

УДК 537.611

## ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЙ СИСТЕМЫ В ПОЛЕ ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ

Е. Н. Булгаков

Численными методами рассмотрено основное состояние спиновой системы со спином 1, связанной диполь-дипольным взаимодействием с учетом одноионной анизотропии типа «легкая плоскость». В приближении среднего поля найдено, что в зависимости от константы анизотропии и параметров элементарной ячейки орторомбической объемно-центрированной решетки реализуется большое разнообразие магнитных структур: 1) ферромагнитная, 2) несоразмерный геликоид, 3) слоистая, 4) поперечная спиновая волна, 5) синглетная фаза с нулевой намагниченностью.

Основное состояние классической дипольной системы на решетке рассматривалось во многих работах [1-7]. В основе их лежит блочный метод Латтинджера и Тисцы [1], состоящий в том, что основное состояние дипольной системы предполагается периодичным с периодом, равным удвоенной элементарной ячейке кристалла. Для квантовой дипольной системы со спином 1/2 и произвольной решеткой Бравэ эта задача была обобщена Ниемеером [2].

Однако для некоторых типов решетки предположение Латтинджера

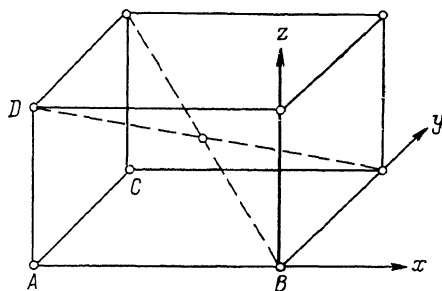


Рис. 1. Орторомбическая объемно-центрированная решетка.  $AB=a$ ,  $AC=AD=1$ .

и Тисцы может стать ошибочным. В частности, было показано, что в орторомбической и гексагональной решетках минимальное собственное значение Фурье-образа дипольного тензора имеет минимум в середине зоны Бриллюэна [8, 9]. Это означает, что упорядочение в дипольной системе может оказаться более сложным, например несоразмерным [8].

Переходя к реальным дипольным системам, необходимо принимать во внимание конечность спина, иначе говоря, учитывать квантовые эффекты. Квантовые системы с преобладающим дипольным взаимодействием рассматривались в работах [10, 11], однако вопрос о возможном неоднородном упорядочении квантовой системы с  $S > 1/2$  не исследовался. Как мы покажем ниже, учет квантовости спина и анизотропии приводит к большому разнообразию возможных типов упорядочения.

Рассмотрим орторомбическую объемно-центрированную решетку спинов  $S=1$  (рис. 1) с гамильтонианом взаимодействия

$$H = 1/2 \sum_{\mathbf{f}\mathbf{f}'} \frac{1}{R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}} \left( \delta_{\alpha\beta} R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^2 - 3R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^{\alpha} R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^{\beta} \right) S_{\mathbf{f}}^{\alpha} S_{\mathbf{f}'}^{\beta} + \sum_{\mathbf{f}} D (S_{\mathbf{f}}^z)^2, \quad (1)$$

где  $D > 0$ ,  $\mathbf{R}_{ff'} = \mathbf{f} - \mathbf{f}'$ . Поскольку анизотропия типа «легкая плоскость» приводит к эффекту квантового сокращения спина, который важен при рассмотрении основного состояния [12-15], мы, следуя [12], будем искать волновую функцию в приближении среднего поля

$$|\Psi_0\rangle = \prod_f |\Psi, \mathbf{f}\rangle \quad (2)$$

с варьируемыми функциями  $|\Psi, \mathbf{f}\rangle$  на каждом узле. Усредняя гамильтониан (1) по состоянию (2), мы перепишем  $\langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$  в виде функционала по переменным  $\mathbf{m}_f = \langle \Psi, \mathbf{f} | \mathbf{S} | \Psi, \mathbf{f} \rangle$  [15]

$$E = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{f}\mathbf{f}'} \frac{1}{R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}} (\delta_{\alpha\beta} R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^2 - 3R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^\alpha R_{\mathbf{f}\mathbf{f}'}^\beta) m_{\mathbf{f}}^\alpha m_{\mathbf{f}'}^\beta + \\ + \sum_{\mathbf{f}} \left( \frac{D}{2} \cos^2 \gamma_{\mathbf{f}} - \frac{D}{2} \sin^2 \gamma_{\mathbf{f}} \sqrt{1 - m_{\mathbf{f}}^2} \right) + \text{const.} \quad (3)$$

Здесь  $\gamma_{\mathbf{f}}$  — угол между осью  $x$  и направлением  $\mathbf{m}_{\mathbf{f}}$ . Дипольная часть (3) после перехода к Фурье-компонентам  $\mathbf{m}_{\mathbf{k}}$  приобретает вид

$$H_{dd} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} Q^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) m_{\mathbf{k}}^\alpha m_{-\mathbf{k}}^\beta, \quad (4)$$

$$Q^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{r \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{1}{r^5} (r^2 \delta_{\alpha\beta} - 3r_\alpha r_\beta). \quad (5)$$

Проанализировать решеточную сумму (5) не так просто ввиду того, что ряд сходится медленно. Однако Малеев [16] показал, как нужно преобразовать ряд (5), чтобы достичь быстрой сходимости. Новый ряд

содержит экспоненциальные режущие множители, и поэтому численный расчет (5) можно провести быстро и с хорошей точностью. Волновой вектор  $\mathbf{k}_0$  неоднородной структуры, для которой дипольная энергия (4) минимальна, может быть вычислен, минимизируя по  $\mathbf{k}$  функцию  $\lambda(\mathbf{k})$ , где  $\lambda(\mathbf{k})$  — наименьшее собственное значение дипольного тензора (5).

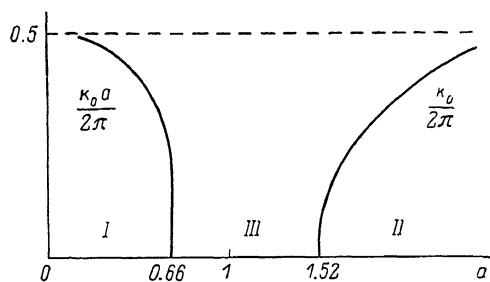


Рис. 2.

Эти расчеты проводились численно, при этом волновые векторы  $\mathbf{k}$  перебирались во всей зоне Бриллюэна. Результат вычислений представлен на рис. 2. В зависимости от параметра  $a$  минимум реализуется для разных направлений  $\mathbf{k}$ : при  $a < 0.66$  (область I)  $\mathbf{k}_0 \parallel \mathbf{e}_x$ , при  $a > 1.52$  (область II)  $\mathbf{k}_0 \parallel \mathbf{e}_y$  или  $\mathbf{e}_z$ , при  $0.66 \leq a \leq 1.52$  (область III) минимум при  $\mathbf{k} \neq 0$  отсутствует. Из симметрии решетки следует, что в точках минимума дипольный тензор (5) диагонален.

Рассмотрим вначале спиновую конфигурацию в области I. Поскольку в этой области  $Q_{yy}(\mathbf{k}_0) = Q_{zz}(\mathbf{k}_0) \ll Q_{xx}(\mathbf{k}_0)$ , то ясно, что спиральная структура

$$\mathbf{m} = \mathbf{e}_y m_0 \cos \mathbf{k}_0 \mathbf{f} + \mathbf{e}_z m_0 \sin \mathbf{k}_0 \mathbf{f} \quad (6)$$

минимизирует как дипольную энергию, так и энергию анизотропии, поскольку  $\mathbf{m}$  лежит в легкой плоскости. Так как задача квантовая, то радиус спирали  $m_0$  может меняться в пределах от нуля до единицы и его можно вычислить, минимизируя функционал (3) с учетом (6)

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{2} Q_{yy}(\mathbf{k}_0) m_0^2 - \frac{D}{2} \sqrt{1 - m_0^2}, \quad Q_{yy}(\mathbf{k}_0) < 0, \quad (7)$$

откуда по лучаем

$$\begin{aligned} m_0 &= (1 - (D/2Q_{yy}(\mathbf{k}_0))^2)^{1/2}, \quad D < 2|Q_{yy}(\mathbf{k}_0)|, \\ m_0 &= 0, \quad D \geq 2|Q_{yy}(\mathbf{k}_0)|. \end{aligned} \quad (8)$$

Таким образом, при увеличении анизотропии намагниченность на каждом узле решетки уменьшается и при  $D=2|Q_{yy}(\mathbf{k}_0)|$  происходит переход в синглетную фазу. Этот результат аналогичен тому, который получен для квантовой системы с конкурирующими связями [15].

Перейдем теперь к области III. В этой области минимумы собственных значений  $Q^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  внутри зоны Бриллюэна отсутствуют и поэтому должно реализовываться состояние с макроскопическим ферромагнитным порядком. Так как дипольная энергия ферромагнетика зависит от формы поверхности образца и для бесконечной среды не имеет смысла, мы предположим, что образец взят в форме плоскопараллельной пластины и оси  $xz$  лежат в плоскости пластины. Тогда энергия однородного упорядочения запишется

$$\frac{1}{N} E_F = \frac{1}{2} m_\alpha m_\beta \sum_{r \neq 0} \frac{1}{r^5} (\delta_{\alpha\beta} r^2 - 3r_\alpha r_\beta) + \frac{D}{2} (\cos^2 \gamma - \sin^2 \gamma \sqrt{1 - m^2}). \quad (9)$$

Решеточная сумма в выражении (9) может быть вычислена как обычно [17]: внутри сферы Лоренца радиуса  $R_L \sim 100 a$  ряд суммируется численно, а вне сферы заменяется интегралом, который точно вычисляется. В результате получаем

$$\begin{aligned} \frac{E_F}{N} &= \frac{2\pi}{v_0} \left[ m_x^2 \left( N_x - \frac{1}{3} \right) + m_y^2 \left( N_y - \frac{1}{3} \right) + m_z^2 \left( N_z - \frac{1}{3} \right) \right] + \\ &+ \sum_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} m_\alpha m_\beta + \frac{D}{2} (\cos^2 \gamma - \sin^2 \gamma \sqrt{1 - m^2}). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $v_0$  — объем, приходящийся на одну частицу;  $N_x, y, z$  — размагничивающие факторы; тензор  $B_{\alpha\beta}$  — результат суммирования внутри сферы Лоренца. В нашем случае  $N_x = N_z = 0$ ,  $N_y = 1$  и тензор  $B_{\alpha\beta}$  диагонален, причем  $B_{yy} = B_{zz}$ . С помощью (10) легко убедиться, что в основном состоянии  $m_y = 0$  и магнитный момент лежит в  $xz$  плоскости. Так как намагниченность параллельна плоскостям пластины и магнитные заряды на поверхностях не возникают, то однородное ферромагнитное упорядочение будет самым выгодным и доменная структура появиться не может. С учетом сказанного представим (10) в виде

$$\begin{aligned} \frac{E_F}{N} &= \left( B_{zz} - \frac{2\pi}{3v_0} \right) m^2 - \frac{D}{2} \sqrt{1 - m^2} + \\ &+ \cos^2 \gamma \left( (B_{xx} - B_{zz}) m^2 + \frac{D}{2} + \frac{D}{2} \sqrt{1 - m^2} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Расчет показал, что, если  $a \geq 1$ , множитель при  $\cos^2 \gamma$  всегда положителен, поэтому намагниченность лежит в легкой плоскости и по величине равна

$$\begin{aligned} m &= (1 - (D/4B_{zz})^2)^{1/2}, \quad D < 4|B_{zz}|, \\ m &= 0, \quad D > 4|B_{zz}|. \end{aligned} \quad (12)$$

Напротив, если  $a < 1$ , то  $B_{xx} - B_{zz} < 0$ . Поэтому при малой константе анизотропии вектору намагниченности выгодно смотреть вдоль оси  $x$ . Но при повышении анизотропии система может предпочесть направление, лежащее в легкой плоскости. Кроме того, чтобы определить абсолютный минимум энергии системы, нужно сравнить энергию ферромагнитного состояния (11) с энергией спиральной структуры, лежащей в локальном минимуме (при  $a < 0.66$ ). Проведя подобный анализ, мы получили фазовую диаграмму (рис. 3) для  $a \leq 1.5$ .

Более сложная ситуация в области  $II$ . Будем считать для определенности, что  $\mathbf{k}_0 \parallel \mathbf{e}_y$ . Поскольку минимальная компонента  $Q_{xz}(\mathbf{k}_0)$  близка к  $Q_{xx}(\mathbf{k}_0)$ , но с ней не совпадает, выгодным упорядочением может оказаться эллиптическая спираль

$$\mathbf{m} = m_{0x}\mathbf{e}_x \cos k_0 f + m_{0z}\mathbf{e}_z \sin k_0 f.$$

После подстановки этого выражения в (3) получаем

$$\begin{aligned} \frac{E_s}{N} = & \frac{1}{4} Q_{xx}(\mathbf{k}_0) m_{0x}^2 + \frac{1}{4} Q_{zz}(\mathbf{k}_0) m_{0z}^2 + \frac{D}{2N} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{f}} \left\{ \frac{m_{0z}^2 \cos^2 \mathbf{k}_0 \mathbf{f}}{m_{0z}^2 - (m_{0z}^2 - m_{0x}^2) \cos^2 \mathbf{k}_0 \mathbf{f}} [1 + (1 - m_{0z}^2 + (m_{0z}^2 - m_{0x}^2) \cos^2 \mathbf{k}_0 \mathbf{f})^{1/2}] - \right. \\ & \left. - [1 - m_{0z}^2 + (m_{0z}^2 - m_{0x}^2) \cos^2 \mathbf{k}_0 \mathbf{f}]^{1/2} \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Если выражение под знаком суммы в (13) разложить по степеням  $\cos^2 \mathbf{k}_0 \mathbf{f}$  и использовать равенство, справедливое для несоразмерных  $k_0$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \cos^{2m} \mathbf{k}_0 \mathbf{f} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cos^{2m} x dx, \quad (14)$$

а затем опять собрать ряд под знаком интеграла, то можно убедиться, что в (13) сумму можно заменить интегралом, который выражается через эллиптические функции. Так как окончательное выражение (13) имеет слишком громоздкий вид, мы его здесь приводить не будем; отметим лишь, что, согласно (14), вклад в полную энергию (13) члена, обусловленного анизотропией при несоразмерном  $\mathbf{k}_0$ , не зависит от  $\mathbf{k}_0$ . Численный расчет показал, что уже при малой анизотропии эллиптическая спираль схлопыва-

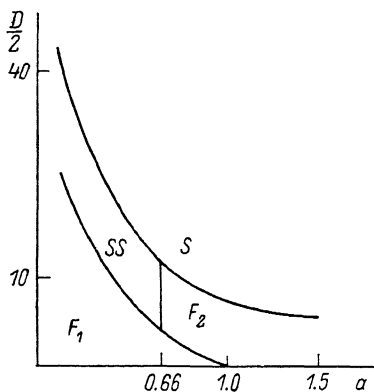


Рис. 3.

$F_1$  — ферромагнитная фаза  $\mathbf{m} \parallel \mathbf{e}_x$ ,  $F_2$  — ферромагнитная фаза  $\mathbf{m} \parallel \mathbf{e}_z$ ,  $SS$  — спиральная фаза,  $S$  — синглетная фаза.

ется в поперечную спиновую волну с поляризацией вдоль оси  $z$ . Изучение модели ANNNI [18] показало, что, помимо несоразмерных структур, следует рассматривать и соразмерные структуры с волновым вектором  $\mathbf{k}_s$ , близким к  $\mathbf{k}_0$ . Хотя такие состояния проигрывают в дипольной энергии, но могут выиграть за счет энергии анизотропии (или энтропийного фактора в модели ANNNI). Так что в целом может оказаться, что соразмерные состояния обладают меньшей энергией, чем несоразмерные.

Численный расчет соразмерных структур выполнялся тем же способом, что и в работах [18, 19]. При этом волновой вектор соразмерной структуры  $\mathbf{k}_s$  выбирался параллельно оси  $y$  и  $k_s = 4\pi/L$ , где  $L$  пробегало значения в интервале  $1 \leq L \leq 17$ . Все структуры с различными  $L$ , а также несоразмерная сравнивались между собой по энергии. Расчет показал, что несоразмерная поперечная спиновая волна лежит всегда выше по энергии (за исключением очень узкой окрестности при переходе из синглетной фазы), чем соразмерная, и, кроме того, в соразмерных структурах намагниченность всегда направлена вдоль оси  $z$ .

Фазовая диаграмма представлена на рис. 4 и очень напоминает в основных чертах фазовую диаграмму модели ANNNI [18]. Мы обозначаем фазы

числом  $\xi = q/4\pi$ . Здесь  $q$  — волновой вектор Фурье-разложения структуры, для которого модуль амплитуды максимален

$$A(q) = \sum_{l=0}^{L-1} m^z(l) \exp(iql).$$

В заключение заметим, что если бы мы ограничились рассмотрением только восьми подрешеточных структур, как это сделали Латтинджер и

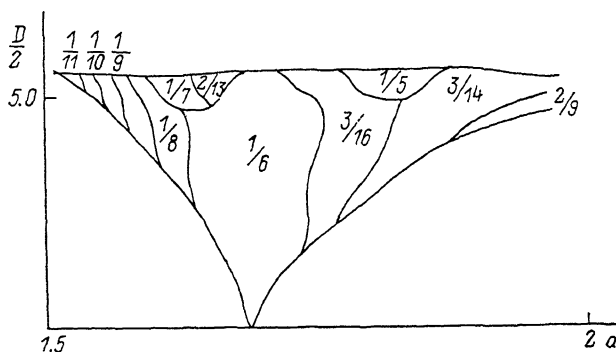


Рис. 4. Фазовая диаграмма соразмерных структур.

Тисца [1] и Ниемеер [2], то для энергии (3) смогли бы повторить рассуждения Ниемеера, которые привели бы нас к выводу о том, что в основном состоянии (3) реализуется либо ферромагнитное упорядочение, либо одна из семи ниемееровских антиферромагнитных структур. Численный расчет антиферромагнитных структур показал, что ни одна из них не является основным состоянием гамма-топона (1).

Автор выражает благодарность А. Ф. Садреву за постановку задачи и помощь в работе, В. В. Валькову, Р. С. Гехту и В. И. Зиненко за полезные замечания.

#### Список литературы

- [1] Lattinger J. M., Tisza L. // Phys. Rev. 1946. V. 70. N 11. P. 954—964.
- [2] Niemeier T. // Physica. 1972. V. 57. N 2. P. 281—293.
- [3] Niemeijer T., Meijer P. H. E. // Phys. Rev. B. 1974. V. 10. N 7. P. 2962—2967.
- [4] Белобров П. И., Гехт Р. С., Игнатченко В. А. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 3. С. 1097—1108.
- [5] Розенбаум В. М., Огенько В. М. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 5. С. 1448—1451.
- [6] Гойчук И. А., Кухтин В. В. // УФЖ. 1988. Т. 33. № 6. С. 948—950.
- [7] Zimmerman G. O., Ibrahim A. K., Wu F. Y. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 4. P. 2059—2065.
- [8] Tokunaga M., Jagi T. // J. Phys. Soc. Jap. 1978. V. 44. N 6. P. 1894—1902.
- [9] Гехт Р. С. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 6. С. 2095—2103.
- [10] Jafarey S., Yang Li Wang, Friedberg S. A., Warner I. D. // Phys. Rev. B. 1979. V. 20. N 9. P. 3809—3819.
- [11] Зубов Э. Е., Криворучко В. Н. // ФНТ. 1987. Т. 13. № 11. С. 1178—1185.
- [12] Локтев В. М., Островский В. С. // УФЖ. 1978. Т. 23. № 10. С. 1708—1717.
- [13] Локтев В. М., Островский В. С. // ФТТ. Т. 1985. Т. 27. № 10. С. 3026—3029.
- [14] Вальков В. В., Валькова Т. А. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 9. С. 951—959.
- [15] Булгаков Е. Н., Садрев А. Ф. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 523—526.
- [16] Малеев С. В. // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. № 6. С. 2374—2389.
- [17] Colpa J. H. P. // Physica. 1971. V. 56. N 2. P. 185—204.
- [18] Bak P., Vohm J. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. N 11. P. 5297—5307.
- [19] Bulgakov E. N. // Phys. St. Sol. (b). 1988. V. 148. N 2. P. K139—K141.