

Переход несоразмерность–несоразмерность со сменой знака вектора магнитной структуры в CuV_2O_4

© С.Н. Мартынов

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,
660036 Красноярск, Россия

E-mail: unonav@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 22 июня 2004 г.)

В приближении среднего поля исследуется несоразмерное магнитное состояние метабората меди CuV_2O_4 в интервале температур $2 < T < 12$ К. Конкуренция антисимметричных обменов на фрустрированных и нефрустрированных взаимодействиях приводит к смене знака вектора магнитной структуры при $T = 10$ К.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 03-02-16701).

Интенсивное исследование магнитной структуры CuV_2O_4 в течение последних лет показало существование различных типов магнитного упорядочения метабората меди с фазовыми переходами между ними как по температуре, так и по магнитному полю [1–5]. Такое разнообразие структур объясняется существованием в метаборате меди двух принципиально различных подсистем магнитных ионов Cu^{2+} в разных кристаллографических позициях с набором различных по типу взаимодействий как внутри каждой подсистемы, так и между подсистемами. Обменное взаимодействие между ионами меди в кристаллографических позициях $4b$ с симметрией S_4 образуют трехмерную магнитную подсистему A с температурой Нееля $T_{N1} = 20$ К, ниже которой среднее значение магнитного момента на A -узле быстро нарастает, достигая $0.94 \mu_B$ при $T = 2$ К. Магнитные моменты подсистемы B в позициях $8d$ с симметрией C_2 при той же температуре достигают величины только $0.54 \mu_B$. Малое значение величины магнитного момента при $T \rightarrow 0$ К является признаком квазинизкомерности [6,7] и (или) фрустрированности [8] основных обменных взаимодействий. Анализ обменных взаимодействий в B -подсистеме показал наличие выделенных конкурирующих антиферромагнитных (АФ) взаимодействий с ближайшими и вторыми соседями, образующих зигзагообразные ладдерные цепочки вдоль тетрагональной оси — квазиодномерную магнитную структуру [9]. На существование квазиодномерных флуктуаций в CuV_2O_4 , вызванных корреляциями ближнего порядка, указывает также сильное диффузное рассеяние нейтронов, наблюдаемое как выше, так и ниже температуры Нееля [3]. Таким образом, главным различием магнитных подсистем является разная магнитная размерность основных внутрисистемных взаимодействий. Анализ спектров спиновых возбуждений для каждой подсистемы с учетом этих взаимодействий позволил сделать вывод о малости влияния межподсистемных взаимодействий на динамические свойства метабората меди при $T = 12$ К [9,10]. Причиной ослабления взаимного влияния двух подсистем является геометрия межподсистемных обменных связей. Все пути косвенного обмена

связывают каждый ион одной подсистемы с парами спинов разных АФ подрешеток другой подсистемы. При АФ упорядочении внутри подсистем это приводит к полной фрустрации межподсистемного обмена. То же самое происходит и с взаимодействием между ладдерными цепочками, что приводит к квазинизкомерности в подсистеме B . Ниже $T_s \approx 10$ К в CuV_2O_4 наблюдается несоразмерная магнитная структура, волновой вектор которой направлен вдоль тетрагональной оси [3,4]. Величина вектора с понижением температуры непрерывно возрастает до 0.15 rlu (приведенные решеточные единицы) при $T = 2$ К. Феноменологический анализ перехода в несоразмерную фазу показал существенную роль инварианта Лифшица на ее формирование [3,4,11]. Анализ полевой зависимости и резонансных свойств CuV_2O_4 позволил сделать вывод о существовании длиннопериодической несоразмерной магнитной структуры и в высокотемпературной фазе $10 < T < 20$ К [4,5]. В настоящей работе проводится анализ магнитной структуры метабората меди в рамках модели простой спирали в интервале температур $2 < T < 12$ К с целью определения микроскопического механизма и характера перехода между этими двумя фазами.

1. Структура и обменные взаимодействия

Детали кристаллической структуры CuV_2O_4 (рис. 1) подробно изучены в ряде работ [3,4,12]. Обменные взаимодействия осуществляются через гибридные $s-p$ -орбитали кислородных тетраэдров бора (цепочки косвенного суперобмена $\text{Cu}-\text{O}-\text{B}-\text{O}-\text{Cu}$). Помимо антиферромагнитных обменов внутри каждой подсистемы, рассмотренных в [9,10], учтем: а) АФ обмены между подсистемами (сплошные линии на рис. 1), б) обмен между ладдерами подсистемы B (штриховые линии) и в) антисимметричные обмены как между подсистемами, так и внутри подсистем. В случае а) АФ обмены между подсистемами J_{ab}^m реализуются по трем различным путям, соединяющим ионы Cu^{2+} , отстоящие друг

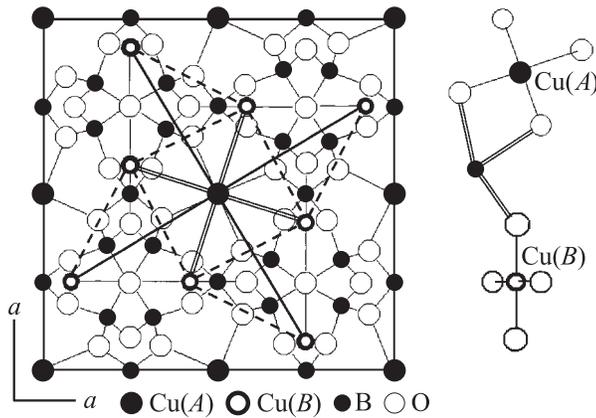


Рис. 1. Кристаллическая структура CuV_2O_4 (проекция на тетрагональную плоскость). Отдельно показано межподсистемное обменное взаимодействие типа $J_{ab}^{2,3}$.

от друга на расстояния $\Delta z = c/8, 3c/8, 5c/8$ вдоль тетрагональной оси c . Обмен между ближайшими по z (и дальними в плоскости ab) соседями осуществляется через одинарную цепочку Cu-O-V-O-Cu (одинарные линии на рис. 1). Два других обмена проходят через „полуторную“ цепочку (двойные линии на рис. 1). Схема последней показана на рис. 1 отдельно. В случае с) обмен между ладдерными цепочками подсистемы B реализуется по таким же „полуторным“ путям, и геометрия локального окружения взаимодействующих ионов Cu^{2+} , так же как и при обмене между подсистемами, близка к квадратам из ионов кислорода, ориентированным взаимно ортогонально. Все обмены типов а) и б) полностью фрустрированы при АФ ориентации магнитных моментов в подсистемах. В случае в) симметричный анализ структуры CuV_2O_4 [11] показывает возможность существования двух различных типов антисимметричного обмена [13,14]. Один приводит к скосу моментов разных АФ подрешеток и появлению слабого ферромагнитного момента. Этот обмен реализуется между ближайшими соседями в подсистеме A (D_a). Второй тип антисимметричного обмена приводит к повороту взаимодействующих моментов, создающему в результате спиральную структуру. Он может быть между подсистемами (D_{ab}), а также между ближайшими и вторыми соседями внутри ладдеров (D_{b1}, D_{b2}). Последний приводит лишь к непринципиальной перенормировке аналогичного обмена D_{b1} и в дальнейшем не учитывается. Таким образом, гамильтониан обменных взаимодействий в CuV_2O_4 может быть записан в виде

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_a \sum_{ii'} J_a^\alpha S_i^\alpha S_{i'}^\alpha + J_{b1} \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + J_{b2} \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2} \\
 & + \sum_m \sum_{ij} J_{ab}^m \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_{b3} \sum_{jj'} \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j'} + D_a^z \sum_{ii'} (-1)^i [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i'}]_z \\
 & + D_{b1}^z \sum_j [\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_{j+1}]_z + \sum_m \sum_{ij} D_{ab}^{m,z} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]_z. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Первый член описывает анизотропию обмена в подсистеме A типа „легкая плоскость“ [10]. Все взаимодействия осуществляются между магнитными моментами, находящимися в разных тетрагональных плоскостях ($\Delta z \neq 0$), поэтому использована нумерация взаимодействующих спинов вдоль направления тетрагональной оси.

2. Локальные обменные поля

Для антиферромагнетика, у которого фазовый переход в магнитоупорядоченное состояние не приводит к удвоению рефлексов упругого рассеяния нейтронов, количество различных возможных ориентаций магнитных моментов совпадает с числом магнитных ионов в примитивной ячейке кристалла. Для CuV_2O_4 таких ионов шесть — два иона в A -подсистеме и четыре в B -подсистеме. Для описания простой спирали необходимо ввести угол поворота 2δ магнитных моментов при переходе от одной, базовой примитивной ячейки к соседним ячейкам, смещенным в направлении вектора несоразмерности. Инвариантность гамильтониана отно-

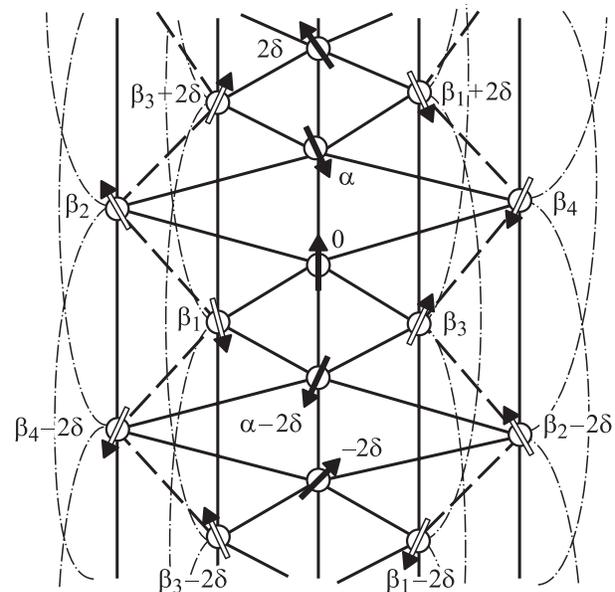


Рис. 2. Упрощенная схема обменных взаимодействий. Вертикальные линии соответствуют обмену J_a внутри подсистемы A с числом соседей $z_a = 4$ (центральная линия) и обмену J_{b1} внутри четырех ладдеров, проходящих через каждую примитивную ячейку кристалла (число соседей $z_b = 2$). Наклонные линии — обмен между подсистемами J_{ab}^1 и половина межладдерных обменов J_{b3} (штриховые линии). Штрихпунктирные линии — обмен J_{b2} . Обмены $J_{ab}^{2,3}$ не показаны. Ориентация стрелок в плоскости схемы показывает ориентацию проекций магнитных моментов на тетрагональную плоскость. Каждая стрелка соответствует слою моментов ($z = \text{const}$), меняющему свою ориентацию при смещении вдоль тетрагональной оси z (вертикальная ось рисунка). Отсчет углов проводится от произвольно выбранного спина A -подсистемы $\alpha_0 = 0$ (центральный спин на схеме).

сительно общего поворота в тетрагональной плоскости позволяет произвольно выбрать начало отсчета углов в плоскости. Следовательно, общее число неизвестных переменных, необходимых для описания простой спиральной структуры в CuV_2O_4 , остается равным шести. Из этого количества пять оставшихся углов одной примитивной ячейки могут быть найдены из условия обращения в нуль компонент суммарных средних полей, направленных ортогонально направлению равновесной ориентации каждого момента. Шестая переменная — угол спирали — может быть найдена минимизацией общей свободной энергии примитивной ячейки по этому параметру. Упрощенная схема обменных взаимодействий показана на рис. 2.

Выбирая в качестве локальных осей каждого момента тетрагональную ось \mathbf{Z} и направление проекции равновесной ориентации момента \mathbf{S}_i на тетрагональную плоскость x \mathbf{X}_i , перепишем компоненты гамильтониана через углы ориентации локальных осей. Для каждой пары взаимодействующих спинов получаем

$$\begin{aligned} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y &= (S_{xi} S_{xj} + S_{yi} S_{yj}) \cos(\alpha_i - \alpha_j) \\ &+ (S_{xi} S_{yj} - S_{yi} S_{xj}) \sin(\alpha_i - \alpha_j), \\ S_i^x S_j^y - S_i^y S_j^x &= -(S_{xi} S_{xj} + S_{yi} S_{yj}) \sin(\alpha_i - \alpha_j) \\ &+ (S_{xi} S_{yj} - S_{yi} S_{xj}) \cos(\alpha_i - \alpha_j). \end{aligned}$$

В локальных осях имеем $\langle S_{yi} \rangle \equiv 0$. После суммирования вкладов от ненулевых компонент средних спинов $\langle S_{xi} \rangle$ по учитываемым взаимодействиям (1) в приближении среднего поля [15] коэффициенты h_y^i перед поперечными компонентами спинов S_{yi} должны обратиться в нуль

$$\begin{aligned} h_y^0 &= -2S_{ax} \cos \delta (J_a \sin(\gamma - \delta) - D_a \cos(\gamma - \delta)) \\ &- S_{bx} \left(f_1 \cdot \cos \frac{\beta_1 - \beta_3}{2} + f_2 \cdot \cos \frac{\beta_2 - \beta_4}{2} \right) \equiv 0, \\ h_y^{\beta_1} &= -S_{bx} \left[\sin(\beta_1 - \beta_3) (J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta) \right. \\ &\left. + 2J_{b3} \cos \delta (\sin(\beta_1 - \beta_2 + \delta) + \sin(\beta_1 - \beta_4 + \delta)) \right] \\ &+ S_{ax} \cos(\beta_1 - 0.5\gamma + \delta) \cdot f_3(\gamma, \delta) \equiv 0, \\ h_y^{\beta_2} &= -S_{bx} \left[\sin(\beta_2 - \beta_4) (J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta) \right. \\ &\left. + 2J_{b3} \cos \delta (\sin(\beta_2 - \beta_1 - \delta) + \sin(\beta_2 - \beta_3 - \delta)) \right] \\ &+ S_{ax} \cos(\beta_2 - 0.5\gamma + \delta) \cdot f_4(\gamma, \delta) \equiv 0, \\ h_y^{\beta_3} &= h_y^{\beta_1} (\beta_1 \leftrightarrow \beta_3), \\ h_y^{\beta_4} &= h_y^{\beta_2} (\beta_2 \leftrightarrow \beta_4), \\ f_1(\gamma, \delta) &= J_{ab}^1 \cos(0.5\gamma - \delta) + J_{ab}^2 \cos(0.5\gamma + \delta) \\ &+ J_{ab}^3 \cos(0.5\gamma - 3\delta) - D_{ab}^1 \sin(0.5\gamma - \delta) \\ &+ D_{ab}^2 \sin(0.5\gamma + \delta) - D_{ab}^3 \sin(0.5\gamma - 3\delta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_2(\gamma, \delta) &= J_{ab}^1 \cos(0.5\gamma) + J_{ab}^2 \cos(0.5\gamma - 2\delta) \\ &+ J_{ab}^3 \cos(0.5\gamma + 2\delta) + D_{ab}^1 \sin(0.5\gamma) \\ &- D_{ab}^2 \sin(0.5\gamma - 2\delta) + D_{ab}^3 \sin(0.5\gamma + 2\delta), \\ f_3(\gamma, \delta) &= -J_{ab}^1 \sin(0.5\gamma - \delta) - J_{ab}^2 \sin(0.5\gamma + \delta) \\ &- J_{ab}^3 \sin(0.5\gamma - 3\delta) - D_{ab}^1 \cos(0.5\gamma - \delta) \\ &+ D_{ab}^2 \cos(0.5\gamma + \delta) - D_{ab}^3 \cos(0.5\gamma - 3\delta), \\ f_4(\gamma, \delta) &= J_{ab}^1 \sin(0.5\gamma) + J_{ab}^2 \sin(0.5\gamma - 2\delta) \\ &+ J_{ab}^3 \sin(0.5\gamma + 2\delta) - D_{ab}^1 \cos(0.5\gamma) \\ &+ D_{ab}^2 \cos(0.5\gamma - 2\delta) - D_{ab}^3 \cos(0.5\gamma + 2\delta), \end{aligned}$$

где $\gamma = \alpha - \pi$ — угол, на который моменты подсистемы A внутри каждой примитивной ячейки отклоняются от $\Lambda\Phi$ ориентации. Здесь и далее $S_{ax, bx}$ обозначают средние x -компоненты спинов подсистемы. Таким образом, все углы базовой примитивной ячейки выражаются через δ . Средние поля, действующие на x -компоненты спинов в каждой подсистеме, принимают вид

$$\begin{aligned} h_{ax} &= -\frac{S_{ax}}{2} \left[4 \cos(\gamma - \delta) (J_a \cos \delta + D_a \sin \delta) \right. \\ &\left. + \frac{(J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta) (f_3^2 + f_4^2) + 2J_{b3} \cos \delta f_3 f_4}{(J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta)^2 - (J_{b3} \cos \delta)^2} \right], \\ h_{bx} &= -S_{bx} (J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta - J_{b2} \cos 4\delta), \end{aligned} \quad (2)$$

по следующему условию, налагаемому на угол γ :

$$\begin{aligned} 2 \cos \delta (J_a \sin(\gamma - \delta) - D_a \cos(\gamma - \delta)) \cdot ((J_{b1} \cos 2\delta \\ + D_{b1} \sin 2\delta)^2 - (J_{b3} \cos \delta)^2) - (J_{b1} \cos 2\delta + D_{b1} \sin 2\delta) \\ \times (f_1 f_3 - f_2 f_4) - J_{b3} \cos \delta (f_1 f_4 - f_2 f_3) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, в приближении среднего поля влияние межподсистемного взаимодействия в модели простой спирали свелось к появлению дополнительного продольного поля, действующего на спины подсистемы A (второе слагаемое в (2)), и к компенсации уменьшения внутриподсистемного обменного поля за счет скоса моментов в подсистеме B ($\beta_1 - \beta_3 \neq \pi \neq \beta_2 - \beta_4$). При этом обе подсистемы остаются квазинеzáвисимыми — дополнительные эффективные поля в каждой подсистеме не зависят явно от намагниченности другой подсистемы.

3. Свободная энергия

В приближении среднего поля минимум свободной энергии

$$F = -k_B T \ln \text{Sp} \{ \exp(-\beta H) \}$$

нетрудно найти, фиксируя величину среднего спина на узлах каждой подсистемы и варьируя общую энергию по

величине шага спирали. При этом не учитывается влияние вариации шага на величину спина. Такое упрощение эквивалентно приближению постоянной амплитуды параметра порядка, применяемому при феноменологическом анализе несоизмерных структур [16]. В рассматриваемом интервале температур ориентация магнитных моментов подсистемы A близка к тетрагональной плоскости, а величина меняется от 0.86 до $0.94\mu_B$ и принимается равной постоянной значению $0.9\mu_B$. Величина магнитных моментов подсистемы B меняется от $0.2\mu_B$ при $T = 12\text{ К}$ до $0.54\mu_B$ при $T = 2\text{ К}$. Для описания ее температурной зависимости между этими значениями рассмотрим подсистему B как набор двухуровневых одноузельных состояний спина $S = 1/2$ с волновыми функциями основного и возбужденного состояний

$$\Psi_{0i} = C_0^+ |+\rangle_i \Psi_{0,N-1}^+ + C_0^- |-\rangle_i \Psi_{0,N-1}^-,$$

$$\Psi_{ei} = C_e^+ |+\rangle_i \Psi_{e,N-1}^+ + C_e^- |-\rangle_i \Psi_{e,N-1}^-$$

в среднем поле остальных спинов. Здесь $C_{0,e}^{+,-}$ — амплитуды вероятности нахождения спина S_i в основном и возбужденном состояниях с проекцией на локальную ось $+$ или $-$ соответственно, а $\Psi_{0,e,N-1}^{+,-}$ — соответствующие нормированные функции состояний остальных $N - 1$ спинов. Среднее значение спина на узле в каждом из состояний

$$S_0 = S_b(T \rightarrow 0) = \frac{1}{2} (|C_0^+|^2 - |C_0^-|^2),$$

$$S_e = \frac{1}{2} (|C_e^+|^2 - |C_e^-|^2)$$

отлично от значений спина для свободного иона $S = \pm 1/2$ и дает следующую температурную зависимость:

$$S_b(T) = \frac{S_0 \exp(\Delta E/2k_B T) + S_e \exp(-\Delta E/2k_B T)}{\exp(\Delta E/2k_B T) + \exp(-\Delta E/2k_B T)},$$

где ΔE — раздвижка уровней в среднем поле. Условие $\lim_{T \rightarrow \infty} S_b(T) = 0$ дает $S_0 = -S_e$ и значение энергии $\Delta E/2 = S_0 h_b$. В конечном итоге получаем стандартное выражение для двухуровневой системы в среднем поле h_b

$$S_b = S_0 \text{th} \frac{S_0 h_b}{k_B T}.$$

Отклонение температурной зависимости среднего поля h_b от зависимости средних значений спина за счет появления спирального разворота моментов в плоскости (множитель в скобке во втором выражении (2), зависящий от δ) для экспериментально наблюдаемой длиннопериодической спирали [4] пренебрежимо мало. Таким образом, зависимость средней намагниченности на узле подсистемы B с хорошей точностью можно определить через температуру появления макроскопической

намагниченности в подсистеме B [15]

$$m_b = m_b^0 \text{th} \frac{m_b T_{N2}}{m_b^0 T}, \quad (3)$$

$$k_B T_{N2} = S_0^2 (J_{b1} - J_{b2}). \quad (4)$$

Для приведенных выше значений намагниченности получаем $m_b^0 = 0.54\mu_B$ и $T_{N2} = 12.6\text{ К}$.

Магнитные моменты подсистемы B при понижении температуры переориентируются от направления, близкого к тетрагональной оси, к направлению, составляющему с ней угол $\Theta_0 \approx \pi/2.7$ при $T = 2\text{ К}$ [3]. Поскольку в настоящей работе для простоты не учитывалась анизотропия подсистемы B , механизм переориентации не рассматривался. При этом переориентация моментов B задается степенной функцией температуры

$$\Theta = \Theta_0 (1 - T/T^*)^n \quad (5)$$

с $n = 1$ (линейная зависимость) и $n = 0.5$ (зависимость параметра порядка для ориентационного перехода второго рода в трехмерной системе [17]). В обоих случаях температура начала переориентации, соответствующая экспериментальным данным [3], близка к T_{N2} : $T^* = 12.4\text{ К}$ ($n = 1$), 12.3 К ($n = 0.5$). Такая простая аппроксимация позволяет говорить только о качественном описании зависимости $k(T)$ для промежуточных температур.

Вариация свободной энергии по шагу спирали одной примитивной ячейки кристалла сводится к вариации средних продольных полей

$$\delta F_1 = 2S_{ax} \delta h_{ax} + 4S_b \delta h_b.$$

При спиральном развороте моментов в тетрагональной плоскости компонента h_{bz} не меняется

$$h_b = \sqrt{h_{bx}^2 + h_{bz}^2}, \quad \delta h_b = \frac{h_{bx} \delta h_{bx}}{\sqrt{h_{bx}^2 + h_{bz}^2}} = \sin \Theta \delta h_{bx},$$

$$S_{bx} = S_b \sin \Theta, \quad \Delta F_1 = 2S_{ax} \delta h_{ax} + 4S_{bx} \delta h_{bx}. \quad (6)$$

При используемых приближениях зависящая от шага спирали часть свободной энергии зависит только от x -компонент спинов подсистем и ее изменение от температуры определяется температурной зависимостью x -компоненты подсистемы B .

Используя полученные поля (2), температурные зависимости величины магнитного момента (3) и угла ориентации (5), численно минимизируем зависящую от угла спирали часть свободной энергии

$$F_1(\delta) = 2S_{ax} h_{ax}(\delta) + 4S_{bx} h_{bx}(\delta), \quad (7)$$

что дает температурную зависимость вектора простой спирали $k(T)$.

4. Результаты и обсуждение

Наилучшее соответствие температурной зависимости вектора несоизмерной структуры в сравнении с результатами упругого рассеяния нейтронов было получено для $n = 1$ и

$$2J_{ab}^1 = J_{ab}^2 = J_{ab}^3 = J_{ab}, \quad 2D_{ab}^1 = D_{ab}^2 = D_{ab}^3 = D_{ab}$$

(рис. 3). При этом взаимодействие между ладдерами J_{b3} слабо влияет на вид $k(T)$ и полагалось равным нулю. Главной особенностью температурной зависимости вектора спирали является смена его знака при $T_s \approx 10$ К: левая спираль переходит в правую. В зависимости от отношения между обменом со вторыми соседями в подсистеме B , формирующим двухминимумный потенциал по δ , и взаимодействием Дзялошинского этот переход может происходить как непрерывно, так и скачком. При определении параметров Гамильтониана значение обмена в подсистеме A принималось равным обмену, полученному из анализа спектра спиновых волн и температуры Нееля T_{N1} [10], $J_a = 45$ К. Обмены в подсистеме B варьировались с учетом соотношения (7) в широком интервале значений. Полученное отношение обменов со вторыми и первыми соседями $J_{b2}/J_{b1} = 0.25$ близко к результату (0.26) [9]. Однако абсолютные значения обменов больше почти на порядок, так как линейная теория спиновых волн, использованная в [9], не учитывала квазинизкомерное уменьшение момента насыщения. Это привело к занижению обменов при сравнении с энергией спиновых возбуждений, полученной из неупругого рассеяния нейтронов. Для цепочек

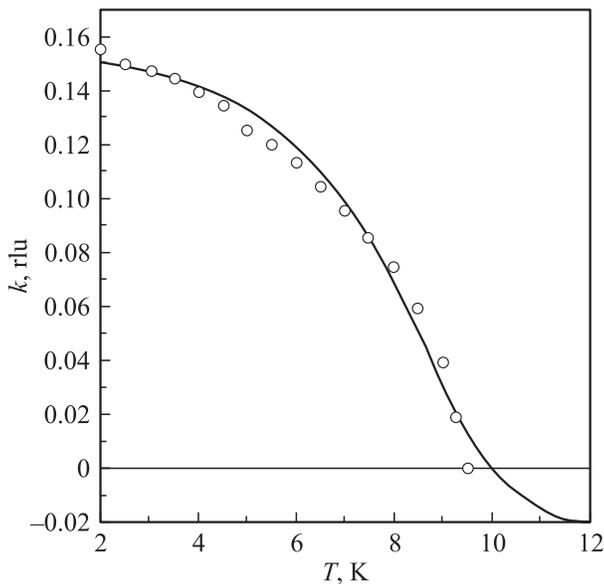


Рис. 3. Температурная зависимость вектора несоизмерности $k(T)$. Точки — эксперимент [4], сплошная линия — приближение среднего поля в модели простой спирали с линейной зависимостью переориентации B -моментов: $\Theta = \Theta_0(1 - T/T^*)$. $J_{b1} = 234$ К, $J_{b2} = 59.4$ К, $J_{ab} = 67.5$ К, $D_{b1} = 21.1$ К, $D_{ab} = 5.6$ К, $D_a = 1.1$ К, $J_{b3} = 0$ К.

с $S = 1/2$ в среднем поле межцепочечного взаимодействия существует соотношение между моментом насыщения на узле и отношением внутрицепочечного обмена к температуре Нееля [6,7]. Это отношение показывает насколько температура Нееля в квазидвумерной системе отличается от температуры Нееля соответствующей трехмерной системы. В нашем случае удобно сравнить подсистемы A и B , для которых получаем

$$K = \frac{z_a J_a T_{N2}}{z_b (J_{b1} - J_{b2}) T_{N1}} \approx 0.33.$$

Это значение находится в хорошем количественном согласии с результатом теории [6] для $m_b^0 = 0.54 \mu_B$ [7]. Максимальное значение вектора несоизмерности $k = 0.15$ rlu при $T = 2$ К определяется совместным действием АФ обмена со вторыми соседями J_{b2} и взаимодействием Дзялошинского между ближайшими соседями D_{b1} в подсистеме B . При повышении температуры вклад подсистемы B в свободную энергию падает как $(m_b^0)^2$ (10), и смена знака вектора несоизмерности происходит в точке компенсации действия D_{b1} и D_{ab} . Различие влияния этих антисимметричных обменов, имеющих одинаковые знаки, вызвано тем, что первый связывает моменты разных АФ подрешеток, в то время как второй — моменты каждой подсистемы с моментами обеих подрешеток другой подсистемы, т.е. со слабым ферромагнитным моментом. Отношения этих обменов к соответствующим АФ обменам принимают близкие значения — $0.9 \cdot 10^{-1}$ и $0.8 \cdot 10^{-1}$ соответственно. Знак обмена Дзялошинского между спинами подсистемы A неизвестен. При $D_a < 0$ он способствует образованию фазы с $k < 0$ — согласование с экспериментом наступает при меньших значениях D_{ab} .

Следует отметить, что вблизи температуры смены знака k модель простой спирали является весьма грубым приближением и в принципе не может описать продольную модуляцию намагниченности [11] или сложную магнитную структуру типа солитонной решетки. На появление последней указывают спутанные пики нейтронного рассеяния вблизи T_s [2]. Очевидно, что аппроксимация намагниченности функцией Бриллюэна (6) обоснована только при $T < 12$ К, когда намагниченность подсистемы B в основном определяется внутрисистемными обменами J_{b1} , J_{b2} . При $T > 12$ К значительное влияние оказывает межподсистемный обмен и намагниченность подсистемы B не обращается в нуль вплоть до исчезновения дальнего порядка в подсистеме A при $T_{N1} = 20$ К. При малых значениях m_b существует решение для углов примитивной ячейки, определяющее продольное поле, отличное от (2). Поэтому найденная величина вектора структуры в высокотемпературной фазе $k(T = 12 \text{ К}) \sim 0.02$ rlu является только верхним оценочным пределом. Но рост величины волнового вектора при увеличении температуры от T_s косвенно подтверждается фазовой диаграммой температура–поле [4,5]. Рост величины поля, разрушающего несоизмерную структуру, с ростом температуры говорит и о росте k при $H = 0$.

На основании полученных результатов можно сделать два основных вывода. 1) Значения обменов, температуры появления макроскопической намагниченности и величины момента насыщения в подсистеме B соответствуют квазиодномерному типу взаимодействий в этой подсистеме. 2) Конкуренция антисимметричных обменов на фрустрированных и нефрустрированных взаимодействиях приводит к смене знака вектора несоразмерной структуры при $T_s \approx 10$ К.

Автор благодарен В.И. Зиненко, М.А. Попову, Г.А. Петраковскому и А.И. Панкрацу за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] G. Petrakovskii, D. Velikanov, A. Vorotinov et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **205**, 1, 105 (1999).
- [2] B. Roessli, J. Schefer, G. Petrakovskii et al. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 9, 1885 (2001).
- [3] M. Boehm, B. Roessli, J. Schefer. *Phys. Rev. B* **68**, 024405 (2003).
- [4] G.A. Petrakovskii, A.I. Pankrats, M.A. Popov et al. *Low Temp. Phys.* **28**, 8–9, 606 (2002).
- [5] А.И. Панкрац, Г.А. Петраковский, М.А. Попов и др. Письма в ЖЭТФ **78**, 9–10, 1058 (2003).
- [6] H.J. Schultz. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 13, 2790 (1996).
- [7] K.M. Kojima, Y. Fudamoto, M. Larkin et al. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 9, 1787 (1997).
- [8] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Статистическая физика. Т. 2. Физматлит, М. (2001).
- [9] S. Martynov, G. Petrakovskii, B. Roessli et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **269**, 106 (2004).
- [10] M. Boehm, S. Martynov, B. Roessli et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **250**, 313 (2002).
- [11] М.А. Попов, Г.А. Петраковский, В.И. Зиненко. ФТТ **46**, 3, 478 (2004).
- [12] M. Martinez-Ripoli, S. Martinez-Carrera, S. Carcia-Blanco. *Acta Cryst. B* **27**, 677 (1971).
- [13] И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ **47**, 3, 992 (1964).
- [14] T. Moriya. *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
- [15] Дж. Смарт. Эффективное поле в теории магнетизма. Мир, М. (1968). [J.S. Smart. *Effective Field theories of Magnetism*. W.B. Saunders Company, Philadelphia–London (1966).]
- [16] Ю.А. Изюмов. Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах. Энергоатомиздат, М. (1987).
- [17] К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, М. (1979).