

© 1990

**МАГНИТНЫЕ ФАЗЫ  
СТОХАСТИЧЕСКОГО АНИЗОТРОПНОГО МАГНЕТИКА  
С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ**

C. C. Аплеснин

Методом Монте-Карло вычислена фазовая диаграмма основного состояния стохастического магнетика с конкурирующими взаимодействиями на гексагональной решетке в модели Изинга и классической модели Гейзенберга. Определены области: неупорядоченный ферромагнетик, антиферромагнетик, антиферромагнетик со столбчатой и фрактальной структурами, парамагнетик в изинговской и спиновое стекло в гейзенберговской моделях. Вычислено поведение восприимчивости и теплоемкости от температуры, а намагниченности — от поля во всех фазовых состояниях.

Эффекты фruстрации играют важную роль в различных магнитных системах. В частности, антиферромагнетик (АФМ) с треугольной решеткой является типичным примером таких фрустрированных спиновых систем, проявляющих во многом свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие отражается прежде всего в богатом разнообразии фаз и фазовых переходов и обусловлено их высокой чувствительностью к различного рода возмущающим взаимодействиям. Существование дополнительной керальской симметрии в треугольной решетке [1] образует новые структуры как с изменением температуры, внешнего поля [2, 3], так и, возможно, со случайным замещением антиферромагнитных связей на ферромагнитные, флуктуирующие по величине.

При исследовании основного состояния стохастических магнетиков с конкурирующими взаимодействиями на основе треугольной решетки кроме обычных фрустрированных связей, возникающих при замещении обменных взаимодействий разного знака, существуют фрустрированные связи, образованные из-за геометрии решетки, величина которых изменяется с анизотропией.

Цель данной работы состоит в определении основного состояния стохастического магнетика и его характерных особенностей в температурном поведении восприимчивости и теплоемкости в зависимости от величины анизотропии.

Предельный случай — бесконечная анизотропия, т. е. модель Изинга, — рассматривался ранее в работе [4]. Использование разных аналитических подходов приводит к противоречивым результатам; так, в промежуточной области концентраций реализуется спиновое стекло или парамагнитная фаза. Чтобы избавиться от неконтролируемых приближений, используется метод численного моделирования.

### 1. М о д е л ь

Треугольная решетка лежит в основе многих трехмерных решеток: гексагональная, гексагонально плотноупакованная, чередование гексагональных и кубических плоскостей [5]. Рассмотрим стохастический магнетик с флуктуирующими обменом в гексагональной решетке с двумя предельными величинами анизотропии: бесконечная анизотропия — модель Изинга

$$H = - \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i, \quad (1)$$

поле анизотропии много меньше обменного — классическая модель Гейзенберга

$$H = - \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} S_i S_j - \sum_i D_i (S_i^z)^2 - \sum_i h_i S_i, \quad (2)$$

где  $D > 0$  — константа одноосной анизотропии типа «легкая ось»;  $h = H / K / \sqrt{S_0 (S_0 + 1)}$  — магнитное поле вдоль оси анизотропии  $\sigma = \pm 1$ ;  $S = S_0 / \sqrt{S_0 (S_0 + 1)}$ ;  $\mathcal{J}_{ij}$  — обменное взаимодействие между ближайшими соседями, подчиняющееся закону распределения

$$P(\mathcal{J}_{ij}) = v \delta(\mathcal{J}_{ij} - I) + \bar{v} \delta(\mathcal{J}_{ij} - K), \quad v = 1 - \bar{v}, \quad I > 0, \quad K < 0, \quad \lambda = K/I. \quad (3)$$

В вычислениях используется метод Монте-Карло (МК) [6] с периодическими и зеркальными граничными условиями на решетке размером  $N = 18 \times 18 \times 18$  и  $24 \times 24 \times 24$ . Все используемые величины даны в безразмерных единицах: энергия  $E = \tilde{E}/N | K | S_0 (1 + S_0)$ , теплоемкость  $C = \tilde{C}k_B/N = dE/dT$ , температура  $T = \tilde{T}/k_B | K | S_0 (1 + S_0)$ , 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  $30^\circ$  к вектору трансляций  $a_T$  ( $a = \sqrt{3}a_T$ ), ось  $OY$  совпадает с  $a_T$ ), намагниченность  $m$  и восприимчивость определены двумя методами

$$\chi^z = \tilde{\chi}^z | K | / N = m / H, \quad (4a)$$

$$\chi^\alpha = \tilde{\chi}^\alpha | K | / N = \frac{1}{NT} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_r^{L/2} (\langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle - \langle S_i^\alpha S_{i+L/2}^\alpha \rangle) \right], \quad \alpha = x, y, z, \quad N = L^3. \quad (4b)$$

Дополнительно вычислены: параметр Эдвардса—Андерсона  $q^\alpha = \sum_i \langle S_i^\alpha \rangle^2 / N$ ; 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; функция распределения локальных энергий  $P(E_i)$ , т. е. энергия взаимодействия спина с ближайшими соседями

$$E_i = S_i \left[ \sum_h \mathcal{J}_{i+h} S_{i+h} + D_i (S_i^z)^2 + S_i^z h \right] / | K | S_0 (1 + S_0),$$

и проекций спина на ось анизотропии  $P(S_i^z)$ ; Фурье-образ спина  $S^\alpha(Q) = (1/N) \sum_r S^\alpha(r) e^{-iQr}$ , соответствующий волновому вектору структуры  $Q$ . В вычислениях константа анизотропии  $D / | K | = 0.5$ .

## 2. Магнитные структуры стохастического магнетика

В плоской треугольной решетке с АФМ взаимодействиями при  $D / | K | > 1.5$  реализуется случайно модулированная структура, представляющая собой конденсат солитонов [7]. С увеличением размерности решетки образуется столбчатая структура, содержащая одномерные цепи вдоль гексагональной оси, имеющие нулевые поля со стороны соседей в базисной плоскости (рис. 1, a). Энергия такой структуры минимальная, но имеет вырождение, которое снято температурой, т. е. при низких температурах гексагональный изинговский магнетик заморожен в одном из своих состояний и при  $T \rightarrow 0$  его энтропия отлична от нуля.

Введение в изинговский АФМ достаточно малых концентраций ферромагнитных связей  $v \geq 0.01$  для  $I \geq | K |$  приводит к перевороту больших кластеров спинов, заключенных между примесными связями (рис. 1, б). Если смотреть в поляризованном излучении, то столбы пред-

ставляют собой рыхлую структуру со случайно распределенными «пустотами». Это напоминает фрактальную структуру со степенным поведением спин-спиновых корреляционных функций от расстояния [8]. Полученные

б

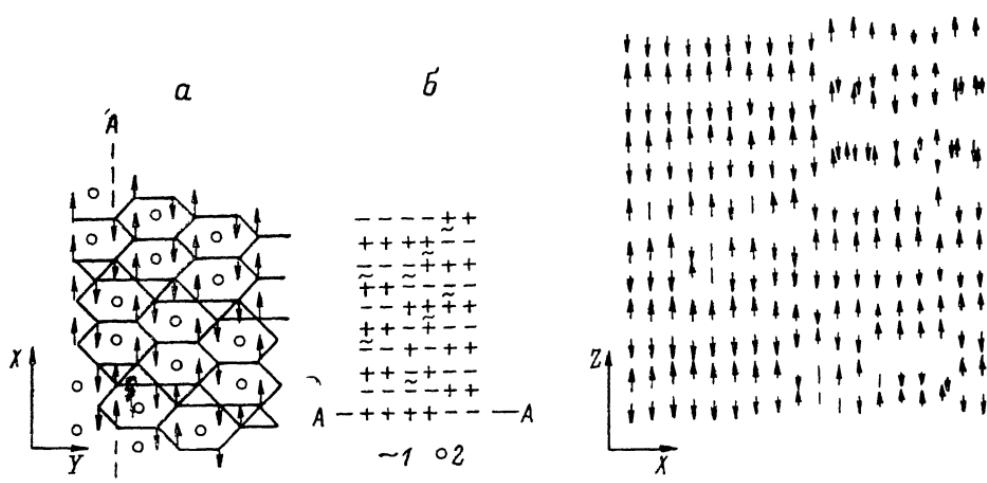


Рис. 1. Фрагмент топологической картины направления спинов вдоль гексагональной оси в базисной плоскости (а), вдоль  $ZX$  по линии  $AA'$  в АФМ с фрактальной структурой в модели Изинга (б), неупорядоченный АФМ в модели Гейзенберга (с).

1 — ФМ-связи, 2 — одномерные цепочки спинов.

фракталы являются одномерными и обладают свойством самоподобия. Изменяя размер решетки вдоль гексагональной оси в МК вычислениях, определим минимальный размер, где нарушается степенное поведение спин-спиновой корреляционной функции от расстояния. Этот минимальный масштаб зависит от концентрации и при больших ее величинах со-

а

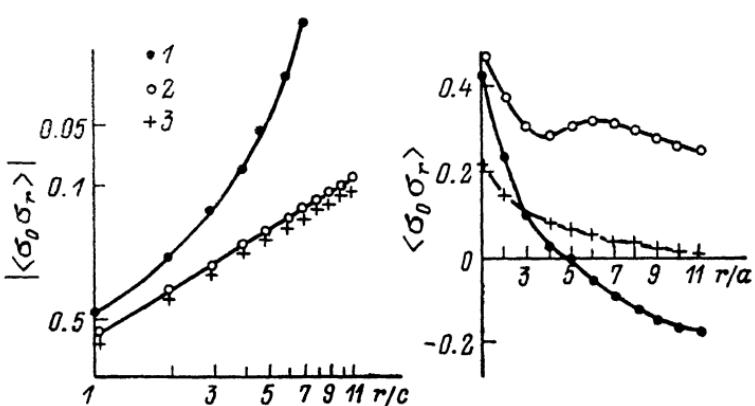


Рис. 2. Спин-спиновая корреляционная функция  $|\langle s_0 s_r \rangle|$  вдоль гексагональных осей  $OZ$  (а) и  $OX$  (б) от расстояния в неупорядоченном изинговском АФМ.

$I/K = -20$ ,  $\nu = 0.03$  (1),  $0.015$  (2),  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.07$  (3); (а);  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.03$ ,  $n = 2000$  (1),  $4000$  (2),  $\nu = 0.12$  (3). (б).

ставляет  $\xi = 4-6$  с. Выбирая максимальный размер вдоль оси с  $L=30$ , т. е. фрактальный агрегат достаточно большой  $L/\xi > 5$ , можно оценить размерность Хаусдорфа  $D_x$  из спин-спиновой корреляционной функции, изменяющейся по степенному закону  $\langle S_0^z S_r^z \rangle \sim 1/r^{D_x-d}$  (рис. 2, а). Так как магнитная структура квазидономерная (столбчатая), то  $d=1$ . С изменением величины примесной положительной связи размерность Хаусдорфа, вычисленная в окрестности критической концентрации  $\nu/\nu_k - 1 = 0.02$ , остается постоянной величиной  $D_x = 0.18 \pm 0.04$ .

В базисной плоскости спин-спиновые корреляционные функции имеют осциллирующий вид. Эта зависимость определяется размером столбцов и границами между ними. Разным зависимостям соответствуют равные энергии. Например, спин-спиновые корреляционные функции, вычисленные в МК процедуре с  $n=2000$  числа шагов МК/спин, отличаются от  $n=4000$  МК/спин (рис. 2, б). Прохождение корреляционной функции через нуль не означает отсутствия корреляции между фрактальными агрегатами. Для малых величин ферромагнитных связей область неупорядоченного АФМ увеличивается и при  $|I|/K| < 0.2$  составляет  $\nu_c^I = 0.08$ . Для  $\nu > \nu_c^I$  реализуется фрактальная структура. При дальнейшем увеличении концентрации ФМ связей  $\nu > \nu_c^{II}$  фрактальная структура разрушается и образуется кластерный парамагнетик, размер кластеров уменьшается с ростом концентрации. Спин-спиновая корреляционная функция обращается в нуль при  $r/c=11$ . В области больших концентраций  $I$ -связей  $\nu > \nu_c^{III}$  появляется дальний порядок ферромагнитного типа (ФМ).

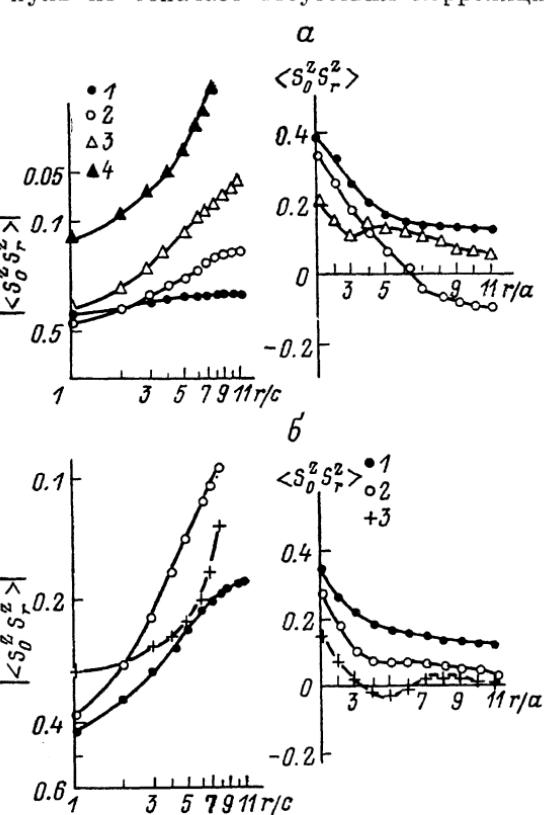


Рис. 3. Спин-спиновая корреляционная функция  $|<S_0^z S_r^z>|$  от нормированного расстояния вдоль соответствующих осей  $c$  и  $a$  в неупорядоченном гейзенберговском АФМ.

$I/K = -0.25$ ,  $\nu = 0$  (1),  $0.04$  (2),  $0.16$  (3),  $0.3$  (4) (а);  $I/K = -4$ ,  $\nu = 0.01$  (1),  $0.02$  (2),  $0.03$  (3) (б).

При дальнейшем увеличении концентрации ФМ связей  $\nu > \nu_c^{II}$  фрактальная структура разрушается и образуется кластерный парамагнетик, размер кластеров уменьшается с ростом концентрации. Спин-спиновая корреляционная функция обращается в нуль при  $r/c=11$ . В области больших концентраций  $I$ -связей  $\nu > \nu_c^{III}$  появляется дальний порядок ферромагнитного типа (ФМ).

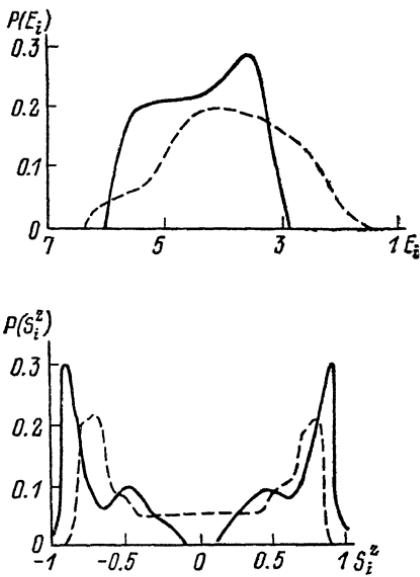


Рис. 4. Функция распределения локальных энергий  $P(E_i)$  и магнитного момента на узле  $P(S_i^z)$  в неупорядоченном гейзенберговском АФМ с  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.03$  (сплошная линия) и в спиновом стекле  $\nu = 0.15$  (штриховая).

В беспримесном гейзенберговском АФМ осуществляется неколлинеарное расположение спинов, образующих столбчатую структуру. Размер столбца много больше, чем в модели Изинга, и зависит от величины анизотропии. Спин-спиновые корреляционные функции по продольным и поперечным компонентам постоянны в направлении гексагональной оси (рис. 3, а). При замещении АФМ связей ферромагнитными степень неколлинеарности уменьшается, т. е. на место фрустрированной  $K$ -связи может попасть  $I$ -связь, и фruстрация исчезает. Поэтому порядок по поперечным компонентам с ростом концентрации уменьшается наряду с уменьшением толщины столбца. Для  $\nu > \nu_c^{II}$  дальний порядок по поперечным компонентам исчезает вдоль оси  $c$ , спин-спиновая корреляционная функция по продольным компонентам имеет степенную зависимость от

концентрации ФМ связей  $\nu > \nu_c^{III}$  фрактальная структура разрушается и образуется кластерный парамагнетик, размер кластеров уменьшается с ростом концентрации. Спин-спиновая корреляционная функция обращается в нуль при  $r/c=11$ . В области больших концентраций  $I$ -связей  $\nu > \nu_c^{III}$  появляется дальний порядок ферромагнитного типа (ФМ).

расстояния (рис. 3) в широком интервале концентраций, так же как и в модели Изинга, т. е., по-видимому, реализуется фрактальная структура. Фракталы расположены также непериодично в базисной плоскости. Фурье-образ спина  $S^z(Q)$  в неупорядоченном АФМ в два раза меньше величины спина на узле и характеризуется волновым вектором  $\mathbf{Q}$  ( $\sqrt{3}\pi/30a, 2\pi/3a, \pi/c$ ), т. е. структура в базисной плоскости непериодическая. При смене порядка на фрактальный  $S^z(Q)$  уменьшается в 3–4 раза, хотя средняя величина спина на узле не меняется. Например, для  $\lambda = -1$ ,  $v = 0.99$   $S^z(Q) = 0.35$ ,  $S^{x,y}(Q) = 0.15$  и для  $v = 0.95$   $S^z(Q) = -0.1$ ,  $S^{x,y}(Q) = 0.04$ . Во фрактальной структуре теряется трансляционная инвариантность вдоль гексагональной оси, поэтому  $S^z(Q) \rightarrow 0$ . В промежуточной области концентрации образуется состояние кластерного спинового стекла (СС). Парные корреляции на больших расстояниях обращаются в нуль (рис. 3), параметр Эдвардса—Андерсона  $q \gg 0$ . Малая величина поля анизотропии по сравнению с обменным полем приводит к изменению локальной симметрии, появлению новых степеней свободы у спиновой переменной и энергетически более низкому состоянию спинового стекла, чем парафазы.

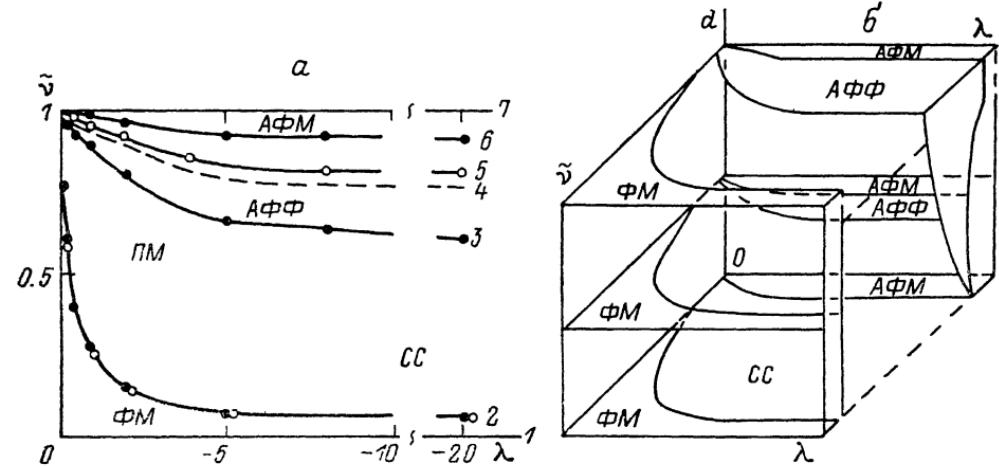


Рис. 5. Фазовая диаграмма основного состояния неупорядоченного магнетика на плоскости концентрация АФМ  $K$ -связей—отношение обменов  $\lambda = K/I$  (а) и качественный вид фазовой диаграммы основного состояния неупорядоченного гексагонального магнетика с произвольной константой анизотропии  $d = D/|K|$  (б).

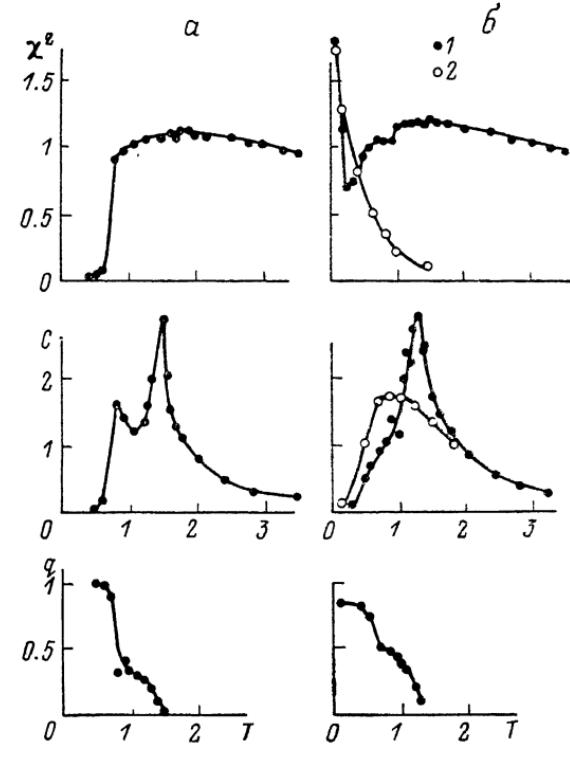
Области состояний в модели Изинга ограничены линиями: неупорядоченный ФМ (1, 2), парамагнетик (ПМ) (2, 3), антиферромагнетик с фрактальной структурой (АФФ) (3, 6), неупорядоченный АФМ (6, 7); в модели Гейзенберга ФМ (1, 2), спиновое стекло (СС) (2, 4), АФФ (4, 5), АФМ (5, 7).

Функции распределения локальных энергий  $P(E_i)$  и магнитных моментов  $P(S_i^z)$  (рис. 4) качественно не отличаются при смене антиферромагнитного порядка на фрактальный и в спиновом стекле. В фазе СС верхняя граница  $E_i^b$  локальных энергий в  $P(E_i)$  увеличивается, а нижняя уменьшается, например в модели равных по модулю связей. Увеличение  $E_i^b$  в функции распределения  $P(E_i)$ , по сравнению с простыми кубическими решетками, обусловлено геометрией решетки. В СС годограф спиновых направлений увеличивается и возрастает вес спинов, расположенных вблизи базисной плоскости.

Фазовая диаграмма основного состояния стохастического магнетика с гексагональной решеткой (рис. 5, а) вычислена в модели Изинга и анизотропном Гейзенберге. Границы области неупорядоченного ФМ не зависят от размерности спиновой переменной, а определяются конфигурацией решетки. Так, в гексагональной решетке число ближайших соседей равно числу ближайших соседей в объемоцентрированной решетке (ОЦК). Однако область неупорядоченного ФМ в ОЦК решетке, вычисленная ранее [9], больше, чем в гексагональной. Так, при диамагнитном

разбавлении  $\lambda \rightarrow 0$   $\zeta_{\text{c}}^{\text{OЦК}} = 0.82$ ,  $\zeta_{\text{c}}^{\text{ГК}} = 0.77$ . В пределе сильной примесной связи  $\lambda \rightarrow \infty$  критические концентрации совпадают  $\zeta_{\text{c}} = 0.056 \pm 0.003$ . Это отличие вызвано присутствием фрустрированных связей из-за геометрии решетки в области больших антиферромагнитных концентраций. При  $\lambda \rightarrow \infty$ ,  $\nu \ll 1$  геометрия решетки не отражается на критической концентрации. Фаза неупорядоченного антиферромагнетика разбивается на две неэквивалентные части: непериодическая колонковая (АФМ) и фрактальная (АФФ) структуры. В промежуточной области концентраций в модели Гейзенберга существует кластерное спиновое стекло, в модели Изинга — кластерный парамагнетик. Схематический вид фазовой диаграммы основного состояния от величины одноосной анизотропии изображен на рис. 5, б. В изотропном гейзенберговском АФМ существует дальний порядок по всем направлениям кристаллических осей и фрактальная структура отсутствует. С ростом анизотропии появляется фаза АФФ, причем фаза АФМ уменьшается. При некотором критическом зна-

Рис. 6. Зависимость восприимчивости  $\chi^z = \tilde{\chi}^z |K|/N$ , вычисленной во внешнем поле  $H=0.1$ ; теплоемкости  $C = \tilde{C}k_B N$ ; параметра Эдвардса—Андерсона  $q$  от температуры в изинговском АФМ с  $\nu=0$  (а), 0.03 (1), 0.5 (2) (б).



чении анизотропии  $D > D_c$  границы фазы не меняются и фаза СС заменяется парамагнетиком (линия раздела — штриховая линия на рис. 5, б).

### 3. Термодинамические характеристики стохастического магнетика

Термодинамические характеристики стохастического АФМ проявляют ряд особенностей в температурном поведении восприимчивости и теплоемкости, отсутствующие в альтернативных решетках. В изинговском АФМ развитый ближний порядок цепочки спинов вдоль гексагональной оси, расположенных в нулевых обменных локальных полях, разрушается при  $T_k=0.8$ . Эта температура не является истинной температурой фазового перехода, а отражает замораживание спинов в столбчатой структуре. Так, при  $T < T_k$  функция распределения локальных энергий имеет два пика, для меньшей энергии  $E_1=2$  ее вес равен  $P(E_1) \approx 1/3$ . Этот переход сопровождается максимумом производной по температуре  $d\chi^z/dT$ , слабой аномалией теплоемкости и появлением парамагнитных спинов (рис. 6, а). При этом изменяется поведение спин-спиновой корреляционной функции от расстояния в базисной плоскости от непериодического расположения к периодическому. Зависимость  $\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle$  вдоль оси  $OY$  характерна для трехподрешеточного АФМ. Разрушение дальнего порядка сопровождается острым максимумом теплоемкости и слабо выраженным максимумом восприимчивости. Закон Кюри—Вейса выполняется при  $T_{\text{KB}}/T_{\text{max}} = 1.6$ .

В неупорядоченном АФМ с фрактальной структурой восприимчивость расходится при низких температурах (рис. 6, б), так как некоторые кластеры, заключенные между примесными атомами в цепочке с  $E_s=2$ , имеют нескомпенсированный спин и дают парамагнитный вклад в восприимчивость. Концентрация этих спинов пропорциональна  $(1-\sqrt{q})$  при  $T \rightarrow 0$ . Выпуклость при  $T < T_k$  в температурном поведении теплоемкости обусловлена хаотическим расположением примесей и уширением функции распределения локальных полей.

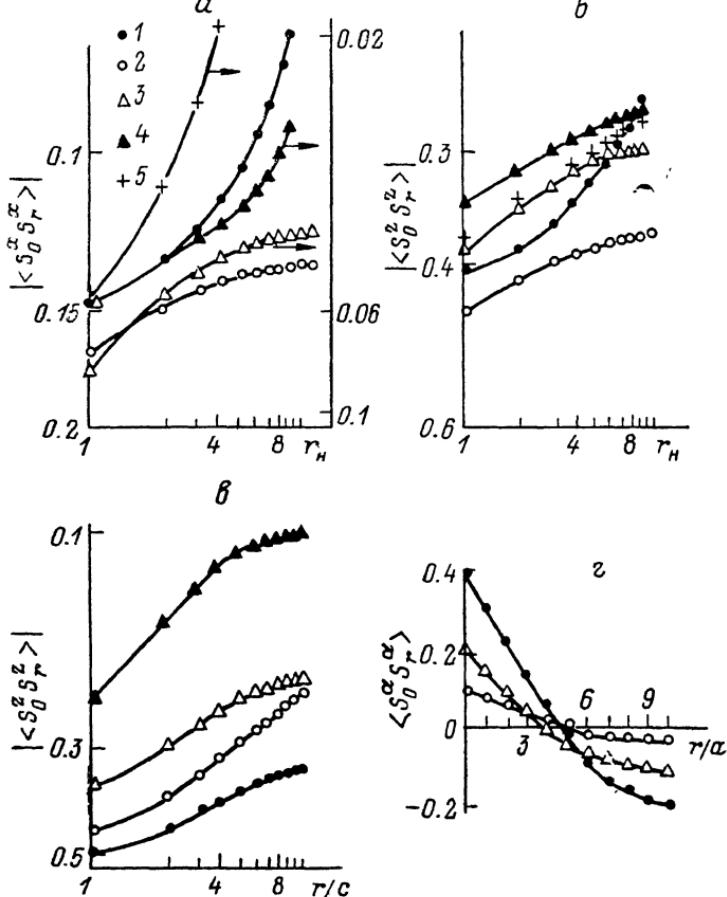


Рис. 7. Зависимость спин-спиновой корреляционной функции по продольным ( $\alpha=z$ ) и поперечным ( $\alpha=x$ ) компонентам спина, построенной в логарифмическом масштабе вдоль осей  $c$  и  $a$ , в неупорядоченном гейзенберговском АФМ от нормированного расстояния.

$I/K=-20$ ,  $v=0.03$ ,  $T=0.4$  ( $r_a=r/a(1)$ ,  $r/c(2)$ ),  $T=0.6$  ( $r_a=r/a(4)$ ,  $r/c(3)$ ),  $T=0.7$  ( $r_a=r/c(5)$ ) (а);  $T=0.4$  ( $r_a=r/a(1)$ ,  $r/c(2)$ ),  $T=0.7$  ( $r_a=r/a(5)$ ),  $T=0.8$  ( $r_a=r/a(1)$ ,  $r/c(2)$ ),  $T=0.7$  ( $r_a=r/a(5)$ ),  $T=0.8$  ( $r_a=r/a(4)$ ,  $r/c(3)$ ) (б);  $I/K=-20$ ,  $v=0.1$ ,  $T=0.4$  (1), 0.6 (2), 0.8 (3), 1 (4) (в);  $\alpha=z$ ,  $T=0.4$  (1), 0.8 (3),  $\alpha=X$ ,  $T=0.4$  (2) (г).

Разрушение порядка в цепочках приводит к разрушению фрактальной структуры. Для  $T > T_k$  степенное поведение спин-спиновой корреляционной функции вдоль  $c$  оси заменяется функцией, характерной для АФМ с дальним порядком (рис. 7).

В промежуточной области концентраций температурное поведение восприимчивости и теплоемкости типично для парамагнетика.

Температурное поведение восприимчивости качественно отличается в анизотропной гейзенберговской модели по сравнению с изинговской. При низких температурах продольная восприимчивость постоянна, теплоемкость резко возрастает (рис. 8, а). Эти эффекты вызваны неколлинеарной спиновой структурой. При разрушении порядка по поперечным компонентам спина ( $T=T_{Nl}$ ) восприимчивость, определенная из линей-

ного отклика системы по формуле (4а), имеет максимум по поперечной компоненте  $\chi^z$ , совпадающий с точкой перегиба продольной восприимчивости  $\chi^x$  по (4б).

Дальний порядок по продольным компонентам разрушается при  $T = T_{N_2}$ . Это вызывает острый максимум теплоемкости. В неупорядоченном АФМ критическая температура разрушения порядка по поперечным компонентам отличается от температуры замораживания продольных компонент спина. Поэтому при  $T > T_{N_1}$  температурное поведение восприимчивости, теплоемкости и термодинамического значения спина аналогично модели Изинга (рис. 8, б). В интервале температур  $T_{N_1} < T <$

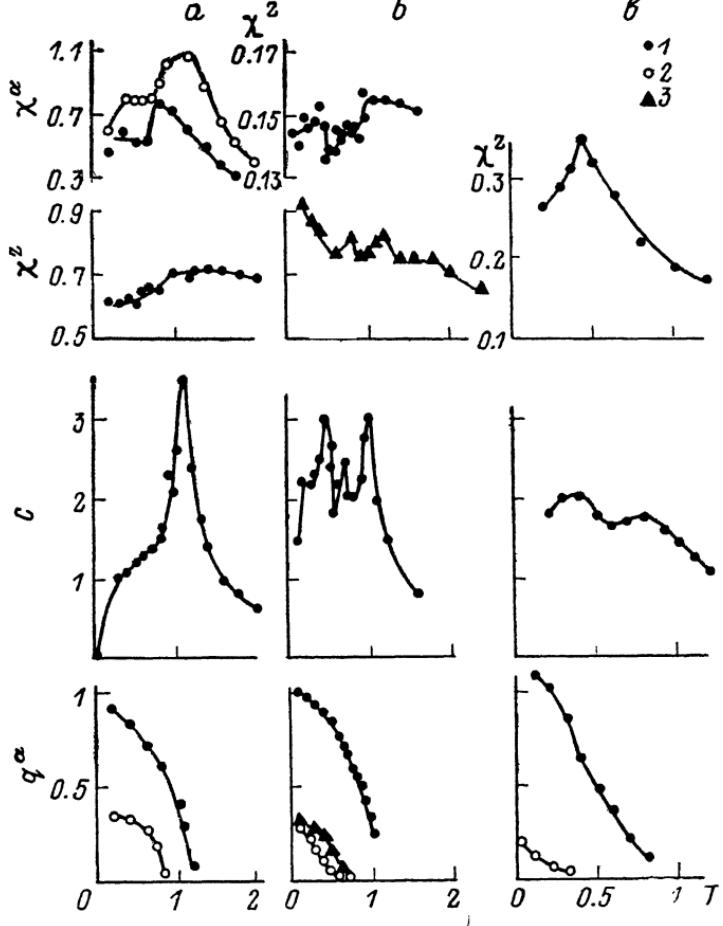


Рис. 8. Восприимчивость, определенная из корреляционной функции (4б)  $\chi^\alpha$  ( $\alpha=x$  (1),  $z$  (2)), из намагниченности во внешнем поле (4а)  $\chi^z$ , теплоемкость  $C=\tilde{C}k_B/N$ , параметр Эдварса—Андерсона  $q^\alpha$  ( $\alpha=z$  (1),  $x$  (2),  $\beta$ ) от температуры в гейзенберговском АФМ.  $\nu=0$  (а),  $1/K=-20$ ,  $\nu=0.1$  (1, 2),  $\lambda=-1$ ,  $\nu=0.03$  (3) (б),  $\nu=0.4$ ,  $\lambda=-1$  (в).

$< T_k$  наблюдается степенное поведение спин-спиновых корреляционных функций от расстояния (рис. 7), т. е. здесь реализуется фрактальная структура. Ее разрушение фиксируется по перегибу температурной зависимости восприимчивости, параметру Эдвардса—Андерсона и функциональному изменению парной спиновой корреляционной функции от расстояния. По-видимому, эта критическая температура хорошо должна проявиться в резонансных и нейтронографических исследованиях по ширине линии. При больших концентрациях продольная восприимчивость имеет каспик при температуре  $T_g$ , соответствующей точке перегиба термодинамическому среднему спина (рис. 8, в). При  $T > T_g$  разрушается ближний порядок в кластерах, образуя слабый максимум в теплоемкости.

Намагничивание АФМ с гексагональной решеткой во внешнем поле качественно отличается в разных областях фазовой диаграммы. Зависимость  $m(H)$  линейна в широком интервале полей и имеет точку перегиба в АФМ с фрактальной структурой независимо от величины анизотропии (рис. 9, a). Интервал полей с линейным поведением  $m(H)$  в неупорядоченном анизотропном АФМ в два раза больше, чем в беспримесном АФМ. Линейное поведение  $m(H)$  в малых полях обусловлено поворотом конечных кластеров с нескомпенсированным спином по направлению поля. При дальнейшем росте поля поворачиваются спины, расположенные в слабых локальных полях.

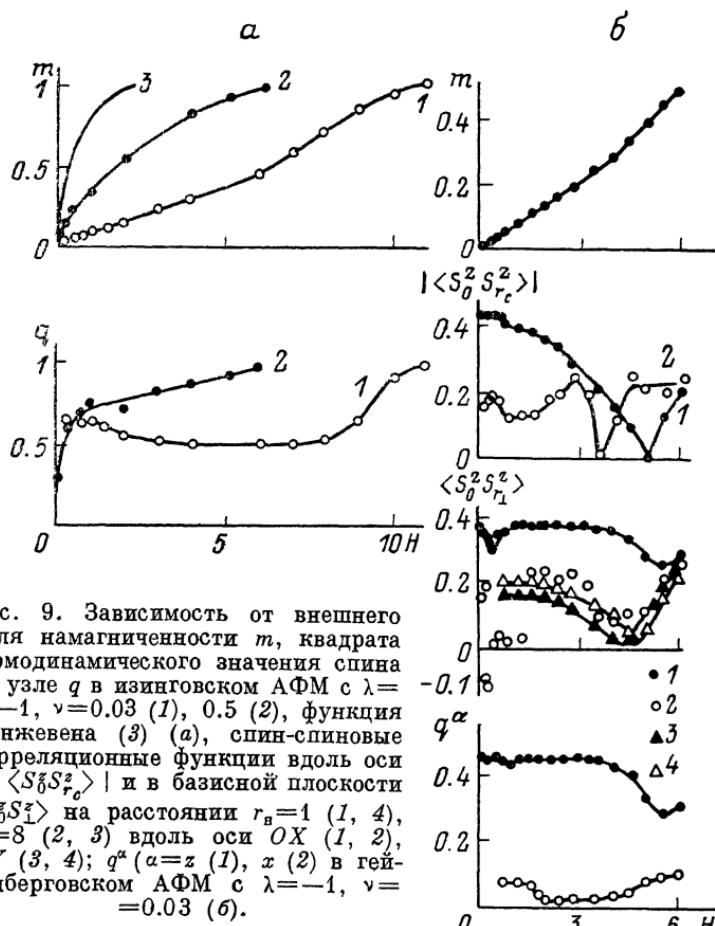


Рис. 9. Зависимость от внешнего поля намагченности  $m$ , квадрата термодинамического значения спина на узле  $q$  в изинговском АФМ с  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.03$  (1),  $0.5$  (2), функция Ланжевена (3) (a), спин-спиновые корреляционные функции вдоль оси с  $|<S_0^z S_{r_c}^z>|$  и в базисной плоскости  $<S_0^z S_{r_c}^z>$  на расстоянии  $r_c = 1$  (1, 4),  $r_c = 8$  (2, 3) вдоль оси  $OX$  (1, 2),  $OY$  (3, 4);  $q^\alpha$  ( $\alpha = z$  (1),  $x$  (2)) в гейзенберговском АФМ с  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.03$  (б).

В модели Гейзенберга из-за неколлинеарного расположения спинов намагченность от поля возрастает линейно и по величине больше, чем в модели Изинга. Порядок по поперечным компонентам с ростом поля исчезает. Магнетик имеет симметрию  $Z_2$ . Спины в цепочках, расположенные в центре сотовой ячейки, устанавливаются ферромагнитно. В базисной плоскости устанавливается периодическая структура с магнитным моментом  $m \sim 1/3$ . По направлению гексагональной оси существует антиферромагнитный порядок наряду с ФМ упорядочением в цепочках. Поэтому спин-спиновая корреляционная функция вдоль оси с на расстоянии  $r/c=1$  меньше, чем на  $r/c=8$  (рис. 9, б). Например, такая структура образуется в интервале полей  $H=3.5 \div 5$  в неупорядоченном АФМ с  $\lambda = -1$ ,  $\nu = 0.97$ . При дальнейшем росте поля образуется неколлинеарная спиновая структура с отсутствием дальнего порядка по поперечным компонентам. В области больших концентраций слабое внешнее поле упорядочивает кластеры по полю в модели Изинга. Кривые намагничивания, вычисленные для парамагнетика на основе функции Ланжевена, каче-

ственno подобны МК вычислениям, хотя намагниченность возрастает более медленно в МК расчетах из-за наличия фрустрированных связей.

На основании полученных результатов можно объяснить наличие двух магнитных моментов в гексагональном АФМ  $Mn_2P$  [10]. Мессбауэровскими измерениями обнаружено  $\mu = 3\mu_B$  и  $\mu = 0\mu_B$ . Парамагнитный вклад в анизотропном АФМ возникает выше температуры замораживания.

Фрактальная структура, по-видимому, реализуется в квазинизомерном  $RbCoCl_3$  [11]. Присутствие 1 % неконтролируемых примесей достаточно, чтобы восприимчивость расходилась при низких температурах. Магнитная структура во фрактале вырождена и спиновые конфигурации разделены энергетическими барьерами, т. е. существует спектр времен релаксаций. Если время наблюдения меньше максимального времени релаксации, то будут наблюдаться гистерезисные эффекты. Например, магнитный момент во внешнем поле при охлаждении по температуре будет иметь большую величину, чем охлажденный без поля. Температура, соответствующая необратимости прямого и обратного хода восприимчивости, должна убывать с ростом поля. Эти свойства проявляются в  $RbCoCl_3$  [11].

Итак, гексагональный АФМ с сильной анизотропией имеет два перехода по температуре: первый — из непериодической замороженной к периодически модулированной столбчатой структуре, второй вызван разрушением дальнего порядка по всем направлениям осей в кристалле. В слабо анизотропном АФМ добавляется еще один переход по поперечным компонентам спина.

В неупорядоченном изотропном магнетике существуют в основном состояния три фазы: неупорядоченный антиферромагнетик, неупорядоченный ферромагнетик и спиновое стекло. В анизотропном неупорядоченном АФМ появляется область с фрактальной структурой. В сильно анизотропном магнетике в промежуточной области концентраций существует парамагнетизм, спиновое стекло отсутствует.

С ростом температуры фрактальная структура сменяется периодически модулированной. В неупорядоченном слабоанизотропном АФМ разрушение порядка по поперечным компонентам спина по температуре приводит к фрактальной структуре. Зависимость намагниченности от поля линейна в стохастическом АФМ и практически не зависит от величины анизотропии. Восприимчивость изинговского АФМ расходится при низких температурах и малых концентрациях примесей.

Автор выражает благодарность Г. А. Петраковскому за обсуждение работы.

#### Список литературы

- [1] Villain J. // J. Physique. 1977. V. 38. N 4. P. 385—391.
- [2] Гехт Р. С. // УФН. 1989. Т. 159. № 2. С. 261—296.
- [3] Аплеснин С. С., Гехт Р. С. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 6. С. 2163—2171.
- [4] Nagahara I., Fujiki S., Katsura S. J. // Phys. C: Sol. St. Phys. 1981. V. 14. N 26. P. 3781—3794.
- [5] Александров К. С., Федосеева Н. В., Спевакова И. П. // Магнитные фазовые переходы в галоидных кристаллах. Новосибирск, 1983. С. 14—31.
- [6] Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. М., 1982. 396 с.
- [7] Аплеснин С. С. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 10. С. 83—91.
- [8] Смирнов Б. М. // УФН. 1989. Т. 157. № 2. С. 339—357.
- [9] Петраковский Г. А., Аплеснин С. С. // Тез. докл. II Всес. семинара «Магнитные фазовые переходы и критические явления». Махачкала, 1989. С. 27—28.
- [10] Ghenevier S., Fruchart D., Bacmann M., Bourtier D., Fruchart R. // J. Phys. Condensed Matter. 1989. V. 1. N 2. P. 9599—9607.
- [11] Петраковский Г. А., Федосеева Н. В., Аплеснин С. С., Королев В. И. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 169—175.