05

Моделирование спин-переориентационного перехода в слабых ферримагнетиках $YFeCrO_3$ методом Монте-Карло

© Е.В. Васинович [1], В.А. Улитко [1], А.С. Москвин [1,2]

[1] Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия
[2] Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: evgeny.vasinovich@urfu.ru

Поступила в Редакцию 6 марта 2025 г.
В окончательной редакции 6 марта 2025 г.
Принята к публикации 5 мая 2025 г.

Представлено моделирование магнитной $3d$-подрешетки в смешанных ортоферритах–ортохромитах $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ классическими методами Монте-Карло. Показано, что при учете конкуренции векторов Дзялошинского в смешанных составах наблюдаются компенсации магнитного момента, а также угловые магнитные конфигурации, соответствующие переориентации спинов.

Ключевые слова: слабый ферримагнетизм, спиновая переориентация, отрицательная намагниченность, взаимодействие Дзялошинского–Мория, метод Монте-Карло, ортоферриты, ортохромиты.

DOI: 10.61011/FTT.2025.07.61190.22HH-25

1. Введение

Системы на основе ортоферритов-ортохромитов типа $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ (R = Nd, Gd, Dy, Y, Lu) были предметом интенсивных фундаментальных теоретических и экспериментальных исследований в конце 20-го века [1–9]. Новый всплеск интереса к этим системам уже в 21 веке связан с обнаружением специфических магнитоэлектрических и магнитокалорических свойств [10–13], а также с открывшимися перспективами практического использования явлениий температурной компенсации магнитного момента, обменного смещения и спиновой переориентации для создания различных мультифункциональных устройств, например, спинтроники [14–22].

В центре фундаментальных исследований ортоферритов и ортохромитов остаются, прежде всего, особенности $4f-3d$-взаимодействия и антисимметричного обмена Дзялошинского–Мория (DM) [1,23–27]. Из микроскопической теории антисимметричного обмена для систем типа $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ можно получить как численную оценку величины вектора Дзялошинского, так и, что особенно важно, его знак, что в свое время сыграло принципиальную роль в предсказании и экспериментальном открытии нового типа магнитного упорядочения — слабого ферримагнетизма [25]. Ключевая особенность слабых ферримагнетиков — конкуренция векторов Дзялошинского между парами ионов Fe^{3+}–Fe^{3+} и Cr^{3+}–Cr^{3+} с одной стороны и парами ионов Fe^{3+}–Cr^{3+} и Cr^{3+}–Fe^{3+} с другой стороны.

Несмотря на свою долгую историю, необычный эффект спонтанной спиновой переориентации (SR) в слабых ферримагнетиках с немагнитным R-ионом (Y, Lu) в отсутствии внешних полей пока не получил адекватного описания. Обычно исследователи ограничиваются феноменологическими подходами и приближениями среднего поля [1–3,25,28], с помощью которых можно связать возможность смены ориентации вектора Нееля $G_z \leftrightarrow G_x$ с микроскопической природой DM-взаимодействия в смешанных ортоферритах-ортохромитах $YFe_{1-x}Cr_xO_3$. Инструментами, позволяющими „наблюдать“ и исследовать магнитные конфигурации в данных системах, являются методы Монте-Карло. Данные методы ранее уже применялись для моделирования редкоземельных перовскитов [29–33] и, в том числе, смешанных ортоферритов–ортохромитов [34,35], но явления спиновой переориентации авторы не рассматривали.

Поэтому основная цель работы — это разработка метода Монте-Карло (MC), который позволяет наблюдать и исследовать нетипичные для „родительских“ $YFeO_3$ и $YCrO_3$ сложные магнитные конфигурации в смешанных ортоферритах–ортохромитах $YFe_{1-x}Cr_xO_3$.

2. Модель

Слабые ферримагнетики типа $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ являются орторомбическими перовскитами с пространственной группой $Pbnm$. На элементарную ячейку приходится 4 магнитных $3d$-иона, для которых можно ввести следующие классические базисные векторы [3]:

$$4S\mathbf{F} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} + \mathbf{S}^{(3)} + \mathbf{S}^{(4)},$$
$$4S\mathbf{G} = \mathbf{S}^{(1)} - \mathbf{S}^{(2)} + \mathbf{S}^{(3)} - \mathbf{S}^{(4)},$$
$$4S\mathbf{C} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} - \mathbf{S}^{(3)} - \mathbf{S}^{(4)},$$
$$4S\mathbf{A} = \mathbf{S}^{(1)} - \mathbf{S}^{(2)} - \mathbf{S}^{(3)} + \mathbf{S}^{(4)}. \quad (1)$$

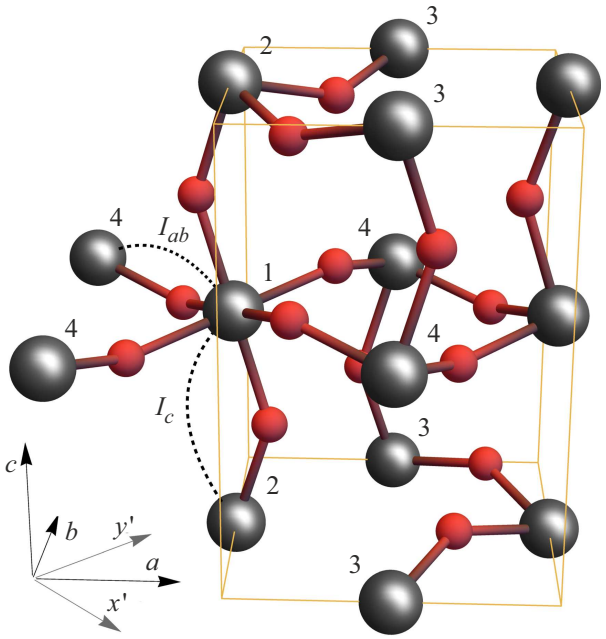

Рис. 1. Структура сверхобменных связей: большие шары — ионы Fe^{3+}, Cr^{3+}, малые шары — O^{2-}; *1, 2, 3, 4* — магнитные ионы в четырех неэквивалентных позициях.

Здесь вектор **G** описывает основную антиферромагнитную компоненту магнитной структуры, **F** — вектор слабого ферромагнетизма (явный скос подрешеток), слабые антиферромагнитные компоненты **C** и **A** описывают скос магнитных подрешеток без образования суммарного магнитного момента (скрытый скос подрешеток). Типичные спиновые конфигурации для $3d$-подрешетки, совместимые с антиферромагнитным знаком основного изотропного сверхобмена, обозначаются как $\Gamma_1(A_x, G_y, C_z)$, $\Gamma_2(F_x, C_y, G_z)$, $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$, где в скобках фигурируют единственные отличные от нуля компоненты базисных векторов.

В отличие от $YFeO_3$ и $YCrO_3$, которые являются слабыми ферромагнетиками с основной магнитной структурой типа $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$ ниже температуры Нееля T_N, слабые ферримагнетики ортоферриты–ортохромиты $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ согласно данным магнитных измерений обнаруживают полную или частичную спин-переориентацию типа $G_xF_z - G_zF_x$ в широком диапазоне замещения [2]. Обычно в подобных системах переориентация возникает из-за $4f-3d$-взаимодействия [3], но в случае немагнитного иона иттрия такой механизм исключен и нужно рассматривать анизотропию $3d$-подрешетки. И действительно, явление можно объяснить сильным уменьшением вклада DM-взаимодействия в магнитную анизотропию [7,28].

Представим спин-гамильтониан слабого ферримагнетика в наиболее простом виде, учитывая только вклады изотропного обменного взаимодействия, а также анти-

Компоненты x, y, z структурных факторов $[\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j]$, вычисленные по данным дифракции нейтронов [11] для $YFe_{0.5}Cr_{0.5}O_3$

	x	y	z
$[\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1]$	$\alpha_c = 0.216$	$\beta_c = 0.562$	0
$[\mathbf{r}_4 \times \mathbf{r}_1]$	$\pm\alpha_{ab} = 0.303$	$\beta_{ab} = 0.287$	$\gamma_{ab} = 0.397$

симметричного обмена Дзялошинского–Мория:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{\mathrm{DM}}$$

$$\hat{H}_{ex} = \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle} I_{ij}(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j),$$

$$\hat{H}_{\mathrm{DM}} = \frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle} \mathbf{d}_{ij}[\hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j] \tag{2}$$

где суммирование происходит по ближайшим соседям, I_{ij} — обменный интеграл, $\mathbf{d}_{ij}$ — вектор Дзялошинского.

На рис. 1 изображена структура сверхобменных связей в модели. Расстояния катион-анион и углы сверхобменной связи для ближайших соседей отличаются незначительно, так что ниже полагаем равенство сверхобменных интегралов $I_{ab} = I_c = I$ и модулей векторов Дзялошинского $d_{ab} = d_c = d$, хотя сами векторы направлены в разные стороны. Также далее полагаем, что пары ближайших ионов лежат вдоль осей системы координат $x'y'z'$, которая повернута вокруг оси z на угол 45°; однако все векторные величины в работе вычисляются в системе xyz, оси которой соответствуют осям кристалла abc.

Микроскопическое выражение связи вектора Дзялошинского с геометрией сверхобменной связи катион–анион–катион имеет вид [1]

$$\mathbf{d}_{ij} = d_{ij}(\theta)[\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j], \tag{3}$$

где $\mathbf{r}_{ij}$ — единичные векторы вдоль связей $O^{2-}-Fe^{3+}$, или $O^{2-}-Cr^{3+}$, θ — угол сверхобменной связи (далее будет опущен в обозначениях). Структурные факторы, определяющие ориентацию векторов Дзялошинского в ортоферритах–ортохромитах типа $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ приведены в таблице. Простая формула (3) позволяет установить прямую связь магнитной неколлинеарности (явный и скрытый скос подрешеток) в слабых ферромагнетиках с кристаллической структурой [23–25].

В соответствии с симметрией кристалла, явный вид векторов Дзялошинского в зависимости от номера узла следующий:

$$\mathbf{d}_{ijk}(Ox') = d\begin{pmatrix}(-1)^{i+j+k}\alpha_{ab}\\(-1)^{i+j+k}\beta_{ab}\\(-1)^{i+j}\gamma_{ab}\end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\mathbf{d}_{ijk}(Oy') = d\begin{pmatrix}-(-1)^{i+j+k}\alpha_{ab}\\(-1)^{i+j+k}\beta_{ab}\\(-1)^{i+j}\gamma_{ab}\end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\mathbf{d}_{ijk}(Oz') = d\begin{pmatrix}(-1)^k\alpha_c\\(-1)^{i+j+k}\beta_c\\0\end{pmatrix}, \quad (6)$$

где индекс i нумерует ионы вдоль оси x', j вдоль оси y', k вдоль оси z', $\mathbf{d}_{ijk}(Ox')$ — вектор для пар ионов, на узле ijk его ближайшего соседа вдоль оси x', $\mathbf{d}_{ijk}(Oy')$ — вектор для пар ионов вдоль оси y', $\mathbf{d}_{ijk}(Oz')$ — вектор для пар ионов вдоль оси z'.

3. Методы

Для численного моделирования простой кубической $3d$-решетки с гамильтонианом (2) мы рассмотрели два метода Монте-Карло (МС) с разными способами выбора состояний на узлах решетки в рамках алгоритма Метрополиса [36].

В первом случае это чистый классический метод Монте-Карло (МС1), когда спиновые операторы $\hat{\mathbf{S}}_i$ в гамильтониане (2) заменяются на классические векторы

$$\mathbf{m}_i = S_i\begin{pmatrix}\cos v_i\sqrt{1-u_i^2}\\\sin v_i\sqrt{1-u_i^2}\\u_i\end{pmatrix}, \quad (7)$$

где u_i — случайная величина от -1 до $+1$, v_i — случайная величина от 0 до 2π, S_i — спиновое квантовое число соответствующего узла. Это один из простейших методов МС, который часто применяют при работе со спин-гамильтонианом типа (2), в том числе для описания магнитных явлений в редкоземельных перовскитах [29,30,32,35,37].

На начальном шаге МС на каждом узле решетки i случайно выбираются числа $u_i^{(0)}$, $v_i^{(0)}$, вычисляются магнитные моменты $\mathbf{m}_i$ и энергия системы $E^{(0)}$. На следующем шаге выбираются новые случайные числа $u_i^{(1)}$, $v_i^{(1)}$, а также между 0 и 1 выбирается случайное число p, затем рассчитывается соответствующая энергия и ее изменение относительно предыдущего состояния системы $\Delta E = E^{(1)} - E^{(0)}$. Если новое состояние удовлетворяет неравенству $\exp(-\Delta E/T) > p$, где T — температура системы, то мы принимаем новое состояние системы: $u_i^{(0)} \to u_i^{(1)}$, $v_i^{(0)} \to v_i^{(1)}$, если новое состояние не удовлетворяет неравенству, то оставляем предыдущее состояние системы. Данный шаг повторяется до тех пор, пока система не придет в равновесие при заданной температуре T.

Во втором случае мы предлагаем квазиклассический метод Монте-Карло (МС2), когда состояние узла задается волновой функцией $|\psi\rangle = \sum\limits_M c_M|S, M\rangle$, где S — спин узла, M — проекция спина на ось, c_M — случайные коэффициенты с нормировкой $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ (индексы узлов опущены).

В случае ионов железа (спин $S = 5/2$) волновая функция имеет вид

$$|\psi\rangle = c_{-\frac{5}{2}}\left|\frac{5}{2}, -\frac{5}{2}\right\rangle + c_{-\frac{3}{2}}\left|\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle + c_{-\frac{1}{2}}\left|\frac{5}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + c_{\frac{1}{2}}\left|\frac{5}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + c_{\frac{3}{2}}\left|\frac{5}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle + c_{\frac{5}{2}}\left|\frac{5}{2}, \frac{5}{2}\right\rangle, \quad (8)$$

где коэффициенты функции можно представить как

$$c_{\frac{5}{2}} = \sqrt{1-\xi_1^{\frac{1}{5}}}\,e^{i2\pi\xi_{\frac{5}{2}}},$$

$$c_{\frac{3}{2}} = \xi_1^{\frac{1}{10}}\xi_2^{\frac{1}{8}}\xi_3^{\frac{1}{6}}\xi_4^{\frac{1}{4}}\xi_5^{\frac{1}{2}}\,e^{i2\pi\xi_{\frac{3}{2}}},$$

$$c_{\frac{1}{2}} = \xi_1^{\frac{1}{10}}\xi_2^{\frac{1}{8}}\sqrt{1-\xi_3^{\frac{1}{3}}}\,e^{i2\pi\xi_{\frac{1}{2}}},$$

$$c_{-\frac{1}{2}} = \xi_1^{\frac{1}{10}}\xi_2^{\frac{1}{8}}\xi_3^{\frac{1}{6}}\sqrt{1-\xi_4^{\frac{1}{2}}}\,e^{i2\pi\xi_{-\frac{1}{2}}},$$

$$c_{-\frac{3}{2}} = \xi_1^{\frac{1}{10}}\xi_2^{\frac{1}{8}}\xi_3^{\frac{1}{6}}\xi_4^{\frac{1}{4}}\sqrt{1-\xi_5}\,e^{i2\pi\xi_{-\frac{3}{2}}},$$

$$c_{-\frac{5}{2}} = \xi_1^{\frac{1}{10}}\sqrt{1-\xi_2^{\frac{1}{4}}}\,e^{i2\pi\xi_{-\frac{5}{2}}}, \quad (9)$$

где все ξ_q, ξ_M — случайные величины от 0 до 1. В случае ионов хрома со спином $S = 3/2$ надо зафиксировать $\xi_1 = \xi_2 = 1$. Такая параметризация коэффициентов гарантирует нормировку волновой функции на узле и то, что любое состояние, при однородной выборке ξ_q, ξ_M будет появляться одинаково часто при работе алгоритма.

Таким образом, в методе МС2 магнитный момент на узле и энергия системы вычисляются, соответственно, как

$$\mathbf{m}_i = \langle\psi_i|\hat{\mathbf{S}}_i|\psi_i\rangle, \quad (10)$$

$$E = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle, \quad (11)$$

где $|\Psi\rangle = \Pi_i|\psi_i\rangle$ — волновая функция всей системы. Данный метод работает по тому же алгоритму Метрополиса, что и приведенный ваше для МС1, но с использованием формул (8)–(11).

Для характеристики угловой фазы на каждом шаге МС (после достижения равновесия в системе) в обоих методах вычисляются базисные векторы (1) на всей решетке как

$$F = \frac{1}{N}\sum_{ijk}^{N}\frac{\mathbf{m}_{ijk}}{S_{ijk}}, \quad G = \frac{1}{N}\sum_{ijk}^{N}(-1)^{i+j+k}\frac{\mathbf{m}_{ijk}}{S_{ijk}},$$

$$C = \frac{1}{N}\sum_{ijk}^{N}(-1)^{i+j}\frac{\mathbf{m}_{ijk}}{S_{ijk}}, \quad A = \frac{1}{N}\sum_{ijk}^{N}(-1)^{k}\frac{\mathbf{m}_{ijk}}{S_{ijk}}, \quad (12)$$

где индекс i нумерует ионы вдоль оси x', j вдоль оси y', k вдоль оси z', N — число $3d$-ионов, S_{ijk} — спин узла ijk, $\mathbf{m}_{ijk}$ — магнитный момент узла ijk, вычисляемый по формуле (7) в методе МС1 и формуле (10) в методе МС2.

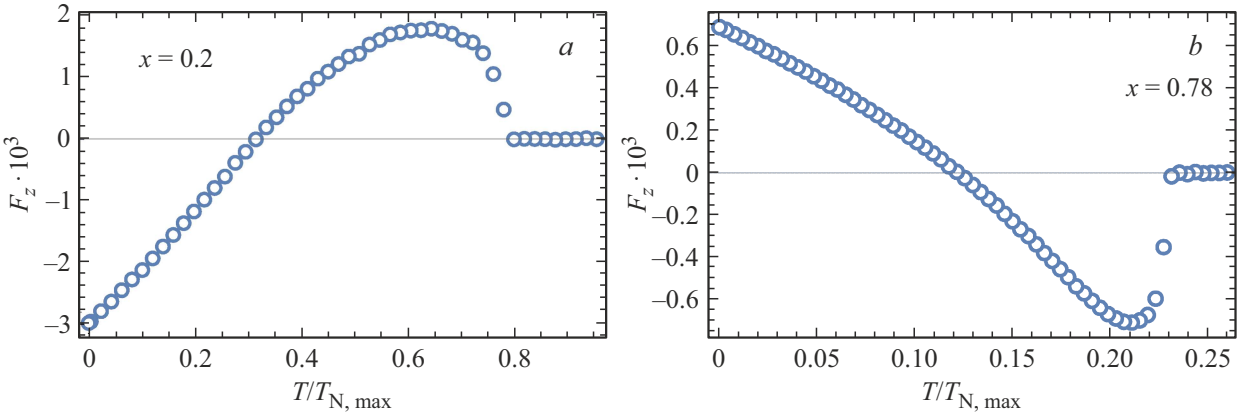

Рис. 2. Первая (a) и вторая (b) компенсации слабо-ферромагнитного вектора **F** в методе MC1.

4. Результаты

Численное моделирование проводилось на простой кубической решетке из $N = 64 \times 64 \times 64$ узлов с периодическими граничными условиями. В соответствие с концентрацией x каждый узел случайным образом выбирается как ион железа или хрома. Для установления равновесия, при заданных значениях температуры и концентрации на каждом узле решетке выполнялось $2 \cdot 10^4$ шагов MC и потом еще $3 \cdot 10^4$ шагов MC на узел для сбора статистики.

Исходя из результатов в приближении среднего поля (MFA) [28], параметры гамильтониана в данной работе принимают следующие значения: $I_{\mathrm{FeFe}} = 36.6\,\mathrm{K}$, $I_{\mathrm{CrCr}} = 18.7\,\mathrm{K}$, $I_{\mathrm{FeCr}} = 13.4\,\mathrm{K}$, $d_{\mathrm{FeFe}} = 2.0\,\mathrm{K}$, $d_{\mathrm{CrCr}} = 1.7\,\mathrm{K}$, $d_{\mathrm{FeCr}} = -2.5\,\mathrm{K}$, где отрицательный знак параметра d_{FeCr}, относительно d_{FeFe} и d_{CrCr}, задает в модельной системе конкуренцию векторов Дзялошинского.

Сразу заметим, что рассматриваемые системы из $N = 64^3$ ионов далеки до размера реальных образцов и результаты могут зависеть от того, как распределится примесь при конкретном моделировании. Например, при значительном количестве примеси ($x \approx 0.5$) в системе будут присутствовать различные области: когда все ближайшие соседи выбранного иона — это ионы того же типа (где вклад дают только вектора $\mathbf{d}_{\mathrm{FeFe}}$ и $\mathbf{d}_{\mathrm{CrCr}}$), и когда все ближайшие соседи — это ионы другого типа (где вклад дает только вектор $\mathbf{d}_{\mathrm{FeCr}}$), и в зависимости от относительного объема областей величина и направление базисных векторов (1) будут отличаться. В рамках данной работы мы не будем исследовать возможные эффекты.

Расчеты методом MC1 показывают, что в смешанном ортоферрите–ортохромите $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ ниже критической температуры $T_{\mathrm{N}}(x)$ происходит спонтанный переход из неупорядоченного состояния в фазу с единственными ненулевыми компонентами базисных векторов $G_x, A_y.F_z$, то есть в фазу Γ_4. В этом плане метод MC1 согласуется с MFA, включая вывод о том, что для переориентации в фазу, отличную от $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$, одной конкуренции векторов Дзялошинского недостаточно и, например, необходимо учитывать эффекты одноионной спиновой анизотропии.

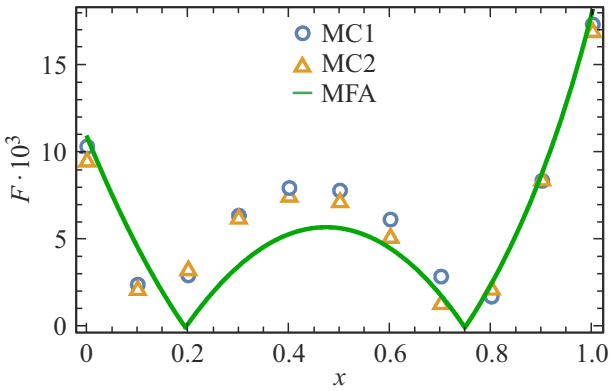

Рис. 3. Концентрационная зависимость величины слабого ферромагнитного вектора **F** в методах MC1 (круги), MC2 (треугольники) и в приближении среднего поля (сплошная линия) вблизи основного состояния ($T/T_{\mathrm{N,max}} \ll 1$).

На рис. 2 показаны примеры поведения слабого ферромагнитного вектора **F** в зависимости от относительной температуры $T/T_{\mathrm{N,max}}$, где $T_{\mathrm{N,max}} = 320\,\mathrm{K}$ — температура образования магнитного момента в модельной системе $YFeO_3$. Что важно, как и MFA, метод MC1 показывает наличие компенсации магнитного момента (эффект отрицательной намагниченности) при небольшой концентрации хрома $x \approx 0.2$ (рис. 2, a), а также предсказывает наличие второй компенсации вблизи концентрации $x \approx 0.8$ (рис. 2, b).

В случае метода MC2, при ряде концентраций температурные зависимости абсолютных значений векторов **F**, **G** ведут себя так же, как и в случае метода MC1, но с температурой упорядочения $T_{\mathrm{N,max}} = 85\,\mathrm{K}$. Близкими оказываются также намагниченности вблизи основного

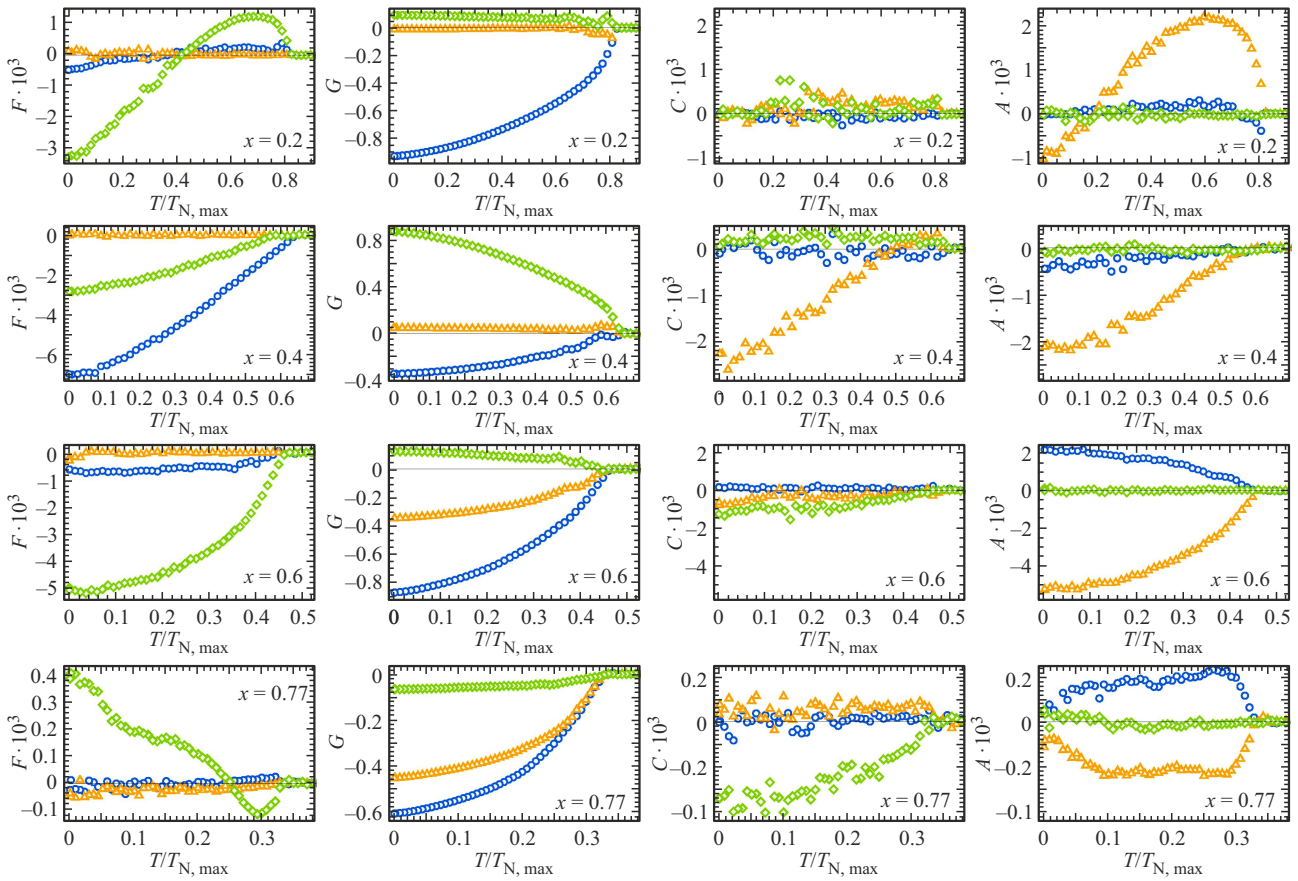

Рис. 4. Температурные зависимости базисных векторов при различных концентрациях хрома, синие круги — проекция соответствующего вектора вдоль a-оси кристалла, оранжевые треугольники — вдоль b-оси, зеленые ромбы — вдоль c-оси.

состояния (рис. 3). Первая и вторая компенсации, например, при $x = 0.2$ и $x = 0.77$, соответственно, здесь также наблюдаются (рис. 4).

Характерной особенностью метода оказывается то, что в области промежуточных концентраций при выбранных параметрах модели мы обнаруживаем фазу G_{xyz}, которая включает все компоненты векторов $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{A}, \mathbf{C}$ (рис. 4). Таким образом существует угловая конфигурация, которая в смешанном составе $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ оказывается предпочтительнее „родительской“ $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$.

Метод MC2 хоть и по своей сути остается классическим, но учета операторной природы спина с помощью квазиклассических волновых функций вида (8) оказывается достаточным, чтобы показать наличие фаз, отличных от Γ_4 (т.е. возможность спиновой переориентации) только за счет конкуренции векторов Дзялошинского без включения дополнительных механизмов, например, внешних полей и одноионной анизотропии. Проверка метода MC2 в отсутствие конкуренции, при сонаправленных векторах $\mathbf{d}_{\mathrm{FeFe}}$, $\mathbf{d}_{\mathrm{CrCr}}$ и $\mathbf{d}_{\mathrm{FeCr}}$, не обнаружила угловых конфигураций, наблюдается только фаза $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$.

Обратим еще внимание на вопрос определения критических температур T_C, например, когда система переходит из неупорядоченного парамагнитного состояния в фазу Γ_4.

В случае классических методов MC с алгоритмом Метрополиса данные температуры оказываются сильно ниже, чем в случае приближения среднего поля. С одной стороны известно, что MFA склонно завышать T_C, так как такие методы не учитывают важные локальные корреляции и флуктуации. С другой стороны, при моделировании систем, в которых есть недиагональные операторы в гамильтониане, возникает сильное занижение T_C в классических методах MC. Мы связываем это с „неубиваемой“ дисперсией энергии и параметров порядка, вызванной непрерывностью спектра одноузельных операторов. При выборе нового состояния на узле мы ограничены только условием нормировки; таким образом, при любой температуре найдется достаточное близкое по энергии новое состояние узла, которое с большой вероятностью будет принято в ходе элементарного шага алгоритма Метрополиса. По этой причине в рамках данной работы, мы интересовались только самой магнитной конфигурацией смешанного состава $YFe_{1-x}Cr_xO_3$, а результаты выше приводили в относи-

тельных температурах $T/T_{\mathrm{N,max}}$, где $T_{\mathrm{N,max}}$ — температура перехода из неупорядоченного парамагнитного состояния для $YFeO_3$ ($T_{\mathrm{N,max}} = 320\,\mathrm{K}$ в методе MC1, и $T_{\mathrm{N,max}} = 85\,\mathrm{K}$ в методе MC2). Для более точного исследования критических температур классическим методом MC требуются другие алгоритмы [31,33,34,38].

5. Заключение

В рамках данной работы нами разработана программа для моделирования методом Монте-Карло магнитных моментов в смешанном ортоферрите–ортохромите $YFe_{1-x}Cr_xO_3$. Ключевые особенности объясняются конкуренцией векторов Дзялошинского. Подтверждено, что в системе имеется первая компенсация вблизи $x \approx 0.2$, а также предсказывается вторая компенсация вблизи $x \approx 0.8$. Тогда как в родительских системах $YFeO_3$ и $YCrO_3$ наблюдается исключительно фаза $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$, в их смешанном составе наблюдается угловая фаза G_{xyz}, включающая все компоненты базисных векторов $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{C}, \mathbf{A}$. Наличие фазы G_{xyz} указывает на возможность спиновой переориентации, но для подробного описания требуются дополнительные исследования, учет одноионной спиновой анизотропии, а также модификация алгоритма, который определяет элементарный шаг метода Монте-Карло.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект FEUZ-2023-0017.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов

Список литературы

[1] А.С. Москвин, И.Г. Бострем. ФТТ **19**, 1616 (1977).
[2] А.М. Кадомцева, А.С. Москвин, И.Г. Бострем, Б.М. Ванклин, Н.А. Хафизова. ЖЭТФ **72**, 2286 (1977).
[3] К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. Наука, М. (1979). 317 с.
[4] А.М. Кадомцева, И.Г. Бострем, Л.М. Васильева, И.Б. Крынецкий, М.М. Лукина, А.С. Москвин. ФТТ **22**, 1146 (1980).
[5] Е.В. Синицын, А.М. Кадомцева, А.С. Москвин, И.Г. Бострем, В.А. Тимофеева, О.В. Казакевич. ФТТ **25**, 161 (1983).
[6] А.М. Кадомцева, А.П. Агафонов, И.А. Зорин, А.С. Москвин, Т.Л. Овчинникова, В.А. Тимофеева. ЖЭТФ **84**, 1432 (1983).
[7] A.M. Kadomtseva, A.S. Moskvin. Acta Phys. Polonica A **68**, 303 (1985).
[8] А.С. Москвин, Г.Г. Артемьев, А.М. Кадомцева, Т.М. Леднева, М.М. Лукина, Т.Л. Овчинникова. ФТТ **33**, 366 (1991).
[9] Г.П. Воробьев, А.М. Кадомцева, А.С. Москвин, Ю.Ф. Попов, В.А. Тимофеева. ФТТ **39**, 112 (1997).
[10] B. Rajeswaran, P. Mandal, R. Saha, E. Suard, A. Sundaresan, C.N.R. Rao. Chem. Mater. **24**, 3591 (2012).
[11] V. Nair, A. Das, V. Subramanian, P. Santhosh. J. Appl. Phys. **113**, 213907 (2013).
[12] L.H. Yin, J. Yang, P. Tong, X. Luo, W.H. Song, J.M. Dai, X.B. Zhu, Y.P. Sun. Appl. Phys. Lett. **110**, 192904 (2017).
[13] J.Y. Yang, X.D. Shen, V. Pomjakushin, L. Keller, E. Pomjakushina, Y.W. Long, M. Kenzelmann. Phys. Rev. B **101**, 014415 (2020).
[14] A. Dahmani, M. Taibi, M. Nogues, J. Aride, E. Loudghiri, A. Belayachi. Mater. Chem. Phys. **77**, 912 (2003).
[15] M. Jinhua, Y. Sui, X. Zhang, Y. Su, X. Wang, Zh. Liu, Y. Wang, R. Zhu, Y. Wang, W. Liu, J. Tang. Appl. Phys. Lett. **98**, 192510 (2011).
[16] T. Bora, S. Ravi. J. Appl. Phys. **114**, 033906 (2013).
[17] F. Pomiro, R.D. Sanchez, G. Cuello, A. Maignan, C. Martin, R.E. Carbonio. Phys. Rev. B **94**, 134402 (2016).
[18] П.Г. Баранов, А.М. Калашникова, В.И. Козуб, В.Л. Коренев, Ю.Г. Кусраев, Р.В. Писарев, В.Ф. Сапега, И.А. Акимов, М. Байер, А.В. Щербаков, Д.Р. Яковлев. УФН **189**, *8*, 849 (2019).
[19] A.P.G. Rodrigues, M.A. Morales, R.B. Silva, D.R.A.B. Lima, R.L.B.A. Medeiros, J.H. Araújo, D.M.A. Melo. J. Phys. Chem. Solids **141**, 109334 (2020).
[20] R. Salazar-Rodriguez, D. Aliaga Guerra, J.-M. Greneche, K.M. Taddei, N.-R. Checca-Huaman, E.C. Passamani, J.A. Ramos-Guivar. Nanomaterials **12**, 3516 (2022).
[21] А.М. Калашникова, Н.Е. Хохлов, Л.А. Шелухин, А.В. Щербаков. ЖТФ **67**, 2335 (2022).
[22] W. Liu, X. Kan, S. Feng, Q. Lv, Yu. Liu, C. Zhang, Yu. Li, X. Liu. J. Mater. Sci.: Mater. Electron. **34**, 793 (2023).
[23] A. Moskvin. Condens. Matter **4**, *4*, 84 (2019).
[24] A. Moskvin. Magnetochemistry **7**, *8*, 111 (2021).
[25] А.С. Москвин. ЖЭТФ **159**, 607 (2021).
[26] A. Moskvin, E. Vasinovich, A. Shadrin. Magnetochemistry **8**, *4*, 45 (2022).
[27] Е.В. Васинович, А.С. Москвин. ФТТ **65**, 928 (2023).
[28] Е.В. Васинович, А.С. Москвин. ФТТ **66**, 888 (2024).
[29] A.K. Murtazaev, I.K. Kamilov, Zh.G. Ibaev. Low Temp. Phys. **31**, 2 (2005).
[30] J. Jeong, E.A. Goremychkin, T. Guidi, K. Nakajima, G.S. Jeon, Sh.-A. Kim, S. Furukawa, Y.B. Kim, S. Lee, V. Kiryukhin, S.-W. Cheong, J.-G. Park. Phys. Rev. Lett. **108**, 077202 (2012).
[31] J. Bertinshaw, D.L. Cortie, Z.X. Cheng, M. Avdeev, A.J. Studer, F. Klose, C. Ulrich, X.L. Wang. Phys. Rev. B **89**, 144422 (2014).
[32] N. Tahiri, S. Dahbi, I. Dani, O. El Bounagui, H. Ez-Zahraouy. Comput. Theor. Chem. **1204**, 113421 (2021).
[33] A.S. Erchidi Elyacoubi, R. Masrour, A. Jabar. Indian J. Phys. **96**, 1351 (2022).
[34] S. Benyoussef, A. Jabar, S. Idrissi, N. Tahiri, L. Bahmad. J. Mol. Model. **30**, 325 (2024).
[35] O.V. Billoni, F. Pomiro, S.A. Cannas, Ch. Martin, A. Maignan, R.E. Carbonio. J. Phys.: Condens. Matter **28**, 476003 (2016).
[36] M.E.J. Newman, G.T. Barkema. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Oxford University Press (1999).
[37] J. Mo, M. Liu, Sh. Xu, P. Xia, Q. Zhang, J. Shen, Ya. Xia. Ceram. Int. **48**, 31309 (2022).
[38] F. Walsh, M. Asta, L.-W. Wang. npj Comput. Mater. **8**, 186 (2022).

Редактор А.Н. Смирнов