НЕПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ С МНОГОКОМПОНЕНТНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА В ФРУСТРИРОВАННОМ АНИЗОТРОПНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ

С. С. Аплеснин

Изучаются магнитные состояния и фазовые переходы в гексагональных антиферромагнетиках с дипольным взаимодействием и одноосной анизотропией. Показано одновременное существование однородной и непериодической структуры по поперечной и продольной компонентам спина в области низких температур. В квазинизкоразмерных антиферромагнетиках переход из парафазы в однородное состояние происходит через промежуточную однокомпонентную несоразмерную структуру. Появление несоразмерности по второй компоненте спина становится возможным при небольшой пространственной анизотропии обмена.

Эффекты фрустраций, вызванные топологией кристаллической решетки, ослабляют спиновые корреляции и обусловливают новые свойства, отсутствующие в нефрустрированных моделях. Теоретические расчеты, выполненные для антиферромагнетика (АФМ) с дипольным взаимодействием в приближении молекулярного поля [1, 2], показывают существование в высокотемпературной области несоразмерных, вихревых, структур. В ряде соединений с данной решеткой, например $CsNiBr_3$ [3], существует одноосная анизотропия типа «легкая ось», которая может существенно изменить магнитную структуру. Предельный случай, когда константа одноосной анизотропии превышает дипольную энергию и ею можно пренебречь, рассматривался ранее [4, 5]. Кроме того, приближение молекулярного поля не применимо к квазинизкоразмерным системам и более строгие расчеты также могут изменить магнитную фазовую диаграмму.

В данной системе со сложными взаимодействиями существует несколько типов фрустраций: фрустрированная обменная связь в плоскости решетки в зависимости от анизотропии и конкуренция дипольного взаимодействия с одноосной анизотропией. Поэтому возможно появление разнообразных магнитных структур. Цель данной работы заключается в определении методом численного моделирования влияния анизотропного распределения связей, соотношения одноионной и дипольной анизотропии на формирование магнитной структуры и последовательности фазовых переходов.

1. Модель

Рассмотрим АФМ с обменным и дипольным взаимодействием и одноосной анизотропией во внешнем магнитном поле

$$H = -\sum_{il}^{N} K_{il}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_l - \sum_{ij}^{N} \mathcal{J}_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - \gamma_d \sum_{ij}^{N} \left[\frac{\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{S}_i\mathbf{r}_{ij})(\mathbf{S}_j\mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5}\right] - \sum_{i}^{N} D_i (S_i^z)^2 - \sum_{i}^{N} \mathbf{H}_i\mathbf{S}_i,$$

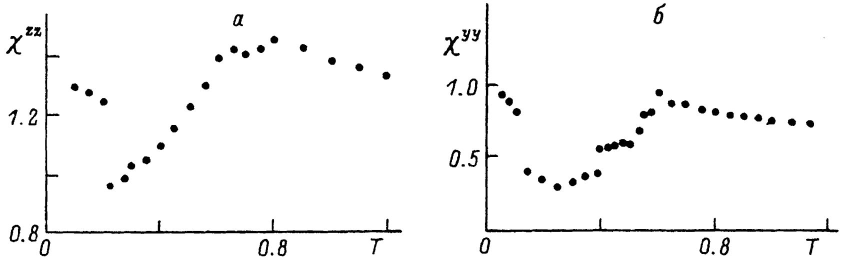

Рис. 1. Зависимость восприимчивости АФМ вдоль гексагональной оси с $H^z = 0.04$, $\gamma_d/\mathcal{J} = 0.3$, $d = -\lambda = -0.25$ (*а*) и в плоскости с $\gamma_d/\mathcal{J} = 0.4$, $H^y = 0.1$, $d = -\lambda = -0.25$ (*б*) от температуры.

где $K_{il} < 0$, $\mathcal{J}_{ij} < 0$ — АФМ взаимодействия между ближайшими соседями соответственно вдоль гексагональной оси и в базисной плоскости ($\lambda = \mathcal{J}/K$), $D > 0$ ($D = dK$) — константа одноосной анизотропии типа «легкая ось», $H^\alpha = \tilde{H}^\alpha\,|K|$ — магнитное поле вдоль оси анизотропии $\alpha = z$ и в базисной плоскости $\alpha = y$, $\gamma_d = [g\mu_Б/a^3]^2/K$.

В вычислениях используется метод Монте-Карло (МК) [6] с периодическими и зеркальными граничными условиями на решетке размером $N = 18 \times 18 \times 18$ и $24 \times 24 \times 24$. Количество МК шагов на одит спин варьировалось от 2000 до 10 000. Все используемые величины даны в безразмерных единицах: температура $T = \tilde{T}/k_Б\,|K|\,S_0\,(1 + S_0)$, расстояние вдоль гексагональной оси c $r_c = \tilde{r}/c$ и в базисной плоскости $r_a = \tilde{r}/a$ (в базисной плоскости выбрана прямоугольная система координат: ось OX направлена под углом 30° к вектору трансляций **a** ($b = \sqrt{3}\,a$), ось OY совпадает с **a**), намагниченность m и восприимчивость $\chi^\alpha = \tilde{\chi}^\alpha\,|K|/N = m^\alpha/H^\alpha$. Вычислены параметр Эдвардса—Андерсона $q^\alpha = \sum_i^N \langle S_i^\alpha\rangle^2/N$; спин-спиновые корреляционные функции продольных и поперечных компонент спина $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha\rangle$ ($\alpha = z, x, y$) в направлении осей кристалла; Фурье-образ спина $S^\alpha\,(\mathbf{Q}) = (1/N)\,\Sigma S^\alpha\,(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{Q}r}$, соответствующий волновому вектору структуры **Q**.

2. Обсуждение результатов

Результаты численного анализа показывают, что для $c \gg a$, характерных для соединений ABX_3 [7], векторы спинов лежат в треугольных плоскостях перпендикулярно оси c; в соседних плоскостях они ориентированы антиферромагнитно, если $\gamma_d/\mathcal{J} > 3/2$, $d/\gamma_d < 3$. Для $\gamma_d/\mathcal{J} < 1/2$, $d/\gamma_d \gtrsim 8$ и $1/K < 1/4$ реализуется парафаза. В промежуточном интервале параметров существует угловая фаза. Антиферромагнетик со слабым дипольным взаимодействием $0.1 < \gamma_d/\mathcal{J} < 0.3$, $d = -\lambda$ имеет три фазовых перехода по температуре. При низких температурах образуется угловая фаза в плоскости YZ либо XZ. По поперечным компонентам спина реализуется двухподрешеточная структура с волновым вектором **Q** (π/a, 0, π/c) и по продольным — трехподрешеточная **Q** (0, $2\pi/3a$, π/c). Здесь возможно существование метастабильных состояний, отличающихся по энергии на $\Delta E \approx 0.1 \div 1\%$ и параметру порядка по поперечным компонентам спина с волновым вектором структуры **Q** (0, $2\pi/3a$, π/c). Обменное взаимодействие между цепочками образует ближний порядок по другой компоненте спина S^x, характерный тем, что $\langle S^x\,(0)\,S^x\,(r_c)\rangle_{r_c \to \infty} = 0$ вдоль гексагональной оси. При $T > T_{c1}$ однородное состояние переходит в непериодическое, возможно, несоразмерное состояние как по S^y, так и по S^z с разным периодом несоразмерности по соответствующим компонентам. Этот переход, по-видимому, относится к фазовому переходу I рода, так как сопровождается резкой аномалией

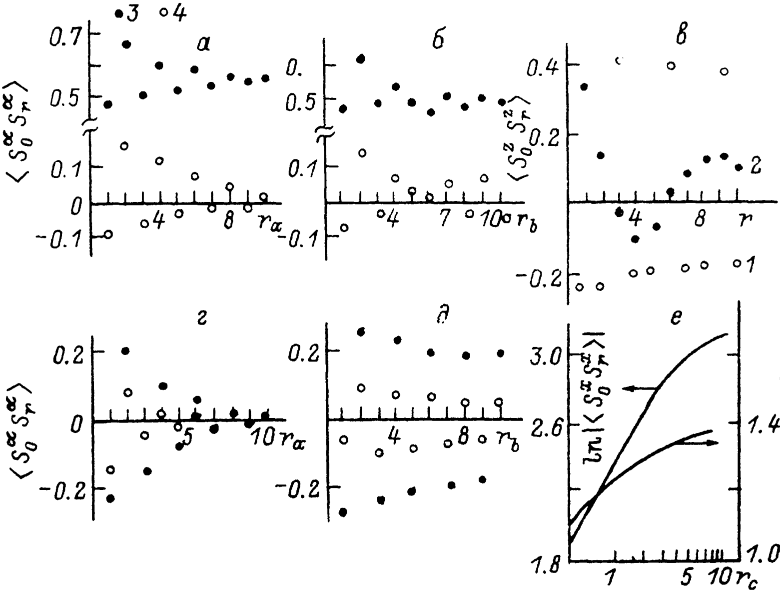

Рис. 2. Спин-спиновые корреляционные функции от расстояния по векторам a (1, 0, 0) (*а*, *г*, *в* (*2*)), b (a / 2, $\sqrt{3}a$ / 2, 0) (*б*, *д*, *в* (*1*)), c (0, 0, 1)(*е*) в фазе с дальним порядком по S^y $\alpha = y$ (3) и непериодической по S^x $\alpha = x$ (4) с $d = -\lambda = -0.25$, $\gamma_d/\mathcal{J} = 0.4$, $T = 0.1$ (*а*, *б*), непериодической по S^z с $\gamma_d/\mathcal{J} = 0.3$, $T = 0.4$ (*в*), с несоразмерным порядком по поперечным компонентам спина $\gamma_d/\mathcal{J} = 0.4$, $T = 0.45$ (*г*, *д*) и АФМ порядком вдоль гексагональной оси (*е*).

теплоемкости, скачком восприимчивости (рис. 1, *а*), качественным изменением поведения спин-спиновых корреляционных функций (рис. 2), параметра Эдвардса—Андерсона (рис. 3, *а*). Разрушение непериодической структуры по поперечной и продольной компонентам спина соответственно при температурах T_{c2} и T_{c3} связано с точкой перегиба температурного поведения восприимчивости для $\lambda < 0.1$ и максимумом $\lambda > 0.25$ (рис. 1).

Увеличение дипольного взаимодействия уменьшает флуктуации в цепочках, вызванные квазинизкоразмерностью системы при конечных температурах, и межцепочечный обмен образует непериодическую структуру по S^x, т. е. $R^x = \langle S^x(0)\, S^x(r_c)\rangle_{r_c \to \infty} \neq 0$, $R^x_{r_a = 10} \to 0$ (рис. 2, *а*). В то же время исчезает дальний порядок и образуется непериодическая структура по продольной компоненте спина в гексагональной плоскости. Спин-спиновая корреляционная функция имеет осциллирующий затухающий вид от расстояния (рис. 2, *в*).

АФМ с параметрами $0.3 < \gamma_d/\mathcal{J} < 0.5$ и $\mathcal{J}/K > 0.25$ имеет пять фазовых переходов. Несоразмерная структура по $S^{x(y)}$ при $T = T_{c1}$ переходит в однородную с вектором антиферромагнетизма, направленным равновероятным образом по элементарным векторам трансляций в гексагональной решетке. Поперечная восприимчивость имеет скачок при этой температуре. При $T > T_{c2}$ исчезает неоднородная модуляция по продольной компоненте спина. Спины расположены в гексагональной плоскости и образуют двухподрешеточную коллинеарную структуру. В температурном интервале $T_{c3} < T < T_{c4}$ существует неоднородная, возможно, вихревая структура с двухкомпонентным параметром порядка. Дальний порядок вдоль гексагональной оси сохраняется $R^{x,\,y}\,(r_c = 12) > 0$, а в плоскости $R^{x,\,y}\,(r_a = 10) = 0$ (рис. 2, *г*—*е*). При переходе из однородного в непериодическое состояние наблюдается скачок в температурном поведении восприимчивости (рис. 1, *б*), теплоемкости, параметра Эдвардса—Андерсона (рис. 3, *б*). Это указывает на возможность фазового перехода I рода. Переход в парафазу происходит через промежуточное состояние с неоднородной модуляцией по $S^{y(x)}$, $q^{x(y)} = 0$.

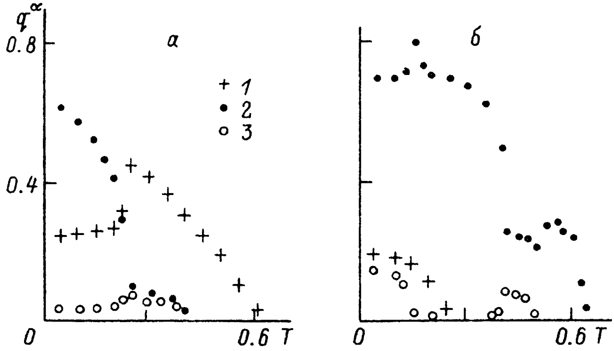

Рис. 3. Температурные зависимости параметра Эдвардса — Андерсона q^α в АФМ с $d=-\lambda=-0.25$, $\gamma_d/\mathcal{J}=0.3$ (*а*), $\gamma_d/\mathcal{J}=0.4$ (*б*), $\alpha=z$ (*1*), y (*2*), x (*3*).

Такие переходы были вычислены Шиба и Зазуки [1] и обусловлены дипольным взаимодействием для любой величины обменного взаимодействия в цепочке.

Численное моделирование приводит к другому результату. Если обмен в цепочках $|K|\gg|\mathcal{J}|$, то последовательность фазовых переходов сокращается. Переход из парафазы в однородное состояние происходит через одно несоразмерное состояние по одной из компонент спина в АФМ с параметрами $\lambda<0.1$, $0.3<\gamma_d/\mathcal{J}<0.5$. Непериодические структуры по $S^{x(y)}$ и S^z появляются только в области низких температур.

Итак, АФМ с дипольным взаимодействием и анизотропией типа «легкая ось» имеет в основном состоянии однородную и непериодически модулированную структуру с разным вектором несоразмерности по поперечной и продольной компонентам спина, что обусловливает последовательность фазовых переходов по температуре. Переход из парафазы в однородное состояние осуществляется через несоразмерные состояния по двум компонентам спина. Сильная пространственная анизотропия обмена приводит к однокомпонентной промежуточной непериодической структуре.

Список литературы

[1] Shiba H., Susuki N. // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 51. N 11. P. 3488—3497.
[2] Гехт Р. С. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 12. С. 2095—2104.
[3] Петраковский Г. А., Федосеева Н. В., Аплеснин С. С., Королев В. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 169—175.
[4] Аплеснин С. С. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 11. С. 3220—3229.
[5] Аплеснин С. С. // ЖЭТФ. 1991. Т. 100. № 12. С. 2068—2073.
[6] Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1982. 396 с.
[7] Александров К. С., Федосеева Н. В., Спевакова И. П. Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах. Новосибирск: Наука, 1983. С. 14—19.

Институт физики им. Л. В. Киренского
СО РАН
Красноярск

Поступило в Редакцию
18 мая 1992 г.