

НЕКОЛЛИНЕАРНАЯ МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ ФАЗЕ La_2CoO_4

С.С.Кротов

Показано, что в соединении La_2CoO_4 в низкотемпературной фазе должна наблюдаться неколлинеарная в плоскости xy магнитная структура.

В последнее время в связи с проблемой ВТСП большой интерес вызывало исследование магнитных свойств системы La_2CuO_4 и родственных ей соединений (см., например, ¹ и цитируемые там работы). В частности, для выяснения особенностей магнетизма ионов Cu со спином $S = 1/2$ в структуре типа La_2CuO_4 в работе ² были изучены магнитные переходы в изоморфном соединении La_2CoO_4 , где ионы Co имеют спин $S = 3/2$, а также в соединении La_2NiO_4 ³ (где ионы Ni обладают спином $S = 1$).

В настоящей работе будет показано, что в соединении La_2CoO_4 низкотемпературная магнитная фаза, если кристаллическая структура характеризуется пространственной группой $P4_2/nctm$ (согласно данным ²), должна быть принципиально неколлинеарным антиферромагнетиком. Возникающая неколлинеарность имеет совершенно иной вид, чем в соединении La_2CuO_4 ^{4,5}.

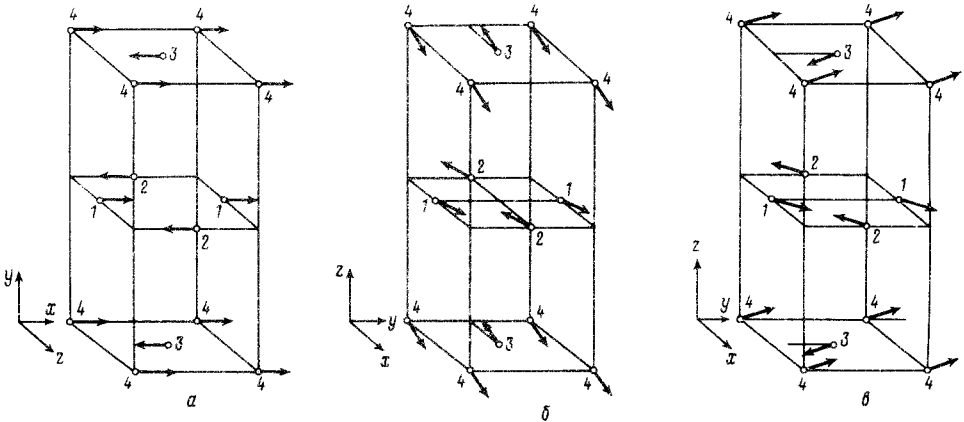


Рис. 1. *a* - Коллинеарный антиферромагнетизм (типа La_2NiO_4) выше температуры структурного фазового перехода первого рода (установка $Cmca$); *b* - неколлинеарное упорядочение в тетрагональной фазе с основной модой L_{1x} (установка $P4_2/nctm$); *v* - неколлинеарное упорядочение в тетрагональной фазе с основной модой L_{1y} (установка $P4_2/nctm$)

С точки зрения кристаллической симметрии настоящая система претерпевает следующие изменения ². Во-первых, высокотемпературная тетрагональная фаза ($I4/m\bar{3}m$) превращается в орторомбическую ($Cmca$) при температуре $T_1 \cong 500\text{K}$ в результате смягчения одной из двукратно вырожденных вращательных TO -мод на границе зоны Бриллюэна. При этом, как и в соединении La_2CuO_4 происходит поворот кислородных октаэдров, окружающих ион переходного $3d$ -металла. Поскольку в данном случае магнитные моменты ионов Co направлены вдоль оси вращения октаэдров (ось ox), то возникающая магнитная структура представляет собой строго коллинеарный четырехподрешеточный антиферромагнетик в точности такого типа, как в системе La_2NiO_4 ³.

Специфическим для соединения La_2CoO_4 является второй структурный фазовый переход при температуре $T_2 \cong 135\text{K}$ (как следует из работы ² - первого

рода) из орторомбической в тетрагональную фазу. Соответствующее изменение симметрии связано с дополнительными поворотами кислородных октаэдров вокруг вертикальных осей четвертого порядка (что является следствием смягчения еще одной вращательной моды октаэдра). Группа симметрии $Cmca$ меняется на группу $P4_2/nctm$.

Как станет ясно из дальнейшего, указанный выше фазовый переход первого рода с необходимостью приведет к особой магнитной структуре. Для описания магнитных свойств новой тетрагональной фазы воспользуемся подходом Дзялошинского ⁶. Для этой цели произведем разложение магнитной части функционала свободной энергии считая, что усреднение по сопутствующим переходу упругим степеням свободы уже произведено. Это отвечает ситуации, как если бы в нашей системе, характеризуемой группой симметрии $P4_2/nctm$, произошел чисто магнитный фазовый переход. Обозначим ионы Co как указано на рисунке *a*, введем соответствующие магнитные моменты m_1, m_2, m_3, m_4 и определим вектора антиферромагнетизма L_1, L_2, L_3 , а также вектор ферромагнетизма M по формулам

$$\begin{aligned} L_1 &= m_1 - m_2 - m_3 + m_4, & L_2 &= m_1 - m_2 + m_3 - m_4, \\ L_3 &= m_1 + m_2 - m_3 - m_4, & M &= m_1 + m_2 + m_3 + m_4. \end{aligned} \quad (1)$$

Учитывая далее, что следующие линейные комбинации введенных векторов \vec{L}_i и \vec{M}

$$L_{1x} + L_{2y}; \quad L_{1x} - L_{2y}; \quad L_{1y} + L_{2x}; \quad L_{1y} - L_{2x}; \quad L_{3x}; \quad M_x$$

образуют базисы одномерных представлений группы D_{4h}^* , а пары $L_{1x}, L_{2x}; L_{3x}, L_{3y}; M_x, M_y$; образуют базисы эквивалентных двумерных представлений точечной группы кристалла, построим соответствующие инвариантные комбинации и получим магнитную часть функционала G_M

$$\begin{aligned} G_M &= \frac{A_1}{2}(L_{1x}^2 + L_{2y}^2) + \frac{A_2}{2}(L_{1y}^2 + L_{2x}^2) + \frac{A_3}{2}(L_{3x}^2 + L_{3y}^2) + \\ &+ \frac{A_4}{2}(M_x^2 + M_y^2) + \frac{A_5}{2}(L_{1x}^2 + L_{2x}^2) + \frac{A_6}{2}L_{3x}^2 + \frac{A_7}{2}M_x^2 + \\ &+ \beta_1 L_{1x}L_{2y} + \beta_2 L_{1y}L_{2x} + d_1(L_{1x}L_{3x} - L_{2x}L_{3y}) + d_2(L_{1x}M_y - L_{2x}M_x) + \\ &+ g_1(L_{1x} - L_{2y})L_{3x} + g_2(L_{1y} + L_{2x})M_x + d_3(L_{3x}M_y + L_{3y}M_x) - \vec{M} \cdot \vec{H}. \end{aligned} \quad (2)$$

В данном случае мы воспользовались традиционным для систем тетрагональной симметрии обозначениями координат (в отличие от группы $Cmca$, когда длинная ось элементарной ячейки была направлена по оси oy , мы использовали для нее обозначение oz). Отметим, что в соответствии с экспериментальными данными ², магнитное состояние в низкотемпературной фазе будет описываться либо x -й, либо y -й проекцией вектора \vec{L}_1 .

Первое следствие полученного выражения (2) состоит в том, что магнитное упорядочение в системе, описываемой пространственной группой $P4_2/nctm$ принципиально должно являться неколлинеарным. Если основной будет магнитная мода L_{1x} , то на нее обязательно наложится "примесь" L_{2y} , т.е. в одном горизонтальном слое моменты поворачиваются по часовой стрелке, а в соседнем - против и т.д. Напомним, что неколлинеарность магнитной структуры в соединении La_2CuO_4 была обусловлена выходом моментов из горизонтальной плоскости и появлением слабой вертикальной антиферромагнитной составляющей.

Очевидно далее, что смешанные члены выражения (2) свидетельствуют о возможности обнаружения специфических эффектов. В частности, при наложении

магнитного поля вдоль оси oz система в зависимости от характера магнитного упорядочения либо совершит спин-флоп переход, либо нет. Если исходная структура описывается вектором L_{1x} , то переход возможен, кстати он явится подтверждением того, что ответственным за магнитный порядок в системе будет именно вектор L_{1x} , а не L_{1y} . Таким образом поведение системы в вертикальном магнитном поле даст необходимую информацию в пользу той или иной структуры и снимет определенную двусмысленность результатов работы ².

Не менее интересным будет поведение системы и в сильных горизонтальных полях. При этом спин-флоп переход в поле параллельном оси oz произойдет без смены типа основного упорядочения (вектор \vec{L}_1), переход же в состояние, характеризующееся вектором \vec{L}_{2z} произойдет в большем по величине поле, направленном по оси oy . В целом, при спин-флоп переходе можно ожидать характерного изменения проводимости аналогично тому, как это имеет место в системе La_2CuO_4 ¹. Совершенно нетривиальным может оказаться поведение системы при допировании. Меняя концентрацию ионов La, мы можем варьировать по температуре интервал существования фазы P_{42}/nct и наблюдения отмеченных выше эффектов.

Итак истинная магнитная структура должна иметь более сложный характер (см., рисунок б, в), чем это следует из расшифровки нейтронографических данных работы ².

Литература

1. Thio T. et al. Phys. Rev., B, 1990, 41, 231.
2. Yamada K. et al. Phys. Rev. B, 1989, 39, 2336.
3. Rodriguez-Carvajal J. Phys. Rev. B, 1988, 38 7148.
4. Thio T. et al. Phys. Rev. B, 1988, 38, 905.
5. Боровик-Романов А.С. и др. Письма в ЖЭТФ, 1988, 47, 600.
6. Боровик-Романов А.С. Лекции по низкотемпературному магнетизму. Новосибирск 1976, с.49.

Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
26 сентября 1990 г.