

НЕКОЛЛИНЕАРНОСТЬ МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ АНТИФЕРРОЭЛАСТИКОВ ТИПА $KDy(MoO_4)_2$

М.Д.Каплан

На основе теории кооперативного эффекта Яна – Теллера показано, что неколлинеарность магнитной структуры есть следствие антиферродисторсионного фазового перехода в кристалле.

В кристаллах с кооперативным эффектом Яна – Теллера ¹ взаимное влияние дисторсионных, магнитных и электродипольных корреляций обуславливает соответствующую взаимосвязь акустических, магнитных и диэлектрических аномалий ²⁻⁴. В рамках соответствующих представлений ниже показано, что в кристаллах типа $KDy(MoO_4)_2$ неколлинеар-

ность магнитной структуры является прямым следствием антиферродисторсионного упорядочения.

Кристалл $KDy(MoO_4)_2$ интенсивно исследуется последнее время теоретически и экспериментально⁵⁻⁹ в связи с реализующимися в нем ян-теллеровским антиферродисторсионным ($T_c = 14$ К) и магнитным ($T_N = 1,1$ К) фазовыми переходами. Как следует из эксперимента^{7, 9}, магнитоупорядоченная фаза является неколлинеарной: магнитные моменты двух подрешеток ромбического кристалла лежат в ac -плоскости, образуя с a -осью угол $\pm 50^\circ$.

Физические причины неколлинеарности состоят в том, что возникающие при $T \leq T_c$ ян-теллеровские молекулярные поля, действующие на спин-орбитальные состояния редкоземельного иона, играют роль магнитной анизотропии, имеющей противоположные знаки для антиферродисторсионно упорядоченных подрешеток. Соответствующие оси легкого намагничивания этих подрешеток перпендикулярны друг другу, что и обуславливает неколлинеарность. Учет кристаллических полей приводит к повороту магнитных моментов в легкой плоскости, а магнитные взаимодействия ответственны за дополнительное малое (соответственно малости T_c/T_N) изменение углов между моментами.

Гамильтониан тетрагонального кристалла, подвергнутого давлению P , создающему ромбическую деформацию B_{1g} -симметрии, на базе нижайших состояний иона Dy^{3+} (два кramerсовых дублета Γ_7 и Γ_6 , разделенных щелью Δ) представим в виде

$$H = H_f + H_{str} + H_{el-str} - \sum_{m \kappa \beta} (V_{\kappa m \beta}^E E_x^{m\beta} + V_{\kappa m \beta}^U E_y^{m\beta}) (b_{\kappa} + b_{-\kappa}^+) - \Delta \sum_{m \beta} \sigma_x^{m\beta} - \sum_{\substack{mn \\ \beta\beta'}} [J_{mn\parallel}^{\beta\beta'} S_z^{m\beta} S_z^{n\beta'} + J_{mn\perp}^{\beta\beta'} (S_x^{m\beta} S_x^{n\beta'} + S_y^{m\beta} S_y^{n\beta'})], \quad (1)$$

где первые три члена описывают свободные фононы и энергию кристалла, связанную с ромбической и моноклинной деформациями, четвертый член – ответственное за структурный фазовый переход взаимодействие электронов с E -колебаниями, последний – магнитные взаимодействия диполь-дипольного типа, S_α -компоненты полного момента, β, β' – индексы четырех подрешеток кристалла. Подвергнув гамильтониан сдвиговому преобразованию^{1, 2}, исключаящему линейные по фононам члены (1), во втором порядке по константе электрон-фононной связи можно получить межцентровое взаимодействие, приводящее к антиферродисторсионному фазовому переходу. Учитывая, что вследствие орторомбичности при $T \leq T_c$ $\bar{E}_x^\beta \neq 0$, $\bar{E}_y^\beta = 0$, в приближении молекулярного поля электронную часть преобразованного гамильтониана запишем в виде

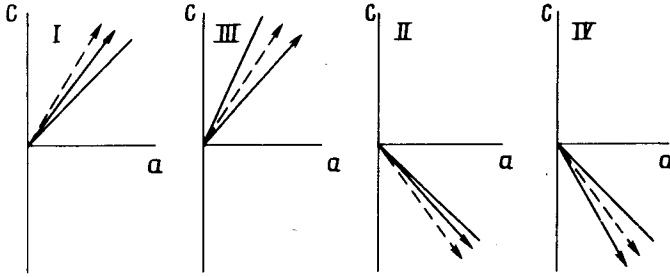
$$\tilde{H}_{el} = - \sum_{m \beta \beta'} [(A^{\beta\beta} \bar{E}_x^\beta + A^{\beta\beta'} \bar{E}_x^{\beta'}) E_x^\beta - g_0 P (c_0 \Omega N)^{-1/2} \sigma_z^{m\beta} - \Delta \sigma_x^{m\beta}], \quad (2)$$

где $A^{\beta\beta}$, $A^{\beta\beta'}$ – параметры внутри- и межподрешеточных ян-теллеровских взаимодействий, $A^{\beta\beta'} < 0$, g_0 – константа связи электронов с B_{1g} -деформацией. Электронные операторы E_α , σ_α удобно выразить через S_α ¹⁰: $E_x = S_x S_z + S_z S_x$, $\sigma_z = S_x^2 - S_y^2$ и т. д. Рассматривая при $T = 0$ операторы момента как классические векторы, ориентация которых в пространстве задана углами θ и φ , можно минимизацией энергии $\tilde{H}_{el}(\theta, \varphi)$ найти равновесные θ^β , φ^β . В парамагнитной фазе (при $J_{\parallel, \perp} = 0$) получим

$$\varphi^{I, II} = 0, \quad \theta^{I, II} = \frac{1}{2} \arccos \left[\pm \frac{\Delta - g_0 P (c_0 \Omega N)^{-1/2}}{A^{I, I} - A^{I, II}} \right] \quad (3)$$

(четыре рассматриваемые подрешетки при $T > T_N$ попарно эквивалентны), т. е. оси легкого намагничивания лежат в ac -плоскости кристалла и развернуты на 90° при $\Delta - g_0 P(c_0 \Omega N)^{-1/2} = 0$.

Из (3) следует возможность дифференциации вкладов тетрагонального и ромбического полей в суммарную энергетическую щель $\Delta_\infty = [\Delta^2 + g_0^2 P^2 (c_0 \Omega N)^{-1}]^{1/2}$, разделяющую крамеровы дублеты при $T > T_c$. С учетом определения критической температуры $kT_c = \Delta_\infty \operatorname{arctg}^{-1} [\Delta_\infty / (A^{I,I} - A^{I,II})]$ — и формулы (3), используя известные из эксперимента величины $\Delta_\infty = 9 \text{ см}^{-1}$, $\theta^I = 40^\circ$, находим, что $\Delta = 6,7 \text{ см}^{-1}$, $g_0 P(c_0 \Omega N)^{-1/2} = 6,0 \text{ см}^{-1}$.



Ориентация магнитных моментов в четырех подрешетках кристалла, --- без учета магнитных взаимодействий, ——— с учетом магнитных взаимодействий

Для определения магнитной конфигурации при $T < T_N$ необходимо дополнительно учесть магнитные взаимодействия. Принимая во внимание, что, как следует из магнитопольевых измерений при $T < T_N$, магнитные взаимодействия вдоль оси z носят антиферромагнитный характер, а вдоль x — ферромагнитный, изменение углов при магнитном упорядочении $\pm \delta\theta^{I,II} \sim (J_\perp \pm J_\parallel) / (A^{I,I} - A^{I,II})$ и составляет $1 - 3^\circ$ ($J_{\parallel,\perp} \approx 1 - 2 \text{ см}^{-1}$, $J \ll A$). Таким образом при $T < T_N$ кристалл разбивается на четыре подрешетки, а не две которые наблюдаются экспериментально, поскольку каждая структурная подрешетка состоит из двух магнитных с малым углом $\delta\theta^\beta$ между магнитными моментами (см. рисунок).

В заключение отметим, что на неколлинеарную магнитную структуру кристаллов типа $\text{KDy}(\text{MoO}_4)_2$ можно эффективно воздействовать одноосными давлениями, поворачивая магнитные моменты подрешеток в ac -плоскости или даже выводя их из нее (если экспериментальная ситуация допускает приложение соответствующих давлений). Наконец, отметим, что прикладывая достаточно большие ($\sim 20 \text{ кЭ}$) внешние магнитные поля в ac -плоскости под углом 45° к c -оси, можно осуществить метамагнитоупругий структурный переход из антиферродисторсионной в ферродисторсионную фазу, который при $T < T_N$ сопровождается магнитным фазовым переходом в квазиколлинеарную ($\delta\theta^\beta \ll 1$) фазу.

Автор глубоко признателен Б.Г.Вехтеру, А.И.Звягину, К.И.Кугелю и Д.И.Хомскому за обсуждение результатов работы.

Литература

1. Gehring G.A., Gehring K.A. Rep. Prog. Phys., 1975, 38, 1.
2. Вехтер Б.Г., Каплан М.Д. ЖЭТФ, 1980, 78, 1781, 1984, 87, 1774.
3. Кугель К.И., Хомский Д.И. УФН, 1982, 136, 621.
4. Каплан М.Д. Письма в ЖЭТФ, 1982, 35, 89.
5. Звягин А.И., Стеценко Т.С., Юрко В.Г., Вайшнорас Р.А. Письма в ЖЭТФ, 1973, 17, 190.
6. Скоробогатова И.В., Звягин А.И. ФНТ, 1978, 4, 801.
7. Leask M.I., Tropper A.C., Wells M.R. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 1981, 14, 3481.
8. Пелих Л.Н., Звягин А.И. ФТТ, 1981, 24, 1536.

9. *Cooke A.H., Davidson M.M., England M. J., Lowry J.B., Tropper A.C., Wells M.R. J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 1976, 9, L573.*

10. *Ellyott R.J., Harley R.T., Hayes W., Smith S.R.P. Proc. Roy. Soc., Ser. A, 1972, 328, 217.*

Институт химии

Академии наук Молдавской ССР

Поступила в редакцию

10 ноября 1984 г
