

## Магнитные свойства метабората меди: двухпараметрическая феноменологическая модель

© М.А. Попов, Г.А. Петраковский\*, В.И. Зиненко\*

Красноярский государственный университет,  
660041 Красноярск, Россия

\* Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

E-mail: rsa@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 21 июля 2003 г.)

Для магнитной подсистемы монокристалла метабората меди проведен симметричный анализ и предложена феноменологическая модель, основанная на двух двухкомпонентных параметрах порядка, отвечающих векторам ферромагнетизма и антиферромагнетизма в тетрагональной плоскости этого кристалла. С учетом его пространственной группы симметрии  $I42d$  в термодинамический потенциал включен инвариант Лифшица, построенный на антисимметричном произведении параметров порядка и их пространственных производных. Анализ такой модели показал возможность несовпадения температуры появления упорядочения в магнитной подсистеме с температурой образования в ней спиральной структуры. Это обстоятельство позволило выполнить численный расчет как температурных зависимостей волнового вектора спирали, намагниченности и интенсивностей магнитных сателлитов первого и третьего порядков в несоизмеримой фазе при упругом рассеянии нейтронов, так и полевой зависимости намагниченности. Получено удовлетворительное описание экспериментальных данных, в том числе и фазовой диаграммы магнитное поле–температура. На основании этого расчета оценены параметры феноменологического термодинамического потенциала магнитной подсистемы метабората меди.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобразования РФ (грант Е02-3.4-227) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 03-02-16701).

Оксидные соединения меди проявляют большое разнообразие типов магнитного упорядочения и магнитных свойств. Помимо большого числа структур типа коллинеарных ферромагнетиков в таких соединениях обнаружены слабые ферромагнетики, спиновые стекла, синглетные магнетики, ферримагнетики и несоизмеримые магнитные структуры. Интерес к магнитным свойствам упомянутых веществ особенно возрос в связи с открытием высокотемпературных сверхпроводников, магнитные корреляции в которых, видимо, играют важную роль при формировании сверхпроводящего состояния.

Метаборат меди  $\text{CuB}_2\text{O}_4$ , как показали недавние исследования [1–5], проявляет особенно интересные магнитные свойства. Согласно данным нейтронографических и магнитных измерений, при температуре  $T_n = 20$  К магнитная подсистема этого кристалла переходит из парамагнитного состояния в состояние легкоплоскостного слабого ферромагнетика. В то же время температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости в тетрагональной плоскости кристалла имеют особенности не только при  $T_n$ , но и при  $T_i = 10$  К. Магнитные пики на нейтронограммах в температурном интервале между  $T_n$  и  $T_i$  совпадают с решеточными, что отражает совпадение магнитной элементарной ячейки с кристаллохимической [3]. Поэтому фазовому переходу при температуре  $T_n$  соответствует волновой вектор в центре зоны Бриллюэна  $\mathbf{q} = 0$ .

Проведенное в этой же работе специальное нейтронографическое исследование высокого разрешения

показало, что вплоть до температуры 1.5 К кристалл не подвержен никаким структурным фазовым переходам. Но при понижении температуры ниже  $T_i$  на нейтронограммах появляются магнитные сателлиты в симметричных позициях по отношению к точкам обратной решетки соизмеримой фазы. Таким свойством обладает магнитная структура, период которой несоизмерим с решеточной структурой вдоль тетрагональной оси кристалла и которая описывается волной спиновой плотности с фазовой модуляцией [3]. Присутствие на нейтронограммах вблизи  $T_i$  со стороны несоизмеримой фазы магнитных сателлитов высших гармоник отвечает образованию магнитной подсистемой кристалла солитонной решетки.

Исследования упругого рассеяния нейтронов при приложении сильных магнитных полей показали, что несоизмеримая магнитная структура метабората меди испытывает фазовый переход первого рода в соизмеримое состояние при достижении магнитным полем, зависящим от температуры, критического значения [4,5].

Нам известен единственный случай, описанный в [6] для кристалла  $\text{NiBr}_2$ , когда переход в несоизмеримую фазу из соизмеримой происходит также с понижением температуры. Поскольку симметрия  $\text{NiBr}_2$  не допускает существования инварианта Лифшица, механизм возникновения несоизмеримой фазы в нем связан с предполагаемой температурной зависимостью конкурирующих обменных взаимодействий [6]. Как показано далее, симметрия метабората меди допускает релятивистски малый

инвариант Лифшица, хотя и не в стандартной форме. В результате в рамках феноменологического подхода удастся описать и столь необычную последовательность фазовых переходов, и ряд магнитных свойств метабората меди.

## 1. Неполный термодинамический потенциал метабората меди

Рентгенографические и нейтронографические исследования [3] при комнатной температуре показали, что кристалл метабората меди имеет пространственную группу  $I\bar{4}2d$  с параметрами решетки  $a = 11.528 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.607 \text{ \AA}$ . Элементарная ячейка содержит двенадцать формульных единиц. Ионы меди  $\text{Cu}^{2+}$  занимают две неэквивалентные позиции:  $\text{Cu}(b)$  — позиция  $4b$  с точечной симметрией  $S_4(0,0,1/2)$ ;  $\text{Cu}(d)$  — позиция  $8d$  с точечной симметрией  $C_2(0.0815, 1/4, 1/8)$ . Ион  $\text{Cu}(b)$  находится в центре квадрата, образованного четырьмя ионами кислорода. Ион  $\text{Cu}(d)$  окружен шестью ионами кислорода, локализованными в вершинах искаженного октаэдра.

Точечная группа кристалла  $\bar{4}2m$  содержит восемь элементов симметрии [7]

$$I, \bar{4}_3^1, 4_3^2, \bar{4}_3^3, 4_1^2, 4_2^2, m_4, m_5.$$

Эта группа имеет пять неприводимых представлений. Четыре из них ( $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$  и  $\Gamma_4$ ) являются одномерными, а одно ( $\Gamma_5$ ) — двумерным. Разложения магнитных представлений для двух неэквивалентных подрешеток меди в метаборате меди имеют вид

$$\Gamma_{4b} = \Gamma_1 + \Gamma_2 + 2\Gamma_5, \quad \Gamma_{8d} = \Gamma_1 + 2\Gamma_2 + 2\Gamma_3 + \Gamma_4 + 3\Gamma_5.$$

Магнитные моды, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы  $\bar{4}2m$  в подрешетке ионов меди  $\text{Cu}(b)$ , таковы:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : & S_{b1z} - S_{b2z}, \\ \Gamma_2 : & S_{b1z} + S_{b2z}, \\ \Gamma_5 : & (S_{b1x} + S_{b2x}, -S_{b1y} - S_{b2y}), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\Gamma_5 : (S_{b1y} - S_{b2y}, S_{b1x} - S_{b2x}). \quad (2)$$

Моды, отвечающие соответственно представлениям  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  позиции  $4b$ , описывают антиферромагнитное или ферромагнитное упорядочение вдоль тетрагональной оси  $c$ , а моды, связанные с представлением  $\Gamma_5$ , — неколлинеарную магнитную структуру в тетрагональной плоскости. Для подрешетки ионов меди  $\text{Cu}(d)$  магнитные моды

преобразуются как

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : & S_{d1x} + S_{d2y} - S_{d3x} - S_{d4y}, \\ \Gamma_2 : & S_{d1y} - S_{d2x} - S_{d3y} + S_{d4x}, \\ \Gamma_2 : & S_{d1z} + S_{d2z} + S_{d3z} + S_{d4z}, \\ \Gamma_3 : & S_{d1y} + S_{d2x} - S_{d3y} - S_{d4x}, \\ \Gamma_3 : & S_{d1z} - S_{d2z} + S_{d3z} - S_{d4z}, \\ \Gamma_4 : & S_{d1x} - S_{d2y} - S_{d3x} + S_{d4y}, \\ \Gamma_5 : & (S_{d1x} + S_{d2x} + S_{d3x} + S_{d4x}, -S_{d1y} - S_{d2y} - S_{d3y} - S_{d4y}), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\Gamma_5 : (S_{d1x} - S_{d2x} + S_{d3x} - S_{d4x}, S_{d1y} - S_{d2y} + S_{d3y} - S_{d4y}), \quad (4)$$

$$\Gamma_5 : (S_{d2z} - S_{d4z}, S_{d1z} - S_{d3z}).$$

Нумерация ионов для этой подрешетки определена последовательным выполнением операции симметрии  $\bar{4}_3^1$ .

Для описания такой неоднородной фазы, как несоизмеримая, необходимы и неоднородные магнитные моды. Линейными по пространственной производной вдоль оси  $c$  являются: для позиции  $4b$

$$\begin{aligned} \Gamma_3 : & (S_{b1z} - S_{b2z})', \\ \Gamma_4 : & (S_{b1z} + S_{b2z})', \\ \Gamma_5 : & (-S_{b1y} - S_{b2y}, S_{b1x} + S_{b2x})', \\ \Gamma_5 : & (S_{b1x} - S_{b2x}, S_{b1y} - S_{b2y})', \end{aligned}$$

для позиции  $8d$

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : & (S_{d1y} + S_{d2x} - S_{d3y} - S_{d4x})', \\ \Gamma_1 : & (S_{d1z} - S_{d2z} + S_{d3z} - S_{d4z})', \\ \Gamma_2 : & (S_{d1x} - S_{d2x} - S_{d3y} + S_{d4y})', \\ \Gamma_3 : & (S_{d1x} + S_{d2y} - S_{d3x} - S_{d4y})', \\ \Gamma_4 : & (S_{d1y} - S_{d2x} - S_{d3y} + S_{d4x})', \\ \Gamma_4 : & (S_{d1z} + S_{d2z} + S_{d3z} + S_{d4z})', \\ \Gamma_5 : & (-S_{d1y} - S_{d2y} - S_{d3y} - S_{d4y}, S_{d1x} + S_{d2x} + S_{d3x} + S_{d4x})', \\ \Gamma_5 : & (S_{d1y} - S_{d2y} + S_{d3y} - S_{d4y}, S_{d1x} - S_{d2x} + S_{d3x} - S_{d4x})', \\ \Gamma_5 : & (S_{d1z} - S_{d3z}, S_{d2z} - S_{d4z})', \end{aligned}$$

где  $f' \equiv df/dz$ .

Анализ картины дифракции нейтронов [3], включающей 25 чисто магнитных пиков, показал, что в соразмерной фазе ( $T_i < T < T_n$ ) спины как подрешетки  $\text{Cu}(b)$ , так и подрешетки  $\text{Cu}(d)$  метабората меди образуют неколлинеарную магнитную структуру. В подрешетке  $\text{Cu}(b)$  доминирует вектор антиферромагнетизма в тетрагональной плоскости, а относительно малыми являются ортогональные ему вектор ферромагнетизма в тетрагональной плоскости и вектор антиферромагнетизма вдоль оси  $c$ . В подрешетке  $\text{Cu}(d)$ , видимо, доминирует вектор антиферромагнетизма вдоль оси  $c$ ,

а относительно малым является ортогональный ему вектор антиферромагнетизма в тетрагональной плоскости. Вектор ферромагнетизма в этой подрешетке в пределах экспериментальной погрешности не обнаружен. Причем магнитный момент иона меди в позиции  $8d$  в соизмеримой фазе намного меньше магнитного момента иона меди в позиции  $4b$ . Всем перечисленным векторам соответствуют магнитные моды, полученные в помощью симметричного анализа.

В несоизмеримой фазе ( $T < T_i$ ) магнитная структура упорядочена в тетрагональной плоскости в виде спирали вдоль оси  $c$ . Для теоретического анализа магнитных свойств метабората меди методом феноменологического термодинамического потенциала существенно, что среди элементов его симметрии нет центра инверсии  $\bar{I}$ . Он входит только в совокупности с поворотом вокруг оси  $c$  на  $90^\circ$ :  $\bar{4}_3^1$  и  $\bar{4}_3^3$ . Поэтому в термодинамическом потенциале допустимо присутствие инварианта типа инварианта Лифшица, билинейного по двухкомпонентным параметрам порядка и их пространственным производным, ответственного за возникновение несоизмеримой фазы.

Учет всех восьми однокомпонентных и пяти двухкомпонентных однородных магнитных мод при феноменологическом подходе приводит к чрезвычайно громоздкому термодинамическому потенциалу системы. Поэтому необходимо выделить моды, позволяющие описать основные экспериментально найденные свойства метабората меди. Поскольку доминирует упорядочение в тетрагональной плоскости, в первую очередь рассмотрим соответствующие двухкомпонентные моды. При этом следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Если выразить произвольную  $i$ -ю однородную моду в представлении  $\Gamma_5$  в виде  $\eta_i = (\eta_{i1}, \eta_{i2})$ , то в этом же представлении соответствующая неоднородная мода равна  $\eta'_i = (\eta_{i2}, \eta_{i1})'$ . Инвариант  $\eta_i \cdot \eta'_i = \eta_{i1}\eta'_{i2} + \eta'_{i1}\eta_{i2}$  оказывается полной производной по  $z$ , и построит инвариант Лифшица для единственной моды не удастся. В терминах теории представлений это связано с тем, что в данном случае антисимметричный квадрат  $\{\Gamma_5^2\}$  преобразуется по представлению  $\Gamma_2$ , — параллельная тетрагональной оси компонента вектора — по представлению  $\Gamma_3$ , а перпендикулярная компонента — по представлению  $\Gamma_5$  [8].

Представим неполный термодинамический потенциал в форме функционала двух двухкомпонентных параметров порядка —  $\eta_1 = (\eta_{11}, \eta_{12})$  и  $\eta_2 = (\eta_{21}, \eta_{22})$ :

$$\begin{aligned} \Phi\{\eta\} = \int \left\{ \frac{A_{11}}{2} \eta_1 \cdot \eta_1 + \frac{A_{22}}{2} \eta_2 \cdot \eta_2 + A_{12} \eta_1 \cdot \eta_2 \right. \\ \left. + \frac{B_{22}}{4} (\eta_2 \cdot \eta_2)^2 + C_{12} (\eta_1 \cdot \eta'_2 - \eta'_1 \cdot \eta_2) + \frac{D_{11}}{2} \nabla \eta_1 \cdot \nabla \eta_1 \right. \\ \left. + \frac{D_{22}}{2} \nabla \eta_2 \cdot \nabla \eta_2 + D_{12} \nabla \eta_1 \cdot \nabla \eta_2 - \eta_1 \cdot H_1 \right\} dV, \quad (5) \end{aligned}$$

где интегрирование производится по объему всего кристалла,  $A_{11} = a_{11}(T - T_1)$ ,  $A_{22} = a_{22}(T - T_2)$ ,  $a_{11} > 0$ ,  $a_{22} > 0$ ,

$B_{22} > 0$ ,  $D_{11} > 0$ ,  $D_{11}D_{22} > D_{12}^2$ ,  $\nabla \eta_\alpha = (\nabla \eta_{\alpha 2}, \nabla \eta_{\alpha 1})$ ,  $H_1$  — сопряженное параметру  $\eta_1$  поле; зависимость параметров порядка от координат используется в неявной форме.

Параметры  $\eta_1$  и  $\eta_2$  различаются линейной комбинацией преобразующихся по представлению  $\Gamma_5$  магнитных мод. То обстоятельство, что ниже  $T_n$  магнитная подсистема метабората меди представляет собой легкоплоскостной слабый ферромагнетик, сворачивающийся ниже  $T_i$  в спираль, позволяет составить  $\eta_1$  из ферромагнитных мод (1) и (3), а  $\eta_2$  — из антиферромагнитных мод (2) и (4). Соответственно  $H_1 = (H_{11}, H_{12}) = (H_x, -H_y)$ . Но для слабого ферромагнетика характерны  $T_1 \lesssim 0$  и  $T_2 \approx T_n$ . Поэтому следует отметить, что в отличие от [3] в термодинамическом потенциале не выделен в явном виде параметр порядка, ответственный за переход при  $T_i$ .

Инвариант с коэффициентом  $C_{12}$  является обобщением известной формы инварианта Лифшица [8] на случай двух двухкомпонентных параметров порядка: вместо антисимметричного произведения компонент одного параметра порядка и их пространственных производных он составлен из антисимметричного произведения разных параметров порядка и их пространственных производных.

Среди инвариантов четвертого порядка в (5) оставлен только инвариант, связанный с температурным развитием параметра антиферромагнетизма. Квадратичные по пространственным производным параметров порядка инварианты взяты в простейшей изотропной форме. Присутствие в (5) иных параметров порядка, как показано далее, не является решающим для описания эволюции состояний в метаборате меди при понижении температуры от парамагнитной фазы выше 20 К к несоизмеримой фазе ниже 10 К.

## 2. Равновесное состояние модели

В отсутствие инварианта Лифшица равновесное состояние описываемой феноменологическим потенциалом (5) модели является однородным вследствие положительной определенности остальных неоднородных слагаемых потенциала. Инвариант Лифшица нарушает устойчивость такого состояния вдоль тетрагональной оси. Для нахождения нового равновесного состояния воспользуемся следующим обстоятельством. Магнитные пики высших гармоник на нейтронографических спектрах в отсутствие внешнего постоянного магнитного поля проявлялись только в относительно узкой окрестности перехода в несоизмеримую фазу [2,3].

Поэтому состояние модели в нулевом внешнем поле представим в виде

$$\begin{aligned} \eta_1 &= (p_{11} \cos(qz + \varphi_{11}), p_{12} \cos(qz + \varphi_{12})), \\ \eta_2 &= (p_{21} \cos(qz + \varphi_{21}), p_{22} \cos(qz + \varphi_{22})), \quad (6) \end{aligned}$$

где амплитуды  $p_{\alpha\beta}$  и фазы  $\varphi_{\alpha\beta}$  пространственной волны не зависят от  $z$ . Выбрав (6)  $\varphi_{11} = 0$ , зададим без

потери общности точку отсчета по тетрагональной оси. Получаемая из (5) вариацией по перечисленным в (6) параметрам система необходимых условий экстремума довольно громоздка. Приведем только ее решение

$$\begin{aligned} p_{11} &= -(A_{12q}p_{21} - C_{12q}p_{22})/A_{11q}, \\ p_{12} &= -(A_{12q}p_{21} + C_{12q}p_{22})/A_{11q}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$p_{21} = p_{22} = \text{Re} \left\{ \left[ (A_{12q}^2 + C_{12q}^2 - A_{11q}A_{22q})/A_{11q}B_{22} \right]^{1/2} \right\}, \quad (8)$$

$$q = \text{Re} \left\{ \left[ \frac{\left( \frac{4A_{11}D_{11}C_{12}^2 - (A_{11}D_{12} - A_{12}D_{11})^2}{D_{11}D_{22} - D_{12}^2} \right)^{1/2} - A_{11}}{D_{11}} \right]^{1/2} \right\}, \quad (9)$$

$$\varphi_{11} = \varphi_{21} = 0, \quad \varphi_{12} = \varphi_{22} = \pi/2, \quad (10)$$

где  $A_{\alpha\beta q} = A_{\alpha\beta} + D_{\alpha\beta}q^2$ ,  $C_{12q} = 2C_{12q}$ .

Особенностью этих соотношений (в отличие от рассмотренных в [9] для однопараметрического потенциала) является возможность несовпадения температуры появления упорядочения в магнитной системе ( $p_{21} \neq 0$ ) с температурой образования в ней спиральной структуры ( $q \neq 0$ ). Так, спиральная магнитная структура существует в температурном интервале ( $T_{q1}, T_{q2}$ )

$$T_{q1} = T_{q0} - \Delta T_q, \quad T_{q2} = T_{q0} + \Delta T_q, \quad (11)$$

где

$$T_{q0} = T_1 + (A_{12}D_{12} + 2C_{12}^2)/(a_{11}D_{22}),$$

$$\Delta T_q = [(A_{12}D_{12} + 2C_{12}^2)^2 - A_{12}^2D_{11}D_{22}]^{1/2}/(a_{11}D_{22}).$$

Упорядочение же происходит при температуре

$$T_p = T_{p0} + \Delta T_p,$$

$$T_{p0} = [T_1 + T_2 - (D_{11}/a_{11} + D_{22}/a_{22})q^2]/2,$$

$$\begin{aligned} \Delta T_p &= \left\{ [T_1 - T_2 - (D_{11}/a_{11} - D_{22}/a_{22})q^2]^2 \right. \\ &\quad \left. + 4(A_{12q}^2 + C_{12q}^2)/(a_{11}a_{22}) \right\}^{1/2} / 2. \end{aligned} \quad (12)$$

Отметим, что согласно соотношениям (7), (8) и (10), в несоизмеримой фазе параметр порядка  $\eta_1$  образует вдоль тетрагональной оси эллиптическую спираль, а параметр порядка  $\eta_2$  — круговую спираль. Эллиптичности спирали отвечает выход магнитных моментов из тетрагональной плоскости с образованием волны из параллельных тетрагональной оси компонент этих моментов.

Состояние кристалла во внешнем магнитном поле, приложенном в тетрагональной плоскости, опишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= (p_{11q} \cos(qz + \varphi_{11q}) + p_{11k} \cos(kz + \varphi_{11k}), \\ &\quad p_{12q} \cos(qz + \varphi_{12q}) + p_{12k} \cos(kz + \varphi_{12k})), \\ \eta_2 &= (p_{21q} \cos(qz + \varphi_{21q}) + p_{21k} \cos(kz + \varphi_{21k}), \\ &\quad p_{22q} \cos(qz + \varphi_{22q}) + p_{22k} \cos(kz + \varphi_{22k})), \\ H_1 &= (H \cos(kz), -H \sin(kz)). \end{aligned} \quad (13)$$

Переход в  $\Phi\{\eta\}$  к случаю однородного внешнего поля ( $k = +0$ ) необходимо выполнить после интегрирования по объему кристалла.

Вариационные уравнения допускают два решения, общими соотношениями для которых являются

$$\begin{aligned} p_{11q} &= -(A_{12q}p_{21q} - C_{12q}p_{22q})/A_{11q}, \\ p_{12q} &= -(A_{12q}p_{21q} + C_{12q}p_{22q})/A_{11q}, \\ p_{11k} &= (H - A_{12}p_{21k})/A_{11}, \quad p_{12k} = (H - A_{12}p_{22k})/A_{11}, \\ \varphi_{11q} &= \varphi_{21q} = \varphi_{11k} = \varphi_{21k} = 0, \\ \varphi_{12q} &= \varphi_{22q} = \varphi_{12k} = \varphi_{22k} = \pi/2. \end{aligned} \quad (14)$$

Одно решение отвечает однородному состоянию магнитной системы:

$$p_{21q} = p_{22q} = 0, \quad p_{21k} = p_{22k} = p_{2k}, \quad (15)$$

где  $p_{2k}$  удовлетворяет уравнению

$$A_{11}B_{22}p_{2k}^3 + (A_{11}A_{22} - A_{12}^2)p_{2k} + A_{12}H = 0.$$

Другое решение позволяет описать неоднородное состояние:

$$p_{21q} = p_{22q} = p_{2q}, \quad p_{21k} = p_{22k} = p_{2k}, \quad (16)$$

где  $p_{2q}$  и  $p_{2k}$  определяются из системы уравнений

$$A_{11q}B_{22}p_{2q}^2 + A_{11q}(A_{22q} + 2B_{22}p_{2k}^2) = A_{12q}^2 + C_{12q}^2,$$

$$\begin{aligned} 3A_{11}A_{11q}B_{22}p_{2k}^3 + [2A_{11}A_{11q}A_{22q} + A_{11q}A_{12}^2 - A_{11}A_{11q}A_{22} \\ - 2A_{11}(A_{12q}^2 + C_{12q}^2)]p_{2k} = A_{11q}A_{12}H. \end{aligned}$$

Волновой вектор  $\mathbf{q}$  равен нулю или определяется выражением (9) в зависимости от устойчивости соответствующих решений (15) или (16). Устойчивость того или иного решения зависит от соотношения между параметрами термодинамического потенциала (5) и значением магнитного поля.

### 3. Обсуждение результатов

Отмеченное выше (см. (11) и (12)) несовпадение температуры появления дальнего порядка в магнитной системе с температурой образования в ней спиральной структуры отвечает описанным в начале статьи свойствам метабората меди. Действительно, при определенных соотношениях между параметрами термодинамического потенциала (5) можно получить  $T_p > T_{q2}$  с устойчивым однородным по кристаллу состоянием ( $\mathbf{q} = 0$ ) при промежуточных температурах. Тогда для метабората меди температуру  $T_n$  можно связать с  $T_p$  (12), а  $T_i$  — с  $T_{q2}$  (11). Сравним полученные соотношения для температурной и полевой зависимостей волнового вектора и параметров порядка с экспериментальными данными.

На рис. 1–5 приведены результаты численного расчета по формулам (6)–(16) со следующими значениями коэффициентов неполного термодинамического потенциала (5):

$$a_{11} = a_{22} = 3.3 \cdot 10^2 \frac{\text{G}^2 \cdot \text{g}^2}{\text{erg} \cdot \text{cm}^3 \cdot \text{K}},$$

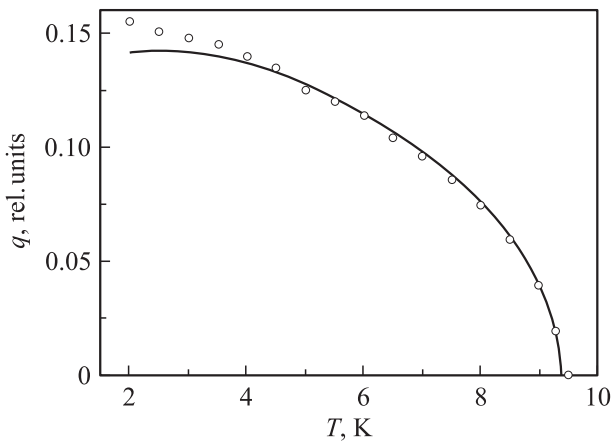
$$T_1 = 0.19 \text{ K}, \quad T_2 = 20.4 \text{ K},$$

$$B_{22} = 5.2 \cdot 10^1 \frac{\text{G}^4 \cdot \text{g}^4}{\text{erg}^3 \cdot \text{cm}^3}, \quad A_{12} = -1.8 \cdot 10^2 \frac{\text{G}^2 \cdot \text{g}^2}{\text{erg} \cdot \text{cm}^3},$$

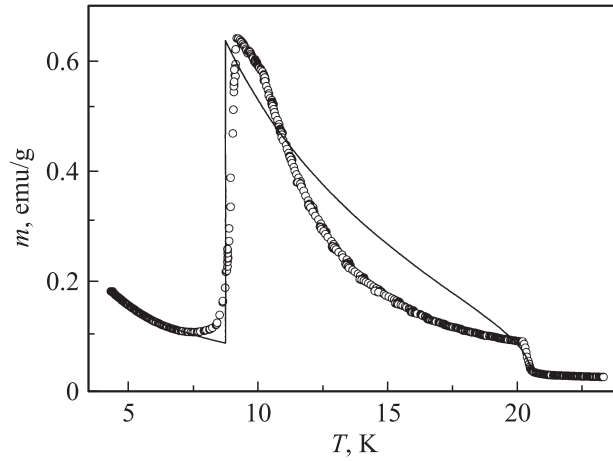
$$C_{12} \left( \frac{2\pi}{c} \right) = -5.3 \cdot 10^3 \frac{\text{G}^2 \cdot \text{g}^2}{\text{erg} \cdot \text{cm}^3},$$

$$D_{11} \left( \frac{2\pi}{c} \right)^2 = 3.7 \cdot 10^4 \frac{\text{G}^2 \cdot \text{g}^2}{\text{erg} \cdot \text{cm}^3}, \quad D_{22} = D_{11}, \quad D_{12} = 0.$$

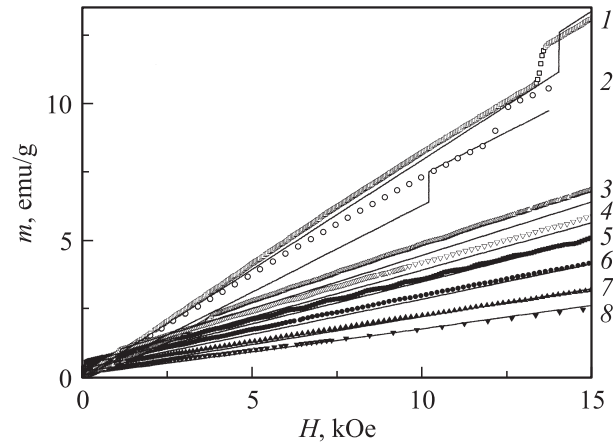
Как видно из этих рисунков, достичь высокого согласия между расчетами и экспериментальными данными не удастся, но вычисленные температурные и полевые зависимости исследованных параметров магнитной подсистемы метабората меди вполне удовлетворительно согласуются с экспериментом.



**Рис. 1.** Температурная зависимость волнового вектора магнитной структуры метабората меди при нулевом внешнем поле. Точки — эксперимент, сплошная линия — расчет.

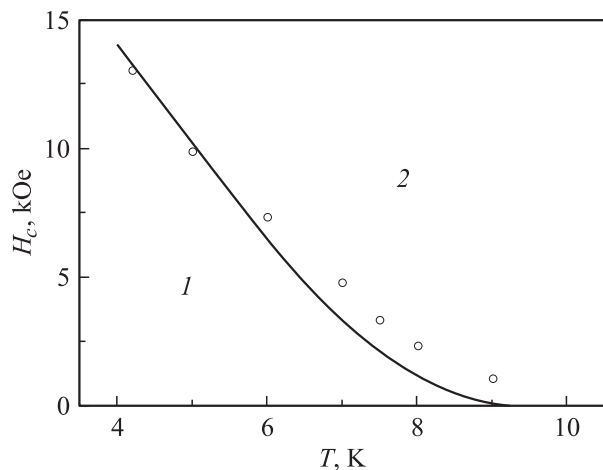


**Рис. 2.** Температурная зависимость намагниченности монокристалла метабората меди при внешнем поле 0.25 кОе в тетрагональной плоскости.

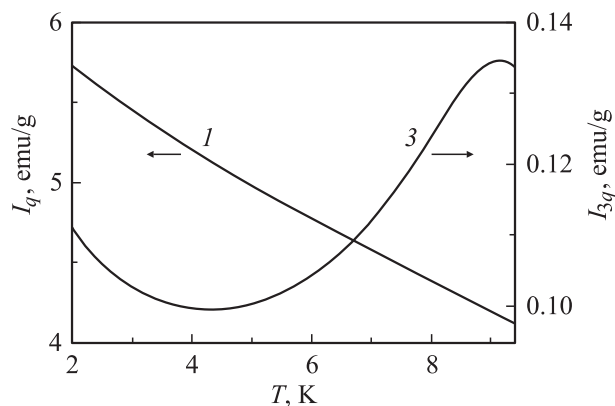


**Рис. 3.** Полевая зависимость намагниченности монокристалла метабората меди при внешнем поле в тетрагональной плоскости для различных температур.  $T$ , К: 1 — 4.2, 2 — 5, 3 — 8, 4 — 9, 5 — 10, 6 — 12, 7 — 15, 8 — 18.

В несоизмеримой фазе из-за образования спирали спонтанный вклад в намагниченность всего кристалла исчезает и остается только намагниченность, наводимая внешним полем (рис. 2) [1,2]. С ростом внешнего поля происходит переход первого рода к фазе легкоплоскостного слабого ферромагнетика: составляющая вектора антиферромагнетизма с  $\mathbf{q} \neq 0$  при поле  $H_c(T)$  скачком обращается в нуль, в то время как составляющая с нулевым волновым вектором скачком возрастает [4,5]. Такой характер изменения состояния магнитной подсистемы кристалла проявляется и для намагниченности (рис. 3), связанной с вектором антиферромагнетизма через инвариант Дзялошинского (с коэффициентом  $A_{12}$ ). Присутствию этого инварианта отвечают ненулевые значения намагниченности в нулевом поле при линейной аппроксимации ее зависимости в полях, больших  $H_c(T)$  [1,2]. На рис. 4 приведены экспериментальная [2] и рассчитанная температурно-полевые фазовые диаграммы в температурном интервале 4–10 К.



**Рис. 4.** Температурно-полевая фазовая диаграмма метабората меди. 1 — несоизмеримая фаза, 2 — фаза легкоплоскостного слабого ферромагнетика.



**Рис. 5.** Рассчитанные температурные зависимости интенсивностей основной  $I_q$  (1) и третьей  $I_{3q}$  (3) гармоник вектора антиферромагнетизма метабората меди при нулевом внешнем поле.

Присутствие высших гармоник в спирали несоизмеримой фазы характерно для той температурной области, где инвариант Лифшица сравним с инвариантом анизотропии [9]. Для магнитных систем с однопараметрическим термодинамическим потенциалом волновой вектор  $\mathbf{q}$  отличен от нуля уже при температуре упорядочения системы ( $T_i = T_p$ ), и инвариант анизотропии, пропорциональный  $|\eta|^4$  для кристалла с тетрагональной осью симметрии, становится сравнимым с пропорциональным  $q|\eta|^2$  инвариантом Лифшица существенно ниже  $T_i$ , вблизи перехода в низкотемпературную соизмеримую фазу. Однако в метаборате меди  $q$  резко растет от нулевого значения при температуре  $T_i < T_p$  (рис. 1) [3], и сравнимость инвариантов возможна только в узкой окрестности  $T_i$  либо в области медленного изменения  $q$ . Согласно экспериментальным данным [3], наблюдалась только первая из перечисленных возможностей.

На рис. 5 приведены рассчитанные температурные зависимости интенсивностей основной и третьей гармоник вектора антиферромагнетизма при нулевом внешнем поле. Для их получения к термодинамическому потенциалу (5) добавлен инвариант анизотропии в форме

$$\frac{E_{22}}{2} \int \eta_{21}^2 \eta_{22}^2 dV.$$

Наблюдавшемуся в [3] при  $T = 9.35$  К приблизительно тридцатикратному превышению интенсивности основной гармоники над интенсивностью третьей отвечает  $E_{22} = 7 (\text{G} \cdot \text{g})^4 / (\text{erg} \cdot \text{cm})^3$ . Как видно из рисунка, с понижением температуры это превышение увеличивается, что ухудшает возможность наблюдения высшей гармоники.

Резкий спад интенсивности магнитных пиков  $(3, 3, \pm q)$  при  $T = 1.8$  К и последующее постоянство  $q$  с понижением температуры [4,5] можно связать с lock-in-переходом в соразмерную фазу. Такой переход сопровождается скачкообразным появлением щели в спектре поперечных по отношению к параметру порядка возбуждений и соответствующим спадом корреляционных функций.

Авторы признательны С.Н. Мартынову за полезные обсуждения.

## Список литературы

- [1] G. Petrakovskii, D. Velikanov, A. Vorotinov, K. Sablina, A. Amato, B. Roessli, J. Schefer, U. Staub. *J. Magn. Mater.* **205**, 1, 105 (1999).
- [2] Г.А. Петраковский, А.Д. Балаев, А.М. Воротынов. *ФТТ* **42**, 2, 313 (2000).
- [3] R. Roessli, J. Schefer, G.A. Petrakovskii, B. Ouladdiaf, M. Boehm, U. Staub, A. Vorotinov, L. Bezmaternikh. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 9, 1885 (2001).
- [4] J. Schefer, M. Boehm, B. Roessli, G. Petrakovskii, B. Ouladdiaf, U. Staub. *Appl. Phys. A* **74**, *Supp. 1*, s1740 (2002).
- [5] M. Boehm, B. Roessli, J. Schefer, B. Ouladdiaf, A. Amato, C. Baines, U. Staub, G.A. Petrakovskii. *Physica B* **318**, 4, 277 (2002).
- [6] Ю.А. Изюмов. Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах. Энергоиздат, М. (1987).
- [7] О.В. Ковалев. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Наука, М. (1986).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). Ч. 1.
- [9] И.Е. Дзялошинский. *ЖЭТФ* **47**, 3, 992 (1964).