

Элементарные спиновые возбуждения в гейзенберговском антиферромагнетике $S = 1/2$ со скирмионами

© С.И. Белов, Б.И. Кочелаев

Казанский государственный университет,
420008 Казань, Россия

(Поступила в Редакцию 3 октября 1996 г.)

Исследованы элементарные спиновые возбуждения в двумерных гейзенберговских антиферромагнетиках со спином $S = 1/2$, находящихся в метастабильном пространственно неоднородном состоянии. Найдены энергетический спектр возбуждений, локальный параметр порядка, температурная зависимость длины спиновых корреляций. Показано, что полученные результаты могут быть использованы для объяснения экспериментальных данных по рассеянию нейтронов в La_2CuO_4 при температурах $T > T_N$.

Существенные успехи последних лет в описании магнитных свойств двумерных гейзенберговских магнетиков со спином $S = 1/2$ при температурах $T > 0$ были связаны с ренормгрупповым анализом классической нелинейной сигма-модели. Влияние квантовых флуктуаций на перенормировку основных параметров модели учитывалось на основе спин-волновой теории при $T = 0$. В рамках такого подхода Чакраварти, Гальперину и Нельсону (ЧГН) удалось вычислить без каких-либо подгоночных параметров радиус магнитных корреляций и корреляционные функции для гейзенберговского антиферромагнетика с учетом взаимодействия только ближайших соседей в квадратной решетке спинов [1]. Детальное сравнение температурной зависимости магнитной корреляционной длины с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов в нелегированном оксиде меди La_2CuO_4 при температурах выше температуры Нееля T_N показало качественное согласие теории ЧГН с экспериментом [2,3]. При этом, однако, без подгонки параметров обойтись не удалось.

В настоящей работе предлагается другой подход к интерпретации этих измерений, основанный на существовании при $T > 0$ метастабильных пространственно неоднородных состояний спин-системы двумерного гейзенберговского магнетика. Возможность такого объяснения магнитных свойств слоистых соединений при $T > T_N$ отмечалась ранее Вальднером [4]. Возникновение локальных статических искажений однородного основного состояния двумерного гейзенберговского ферромагнетика было установлено Белавиным и Поляковым на основе классической нелинейной сигма-модели [5]. Мы используем с самого начала квантовое рассмотрение, что позволит помимо решения задачи о метастабильных состояниях получить гамильтониан для описания спиновых флуктуаций. Затем методом функций Грина будут найдены спектр элементарных возбуждений, локальный параметр порядка и радиус магнитных корреляций.

1. Спектр элементарных возбуждений и локальный параметр порядка

Исходным пунктом вычислений является унитарное преобразование гейзенберговского гамильтониана к но-

вым локальным осям квантования в каждом узле квадратной решетки спинов $S = 1/2$

$$\tilde{H} = U^{-1}HU = J \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{S}_i \tilde{S}_j. \quad (1)$$

Здесь $\langle ij \rangle$ означает суммирование лишь по ближайшим узлам i и j двух подрешеток спинов, J — соответствующий обменный интеграл, а унитарный оператор U имеет вид

$$U = \prod_{ij} \exp(iS_i^z \varphi_i) \exp(iS_i^y \theta_i) \exp(iS_j^z \varphi_j) \exp(iS_j^y \theta_j). \quad (2)$$

Имея в виду существование локального антиферромагнитного порядка, определим локальные оси квантования таким образом, чтобы поперечные компоненты спина, усредненные с равновесной матрицей плотности, обращались в нуль, а продольные компоненты соседних спинов i и j имели противоположный знак: $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$, $\langle S_i^z \rangle = -\langle S_j^z \rangle = \sigma$. Результат преобразования удобно записать в Паули-операторах для двух подрешеток

$$S_i^x - iS_i^y = a_i^+, \quad S_i^x + iS_i^y = a_i, \quad S_i^z = 1/2 - a_i^+ a_i,$$

$$S_j^x - iS_j^y = b_j, \quad S_j^x + iS_j^y = b_j^+, \quad S_j^z = -1/2 + b_j^+ b_j. \quad (3)$$

Тогда гамильтониан (1) можно привести к виду

$$H = E_0 + E_{sk} + H_1 + H_2 + H_3,$$

$$E_0 = -J\sigma(1 - \sigma)Nz, \quad E_{sk} = J\sigma(1 - \sigma) \sum_{\langle ij \rangle} (1 - A_{ij}),$$

$$H_1 = J \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ \sigma A_{ij} (a_i^+ a_i + b_j^+ b_j) + B_{ij} a_i b_j + B_{ij}^* a_i^+ b_j^+ + C_{ij} a_i b_j^+ + C_{ij}^* a_i^+ b_j \right\},$$

$$H_2 = -J \sum_{\langle ij \rangle} A_{ij} (a_i^+ a_i + \sigma - 1/2) (b_j^+ b_j + \sigma - 1/2). \quad (4)$$

Здесь N — полное число спинов, z — число ближайших соседей ($z = 4$), $E_0 + E_{sk}$ представляет собой энергию метастабильного состояния, в которой выделена неоднородная часть E_{sk} . Гамильтониан $H_1 + H_2$ описывает

спиновые флуктуации над метастабильной конфигурацией, явный вид H_3 не выписан, поскольку он исчезает после минимизации E_{sk} (см. далее). Коэффициенты в гамильтониане имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \cos \theta_i \cos \theta_j + \sin \theta_i \sin \theta_j \cos(\varphi_i - \varphi_j), \\ 4B_{ij} &= (\cos \theta_i \cos \theta_j + 1) \cos(\varphi_i - \varphi_j) + \sin \theta_i \sin \theta_j \\ &\quad + i \sin(\varphi_i - \varphi_j)(\cos \theta_i + \cos \theta_j), \\ 4C_{ij} &= (\cos \theta_i \cos \theta_j - 1) \cos(\varphi_i - \varphi_j) + \sin \theta_i \sin \theta_j \\ &\quad - i \sin(\varphi_i - \varphi_j)(\cos \theta_i - \cos \theta_j). \end{aligned} \quad (5)$$

Структуру метастабильного неоднородного состояния находим путем минимизации функционала $E_{sk}(\{\theta\}, \{\varphi\})$ по θ и φ . После перехода к непрерывному пределу в случае единственного скирмиона получается аксиально-симметричное решение в полярных координатах r, ϕ

$$\text{tg}(\theta/2) = r/r_0, \quad \varphi = \phi, \quad E_{sk} = 4\pi J\sigma(1 - \sigma) \equiv \varepsilon_{sk}, \quad (6)$$

где r_0 имеет смысл радиуса скирмиона (при $r = r_0$ $\langle \tilde{S}_z \rangle = \sigma \cos \theta = 0$). Этот результат для распределения углов θ был получен в работе Скирме [6] в связи с задачей о топологических солитонах бозонных полей. Пространственная структура скирмиона получается стереографической проекцией точек сферы на плоскость; антискирмион образуется при дополнительном отражении в плоскости, проходящей через центр сферы. В общем случае $E_{sk} = Q\varepsilon_{sk}$, где Q определяется наибольшим из чисел скирмионов и антискирмионов (см. [5]). Подчеркнем, что в рамках классической нелинейной сигма-модели $\varepsilon_{sk} = 4\pi JS^2$.

Для определения неизвестного пока локального параметра σ запишем уравнения движения для коммутаторных функций Грина

$$\begin{aligned} G_{i'v}^1(t) &= -i\theta(t) \langle [a_i(t), a_{i'}^+(0)] \rangle, \\ G_{j'v}^2 &= -i\theta(t) \langle [b_j^+(t), a_{j'}^+(0)] \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

В приближении молекулярного поля и с учетом условий минимума получаем после Фурье-преобразования по времени и перехода к непрерывному пределу

$$\begin{aligned} \omega G^1(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= 2\sigma a^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + J\sigma a^2 \\ &\quad \times \{ \hat{u}(\mathbf{r}) G^1(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') + \hat{v}(\mathbf{r}) G^2(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \}, \\ \omega G^2(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -J\sigma a^2 \{ \hat{u}(\mathbf{r}) G^2(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &\quad + \hat{v}(\mathbf{r}) G^1(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \}, \end{aligned} \quad (8)$$

где введены операторы

$$\begin{aligned} \hat{u} &= z/a^2 - 2 \sin^2 \theta (\nabla \varphi)^2, \\ \hat{v} &= z/a^2 + \nabla^2 - 2i \cos \theta (\nabla \varphi, \nabla) - (\nabla \varphi)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Для решения системы уравнений (10) удобно разложить функции Грина по ортонормированной системе собственных функций $\Psi_f(\mathbf{r})$ оператора $\hat{u} - \hat{v}$

$$\begin{aligned} G^{1,2}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{ff'} \Psi_f(\mathbf{r}) \Psi_{f'}^*(\mathbf{r}') G_{ff'}^{1,2}(\omega), \\ (\hat{u} - \hat{v}) \Psi_f(\mathbf{r}) &= k_f^2 \Psi_f(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (10)$$

Подстановка (10) в (8) дает

$$G_{ff'}^1 = \frac{2\sigma(\omega + z\sigma J)}{\omega^2 - \varepsilon_f^2} \delta_{ff'}, \quad G_{ff'}^2 = -\frac{2z\gamma_f \sigma^2 J}{\omega^2 - \varepsilon_f^2} \delta_{ff'} \quad (11)$$

с $\gamma_f = 1 - (ak_f)^2/z$ и $\varepsilon_f \approx 2\sqrt{2}\sigma J a k_f$. Уравнение для локального параметра порядка σ получаем обычным путем, используя равенство $\langle a_i^+ a_i \rangle = 1/2 - \sigma$ и стандартные соотношения между корреляционными и гриновскими функциями

$$\frac{1}{\sigma} = \sum_f \frac{2z\sigma J}{\varepsilon_f} |\Psi_f(\mathbf{r})|^2 \text{cth} \frac{\varepsilon_f}{2k_B T}. \quad (12)$$

Запишем приближенное решение уравнения (10) для одного скирмиона, опустив индексы у k_f ,

$$\begin{aligned} \Psi_{mk}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} R_{mk}(r), \\ R_{mk} &= C_{mk} J_{m-1}(kr), \quad r/r_0 \ll 1, \\ R_{mk} &= C'_{mk} J_{m+1}(kr), \quad r/r_0 \gg 1, \end{aligned} \quad (13)$$

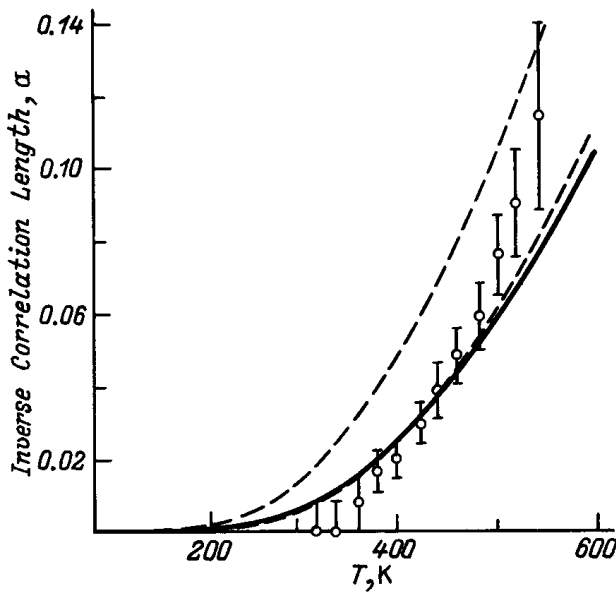
где C_{mk} — нормировочные константы. В случае антискирмиона функции $J_{m-1}(kr)$ и $J_{m+1}(kr)$ в (13) меняются местами. Заметим, что после подстановки (13) в уравнение для локального параметра порядка (12) и суммирования по m (в случае образца бесконечных размеров спектр k непрерывен и не зависит от m , а $C_{mk} = 1$) зависимость от координат в (12) исчезает в соответствии с исходным предложением о независимости σ от координат.

2. Длина спиновой когерентности

При большом числе топологических возбуждений $Q \gg 1$ можно ожидать, что ближайшими соседями каждого скирмиона будут антискирмионы и наоборот. Полная намагниченность каждой из подрешеток обращается в нуль, и дальний порядок отсутствует. В термодинамическом равновесии вероятность рождения одной скирмион-антискирмионной пары пропорциональна $\exp(-\varepsilon_{sk}/k_B T)$, что позволяет оценить среднее число пар и средний радиус скирмиона (антискирмиона), играющий роль радиуса спиновых корреляций, следующим образом:

$$Na^2/Q = 2\pi r_0^2 = a^2 \exp(\varepsilon_{sk}/T). \quad (14)$$

Очевидно, что условие $Q > 1$ выполняется при определенном соотношении между линейными



Обратная длина спиновых корреляций в чистом La_2CuO_4 ($T_N = 325 \text{ K}$). Точки — эксперимент [2], сплошная линия — наш результат для a/r_0 (17), штриховая — теория ЧГН для a/ξ (18), пунктир — результат подгонки (18) к экспериментальным точкам [3].

размерами образца и температурой: $T > \varepsilon_{sk}/\ln N = \varepsilon_{sk}/2\ln(L/a) = T^*$. Несмотря на отсутствие дальнего порядка, локальный антиферромагнитный порядок имеет место. Для определения параметра локального порядка используем форму отдельного скирмиона (6) при $r < r_0$ и соответствующее приближение для функций $R_{mk}(r)$ в (13). Поскольку это решение становится точным при $r \rightarrow 0$, положим в уравнении (12) $r = 0$. Это приводит к сохранению единственного слагаемого в сумме по m с $m = 1$. Спектр возможных значений k определяется граничным условием для $R_{1k}(r) \approx C_{1k}J_0(kr)$ при $r = r_0$, конкретный вид которого несуществен для основной области внутри скирмиона при $r_0 \gg a$. При $J_0(kr_0) = 0$ имеем $k_n r_0 \approx \pi(n - 1/4)$ для $1 \leq n \leq n_{\max}$, где $n_{\max} \approx \sqrt{2/\pi}(r_0/a)$ определяется условием полноты набора собственных функций $\Psi_f(\mathbf{r})$. В результате уравнение для σ приводится к следующему виду:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{2\sqrt{2}a}{r_0} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \text{cth} \left\{ \frac{\sqrt{2}\pi\sigma J}{k_B T} \frac{a}{r_0} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right\}. \quad (15)$$

Для наиболее актуальной области температур $T^* < T < J$ нетрудно получить его приближенное решение, учитывая (14),

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{0.83k_B T}{2\pi J} \ln \left(\frac{2\pi\sqrt{2}\pi\sigma_0 J}{ek_B T} \right), \quad (16)$$

где $\sigma_0 = 0.181$. Средний радиус скирмиона r_0 , который можно отождествить с длиной магнитной когерентности,

равен

$$r_0 = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{4\pi\sqrt{\pi}\sigma_0 J}{ek_B T} \right)^\alpha \exp \left\{ \frac{2\pi J\sigma_0(1 - \sigma_0)}{k_B T} \right\} \quad (17)$$

с $\alpha = 0.531$. Интересно сравнить эту формулу с результатом теории ЧГН для магнитной длины когерентности (см. [1,3] и обзор [7])

$$\xi = \frac{e}{8} \frac{\hbar c}{2\pi\rho_s} \left(1 - \frac{0.5k_B T}{2\pi\rho_s} \right) \exp \left(\frac{2\pi\rho_s}{k_B T} \right). \quad (18)$$

Здесь c — скорость антиферромагнитных магнонов, с учетом перенормировок равная $c = 2\sqrt{2}JaZ_c/\hbar$, $Z_c = 1.158$, ρ_s — константа магнитной жесткости, $2\pi\rho_s = 0.94J$. Примечательно, что наш результат для $2\pi J\sigma_0(1 - \sigma_0) = 0.93J$ практически совпадает с этой величиной, и разница между (17) и (18) определяется лишь предэкспоненциальным множителем. Результат сравнения (17) и (18) с детальными измерениями обратной длины спиновой когерентности, полученными по рассеянию нейтронов в La_2CuO_4 при $T > T_N = 325 \text{ K}$, представлен на рисунке: $a = 3.8 \text{ \AA}$, величина обменного интеграла, полученная из измерений скорости спиновых волн при $T < T_N$ [8], равна $J = 1580 \text{ K}$. Очевидно, что наша формула (17) лучше согласуется с экспериментальными данными. В работах [3,7] расхождение теории ЧГН с экспериментом было отнесено к недостаткам вычисления величины ρ_s в рамках спин-волновой теории. Подгонка (18) к экспериментальным точкам привела к значению $2\pi\rho_s = 1.1J$ [3]. Любопытно, что кривая ЧГН (18) с этим параметром мало отличается от нашего результата (см. рисунок). Следует отметить, что, несмотря на удовлетворительное согласие (17) с экспериментом, расхождение все-таки есть. Возможно, что это связано с простейшим расщеплением функций Грина в приближении молекулярного поля.

Полученные результаты показывают, что для интерпретации экспериментальных данных по магнитным свойствам квазидвумерных магнетиков серьезной альтернативой является подход, основанный на существовании метастабильных состояний со скирмионами. Несомненный интерес представляет также исследование на этой основе спиновой динамики в квазидвумерных антиферромагнетиках с $S = 1/2$, для которых в последние годы появилось большое количество надежных измерений как ядерной, так и электронной спиновой релаксации. Об этом интересе свидетельствуют, в частности, появившиеся недавно попытки рассмотрения этого вопроса на основе классической нелинейной сигма-модели [9].

Один из авторов (Б.И.К.) выражает благодарность проф. Ф. Вальднеру, стимулировавшему его интерес к рассмотренной задаче, за плодотворные дискуссии и поддержку, а также Цюрихскому университету, где была выполнена часть этой работы, за гостеприимство.

Список литературы

- [1] S. Chakravarty, B.I. Halperin, D. Nelson. Phys. Rev., **B39** , 4, 2344 (1989).
- [2] B. Keimer, R.J. Birgeneau, A. Cassanho, Y. Endoh, R.W. Erwin, M.A. Kastner, G. Shirane. Phys. Rev. Lett. **67** , 1930 (1991).
- [3] R.J. Birgeneau, N. Belk, Y. Endoh, R.W. Erwin, M.A. Kastner, B. Keimer, G. Schirane. Physica **B180&181**, 15 (1992).
- [4] F. Waldner. J. Magn. Magn. Mater. **31–34**, 1203 (1983); **104–107**, 793 (1992).
- [5] А.А. Белавин, А.М. Поляков. Письма в ЖЭТФ **22**, 503 (1975).
- [6] T. Skyrme. Proc. R. Soc. Lond. **262** , 237 (1961).
- [7] J. Rossat-Mignod, L.P. Regnault, P. Bourges, P. Burlet, C. Vettier, J.Y. Henry. In: Frontiers in Solid State Sciences / Ed. L.C. Gupta and M.S. Multani. World Scientific (1992). V. 1. P. 265–346.
- [8] S.M. Hayden, G. Aeppli, H. Mook, D. Rytz, M.F. Handley, Z. Fizk. Phys. Rev. Lett. **66**, 821 (1991).
- [9] C.E. Zaspel, T.E. Grigereit, J.E. Drumheller. Phys. Rev. Lett. **74**, 22, 4539 (1995).