

УДК 538.945

©1993

ТОНКАЯ СТРУКТУРА ПОЛЯ МАГНИТНОЙ ФРУСТРАЦИИ

А.С.Ковалев, М.М.Богдан

Теоретически рассчитаны внутренние поля на позициях редкоземельных ионов, обусловленные дырочными фрустрациями в плоскостях CuO_2 слоистых антиферромагнетиков типа ВТСП соединений. Обнаружена тонкая доменная структура реплики магнитной фрустрации на плоскость редкоземельных ионов и обсуждены ее особенности.

В антиферромагнитных плоскостях CuO_2 высокотемпературных сверхпроводников в области стехиометрического состава, соответствующего магнитоупорядоченной фазе, возможно возникновение фрустрационных конфигураций спинов меди [¹⁻³]. Фрустрация — неоднородное распределение намагниченности подрешеток, локализованное вблизи фрустрированной связи, обязанной своим появлением «дырке» на кислороде, которая меняет характер косвенного обменного взаимодействия спинов меди с антиферромагнитного на ферромагнитный. Такого типа фрустрации могут давать вклад в слабый ферромагнетизм «дырочных» высокотемпературных сверхпроводников типа $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ и $\text{La}_{2-z}\text{Sr}_z\text{CuO}_4$ и их изоструктурных аналогов [³].

Теоретическое описание магнитной фрустрации возможно в рамках плоской классической модели Гайзенберга на квадратной решетке (рис. 1). При нахождении угла φ поля ориентации магнитных моментов в отсутствие магнитного поля будем предполагать все связи ферромагнитными с интегралом обменного взаимодействия J , а фрустрированную связь, направленную вдоль оси X , — антиферромагнитной с интегралом обменного взаимодействия J' . Переход к антиферромагнитной матрице с ферромагнитной фрустрированной связью осуществляется заменой $J \rightarrow -J$, $J' \rightarrow -J'$, $\varphi_{nm} \rightarrow \varphi_{nm} + \pi(n+m)$. Для всех узлов, кроме $m=0$, $n=0.1$ (связанных фрустрированной связью), распределение поля φ_{nm} задается уравнением

$$J \sum_{\langle \delta \rangle} \sin(\varphi_{nm} - \varphi_{n,m+\delta}) = 0, \quad (1)$$

где δ нумерует ближайших соседей, а уравнение для спина с номером (1.0) имеет вид

$$\sin(\varphi_{10} - \varphi_{20}) + \sin(\varphi_{10} - \varphi_{11}) + \sin(\varphi_{10} - \varphi_{1,-1}) + J'/J \sin(\varphi_{10} - \varphi_{00}) = 0. \quad (2)$$

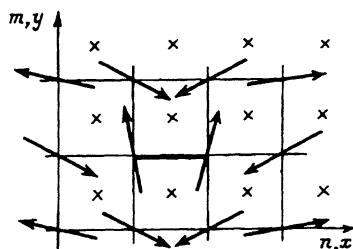
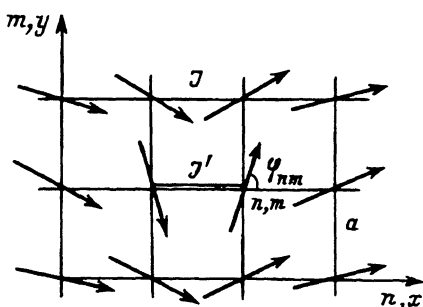


Рис. 1. Распределение намагниченности вблизи антиферромагнитно фрустрированной связи в ферромагнитно упорядоченной матрице.

Рис. 2. Конфигурация фрустрации в антиферромагнитно упорядоченной плоскости CuO_2 .

В длинноволновом приближении уравнения (1), (2) сводятся к следующим:

$$\Delta\varphi(x, y) = 0, \quad (3)$$

$$-\partial\varphi/\partial x|_{x=a/2, y=0} = |J'/J| \sin\{2\varphi(x = a/2, y = 0)\}. \quad (4)$$

В полярных координатах ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\chi = \text{arctg}(y/x)$) фрустрационное решение уравнения (3) имеет очевидную форму

$$\varphi = A \cos \chi/r, \quad (5)$$

где константа A определяется из граничного условия (4)

$$4A/a = |J'/J| \sin(4A/a). \quad (6)$$

Уравнение (6) имеет неоднородное решение, лишь при $J' > |J|$. При слабом превышении интегралом обменного взаимодействия фрустрированной связи его критического значения $J_c = |J|$ имеем $A = \sqrt{3/8} \sqrt{1 - |J|/J'}$, а при больших значениях J' величина A стремится к значению $A_0 = \pi a/4$, при котором спины фрустрированной связи ориентированы ортогонально к намагниченности на бесконечности. В последнем предельном случае дискретный аналог выражения (5) с $A = A_0$ в точности совпадает с решением, найденным в работе [2] для решеточной модели с $J' = \infty$

$$\varphi_{nm} = (\pi/2)(n - 1/2)\{m^2 + (n - 1/2)^2\}^{-1}. \quad (7)$$

Обсудим теперь точность результатов, полученных в рамках длинноволнового приближения, соответствующего линейному уравнению (3). С точностью до четвертых пространственных производных и при учете слабой нелинейности уравнение (3) обобщается следующим образом:

$$\Delta\varphi + a^2/12(\varphi_{xxxx} + \varphi_{yyyy}) - a^2/2(\varphi_x^2\varphi_{xx} + \varphi_y^2\varphi_{yy}) = 0, \quad (8)$$

где a — постоянная решетки. Считая нелинейные и дисперсионные слагаемые в (8) малыми и представляя решение (8) в виде $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, где φ_0 определяется формулой (5) и $\varphi_1 \ll \varphi_0$, имеем

$$\Delta\varphi_1 = -4Aa^2 \cos 5\chi/r^5 + A^3 a^2/2r^7 (\cos \chi + \cos 7\chi). \quad (9)$$

Это уравнение легко решается, и решение уравнения (8) представляется в виде

$$\varphi \cong A \cos \chi / r + A/4 \cos 5\chi / r^3 + A^3/48(\cos \chi - \cos 7\chi) / r^5. \quad (10)$$

Очевидно, что добавки к основному приближению уравнения (8) малы везде, кроме малой области в ядре фрустрации, а нелинейные добавки при малом превышении интегралом обменного взаимодействия критического значения $|J|/J' - 1 \ll 1$ малы, особенно в ядре.

Ферромагнитная фрустрация в антиферромагнитной матрице описывается решениями уравнений (5) и (7), в которых произведена замена $\varphi_{nm} \rightarrow \varphi_{nm} + \pi(n + m)$. Возникающая фрустрационная конфигурация приведена на рис. 2. Ранее численными методами было показано [3], что найденного типа фрустрации обладают ферромагнитным моментом и для слоистых антиферромагнетиков типа ВТСП в магнитном поле могут давать дополнительный вклад в намагниченность и магнитную восприимчивость таких соединений. Реальным инструментом изучения полей фрустрации может быть экспериментальное исследование магнитных свойств соединений типа $A_{2-x}R_xCuO_4$, в которых антиферромагнитно упорядоченные плоскости CuO_2 соседствуют с двумя плоскостями немагнитных ионов A , содержащих малую концентрацию редкоземельных магнитных ионов R . Примером такого соединения может служить $Eu_{2-x}Gd_xCuO_4$ [4], где $A = Eu$ и $R = Gd$. Редкоземельные плоскости в нем смещены относительно плоскостей CuO_2 на полпериода в направлении $(1,1,0)$ и атомы Eu и Gd занимают позиции, отмеченные крестиками на рис. 2. При малой концентрации x магнитные ионы Gd не взаимодействуют между собой и ориентация их спинов определяется магнитным полем плоскости CuO_2 в точках, отмеченных крестиками. В отсутствие фрустрации поля антипараллельно направленными спинов меди взаимно компенсируются и эффективное поле, действующее на редкоземельный ион, равно нулю. При наличии фрустраций ($x \neq 0$) это поле отлочно от нуля, что должно проявиться в резонансных экспериментах типа ЭПР на этих соединениях [4]. Таким образом, возникает принципиальная возможность экспериментального исследования тонкой структуры магнитного поля фрустрации.

Рассчитаем в рамках предложенной модели (рис. 2) эффективное поле H_{nm} , действующее на редкоземельный ион, соседствующий с ионами меди с номерами (n, m) , $(n + 1, m)$, $(n, m + 1)$ и $(n + 1, m + 1)$. В единицах интеграла межслоевого обменного взаимодействия J_{\perp} компоненты этого поля равны

$$H_{nm}^y = \{\sin \varphi_{nm} + \sin \varphi_{n+1, m+1} - \sin \varphi_{n, m+1} - \sin \varphi_{n+1, m}\} (-1)^{n+m}, \quad (11)$$

$$H_{nm}^x = \{\cos \varphi_{nm} + \cos \varphi_{n+1, m+1} - \cos \varphi_{n, m+1} - \cos \varphi_{n+1, m}\} (-1)^{n+m}. \quad (12)$$

В длинноволновом приближении, оставляя слагаемые a^2 (содержащие две пространственные производные), выражения (11), (12) можно упростить следующим образом:

$$H_{nm}^y = (-1)^{n+m} a^2 \{ \partial^2 \varphi / \partial x \partial y - \varphi \partial \varphi / \partial x \partial \varphi / \partial y \}, \quad (13)$$

$$H_{nm}^x = (-1)^{n+m} a^2 \{-\varphi \partial^2 \varphi / \partial x \partial y - \partial \varphi / \partial x \partial \varphi / \partial y\}. \quad (14)$$

Воспользовавшись выражением (5) для величины φ и оставляя в формулах (13), (14) главные слагаемые, получаем окончательное выражение для «отпечатка» поля магнитной фрустрации на плоскости редкоземельных ионов

$$H_{nm}^y \cong (-1)^{n+m} (2a^2 A / r^3) \sin \chi (3 \cos^2 \chi - \sin^2 \chi), \quad (15)$$

$$H_{nm}^x \cong (-1)^{n+m} (2a^2 A^2 / r^4) \sin 2\chi (\sin^2 \chi - 2 \cos^2 \chi). \quad (16)$$

Из формул (15), (16) видно, что поле фрустрации на больших расстояниях от центра имеет «антиферромагнитную» симметрию, что не очевидно, так как в отсутствие фрустрации поле отсутствует, а с фрустрацией связано слабое ферромагнитное упорядочение в плоскости CuO_2 .

Кроме того, из (15), (16) следует, что на больших расстояниях $H^x \gg H^y$ и спины редкоземельных ионов выстраиваются в антиферромагнитном порядке ортогонально вектору антиферромагнетизма в плоскости CuO_2 (направленному примерно вдоль оси x). Наконец, самым интересным является то обстоятельство, что, как следует из формулы (15), правильное антиферромагнитное упорядочение спинов редкоземельных ионов нарушается вдоль линейных дефектов типа 180° антиферромагнитных доменных границ с направлением $\chi = 0, 60$ и 120° , разбивающих всю плоскость на 6 доменов (доменные границы, разделяющие эти домены, конечно, отличаются от традиционных, обусловленных обменным взаимодействием и анизотропией).

Эти результаты легко получаются и в рамках дискретного подхода при использовании формулы (7). В основном приближении для y -компоненты эффективного поля из выражения (7) следует

$$H_{nm}^y = (-1)^{n+m} \frac{\pi}{2} \left\{ \frac{n - 1/2}{(n - 1/2)^2 + m^2} - \frac{n + 1/2}{(n + 1/2)^2 + m^2} - \frac{n - 1/2}{(n - 1/2)^2 + (m + 1)^2} + \frac{n + 1/2}{(n + 1/2)^2 + (m + 1)^2} \right\}. \quad (17)$$

При $n, m \gg 1$ это сводится к простому выражению

$$H_{nm}^y = \frac{\pi}{2} (-1)^{n+m} \frac{2m(3n^2 - m^2)}{(n^2 + m^2)^3}, \quad (18)$$

практически совпадающему с формулой (15).

Поскольку в вышеприведенных вычислениях использовался ряд упрощающих предположений (длинноволновое приближение, линеаризация исходных уравнений, рассмотрение на больших расстояниях то ядра фрустрации), мы исследовали эту проблему также численно, используя точные исходные уравнения (1), (2) для значения $|J'/J| = 3$ и их численные решения для эффективных полей (11), (12). Вычисления проводились для участка плоскости, содержащего 156 атомов и имеющего в центре фрустрацию. Результаты численного счета оказались очень

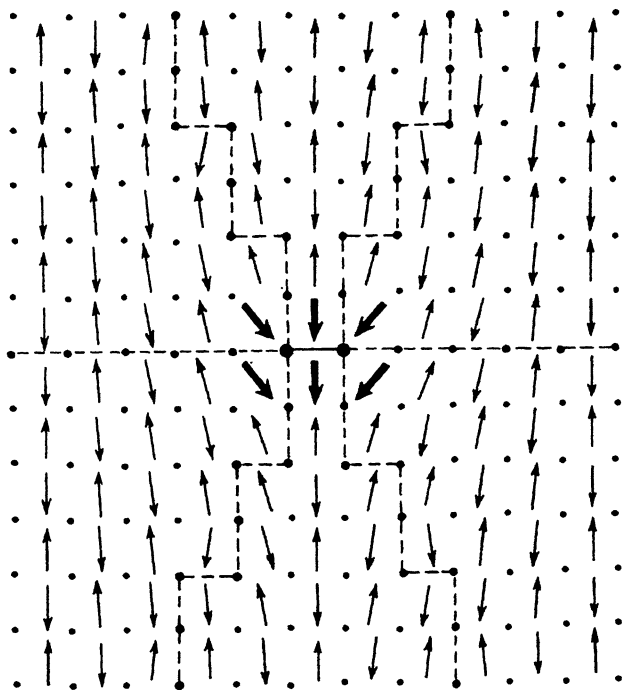


Рис. 3. Распределение спинов редкоземельных ионов в плоскости, прилегающей к CuO_2 плоскости. Штрихом обозначены доменные границы, а жирными стрелками выделен «отпечаток» фрустрации.

близкими к приведенным выше аналитическим выражениям. Они приведены на рис. 3. Здесь точками отмечены положения атомов меди в плоскости CuO_2 , распределение моментов которых изображено на рис. 2. Стрелки на рис. 3 соответствуют моментам редкоземельных ионов, и их направления характеризуют распределение эффективного поля магнитной фрустрации на позициях редкоземельных ионов. Штрихом отмечены линии нарушения правильного «антиферромагнитного» упорядочения спинов. Средний угол наклона этих линий равен $\pm 63^\circ$, что несколько отличается от аналитического результата, вытекающего из (15), — 60° . Расхождение связано с несоизмеримостью симметрии доменной структуры (C_6) и кристаллической плоской квадратной решетки.

Наконец, отметим следующий важный результат. В плоскости CuO_2 вектор ферромагнетизма фрустрации ориентирован перпендикулярно вектору антиферромагнетизма матрицы на бесконечности. В отличие от этого средний ферромагнитный момент «отпечатка» фрустрации на редкоземельной плоскости (область жирно выделенных моментов на рис. 3) направлен параллельно вектору антиферромагнетизма этой плоскости на бесконечности. Эта интересная особенность распределения моментов редкоземельных ионов является прямым следствием существования связи с тонкой доменной структурой реплики фрустрационных полей.

Список литературы

- [1] Aharony A., Birgeneau R.J., Coniglio A., Kastner M.A., Stanley H.E. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 13. P. 1330-1333.
- [2] Vannimenus J., Kirkpatrick S., Jayaprakash C., Haldane F.D.M. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 7. P. 4634-4643.
- [3] Богдан М.М., Ковалев Ф.С., Степанов А.А. // ФНТ. 1992. Т. 18. № 8. С. 838-843.
- [4] Zysler R.D., Tovar M., Rettori C., Rao D., Shore H., Oseroff S.B., Vier D.C., Schultz S., Fisk Z., Cheong S.-W. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. N 17. P. 9467-9479.

Физико-технический институт
низких температур АН Украины
Харьков

Поступило в Редакцию
25 января 1993 г.
