

Краткие сообщения

Исследование магнитных свойств квазиодномерного магнетика β -TeVO₄ в рамках J_1 – J_2 -модели

Ю.А. Савина, А.Н. Блудов, В.А. Пащенко, С.Л. Гнатченко, Ю.В. Савин

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: vpashchenko@ilt.kharkov.ua*

S. Schäfer

Faculté des Sciences et Techniques, Université d'Aix-Marseille, France

P. Lemmens

Institute for Condensed Matter Physics, TU Braunschweig, D-38106 Braunschweig, Germany

H. Berger

Institute for Condensed Matter and Complex Systems, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Статья поступила в редакцию 26 мая 2015 г., опубликована онлайн 23 июня 2015 г.

Представлен анализ магнитных свойств монокристалла β -TeVO₄ с зигзагообразным расположением магнитных центров (ионы V^{4+} , $S = 1/2$) в спиновой цепочке в рамках J_1 – J_2 -модели. Наилучшее согласие с экспериментальными данными получено для J_1 – J_2 -модели с параметрами $J_1/k_B = -38,33$ К и $J_2/k_B = 29,48$ К ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$). В отличие от ранее использованной модели (однородная антиферромагнитная спиновая цепочка с $J_1/k_B = 21,4$ К ($g_b = 2,28$; $g_{a,c} = 2,18$)) этот улучшенный результат позволяет рассматривать объект исследования как зигзагообразную цепочку с доминирующим ферромагнитным обменом между ближайшими соседями и антиферромагнитным взаимодействием между следующими за ближайшими соседями.

Представлено аналіз магнітних властивостей монокристалу β -TeVO₄ із зигзагоподібним розташуванням магнітних центрів (іони V^{4+} , $S = 1/2$) в спіновому ланцюжку в рамках J_1 – J_2 -моделі. Найкращу згоду з експериментальними даними одержано для J_1 – J_2 -моделі з параметрами $J_1/k_B = -38,33$ К та $J_2/k_B = 29,48$ К ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$). На відміну від раніше використаної моделі (однорідний антиферомагнітний спіновий ланцюжок з $J_1/k_B = 21,4$ К ($g_b = 2,28$; $g_{a,c} = 2,18$)), цей покращений результат дозволяє розглядати об'єкт дослідження як зигзагоподібний ланцюжок з домінуючим феромагнітним обміном між найближчими сусідами і антиферомагнітною взаємодією між наступними за найближчими сусідами.

PACS: 75.10.Pq Модели спиновых цепочек;

75.30.Et Обменное и суперобменное взаимодействия;

75.40.Cx Статические свойства (параметр порядка, статическая восприимчивость, теплоемкости, критические индексы и т.д.);

75.50.Ee Антиферромагнетики.

Ключевые слова: антиферромагнетики, магнитная восприимчивость, обменное и суперобменное взаимодействия, модели для спиновых цепочек, J_1 – J_2 -модели.

В течение последних четырех десятилетий современное исследование магнитных материалов сфокусировано на изучении поведения низкоразмерных (квантовых) спиновых систем [1].

В настоящей работе представлены результаты анализа магнитных свойств квазиодномерной спиновой системы β -TeVO₄ с привлечением модельных расчетов в рамках J_1 – J_2 -модели. Экспериментальные данные

для трех кристаллографических направлений взяты из нашей предыдущей работы [2]. Усложнение магнитной модели по сравнению с [2] прежде всего обусловлено структурными предпосылками анализа топологии обменных связей и желанием более точно воспроизвести все особенности магнитного поведения кристалла $\beta\text{-TeVO}_4$ в высокотемпературной области.

Для реализации поставленных целей сначала потребовалось изучить закономерности трансформации характерных свойств (амплитуды и температурного положения максимума магнитной восприимчивости $\chi(T)$) для низкоразмерной изотропной $J_1\text{-}J_2$ -модели в зависимости от знака и величины отношения амплитуд двух обменов J_1 и J_2 . Гамильтониан для зигзагообразной спиновой системы может быть представлен в виде

$$\mathcal{H} = \sum_i [J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}] - g \mu_B H \sum_i S_i^z,$$

где \mathbf{S}_i — оператор спина $S = 1/2$, g — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, J_1 и J_2 — константы обменной связи между ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Интенсивное теоретическое изучение такого гамильтониана показало, что зигзагообразная цепочка может иметь большое многообразие фаз в нулевом магнитном поле. Так, например, при $J_2 = 0$ система эквивалентна однородной (AFM $J_1 > 0$ или FM $J_1 < 0$) гейзенберговской цепочке с бесщелевым спектром возбуждений [3]; в случае двух антиферромагнитных обменов J_1 и J_2 ($J_1, J_2 > 0$) основным состоянием системы является спиновая жидкость; при дальнейшем увеличении J_2 при значении $\alpha = J_2/J_1 \approx 0,24$ произойдет переход в димерную фазу с открытием щели в спектре возбуждений [4]. В пределе $J_2/J_1 \rightarrow \infty$ система превращается в пару несвязанных друг с другом гейзенберговских цепочек [5]. В случае обменов разного знака — ферромагнитного J_1 ($J_1 < 0$) и антиферромагнитного J_2 ($J_2 > 0$) — основное состояние будет ферромагнитным для $-0,25 < \alpha < 0$ и иметь несоразмерную фазу с $S_{\text{tot}} = S_{\text{tot}}^z = 0$ при $\alpha < -0,25$ [6,7]. Принимая во внимание тот факт, что в высокотемпературной области магнитная восприимчивость $\beta\text{-TeVO}_4$ демонстрирует наличие слабых ферромагнитных спин-спиновых корреляций, в рамках изотропной $J_1\text{-}J_2$ -модели это возможно только в двух случаях обменов разного знака: 1) $J_1 < 0$, $J_2 > 0$ и $|J_1| > J_2$ и 2) $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ и $|J_2| > J_1$. На этих двух случаях мы и сконцентрировали внимание при анализе кривых $\chi(T)$ для различных соотношений между J_1 и J_2 .

Для расчета магнитных характеристик нами использована специализированная программа разработки S. Schäfer (Université d'Aix-Marseille, France), которая позволяла для относительно небольшого числа магнитных узлов ($n = 12, 14, 16$) путем полной диагонализации получить точное решение задачи для опреде-

ленного соотношения между J_1 и J_2 . Восстановлена эволюция кривых $\chi(T)$ для $-2,0 \leq J_1/J_2 \leq 1,5$ с дискретным шагом изменения $\Delta |J_1/J_2| = 0,1$ и построены зависимости χ_{max} и T_{max} от J_1/J_2 . Кроме того, была возможность усложнить задачу расчета и учесть все возможные обменные пути, существующие в кристалле $\beta\text{-TeVO}_4$ и имеющие ненулевую амплитуду (см. обозначения в работе [8]). Хорошо известно, что этот метод расчета имеет ограниченную точность при низких температурах по сравнению с результатом для бесконечной цепочки, что обусловлено возможностью компьютера оперировать только с небольшим числом узлов, но это никак не сказалось на интересующей нас температурной области — район максимума $\chi(T)$ и выше. Сравнение расчетных кривых для $n = 12, 14, 16$ показало, что амплитуда и температурное положение максимума $\chi(T)$ хорошо совпадают независимо от числа узлов.

Используя зависимость $T_{\text{max}}(J_1/J_2)$, можно всегда подобрать пару амплитуд J_1 и J_2 так, чтобы максимум $\chi(T)$ совпадал с экспериментальным значением 14 К. Дополнительным критерием выбора определенной пары амплитуд J_1 и J_2 было воспроизведение всех особенностей температурной зависимости произведения $\chi(T)T$ при $T \geq 50$ К, таких как амплитуда и температурное положение максимума $\chi(T)T$ и его характерное убывание в области высоких температур (см. рис. 1(б)). Используя эти два критерия, можно легко найти, что набор параметров для $J_1\text{-}J_2$ -модели $J_1/k_B = 14,57$ К и $J_2/k_B = -18,95$ К ($g_b = 2,19$; $g_{a,c} = 2,10$) может достаточно хорошо воспроизвести поведение $\chi(T)T$ при $T \geq 50$ К и дать близкое значение ферромагнитной температуры Кюри $\Theta_{FM} = 1/2 |J_1 + J_2| = 2,2$ К, но при этом амплитуда максимума χ_{max} , расположенного при $T_{\text{max}} = 14$ К, будет сильно отличаться от экспериментально наблюдаемого. Таким образом, случай антиферромагнитного обмена J_1 как взаимодействия между ближайшими соседями в зигзагообразной спиновой цепочке, по видимому, не реализуется в $\beta\text{-TeVO}_4$.

Превосходное совпадение модельных расчетов для $J_1\text{-}J_2$ -модели с экспериментальными данными во всем диапазоне температур получено для следующих параметров: $J_1/k_B = -38,33$ К и $J_2/k_B = 29,48$ К ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$) (сплошные линии на рис. 1). При этом в высокотемпературной области $\Theta_{FM} = 4,42; 1,65$ К, что близко к экспериментальному значению. Таким образом, отношение $|J_1|/J_2 = 1,3$ может воспроизвести не только магнитное поведение системы в области максимума $\chi(T)$, но и довольно точно ее высокотемпературный участок. Видимое различие в точности описания по сравнению с предыдущей моделью [2] может быть замечено только на температурной зависимости произведения $\chi(T)T$ при сравнении сплошной и пунктирной линий (Bonner–Fisher fit) для $H \parallel b$ (см. рис. 1(б)).

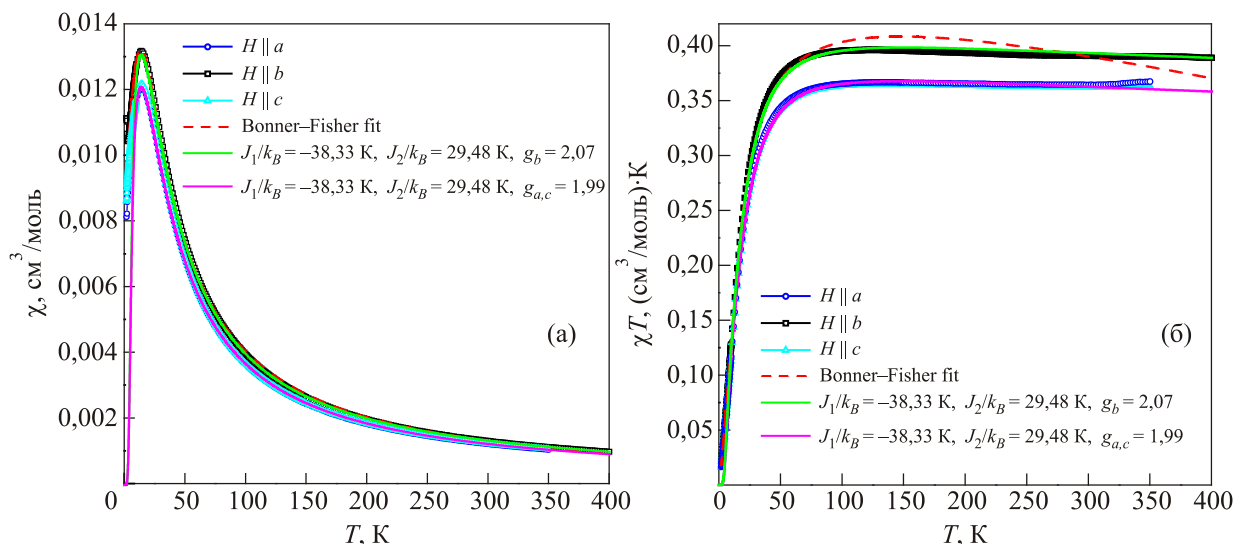


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость магнитной восприимчивости $\chi(T)$ (а) и произведения $\chi(T)T$ (б) монокристалла $\beta\text{-TeVO}_4$ в температурном интервале 2–400 К. Символами обозначены экспериментальные данные для направления магнитного поля вдоль трех кристаллографических осей. Пунктирной линией показан наилучший результат описания для $H\parallel b$, согласно модели однородной антиферромагнитной гейзенберговской спиновой цепочки (см. [2]). Сплошными линиями представлены расчеты $J_1\text{-}J_2$ -модели с параметрами $J_1/k_B = -38,33$ К и $J_2/k_B = 29,48$ К ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$).

В работе представлены результаты всестороннего анализа магнитных свойств монокристалла $\beta\text{-TeVO}_4$ в рамках $J_1\text{-}J_2$ -модели. Показано, что наилучшее согласие с экспериментальными данными может быть достигнуто для $J_1\text{-}J_2$ -модели с параметрами $J_1/k_B = -38,33$ К и $J_2/k_B = 29,48$ К ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$). В отличие от описания в рамках однородной антиферромагнитной спиновой цепочки [2], использование $J_1\text{-}J_2$ -модели позволило не только с высокой точностью воспроизвести положение и амплитуду максимума магнитной восприимчивости $\chi(T)$ при $T_{\text{max}} = 14$ К, но и гораздо лучше воссоздать все особенности магнитного поведения монокристалла $\beta\text{-TeVO}_4$ в высокотемпературной области. Кроме того, полученные оценки компонент g -фактора для иона V^{4+} ($g_b = 2,07$; $g_{a,c} = 1,99$) в рамках $J_1\text{-}J_2$ -модели прекрасно согласуются с данными спектральных исследований (1,99; 1,94). Таким образом, полученный результат дает новый аспект рассмотрения исследуемого кристалла как спиновую систему зигзагообразных цепочек с доминирующим ферромагнитным обменом между ближайшими соседями и антиферромагнитным взаимодействием между следующими за ближайшими соседями. Несмотря на схожесть магнитных свойств $J_1\text{-}J_2$ -модели в низкотемпературной области (особенно в районе максимума $\chi(T)$) с поведением однородной антиферромагнитной спиновой цепочки, конкуренция двух обменов J_1 и J_2 разного знака почти одинаковой амплитуды проявляется в виде слабых суммарных ферромагнитных спин-спиновых корреляций при высоких температурах, что согласуется с экспериментальной величиной $\Theta_{FM} = 4,4$; 1,6 К.

1. S. Sebastian, N. Harrison, C. Batista, L. Balicas, M. Jaime, P. Sharma, N. Kawashima, and I.R. Fisher, *Nature (London)* **441**, 617 (2006).
2. Yu. Savina, O. Bludov, V. Pashchenko, S. Gnatchenko, P. Lemmens, and H. Berger, *Phys. Rev. B* **84**, 104447 (2011).
3. J. Cloizeaux and J.J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
4. F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. B* **25**, 4925 (1982); I. Affleck, D. Gepner, H.J. Schultz, and T. Ziman, *J. Phys. A* **22**, 511 (1989).
5. S.R. White and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).
6. T. Tonegawa and I. Harada, *J. Phys. Soc. J.* **58**, 2902 (1989).
7. S.-L. Drechsler, O. Volkova, A.N. Vasiliev, N. Tristan, J. Richter, M. Schmitt, H. Rosner, J. Málek, R. Klingeler, A.A. Zvyagin, and B. Büchner, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 077202 (2007).
8. A. Saul and G. Radtke, *Phys. Rev. B* **89**, 104414 (2014).

Magnetic properties study of quasi-one-dimensional magnet $\beta\text{-TeVO}_4$ in the frame of the $J_1\text{-}J_2$ model

Yu.O. Savina, A.N. Bludov, V.A. Pashchenko, S.L. Gnatchenko, Yu.V. Savin, S. Schäfer, P. Lemmens, and H. Berger

The magnetic properties of the $\beta\text{-TeVO}_4$ single crystal with a zigzag chain of magnetic centers (ions V^{4+} , $S = 1/2$) are analyzed in the framework of the $J_1\text{-}J_2$ model. The best agreement with the experimental data is obtained for the $J_1\text{-}J_2$ model with pa-

rameters $J_1/k_B = -38.33$ K and $J_2/k_B = 29.48$ K ($g_b = 2.07$; $g_{a,c} = 1.99$). In contrast to the previously used model (the uniform antiferromagnetic spin chain system with $J_1/k_B = 21.4$ K ($g_b = 2.28$; $g_{a,c} = 2.18$)), this improved result allows one to consider the object under study as a zigzag chain system with a dominant ferromagnetic exchange between the nearest neighbors and an antiferromagnetic interaction between the next-nearest neighbors.

PACS: 75.10.Pq Spin chain models;
75.30.Et Exchange and superexchange interactions;
75.40.Cx Static properties (order parameter, static susceptibility, heat capacities, critical exponents, etc.);
75.50.Ee Antiferromagnetics.

Keywords: antiferromagnetics, exchange and superexchange interactions, magnetic susceptibility, models for spin chains, J_1 - J_2 model.