

ТЕОРИЯ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ СИСТЕМЫ Cr_2BeO_4

В.Г.Барьяхтар, Е.П.Стефановский, Д.А.Яблонский

Построена теория обменных длиннопериодических двойных циклоидальных структур в ромбических антиферромагнетиках (пространственная группа $D_{2h}^{16} - P_{bnn}$). Конкретное рассмотрение проведено для соединения Cr_2BeO_4 . Наличие электрической поляризации в этой системе объяснено неоднородным магнитоэлектрическим эффектом.

Эксперименты по нейтронной дифракции ¹ показали, что в соединении Cr_2BeO_4 (пространственная группа D_{2h}^{16} , см. рис. 1) при 28К имеет место магнитное упорядочение в модулированную фазу с вектором сверхструктуры вдоль c -оси ромбического кристалла (период модуляции около 30 межатомных расстояний). Магнитные моменты ионов Cr лежат в ac -плоскости, т. е. имеет место циклоидальная магнитная структура. Несколько позднее в ² в области температур $28 \div 24\text{К}$, т. е. в области существования сверхструктуры, в этом соединении была обнаружена электрическая поляризация. Объяснению природы магнитной структуры и электрической поляризации Cr_2BeO_4 и посвящено настоящее сообщение.

Элементарная кристаллохимическая ячейка Cr_2BeO_4 (см. рис. 1) содержит два типа кристаллографически эквивалентных ионов хрома (Cr_1 в b позициях, Cr_2 в c позициях). Вводя для каждого типа ионов главный вектор антиферромагнетизма $\mathbf{G}_1 = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4$ и $\mathbf{G}_2 = \mathbf{M}_5 - \mathbf{M}_6 + \mathbf{M}_7 - \mathbf{M}_8$, можно показать, что в обменном приближении плотность термодинамического потенциала (ТДП) имеет вид

$$f = \delta_1 \mathbf{G}_1^2 + \delta_2 \mathbf{G}_2^2 + \Delta \left(\mathbf{G}_1 \frac{d\mathbf{G}_2}{dz} - \mathbf{G}_2 \frac{d\mathbf{G}_1}{dz} \right) + \alpha_1 \left(\frac{d\mathbf{G}_1}{dz} \right)^2 + \alpha_2 \left(\frac{d\mathbf{G}_2}{dz} \right)^2, \quad (1)$$

где δ_i , Δ , α_i – постоянные обменного взаимодействия, декартова ось z совпадает с c -осью кристалла.

Отметим важное обстоятельство. Слагаемое, содержащее первые производные и приводящее к появлению сверхструктуры, существенно связано с кристаллографической неэквивалентностью двух групп магнитных ионов. Замечая, что минимальное расстояние между ионами хрома в разных позициях примерно на 30% превосходит расстояние между ними в b -позициях (см. рис. 1), можно считать треть слагаемое в (1) много меньше, например, четвертого. Это и приводит к возникновению длиннопериодической сверхструктуры (см. ниже).

Решение задачи ищем в виде двойной гармонической циклоидальной структуры

$$\begin{aligned} G_{1x} &= G_1 \sin qz, & G_{2x} &= G_2 \sin(qz - \varphi), \\ G_{1z} &= G_1 \cos qz, & G_{2z} &= G_2 \cos(qz - \varphi). \end{aligned} \quad (2)$$

Отсутствие в (1) инварианта вида $\mathbf{G}_1 \mathbf{G}_2$ приводит к тому, что взаимное расположение сверхструктур в первой и второй группах магнитных атомов фиксируется инвариантом, линейным по производным. Минимуму ТДП при $\Delta > 0$ соответствует $\varphi = 3\pi/2$, что находится в соответствии с ¹.

Нетрудно убедиться в том, что на линии ABC магнитной фазовой диаграммы в переменных (γ_1, γ_2) (см. рис. 2), где

$$\gamma_1(T) = \delta_1(T) / \alpha_1, \quad \gamma_2(T) = \delta_2(T) / \alpha_2, \quad x = \Delta^2 / \alpha_1 \alpha_2, \quad (3)$$

уравнение которой

$$(\gamma_1 - \gamma_2)^2 - 2(\gamma_1 + \gamma_2)x + x^2 = 0, \quad (4)$$

имеет место непрерывный фазовый переход из парамагнитного состояния в сверхструктуру (2); причем на этой линии

$$q^2 = \gamma_2 \frac{x - (\gamma_2 - \gamma_1)}{x + (\gamma_2 - \gamma_1)} = \gamma_1 \frac{x + (\gamma_2 - \gamma_1)}{x - (\gamma_2 - \gamma_1)} > 0. \quad (5)$$

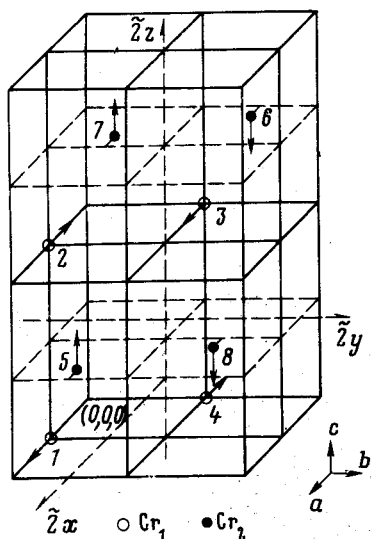


Рис. 1

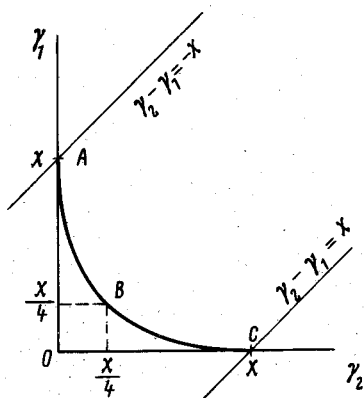


Рис. 2

Рис. 1. Кристаллохимическая ячейка Sr_2BeO_4 ($a = 4,555 \text{ \AA}$, $b = 9,792 \text{ \AA}$, $c = 5,663 \text{ \AA}$). Стрелками у ионов Sr обозначен один из вариантов простой антиферромагнитной структуры G-типа

Рис. 2. Схематическое изображение (γ_1, γ_2) магнитной фазовой диаграммы

В выражении (1) мы не учитывали энергию магнитной анизотропии $\beta_1 G_{1z}^2 + \beta_2 G_{2z}^2$, которая может сделать невозможным существование сверхструктуры (2). Можно показать, что критерий существования сверхструктуры вдали от фазового перехода имеет вид

$$|\beta_1| G_1^2 + |\beta_2| G_2^2 \leq \frac{2\Delta^2 G_1^2 G_2^2}{\alpha_1 G_1^2 + \alpha_2 G_2^2}. \quad (6)$$

Перейдем теперь к объяснению появления электрической поляризации в Sr_2BeO_4 при 28К. Согласно ³, в магнитоупорядоченном кристалле любой симметрии в том случае, если в нем имеет место макроскопическая магнитная неоднородность (в нашем случае это двойная циклоидальная сверхструктура), с необходимостью возникает электрическая поляризация P. Это так называемый неоднородный магнитоэлектрический эффект. В нашем случае введение в плотность ТДП соответствующих магнитоэлектрических инвариантов обменно-релятивистского происхождения

$$P_x \left[d_1 \left(G_{1z} \frac{dG_{1x}}{dz} - G_{1x} \frac{dG_{1z}}{dz} \right) + d_2 \left(G_{2z} \frac{dG_{2x}}{dz} - G_{2x} \frac{dG_{2z}}{dz} \right) \right] \quad (7)$$

позволяет найти P в виде

$$P_z = P_y = 0, \quad P_x = \chi \Delta \frac{(d_1 G_1^2 + d_2 G_2^2) G_1 G_2}{\alpha_1 G_1^2 + \alpha_2 G_2^2} \quad (8)$$

где χ — диэлектрическая восприимчивость кристалла. Релятивистские же инварианты, содержащие P_i , приводят к появлению знакопеременной составляющей P_z , причем $|P_z| \ll |P_x|$.

Авторы выражают благодарность И.М.Витебскому и В.Н.Криворучко за полезные дискуссии.

Литература

1. Cox D.E., Frazer B.C., Newnham R.E., Santoro R.P. J. Appl. Phys., 1969, 40, 1124.
2. Newnham R.E., Kramer I.I., Schulze W.A., Cross L.E. J. Appl. Phys., 1978, 49, 6088.
3. Барьяхтар В.Г., Львов В.А., Яблонский Д.А. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, 565.

Донецкий физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
5 августа 1985 г.