Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского
Серия «Физико-математические науки». Том 24 (63). 2011 г. № 2. С. 27-32

УДК: ***537.612***

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИЛЬНОАНИЗОТРОПНОМ МАГНЕТИКЕ С ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ТИПА “ZIG-ZAG”

Фридман Ю.А., Мелешко А.Г.

Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: *frid@tnu.crimea.ua*

В работе исследованы фазовые состояния сильно анизотропного антиферромагнетика со сложными обменными взаимодействиями, находящегося во внешнем магнитном поле. Показано, что учет обменного взаимодействия типа «zig-zag» делает энергетически не выгодным реализацию ферромагнитной фазы.
Ключевые слова: обменное взаимодействие типа «zig-zag»; антиферромагнетик; большая одноионная анизотропия.

ВВЕДЕНИЕ

Как хорошо известно, сильный магнетизм (ферро-, антиферро- ферримагнетизм) обусловлен чисто квантовым эффектом, а именно, сильным перекрытием волновых функций магнитоактивных атомов, которое, в свою очередь формирует обменное взаимодействие [1] Однако, в силу экспоненциального убывания степени перекрытия с ростом расстояния между атомами, обменное взаимодействие является короткодействующим, и существенно отличается от нуля лишь для ближайших соседей. Это обстоятельство приводит к достаточно большим проблемам при описании сильно разбавленных магнетиков, магнетиков с треугольной решеткой, или магнитоупорядоченных систем с ярко выраженными квантовыми свойствами. В такого рода системах важную роль играют обменные взаимодействия типа косвенного обмена или РККИ.

Одним из примеров таких систем являются фрустрированные магнетики, для которых обменное взаимодействие отлично от нуля не только для ближайших соседей, но и для следующих за ними [2]. В таких системах могут реализовываться более сложные спиновые состояния, например, спиральная или синусоидальная магнитные структуры.

Однако, фрустрированные системы не обязательно характеризуются «взаимодействием через один». Существует большое число магнитоупорядоченных систем, в которых реализуется обменное взаимодействие типа «zig-zag», т.е. обменное взаимодействие магнитоактивных атомов, находящихся друг относительно друга «накрест» (см. рис.1). Такие системы хорошо изучены для магнетиков со спином $S=\frac{1}{2}$ [3]. Как известно, магнетики со спином $S=\frac{1}{2}$ не обладают одноионной анизотропией, поэтому представляет интерес исследовать магнетик с обменным взаимодействием типа «zig-zag» и одноионной анизотропией.

1. МОДЕЛЬ

В качестве исследуемой системы рассмотрим магнитный диэлектрик, состоящий из двух эквивалентных подрешеток. Спин магнитного иона в каждой из подрешеток будем считать равным единице ($S=1$). Такая величина спина позволяет учесть влияние одноионной анизотропии типа «легкая плоскость». Обменное взаимодействие в подрешетках ($J_{\|}\left(n-n'\right)>0$) создает ферромагнитный порядок, между подрешетками ($J_{\perp}\left(n-n'\right)<0$) – антиферромагнитное упорядочение, и, наконец, между накрестлежащими узлами подрешёток существует взаимодействие $J_{\times}\left(n-n'\right)<0$. Схематично, данная магнитная структура приведена на рис.1.

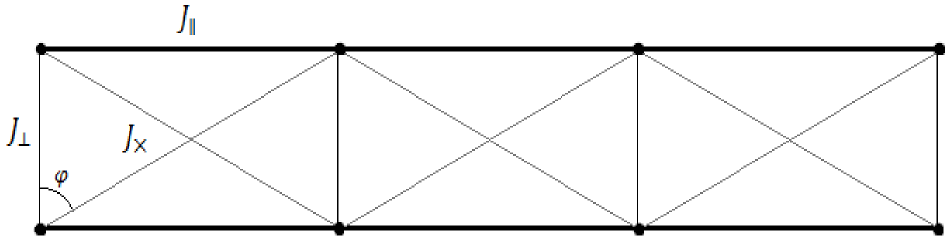

Рис. 1. Графическое изображение обменных взаимодействий в магнетике типа «zig-zag».

Также предположим, что система находится во внешнем магнитном поле, перпендикулярном базисной плоскости. Гамильтониан такой системы можно представить в следующем виде:

$$\mathcal{H}=-\frac{1}{2}\sum_{n,n'}J_{\|}\left(n-n'\right)\left(\vec{S}_n\vec{S}_{n'}\right)+\frac{1}{2}\sum_{n,m}J_{\perp}\left(n-m\right)\left(\vec{S}_n\vec{S}_m\right)+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{n,m}J_{\times}\left(n-m\right)\left\{\vec{S}_n\vec{S}_{m+1}+\vec{S}_{n+1}\vec{S}_m\right\}+\frac{\beta}{2}\sum_{n}\left(S_n^z\right)^2-H\sum_{n}S_n^z\,, \qquad (1)$$

где $\beta>0-$ константа одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» (ХОУ – базисная плоскость), $H-$магнитное поле (в энергетических единицах), перпендикулярное плоскости ХОУ. В дальнейшем будем предполагать, что энергия одноионной анизотропии превосходит энергию обменного взаимодействия ($\beta>>J_i$, $i=\|,\perp,\times$). Кроме того, будем рассматривать случай низких температур ($T<<T_N, T_N-$температура Нееля).

Для точного учета одноионной анизотропии воспользуемся представлением операторов Хаббарда для спиновых операторов [4,5].

Выделяя среднее поле в гамильтониане (1), получим одноузельный гамильтониан

$$\mathcal{H}_0=\frac{\beta}{2}\sum_{n}\left(S_n^z\right)^2-\bar{H}\sum_{n}S_n^z, \qquad (2)$$

где $H+\left\{J_{\|}\left(0\right)-J_{\perp}\left(0\right)-2J_{\times}\left(0\right)\right\}\left\langle S^z\right\rangle=\bar{H}$.

Решая с гамильтонианом (2) одноузельную задачу, получим собственные значения (энергетические уровни магнитного иона)

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \overline{H}\,,\ E_0 = 0\,,\ E_{-1} = \frac{\beta}{2} + \overline{H} \tag{3}$$

и собственные функции одноузельного гамильтониана

$$|\psi(1)\rangle = |1\rangle,\ |\psi(0)\rangle = |0\rangle, |\psi(-1)\rangle = |-1\rangle. \tag{4}$$

На базисе собственных функций (4) построим операторы Хаббарда $X^{M'M} = |\psi(M')\rangle\langle\psi(M)|$, описывающие переход магнитного иона из состояния M' в состояние M. В терминах операторов Хаббарда одноузельный гамильтониан (2) является диагональным:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{M=\pm 1,0} E_M H^M ,$$

где $H^M = X^{MM}$ – диагональные операторы Хаббарда.

Операторы Хаббарда связаны со спиновыми операторами следующими соотношениями:

$$S^+ = \sqrt{2}\left(X^{10} + X^{-10}\right), S^- = \sqrt{2}\left(X^{01} + X^{0-1}\right),\ S^z = H^1 - H^{-1}. \tag{5}$$

Рассмотрим спиновые состояния системы в двух предельных случаях: $H > \beta > J$ и $H < \beta, \beta >> J$.

Рассмотрим случай больших полей ($H > \beta$). В этом случае, как следует из (3) нижайшим энергетическим уровнем является E_1, и, следовательно, как видно из (5), среднее значение магнитного момента подрешеток (на один узел) равно

$$\left\langle S^z \right\rangle = \left\langle H^1 \right\rangle - \left\langle H^{-1} \right\rangle \approx 1.$$

Это состояние может являться как ферромагнитным, так и антиферромагнитным.

При малых полях ситуация принципиально иная. В этом случае, как видно из (3), нижайшим энергетическим уровнем является E_0, т.е. в системе происходит инверсия энергетических уровней. Это обстоятельство приводит к тому, что средняя намагниченность подрешеток (на один узел) равен нулю ($\left\langle S^z \right\rangle = 0$). Однако, это состояние не является парамагнитным, поскольку для парамагнитного состояние характерны следующие значения средних:

$$\left\langle \left(S^x\right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(S^y\right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(S^z\right)^2 \right\rangle = \frac{2}{3}.$$

В рассматриваемом случае данные средние имеют вид:

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

Такое состояние является упорядоченным, но характеризуется не векторным, а тензорным параметром порядка и называется квадрупольным.

2. СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Спектры элементарных возбуждений позволяют определить области устойчивости соответствующих спиновых состояний.

Определим функцию Грина следующим образом:

$$G^{\alpha,\alpha'}(n,\tau,n',\tau') = -\left\langle T\tilde{X}_n^{\alpha}(\tau)\,\tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau')\right\rangle,$$

где $T-$оператор Вика, $\tilde{X}_n^{\alpha}(\tau) = e^{-iH\tau} X_n^{\alpha} e^{iH\tau}$ - оператор Хаббарда в представлении взаимодействия. Полюса функции Грина определяют спектры элементарных возбуждений.

Исследуем спектр магнонов в области больших полей. Как отмечалось ранее, это состояние характеризуется векторным параметром порядка – намагниченностью (на один узел). Спектр имеет довольно простой вид, и может быть представлен как

$$\varepsilon^2(k) = \left(\tilde{J}(k) + E_{10}\right)^2, \tag{6}$$

В (6) введены следующие обозначения $\tilde{J}(k) = J_{||}(k) - J_{\perp}(k) - 2J_{\times}(k)$, $E_{10} = \frac{\beta}{2} - H + \tilde{J}(0)$. Константы обменного взаимодействия существенным образом зависят от параметров кристаллической решетки. Особенно сильно эта зависимость проявляется для обменного интеграла $J_{\times}$. Из рис. 1 видно, что этот обменный интеграл можно представить в виде $J_{\times} = \frac{J_{||}}{\sin\varphi}$, где угол φ определяется параметрами кристаллической решетки. Учитывая эту связь, спектр магнонов (6) можно представить в виде:

$$\varepsilon(k) = H - \frac{\beta}{2} - J_{||}(0)\left[1 - \frac{2}{\sin\varphi}\right] + J_{\perp}(0) - \left[J_{||}(0)\left(1 - \frac{2}{\sin\varphi}\right) - J_{\perp}(0)\right]\cos k\,. \tag{7}$$

Как видно из (7), спектр магнонов перестает быть физичным в длинноволновом пределе, т.е. при $k \to 0$. Это означает, что спектр магнонов в ферромагнитной фазе неустойчив, и, следовательно, ферромагнитная фаза не реализуется даже при достаточно больших полях. Однако, учитывая свойства обменных интегралов $J(\pi) = -J(0)$ спектр магнонов на краю зоны Бриллюэна (при $k = \pi$) принимает стандартный вид:

$$\varepsilon(k) = H - \frac{\beta}{2} + \left[J_{||}(0)\left(\frac{2}{\sin\varphi} - 1\right) + J_{\perp}(0)\right]\frac{k^2}{2}. \tag{8}$$

Таким образом в системе реализуется антиферромагнитное состояние даже при достаточно больших магнитных полях.

Из обращения энергетической щели в спектре (8) в ноль можно найти поле устойчивости антиферромагнитного состояния

$$H_{c1} = \frac{\beta}{2}.$$

Рассмотрим теперь противоположный случай, т.е.предположим, что магнитное поле мало, так что $\beta > H, \tilde{J}$. Как уже отмечалось ранее, при таких соотношениях материальных параметров в системе реализуется квадрупольное спиновое состояние. Спектр магнонов в этой фазе имеет следующий вид:

$$\varepsilon(k) = -H + \frac{\beta}{2}\sqrt{1 - \frac{4}{\beta}\left[\tilde{J}(0) + \left\{J_{\parallel}(0)\left(\frac{2}{\sin\phi} - 1\right) + J_{\perp}(0)\right\}\frac{k^2}{2}\right]}. \quad (9)$$

Из (9) следует, что квадрупольное состояние устойчиво вплоть до полей

$$H_{c2} = \sqrt{\frac{\beta^2}{4} - \beta\left[\tilde{J}(0) + \left\{J_{\parallel}(0)\left(\frac{2}{\sin\phi} - 1\right) + J_{\perp}(0)\right\}\frac{k^2}{2}\right]}. \quad (10)$$

Кроме того, из формулы (10) можно определить минимальное значение константы анизотропии, при котором возможна реализация квадрупольной фазы:

$$\beta_c = \frac{\tilde{J}(0)}{4}.$$

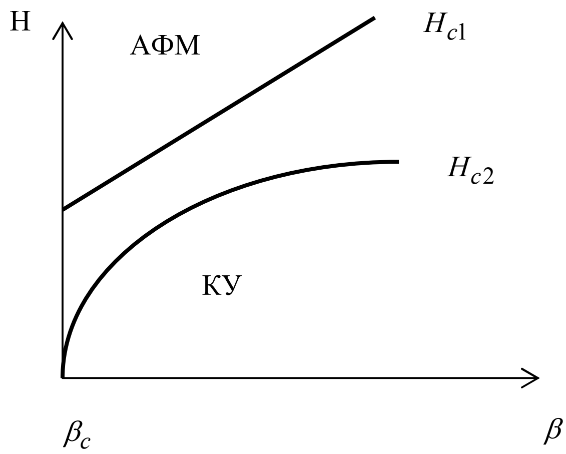

Рис. 2. Фазовая $H - \beta$ диаграмма сильно анизотропного магнетика с «перекрестным» взаимодействием.

Из выражений (8) и (10) следует, что в интервале полей $H_{c1} - H_{c2} = \tilde{J}(0)$ квадрупольное и антиферромагнитное упорядочения сосуществуют.

Качественно, фазовая $H - \beta$ диаграмма исследуемой системы приведена на рис. 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования позволяют сделать следующий вывод. В сильно анизотропном магнетике со сложными обменными взаимодействиями, включающими и так называемый «перекрестный» обмен, существование ферромагнитного упорядочения является энергетически не выгодным даже при достаточно больших магнитных полях. Ферромагнитная фаза в рассматриваемом случае «вытесняется» антиферромагнитной. Если же в гамильтониане (1) убрать «перекрестный» обмен, то система ведет себя стандартным образом, т.е. при больших магнитных полях в ней реализуется ферромагнитная фаза.

Список литературы

1. Ахиезер А.И. Спиновые волны / Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. – М.: Наука, 1967. – 207 с.
2. Изюмов Ю.А. Модулированные, или длиннопериодические, магнитные структуры кристаллов / Изюмов Ю.А. // УФН. – 1984. – Т. 144. – С. 439-474.
3. Frustration-induced plateus in S ≥ 1/2 Heisenberg spin ladders / Michaud F., Coletta T., Manmana S.R., et al. // Phys. Rev. – 2010. – V. B 81. – P. 014407.
4. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Зайцев Р.О. // ЖЭТФ. – 1975. – Т.68. – С. 207.
5. Мицай Ю.Н. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн / Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А. // ТМФ. – 1989. – Т. 81. – С. 263-270.

Фрідман Ю.А., Мелешко О.Г. Фазові переходи в сильно анізотропному магнетику із обмінною взаємодією типу «zig-zag» / Фрідман Ю.А., Мелешко О.Г. // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2011. – Т. 24(63), №2. – С. 27-32.

У роботі досліджені фазові стани сильно анізотропного антиферомагнетиках зі складними обмінними взаємодіями, що знаходиться в зовнішньому магнітному полі. Показано, що облік обмінної взаємодії типу «zig-zag» робить енергетично не вигідним реалізацію феромагнітної фази.

Ключові слова: обмінна взаємодія типу «zig-zag»; антиферомагнетик; велика одноіонна анізотропія

Fridman Yu.A. Phase transitions in strongly anisotropic magnet with exchange interaction of the "zig-zag" type / Fridman Yu.A., Meleshko A.G. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2011 – Vol. 24(63), No.2 – P. 27-32.

Summary: We have studied the phase states of a strongly anisotropic antiferromagnet with complicated exchange interactions in an external magnetic field. It is shown that the inclusion of the exchange interaction of the «zig-zag» type does not energetically favorable realization of the ferromagnetic phase.

Keywords: exchange interaction of the type «zig-zag»; antiferromagnet; large single-ion anisotropy

Поступила в редакцию 23.05.2011 г.