

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ЗАРЯДОВЫХ УПОРЯДОЧЕНИЙ ТРЕУГОЛЬНОГО БИСЛОЯ

Ботин Д.Г., Маслов Д.А.
СарФТИ НИЯУ МИФИ, г. Саров

Описание последовательности фазовых переходов в соединении LuFe_2O_4 требует разработки моделей зарядового упорядочения. Ранее была разработана модель зарядового упорядочения соединений RFe_2O_4 в приближении среднего поля [1, 2]. В рамках данной работы показано, что в 6-подрешёточном приближении могут быть получены только одно- и двухпараметрические решения. Двухпараметрические решения представляют собой набор трёх ферриэлектрических фаз, отличающихся значением энтропии в основном состоянии ($T = 0$): низкоэнтропийная фаза, высокоэнтропийная фаза и фаза с промежуточным значением энтропии. Разработана процедура коррекции свободной энергии зарядовой фазы, полученной в приближении среднего поля, с учётом процесса димеризации: образования соседними разупорядоченными ионами, находящимися в разных слоях бислоя, димерных состояний.

В работе исследована зависимость фазовой диаграммы бислоя от энергии образуемого димера (см. Рис. 1). Полученные результаты используются для объяснения изменения зарядового упорядочения при магнитном фазовом переходе в LuFe_2O_4 [3, 4].

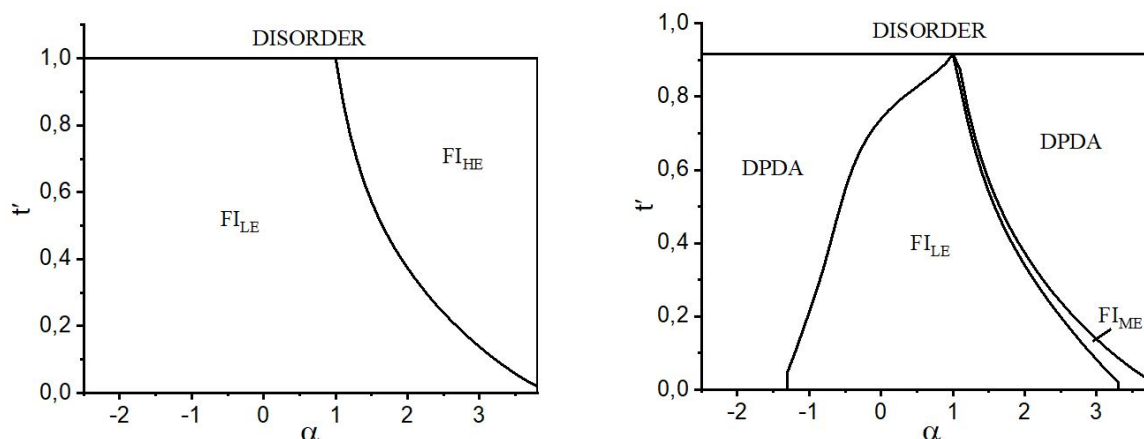


Рис. 1. Фазовые диаграммы бислоя для двух значений энергии димера $J = 0$ (слева) и $J = 0,2$ (справа). DPDA – димерная частично разупорядоченная фаза, FI ферриэлектрическая фаза. Индексы LE, ME, HE означают низко-, средне- и высокоэнтропийную фазы, соответственно.

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 7 «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях».

Список литературы

1. Yu.B. Kudasov, D.A. Maslov. Frustration and charge order in LuFe_2O_4 . Phys. Rev. B 86, 214427 (2012).
2. Д.Г. Ботин, Д.А. Маслов. Математика и математическое моделирование. Сборник материалов XVII Всероссийской молодежной научно-инновационной школы. С. 292-293 (2023).
3. N. Ikeda, H. Ohsumi, K. Ishii, T. Inami, K. Kakurai, Y. Murakami, K. Yoshii, S. Mori, Y. Horibe, and H. Kito. Nature (London) 436, 1136 (2005).
4. J. Wen, G. Xu, G. Gu, and S.M. Shapiro. Phys. Rev. B 80, 020403(R) (2009).