

АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТНЫХ ФАЗ КУБИЧЕСКИХ ГЕЛИМАГНЕТИКОВ

*В. А. Чижиков**

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук
119333, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 ноября 2020 г.,
после переработки 20 ноября 2020 г.
Принята к публикации 3 декабря 2020 г.

Магнитные фазы кубических хиральных ферромагнетиков с взаимодействием Дзялошинского–Мория (MnSi , Cu_2OSeO_3) исследуются в рамках микроскопического и феноменологического подходов. Показано, что взаимодействие магнитных моментов атомов с локальным кристаллическим полем приводит к возникновению кубического анизотропного члена в энергии Ландау–Лифшица вида $M_x^4 + M_y^4 + M_z^4$ (M — поле намагниченности). Этот член отвечает за существование геликоидальной фазы при близком к нулю магнитном поле, а в более высоких полях может вносить вклад в устойчивость магнитной фазы A . Проведено моделирование фазы A при разных магнитных полях. Показано, что при включении магнитного поля спирали в геликоидальной фазе приобретают эллиптическую и коническую составляющие.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040076

1. ВВЕДЕНИЕ

Спиральный порядок в природе возникает в очень непохожих друг на друга системах, от физики конденсированного состояния до биологии [1], и служит важным примером примитивной самоорганизации. Эта самоорганизация может создавать довольно сложные структуры, такие как голубые фазы в холестерических жидких кристаллах [2, 3] или скирмионные текстуры в хиральных кубических магнетиках (MnSi , MnGe , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, Cu_2OSeO_3 и др.) [4–9]. При этом в физике столь различных систем наблюдается замечательное сходство [10–12]. Тем не менее в каждом отдельном случае за возникновение макроскопической спирали ответственны свои собственные микроскопические механизмы, и требуется приложить немалые усилия для их отыскания. В частности, необходимо установить взаимосвязь между параметрами локальных взаимодействий в системе и ее конечной структурой. Например, первый вопрос — что определяет период и направление спиралей? С другой стороны, описание микроскопи-

ческой спиновой структуры важно как для приложений (спинтроника, мультиферроики [13–15]), так и для фундаментальных проблем, таких как топологический эффект Холла [16].

Начиная с открытия хиральных магнитных свойств MnSi в 1976 г. [17, 18] по сегодняшний день наиболее часто используемым методом описания и предсказания закрученных магнитных структур остается феноменологическая теория, основанная на свободной энергии Ландау–Лифшица с добавочным членом, впервые предложенным Дзялошинским [19, 20]. Однако данный подход, в котором используются наши знания о симметрии физической системы, ничего не может сказать о значениях входящих в свободную энергию коэффициентов и о том, как они связаны с реальными межатомными взаимодействиями.

Микроскопические теории, такие как модель классического гейзенберговского ферромагнетика со спин-орбитальным членом, изначально разработанная Мория [21, 22], в свою очередь обладают тем недостатком, что количество переменных, включающее спины всех магнитных атомов, бесконечно, и поэтому эти модели сложно использовать в любых аналитических расчетах. Тем не менее, несмотря на некоторые сомнения в справедливости модели Гей-

* E-mail: chizhikov@crys.ras.ru

зенберга для зонных магнетиков, она часто используется для численного моделирования [12, 23–25]. Для этой модели необходимо знать параметры межспиновых взаимодействий: константы J_{ij} изотропного обмена между i -м и j -м атомами и (псевдо)векторы \mathbf{D}_{ij} антисимметричного обмена Дзялошинского–Мория. Эти параметры можно получить двумя способами: из сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными и посредством вычислений *ab initio* [26, 27].

Два этих подхода, микроскопический и феноменологический, на протяжении многих лет использовались для описания одних и тех же магнитных структур, хорошо дополняя друг друга. Тем не менее осуществить корректный переход от одной модели к другой долго не удавалось даже для такого простого случая, как MnSi. Здесь переход, в частности, подразумевает выражение констант, входящих в энергию Ландау–Лифшица континуальной модели, через параметры J_{ij} , \mathbf{D}_{ij} гейзенберговской модели. Обратный переход, очевидно, неоднозначен в силу большого числа микроскопических параметров. В работах [28, 29] такой переход был впервые осуществлен для кристаллов MnSi в приближении взаимодействия ближайших соседей. Важным побочным результатом этой работы стало предсказание и описание антиферромагнитных спиновых скосов, которые являются неотъемлемой особенностью магнитной структуры закрученных ферромагнетиков, влияющей на волновое число k спиновых спиралей. Далее подход был сначала расширен за счет учета взаимодействий со следующими соседями в MnSi [30] и, наконец, обобщен на случай других кубических гелимагнетиков, включая Cu_2OSeO_3 [31]. Для мультиферроика Cu_2OSeO_3 спиновые скосы играют дополнительную важную роль, осуществляя связь магнитной структуры с электрической поляризацией [32].

Однако программа объединения микроскопического и феноменологического описаний кубических хиральных ферромагнетиков пока остается не вполне завершенной. Хотя высокая симметрия кристаллической решетки и позволяет в отдельных случаях полагать магнитные свойства системы изотропными, слабая кубическая анизотропия может проявлять себя, например, в ориентации магнитной структуры относительно кристаллических осей. Анизотропные члены вносят меньший вклад в энергию Ландау–Лифшица, чем взаимодействие Дзялошинского–Мория, тем не менее именно они отвечают за существование геликоидальной фазы в слабом магнитном поле. В данной работе

будет показано, как микроскопические причины, в частности взаимодействие спинов с локальным кристаллическим полем, могут вызывать появление анизотропных членов в энергии. Также будут рассмотрены некоторые следствия анизотропии, в том числе ориентация спиралей в геликоидальной фазе, преимущественные направления намагничивания конической фазы и вклад анизотропии в устойчивость фазы A кубических гелимагнетиков.

2. КУБИЧЕСКИЕ ХИРАЛЬНЫЕ ФЕРРОМАГНЕТИКИ

Гелимагнетики представляют собой особый подвид магнитных кристаллов, в которых локальное упорядочение спинов (ферро-, ферри- или антиферромагнитное) сопровождается закруткой на масштабах, много больших элементарной ячейки. Причиной столь необычного поведения может служить, например, конкуренция между ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями на фрустрированной решетке спинов. В данной работе мы сосредоточимся на другой возможной причине появления закрученных магнитных структур, а именно, на антисимметричном обмене Дзялошинского–Мория. Рассмотрим ряд условий, способствующих возникновению гелимагнетизма такого рода.

1) Низкая симметрия межатомных связей обуславливает возникновение взаимодействия Дзялошинского–Мория между магнитными атомами. Заметим, что внутри одного кристаллического класса более низкой симметрией атомных позиций и связей обладают кристаллы несимморфных групп.

2) Отсутствие зеркальной и инверсионной симметрии приводит к возникновению магнитных спиралей с определенным направлением закрутки — правых или левых геликоид. В принципе, закрутка может возникать и в кристаллах с центром инверсии как следствие спонтанного нарушения симметрии. Однако в первом случае дополнительного нарушения симметрии не требуется и спиральные структуры возникают закономерно.

3) Поскольку взаимодействие Дзялошинского–Мория является слабым спин-орбитальным эффектом, оно проявляется лучше на фоне ослабленного изотропного обмена. Как следствие, гелимагнетики обычно имеют низкую температуру перехода от парамагнитного порядка к магнитному.

Рассмотренные в данной работе кристаллы, MnSi и Cu_2OSeO_3 , удовлетворяют вышеперечисленным условиям. Оба обладают кубической хиральной

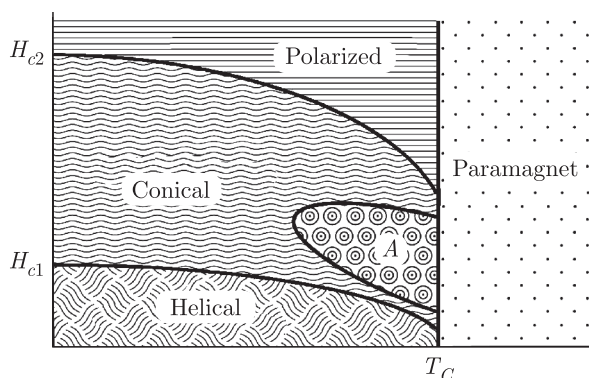


Рис. 1. Фазовая диаграмма кубического хирального ферромагнетика. Ниже критической температуры T_C существует ряд фаз, зависящих от магнитного поля. Критические поля H_{c1} и H_{c2} разделяют геликоидальную, коническую и поляризованную ферромагнитную фазы. Вблизи точки Кюри находится область существования загадочной фазы A с двойной закруткой

несимметричной пространственной группой $P2_13$ и низкой температурой перехода из парамагнитной в упорядоченную ферро- (MnSi , $T_C = 29$ К) или ферри- (Cu_2OSeO_3 , $T_C = 58$ К) магнитную фазу.

Другое замечательное свойство этих кристаллов заключается в том, что, благодаря высокой точечной симметрии, спиновые спирали могут почти свободно ориентироваться магнитным полем вдоль произвольного направления. Вследствие этого в кубических гелимагнетиках наблюдается интересное фазовое разнообразие [8, 9].

2.1. Фазовая диаграмма

В кристаллах типа MnSi и Cu_2OSeO_3 температуру фазового перехода из парамагнитного состояния в магнитное часто называют точкой Нееля, подразумевая при этом, что, благодаря пространственным осцилляциям поля намагниченности, суммарный магнитный момент геликоидальной фазы равен нулю. Однако правильнее было бы определить магнитное состояние не как антиферромагнетик, а как «закрученный ферромагнетик» и, соответственно, температуру перехода как точку Кюри, поскольку это состояние характеризуется ненулевой локальной намагниченностью, а периоды осцилляций во много раз превышают параметр элементарной ячейки кристалла. Это, в частности, позволяет отличить данный случай от случая «закрученного антиферромагнетика», который также встречается в природе [33].

На рис. 1 схематично изображена фазовая диаграмма хирального кубического ферромагнетика. При температурах намного ниже точки Кюри выделяют три фазы — геликоидальную, коническую и поляризованную ферромагнитную — с фазовыми переходами по магнитному полю между ними. Эти фазы, различающиеся главным образом по поведению магнитной восприимчивости, структурно весьма похожи. Действительно, геликоидальную и поляризованную структуры можно считать частными случаями конической: в первой из них равна нулю высота конуса, во второй — радиус его основания. Фактически геликоида приобретает коническую составляющую уже при приложении минимального магнитного поля, а критическое значение поля H_{c1} определяется, как будет обсуждаться позднее, переориентацией оси спирали вдоль направления поля.

Наиболее интригующей фазой безусловно является так называемая фаза A , возникающая вблизи точки Кюри при промежуточных значениях магнитного поля [34–41]. Расположение на фазовой диаграмме позволяет предположить, что за появление фазы A отвечают механизмы, схожие с теми, что приводят к появлению голубых фаз в холестерических жидких кристаллах. В настоящий момент считается установленным, что фаза A представляет собой треугольную решетку стабилизированных полем линейных топологических дефектов — скирмионов (рис. 2а) [4–7, 35, 42, 43]. Намагниченность в фазе A закручена вокруг ориентированных вдоль магнитного поля ядер скирмионов, а на самих ядрах — опрокинута против поля. Очевидная энергетическая невыгодность этого опрокидывания компенсируется выгодой от двойной закрутки поля намагниченности, что углубляет аналогию с голубыми фазами. На рис. 2б показана элементарная ячейка магнитной структуры фазы A с элементами симметрии. Компонента намагниченности вдоль поля обозначена цветовым градиентом, проекция поля намагниченности на плоскость — стрелками. Всем осям симметрии соответствуют сингулярности, в которых намагниченность строго параллельна магнитному полю: осям b — вихри-скирмионы, осям 3 — вихри, осям 2 — антивихри (2π -дисклинации). Кроме того, симметрия включает магнитные псевдооси $2'$, перпендикулярные полю. Магнитная группа $p62'2'$ [44].

2.2. Микроскопический и феноменологический подходы

Закрученные магнитные структуры хиральных кубических ферромагнетиков, таких как MnSi и

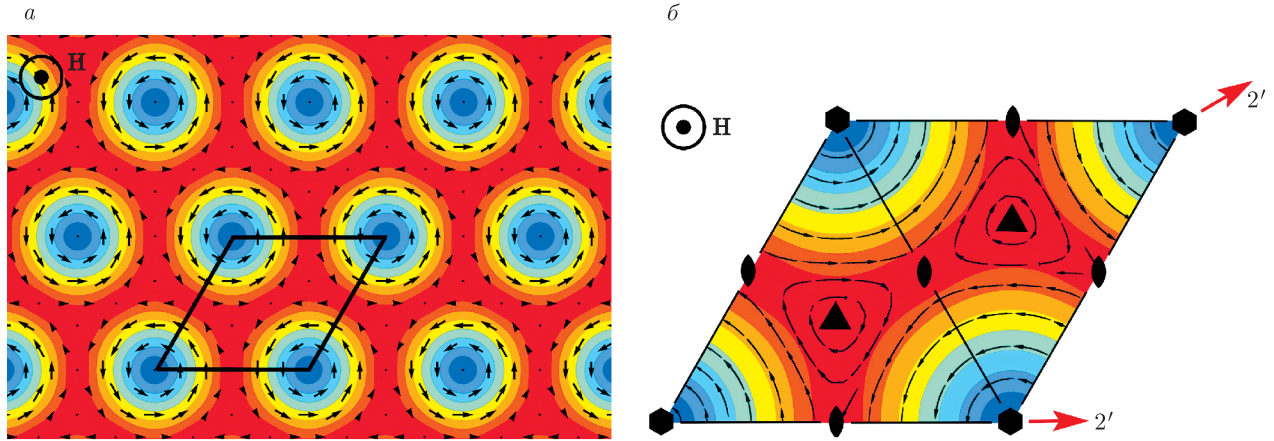


Рис. 2. (В цвете онлайн) Фаза *A* хирального кубического ферромагнетика (а) и ее элементарная ячейка с элементами симметрии (б). Цветовой градиент обозначает проекцию намагниченности на направление магнитного поля: красный — по полю, синий — против поля. Стрелки — проекции поля намагниченности на плоскость, перпендикулярную полю

Cu_2OSeO_3 , могут описываться в рамках микроскопического подхода, основанного на энергии Гейзенберга [23], либо феноменологически с энергией Ландау – Лифшица [45, 46]. Энергия гейзенберговского магнетика имеет вид

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (-J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]) - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{s}_i, \quad (1)$$

где суммирование ведется по магнитным атомам (*i*) и их соседям (*j*), \mathbf{s} — классические спины ($|\mathbf{s}| = 1$), J_{ij} — константы изотропного обмена, \mathbf{D}_{ij} — псевдовекторы Дзялошинского – Мориа. В работах [28–31] был осуществлен переход от соотношения (1) к выражению для плотности энергии Ландау – Лифшица:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \mathcal{J} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} + \mathcal{D} \boldsymbol{\mu} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - M_0 \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad (2)$$

где $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M}/M$ — направление вектора намагниченности; здесь предполагается, что плотность магнитного момента имеет постоянное абсолютное значение $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| \approx M_0$, что практически верно при температурах достаточно ниже точки Кюри. Коэффициенты \mathcal{J} и \mathcal{D} вычисляются согласно формулам [31]

$$\mathcal{J} = \frac{1}{6} \sum_i \sum_j J_{ij} \tilde{r}_{ij}^2, \quad (3)$$

$$\mathcal{D} = -\frac{1}{6} \sum_i \sum_j \mathbf{D}_{ij} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (4)$$

где суммирование по *i* теперь ведется по атомам внутри элементарной ячейки. Здесь $\tilde{\mathbf{r}}_{ij} = \tilde{\mathbf{r}}_j - \tilde{\mathbf{r}}_i$ — расстояния между некоторыми идеальными положениями двух атомов, также называемыми «обменными» [30, 31], которые находятся из системы уравнений

$$\sum_j J_{ij} \tilde{\mathbf{r}}_{ij} = 0. \quad (5)$$

Заметим, что константы \mathcal{J} и \mathcal{D} не могут зависеть от реальных координат атомов, поскольку реальные координаты не входят в выражение для энергии (1). При выводе формул (2)–(4) за единицу длины принимался период кристаллической решетки. Предполагается, что изменения магнитной структуры происходят на масштабах, много больших элементарной ячейки кристалла. Плотность энергии в произвольных единицах измерения длины есть $\mathcal{E}/V_{u.c.}$, где $V_{u.c.}$ — объем ячейки.

Формулы (3) и (4) позволяют вычислить из первых принципов волновое число магнитных спиралей, $k = \mathcal{D}/\mathcal{J}$. В закрученных ферромагнетиках $\mathcal{J} > 0$ и знак *k*, определяющий направление закрутки геликоид, совпадает со знаком псевдоскаляра \mathcal{D} . Таким образом, выражение (4) устанавливает связь между структурной хиральностью кристалла и хиральностью его магнитных свойств. Эта связь исследовалась экспериментально и теоретически в целом ряде работ [47–52].

Есть одна особенность микроскопической спиновой структуры, которая не описывается феноменологической теорией. Она заключается в том, что каждый спин \mathbf{s}_i отклоняется от направления по-

ля намагниченности $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}_i)$ в точке, где он находится [29]:

$$\mathbf{s}_i = \boldsymbol{\mu} + \Delta\mathbf{s}_{i\perp} + \Delta\mathbf{s}_{i\parallel}, \quad (6)$$

где $\Delta\mathbf{s}_{i\perp}$ — перпендикулярный к $\boldsymbol{\mu}$ малый скос, а $\Delta\mathbf{s}_{i\parallel} = -(\Delta\mathbf{s}_{i\perp})^2\boldsymbol{\mu}/2$ — вызванное скосом уменьшение проекции спина на направление намагниченности. В первом приближении имеем

$$\Delta\mathbf{s}_{i\perp} = ((\tilde{\mathbf{r}}_i - \mathbf{r}_i) \cdot \nabla)\boldsymbol{\mu} + [\boldsymbol{\rho}_i \times \boldsymbol{\mu}], \quad (7)$$

где первое слагаемое связано с разницей реальных и обменных координат атомов, а второе описывает скосы спинов из-за взаимодействия Дзялошинского–Мория; углы скосов $\boldsymbol{\rho}$ вычисляются из уравнений [31]

$$\sum_j J_{ij}(\boldsymbol{\rho}_i - \boldsymbol{\rho}_j) = \sum_j \mathbf{D}_{ij}. \quad (8)$$

Скосы дают вклад в энергию (2), учтенный в константах \mathcal{J} и \mathcal{D} .

3. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МАГНИТНЫХ ФАЗ

Выражение (2) для плотности энергии содержит несколько физических констант, что создает впечатление многопараметричности задачи. Можно, однако, перейти к безразмерным величинам, используя замены

$$\mathbf{r}_{new} = \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{J}}\mathbf{r}_{old}, \quad \mathcal{E}_{new} = \frac{\mathcal{J}}{\mathcal{D}^2}\mathcal{E}_{old}$$

и вводя параметр

$$\mathbf{h} \equiv \frac{\mathcal{J}M_0}{\mathcal{D}^2}\mathbf{H} = \frac{\mathbf{H}}{H_{c2}},$$

где H_{c2} — критическое поле, выше которого магнитная структура вырождается до однородной. Тогда формула (2) преобразуется к виду

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} + \boldsymbol{\mu} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad (9)$$

и задача становится однопараметрической, причем все нетривиальные магнитные фазы, включая геликоидальную, коническую фазы и фазу A , помещаются в диапазоне $0 \leq h < 1$.

Приравнивая нулю вариацию энергии магнитной структуры, получаем

$$\int \delta \mathcal{E} dV = - \int (\mathbf{h}_{eff} \cdot \delta \boldsymbol{\mu}) dV = 0, \quad (10)$$

где

$$\mathbf{h}_{eff}(\boldsymbol{\mu}) = \Delta \boldsymbol{\mu} - 2[\nabla \times \boldsymbol{\mu}] + \mathbf{h} \quad (11)$$

— действующее на $\boldsymbol{\mu}$ эффективное локальное поле.

Поскольку $|\boldsymbol{\mu}| = 1$, то $\delta \boldsymbol{\mu} \perp \boldsymbol{\mu}$ и равенство (10) выполняется, если $\mathbf{h}_{eff} \parallel \boldsymbol{\mu}$, или

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{h}_{eff}/h_{eff}, \quad (12)$$

где знак выбран таким образом, чтобы соответствовать известному решению для конической спирали, когда $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{h}_{eff}$.

Энергия (9) является «изотропной» в том смысле, что она не зависит от ориентации магнитной структуры относительно кристаллических осей. Тем не менее известные решения (11), (12), такие как геликоида, коническая фаза и фаза A , имеют более низкую симметрию, чем сами уравнения. Изотропия же уравнений приводит к тому, что эти низкосимметричные решения могут быть ориентированы произвольным образом относительно кристалла. Как будет показано в разд. 5, добавление к выражению (9) анизотропных членов может привести к выбору преимущественной ориентации решений. В данном разделе мы ограничимся рассмотрением изотропного случая, не считая нескольких общих замечаний, которые необходимо сделать, говоря о геликоидальной фазе.

3.1. Коническая фаза

С точностью до констант и дивергентных членов плотность энергии (9) можно переписать в виде

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu} + [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - \mathbf{h})^2 + \frac{1}{2}(\nabla \cdot \boldsymbol{\mu})^2. \quad (13)$$

Очевидно, что энергия имела бы минимум для совместного решения уравнений

$$\boldsymbol{\mu} + [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] = \mathbf{h}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} = 0. \quad (14)$$

Такое решение существует и представляет собой закрученную вдоль поля коническую спираль:

$$\boldsymbol{\mu} = \sin \theta (\mathbf{e}_1 \cos z + \mathbf{e}_2 \sin z) + \mathbf{e}_3 \cos \theta, \quad (15)$$

где $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ — ортонормированный базис, $z \equiv \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_3$ — координата вдоль оси спирали, $\mathbf{e}_3 \parallel \mathbf{h}$ и $\cos \theta = h$. Заметим, что двойная закрутка вектора $\boldsymbol{\mu}$ может оказаться локально более выгодной, однако, благодаря пространственным фрустрациям, глобальный минимум энергии достигается на структуре, закрученной вдоль одного направления. Среднее значение магнитного момента направлено вдоль поля, $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$, и, таким образом, коническая фаза имеет скалярную магнитную восприимчивость $\chi_c = 1$ ($\chi_c = M_0/H_{c2}$ в размерных величинах).

Подставляя выражение (15) в (9), получим плотность энергии конической спирали:

$$\mathcal{E}_c = -\frac{1}{2} - \frac{h^2}{2}. \quad (16)$$

При $h \geq 1$ конус схлопывается ($\cos \theta = 1$) и коническая фаза переходит в поляризованную. При этом магнитная восприимчивость резко убывает, $\chi \rightarrow 0$, и ее отличие от нуля теперь обусловлено сохраняющимися скосами магнитных моментов, которые медленно уменьшаются при увеличении поля.

3.2. Геликоидальная фаза

В области малых магнитных полей, $h \lesssim h_{c1} \equiv H_{c1}/H_{c2} \ll 1$, вследствие кубической анизотропии кристалла ось магнитной геликоида выстраивается вдоль кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$ в зависимости от знака коэффициента при анизотропном члене [45, 46]. Как правило, структура распадается на домены, характеризующиеся выбором одного из эквивалентных направлений оси. Направление магнитного поля может не совпадать с направлением волнового вектора, что должно приводить к искажению геликоида. Так, если магнитное поле перпендикулярно оси, то геликоида переходит в эллиптическую спираль, подобную той, что возникает в холестерических и хиральных смектических жидких кристаллах при схожих условиях [53]. В случае, когда поле направлено вдоль геликоида, появляется коническая спираль с высотой конуса $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$. Легко предположить, что при произвольной взаимной ориентации поля и оси спирали в области малых h будет возникать коническо-эллиптическая спираль, описываемая выражением

$$\boldsymbol{\mu} = \sin \theta (\mathbf{e}_1 \cos \varphi + \mathbf{e}_2 \sin \varphi) + \mathbf{e}_3 \cos \theta, \quad (17)$$

где ось спирали направлена по $\mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{n}$ и при $\mathbf{h} = (h_\perp, 0, h_\parallel)$ в базисе $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ тригонометрические функции φ выражаются через эллиптические функции Якоби:

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= 2\text{sn}^2(\lambda z; m) - 1, \\ \sin \varphi &= -2\text{sn}(\lambda z; m)\text{cn}(\lambda z; m), \end{aligned} \quad (18)$$

где z — координата вдоль оси спирали. Минимизируя энергию, в первом приближении по малому параметру h получим

$$\cos \theta \approx h_\parallel, \quad m \approx 4h_\perp, \quad \lambda \approx 1/2 + h_\perp/2 \quad (19)$$

(см. Приложение). Средний по структуре магнитный момент имеет коническую составляющую

$\cos \theta$ вдоль оси \mathbf{n} и эллиптическую составляющую $\langle \cos \varphi \rangle \approx m/8$ вдоль \mathbf{e}_1 :

$$\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = (\langle \cos \varphi \rangle, 0, \cos \theta) \approx (h_\perp/2, 0, h_\parallel), \quad (20)$$

или, в произвольной установке,

$$\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \frac{\mathbf{h}}{2} + \frac{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}}{2}. \quad (21)$$

Средняя по коническо-эллиптической спирали плотность энергии равна

$$\langle \mathcal{E}_{ce} \rangle = -\frac{1}{2} - \frac{3h^2}{8} - \frac{h^2}{8} \cos 2\gamma, \quad (22)$$

где γ — угол между магнитным полем и направлением оси спирали.

В многодоменной структуре при $h \rightarrow 0$ и одинаковой встречаемости доменов с разными \mathbf{n} усреднение выражения (21) по точечной группе 23 дает $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = 2\mathbf{h}/3$ (использовано $\langle n_\alpha n_\beta \rangle_{23} = (1/3)\delta_{\alpha\beta}$), т. е. магнитная восприимчивость геликоидальной фазы составляет две трети от восприимчивости конической фазы. Этот результат был получен экспериментально [54–56]. При увеличении h домены постепенно переориентируются в направлении магнитного поля, и магнитная восприимчивость должна испытать скачок вблизи $h = h_{c1}$, для того чтобы намагниченность могла выйти на режим $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$ для конической спирали. Из выражения (21) тензор магнитной восприимчивости спирали в близком к нулю магнитном поле может быть записан как

$$\chi_{\alpha\beta} = \chi_\parallel n_\alpha n_\beta + \chi_\perp (\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta),$$

$$\chi_\parallel = \chi_c, \quad \chi_\perp = \chi_c/2.$$

В работах [56, 57] этот результат был получен в приближении среднего поля.

4. ФАЗА А

Наибольший интерес у исследователей вызывает фаза А, устойчивая в ограниченной области фазовой диаграммы T – H [35, 36, 38–40]. По шкале температур она представлена в узкой области ниже точки Кюри, что роднит ее с голубыми фазами холестерических жидких кристаллов. Очевидно, как и в случае холестериков, для устойчивости фазы А важна возможность изменения абсолютной величины параметра порядка (здесь — намагниченности) вблизи критической температуры. По магнитному полю фаза А расположена вблизи $H_{c2}/2$ и снизу и сверху

ограничена конической фазой. Нейтронографические исследования показывают, что фаза A раскладывается на три перпендикулярные полю спирали с углами $2\pi/3$ между ними [35–37, 40, 41]. Структурно ее часто описывают как треугольную решетку линейных топологических дефектов — скирмионов, обладающую гексагональной симметрией [7, 35, 42, 43]. Оси скирмионов параллельны полю, а намагниченность меняется в плоскости, перпендикулярной полю.

Распределение намагниченности в фазе A можно разложить в ряд Фурье:

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (23)$$

где векторы \mathbf{k} раскладываются по базису обратной решетки:

$$\mathbf{k}_1 = k_0(1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_2 = k_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right),$$

k_0 — волновое число главных спиралей, видимых в нейтронографическом эксперименте. Условие действительности поля $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$ сводится к $\boldsymbol{\mu}_{-\mathbf{k}} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}^*$.

Усредненная плотность энергии (9) по пространству, находим выражение

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (k^2 |\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|^2 + i\mathbf{k} \cdot [\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}^*]) - \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\mu}_0, \quad (24)$$

которое в отсутствие дополнительных условий легко минимизируется спиралями вида

$$\text{Re } \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \perp \text{Im } \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \perp \mathbf{k}, \quad |\text{Re } \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}| = |\text{Im } \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|.$$

Однако дополнительное усложнение вытекает из условия унимодулярности поля $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$, которое записывается в виде свертки:

$$\sum_{\mathbf{k}'} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \cdot \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}'} = \begin{cases} 1, & \mathbf{k} = 0, \\ 0, & \mathbf{k} \neq 0. \end{cases} \quad (25)$$

В частности, при $\mathbf{k} = 0$ это приводит к условию нормировки

$$\langle \mu^2(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} |\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (26)$$

С учетом условия (25) минимизация выражения (24) становится непростой задачей, которую приходится решать численным моделированием.

Скажем несколько слов о волновом числе k_0 главных спиралей. Часто утверждают, что $|k_0| = |\mathcal{D}|/\mathcal{J}$ (в принятых здесь безразмерных единицах $k_0 = 1$), т. е. спирали фазы A имеют тот же период, что и коническая фаза. Действительно, каждое слагаемое в круглых скобках в (24) минимально

при $k = 1$. Однако, вследствие того что сумма (24) включает спирали с волновыми числами, кратными k_0 , «энергетическое давление» высоких гармоник должно приводить к уменьшению величины k_0 , которая, таким образом, должна быть меньше единицы. Отметим, что нейтронографические исследования, как правило, не показывают высоких гармоник, что объясняется малым удельным весом последних.

4.1. Простая модель с тремя геликоидами

Рассмотрим в качестве примера примитивную модель фазы A , имеющей ненулевую среднюю намагниченность $\boldsymbol{\mu}_0 \parallel \mathbf{h}$ и шесть главных гармоник с $k_0 = 1$, образующих три спирали с углами $2\pi/3$ между ними. Примем, что выполняется условие нормировки (26), при этом нарушается более общее условие унимодулярности (25). Минимизация выражения (24) дает $\mu_0 = h$ и среднюю плотность энергии, в точности равную плотности энергии (16) конической фазы. Подчеркнем, что данный результат возможен только благодаря отказу от условия унимодулярности.

Поле намагниченности имеет вид

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = h\mathbf{e}_3 + \sum_{s=1}^3 \{ \boldsymbol{\mu}_s \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) + \text{с.с.} \}, \quad (27)$$

где $\mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{h}/h$, индекс « s » нумерует спирали, волновые векторы

$$\mathbf{k}_1 = (1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_{2,3} = \left(-\frac{1}{2}, \pm \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right),$$

а амплитуды задаются выражением

$$\boldsymbol{\mu}_s = \sqrt{\frac{1-h^2}{12}} \exp(i\phi_0) (-\mathbf{e}_3 + i[\mathbf{k}_s \times \mathbf{e}_3]), \quad (28)$$

удовлетворяющим условию нормировки. Что касается условия унимодулярности, то оно хорошо удовлетворяется в некоторой области вблизи $h = 1/2$. Решим, например, задачу минимизации величины $\langle (\mu^2 - 1)^2 \rangle = \langle \mu^4 \rangle - 1$, характеризующей отклонение поля $\boldsymbol{\mu}$ от унимодулярности. Из (27), (28) получаем выражение

$$\langle \mu^4 \rangle - 1 = (1 - h^2) \times \left[(19h^2 + 5)/12 - h\sqrt{3(1-h^2)} \cos 3\phi_0 \right], \quad (29)$$

имеющее минимум при $\phi_0 = 0$, что соответствует гексагональной симметрии и расположению ядра

скирмиона в вершине элементарной ячейки (решения $\phi_0 = \pm 2\pi/3$ приводят к смещению начала координат). Таким образом, из данной модели следует гексагональная симметрия скирмионной решетки. Минимум $\langle \mu^4 \rangle - 1$, приблизительно равный 0.029, достигается при $h = 0.409$, что хорошо согласуется с расположением фазы A на фазовых диаграммах, получаемых в экспериментах.

4.2. Численное моделирование фазы A

Поскольку энергия (9) достигает минимума на конической фазе, для моделирования фазы A необходимо минимизировать энергию при дополнительных условиях, задающих точечную симметрию и периодичность. Из экспериментов по дифракции нейтронов известно, что фаза A имеет ось 6-го или, возможно, 3-го порядка, параллельную приложенному магнитному полю [35–37, 40, 41]. В перпендикулярной полю плоскости структура периодическая с базисом обратной решетки

$$\mathbf{k}_1 = k_0(1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_2 = k_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right).$$

Учитывая (12), устойчивое состояние можно искать методом медленного дрейфа унимодулярного поля $\boldsymbol{\mu}$ в направлении эффективного поля $\mathbf{h}_{eff}(\boldsymbol{\mu})$. В качестве стартового состояния можно взять, например, поле простой модели из предыдущего раздела, приведя его к унимодулярному: $\boldsymbol{\mu} \rightarrow \boldsymbol{\mu}/\mu$.

Вариационный метод позволяет отыскать лишь локально устойчивую магнитную структуру, но не минимизирует полную энергию системы. Это, в частности, означает, что невозможно определить период структуры и обратную ему величину k_0 . Однако, при заданных амплитудах $\boldsymbol{\mu}_k$, равновесный период может быть вычислен минимизацией энергии (24), представляющей собой квадратичную функцию k_0 . Заметим, что изменение k_0 не приведет к нарушению условия унимодулярности (25). Для отыскания глобального минимума энергии необходимо чередовать процесс дрейфа и вычисление k_0 . Однако нельзя утверждать, что наблюдаемая в эксперименте фаза A достигает минимума энергии. Действительно, поскольку фаза A представляет собой решетку скирмионов, любое изменение периодичности приводит к рождению/уничтожению топологических дефектов — процессу, который без нарушения непрерывности может происходить только на границе кристалла. Сложность образования/уничтожения скирмионов может привести к то-

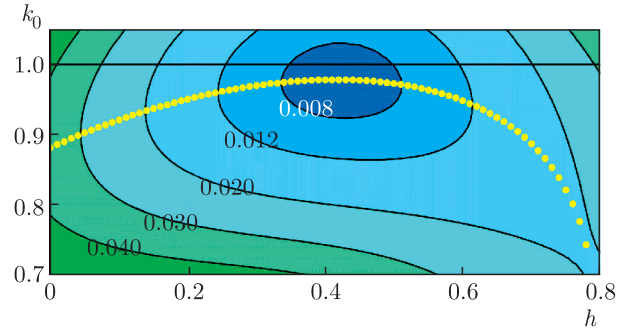


Рис. 3. (В цвете онлайн) Разность $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$ средних плотностей энергий фазы A (моделирование) и конической фазы как функция величины магнитного поля h и волнового числа главных спиралей k_0 . Энергия конической фазы вычислена для $k = 1$. Желтые точки соответствуют глобальному минимуму энергии фазы A при заданном значении поля

му, что периоды решетки не будут меняться при изменении поля, но будут сохранять свои значения, полученные в момент возникновения фазы A . Поэтому имеет смысл проводить моделирование в зависимости не от одного, а сразу от двух параметров: h и k_0 .

На рис. 3 показаны результаты вычисления средней плотности энергии фазы A в зависимости от h и k_0 . Энергия отсчитывается от энергии конической фазы (16) при том же значении магнитного поля и $k = 1$. Желтая кривая отмечает глобальный минимум энергии при заданном значении поля. Видно, что разница энергий минимальна в некоторой окрестности $h = 1/2$, что соответствует области существования фазы A , наблюдаемой в эксперименте. В этой области оптимальное значение k_0 достигает максимума, приблизительно равного 0.978. Отметим, что соответствующее минимуму энергии значение k_0 всегда меньше единицы, что объясняется давлением со стороны высоких гармоник.

На рис. 4 изображены дифракционные картины фазы A по результатам моделирования для нескольких пар параметров h, k_0 . Площади изображающих пики кругов пропорциональны квадратам амплитуд $|\boldsymbol{\mu}_k|^2$. Центральный пик соответствует квадрату средней намагниченности μ_0^2 фазы A . Параметры $k_0 = 0.978, h = 0.41$ соответствуют минимальной разнице энергий $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$. Для сравнения приведены две дифракционные картины для структур с тем же периодом, вычисленные при других значениях поля ($h = 0, h = 0.8$). Видно, что бóльшая устойчивость фазы A связана с меньшим весом высоких гармоник. Отметим, что оптимальная для существования

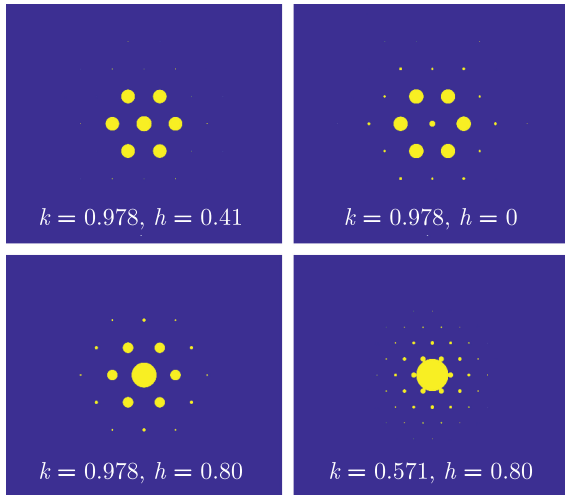


Рис. 4. (В цвете онлайн) Дифракционные картины фазы A по результатам моделирования. Площади кружков пропорциональны квадратам амплитуд $|\mu_k|^2$. Параметры $k_0 = 0.978$, $h = 0.41$ отвечают наименьшей разности энергий между фазой A и конической фазой при $k = 1$

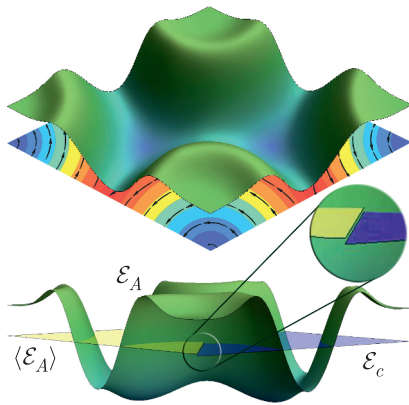


Рис. 5. (В цвете онлайн) Распределение плотности энергии фазы A по элементарной ячейке по результатам моделирования с параметрами $h = 0.41$, $k_0 = 0.978$. Для сравнения показаны средняя плотность энергии $\langle \mathcal{E}_A \rangle$ (желтый уровень) и энергия конической фазы \mathcal{E}_c при том же значении поля (синий уровень)

фазы A величина магнитного поля $h \approx 0.41$ близка к значению, полученному в простой модели трех геликоид.

В отличие от конической фазы с ее всюду одинаковой плотностью энергии, энергия фазы A неравномерно распределена по элементарной ячейке. На рис. 5 показана плотность энергии по результатам моделирования фазы A для наиболее устойчивого случая с параметрами $h = 0.41$, $k_0 = 0.978$. Как и ожидалось, плотность энергии максимальна вблизи

скирмионов, где намагниченность направлена противоположно магнитному полю. При этом в центре ядра наблюдается небольшой прогиб как следствие двойной закрутки. Усредненная по ячейке энергия $\langle \mathcal{E}_A \rangle$ обозначена на рисунке желтым уровнем. Синий уровень соответствует энергии \mathcal{E}_c конической фазы при том же значении поля. Видно, что, несмотря на сильную неоднородность распределения энергии, разница $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$ очень мала. Как следствие, любой неучтенный физический фактор может повлиять на устойчивость фазы A , сделав ее энергетически более выгодной, чем коническая фаза. Среди таких факторов следующие:

- 1) флуктуации намагниченности вблизи точки Кюри (как уже было замечено, этим может объясняться температурный диапазон существования фазы A);
- 2) влияние поверхности (по всей видимости, это один из главных факторов устойчивости фазы A в тонких пленках [38, 39, 58]);
- 3) дискретность распределения магнитных атомов;
- 4) неучтенные в энергии члены более высоких порядков малости, в том числе члены с кубической анизотропией.

Последняя из перечисленных выше возможностей, а именно влияние анизотропных членов на устойчивость фаз хирального кубического ферромагнетика, будет рассмотрена в следующем разделе.

5. КУБИЧЕСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ

Можно предложить два различных механизма появления анизотропных членов в энергии Ландау–Лифшица. Первый связан с взаимодействием каждого магнитного момента по отдельности с неким локальным кристаллическим полем на атоме, к которому он привязан. Другой механизм — коллективный — не требует привлечения дополнительных взаимодействий кроме уже рассмотренных изотропного обмена и антисимметричного обмена Дзялошинского–Мория. Здесь анизотропия возникает как следствие топологических свойств решетки взаимодействующих магнитных моментов, обладающей кубической симметрией. В реальных кристаллах одновременно могут действовать оба этих механизма, однако здесь мы ограничимся рассмотрением лишь более простого первого случая. Заметим, что в этом случае анизотропные члены энергии

Ландау–Лифшица не содержат пространственных производных от намагниченности.

На микроскопическом уровне энергию взаимодействия спина \mathbf{s} с локальным кристаллическим полем можно задать выражением

$$E_{l.c.f.} = \frac{1}{2}A_{\alpha\beta}s_{\alpha}s_{\beta} + \frac{1}{4}B_{\alpha\beta\gamma\delta}s_{\alpha}s_{\beta}s_{\gamma}s_{\delta}, \quad (30)$$

где тензоры A и B обладают следующими свойствами: 1) они симметричны по перестановкам индексов; 2) они обладают симметрией атомной позиции; 3) след A и любая свертка B по двум индексам равны нулю ($A_{\alpha\alpha} = B_{\alpha\alpha\gamma\delta} = 0$). Тензоры, относящиеся к атомам в эквивалентных позициях, связаны преобразованиями симметрии точечной группы кристалла. В общем случае тензоры A и B имеют соответственно пять и девять независимых компонент; для атомов, лежащих на оси 3, соответственно одну (A_{xy}) и три ($B_{xxxx}, B_{xxxy}, B_{xxxz}$).

Для того чтобы получить кубическую анизотропную поправку к энергии Ландау–Лифшица (2), необходимо просуммировать (30) по всем магнитным моментам внутри элементарной ячейки.

Из соображений симметрии видно, что первый анизотропный член в плотности энергии имеет вид

$$\mathcal{E}_a = \alpha(\mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4). \quad (31)$$

Может показаться, что тензор A не должен давать вклада в это выражение, однако это не так. Вклад от A возникает благодаря скосам, возникающим из-за взаимодействия спинов с локальным кристаллическим полем. Эти скосы могут быть вычислены по аналогии со скосами (7), (8), возникающими из-за взаимодействия Дзялошинского–Мория. Они имеют вид

$$\Delta\mathbf{s}_{i\perp} = \Theta_i \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_i \cdot \boldsymbol{\mu}), \quad (32)$$

где Θ_i — тензоры, вычисляемые из уравнений

$$\sum_j J_{ij}(\Theta_i - \Theta_j) = -A_i, \quad (33)$$

где сумма по j берется по атомам, соседним с i -м. Тензоры Θ_i обладают теми же свойствами симметрии, что и A_i . Скосы (32) вносят в плотность энергии вклад

$$-\frac{1}{4} \sum_i \sum_j J_{ij} \{ \boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_{ij}^2 \cdot \boldsymbol{\mu} - (\boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu})^2 \}, \quad (34)$$

где сумма по i берется по всем магнитным атомам в элементарной ячейке, а $\Theta_{ij} \equiv \Theta_i - \Theta_j$ — симметричный бесследовый тензор, имеющий симметрию

межатомной связи. Второе слагаемое в фигурных скобках, имеющее четвертый порядок по намагниченности, дает вклад в (31).

Для случая хиральных ферромагнетиков структурного типа $B20$ (MnSi и др.) коэффициент в выражении (31) имеет вид

$$\alpha = -\frac{3A_{xy}^2}{\sum_j J_{ij}} + \frac{5}{2}B_{xxxx}, \quad (35)$$

где в знаменателе сумма по j берется по всем соседям произвольного магнитного момента (i).

При переходе к безразмерному выражению (9) для плотности энергии коэффициент α преобразуется как $\alpha_{new} = (\mathcal{J}/\mathcal{D}^2)\alpha_{old}$.

Добавление к плотности энергии (9) анизотропного члена (31) вызывает два вида изменений магнитной структуры. Во-первых, энергия низкосимметричных фаз теперь зависит от их ориентации. Это может приводить к повороту магнитной структуры как целого, а при малых полях — к выстраиванию ее вдоль выделенного кристаллографического направления. Во-вторых, это может вызывать искажение магнитной структуры. Остановимся на этом подробнее.

Введение анизотропного члена (31) изменит эффективное локальное поле на величину

$$\mathbf{h}_{eff}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}) = -4\alpha(\mu_x^3, \mu_y^3, \mu_z^3), \quad (36)$$

что исказит исходную магнитную структуру. Будем искать поле намагниченности в виде

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + \boldsymbol{\mu}_1 - \frac{\mu_1^2}{2}\boldsymbol{\mu}_0, \quad (37)$$

где $\boldsymbol{\mu}_0$ — исходное решение системы (11), (12), $\boldsymbol{\mu}_1$ — слабое искажение порядка α , $\boldsymbol{\mu}_1 \perp \boldsymbol{\mu}_0$. Выпишем поправки к плотности энергии первого и второго порядков по α :

$$\mathcal{E}_{a1} = \alpha(\mu_{0x}^4 + \mu_{0y}^4 + \mu_{0z}^4), \quad (38)$$

$$\mathcal{E}_{a2} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mu_1}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \mu_1}{\partial r_\alpha} + \boldsymbol{\mu}_1 \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}_1] + \mathbf{h}_{eff}^{(0)}(\boldsymbol{\mu}_0) \frac{\mu_1^2}{2} + 4\alpha(\mu_{0x}^3 \mu_{1x} + \mu_{0y}^3 \mu_{1y} + \mu_{0z}^3 \mu_{1z}). \quad (39)$$

Видно, что искажения структуры сказываются на энергии, начиная с членов второго порядка по малой величине α . В основном же анизотропия проявляется в зависимости энергии магнитной фазы от ее ориентации относительно кристаллических осей.

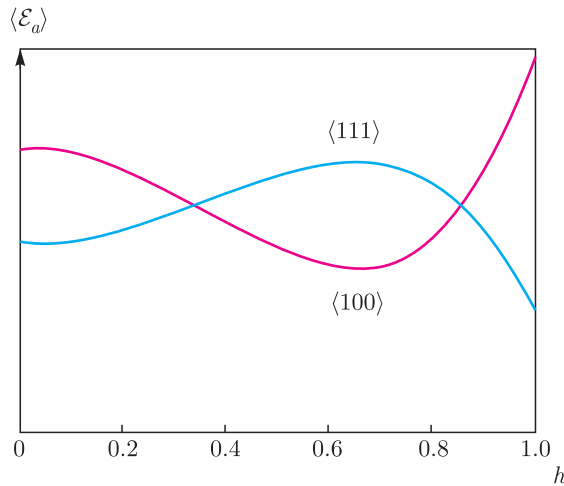


Рис. 6. Средняя плотность энергии анизотропии конической фазы, ориентированной вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ (случай $\alpha > 0$). Ось легкого намагничивания конической фазы меняет направление при значениях поля $0.340H_{c2}$ и $0.861H_{c2}$

5.1. Коническая фаза

Учет малой анизотропной поправки (31) к плотности энергии не приведет к сильному искажению конической спирали, но средняя энергия будет теперь зависеть от ориентации оси спирали относительно осей кристалла. Действительно, усредняя \mathcal{E}_a по магнитной структуре (15) при произвольном направлении оси спирали $\mathbf{n} \equiv \mathbf{e}_3 = \mathbf{h}/h$, получим

$$\langle \mathcal{E}_a \rangle = \frac{\alpha}{8} [3\xi + (8 - 5\xi)(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4)], \quad (40)$$

где

$$\xi = 1 + 6h^2 - 7h^4. \quad (41)$$

Видно, что направление \mathbf{n} , соответствующее минимуму энергии, зависит от знака коэффициента $\alpha(8 - 5\xi)$. Множитель $(8 - 5\xi)$ дважды меняет знак на отрезке $0 < h < 1$, а именно в точках 0.340 и 0.861, и вместе с ним меняется выгодное направление намагничивания (рис. 6). Магнитный эксперимент с торсионными весами, проведенный при температуре ниже области существования фазы А, мог бы подтвердить или опровергнуть этот результат.

5.2. Геликоидальная фаза

При нулевом поле $\xi = 1$ и в зависимости от знака α геликоидам выгодно упорядочиваться либо вдоль трех направлений $\langle 100 \rangle$ ($\alpha < 0$), либо вдоль четырех направлений $\langle 111 \rangle$ ($\alpha > 0$). Первый случай соответствует Cu_2OSeO_3 , второй — MnSi . При этом, как

уже говорилось, магнитная структура разбивается на отдельные домены, различающиеся выбором одного из нескольких эквивалентных направлений оси геликоиды. При достижении магнитным полем критического значения H_{c1} доменная структура разрушается и спирали переориентируются вдоль поля. Переориентация спиралей представляет собой сложный процесс, зависящий от направления приложенного магнитного поля и предыдущей истории доменов [56, 59].

Зная H_{c1} , можно оценить величину коэффициента α . Из (22) видно, что в зависимости от угла γ между направлением магнитного поля и осью коническо-эллиптической спирали энергия может меняться в диапазоне $\Delta\mathcal{E}_{ce} = h^2/4$. С другой стороны, энергия анизотропии (40) конической спирали меняется в диапазоне $\Delta\mathcal{E}_a = |\alpha|/4$ ($h \ll 1$) в зависимости от ориентации оси спирали относительно кристаллической решетки. Приравнявая $\Delta\mathcal{E}_{ce}$ и $\Delta\mathcal{E}_a$, оценим величину критического поля как $h_{c1} \approx \sqrt{|\alpha|}$, или

$$\alpha \approx \pm(H_{c1}/H_{c2})^2, \quad (42)$$

где знак выбирается в зависимости от ориентации геликоид при нулевом поле. Так, для кристалла MnSi $H_{c1} \approx 0.1$ Тл, $H_{c2} \approx 0.6$ Тл и, следовательно, $\alpha \approx 1/36$.

5.3. Фаза А

Как и в предыдущих случаях, вычисление средней плотности энергии анизотропии фазы А сводится к вычислению величины $\langle \mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4 \rangle$. С этой целью введем симметричный тензор четвертого ранга с компонентами

$$\mathcal{M}_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \mu_\alpha \mu_\beta \mu_\gamma \mu_\delta \rangle \quad (43)$$

в системе координат, связанной с фазой А. Обозначим оси этой системы координат как $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{n} = \mathbf{h}/h$; для определенности вектор \mathbf{e}_1 направлен вдоль волнового вектора \mathbf{k}_1 . За декартовыми осями, связанными с кристаллической решеткой, сохраним обозначения $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ и \mathbf{e}_z .

Тензор \mathcal{M} любой магнитной структуры обладает точечной симметрией этой структуры и, в частности, для гексагональной фазы А с осью b , направленной вдоль \mathbf{e}_3 , сохранятся три независимых компоненты:

$$\mathcal{M}_{1111} = \mathcal{M}_{2222} = 3\mathcal{M}_{1122}, \quad \mathcal{M}_{1133} = \mathcal{M}_{2233}, \mathcal{M}_{3333}.$$

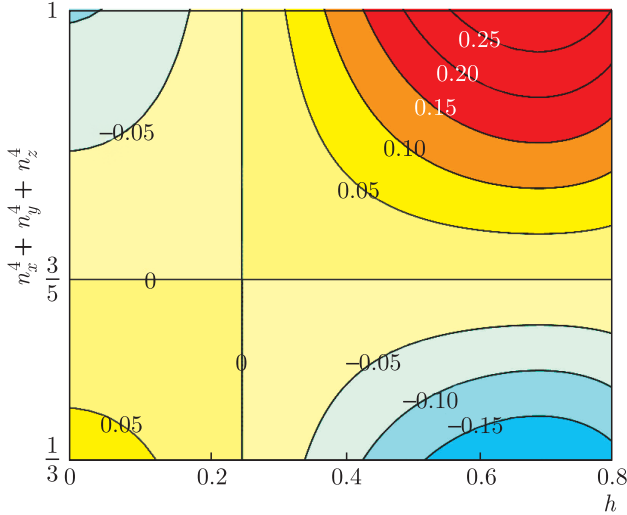


Рис. 7. (В цвете онлайн) Разность $\langle \mathcal{E}_{a,A} \rangle - \langle \mathcal{E}_{a,c} \rangle$ энергий анизотропии фазы A с $k_0 = 0.978$ и конической фазы с $k = 1$ в зависимости от направления \mathbf{n} и величины h магнитного поля. Коэффициент $\alpha = +1$. В области существования фазы A (правая часть диаграммы) анизотропия делает фазу A более устойчивой при $\mathbf{n} \parallel [111]$ и менее устойчивой при $\mathbf{n} \parallel [100]$ (наоборот при отрицательном значении α)

Из условия унимодулярности следует равенство $\langle \mu^4 \rangle = 1$, дающее дополнительную связь между этими компонентами:

$$8\mathcal{M}_{1111}/3 + 4\mathcal{M}_{1133} + \mathcal{M}_{3333} = 1. \quad (44)$$

Средняя величина четвертой степени проекции μ на произвольное направление \mathbf{d} ($d = 1$) выражается через тензор \mathcal{M} следующим образом:

$$\langle (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{d})^4 \rangle = \mathcal{M}_{\alpha\beta\gamma\delta} d_\alpha d_\beta d_\gamma d_\delta. \quad (45)$$

В случае гексагональной симметрии эта величина зависит только от проекции направления \mathbf{d} на ось 6 ($\mathbf{d} \cdot \mathbf{n} \equiv d_3$):

$$\langle (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{d})^4 \rangle = \mathcal{M}_{1111}(1 - d_3^2)^2 + 6\mathcal{M}_{1133}d_3^2(1 - d_3^2) + \mathcal{M}_{3333}d_3^4. \quad (46)$$

Подставляя в качестве \mathbf{d} направления кристаллических осей \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z и суммируя, получим среднюю плотность энергии анизотропии фазы A вида (40) с $\xi_A = 8\mathcal{M}_{1111}/3 + 16\mathcal{M}_{1133}$.

В отличие от случая конической фазы, комбинация $(8 - 5\xi_A)$ не меняет знака во всей области существования фазы A , поэтому энергетически наиболее выгодным всегда является одно направление оси \mathbf{n} :

$\langle 111 \rangle$ при $\alpha > 0$, $\langle 100 \rangle$ при $\alpha < 0$. Однако для устойчивости фазы A важнее разница между ее энергией анизотропии и энергией анизотропии конической фазы при одном и том же направлении магнитного поля:

$$\langle \mathcal{E}_{a,A} \rangle - \langle \mathcal{E}_{a,c} \rangle = \frac{\alpha}{8}(\xi_A - \xi_c)[3 - 5(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4)]. \quad (47)$$

На рис. 7 эта разница показана для фазы A с $k_0 = 0.978$ и конической фазы с $k = 1$ (коэффициент α положен равным $+1$). Видно, что кубическая анизотропия способствует устойчивости фазы A с осью \mathbf{n} , направленной вдоль $\langle 111 \rangle$ при положительном значении α и вдоль $\langle 100 \rangle$ при отрицательном. Необходимо отметить, что величины энергии анизотропии недостаточно для того, чтобы сделать фазу A энергетически выгоднее конической фазы.

Заметим, что рассмотренный анизотропный эффект ограничивается зависимостью энергии фазы A от направления \mathbf{n} магнитного поля и параллельных ему ядер скирмионов и не затрагивает азимутальной ориентации треугольной решетки скирмионов [60]. Для описания азимутального упорядочения, выходящего за рамки данной статьи, нужно учесть анизотропные поправки (39) к энергии, имеющие следующий порядок малости по α . Здесь, в частности, существенную роль будут играть искажения скирмионной решетки.

6. ВЫВОДЫ

Для описания магнитной структуры кубических хиральных ферромагнетиков в рамках феноменологического подхода было использовано приближение $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| = \text{const}$, хорошо применимое при температурах значительно ниже точки перехода из парамагнитной в упорядоченную фазу. В данном приближении энергия Ландау—Лифшица содержит в качестве единственного параметра величину внешнего магнитного поля $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H_{c2}$, причем все нетривиальные магнитные фазы — геликоидальная, коническая, фаза A — заключены в диапазоне $0 \leq h < 1$.

В рамках данной модели показано, что геликоидальная фаза в слабом магнитном поле хорошо описывается коническо-эллиптическими спиралями. При этом вид тензора магнитной восприимчивости согласуется как с экспериментальными данными [54–56], так и с результатами, полученными с помощью других теоретических подходов [56, 57].

Проведено моделирование фазы A в зависимости от величины магнитного поля и волнового числа k_0

главных спиралей. Результаты вычислений показали, что фаза A энергетически наиболее выгодна при $H \approx 0.41H_{c2}$; при этом число k_0 составляет 97.8% от волнового числа спиралей конической фазы.

Тем не менее в рамках заданного приближения энергия фазы A не опускается ниже энергии конической фазы при том же значении поля. Наиболее вероятное объяснение того, почему фаза A оказывается все же выгоднее конической при некоторых условиях, заключается в том, что в области существования фазы A — вблизи точки Кюри T_C — условие $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| = \text{const}$ выполняется лишь приближенно из-за тепловых флуктуаций магнитного порядка, сильных вблизи температуры перехода. В этом случае вместо унимодулярного поля $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$ ($\mu = 1$) необходимо использовать поле, близкое к унимодулярному ($\mu \lesssim 1$), и ввести в энергию Ландау–Лифшица дополнительный член $f(\mu)$. В работе [30] приводятся аргументы в пользу того, что этот член должен иметь вид $f(\mu) \sim \sqrt{1 - \mu}$.

Взаимодействие спинов с локальным кристаллическим полем рассмотрено в качестве причины возникновения кубической анизотропии магнитных свойств исследуемых кристаллов. В этом случае энергия Ландау–Лифшица должна быть дополнена анизотропным членом $\alpha(\mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4)$. Знак α определяется кристаллографическими направлениями, вдоль которых выстраиваются спирали в геликоидальной фазе: $\alpha > 0$ соответствует направлениям $\langle 111 \rangle$, $\alpha < 0$ — направлениям $\langle 100 \rangle$. Абсолютную величину α можно оценить по критическому полю H_{c1} , разграничивающему геликоидальную и коническую фазы: $|\alpha| \approx (\mathcal{D}^2/\mathcal{J})(H_{c1}/H_{c2})^2$.

Для конической фазы, так же как и для геликоидальной, существуют кристаллографические направления, вдоль которых энергетически более выгодно выстраивание спиралей. Эти направления не постоянны и зависят от величины магнитного поля. Действительно, энергия анизотропии конической спирали имеет вид $\alpha F(h)[n_x^4 + n_y^4 + n_z^4]$, где \mathbf{n} — направление оси спирали, а функция $F(h)$ дважды меняет знак на отрезке $0 \leq h < 1$. Это приводит к тому, что, например, при $\alpha > 0$ оси легкого намагничивания меняются сначала от $\langle 111 \rangle$ к $\langle 100 \rangle$ при $H = 0.340H_{c2}$, а затем обратно к $\langle 111 \rangle$ при $H = 0.861H_{c2}$. Данный вывод можно проверить, например, проведя магнитный эксперимент с торсионными весами.

Показано, что кубическая анизотропия влияет на устойчивость фазы A в зависимости от направления магнитного поля, однако одного этого эффекта недостаточно для объяснения существо-

вания фазы. Так, при $\alpha > 0$ фаза A становится устойчивее, если поле приложено вдоль направленный $\langle 111 \rangle$, при $\alpha < 0$ — если вдоль $\langle 100 \rangle$. Некоторые экспериментальные наблюдения показывают прямо противоположную картину. Так, в кристалле MnSi фаза A существует в более широкой области температур, если поле приложено вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ [61, 62], а в Cu_2OSeO_3 — если поле параллельно $\langle 111 \rangle$ [40]. Это несоответствие может служить доводом в пользу иной микроскопической причины возникновения кубической анизотропии в этих кристаллах. Такой причиной, например, может быть взаимодействие Дзялошинского–Мория между спинами, упорядоченными в решетку с кубической симметрией. В этом случае в энергии Ландау–Лифшица должны появиться анизотропные члены с пространственными производными от намагниченности.

Благодарности. Автор выражает благодарность В. Е. Дмитриенко за плодотворные обсуждения и высказанные критические замечания.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Определим параметры θ , λ и m коническо-эллиптической спирали из разд. 3.2, необходимые для вычисления энергии и магнитной восприимчивости геликоидальной фазы.

Подставляя (17) в выражение (9) для плотности энергии получим при $\theta = \text{const}$

$$\mathcal{E} = \sin^2 \theta \frac{d\varphi}{dz} \left(\frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dz} - 1 \right) - h_{\parallel} \cos \theta - h_{\perp} \sin \theta \cos \varphi. \quad (48)$$

Уравнение Эйлера–Лагранжа

$$\frac{d^2 \varphi}{dz^2} = \frac{h_{\perp}}{\sin \theta} \sin \varphi \quad (49)$$

совпадает с уравнением движения математического маятника с первым интегралом

$$\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 = \frac{2h_{\perp}}{\sin \theta} (a - \cos \varphi). \quad (50)$$

Подставляя в (50) решение (18), находим

$$a = \frac{2}{m} - 1, \quad \lambda^2 = \frac{h_{\perp}}{m \sin \theta}. \quad (51)$$

Подставляя (50), (51) в (48) и усредняя по z , получаем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -k \sin^2 \theta - h_{\parallel} \cos \theta - h_{\perp} \sin \theta (2/m - 1 - 2\langle \cos \varphi \rangle), \quad (52)$$

где введено обозначение $k = \langle d\varphi/dz \rangle = 2\pi/p$, p — период спирали. Учитывая, что $p = 2K(m)/\lambda$ ($K(m)$ — полупериод функций Якоби), получим из (51) уравнение для параметра m эллиптических функций:

$$mK^2(m) = \frac{\pi^2 h_{\perp}}{k^2 \sin \theta}. \quad (53)$$

При малых полях $m \sim h_{\perp}$ и с учетом разложения

$$K(m) \approx \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{m}{4} + \frac{9m^2}{64} \right)$$

решение (53) принимает вид

$$m \approx \omega - \frac{\omega^2}{2} + \frac{5\omega^3}{32}, \quad \omega = \frac{4h_{\perp}}{k^2 \sin \theta}. \quad (54)$$

$$\langle \cos \varphi \rangle = \frac{1}{K} \int_0^{2K} \text{sn}^2(x; m) dx - 1 \approx \frac{m}{8}. \quad (55)$$

Подставляя (54), (55) в (52) и сохраняя члены до второго порядка малости по h включительно, имеем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \sin^2 \theta \left(\frac{k^2}{2} - k \right) - h_{\parallel} \cos \theta - \frac{h_{\perp}^2}{4}. \quad (56)$$

Минимизируя по k и θ , получаем $k = 1$ и $\cos \theta = h_{\parallel}$ и окончательно имеем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -\frac{1}{2} - \frac{h_{\parallel}^2}{2} - \frac{h_{\perp}^2}{4}. \quad (57)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Kornyshev, D. J. Lee, S. Leikin, and A. Wynveen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 943 (2007).
2. В. А. Беляков, В. Е. Дмитриенко, УФН **146**, 369 (1985) [V. A. Belyakov and V. E. Dmitrienko, *Sov. Phys. Usp.* **28**, 535 (1985)].
3. D. C. Wright and N. D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 385 (1989).
4. А. Н. Богданов, Д. А. Яблонский, ЖЭТФ **95**, 178 (1989) [A. N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, *Sov. Phys. JETP* **68**, 101 (1989)].
5. A. Bogdanov and A. Hubert, *Phys. Stat. Sol. (b)* **186**, 527 (1994).
6. A. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn. Mater.* **138**, 255 (1994).
7. U. K. Röbler, A. N. Bogdanov, and C. Pfeleiderer, *Nature* **442**, 797 (2006).
8. С. М. Стишов, А. Е. Петрова, УФН **181**, 1157 (2011) [S. M. Stishov and A. E. Petrova, *Phys. Usp.* **54**, 1117 (2011)].
9. А. Б. Борисов, УФН **190**, 291 (2020) [A. B. Borisov, *Phys. Usp.* **63**, 269 (2020)].
10. S. Tewari, D. Belitz, and T. R. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047207 (2006).
11. B. Binz, A. Vishwanath, and V. Aji, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 207202 (2006).
12. A. Hamann, D. Lamago, Th. Wolf et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 037207 (2011).
13. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, УФН **182**, 593 (2012) [A. P. Pyatakov and A. K. Zvezdin, *Phys. Usp.* **55**, 557 (2012)].
14. M. Mostovoy, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 067601 (2006).
15. А. П. Пятаков, А. С. Сергеев, Е. П. Николаева и др., УФН **185**, 1077 (2015) [A. P. Pyatakov, A. S. Sergeev, E. P. Nikolaeva et al., *Phys. Usp.* **58**, 981 (2015)].
16. N. Kanazawa, Y. Onose, T. Arima et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 156603 (2011).
17. Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch, and M. Roth, *Sol. St. Comm.* **19**, 525 (1976).
18. K. Motoya, H. Yasuoka, Y. Nakamura, and J. H. Wernick, *Sol. St. Comm.* **19**, 529 (1976).
19. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **32**, 1547 (1957) [I. E. Dzyaloshinsky, *Sov. Phys. JETP* **5**, 1259 (1957)].
20. I. Dzyaloshinsky, *Phys. Chem. Sol.* **4**, 241 (1958).
21. T. Moriya, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 228 (1960).
22. T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
23. J. M. Hopkinson and H.-Y. Kee, *Phys. Rev. B* **79**, 014421 (2009).
24. J. P. Chen, Y. L. Xie, Z. B. Yan, and J.-M. Liu, *J. Appl. Phys.* **117**, 17C750 (2015).
25. G. P. Müller, F. N. Rybakov, H. Jónsson et al., *Phys. Rev. B* **101**, 184405 (2020).
26. J. H. Yang, Z. L. Li, X. Z. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 107203 (2012).

27. O. Janson, I. Rousochatzakis, A. A. Tsirlin et al., *Nature Comm.* **5**, 5376 (2014).
28. V. E. Dmitrienko and V. A. Chizhikov, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 187203 (2012).
29. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *Phys. Rev. B* **85**, 014421 (2012).
30. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *Phys. Rev. B* **88**, 214402 (2013).
31. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *J. Magn. Magn. Mater.* **382**, 142 (2015).
32. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 155601 (2017).
33. F. J. dos Santos, M. dos Santos Dias, and S. Lounis, *Phys. Rev. B* **102**, 104436 (2020).
34. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, A. I. Okorokov et al., *Phys. Rev. B* **74**, 214414 (2006).
35. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al., *Science* **323**, 915 (2009).
36. W. Münzer, A. Neubauer, T. Adams et al., *Phys. Rev. B* **81**, 041203 (2010).
37. T. Adams, S. Mühlbauer, C. Pfleiderer et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 217206 (2011).
38. X. Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose et al., *Nature Mat.* **10**, 106 (2011).
39. S. Seki, X. Z. Yu, S. Ishiwata, and Y. Tokura, *Science* **336**, 198 (2012).
40. T. Adams, A. Chacon, M. Wagner et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 237204 (2012).
41. S. Seki, J.-H. Kim, D. S. Inosov et al., *Phys. Rev. B* **85**, 220406 (2012).
42. U. K. Rößler, A. A. Leonov, and A. N. Bogdanov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **303**, 012105 (2011).
43. M. C. Ambrose and R. L. Stamps, *New J. Phys.* **15**, 053003 (2013).
44. D. B. Litvin, *Magnetic Group Tables: 1-, 2-, and 3-Dimensional Magnetic Subperiodic Groups and Magnetic Space Groups*, International Union of Crystallography (2013).
45. P. Bak and M. H. Jensen, *J. Phys. C* **13**, L881 (1980).
46. O. Nakanishi, A. Yanase, A. Hasegawa, and M. Kataoka, *Sol. St. Comm.* **35**, 995 (1980).
47. M. Tanaka, H. Takayoshi, M. Ishida, and Ya. Endoh, *J. Phys. Soc. Jpn* **54**, 2970 (1985).
48. M. Ishida, Ya. Endoh, S. Mitsuda et al., *J. Phys. Soc. Jpn* **54**, 2975 (1985).
49. V. Dmitriev, D. Chernyshov, S. Grigoriev, and V. Dyadkin, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 366005 (2012).
50. S. V. Grigoriev, N. M. Potapova, S.-A. Siegfried et al., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 207201 (2013).
51. K. Shibata, X. Z. Yu, T. Hara et al., *Nature Nanotech.* **8**, 723 (2013).
52. V. Dyadkin, K. Prša, S. V. Grigoriev et al., *Phys. Rev. B* **89**, 140409 (2014).
53. В. Е. ДМИТРИЕНКО, В. А. БЕЛЯКОВ, ЖЭТФ **78**, 1568 (1980) [V. E. Dmitrienko and V. A. Belyakov, *Sov. Phys. JETP* **51** 787 (1980)].
54. В. Н. НАРОЖНЫЙ, В. Н. КРАСНОРУССКИЙ, ЖЭТФ **143**, 906 (2013) [V. N. Narozhnyi and V. N. Krasnorussky, *JETP* **116**, 785 (2013)].
55. V. N. Narozhnyi and V. N. Krasnorussky, *Phys. Rev. B* **91**, 134403 (2015).
56. A. Bauer, A. Chacon, M. Wagner et al., *Phys. Rev. B* **95**, 024429 (2017).
57. M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer et al., *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
58. F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, and N. S. Kiselev, *New J. Phys.* **18**, 045002 (2016).
59. P. Milde, L. Köhler, E. Neuber et al., *Phys. Rev. B* **102**, 024426 (2020).
60. T. Adams, M. Garst, A. Bauer et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 187205 (2018).
61. D. Lamago, R. Georgii, C. Pfleiderer, and P. Böni, *Physica B* **385–386**, 385 (2006).
62. A. Bauer and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **85**, 214418 (2012).