

Динамика намагниченности фрустрированных изинговских систем

© Ю.Б. Кудасов, А.С. Коршунов, Д.А. Маслов, В.Н. Павлов

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Саров, Нижегородская обл., Россия

E-mail: yu_kudasov@yahoo.com

Исследуется динамика намагниченности в треугольных решетках изинговских цепочек в рамках теории Глаубера. Представлены результаты численного трехмерного моделирования магнитной структуры и кривых намагничивания $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$. Структуры низко- и высокотемпературных фаз оказываются существенно различными: ложная фрустрированная низкотемпературная фаза трансформируется в частично разупорядоченную антиферромагнитную сотовую структуру. Две дополнительные ступени намагниченности при низких температурах образуются за счет доменной структуры и ферримагнитной фазы. Все основные гипотезы, использованные в рамках двумерной модели, нашли свое подтверждение при трехмерном моделировании.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, аналитической ведомственной целевой программой „Развитие научного потенциала высшей школы“ и программой „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“.

Сочетание низкой размерности и фрустрации приводит к сложному поведению магнитных систем. Примером такого рода могут служить фрустрированные решетки изинговских цепочек. Здесь подразумевается, что магнитное взаимодействие вдоль цепочки значительно превосходит межцепочечное взаимодействие и, таким образом, цепочка является базовым элементом структуры. Правильная треугольная решетка образована антиферромагнитными (АФМ) цепочками в соединениях CsCoCl_3 , CsCoBr_3 [1] и ферромагнитными цепочками в $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ [2–4] и $\text{Sr}_5\text{Rh}_4\text{O}_{12}$ [5,6]. Слабые взаимодействия соседей, следующих за ближайшими, частично снимают вырождение и приводят к разнообразным низкотемпературным магнитным фазам: ферримагнитной (CsCoCl_3 , CsCoBr_3), 2D-антиферромагнитной треугольной изинговской фазе ($\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$) или двухподрешеточной структуре ($\text{Sr}_5\text{Rh}_4\text{O}_{12}$).

В последние несколько лет были проведены тщательные исследования магнитных свойств $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ и родственных соединений [2]. Было обнаружено, что при низких температурах и малых скоростях нарастания магнитного поля кривые намагничивания имеют ступенчатую форму. В $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ в структуре отчетливо наблюдаются четыре ступеньки эквидистантных по магнитному полю (с шагом 1.2 Т). При температуре выше 12 К и при очень медленном изменении магнитного поля число ступенек уменьшается до двух. Заметная зависимость высоты ступенек от скорости изменения магнитного поля при низких температурах указывает на неравновесный характер кривой намагничивания [2]. Высказывалось предположение о том, что поведение $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ может быть связано с квантовым туннелированием. Однако известно, что в системе одномерных цепочек возникает сложный трехмерный магнитный порядок, и прямая аналогия с молекулярными магнетиками вряд ли возможна.

Структура $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ образована цепочками Co_2O_6 , ориентированными вдоль кристаллографической оси c .

В цепочках ионы Co^{3+} находятся в центрах чередующихся тригональных призм и октаэдров с общими гранями. В зависимости от окружения кристаллическое поле переводит ион Co^{3+} либо в высокоспиновое, либо в низкоспиновое (немагнитное) состояние. Особенностью кристаллической структуры $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ является относительный сдвиг цепочек вдоль оси c . На рис. 1, *a* показана пара соседних цепочек. Из шести ближайших соседей три оказываются сдвинутыми вверх, а три других — вниз (рис. 1, *b*). Это приводит к очень сложной структуре связей в магнитной системе. В частности, имеются двойные спиральные пути вдоль оси c .

В работе [3] была предложена модель жестких цепочек для объяснения особенностей на кривой намагниченности $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$. Эта модель предполагает, что при низких температурах цепочка конечной длины находится

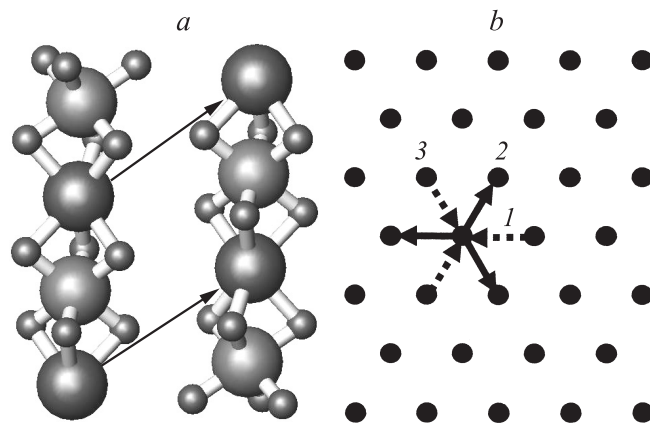


Рис. 1. Структура $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$. *a* — соседние цепочки Co_2O_6 , ионы Co^{3+} показаны большими сферами, O^{2-} — малыми, магнитные взаимодействия между ионами Co^{3+} в высокоспиновом состоянии показаны стрелками; *b* — решетка цепочек, сдвиги вверх и вниз при переходе к ближайшему узлу в соседней цепочке показаны стрелками.

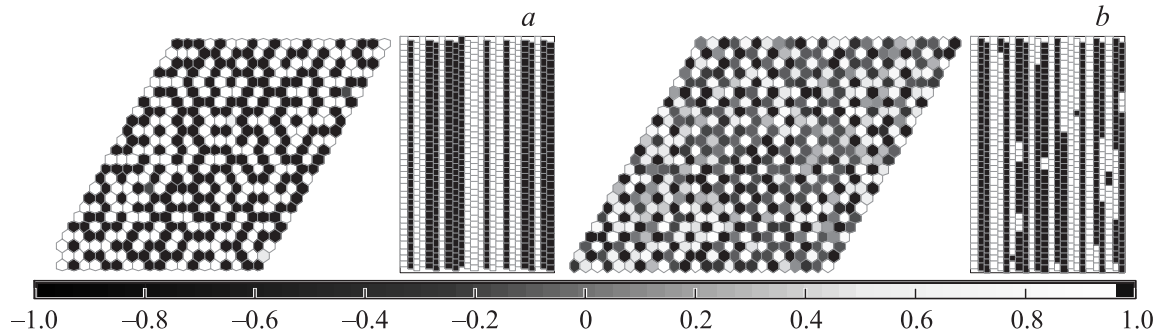


Рис. 2. Магнитная структура $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ в отсутствии магнитного поля. Показаны усредненные значения намагниченностей по цепочкам при 5 (*a*) и 15 К (*b*) и вертикальные сечения кластера вдоль оси *c* по средней линии ромба. Величина среднего момента цепочки определяется по шкале оттенков.

в одном из полностью упорядоченных состояний, т.е. является жестким суперспином. Тогда задача сводится к двумерной АФМ-модели Изинга на треугольной решетке [7]

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

где J_1 — константа взаимодействия ближайших магнитных ионов в цепочке, $\sigma_i = \pm 1$ — величина проекции суперспина на ось *c*, $\langle \dots \rangle$ обозначает суммирование по парам ближайших магнитных ионов в цепочке, B — внешнее магнитное поле. Основное состояние этой модели сильно вырождено [7].

Второй особенностью модели является неравновесный характер эволюции состояния системы (по метастабильным состояниям). Модель жестких цепочек была обобщена на ненулевые температуры в рамках теории среднего поля [4]. При описании неравновесной динамики использовалась теория Глаубера [8], в рамках которой предполагается, что изинговская цепочка взаимодействует с внешним тепловым резервуаром. Это взаимодействие приводит к стохастической динамике. Отметим, что динамика даже изолированной изинговой цепочки довольно сложная [9]. В частности, существует два характерных времени релаксации магнитного момента, которые при низкой температуре сильно различаются между собой.

Ранее выполнялось также и численное 2D- и 3D-моделирование статической магнитной структуры $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ методом Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса [10]. Однако совсем недавно было показано, что вследствие сильного вырождения системы алгоритм Метрополиса приводит к качественно неверным результатам, и его необходимо заменить алгоритмом Ванга-Ландау [11]. Он дает две ступени намагниченности в идеальной и неидеальной решетках, а не четыре, наблюдаемые в эксперименте. Это было интерпретировано как проявление неравновесности системы [11], что согласуется с моделью глауберовой динамики.

Таким образом, в настоящее время возникла необходимость пересмотра результатов численных 2D- и 3D-расчетов магнитной структуры $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$. В настоящей работе мы выполнили 3D-моделирование неравно-

весной глауберовой динамики намагниченности. Ранее в работе [12] мы исследовали глауберову динамику намагниченности в рамках 2D-моделирования. При этом предполагалось, что цепочки полностью упорядочены, что заведомо несправедливо при высоких температурах. Другим предположением являлась гипотеза о том, что динамика суперспина (цепочки) такая же, как и у изолированного спина в теории Глаубера.

В ходе 3D-моделирования использовалась ромбическая суперъчейка размерами $36 \times 36 \times 72$. Граничные условия в плоскости (*ab*) были периодическими, а вдоль оси *c* цепочки имели конечную длину. Отметим, что конечная длина цепочки и ее разомкнутые концы имеют принципиальное значение [9]. Вероятность переворота *i*-го спина вычислялась согласно теории Глаубера по формуле

$$W(\sigma_i) = \frac{\alpha}{2} \left[1 - \sigma_i \text{th} \left\{ \frac{J_1}{T} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_j + \frac{J_2}{T} \sum_{\langle ik \rangle} \sigma_k + \frac{B}{T} \right\} \right], \quad (2)$$

где $J_2 < 0$ — константа взаимодействия ближайших магнитных ионов в соседних цепочках, $|J_1| \gg |J_2|$, $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ обозначает суммирование по парам ближайших магнитных ионов в соседних цепочках, T — температура. Константа α является свободным параметром в глауберовой теории. Она описывает взаимодействие магнитной подсистемы с тепловым резервуаром.

Начальным состоянием служило случайное состояние, которое релаксировало аналогично технике 2D-моделирования [12]. Затем исследовалась эволюция структуры в нарастающем магнитном поле. Расчетный шаг по времени должен быть достаточно малым, чтобы исключить ложные двойные перевороты пары ближайших соседей. В наших расчетах он составлял примерно 10^{-4} .

Магнитная структура, полученная в результате моделирования, показана на рис. 2 и 3. При низкой температуре (рис. 2, *a*) она практически воспроизводит результаты 2D-моделирования [12]. На вертикальном разрезе кластера видно, что почти все цепочки полностью упорядочены. При высокой температуре (рис. 2, *b*) появляется частично разупорядоченная сотовая структура, в кото-

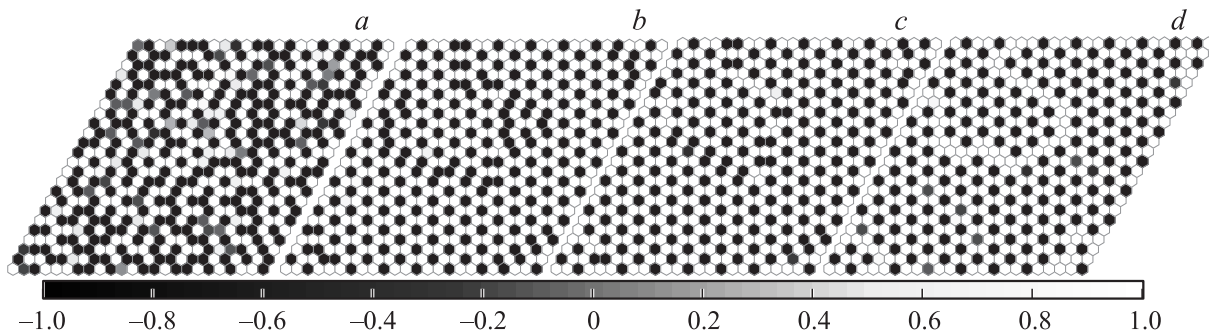


Рис. 3. Усредненные значения намагниченностей по цепочкам в $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ при 8 К в магнитном поле $B = 0$ (a), 0.74 (b), 1.667 (c) и 2.778 Т (d).

рой две подрешетки упорядочены в АФМ-структуру, а третья — разупорядочена. Это согласуется с правилом, предложенным в работе [4]. Такая структура приводит к двум ступеням в кривой намагничивания, наблюдаемым экспериментально при высокой температуре [2].

На рис. 3 показаны результаты моделирования при постоянной температуре в нарастающем магнитном по-

ле при низкой температуре. Здесь важно отметить образование доменной структуры в ферримагнитной фазе. Такие домены наблюдались при 2D-моделировании. Они как раз и являются источником дополнительных двух ступенек на кривой намагничивания при высоких скоростях нарастания магнитного поля, поскольку ближайшее окружение для ионов в доменной стенке отличается от монодоменного.

Результаты 3D-моделирования хорошо согласуются с выполненным ранее 2D-моделированием глауберовой динамики. На рис. 4 проведено сравнение кривых намагничивания, полученных при различных скоростях нарастания магнитного поля в случаях 2D- (рис. 4, a) и 3D- (рис. 4, b) моделирования. Видно, что качественно графики имеют одинаковый вид. Следует отметить, что в случае 3D-моделирования возникает дополнительная зависимость результатов от длины цепочки. Однако она при большой длине оказывается довольно слабой. В целом результаты 3D-моделирования подтверждают основные предположения 2D-модели жестких цепочек [3,4,9].

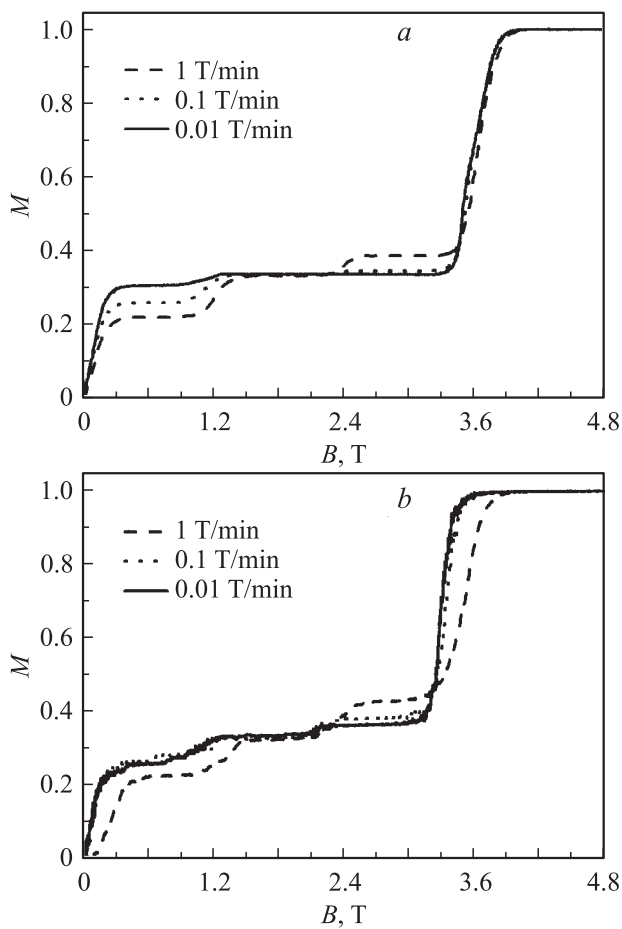


Рис. 4. Кривые намагничивания (M — нормированная намагниченность) $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ при различных скоростях нарастания магнитного поля при 5 К в случаях 2D- (a) и 3D-моделирования (b).

Список литературы

- [1] M. Mekata, K. Adachi. *J. Phys. Soc. Jpn.* **44**, 806 (1978).
- [2] V. Hardy, M.R. Lees, O.A. Petrenko, D.Mck. Paul, D. Flahaut, S. Hebert, A. Maignan. *Phys. Rev. B* **70**, 64 424 (2004).
- [3] Yu.B. Kudasov. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 27 212 (2006).
- [4] Yu.B. Kudasov. *Eur. Phys. Lett.* **78**, 57 005 (2007).
- [5] G. Cao, V. Durairaj, S. Chikara, S. Parkin, P. Schlottmann. *Phys. Rev. B* **75**, 134 402 (2007).
- [6] Ю.Б. Кудасов. *Письма в ЖЭТФ* **88**, 677 (2008).
- [7] G.H. Wannier. *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950).
- [8] R.J. Glauber. *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
- [9] Ю.Б. Кудасов. *ЖЭТФ* **137**, 406 (2010).
- [10] X. Yao, S. Dong, H. Yu, J. Liu. *Phys. Rev. B* **74**, 134 421 (2006).
- [11] M.H. Qin, K.F. Wang, J.-M. Liu. *Phys. Rev. B* **79**, 172 405 (2009).
- [12] Yu.B. Kudasov, A.S. Korshunov, V.N. Pavlov, D.A. Maslov. *Phys. Rev. B* **78**, 132 407 (2008).

Окончание публикации материалов симпозиума