

ДВОЙНАЯ МОДЕЛЬ ГАЙЗЕНБЕРГА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ И МЕТАМАГНЕТИЗМ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ СИСТЕМ

К.И. Кугель¹⁾, Д.И. Хомский

Показана возможность метамагнитного поведения систем с изотропным спиновым взаимодействием, характеризующихся двумя параметрами порядка.

Метамагнетизм (нелинейный, вплоть до скачкообразного, рост намагниченности антиферромагнетика с полем) связывают обычно с анизотропией магнитных свойств (одноионной или обменной) [1]. Цель настоящей работы – показать, что метамагнитное поведение возможно и в веществах с изотропной спиновой системой за счет взаимодействия ее с другой "степенью свободы"²⁾. Мы покажем, что такой механизм может реализоваться в системах с орбитальным вырождением (ян-теллеровских).

В веществах с ян-теллеровскими ионами (например, Mn^{3+} , Cr^{2+} , Cu^{2+} в октаэдрическом окружении, орбитальное основное состояние которых двукратно вырождено) обменное взаимодействие, как показано в [4, 5], описывается гамильтонианом типа двойного гамильтониана Гайзенберга, имеющего вид (с учетом внешнего магнитного поля h)

$$H = \sum_{i,j} \{ J_1 s_i s_j + J_2 \tau_i \tau_j + J_3 (s_i s_j)(\tau_i \tau_j) \} - h \sum_i s_i. \quad (1)$$

Здесь s_i – спин i -го узла ($s^z = \pm 1$), а τ_i – псевдоспин, характеризующий орбитальное состояние; например, для e_g -орбиталей $\tau^z = +1$ соответствует орбиталь $d_{2z^2-x^2-y^2}$, а $\tau^z = -1$ – $d_{x^2-y^2}$.

Гамильтониан типа (1) получается, исходя из вырожденной модели Хаббарда. При учете конкретного вида l_g -орбиталей он, конечно, выглядит намного сложнее, но все качественные особенности легко пояснить на (1). При этом в (1) соответствующие взаимодействия имеют вид $(s_i s_j)$, $(\tau_i \tau_j)$ (двойная модель Гайзенберга) или же s и τ могут быть изинговскими переменными. В последнем случае наша модель (1), по существу, совпадает с моделью Ашкина – Теллера [6], интерес к которой возрос в последнее время [7, 8].

В рассматриваемой модели орбитальная и спиновая структуры оказываются тесно связанными. Так, спиновое взаимодействие описывается гамильтонианом

$$H^s = \sum_{i,j} J_{ij}^s s_i s_j + h \sum_i s_i, \quad J_{i,j}^s = J_1 + J_3 \langle \tau_i \tau_j \rangle. \quad (2)$$

¹⁾ Институт высоких температур АН СССР

²⁾ Метамагнетизм возможен также в системах с изотропным биквадратным обменом [2,3].

Аналогично, взаимодействие в τ -системе определяется величиной $J_{ij}^{\tau} = J_2 + J_3 < s_i s_j >$. Меняя спиновую структуру, например внешним магнитным полем, мы тем самым меняем и J_{ij}^{τ} ; и соответственно, орбитальную структуру. Но тогда, согласно (2), и обменный интеграл J_{ij}^s станет другим; в результате отклик спиновой системы на внешнее магнитное поле будет нелинейным, с чем и связано метамагнитное поведение.

Рассмотрим для конкретности соотношение констант $J_1 > J_3 > J_2 > 0$. Основное состояние при $h = 0$ будет антиферромагнитным по спину, $< s_i s_{i+1} > = -1$, и "ферромагнитным" по орбиталам, с $< \tau_i \tau_{i+1} > = 1$; при этом действительно, $J^s = J_1 + J_3 > 0$ и $J^{\tau} = J_2 - J_3 < 0$. С ростом h спиновый коррелятор $< s_i s_{i+1} >$ будет возрастать и в поле h_{c_2} достигает значения $< s_i s_{i+1} > = -J_2/J_3$. Поле h_{c_2} легко найти в классическом случае, записав $< s_i s_{i+1} > = \cos 2\theta$, $h s = h \cos \theta$ и минимизируя энергию по углу θ ; получаем отсюда $h_{c_2}^2 = 8(J_1 + J_3)^2 (1 - J_2/J_3)$. При $h > h_{c_2}$ J^{τ} сменит знак, и орбитальное упорядочение станет антиферромагнитным с $< \tau_i \tau_{i+1} > = -1$. Но тогда, по (2), скачком уменьшается и спиновый обмен (до $J^s = J_1 - J_3$), что приведет к скачкообразному росту намагниченности. h_{c_2} является на самом деле "полем перегрева"; если же идти со стороны больших полей, то фаза с $< \tau_i \tau_{i+1} > = -1$ может сохраниться вплоть до поля h_{c_1} , ($h_{c_1}^2 = 8(J_1 - J_3)^2 (1 - J_2/J_3)$).

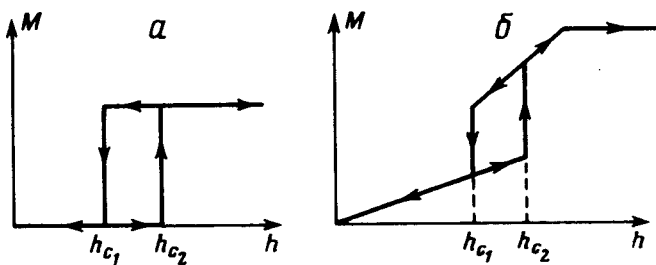


Рис. 1. Зависимость магнитного момента от поля в модели (1): а – изинговский вариант, б – гайзенберговский вариант

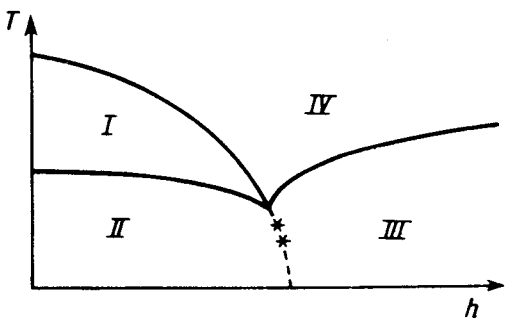


Рис. 2. Схематический вид фазовой диаграммы при $J_1 > J_3 > J_2 > 0$: I – фаза антиферромагнитная по s и парамагнитная по τ ; II – фаза антиферромагнитная по s и ферромагнитная по τ ; III – фаза с частично (гайзенберговский случай) или полностью (изинговский) схлопнувшимися подрешетками, антиферромагнитная по τ ; IV – фаза парамагнитная по s и τ . Звездочкой отмечено возможное положение трикритической точки. ——— — переходы второго рода, ---- — переходы первого рода

Переход, таким образом, оказывается переходом первого рода. Поведение момента M при $T = 0$ в зависимости от h показано схематически на рис. 1.

Можно думать, что скачкообразный характер перехода сохранится и при $T = 0$ в некоторой области фазовой диаграммы. В отсутствие поля, вообще говоря, имеются два фазовых перехода (упорядочение по s и по τ), происходящие при разных температурах и являющиеся, по крайней мере в приближении самосогласованного поля [9], переходами второго рода (см. также [8]). Поэтому на фазовой диаграмме ($T - h$) (ее возможный вид показан на рис. 2) должна иметься трикритическая точка.

Помимо этого общего рассмотрения было найдено точное решение соответствующей одномерной задачи для изинговского взаимодействия. Свободная энергия в этом случае имеет вид

$$F = -TN \ln \left[2 \left\{ e^{-\beta J_1} \operatorname{ch} \beta (J_2 + J_3) \operatorname{ch} \beta h + e^{\beta J_1} \left[\operatorname{ch}^2 \beta (J_2 - J_3) + \operatorname{ch}^2 \beta (J_2 + J_3) \operatorname{sh}^2 \beta h \right]^{1/2} \right\} \right], \quad \beta = 1/kT. \quad (3)$$

Анализ (3), подтверждает в общих чертах полученные выводы, в частности, вид фазовой диаграммы (рис. 2), хотя, конечно, истинных фазовых переходов в одномерном случае нет. Соответствующие линии на фазовой диаграмме определялись по максимумам теплоемкости.

Был также проведен в приближении самосогласованного поля конкретный расчет влияния магнитного поля на вещества со структурой перовскита, типа KCuF_3 [10], с использованием обменного гамильтониана, полученного в [5]. Качественно поведение намагниченности близко к изображенному на рис. 1, б. При h_c происходит переход от спиновой структуры типа антиферромагнитно связанных ферромагнитных плоскостей к чисто двухподрешеточному антиферромагнетику.

Отметим в заключение, что имеются некоторые экспериментальные данные, которые можно связать с изложенным механизмом метамагнетизма. Так, в [11] при исследовании граната $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ($T_N \approx 14\text{K}$) с ионами Mn^{3+} в октаэдрических междуузлиях был обнаружен метамагнитный переход при $h_c \sim 15 \text{ кэ}$. Такое поведение трудно связать с анизотропией, пришлось бы предположить величину поля анизотропии порядка обменного, что для Mn^{3+} кажется маловероятным; не согласуется с этим и то, что при $h \gtrsim h_c$ намагниченность составляет $\sim 1/3$ от намагниченности насыщения.

Трикритическая точка в веществах с кооперативным ян-теллеровским упорядочением орбиталей обнаружена в DySb [12] и ряде других систем.

Интересно было бы и исследование в поле веществ типа KCuF_3 . При этом метамагнитное поведение должно наблюдаться, если существенную роль играет суперобменный механизм упорядочения орбиталей. Если же орбитальное упорядочение определяется преимущественно электрон-колебательным (ян-теллеровским) взаимодействием, то указанные эффекты, вообще говоря, могут и не реализоваться.

Физический институт
им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 января 1976 г.

Литература

- [1] С.В.Вонсовский. "Магнетизм", М., изд. Наука, 1971.
 - [2] В.М.Матвеев. ФТТ, 16, 1635, 1974.
 - [3] М.Варма. Phys. Rev. B12, 2710, 1975.
 - [4] В.Л.Покровский, Г.В.Уймин. ЖЭТФ, 61, 859, 1971.
 - [5] К.И.Кугель, Д.И.Хомский. ЖЭТФ, 64, 1429, 1973.
 - [6] J.Ashkin, E.Teller. Phys. Rev., 64, 178, 1943.
 - [7] С.Fan. Phys. Rev. B6, 902, 1974; Phys. Lett., 39A, 136, 1972.
 - [8] S.Y.Wu, K.Y.Lin. J.Phys. C: Sol. St. Phys., 7, L181, 1974.
 - [9] S.Inagaki. J.Phys. Soc. Japan, 39, 596, 1975.
 - [10] К.И.Кугель, Д.И.Хомский. Препринт ФИАН №142, М., 1975.
 - [11] К.П.Белов, Т.В.Валянский, Л.Г.Мамсурова, В.И.Соколов. ЖЭТФ, 65, 1132, 1973.
 - [12] R.Streit, G.E.Everett, A.W.Lawson. Phys. Lett., 50, 199, 1974.
-