

©1993

## МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ С ФЛУКТУАЦИОННО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИМИ ПЛОСКОСТЯМИ

*С.С.Аплеснин*

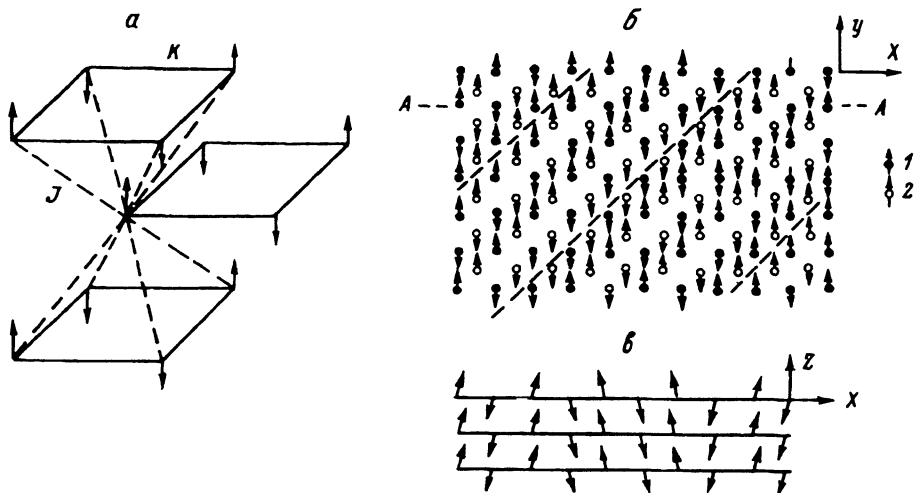
Методом численного моделирования Монте-Карло исследуются антиферромагнетики на квадратной решетке, соседние слои которых сдвинуты на половину диагонали, так что молекулярное поле спинов первой плоскости на второй и наоборот равно нулю. Показано, что при температурных флуктуациях появляется косвенное взаимодействие спинов между плоскостями. Найдены несоизмерные и скошенные структуры со спонтанным моментом.

Существует класс магнетиков, в которых молекулярное поле, создаваемое одной плоскостью на соседней, равно нулю. Например, соседние плоскости антиферромагнетиков (АФМ) с квадратной решеткой сдвинуты на половину диагонали относительно друг друга. Такое упорядочение реализуется в квазидвумерных соединениях  $K_2NiF_4$  [1]. Несмотря на сильное взаимодействие в плоскостях, в приближении молекулярного поля плоскости являются несвязанными. При этом взаимодействие между плоскостями не влияет на магнитные свойства вещества и проявляет двумерные свойства.

Взаимодействие плоскостей появляется в теории при выходе за рамки приближения молекулярного поля, а именно при учете флуктуаций подрешеточной намагниченности за счет поляризации соседних плоскостей, т.е. с помощью обмена виртуальными спиновыми волнами. Это взаимодействие может стать существенным и привести к тому, что даже в чисто обменном приближении энергия системы будет зависеть от относительного направления векторов антиферромагнетизма подрешеток и таким образом привести к уменьшению температуры Нееля. Подобные задачи рассматривались для двухподрешеточных АФМ с ОЦК решеткой во втором порядке теории возмущений [2] и для фрустрированных кубических решеток [3,4]. Но для двумерных систем этот метод не применим, так как не определено основное состояние АФМ и существенный вклад в термодинамику вносят нелинейные возбуждения. Комплексное исследование во всем интервале температур и полей можно провести методом численного моделирования.

### 1. Модель

Рассмотрим классическую модель Гейзенберга с анизотропным распределением обменных взаимодействий: в плоскости с квадратной решеткой существует сильное АФМ обменное взаимодействие  $K < 0$ , а



**Рис. 1.** Магнитная структура  $K_2NiF_4$  (а), поперечные компоненты спинов в плоскости решетки  $XY$  (1) и ближайшей соседней плоскости (2). Штриховой линией обозначены солитоны (б), спины в плоскости  $ZX$  по линии  $AA'$  (в).

между плоскостями — ферромагнитное обменное взаимодействие  $J > 0$  (рис. 1). Гамильтониан системы имеет вид

$$H = - \sum_{ij} K_{ij} S_i S_j - \sum_{ik} J_{ik} S_i S_k - \sum_i D_i (S_i^z)^2 - \sum_i H_i^z S_i^z,$$

где  $D > 0$  — константа одноосной анизотропии;  $D/K = -0.01$ ;  $\lambda = J/|K|$ ;  $H^z$  — внешнее магнитное поле, приложенное вдоль оси  $OZ$ . Все используемые величины: температура  $T = T/(k_B |K| S^2)$ , энергия  $E$ , теплоемкость  $C_v = dE/dT$ , восприимчивость  $\chi^z = m^z/H^z$ , намагниченность  $m^z$  даны в безразмерных единицах. Дополнительно вычислены параметр Эдвардса-Андерсона

$$q^\alpha = \sum_{i=1}^N \langle S_i^\alpha \rangle^2 / N,$$

спин-спиновые корреляционные функции продольных и поперечных компонент спина  $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle$  и волновой вектор структуры  $Q$ .

В вычислениях использован метод Монте-Карло (МК) [5] с периодическими и зеркальными граничными условиями на решетке размером  $12 \times 12 \times 12$ ,  $18 \times 18 \times 18$ ,  $24 \times 24 \times 12$ .

## 2. Обсуждение результатов

Согласно магнитной структуре решетки (рис. 1,а), половина межплоскостных связей является фрустрированной независимо от знака взаимодействия. Локальные флуктуации магнитного порядка, вызванные температурой, пытаются уменьшить фрустрированность системы из-за изменения ближнего порядка. В результате появляется локальное взаимодействие между плоскостями. При определенном критическом значении

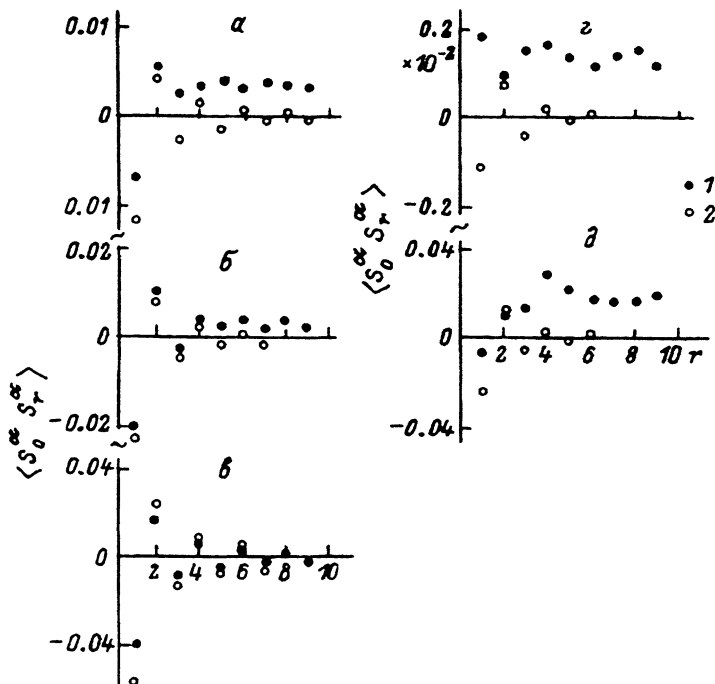


Рис. 2. Спин-спиновые корреляционные функции  $\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle$  ( $\alpha = x(1), y(2)$ ) по сторонам квадратной решетки от расстояния при разных температурах.  $T = 0.2$  (а),  $0.3$  (б, д),  $0.4$  (в),  $0.1$  (г) для  $\lambda = 0.4$  (а-в) и  $0.6$  (г, д).

интеграла межплоскостного обменного взаимодействия  $J \geq J_k$  образуются модулированные структуры. (В численных расчетах определен интервал  $\lambda_k = 0.2 \div 0.3$  из-за медленной сходимости процедуры при низких температурах и ограниченного размера решетки). Эти структуры можно представить в виде солитонов (рис. 1, б). Здесь солитоны представляют собой статические стенки по поперечным компонентам спина между доменами простой АФМ фазы, вектор антиферромагнетизма которой повернут на некоторый угол относительно основного состояния системы. Неелевское состояние оказывается стабильным, пока возникновение солитонов энергетически невыгодно. Как только оно становится выгодным, периодичность системы меняется из-за образования подрешетки солитонов.

Плотность солитонов растет с увеличением межплоскостного обменного взаимодействия, и они имеют слабый спонтанный момент в плоскости. По оси  $OZ$  устанавливается ферромагнитное упорядочение: спин-спиновые корреляционные функции  $\langle S_0^{x(y)} S_r^{x(y)} \rangle > 0$  и вектор структуры  $Q = 0$ . С увеличением температуры меняется модуляция спин-спиновой корреляционной функции (рис. 2). Вектор структуры по поперечным компонентам спина в плоскости  $XY$  растет с температурой до значения  $Q = \pi/2a$ , и при критическом значении температуры  $T_1^*$  исчезает сверхструктура по поперечным компонентам спина, т.е. разрушается солитонная решетка. Магнетик становится двумерным с АФМ упорядочением по продольным компонентам спина в плоскости. Корреляция между плоско-

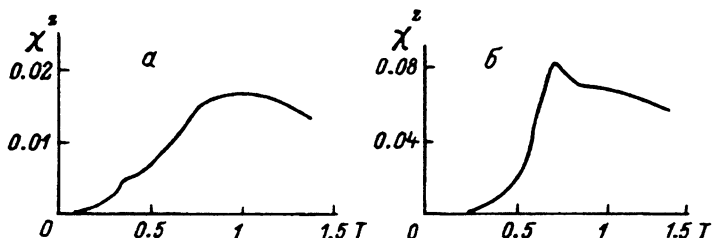


Рис. 3. Зависимость продольной восприимчивости  $\chi^z$  от нормированной температуры в поле  $H^z/|K| = 0.1$  для  $\lambda = 0.4$  (а) и  $0.9$  (б).

стями отсутствует. По-видимому, этот переход является фазовым переходом 2-го рода, так как параметр порядка солитонной решетки (вектор антиферромагнетизма) меняется непрерывно либо скачки его слишком малы, что численными расчетами их невозможно зафиксировать. Этот переход сопровождается небольшим максимумом теплоемкости и точкой перегиба в температурном поведении восприимчивости (рис. 3).

Для  $\lambda \geq 0.5$  образуется слабоскошенная АФМ структура со спонтанным моментом в базисной плоскости. Поперечные компоненты спинов ферромагнитно упорядочены с волновым вектором структуры  $Q = 0$  (рис. 2,б). С ростом температуры однородная структура разрушается  $m^z \rightarrow 0$  (рис. 4), и при  $T \geq T_c$  магнетик имеет несоразмерную структуру, описанную ранее. При высокой температуре фрустрированные межплоскостные взаимодействия уменьшают температуру Нееля по отношению к двумерно-упорядоченному анизотропному АФМ. Для случая равных интегралов обменного взаимодействия  $\lambda = 1$  переход по температуре из

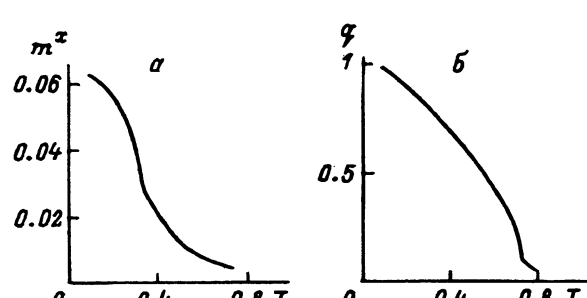
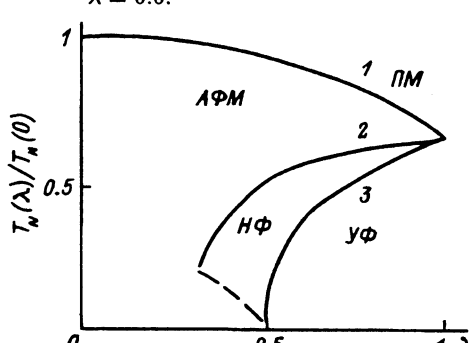


Рис. 4. Зависимость от температуры спонтанного момента в плоскости  $m^z$  (а) и параметра Эдвардса-Андерсона  $q$  (б) для  $\lambda = 0.6$ .

Рис. 5. Фазовая диаграмма  $T - \lambda$  двумерного антиферромагнетика (АФМ), несоразмерной фазы солитонов (НФ), угловой фазы (УФ).



угловой фазы в парамагнитную происходит, минуя промежуточные состояния.

На рис. 5 изображена фазовая диаграмма в зависимости от величины ферромагнитной связи между плоскостями. Первая линия разделяет парамагнитную фазу от двумерно-упорядоченного АФМ неелевского типа. Ниже третьей линии обозначена область с трехмерным порядком, имеющая скошенную структуру. Между второй и третьей линиями реализуется солитонная решетка по поперечным компонентам спина с несоизмерным параметром порядка. Образование солитонов связано с температурными флуктуациями при  $\lambda < 0.5$  и критической температуре  $T_2^*$ , которую численным методом трудно фиксировать в силу медленной сходимости процедуры МК при низких температурах. Поэтому низкотемпературная область, обозначенная штриховыми линиями, не исследована.

Процесс намагничивания, когда внешнее магнитное поле направлено вдоль оси антиферромагнетизма, в области, ограниченной линиями  $\{-2\}$ , также сопровождается образованием несоизмерных структур.

Итак, фрустрированные магнетики с флуктуационно взаимодействующими плоскостями в определенной области параметров имеют скошенную структуру, образующую по поперечным компонентам спина несоизмерную солитонную решетку с трехмерным упорядочением или однородное ферромагнитное упорядочение со слабым спонтанным моментом в плоскости квадратной решетки.

#### Список литературы

- [1] Александров К.С., Федосеева Н.В., Спевакова И.П. Магнитные фазовые переходы в галлоидных кристаллах. Новосибирск: Наука, 1983. 194 с.
- [2] Шендер Е.Ф. // ЖЭТФ, 1982. Т. 83. № 7. С. 326-337.
- [3] Azaria P. // J. Phys. C. 1986. V. 19. N 15. P. 2773-2783.
- [4] Henley C.L. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. N 17. P. 2056-2059.
- [5] Петраковский Г.А., Аплеснин С.С. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 4. С. 1167-1171.

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

Поступило в Редакцию  
26 января 1993 г.