

УДК 537.612

ВЛИЯНИЕ БОЛЬШОЙ ДВУХОСНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННОГО КРИСТАЛЛА С $S=1$

Фридман Ю.А., Гореликов Г.А., Клевец Ф.Н.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: frid@tnu.crimea.ua, gorelikov.gennadii@rambler.ru, phil_klevets@mail.ru

В работе исследовано влияние двухосной одноионной анизотропии на фазовые состояния ванфлековского магнетика.

Ключевые слова: ферромагнетик, анизотропия, фазовые переходы.

ВВЕДЕНИЕ

Магнетики с большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» обладают рядом необычных свойств. Если константа одноионной анизотропии превосходит константу обменного взаимодействия, в магнетике формируется одинаковое для всех ионов синглетное спиновое состояние. Физически это означает, что из трех возможных одноионных спиновых состояний с проекциями $S^z = \pm 1, 0$ на ось C_3 нижайшим оказывается последнее. Теоретические исследования таких

систем восходят к работе Мория [1]. В ней было показано, что при $\frac{6}{2J_0} > 1$, даже

при абсолютном нуле температур ($T = 0$) в отсутствие внешнего поля реализуется немагнитное, квадрупольно-упорядоченное основное состояние. В таких магнетиках квантовые свойства отдельных спинов в эффективном магнитном поле играют решающую роль в формировании динамических и термодинамических свойств магнетиков. В [2] было показано, что конкуренция двух типов взаимодействий – одноионной анизотропии и обмена, приводит к существованию своеобразных типов спиновых структур при $T = 0$: одноионная анизотропия также создает эффективное поле, но не ферромагнитного, а квадрупольного типа. Соответствующий квадрупольный порядок в рассматриваемом случае можно представить как хаотичное упорядочение спинов в плоскости, перпендикулярной оси ферромагнетизма, выделенной, например, внешним полем, и характеризовать квадрупольным параметром порядка $q = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1)$. Таким образом,

несмотря на отсутствие векторного магнитного порядка, соответствующие структуры являются спин-упорядоченными, и порядок в них определяется тензорными характеристиками. По этой причине их свойства отличаются от свойств парамагнетиков, в частности, оказываются близкими к свойствам

антиферромагнетиков (а конкретно – одноосных в поле, параллельном оси анизотропии). Такие системы называют также ванфлековскими парамагнетиками [3,4].

Развитие твердотельных технологий требует создания материалов с все более сложной кристаллической структурой. К таким системам относятся, например, магнетики с двухосной одноионной анизотропией. Однако, исследования зависимости фазовых состояний от величины константы гексагональной анизотропии, насколько нам известно, не проводились.

1. МОДЕЛЬ

В качестве исследуемой системы рассматривается анизотропный ферромагнетик, занимающий все пространство. Рассматриваемый ферромагнетик обладает большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», а также анизотропией типа «легкая ось», лежащей в «легкой плоскости». Такая модель одноионной анизотропии представляет собой ничто иное, как двухосную одноионную анизотропию. В качестве базисной плоскости выберем плоскость XOY. Система находится во внешнем магнитном поле, перпендикулярном базисной плоскости ($\vec{H} \parallel OZ$). Спин магнитного иона предполагается равным единице ($S=1$) – это то минимальное значение спина, при котором возможно существование одноионной анизотропии. Гамильтониан исследуемого магнетика имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{f,f'} J(f-f') \vec{S}_f \vec{S}_{f'} + \frac{\beta}{2} \sum_f (S_f^z)^2 - \frac{\beta_{xy}}{2} \sum_f (S_f^x S_f^y + S_f^y S_f^x) - H \sum_f S_f^z, \quad (1)$$

где $J(f-f')$ – константа билинейного обменного взаимодействия; f – номер узла в кристалле; S_f^i – i -я компонента спинового оператора в узле f ; $\beta > 0$ – константа легкоплоскостной одноионной анизотропии; $\beta_{xy} > 0$ – константа легкоосной одноионной анизотропии. Дальнейшие вычисления будем проводить для случая низких температур ($T=0$), в котором наиболее ярко проявляются свойства большой одноионной анизотропии.

Для описания данной системы удобно использовать диаграммную технику операторов Хаббарда [5,6,7,8]. Такой метод решения позволяет точно учесть одноионную анизотропию путем включения ее в одноузельный гамильтониан, а также проводить вычисления при произвольном соотношении материальных констант. Операторы Хаббарда строятся на полном базисе собственных состояний одноионного гамильтониана, включающего в себя эффекты самосогласованного поля [9].

Выделим в обменной части гамильтониана (1) среднее поле $\langle S_f^z \rangle$, связанное с упорядочением магнитного момента, а также дополнительные поля $\langle Q_{2f}^p \rangle = q_2^p$ (

$p = 0, xy$), определяемые квадрупольными моментами. В результате получим одноузельный гамильтониан следующего вида:

$$\mathcal{H}_0(f) = -\bar{H}S_f^z + \frac{\beta}{6}Q_{2f}^0 - \frac{\beta_{xy}}{2}Q_{2f}^{xy} + \varepsilon_0, \quad (2)$$

где $\bar{H} = H + J_0 \langle S^z \rangle$, $\varepsilon_0 = \frac{\beta}{6}NS(S+1) + \frac{1}{2}J_0 \langle S^z \rangle^2$; $Q_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1)$,

$Q_{2f}^{xy} = S_f^x S_f^y + S_f^y S_f^x = \frac{1}{2i} \{ (S_f^+)^2 - (S_f^-)^2 \}$ – операторы Стивенса.

Из решения одноузельной задачи с гамильтонианом (2) получаем следующие энергетические уровни магнитного иона

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \chi, \quad E_0 = 0, \quad E_{-1} = \frac{\beta}{2} + \chi, \quad (3)$$

и собственные функции гамильтониана (2)

$$\Psi_f(1) = sh\theta|1\rangle + ch\theta|-1\rangle, \quad \Psi_f(0) = |0\rangle, \quad \Psi_f(-1) = ch\theta|1\rangle + sh\theta|-1\rangle, \quad (4)$$

где $\chi = \sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta_{xy}}{2}\right)^2}$, $ch\theta = \left[\frac{\chi - \bar{H}}{2\chi}\right]^{\frac{1}{2}}$, $sh\theta = -i \frac{\beta_{xy}}{2\sqrt{2\chi(\chi - \bar{H})}}$.

На собственных функциях $\Psi_n(M)$ построим операторы Хаббарда $X_f^{M'M} \equiv |\Psi_f(M')\rangle \langle \Psi_f(M)|$, описывающие переход магнитного иона из состояния $|M\rangle$ в состояние $|M'\rangle$ [5,6,7,8]. Для рассматриваемой системы приходим к следующему виду связи спиновых операторов с операторами Хаббарда:

$$S_f^+ = \sqrt{2} \{ ch\theta (X_f^{01} + X_f^{-10}) + sh\theta (X_f^{0-1} - X_f^{10}) \}, \quad S_f^- = (S_f^+)^+, \quad (5)$$

$$S_n^z = ch2\theta (X_n^{-1-1} - X_n^{11}) + sh2\theta (X_n^{-11} - X_n^{1-1}).$$

В представлении (5) одноузельный гамильтониан (2) диагонален. Как следует из (5), параметры порядка системы при $T=0$ можно представить в виде:

$$\langle S^z \rangle = -ch2\theta, \quad q_2^0 = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 2, \quad q_2^2 = 0, \quad q_2^{xy} = -2sh2\theta. \quad (6)$$

Рассмотрим, какие однородные фазовые состояния в данной системе будут реализовываться в зависимости от соотношения материальных констант.

1. При $H \gg \beta, \beta_{xy}, J$ (случай большого внешнего поля) в системе реализуется ферромагнитная фаза с магнитным моментом, направленным вдоль внешнего магнитного поля (параллельно оси OZ). При этом нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а волновая функция этого состояния $\Psi(1) = -i|1\rangle$.

Параметры порядка системы, как следует из (6), имеют вид:

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0, \quad q_2^{xy} = 0. \quad (7)$$

Необходимо отметить, что реализация ферромагнитной фазы возможна также и в отсутствие внешнего поля, но только в случае сильных обменных взаимодействий ($J \gg \beta, \beta_{xy}$).

2. В случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии ($\beta \gg H, J, \beta_{xy}$), как следует из (3), происходит инверсия энергетических уровней, и нижайшим оказывается уровень E_0 . Волновая функция этого состояния $\Psi(0) = |0\rangle$, а параметры порядка системы равны:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = -2, q_2^2 = 0, q_2^{xy} = 0. \quad (8)$$

Хотя, как следует из (8), средняя намагниченность (на один узел) в этом состоянии равна нулю, данное фазовое состояние не является парамагнитным, поскольку для парамагнитного состояния характерно следующее условие: $\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{2}{3}$. В рассматриваемом случае выполняется иное соотношение, а именно

$$\langle (S^z)^2 \rangle = 0, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

Такое фазовое состояние мы будем называть квадрупольно упорядоченным (QU₂-фазой), поскольку отличным от нуля параметром порядка является компонента тензора квадрупольных моментов q_2^0 [10]. В некоторых работах такое фазовое состояние называют ванфлековским парамагнетиком [3,4].

3. Для рассматриваемой системы возможна реализация еще одной нетривиальной ситуации при $H=0$. В случае преобладания наклонной легкоосной анизотропии ($\beta_{xy} \gg \beta, J$) в системе реализуется еще одно квадрупольное состояние (QU₁-фаза). В этой фазе нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона, как видно из (3), является E_1 . Однако параметры порядка системы в этом случае имеют вид:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 0, q_2^{xy} = 2. \quad (9)$$

$$\text{Основное состояние в этой фазе } \Psi(1) = -\frac{i}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle.$$

Нашей задачей является исследование фазовых переходов в рассматриваемой системе. Для этого определим спектры элементарных возбуждений в соответствующих фазах. Хорошо известно, что спектры элементарных возбуждений определяются полюсами функции Грина

$$G^{\alpha\alpha'}(f, \tau; f', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_f^\alpha(\tau) \tilde{X}_{f'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где $\hat{T}$ - оператор Вика, $\tilde{X}_n^\alpha(\tau)$ - оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, усредненный с полным гамильтонианом системы. Процедура

получения дисперсионного уравнения подробно описана, например, в [6,7,8]. Как показано в этих работах, дисперсионное уравнение, определяющее спектры элементарных возбуждений, получено при точном учете одноионной анизотропии.

2. ФЕРРОМАГНИТНАЯ ФАЗА

В случае больших магнитных полей параметры порядка системы определяются соотношениями (7). В результате решения дисперсионного уравнения получаем две следующих ветви

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k) &= \chi - \frac{\beta}{2} - J(k) \approx \alpha k^2 + H - \frac{\beta}{2} + \frac{1}{8} \frac{\beta_{xy}^2}{H + J_0}, \\ \varepsilon_2(k) &= \sqrt{4\chi^2 - \frac{\beta_{xy}^2}{\chi} J(k)} \approx \sqrt{4(H + J_0)^2 + \beta_{xy}^2 - \frac{\beta_{xy}^2}{H + J_0} J_0}.\end{aligned}\quad (10)$$

Здесь $\alpha = J_0 R_0^2$, R_0 – радиус взаимодействия.

Как видно из полученных выражений, ветвь $\varepsilon_2(k)$ является высокочастотной, и точка фазового перехода из ферромагнитной фазы определяется из спектра $\varepsilon_1(k)$.

Легко видеть, что спектр размягчается при

$$H_{FM} = \frac{\beta}{2} - \frac{\beta_{xy}^2}{8(\frac{\beta}{2} + J_0)}.\quad (11)$$

Соотношение (11) определяет поле перехода из ферромагнитной фазы. Как видно, двухосная анизотропия увеличивает область существования ФМ фазы.

3. QU₂-ФАЗА

Рассмотрим теперь решения дисперсионного уравнения в случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии. В этом случае параметры порядка имеют вид (8). При этом происходит инверсия энергетических уровней, и нижайшим становится E_0 . Наличие двухосной анизотропии приводит к снятию вырождения возбужденных энергетических уровней. Полученные спектры магнонов имеют вид:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(\frac{\beta}{4} - J_0 + \alpha k^2\right)\beta} \pm \sqrt{H^2 + \frac{\beta_{xy}^2}{4}}.\quad (12)$$

Из полученных выражений следует, что реализация фазового перехода возможна при следующем значении поля:

$$H_{QU_2} = \frac{1}{2} \sqrt{(\beta - 4J_0)\beta - \beta_{xy}^2}.\quad (13)$$

Из (13) видно, что анизотропия β_{xy} существенно уменьшает область существования QU_2 фазы. При $\beta_{xy} = 0$ выражение (13) в точности соответствует результатам работы [11]. Кроме того, видно, что QU_2 фаза реализуется при $\sqrt{(\beta - 4J_0)\beta} > \beta_{xy}$, т.е. при $\beta_c = 2J_0 + \sqrt{4J_0^2 + \beta_{xy}^2}$.

4. QU_1 -ФАЗА

Как было сказано выше, в данной системе возможна реализация еще одного фазового состояния в случае отсутствия внешнего поля и преобладания наклонной легкоосной анизотропии ($\beta_{xy} \gg \beta, J$). Параметры порядка в QU_1 -фазе принимают значения (9), а нижайшим энергетическим уровнем является E_1 . При этом получаем следующие выражения для спектров магнонов:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= \sqrt{\beta_{xy}(\beta_{xy} - 2J(k))} \approx \sqrt{\beta_{xy}(\beta_{xy} - 2J_0 + \alpha k^2)}, \\ \varepsilon_2(k) &= \frac{1}{2} \sqrt{(\beta_{xy} - \beta)(\beta_{xy} - \beta - 4J(k))} \approx \frac{1}{2} \sqrt{(\beta_{xy} - \beta)(\beta_{xy} - \beta - 4J_0 + \alpha k^2)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Исследуя полученные выражения, находим значение константы наклонной анизотропии $(\beta_{xy})_{QU_1}$, при котором спектр размягчается:

$$(\beta_{xy})_{QU_1} = \beta + 4J_0. \quad (15)$$

Кроме того, как было отмечено выше, в случае большого обменного взаимодействия при нулевом поле в системе возможна реализация ферромагнитной фазы. Спектр магнонов в этой фазе легко получить из спектра $\varepsilon_1(k)$ в (10), приняв в нем $H=0$. Из полученного спектра получается следующее выражение для критического значения константы β_{xy} :

$$(\beta_{xy})_{FM} = 2\sqrt{\beta J_0}. \quad (16)$$

Таким образом, в системе возможна реализация фазовых состояний, представленных на соответствующих диаграммах (рис.1, 2).

Как видно из рис.1, в исследуемой системе фазовые переходы между ферромагнитной и QU_2 -фазой происходят через некоторое смешанное состояние, область существования которого по полю

$$\Delta H = H_{FM} - H_{QU_2} \approx J_0 - \frac{J_0 \beta_{xy}^2}{2\beta(\beta - 2J_0)}.$$

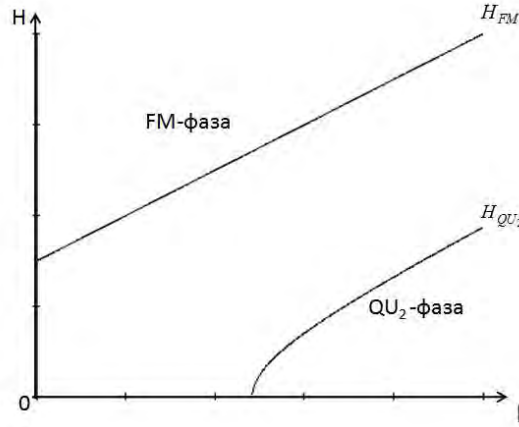


Рис. 1. Качественная фазовая диаграмма анизотропного гейзенберговского магнетика в случае наличия внешнего поля. H_{FM} и H_{QU_2} определяются выражениями (11) и (13), соответственно.

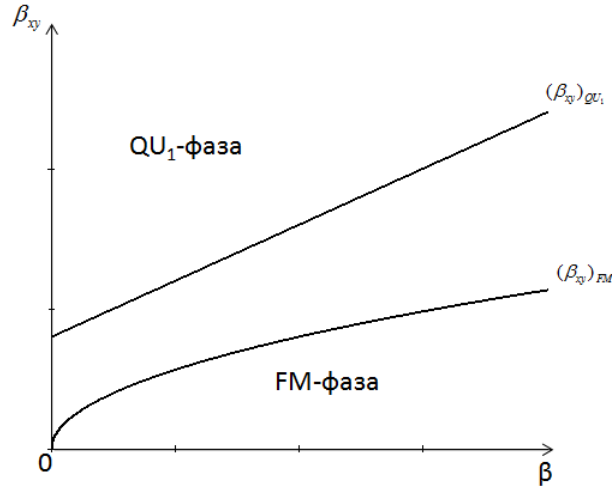


Рис. 2. Качественная фазовая диаграмма анизотропного гейзенберговского магнетика при отсутствии внешнего поля. $(\beta_{xy})_{QU_1}$ и $(\beta_{xy})_{FM}$ определяются выражениями (15) и (16), соответственно.

В случае отсутствия внешнего магнитного поля в системе возможна реализация фазовых состояний, показанных на рис. 2. В данном случае фазовый переход между двумя однородными состояниями также осуществляется через неоднородное. Область существования этого состояния по константе наклонной анизотропии имеет вид:

$$\Delta\beta_{xy} = (\beta_{xy})_{QU_1} - (\beta_{xy})_{FM} = \beta - 2\sqrt{\beta J_0} + 4J_0.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований нами установлено, что влияние большой двухосной анизотропии приводит к следующим эффектам:

1. В исследуемой системе возможна реализация трех однородных фазовых состояний: ферромагнитной фазы в случае больших магнитных полей, QU_1 -фазы в случае отсутствия магнитного поля и преобладания наклонной легкоосной анизотропии, а также QU_2 -фазы в случае малых полей и большой легкоплоскостной анизотропии. Фазовые переходы между ферромагнитной фазой и QU_2 -фазой по полю и между ферромагнитной фазой и QU_1 -фазой осуществляются через неоднородные фазовые состояния.

2. Двухосная анизотропия увеличивает область существования ферромагнитного состояния, и уменьшает область существования QU_2 -фазы.

3. В отсутствие внешнего поля, большая двухосная анизотропия приводит к реализации QU_1 -фазы.

Список литературы

1. Moriya T. Theory of Magnetism of NiF_2 / Moriya T. // Phys. Rev. – 1960. – V. 117. – P. 635.
2. Онуфриева Ф.П. Низкотемпературные свойства спиновых систем с тензорными параметрами порядка / Онуфриева Ф.П. // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 89 – С. 2270.
3. Калита В.М. Многоподрешеточная магнитная фаза, индуцированная внешним полем в синглетном магнетике / Калита В.М., Локтев В.М. // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 125 – С. 1149.
4. Kalita V.M. Magnetization and magnetostriction of Van Vleck antiferromagnets with magnetic anisotropy of “easy-plane” type / Kalita V.M., Ivanova I., Loktev V.M. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 78 – P. 104415.
5. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Зайцев Р.О. // ЖЭТФ. – 1975. – Т. 68. – С. 207.
6. Мицай Ю.Н. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн / Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А. // ТМФ. – 1989. – Т. 81. – С. 263.
7. Вальков В.В. Квантовая спин-волновая теория ферромагнетиков с произвольным видом одноионной анизотропии / Вальков В.В., Валькова Т.А., Овчинников С.Г. // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 88. – С. 550.
8. Fridman Yu.A. Phase states of an $S=1$ magnet with anisotropic exchange interactions / Fridman Yu.A., Kosmachev O.A., Klevets Ph.N. // JMMM. – 2008. – V. 320. – P. 435.
9. Локтев В.М. Квантовая теория одноосного ферромагнетика в поперечном магнитном поле / Локтев В.М., Островский В.С. // УФЖ. – 1978. – Т. 23 – С. 1708.
10. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями / Нагаев Э.Л. – М.: Наука, 1988. – 231 с.
11. Фридман Ю.А. Спиральная магнитная структура в гейзенберговских и негейзенберговских магнетиках / Фридман Ю.А., Матюнин Д.А., Клевец Ф.Н., Гореликов Г.А. // ФТТ. – 2010. – Т. 52 – С. 1123.

Фрідман Ю.А. Вплив великої двовісної анізотропії на фазові стани магнітоупорядкованого кристала з $S=1$ / **Фрідман Ю.А., Гореліков Г.А., Клевець Ф.М.** // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 108-116.

У роботі досліджено вплив двовісної одноіонної анізотропії на фазові стани ванфлековського магнетика.

Ключові слова: ферромагнетик, анізотропія, фазові переходи.

Fridman Yu.A. Influence of biaxial anisotropy on phase states of magnetoordering crystal with $S=1$ / **Fridman Yu.A., Gorelikov G.A., Klevets Ph.N.** // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010. – Vol. 23(62), No.3. – P. 108-116.

In this article we investigated the influence of biaxial anisotropy on phase states of van Flex magnet.

Keywords: ferromagnetic, anisotropy, phase transitions.

Поступила в редакцію 09.11.2010 г.