

СЛЕДЫ ПЛАТО НАМАГНИЧЕННОСТИ В ПРОЦЕССЕ НАМАГНИЧИВАНИЯ МОДЕЛЬНЫХ ТРЕХ- И ЧЕТЫРЕХСПИНОВЫХ КЛАСТЕРОВ

*В. Н. Глазков**

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

*Международная лаборатория физики конденсированного состояния,
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 сентября 2018 г.,
после переработки 20 сентября 2018 г.
Принята к публикации 5 октября 2018 г.

Обсуждаются кривые намагничивания модельных трех- и четырехспиновых кластеров. Обнаружена нелинейность процесса намагничивания с минимумом дифференциальной восприимчивости, напоминающим известные плато намагниченности в антиферромагнетиках на «треугольной» и пирохлорной решетках. Эта нелинейность наблюдается при температурах в промежуточном температурном интервале $J \lesssim T \lesssim \Theta$ (здесь J — константа обменного взаимодействия, а Θ — температура Кюри–Вейса). Такое поведение объясняется увеличенным статистическим весом состояний с промежуточными значениями полного спина на кластере, что качественно связано с флуктуационным механизмом стабилизации плато намагниченности в макроскопических фрустрированных магнетиках (эффект “order-by-disorder”).

DOI: 10.1134/S0044451019030167

1. ВВЕДЕНИЕ

Треугольные мотивы в кристаллической структуре магнетика часто приводят к фрустрации обменных связей, приводящей, в свою очередь, к нестандартным видам магнитного порядка или даже к формированию неупорядоченного спин-жидкостного состояния. Хорошо изученными примерами таких систем являются антиферромагнетики на треугольной, кагоме- или пирохлорной решетках [1–3]. Сильное вырождение основного состояния фрустрированного магнетика делает важным учет тепловых и квантовых флуктуаций (эффект “order-by-disorder”) при выборе типа упорядочения. Это приводит к заметному эффекту на низкотемпературных кривых намагничивания: гейзенберговский антиферромагнетик на треугольной решетке демонстрирует плато намагниченности на уровне $1/3$ от намагниченности насыщения [4],

аналогичное плато на уровне $1/3$ от намагниченности насыщения предсказано для гейзенберговского антиферромагнетика на кагоме-решетке [5], а гейзенберговский антиферромагнетик на пирохлорной решетке демонстрирует плато намагниченности на уровне $1/2$ от намагниченности насыщения [6]. Плато намагниченности также наблюдается в ряде других модельных систем [7, 8]. Плато намагниченности в антиферромагнетиках на треугольной (а также кагоме-) и пирохлорной решетках соответствуют коллинеарным фазам (соответственно *iiid* и *uuud*), которые стабилизируются квантовыми и тепловыми флуктуациями. Эти плато были детально рассмотрены теоретически [3, 4, 6] и наблюдались экспериментально в различных магнетиках [3, 9–13].

Таким образом, стабилизация коллинеарного упорядоченного состояния в широком интервале полей, отсутствующая в приближении среднего поля, является известной особенностью антиферромагнетиков на треугольной решетке и в некоторых других системах. Этот эффект сопровождается плато на кривой намагниченности, которое часто наблюдается как широкий интервал полей, в

* E-mail: glazkov@kapitza.ras.ru

котором существенно уменьшается дифференциальная восприимчивость $\chi = \partial M / \partial B$. Данная работа связана с наблюдением в работах [10, 14] минимума дифференциальной восприимчивости в антиферромагнетике на треугольной решетке выше температуры Нееля [10], а также в антиферромагнетике на треугольной решетке с хаотической модуляцией обменных связей, достигаемой заменой части немагнитных ионов в кристаллической структуре другими немагнитными ионами, в котором коллинеарная фаза подавлена модуляцией обменных связей [14].

Здесь мы рассматриваем результаты анализа микроскопических моделей, связанных с такими магнетиками, которые являются «строительными блоками» описанных выше магнетиков на фрустрированных решетках: трехспинового и четырехспинового кластеров с равными константами обменных связей между всеми парами спинов, графически соответствующими равносторонним треугольнику и тетраэдру. Мы покажем далее, что, неожиданно, кривые намагничивания этих микроскопических моделей демонстрируют следы плато намагниченности, наблюдаемые при температурах порядка температуры Кюри–Вейса: дифференциальная восприимчивость имеет локальный минимум при значении полной намагниченности, слишком к значению намагниченности в фазе плато макроскопического магнетика. Этот эффект наблюдается как для квантовых, так и для классических моделей, его происхождение является чисто статистическим и является микроскопическим аналогом макроскопического механизма флуктуационной стабилизации коллинеарной фазы: он связан с большим статистическим весом состояний кластера с промежуточными значениями полного спина. Мы проводим подробный анализ этих модельных микроскопических систем и сравниваем предсказания модельных расчетов с известными результатами [10, 14] для антиферромагнетика на треугольной решетке $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

Мы рассмотрим кластеры из $N = 3$ и 4 спинов S , в которых каждый спин связан со всеми остальными одинаковыми антиферромагнитными обменными связями. Такие кластеры соответствуют треугольной и тетраэдрической геометриям обменных связей. Гамильтониан квантовой модели (здесь $\langle i, j \rangle$ обозначает, что каждая пара спинов учитывается при суммировании единожды)

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j - g\mu_B B \sum_i \hat{S}_{z,i} \quad (1)$$

может быть переписан с помощью полного спина кластера S_{tot} :

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{J}{2} \hat{\mathbf{S}}_{tot}^2 - g\mu_B B \hat{S}_{z,tot} - \frac{N}{2} JS(S+1), \quad (2)$$

так как

$$\mathbf{S}_{tot}^2 = \sum_i \mathbf{S}_i^2 + 2 \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j.$$

Последнее слагаемое в уравнении (2) представляет просто сдвиг начала отсчета энергии состояний кластера и будет опущено в дальнейшем.

Аналогично можно сформулировать классическую спиновую модель с единичными векторами \mathbf{S} в вершинах треугольника или тетраэдра. Полная энергия такого кластера также может быть выражена через его полный спин:

$$E = J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - g\mu_B B \sum_i S_{z,i} = \\ = \frac{J}{2} \mathbf{S}_{tot}^2 - g\mu_B B S_{z,tot} - \frac{N}{2} JS^2, \quad (3)$$

здесь также последнее слагаемое может быть опущено, так как оно описывает выбор начала отсчета энергии.

Здесь мы заинтересованы в вычислении кривых намагниченности $m_z(B, T)$ и дифференциальной восприимчивости $\chi(B, T) = \partial m_z / \partial B$, которые соответствуют экспериментально измеряемым величинам. Это вычисление проводится стандартным термодинамическим усреднением:

$$Z = \sum_{|... \rangle} e^{-E/T},$$

здесь суммирование проводится по всем собственным состояниям гамильтониана, $F = -T \ln Z$, $M = -\partial F / \partial B$ и т. д.

Из-за высокой симметрии кластеров их энергия зависит только от полного спина кластера и его проекции. Это позволяет заменить суммирование по всем состояниям суммированием по возможным значениям полного спина S_{tot} (пробегающим значения от 0 или $1/2$ до NS), взвешенным с учетом весового коэффициента $D_N(S_{tot})$, и по проекциям полного спина. Весовой коэффициент $D_N(S_{tot})$ — это число комбинаций, соответствующих значению полного спина в квантовой модели, и плотность числа таких комбинаций в классической модели. Таким образом,

$$Z = \sum_{S_{tot}} D_N(S_{tot}) \sum_{S_z} e^{-E/T}, \quad (4)$$

$$Z = \int_0^{NS} D_N(S_{tot}) \int_0^{\pi} 2\pi \sin \Theta e^{-E/T} dS d\Theta = \\ = 4\pi \int_0^N D_N(S) \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{g\mu_B BS}{T}\right)}{\frac{g\mu_B BS}{T}} e^{-JS^2/2T} dS \quad (5)$$

соответственно в квантовом и классическом случаях.

Все численные расчеты были сделаны в среде GNU Octave [15] с использованием стандартных функций для интегрирования и минимизации там, где это необходимо.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕСОВЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Вычисленные весовые коэффициенты для квантовой модели приведены в табл. 1, 2, 3; получить компактное выражение для весового коэффициента квантовой модели не удалось.

Для классической модели весовые коэффициенты могут быть вычислены аналитически (см. Приложение А), соответствующие выражения приведены ниже:

$$D_3(S) = \begin{cases} S^2/2, & 0 \leq S < 1, \\ S(3-S)/4, & 1 \leq S \leq 3, \end{cases} \quad (6)$$

$$D_4(S) = \begin{cases} S^2(1-3S/8)/2, & 0 \leq S < 2, \\ S(1-S/4)^2, & 2 \leq S \leq 4. \end{cases} \quad (7)$$

Отметим, что наклон кривых $D_{3,4}(S)$ меняется скачком соответственно при $S = 1, 2$.

4. КРИВЫЕ НАМАГНИЧИВАНИЯ И ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ: СЛЕДЫ ПЛАТО И ЕГО ПАРАМЕТРЫ

Напомним, что при $T = 0$ намагниченность кластера в квантовой модели растет ступеньками по мере того, как состояния с более высоким полным спином поочередно становятся основным состоянием. Максимальная намагниченность достигается в поле насыщения $B_{sat} = NJS/g\mu_B$, интервал между ступеньками на кривой намагничивания равен $\Delta B = J/g\mu_B$. Ступенчатый характер процесса намагничивания размывается при повышении температуры.

Высокотемпературный предел может быть рассмотрен в рамках стандартного высокотемпературного разложения, что приводит к закону Кюри–Вейса

$$\chi = \frac{N(g\mu_B)^2 S(S+1)}{3} \frac{1}{T+\Theta}, \quad (8)$$

где температура Кюри–Вейса равна $\Theta_3 = (2/3)JS(S+1)$ для трехспинового кластера ($N = 3$) и $\Theta_4 = JS(S+1)$ для четырехспинового кластера ($N = 4$)¹⁾. При низких температурах магнитная восприимчивость (для $B \rightarrow 0$) растет как $1/T$ для трехспиновых кластеров полуцелых спинов (обладающих основным состоянием с $S = 1/2$) и экспоненциально обращается в нуль для трехспиновых кластеров целых спинов и для четырехспиновых кластеров (основное состояние таких кластеров имеет спин $S = 0$).

Для классической модели при $T = 0$ поле насыщения равно $B_{sat} = NJ/g\mu_B$, процесс намагничивания линеен по полю вплоть до поля насыщения с восприимчивостью $\chi_0 = (g\mu_B)^2/J$. Высокотемпературная восприимчивость классической модели подчиняется закону Кюри–Вейса с температурами Кюри–Вейса $\Theta_3 = (2/3)J$ и $\Theta_4 = J$ соответственно для трехспиновых ($N = 3$) и четырехспиновых ($N = 4$) кластеров.

Рисунок 1 показывает смоделированные кривые намагничивания и дифференциальной восприимчивости для трехспинового кластера спинов $S = 5/2$ при различных температурах. Как и ожидалось, ступенчатый рост намагниченности сглаживается с ростом температуры и практически исчезает при температуре $T \approx J$, а при высоких температурах эволюционирует к стандартной парамагнитной кривой Бриллюэна. Однако на кривых дифференциальной восприимчивости видны неожиданные особенности: как и ожидалось, при низких температурах полевая зависимость дифференциальной восприимчивости имеет вид семейства острых пиков, при нагреве эти пики уширяются и плавно превращаются в плавные осцилляции дифференциальной восприимчивости при $T \approx J$. При дальнейшем нагреве эти регулярные осцилляции исчезают, но остается локальный минимум дифференциальной восприимчивости $\chi(B)$, расположенный в поле, примерно равном $1/3$ поля насыщения. Этот локальный минимум остается наблюдаемым до температур порядка температуры

¹⁾ Однако численный анализ показывает, что «локальная» температура Кюри–Вейса $\Theta = (g\mu_B)^2 S(S+1)/(3\chi) - T$ приближается к своему высокотемпературному пределу с точностью 1% только при $T > 50JS(S+1)$.

Таблица 1. Весовые коэффициенты $D_3(S_{tot})$ для трехспиновых ($N = 3$) кластеров с целым спином

S	Полный спин S_{tot}														
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	1	3	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
2	1	3	5	4	3	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—
3	1	3	5	7	6	5	4	3	2	1	—	—	—	—	—
4	1	3	5	7	9	8	7	6	5	4	3	2	1	—	—
5	1	3	5	7	9	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2

Таблица 2. Весовые коэффициенты $D_3(S_{tot})$ для трехспиновых ($N = 3$) кластеров с полуцелым спином

S	Полный спин S_{tot}													
	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	11/2	13/2	15/2	17/2	19/2	21/2	23/2	25/2	27/2
1/2	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
3/2	2	4	3	2	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
5/2	2	4	6	5	4	3	2	1	—	—	—	—	—	—
7/2	2	4	6	8	7	6	5	4	3	2	1	—	—	—
9/2	2	4	6	8	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1

Таблица 3. Весовые коэффициенты $D_4(S_{tot})$ для четырехспиновых ($N = 4$) кластеров

S	Полный спин S_{tot}																			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
1/2	2	3	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
1	3	6	6	3	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
3/2	4	9	11	10	6	3	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
2	5	12	16	17	15	10	6	3	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
5/2	6	15	21	24	24	21	15	10	6	3	1	—	—	—	—	—	—	—	—	—
3	7	18	26	31	33	32	28	21	15	10	6	3	1	—	—	—	—	—	—	—
7/2	8	21	31	38	42	43	41	36	28	21	15	10	6	3	1	—	—	—	—	—
4	9	24	36	45	51	54	54	51	45	36	28	21	15	10	6	3	1	—	—	—
9/2	10	27	41	52	60	65	67	66	62	55	45	36	28	21	15	10	6	3	1	—
5	11	30	46	59	69	76	80	81	79	74	66	55	45	36	28	21	15	10	6	3

Кюри–Вейса, которая для больших спинов может быть много больше обменного интеграла J . Для классической модели (рис. 2) дифференциальная восприимчивость остается постоянной вплоть до поля насыщения при $T = 0$, однако локальный минимум дифференциальной восприимчивости возникает при нагреве и продолжает существовать до температур порядка температуры Кюри–Вейса.

Аналогичные эффекты наблюдались и для четырехспинового кластера, но минимум дифференциальной восприимчивости был менее выраженным. В случае $N = 4$ локальный минимум дифференциальной восприимчивости располагается примерно на половине поля насыщения. Аналогичный минимум дифференциальной восприимчивости наблюдался экспериментально в содержащем большее

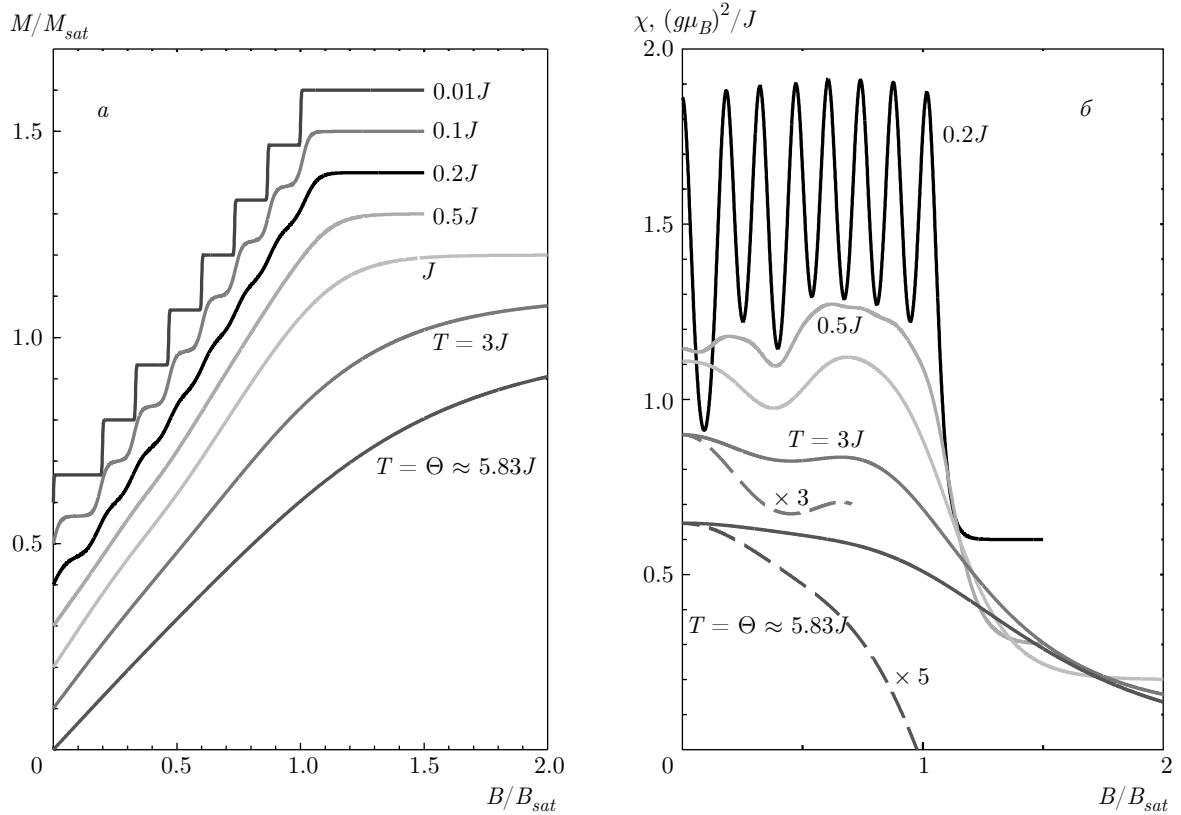


Рис. 1. (В цвете онлайн) *a*) Кривые намагничивания для трехспинового кластера спинов $S = 5/2$ при различных температурах, кривые смещены для наглядности; *б*) полевые зависимости дифференциальной восприимчивости для трехспинового кластера спинов $S = 5/2$ при различных температурах, кривые смещены для наглядности. Штриховые кривые на рис. *б* увеличены по оси Y с указанным коэффициентом

($N = 30$) количество спинов молекулярном магнетике $\text{M}_{0.72}\text{Fe}_{30}$, а также в модельных задачах вычисления дифференциальной восприимчивости для спинов на октаэдре ($N = 6$), кубоктаэдре ($N = 12$) и икосидодекаэдре ($N = 30$) [17], в этих моделях минимум дифференциальной восприимчивости оказывался в поле, близком к $1/3$ от поля насыщения.

Как отмечалось во Введении, плато намагнченности на уровне $1/3$ и $1/2$ от намагнченности насыщения предсказаны и наблюдались для антиферромагнетиков на треугольной (и кагоме-) и пирохлорной решетках. Поскольку такие плато часто оказываются в высоких магнитных полях, для их наблюдения используются импульсные магнитные поля, а непосредственно измеряемой величиной оказывается именно дифференциальная восприимчивость [9]. В таком эксперименте плато намагнченности проявляются как протяженное уменьшение дифференциальной восприимчивости. В идеальном случае в интервале плато дифференциальная восприимчивость должна падать до нуля, но в реальном экспе-

рименте она остается конечной [9]. Таким образом, обнаруженный в нашей модельной задаче локальный минимум дифференциальной восприимчивости сильно напоминает такую экспериментальную ситуацию: процесс намагничивания модельной задачи как будто содержит следы плато, наблюдавшегося в макроскопическом магнетике, структурным элементом которого является рассматриваемый кластер. Необходимо однако подчеркнуть, что фаза плато намагнченности в макроскопическом магнетике является отдельной термодинамической фазой магнитной системы и границы плато являются настоящими фазовыми переходами, в то время как в микроскопической модельной задаче дифференциальная восприимчивость меняется гладко, без фазовых переходов.

Этот локальный минимум дифференциальной восприимчивости модельной задачи является, по существу, классическим эффектом — он сохраняется при переходе к классическому эффекту и связан с наличием максимума у весового коэффициента

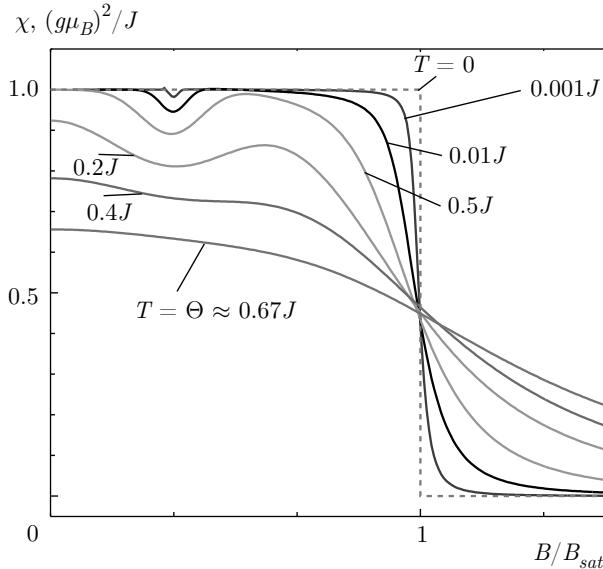


Рис. 2. Полевые зависимости дифференциальной восприимчивости для трехспинового кластера из классических спинов единичной длины при различных температурах

для состояний с промежуточными значениями полного спина кластера. Причина уменьшения дифференциальной восприимчивости статистическая, она напоминает флуктуационный механизм стабилизации коллинеарной фазы плато для макроскопического магнетика. Поскольку весовой коэффициент $D(S_{tot})$ имеет максимум при некотором промежуточном значении полного спина кластера S_0 , низкотемпературная энтропия $\sigma(T, B)$ может иметь максимум (как функция приложенного поля) в поле, близком к значению магнитного поля, в котором спиновый мультиплет с $S = S_0$ станет основным состоянием кластера. Поскольку свободная энергия $F = E - T\sigma$ (здесь σ обозначает энтропию), а намагнченность

$$\mathbf{M} = -\frac{\partial F}{\partial \mathbf{B}} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{B}} + T \frac{\partial \sigma}{\partial \mathbf{B}}, \quad (9)$$

намагнченность будет демонстрировать тенденцию к опережающему росту при приближении к максимуму энтропии ($\partial\sigma/\partial B > 0$) и, наоборот, несколько уменьшаться после прохождения максимума энтропии. Это соответствует появлению на кривой $M(B)$ участка с меньшим наклоном и к появлению локального минимума дифференциальной восприимчивости. Эти качественные рассуждения подтверждаются численными вычислениями для кластера квантовых спинов (рис. 3a). Для классических моделей (рис. 3б, в) максимум энтропии отсутствует, а положение минимума дифференциальной восприимчивости совпадает с точкой излома кривых $\sigma(B)$:

в этой точке энтропия скачком начинает быстрее убывать с ростом поля, что опять же приводит к появлению на кривой намагнченности участка с уменьшенным наклоном. При низких температурах, $T \ll J$, это может быть подтверждено аналитически, если оставить главные экспоненты в уравнении (5). Тогда для статистической суммы и энтропии классической модели получим

$$Z \approx \left(2\pi \frac{T}{J}\right)^{3/2} \frac{D_N(g\mu_B B/J)}{(g\mu_B B/J)^2} e^{(g\mu_B B)^2/(2TJ)}, \quad (10)$$

$$\sigma \approx \text{const} + \frac{3}{2} \ln \frac{T}{J} + \ln \frac{D_N(g\mu_B B/J)}{(g\mu_B B/J)^2}. \quad (11)$$

С учетом уравнений (6) и (7) видно, что действительно максимума энтропии нет, и, более того, поскольку $D_3(S) \propto S^2$ для малых S , низкополевая энтропия трехспинового кластера оказывается не зависящей от поля в этом пределе. Сильная зависимость энтропии от поля в окрестности поля насыщения приводит к усилению магнитокалорического эффекта, что описывалось для молекулярных магнетиков [17], модельной задачи о гейзенберговском магнетике на кубоктаэдре [18] и для макроскопических фрустрированных антиферромагнетиков на пирохлорной решетке [19, 20].

Для того чтобы численно охарактеризовать наблюдаемую особенность процесса намагничивания, похожую на следы плато намагнченности, были вычислены следующие величины (см. также схему на рис. 4a) для различных значений квантового спина в узле кластера и для классической модели: поле локального минимума дифференциальной восприимчивости B_0 , значение полной намагнченности кластера в поле B_0 и фактор качества плато, определенный следующим образом:

$$Q = 1 - \frac{\chi(B_0)}{\max_{B>B_0} \chi(B)}. \quad (12)$$

Здесь $\max_{B>B_0} \chi(B)$ выражает максимальное значение дифференциальной восприимчивости кластера в полях, больших B_0 , фактор качества равен единице для идеального плато (где $\chi(B_0) = 0$) и обращается в нуль в момент исчезновения похожей на плато особенности. При понижении температуры процесс намагничивания квантовой модели приближается к ступенчатому росту намагнченности, сопровождаемому возникновением и ростом регулярных осцилляций дифференциальной восприимчивости. При достаточно большой амплитуде этих осцилляций обнаруженный локальный минимум восприимчивости теряется на их фоне и становится плохо определен, при этом численная процедура поиска

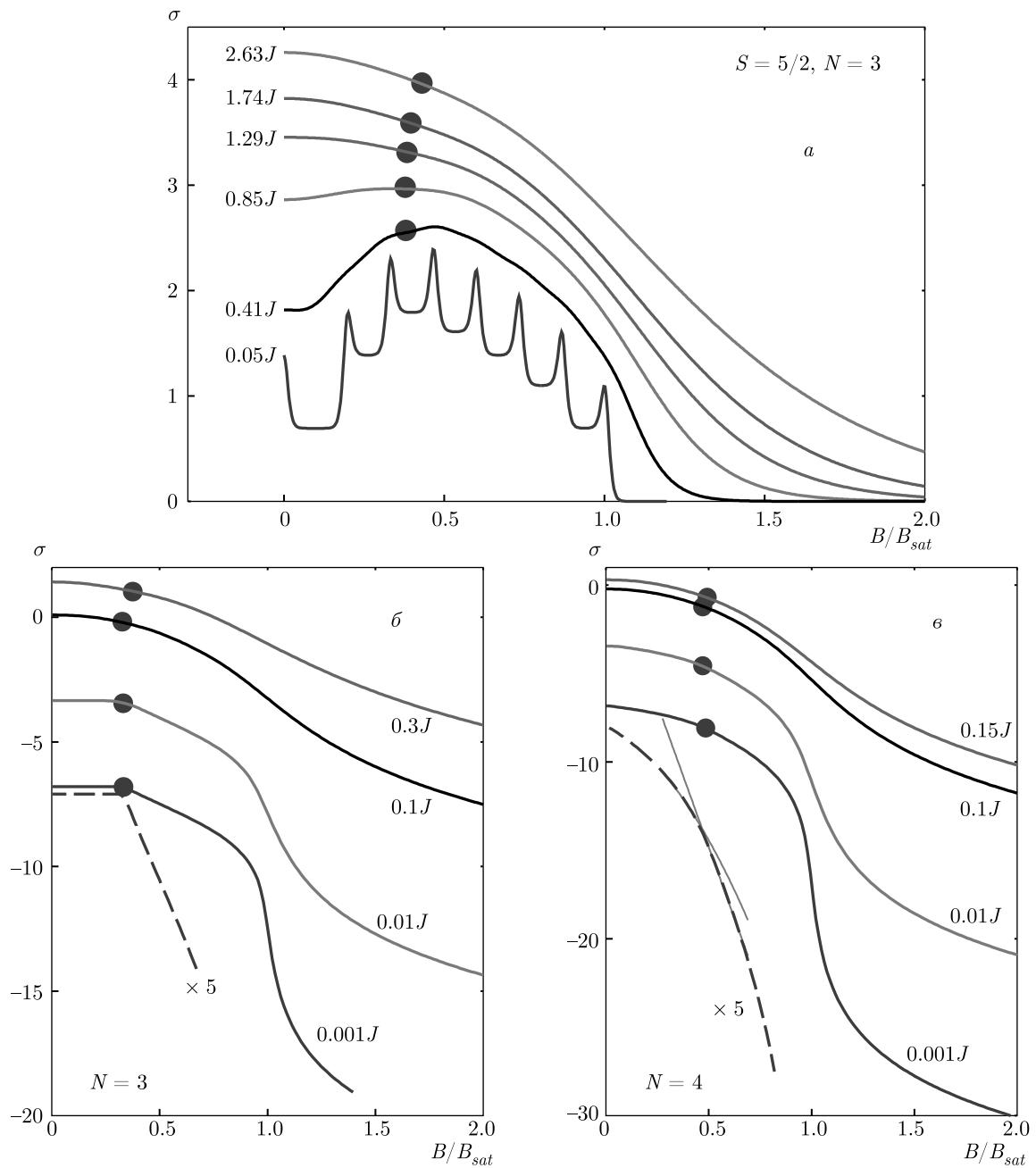


Рис. 3. (В цвете онлайн) Полевые зависимости энтропии при различных температурах для трехспинового кластера квантовых спинов $S = 5/2$ (*a*) и трех- и четырехспинового кластеров классических спинов (*б*, *в*). Темные кружки отмечают положения минимума дифференциальной восприимчивости при соответствующей температуре. Штриховые кривые (для классических моделей на рис. *б*, *в*) показывают соответствующие кривые после растяжения в 5 раз вдоль оси Y для более наглядной демонстрации изменения наклона кривых $\sigma(B)$, тонкие красные линии на рис. *в* являются гладкими кривыми, проведенными через точки кривой $\sigma(B)$ выше и ниже изменения наклона, их пересечение отмечает точку изменения наклона. Значения температуры на рис. *а* в единицах $JS(S+1)$ равны, соответственно, 0.0057, 0.0463, 0.097, 0.148, 0.199 и 0.3

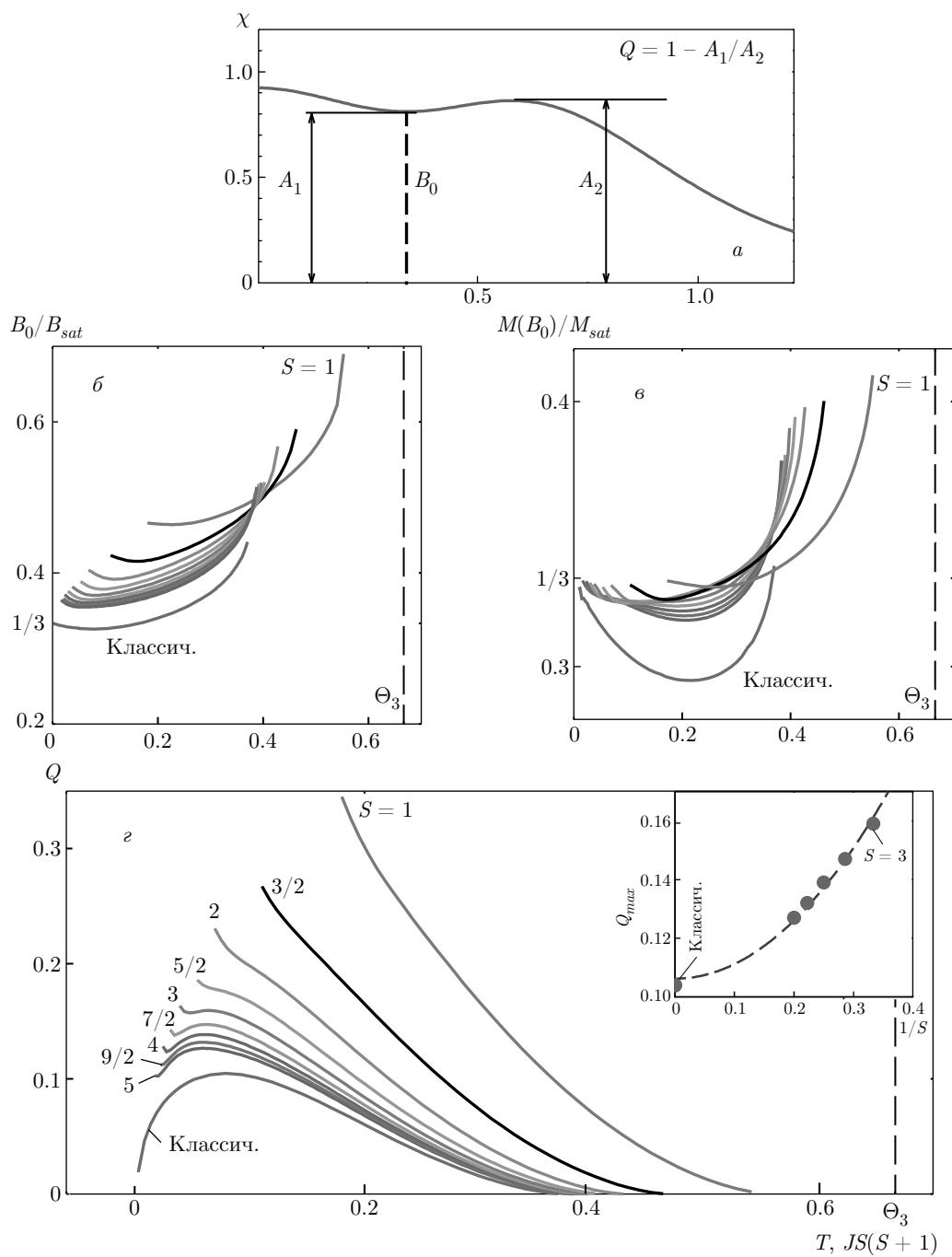


Рис. 4. (В цвете онлайн) *a*) Схема определения параметров напоминающей плато особенности на кривых намагничивания модельной задачи. На рис. *b,в,г* показаны результаты для трехспиновых ($N = 3$) кластеров спинов $S \geq 1$ (в том числе для классического предела). *б*) Температурная зависимость положения минимума дифференциальной восприимчивости. *в*) Температурная зависимость величины полной намагнченности кластера в поле минимума дифференциальной восприимчивости. *г*) Температурная зависимость фактора качества плато, на вставке: зависимость максимального значения фактора качества плато от спина в вершине кластера для $S \geq 3$, штриховая кривая проведена для наглядности. Рисунки *б,в,г* используют одинаковую цветовую схему для маркировки кривых. Вертикальные штриховые линии на рис. *б,в,г* отмечают значения температуры Кюри – Вейса, для квантовой модели шкала температур выражена в единицах $JS(S+1)$, для классических моделей — в единицах J

минимума останавливается где-то между двумя ближайшими ступенями на кривой намагничивания — такой минимум дифференциальной восприимчивости, очевидно, имеет другое, тривиальное, происхождение и не представляет здесь интереса. Для исключения этого эффекта при представлении результатов интервал температур ограничен со стороны низких температур достаточно условно выбранной температурой, при которой амплитуда регулярных осцилляций восприимчивости становится существенной. Результаты численного описания найденной особенности показаны на рис. 4, 5. Случай спина $S = 1/2$ на этих рисунках не представлен, так как в этом случае поведение дифференциальной восприимчивости тривиально: при низких температурах процесс намагничивания трехспинового кластера содержит две ступеньки: в нулевом поле (соответствующая поляризации двукратно вырожденного основного состояния кластера с полным спином $S = 1/2$) и в поле насыщения (соответствующая переходу в полностью поляризованное состояние с полным спином $S = 3/2$), а процесс намагничивания четырехспинового кластера содержит две ступеньки в поле, равном половине поля насыщения (переход между состояниями со спином $S = 0$ и $S = 1$) и в поле насыщения (переход в полностью поляризованное состояние со спином $S = 2$). Локальные минимумы дифференциальной восприимчивости оказываются заперты между этими ступеньками и всегда остаются в этом интервале полей при изменении температуры. Для полноты описания результаты для спина $S = 1/2$ представлены в Приложении В.

Как уже было упомянуто, похожая на плато особенность наблюдается (см. рис. 4, 5) в протяженном интервале температур, который для квантовых моделей начинается с температуры $T \sim J$ и продолжается до $T \sim 0.5JS(S+1)$, а для классических моделей — с $T = 0$ до $T \sim 0.2 \dots 0.3J$. Это указывает на присутствие двух характерных температур для процесса намагничивания таких кластеров: больший масштаб температур $T_1 \sim \Theta \sim JS(S+1)$ соответствует полному расщеплению спиновых уровней кластера, а меньший масштаб $T_2 \sim J$ соответствует различию энергии двух ближайших подуровней. При $T > T_1$ все подуровни кластера заселены и спины в вершинах кластера могут рассматриваться как почти свободные. При $T < T_2$ заселены только нижние подуровни и намагниченность кластера определяется его полным спином. Для большого значения спина S эти два масштаба температур могут различаться на порядок, создавая протяженный промежуточный интервал температур, где дискрет-

ность спиновых подуровней уже размыта тепловыми флуктуациями, но спиновые корреляции внутри кластера еще играют заметную роль.

Похожие на плато особенности наблюдаются в поле, близком к $1/3$ или $1/2$ от поля насыщения соответственно для трех- и четырехспиновых кластеров. Значение намагниченности при этом также близко соответственно к $1/3$ или $1/2$ от намагниченности насыщения. Эта особенность лучше видна для трехспиновых кластеров, где максимальное значение фактора качества для классической модели составляет 0.10 (для четырехспинового кластера это значение равно 0.02). Фактор качества обращается в нуль при некоторой температуре при нагревании, что соответствует исчезновению локального минимума дифференциальной восприимчивости.

5. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ДЛЯ $RbFe(MO_4)_2$

Антиферромагнетик на треугольной решетке $RbFe(MO_4)_2$ является примером магнетика, в котором наблюдается плато намагниченности [9, 10]. Измеренная фазовая диаграмма этого магнетика хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями. Однако аккуратные измерения намагниченности [10] показали, что минимум дифференциальной восприимчивости существует даже в парамагнитной фазе выше температуры Нееля. Кроме того, был изучен процесс намагничивания магнетика $Rb_{1-x}K_xFe(MO_4)_2$ с хаотической модуляцией обменных связей [14], эти исследования показали, что макроскопическая коллинеарная фаза может быть подавлена замещением примерно 15 % атомов рубидия атомами калия, причем коллинеарная фаза может восстановиться при нагреве из-за действия тепловых флуктуаций. Это восстановление сопровождается появлением плато намагниченности [14], температурная зависимость фактора качества для этого минимума оказывается качественно похожей на результаты для рассмотренных моделей: фактор качества равен нулю при $T = 0$, достигает максимального значения при некоторой температуре, а затем вновь уменьшается до нуля.

Допуская, что такое поведение намагниченности в парамагнитной фазе связано с ближними корреляциями спинов, сравним измеренные кривые намагничивания и экспериментально определенный

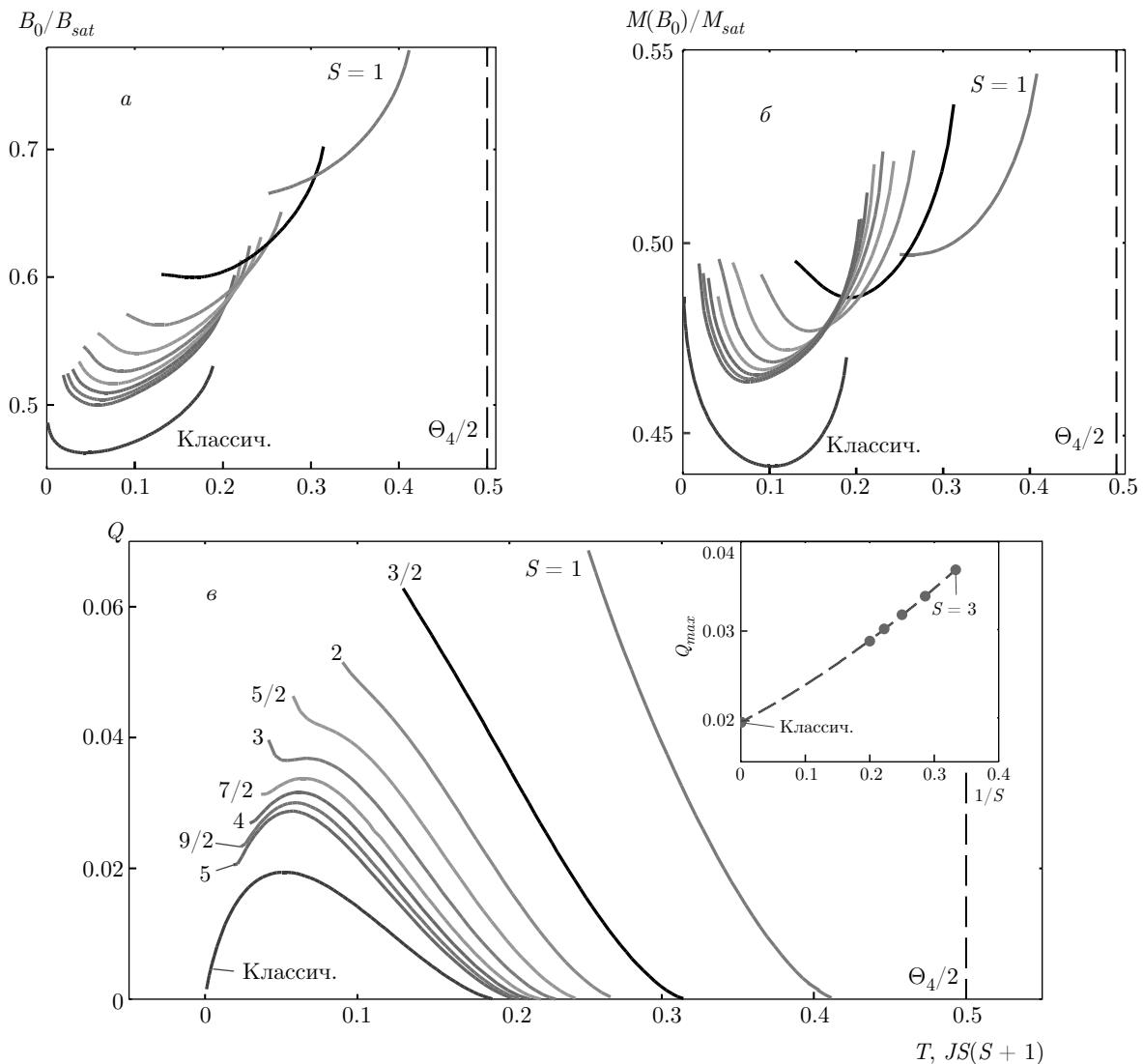


Рис. 5. (В цвете онлайн) Параметры напоминающей плато особенности на кривых намагничивания для четырехспинового ($N = 4$) кластера спинов $S \geq 1$ (включая классический предел): *а* — температурная зависимость положения минимума дифференциальной восприимчивости; *б* — температурная зависимость величины полной намагниченности кластера в поле минимума дифференциальной восприимчивости; *в* — температурная зависимость фактора качества плато, на вставке: зависимость максимального значения фактора качества плато от спина в вершине кластера для $S \geq 3$, штриховая кривая проведена для наглядности. Все панели используют одинаковую цветовую схему для маркировки кривых. Вертикальные штриховые линии на рис. *а*, *б*, *в* отмечают значения половины температуры Кюри–Вейса, для квантовой модели шкала температур выражена в единицах $JS(S + 1)$, для классических моделей — в единицах J

фактор качества с результатами нашей модельной задачи: трехспиновый кластер является предельным случаем коррелированных спинов на треугольной решетке. Делая такое сравнение, нельзя забывать про принципиальное различие макроскопического антиферромагнетика и микроскопического кластера: плато намагниченности в макроскопическом магнетике, даже если по каким-то причинам

фактор качества $Q < 1$, является отдельной фазой с четкими фазовыми границами, отличающейся симметрией от других упорядоченных фаз. В случае модельного микроскопического кластера состояние кластера в минимуме дифференциальной восприимчивости ничем специально не выделено. Однако, как будет показано далее, некоторые черты поведения простой модельной задачи оказываются

бллизки к поведению реального макроскопического магнетика.

Для подбора параметров модельной задачи мы потребуем, чтобы поле насыщения кластера совпадало с полем насыщения в $\text{RbFe}(\text{MO}_4)_2$, которое составляет 18.2 Тл при температуре 1.3…1.5 К и не меняется существенно при замене Rb на K. Температура Нееля в нулевом поле составляет 4.2 К в $\text{RbFe}(\text{MO}_4)_2$, она увеличивается примерно до 4.5 К в поле 6 Тл. Величина g -фактора известна из ЭПР-экспериментов [10] и составляет 2.2, спин магнитных ионов Fe равен $S = 5/2$. Это позволяет определить обменные интегралы для квантовой модели $J = g\mu_B B_{sat}/NS \approx 3.6$ К. Классическая модель полагает $|\mathbf{S}| = 1$, поэтому для количественного описания процесса намагничивания необходимо выбрать значение g -фактора, правильно воспроизводящее намагниченность насыщения $g\mu_B$, откуда $g_{cl} = 2.2 \times 5/2 = 5.5$. Тогда эффективная константа обменной связи в классической модели будет равна $J = g_{cl}\mu_B B_{sat}/N \approx 22.4$ К. Температуры Кюри–Вейса для модельного кластера оказываются равными 21 К для квантовой ($S = 5/2$) модели и 15 К для классической модели.

После этого кривые дифференциальной восприимчивости и фактор качества могут быть вычислены без дополнительных подгоночных параметров и сравнены с экспериментальными результатами для $\text{RbFe}(\text{MO}_4)_2$, результаты сравнения приведены на рис. 6. Сравнение показывает качественную схожесть модельной задачи и эксперимента, подчеркнем, что амплитуда вычисленной дифференциальной восприимчивости не содержит подгоночных параметров. Естественно, микроскопическая модельная задача не может воспроизвести эффекты, связанные с фазовыми переходами: резкие границы плато в упорядоченной фазе $\text{RbFe}(\text{MO}_4)_2$ и фактор качества в упорядоченной фазе чистого $\text{RbFe}(\text{MO}_4)_2$ сильно отличаются от результатов модельной задачи. В случае магнетика с хаотической модуляцией обменных связей $\text{Rb}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}(\text{MO}_4)_2$ максимальное значение фактора качества оказывается близко к модельным результатам для высокой концентрации примеси x . Но и в этом случае остается принципиальное различие, касающееся фазового перехода: фактор качества плато в $\text{Rb}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}(\text{MO}_4)_2$ начинает расти от нуля при некоторой температуре, в которой коллинеарная фаза *and* снова восстанавливается из-за усиливающихся тепловых флуктуаций, в то время как в микроскопическом кластере фактор качества непрерывно меняется, обращаясь в нуль лишь при $T = 0$.

6. ТЕМПЕРАТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ КЛАСТЕРА В БЛИЗИ ПОЛЯ НАСЫЩЕНИЯ

Дополнительно отметим еще одну обнаруженную черту процесса намагничивания вблизи поля насыщения. При $B \gg B_{sat}$ дифференциальная восприимчивость χ должна обращаться в нуль, так как полная намагниченность кластера стремится к насыщению. Характерный масштаб величины дифференциальной восприимчивости при низких температурах задается ее значением для классической модели при $T = 0$: $\chi_0 = (g\mu_B)^2/J$. Мы обнаружили, что вблизи поля насыщения значение магнитного поля, в котором дифференциальная восприимчивость кластера равна $\chi_0/2$, остается почти неизменным (меняется в пределах 1%) в довольно протяженном интервале температур (рис. 7). Это наблюдение может оказаться полезным при определении обменных констант из кривых намагничивания.

Такое стабильное поведение дифференциальной восприимчивости наблюдалось для спина в вершине кластера $S \geq 3/2$ (в том числе и для классической модели) при температурах примерно от $0.1JS(S+1)$ до $0.4JS(S+1)$ (примерно от $0.1J$ до $0.4J$ для классической модели) как для трехспиновых, так и для четырехспиновых кластеров, значение магнитного поля, в котором наблюдается это стабильное поведение, зависит от величины спина в узле кластера. Зависимость этого поля от величины обратного спина (в предположении, что для классической модели $1/S = 0$) для обоих размеров кластера описывается эмпирическим законом

$$\frac{B_{stab}}{B_{sat}} = 0.97 + 0.39 \frac{1}{S} - 0.14 \frac{1}{S^2}.$$

Отметим, что поле, в котором $\chi = \chi_0/2$, с ростом температуры сдвигается для рассмотренных квантовых моделей в поля выше B_{sat} , а для классической модели — в поля ниже B_{sat} .

7. ВЫВОДЫ

В процессе намагничивания трех- и четырехспиновых кластеров с треугольной и тетраэдрической геометриями обменных связей при конечной температуре проявляются два масштаба энергии: величина константы обменного взаимодействия и температура Кюри–Вейса. Эти масштабы энергии различаются в квантовой модели множителем $S(S+1)$. При самых низких температурах, $T \ll J$, кривые намагничивания для кластера из квантовых спинов

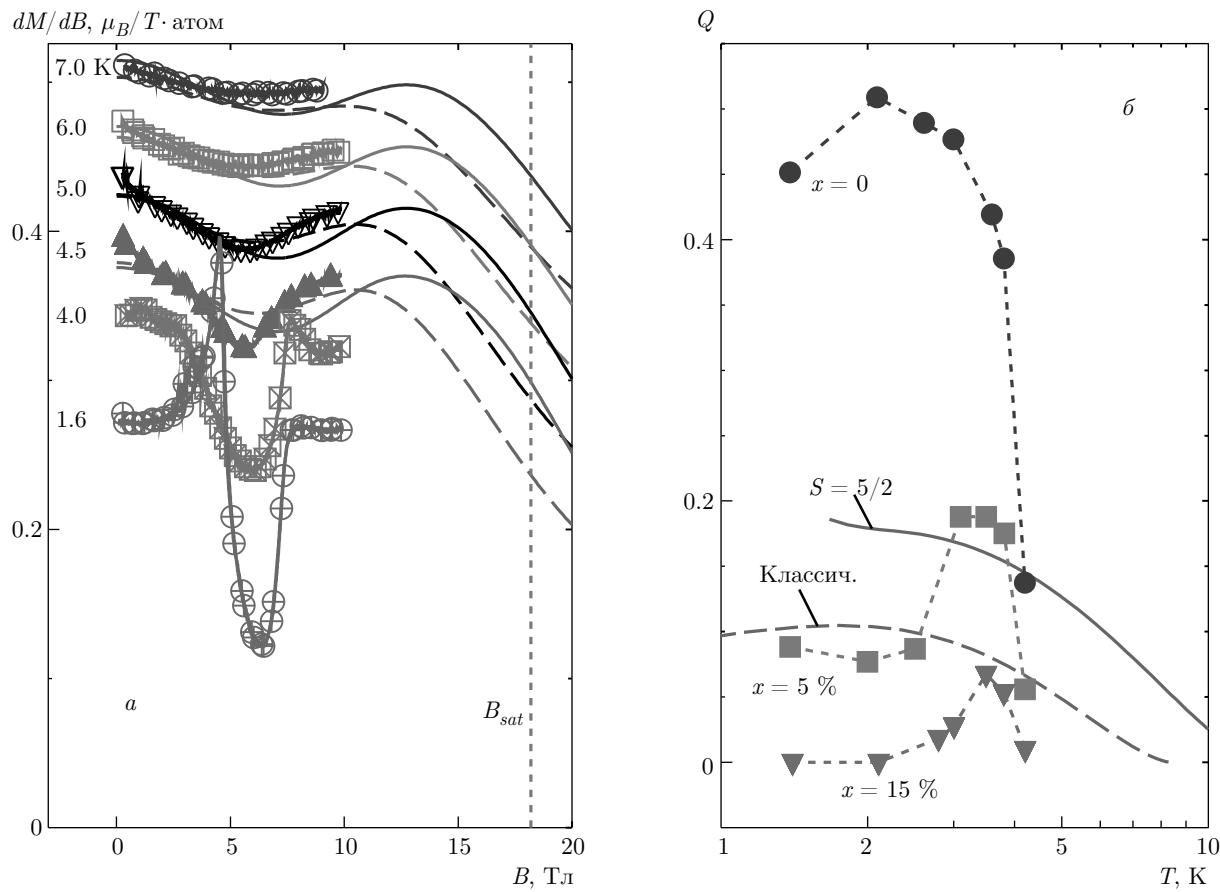


Рис. 6. (В цвете онлайн) *a)* Сравнение экспериментально измеренной дифференциальной восприимчивости треугольного антиферромагнетика $RbFe(MO_4)_2$ (линии с символами из работы [10]) с вычислениями для модельного трехспинового кластера (сплошные кривые для квантовой модели, штриховые кривые — для классической модели). Температура Нееля для $RbFe(MO_4)_2$ в отсутствие внешнего поля приближенно равна 4.3 К. Кривые для различных температур сдвинуты для наглядности, параметры модельной задачи подобраны по низкотемпературным полю насыщения и намагниченности, как описано в тексте. *б)* Сравнение определенного из эксперимента фактора качества плато для $Rb_{1-x}K_xFe(MO_4)_2$ (кривые с символами из работы [14]) с вычислениями для модельного трехспинового кластера (сплошные кривые для квантовой модели, штриховые кривые для классической модели). Параметры модельной задачи подобраны, как описано в тексте

имеют вид последовательных ступенек, при высоких температурах, $T \gg \Theta$, восприимчивость кластера подчиняется закону Кюри–Вейса. Однако в промежуточном интервале температур, $J \lesssim T \lesssim \Theta$, сохраняющиеся сильные корреляции между спинами приводят к нелинейности процесса намагничивания с локальным минимумом дифференциальной восприимчивости (наклона кривой намагничивания) примерно в том же поле (и примерно при том же значении намагниченности), где наблюдается плато намагниченности в антиферромагнетике на треугольной или пирохлорной решетке.

Мы проанализировали этот эффект на наборе квантовых модельных кластеров с различным значением спина в узле кластера ($1/2 \leq S \leq 5$) и на классической модели спинового кластера. Для каж-

кой модели были определены положение, фактор качества и интервалы существования такой похожей на плато особенности процесса намагничивания. Результаты расчетов для модельной системы сравнены с экспериментальными результатами для антиферромагнетика на треугольной решетке. Мы показали, что процесс намагничивания модельного кластера отражает некоторые особенности, наблюдаемые при намагничивании макроскопического антиферромагнетика на треугольной решетке в paramagnитной фазе или в присутствии сильного беспорядка. Однако микроскопическая модельная задача и макроскопический антиферромагнетик ведут себя принципиально различным образом ниже температуры Нееля, где возникают фазовые переходы в макроскопическом магнетике.

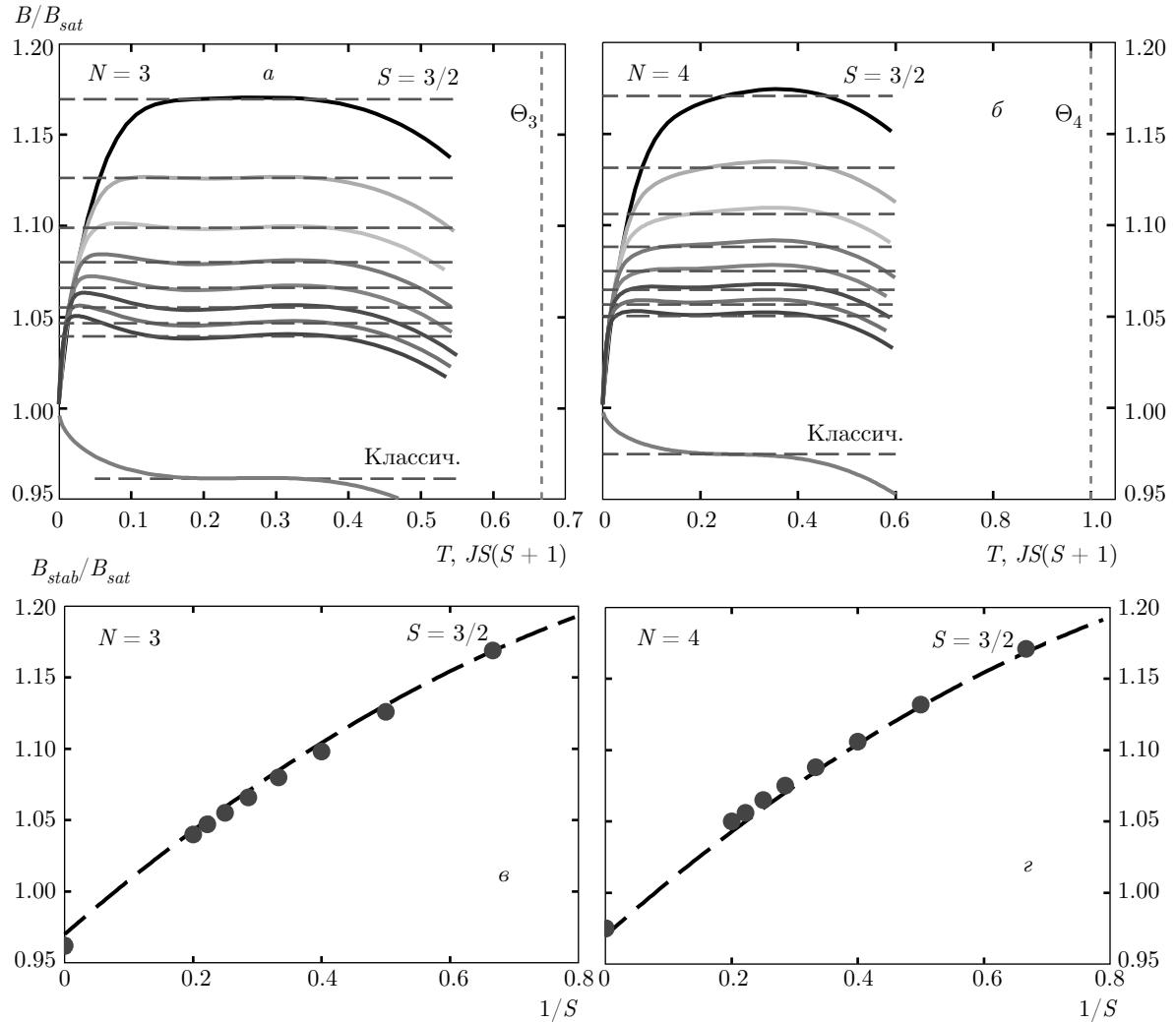


Рис. 7. а, б) Температурные зависимости магнитного поля, в котором дифференциальная восприимчивость равна $(1/2)(g\mu_B)^2/J$ для разных значений спина в вершине кластера ($3/2 \leq S \leq 5$ и для классической модели) соответственно для трехспинового ($N = 3$) и четырехспинового ($N = 4$) кластеров. Штриховые горизонтальные прямые соответствуют наилучшей в интервале стабильности прямой, вертикальные штриховые линии отмечают температуру Кюри – Вейса, температуры для квантовых моделей выражены в единицах $JS(S+1)$, температуры для классических моделей — в единицах J . **б, в)** Значения магнитного поля, в котором дифференциальная восприимчивость остается постоянной, от обратного спина в узле кластера соответственно для трех- и четырехспинового кластеров. Данные для классической модели показаны для $1/S = 0$. Штриховая кривая — эмпирическая подгонка квадратичным полиномом $B/B_{sat} = 0.97 + 0.39/S - 0.14/S^2$ (одинаковым для $N = 3$ и $N = 4$)

Автор благодарен Л. Е. Свистову (ИФП РАН) за привлечение внимания к этой задаче и А. И. Смирнову (ИФП РАН) за предоставление экспериментальных данных для сравнения и многочисленные полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 17-02-01505), а также в рамках Программы фундаментальных исследований Высшей школы экономики.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Детали вычисления весового коэффициента

Для квантовых моделей весовой коэффициент $D_N(S)$ (число способов, которым можно получить полный спин S для данного кластера) вычислялся прямым подсчетом. Для квантово-механической модели конечного размера можно легко посчитать все возможные проекции полного спина, принимающие значения от $-NS$ до NS . Эти значения проекций могут отвечать разным значениям полного спина,

полный спин кластера может принимать значения от NS до 0 или $1/2$. Для вычисления весового коэффициента необходимо просто заметить, что если неотрицательная проекция спина S_z может быть получена n_{S_z} способами, а большее значение проекции полного спина ($S_z + 1$) может быть получено n_{S_z+1} способом, то весовой коэффициент для полного спина $S = S_z$ в точности равен $D_N(S) = n_{S_z} - n_{S_z+1}$, так как все спиновые состояния, для которых имеется проекция спина ($S_z + 1$), обязаны включать в свои спиновые мультиплеты и состояние с проекцией спина S_z . Результаты такого пересчета сведены в табл. 1, 2, 3. Мы не получили строго компактных выражений для весовых коэффициентов, но для $N = 3$ найденные значения можно описать как

$$D(S_{tot}) = 1 + 2S_{tot} \quad \text{для } S_{tot} \leq S,$$

$$D(S_{tot}) = 1 + 3S - S_{tot} \quad \text{для } S_{tot} > S$$

(здесь S — величина спина в вершине кластера). Также можно отметить, что весовой коэффициент для синглетного ($S = 0$) состояния четырехспинового кластера растет с ростом спина как $(2S + 1)$, этот рост вырождения согласуется с макроскопическим вырождением антиферромагнетиков на пирохлорной решетке.

Для вычисления весового фактора классической модели начнем со случая $N = 2$. Мы заинтересованы в полном спине пары, который не изменится при одновременном повороте двух спинов. Таким образом, можно зафиксировать один спин и при вычислении весового коэффициента учитывать только возможные ориентации второго спина. Обозначим полярный угол, описывающий ориентацию второго спина, Θ и примем соглашение об отсчете угла, по которому $\Theta = 0$ соответствует антипараллельной ориентации этих векторов. Тогда полный спин пары

$$S^2 = 2(1 + \cos \Theta)$$

(напомним, что в классической модели спиновые векторы имеют единичную длину). Продифференцировав это уравнение,

$$S dS = -\sin \Theta d\Theta,$$

и сравнив его с определением доли реализаций спиновых конфигураций, попадающих в данный интервал углов,

$$\frac{dn}{n} = \frac{2\pi \sin \Theta d\Theta}{4\pi},$$

получаем для весового коэффициента

$$D_2(S) = \frac{1}{n} \frac{dn}{dS} = \frac{S}{2}, \quad (13)$$

здесь $0 \leq S \leq 2$.

Результат может показаться континтуитивным: вероятность антипараллельной конфигурации $S = 0$ получается много меньшей, чем вероятность параллельной конфигурации $S = 2$. Такое поведение связано с тем, что для антипараллельной ($S = 0$) ориентации малые отклонения спинов приведут к линейному по углу отклонения росту полного спина, в то время как для параллельной ($S = 2$) ориентации малые отклонения приведут лишь к квадратичному уменьшению полного спина. Также можно отметить, что непрерывность классической модели приводит здесь к сильному отличию от квантовой задачи сложения моментов: в квантовой задаче каждое значение полного спина от 0 до $2S$ получается единственным способом.

Для случая трех спинов, $N = 3$, также зафиксируем направление одного из спинов \mathbf{S}_1 . Два других спина могут быть просуммированы независимо, $\sigma = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$, распределение длин вектора σ найдено выше. Тогда полный спин

$$S^2 = 1 + \sigma^2 + 2\sigma \cos \Theta,$$

здесь выбор полярного угла Θ аналогичен сделанному выше.

Все возможные конфигурации, дающие различные значения полного спина, могут быть отражены на плоскости $(\sigma, \cos \Theta)$ с ограничениями $0 \leq \sigma \leq 2$ и $-1 \leq \cos \Theta \leq 1$. Доля реализаций спиновых конфигураций в элементе $d\sigma d\cos \Theta$ равна

$$\frac{dn}{n} = D_3(\sigma) d\sigma d(\cos \Theta)/2 = \frac{\sigma}{4} d\sigma d(\cos \Theta).$$

Из уравнения изолинии $\cos \Theta = (S^2 - 1 - \sigma^2)/(2\sigma)$ получаем $d(\cos \Theta) = S dS / \sigma$. Отсюда легко выразить дифференциальный весовой коэффициент

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dS} = \frac{S}{4} d\sigma,$$

который должен быть проинтегрирован по всем возможным значениям σ .

Возможные значения σ зависят от полного спина S : $(1 - S) \leq \sigma \leq (1 + S)$ для $S < 1$, и $(S - 1) \leq \sigma \leq 2$ для $S > 1$. Отсюда для искомого весового коэффициента

$$D_3(S) = \begin{cases} \frac{S^2}{2}, & 0 \leq S < 1, \\ \frac{S(3 - S)}{4}, & 1 \leq S \leq 3. \end{cases} \quad (14)$$

Наконец, для четырехспинового кластера, $N = 4$, мы воспользуемся таким же подходом. Зафиксируем направление первого спина \mathbf{S}_1 и просумми-

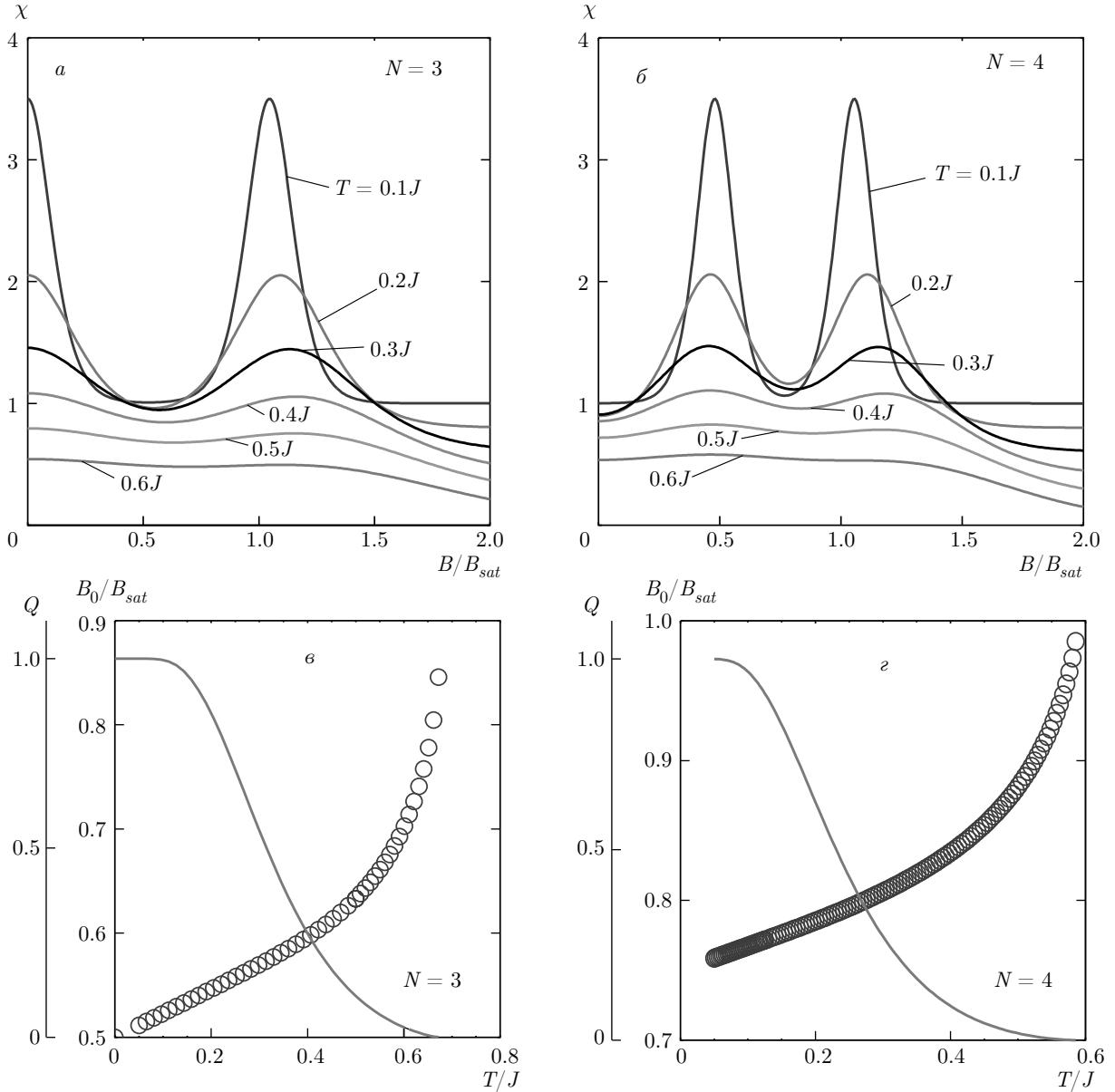


Рис. 8. а, б) Примеры кривых дифференциальной восприимчивости для трехспинового и четырехспинового кластеров из спинов $S = 1/2$. Кривые сдвинуты для наглядности. в, г) Температурные зависимости положения минимума восприимчивости (символы) и фактора качества (сплошная кривая) для трехспинового и четырехспинового кластеров спинов $S = 1/2$

руем оставшиеся три вектора в спиновый вектор $\sigma = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4$ с известным распределением по длинам. Далее получим дифференциальный весовой коэффициент

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dS} = \frac{S}{2} \frac{D_3(\sigma)}{\sigma} d\sigma,$$

который должен быть проинтегрирован по допустимым значениям σ . Допустимые интервалы σ таковы: $(1-S) \leq \sigma \leq (1+S)$ для $S < 1$, $(S-1) \leq \sigma \leq (1+S)$ для $1 < S < 2$ и $(S-1) \leq \sigma \leq 3$ для $S > 2$. Отсюда

$$D_4(S) = \begin{cases} \frac{S^2}{2} \left(1 - \frac{3}{8}S\right), & 0 \leq S < 2, \\ S \left(1 - \frac{S}{4}\right)^2, & 2 \leq S \leq 4. \end{cases} \quad (15)$$

Весовые коэффициенты $D_3(S)$ и $D_4(S)$ обращаются в нуль на предельных значениях (0 и N) и достигают максимума при $S = 3/2$ и $S = 16/9$ соответственно для трех- и четырехспинового кластеров. Сами весовые коэффициенты непрерывны,

но их производные имеют разрыв (скачок): наклон кривых $D_N(S)$ меняется при $S = 1$ и $S = 2$ соответственно для трехспиновых и четырехспиновых кластеров. Полученные значения весовых коэффициентов для классических моделей совпадают с вычисленными другим методом [21].

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Кривые восприимчивости для предельного квантового случая $S = 1/2$

Случай спиновых кластеров из спинов $S = 1/2$ отличается от разобранных выше. Причиной является то, что для маленького спина S масштабы энергии обменного взаимодействия J и температуры Кюри–Вейса $JS(S+1)$ не различаются заметно и, следовательно, промежуточный температурный режим просто отсутствует.

Моделирование процесса намагничивания и кривых восприимчивости (рис. 8) показывает ожидаемое сглаживание ступенек намагниченности при нагреве до $T \approx 0.3J$, дифференциальная восприимчивость демонстрирует локальный минимум до температур $0.6 \dots 0.7J$. С охлаждением этот локальный минимум плавно смещается к позиции точно посередине между двумя ступеньками намагниченности: к $B_0 = B_{sat}/2$ для трехспинового кластера и к $B_0 = 3B_{sat}/4$ для четырехспинового. Соответственно, фактор качества достигает единицы при $T = 0$. Аналогичное «запирание» минимума восприимчивости между двумя ступеньками намагниченности возникает и для больших спинов, однако для большего значения спина температурная эволюция параметров, характеризующих похожую на плато особенность, изменяется (происходит кроссовер между двумя режимами) при возникновении «запирания»: фактор качества начинает расти быстрее, наклон кривой $B_0(T)$ заметно изменяется. Такое изменение позволяло в случае спинов $S \geq 1$ достаточно четко выделить границу низкотемпературного режима, в котором положение локального минимума определяется «запиранием» между ближайшими ступеньками намагниченности, и исключить этот тривиальный режим из рассмотрения.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. P. Ramirez, Ann. Rev. Mater. Sci. **24**, 453 (1994).
2. J. S. Gardner, M. J. P. Gingras, and J. E. Greidan, Rev. Mod. Phys. **82**, 53 (2010).
3. *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, ed. by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer Science and Business Media (2011).
4. A. V. Chubokov and D. I. Golosov, J. Phys.: Cond. Matt. **3**, 69 (1991).
5. S. Nishimoto, N. Shibata, and C. Hotta, Nature Comm. **4**, 2287 (2013).
6. Y. Motome, K. Penc, and N. Shannon, J. Magn. Magn. Mater. **300**, 57 (2006).
7. A. Honecker, J. Schulenburg, and J. Richter, J. Phys.: Condens. Matter **16**, S749 (2004).
8. K. Morita, T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama, Phys. Rev. B **97**, 014412 (2018).
9. T. Inami, Y. Ajiro, and T. Goto, J. Phys. Soc. Jpn **65**, 2374 (1996).
10. L. E. Svitov, A. I. Smirnov, L. A. Prozorova, O. A. Petrenko, A. Micheler, N. Buttgen, A. Ya. Shapiro, and L. N. Demianets, Phys. Rev. B **74**, 024412 (2006).
11. H. Ueda, H. Mitamura, T. Goto, and Y. Ueda, Phys. Rev. B **73**, 094415 (2006).
12. N. Shannon, H. Ueda, Y. Motome, K. Penc, H. Shiba and H. Takagi, J. Phys.: Conf. Ser. **51**, 31 (2006).
13. K. Okuta, S. Hara, H. Sato, Y. Narumi, and K. Kindo, J. Phys. Soc. Jpn **80**, 063703 (2011).
14. A. I. Smirnov, T. A. Soldatov, O. A. Petrenko, A. Takata, T. Kida, M. Hagiwara, A. Ya. Shapiro, and M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. Lett. **119**, 047204 (2017).
15. <https://www.gnu.org/software/octave/>.
16. C. Schröder, H. Nojiri, Jürgen Schnack, P. Hage, M. Luban, and P. Kögerler, Phys. Rev. Lett. **94**, 017205 (2005).
17. J. Schnack, J. Low Temp. Phys. **142**, 283 (2006); <https://doi.org/10.1007/s10909-006-9184-x>.
18. A. Honecker and M. E. Zhitomirsky, J. Phys.: Conf. Series **145**, 012082 (2009).
19. M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B **67**, 104421 (2003).
20. S. S. Sosin, L. A. Prozorova, A. I. Smirnov, A. I. Golov, I. B. Berkutov, O. A. Petrenko, G. Balakrishnan, and M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B **71**, 094413 (2005).
21. O. Ciftja, M. Luban, M. Auslender, and J. H. Luscombe, Phys. Rev. B **60**, 10122 (1999).