Физика твердого тела, 1997, том 39, № 5

Влияние квантовых флуктуаций на температуру Нееля разбавленного двухмерного анизотропного антиферромагнетика

© *С.С. Аплеснин*

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,
660036 Красноярск, Россия

(Поступила в Редакцию 24 сентября 1996 г.)

Квантовым методом Монте-Карло в модели Гейзенберга с анизотропными отрицательными взаимодействиями между ближайшими соседями на квадратной решетке с разбавлением по узлам вычислены концентрационные зависимости энергии, подрешеточной намагниченности, температуры Нееля, величины наклонов $S = \left(1/T_\mathrm{N}(x=0)\right)dT_\mathrm{N}(x)/dx$ от анизотропии обмена $\Delta = 1 - J_{x,y}/J_z$. При $\Delta \to 0$ наклон расходится: $S \sim \ln(6,5/\Delta)$.

Для вычисления температуры Кюри $T_c(x)$ и спонтанной намагниченности $\sigma(x)$ диамагнитно-разбавленных ферромагнетиков используется теория протекания, в которой топологией бесконечного кластера определяются величины σ_x и $T_c(x)$ [1]. Эта теория оперирует с однокомпонентными локальными характеристиками и постоянным магнитным моментом на узле. Аналогичным образом рассматривается разбавленный антиферромагнетик (AF) [2–4]. Хотя не вполне очевидно, что магнитоупорядоченная фаза должна быть термодинамически устойчивой вблизи $T = 0$, когда концентрация x меньше концентрации протекания x_c. Может оказаться, что "размерность" топологической структуры бесконечного связанного кластера надостаточна для того, чтобы препятствовать флуктуационному распаду основного состояния упорядоченного AF. Так, с уменьшением размерности решетки энергия на одну связь увеличивается с $E^{2D} = 0.35$ [5] до $E^{1D} = 0.443$ [6]. Эту теоретическую возможность нельзя исключить ни путем перехода к эффективной среде (приближение когерентного потенциала) [2], ни с помощью теории спиновых волн [3,4], применение которых к двухмерным системам весьма сомнительно. В силу низкой размерности пространства и малой величины спина весьма существенными оказываются квантовые флуктуации, которые могут существенно повлиять на критические свойства разбавленных AF. Для диамагнитно-разбавленного AF в приближении случайных фаз [3] вычислена величина наклона концентрационной зависимости температуры Нееля $S = \left(1/T_\mathrm{N}(x=0)\right)dT_\mathrm{N}(x)/dx_{x\to 0}$ от анизотропии обмена. В изотропном пределе $S = 3.14$.

Существуют экспериментальные данные для квазидвумерных AF, например $Rb_2Mn_xCd_{1-x}Cl_4$ [7], $La_2Cu_{1-x}Zn_xO_4$ [8], имеющих высокие величины наклона (соответственно $S = 3.5$, 6.7) по сравнению с теоретическими расчетами для квадратной решетки [3] ($S = 3.14$). Диамагнитное замещение Cu на Zn не влияет на величину спина меди ближайших соседей [9], и твердый раствор остается диэлектриком в магнитоупорядоченной фазе. Для объяснения большой величины S в теории [10,11] введен еще один параметр — фрустрированный обмен во второй координационной сфере.

В данной работе показано, что увеличение S связано с квантовыми флуктуациями и описывается простой моделью Гейзенберга с ближайшими соседями, исследовано влияние квантовых флуктуаций на температуру Нееля и магнитный момент на узле, а также возможность изменения критической концентрации разрушения дальнего антиферромагнитного порядка в 2D-модели Гейзенберга в зависимости от анизотропии обмена при удалении магнитных атомов из узлов решетки. Эта задача решается квантовым методом Монте-Карло (МК), использующим траекторный алгоритм [12]. Суть алгоритма — преобразование квантовой D-мерной задачи к классической $D+1$-мерной путем введения "временны́х" срезов в пространстве мнимое время–координата. Алгоритм и метод вычисления термодинамических характеристик изложены ранее [13].

Рассматривается простая модель: в узлах квадратной решетки локализованы спины $S_i = \pm 1/2$, которые случайным образом удаляются из решетки ($S_i = 0$). Между ближайшими соседями существует отрицательный

Рис. 1. Зависимость температуры Нееля анизотропного AF с $1 - (J^\perp/J^z) = 0.5\,(1)$, $0.2\,(2)$, $0.1\,(3)$, $0.05\,(4)$, $0.02\,(5)$ от концентрации дырок.

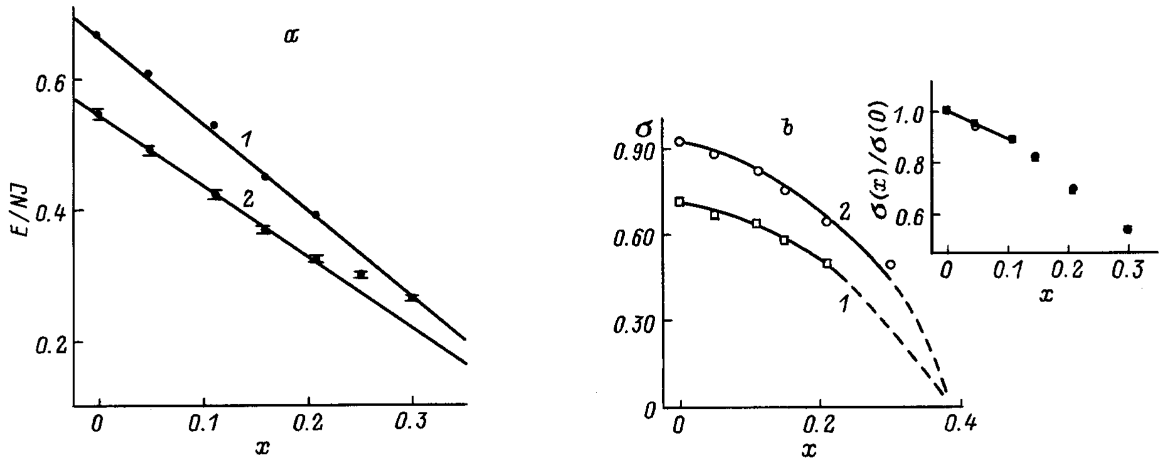

Рис. 2. Зависимости энергии $E(a)$ и подрешеточной намагниченности $\sigma(b)$ AF с анизотропией обмена $\Delta = 0.05$ (*1*), и 0.5 (*2*) от концентрации дырок. Сплошные линии — $E(x) = E(0)(1-x)$ и $\sigma(x)/\sigma(0) = 1-x$.

обмен. Гамильтониан имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{L} c_i c_j \left[J_{ij}^{zz} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} J_{i,j}^{\perp} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right], \quad (1)$$

где $J_{i,j}^{\perp} < 0$ — антиферромагнитный обмен между ближайшими соседями, $\Delta = 1 - (J^{\perp}/J^z)$ — анизотропия обмена типа "легкая ось", $c_j = 1$ (или 0), если спин на узле j присутствует (или отсутствует), концентрация дырок равна x, а концентрация магнитных атомов составляет $1 - x$.

В МК-процедуре используются периодические граничные условия. Линейный размер решетки $L = 40$, троттеровское число $m = 16, 32, 48$. Количество МК-шагов на один спин изменялось от 3 000 до 10 000. Вычислены энергия E, теплоемкость $C = dE/dT$, спин-спиновые корреляционные функции по продольным компонентам по сторонам и диагонали квадратной решетки $\langle S_0^z S_r^z \rangle$, их Фурье-образ, а также подрешеточная намагниченность σ. Минимальное значение анизотропии обмена выбиралось так, чтобы щель в спектре спиновых волн $E_c \sim \sqrt{\Delta(1+\Delta)} > k = \pi/L$ превышала щель, образованную вследствие обрезания спектра из-за конечности образца.

Вычисления проведены для следующих величин анизотропий обмена $\Delta = 0.02$, 0.05, 0.075, 0.1, 0.15, 0.2, 0.5, 0.9. По максимуму теплоемкости и исчезновению спиновых корреляций $\langle S_0^z S_{r=L/2}^z \rangle \to 0$ определены температуры Нееля разбавленного анизотропного AF (рис. 1). Рассмотрим поведение $T_N(x)$ для двух AF с анизотропией обмена, различающейся на порядок $\Delta = 0.05$ и 0.5. Сильно анизотропный AF имеет зависимость $T_N(x)$, аналогичную полученной модели Изинга [1]. Для слабо анизотропного AF при $x > 0.1$ наблюдается отклонение от линейной зависимости. Аналогичные концентрационные зависимости имеют энергия и подрешеточная намагниченность AF в основном состоянии (рис. 2). Эти величины с точностью до 0.5–2% определены из асимптотического продолжения E, σ по степенному закону от температуры $A(T) = A(T=0) - \alpha T^{\beta}$, где $A = E, \sigma$, а α, и β — подгоночные параметры. Для малых концентраций $x \ll 1$, когда замещение магнитного атома диамагнитным приводит к удалению четырех ближайших обменов с энергией на одну связь E_j, линейная зависимость энергии от концентрации $E(x) = E(0) - 2xE_j$ хорошо согласуется с МК-вычислениями (рис. 2). Разность энергии сильно и слабо анизотропного AF $\Delta E = E(\Delta = 0.05)/E(\Delta = 0.5) - 1$ и нормированный магнитный момент на узле $\sigma(x)/\sigma(x = 0)$ не зависят от анизотропии обмена (вставка на рис. 2), т. е. квантовые флуктуации, вызывающие сокращение спина на узле, дырками не подавляются. По-видимому, квантовые флуктуации не приводят к смещению критической концентрации протекания $x_c = 0.39$.

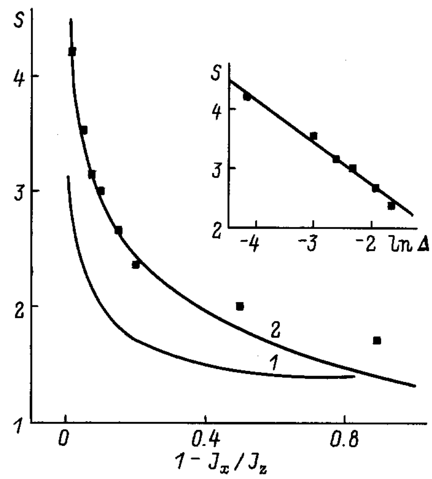

Рис. 3. Наклон концентрационной зависимости температуры Нееля $S = \big(1/T_N(x=0)\big) dT_N(x)/dx$ как функция анизотрапии обмена, вычисленная в спин-волновом приближении [3] (*1*) и МК-методом (*2*). На вставке — зависимость S от $\ln\Delta$: $S = 1.32(8) - 0.7(5)\ln(\Delta)(\Delta \ll 1)$.

Для всех величин анизотропий обмена характерна линейная зависимость температуры Нееля от концентрации дырок для $x \leq 0.1$. Из зависимости $T_{\mathrm{N}}(x)$ вычислим нормированную величину наклона $S = \big(1/T_{\mathrm{N}}(x=0)\big) dT_{\mathrm{N}}(x)/dx$. На рис. 3 изображены эти величины S в зависимости от анизотропии обмена, вычисленные МК-методом и в спин-волновом приближении (SW) [3]. Для малых величин анизотропий обмена $\Delta < 0.2$ наклон S хорошо описывается логарифмической зависимостью $S = 1.32(8) - 0.7(5)\ln(\Delta)$, изображенной на вставке к рис. 3. В предельных случаях имеем: при $\Delta \to 1$ в модели Изинга $S^{\text{МК}} = 1.6$ хорошо согласуется с величиной $S = 1.57$ [14], а в полученной теории возмущения, при $\Delta \to 1$ в изотропной модели Гейзенберга $S^{\text{МК}} \to \infty$, спин-волновом приближении $S^{\text{SW}} = 3.14$ [3], т.е. в пределе малой анизотропии обмена температура Нееля не зависит от концентрации $dT_{\mathrm{N}}/dx \to 0$. Наши результаты дают изменение $T_{\mathrm{N}}(x)$ для любой величины анизотропии. Используя один параметр — анизотропию обмена между ближайшими соседями для $La_2Cu_{1-x}Zn_xO_4 \Delta \sim 10^{-3}$ [15], вычислим величину наклона $S = 6.25$, хорошо согласующуюся с экспериментом, который дает $S = 6.67$ [8].

Итак, величина наклона концентрационной зависимости температуры Нееля $\big(1/T_{\mathrm{N}}(x=0)\big) dT_{\mathrm{N}}(x)/dx_{x\to 0}$ в разбавленном двухмерном антиферромагнетике расходится логарифмически в изотропном случае. Диамагнитное замещение не подавляет квантовых флуктуаций; по-видимому, антиферромагнитное упорядочение вблизи порога протекания $x_c = 0.39$ остается устойчивым, и концентрация протекания не зависит от анизотропии обмена.

Автор благодарит С.Г. Овчинникова за обсуждение результатов этой работы.

Список литературы

[1] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. УФН **117**, 401 (1975).
[2] Р. Эллиот, Дж. Крамханел, П. Лис. Теория и свойства неупорядоченных материалов. Мир, М. (1977). С. 11–249.
[3] A.R. Mc Gurn. J. Phys. C: Sol. St. at. Phys. **12**, 3523 (1979).
[4] R.A. Tahir-Kheli, A.R. Mc Gurn. Phys. Rev. **B 17**, 503 (1979).
[5] J. Richter. Phys. Rev. **B 47**, 5794 (1993).
[6] H.A. Bethe. Z. Phys. **71**, 205 (1931).
[7] Г.А. Петраковский, Н.В. Федосеева, С.С. Аплеснин, В.К. Королев. ФТТ **29**, *9*, 2579 (1987).
[8] S.T. Ting, P. Pernambuco-Wise, J.E. Crow, E. Manousakis. Phys. Rev. **46**, 11 772 (1992).
[9] С.Г. Овчинников. ФТТ **36**, *5*, 1307 (1994).
[10] F. Annett, R. Martin, A. Mc Mahan, S. Satpatty. Phys. Rev. **40**, 2620 (1989).
[11] D. Ihle, M. Kasner. Phys. Rev. **B 42**, 4760 (1990).
[12] H. Raedt, A. Lagendijk. Phys. Rep. **127**, 233 (1985).
[13] С.С. Аплеснин. ФТТ **38**, *6*, 1868 (1996).
[14] M.F. Thope, A.R. Mc Gurn. Phys. Rev. **B 18**, 1234 (1978).
[15] S. Keimer, B. Birgeneau, R.J. Cassanho, A. Endoh, Y. Greven, M. Kastner, M.A. Shirane. Z. Phys. **B 91**, 373 (1993).