

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ОБМЕННОГО ИНТЕГРАЛА В ДВУМЕРНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ K_2CuF_4

М. В. Ерёмин, А. Ю. Завидонов

В [1, 2] обнаружена температурная зависимость ширины линии ЭПР ионов Cu^{2+} в двумерном ферромагнетике K_2CuF_4 . По мнению авторов [1, 2], она обусловлена уменьшением обменной связи между ионами меди с температурой.

В принципе такой эффект возможен в отдельно взятой паре магнитных ионов и обсуждался еще в [3]. Наиболее сильная температурная зависимость обменного интеграла ожидается у пар магнитных ионов с незамороженным орбитальным движением, когда ион-решеточное взаимодействие особенно велико [4, 5].

В данной заметке мы хотим обратить внимание на еще один

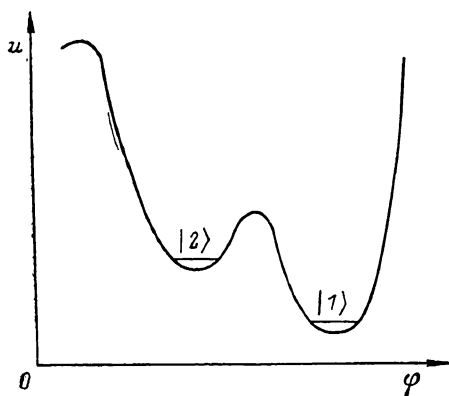


Рис. 1. Адиабатический потенциал иона Cu^{2+} в кристалле K_2CuF_4 .

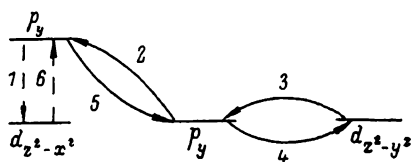


Рис. 2. Пример процесса, приводящего к температурной зависимости суперобмена.

Штриховая линия соответствует матричному элементу электронно-колебательного взаимодействия, сплошные линии соответствуют перескокам электрона.

механизм возникновения температурной зависимости обменной связи в концентрированном кристалле, связанный с проявлением кооперативного эффекта Яна—Теллера.

Структура кристалла K_2CuF_4 известна [6]. При низких температурах в плоскостях xu ионы меди образуют квадратную подрешетку с антиферродисторсионно-упорядоченными состояниями $d_{z^2-x^2}$ и $d_{z^2-y^2}$ [7].

Адиабатический потенциал отдельного центра Cu^{2+} при низкой температуре изображен на рис. 1. Гамильтониан системы центров с учетом их взаимодействия через решетку имеет вид

$$\hat{H} = -\Delta_0 \sum \sigma_z^i + \delta \sum \sigma_x^i + \sum A_{ij} \sigma_z^i \sigma_z^j, \quad (1)$$

где σ_x , σ_z — матрицы Паули, определённые в базисе минимумов адиабатического потенциала (в базисе функций $d_{z^2-x^2}$ и $d_{z^2-y^2}$); δ — параметр туннелирования; Δ_0 — ромбическое поле; A_{ij} — константа взаимодействия.

Применяя метод молекулярного поля, аналогичный известному в теории магнетизма для двухподрешеточного антиферромагнетика, перепишем (1) в виде

$$\hat{H} = \sum_a (-\Delta_0 + A_1 \langle \sigma_z^a \rangle + A_2 \langle \sigma_x^a \rangle) \sigma_z^a + \sum (-\Delta_0 + A_1 \langle \sigma_z^a \rangle + A_2 \langle \sigma_x^a \rangle) \sigma_x^a + \delta \sum_{a,b} \sigma_x^a \sigma_x^b = \sum \Delta_a \sigma_z^a + \sum \Delta_b \sigma_x^b + \delta \sum_{a,b} \sigma_x^a \sigma_x^b, \quad (2)$$

где $A_1 = \sum A_{ab}$, $A_2 = \sum A_{uv}$, индексы «a» и «b» относятся к различным подрешеткам. Предполагая туннелирование малым (по отношению к Δ_a и Δ_b), найдем уравнения на $\langle \sigma_z^i \rangle$

$$\langle \sigma_z^a \rangle = -\text{th} \left(\frac{-\Delta_0 + A_1 \langle \sigma_z^b \rangle + A_2 \langle \sigma_z^a \rangle}{T} \right), \quad (3)$$

$$\langle \sigma_z^b \rangle = -\text{th} \left(\frac{-\Delta_0 + A_1 \langle \sigma_z^a \rangle + A_2 \langle \sigma_z^b \rangle}{T} \right). \quad (4)$$

Здесь T — температура кристалла.

Волновые функции ионов Cu^{2+} , относящихся к различным подрешеткам «a» и «b», имеют вид

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{x^2-x^2} + \frac{\delta}{2|\Delta_a|} d_{x^2-y^2} \right), \quad (5)$$

$$\Psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{x^2-y^2} + \frac{\delta}{2|\Delta_b|} d_{x^2-x^2} \right). \quad (6)$$

Обменный интеграл пары $\text{Cu}^{2+}(a) - \text{Cu}^{2+}(b)$, согласно [8], складывается из ферромагнитного I_Φ и антиферромагнитного I_A вкладов и, исходя из (5) и (6), имеет вид

$$I = I_\Phi^* \left(1 - \left| \frac{I_A}{I_\Phi} \right| \frac{\delta^2}{4\Delta_a^2} \right). \quad (7)$$

Чтобы оценить, насколько эффективен предложенный механизм (7), определим, как изменится обменный интеграл I при повышении температуры кристалла от 100 до 300 К. Согласно [8], $I_\Phi = -22 \text{ см}^{-1}$, $I_A = 220 \text{ см}^{-1}$. Оценки из [9] для величин A_1 и A_2 дают 300 К и 20 К соответственно. Полагая $\Delta_0 \sim 30 \text{ К}$, $\delta \sim 10 \text{ К}$ и решая (3) и (4) на ЭВМ, получаем $I(300 \text{ К}) - I(100 \text{ К}) \sim 5 \text{ см}^{-1}$. Видно, что получающаяся температурная зависимость достаточно сильная и может объяснить наблюдаемое в [1, 2] изменение ширины линии ЭПР с температурой.

Следует подчеркнуть, что указанный источник температурной зависимости I отсутствует в примесных парах, например в $\text{K}_2\text{ZnF}_4 : \text{Cu}^{2+}$. В связи с этим наши выводы можно проверить экспериментально. В случае примесных пар ближайших соседей в $\text{K}_2\text{ZnF}_4 : \text{Cu}^{2+}$ наибольший вклад в температурную зависимость I вносит процесс, изображенный на рис. 2, когда $3d$ - и $4p$ -состояния иона меди смешиваются нечетными колебаниями, как в псевдоэффекте Яна—Теллера. Оценки показывают, что в этом случае I изменяется всего на 1–3 %.

Л и т е р а т у р а

- [1] Yamada I., Ikebe M. J. Phys. Soc. Jap., 1972, vol. 33, N 5, p. 1334–1341.
- [2] Zaspel C. E., Drumheller J. E. Phys. Rev. B, 1977, vol. 16, N 5, p. 1771–1781.
- [3] Tyablikov S. V., Konvent G. Phys. Lett., 1968, vol. 27A, N 3, p. 130–131.
- [4] Кугель К. И., Хомский Д. И. ЖЭТФ, 1980, т. 79, № 3, с. 987–1005.
- [5] Вестер Б. Г. ФТТ, 1986, т. 28, № 8, с. 2406–2410.
- [6] Reinen D., Krause S. Inorganic Chem., 1981, vol. 20, N 9, s. 2750–2759.
- [7] Khomskii D. I., Kugel K. I. Sol. St. Commun., 1973, vol. 13, p. 763–766.
- [8] Ерёмин М. В., Яблоков Ю. В., Иванова Т. А., Гумеров Р. М. ЖЭТФ, 1983, т. 83, № 5, с. 1005–1010.
- [9] Ерёмин М. В., Завидонов А. Ю., Кочелав Б. И. ЖЭТФ, 1986, т. 90, № 2, с. 537–545.

Казанский государственный университет им. В. И. Ульянова-Ленина
Казань

Поступило в Редакцию
7 июля 1987 г.