Кызыргулов И.Р., Харрасов М.Х.

ВЛИЯНИЕ НЕКОЛЛИНЕАРНОСТИ МАГНИТНЫХ ПОДРЕШЕТОК НА СПЕКТР СПИНОВЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЛЕ La_2CuO_4

В работе исследовано влияние неколлинеарности магнитных подрешеток на спектры спиновых волн в кристалле La_2CuO_4. Вычисления показали, что учет неколлинеарности магнитных моментов может привести в некоторых случаях к немалым изменениям спектра спиновой волны, что связано с существованием сильного обменного взаимодействия магнитных моментов в этих кристаллах.

Как известно, кристалл La_2CuO_4 приближенно имеет коллинеарную антиферромагнитную структуру [1-4]. Ряд экспериментальных работ указывает на наличие слабого ферромагнитного момента в плоскостях CuO_2, направленного перпендикулярно плоскости и имеющего противоположные направления в соседних плоскостях [5, 6]. Ферромагнитный момент возникает при выходе магнитных моментов ионов Cu^{2+} из базисной (001) плоскости при повороте их на небольшой угол вследствие поворота октаэдров CuO_6 в ортофазе. Другими словами, магнитные моменты подворачиваются в плоскости (010) на малый угол [7]. Но поскольку в соседних плоскостях октаэдры развернуты в противофазе, это приводит к противоположной направленности ферромагнитных моментов в соседних плоскостях, что означает антиферромагнитную модуляцию вдоль оси [001]. Из исследований инфракрасных спектров, неупругого рассеяния нейтронов и двухмагнонного рассеяния света определена величина угла скоса, которая оказалась равной $\delta\theta = 0{,}17^0$ [6, 8].

В данной работе мы исследуем влияние неколлинеарности магнитных подрешеток на спектры спиновых волн в кристалле La_2CuO_4 как поправку к спектру, найденному в работе [9].

Будем исходить из гамильтониана, в котором учитывается энергия магнитной системы:

$$H_M = \frac{1}{2}\int dx\left\{ \chi^{\alpha\beta}_{jm} M^{\alpha}_{j} M^{\beta}_{m} + \alpha^{\alpha\beta}_{ijmn} \frac{\partial M^{\alpha}_{i}}{\partial x_j} \frac{\partial M^{\beta}_{m}}{\partial x_n} \right\}, \quad (1)$$

где $\chi^{\alpha\beta}_{jm} = I^{\alpha\beta}_{jm} + \beta^{\alpha\beta}_{jm}$, $\alpha, \beta = 1,...,4$, $i, j, m, n = x, y, z$.

Тензор $I^{\alpha\beta}_{jm}$ выберем в виде

$$I^{\alpha\beta}_{jm} = \delta_{jm}[\, I(\delta^{1\alpha}\delta^{2\beta} + \delta^{2\alpha}\delta^{1\beta} + \delta^{3\alpha}\delta^{4\beta} + \delta^{4\alpha}\delta^{3\beta}) + $$
$$+ \sigma'(\delta^{1\alpha}\delta^{4\beta} + \delta^{4\alpha}\delta^{1\beta} + \delta^{2\alpha}\delta^{3\beta} + \delta^{3\alpha}\delta^{2\beta}) +$$
$$+ \sigma''(\delta^{1\alpha}\delta^{3\beta} + \delta^{3\alpha}\delta^{1\beta} + \delta^{2\alpha}\delta^{4\beta} + \delta^{4\alpha}\delta^{2\beta})],$$

где I – постоянная внутриплоскостного взаимодействия (в CuO_2 – плоскости), σ', σ'' – постоянные межплоскостного взаимодействия, $\beta^{\alpha\beta}_{jm}$ – тензор анизотропии, $\alpha^{\alpha\beta}_{ijmn}$ – тензор неоднородного обменного взаимодействия.

Далее ввиду эквивалентности подкластеров можно ввести следующую систему обозначений:

$$\beta^{11}_{jm} = \beta^{22}_{jm} = \beta^{33}_{jm} = \beta^{44}_{jm} = \beta_{jm}, \beta^{12}_{jm} = \beta^{34}_{jm} = \beta'_{jm},$$

$$\beta^{13}_{jm} = \beta^{23}_{jm} = \beta^{14}_{jm} = \beta^{24}_{jm} = \beta''_{jm}, \ \beta^{\alpha\beta}_{jm} = \beta^{\beta\alpha}_{jm}.$$

Аналогичных обозначений будем придерживаться и для компонент тензоров $\alpha^{\alpha\beta}_{ijmn}$ с учетом соотношения из орторомбичности кристаллической структуры

$$\alpha^{14}_{ijmn} = \alpha^{23}_{ijmn}, \ \alpha^{13}_{ijmn} = \alpha^{24}_{ijmn}, \ \alpha^{13}_{ijmn} \neq \alpha^{14}_{ijmn}.$$

Эксперименты по неупругому нейтронному рассеянию дают следующее значение для постоянной внутриплоскостного обменного взаимодействия: $I = (136 \pm 5)\,meV$ [10-12] и верхнюю оценку для постоянных межплоскостного обменного взаимодействия: $\sigma', \sigma'' < 9$ meV [12]. Приведенные экспериментальные данные позволяют считать в нашем приближении $\sigma'', \sigma' << I$.

Запишем гамильтониан (1) в представлении приближенного вторичного квантования [13]. С этой целью магнитные моменты подрешеток M^{α} выразим через операторы Гольштейна-Примакова $a^{+}_{\alpha}, a_{\alpha}$ [14]. Рассмотрим гамильтониан с учетом членов, квадратичных по операторам рождения и уничтожения:

$$H_M = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta k}\left\{A^{\alpha\beta}_{k} a_{k\alpha} + a_{k\alpha} + B^{\alpha\beta}_{k} a_{k\alpha} + a^{+}_{-k\beta}\right\} + \text{э.с.}, \quad (2)$$

где

$$A^{\alpha\beta}_{k} = \mu M_0[(\chi^{\alpha\beta}_{jm} e^{\alpha *}_{\perp j} + \alpha^{\alpha\beta}_{ijmn} k_j k_n e^{\alpha *}_{\perp i}) e^{\beta}_{\perp m} -$$
$$- \delta^{\alpha\beta} \sum_{\beta jm} \chi^{\alpha\beta}_{jm} e^{\alpha}_{3j} e^{\beta}_{3m}], \quad (2.1)$$

$$B^{\alpha\beta}_{k} = \mu M_0[\chi^{\alpha\beta}_{jm} e^{\alpha *}_{\perp j} + \alpha^{\alpha\beta}_{ijmn} k_j k_n e^{\alpha *}_{\perp i}] e^{\beta *}_{\perp m}, \quad (2.2)$$

$$e^{\alpha}_{3} = \frac{M^{\alpha}_{0}}{M_0}, e^{\alpha}_{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\alpha}_{1} + i e^{\alpha}_{2}), \ e^{\alpha}_{1} \parallel Y, e^{\alpha}_{2} = [e^{\alpha}_{3}, e^{\alpha}_{1}]. \quad (2.3)$$

Перейдем к исследованию конкретного случая. Введем сферические координаты базисных векторов (2.3). Учитывая малость угла откоса, напишем:

$$e_{1x}^{\alpha}=0,\ e_{1y}^{\alpha}=-(-1)^{\alpha},\ e_{1z}^{\alpha}=0,\ e_{2x}^{\alpha}=(-1)^{\alpha}\delta\theta,\ e_{2y}^{\alpha}=0,$$

$$e_{2z}^{\alpha}=(1-\frac{1}{2}\delta\theta^2)(-(\delta^{1\alpha}+\delta^{2\alpha})+(\delta^{3\alpha}+\delta^{4\alpha})), \qquad (3)$$

$$e_{3x}^{\alpha}=(1-\frac{1}{2}\delta\theta^2)(-(\delta^{1\alpha}+\delta^{2\alpha})+(\delta^{3\alpha}+\delta^{4\alpha}))(-1)^{\alpha},$$

$$e_{3y}^{\alpha}=0,\quad e_{3z}^{\alpha}=-(-1)^{\alpha}.$$

Тогда в соответствии с системой инвариантов группы D_{2h}^{18} коэффициенты $A_k^{\alpha\beta},B_k^{\alpha\beta}$ будут иметь вид

$$A_k^{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\mu M_0[(\chi_{xx}^{\alpha\beta}+\alpha_{xnxn}^{\alpha\beta}k_n^2)\delta\theta^2(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}+$$
$$+(\chi_{yy}^{\alpha\beta}+\alpha_{ynyn}^{\alpha\beta}k_n^2)(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}+(\chi_{zz}^{\alpha\beta}+\alpha_{znzn}^{\alpha\beta}k_n^2)(1-\delta\theta^2)]-$$
$$-\mu M_0\delta^{\alpha\beta}[(\beta_{xx}-\beta'_{xx})(1-\delta\theta^2)+(\beta_{zz}+\beta'_{zz}+2\beta''_{zz})\delta\theta^2+$$
$$+(I+\sigma')(2\delta\theta^2-1)+\sigma''], \qquad (4.1)$$

$$B_k^{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\mu M_0[(\chi_{yy}^{\alpha\beta}+\alpha_{ynyn}^{\alpha\beta}k_n^2)(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}-$$
$$-(\chi_{zz}^{\alpha\beta}+\alpha_{znzn}^{\alpha\beta}k_n^2)(1-\delta\theta^2)-$$
$$-(\chi_{xx}^{\alpha\beta}+\alpha_{xnxn}^{\alpha\beta}k_n^2)\delta\theta^2(-1)^{\alpha}(-1)^{\beta}]. \qquad (4.2)$$

Используя выбор ортов (3) и учтя направления равновесных намагниченностей, получим отсюда:

$$F_k^{11}=F_k^{22}=F_k^{33}=F_k^{44},\ F_k^{\alpha\beta}=F_k^{\beta\alpha},$$
$$F_k^{12}=F_k^{34},F_k^{13}=F_k^{24},\ F_k^{14}=F_k^{23}, \qquad (5)$$

где $F_k\equiv A_k,B_k$.

Для упрощения диагонализации гамильтониана (2) введем вместо операторов $a_{k\gamma},a_{k\gamma}^{+}$ операторы $f_{k\gamma},f_{k\gamma}^{+}$ согласно следующим формулам

$$f_{k1}=\frac{1}{2}(a_{k1}+a_{k2}+a_{k3}+a_{k4}),$$
$$f_{k2}=\frac{1}{2}(a_{k1}-a_{k2}+a_{k3}-a_{k4}),$$
$$f_{k3}=\frac{1}{2}(a_{k1}+a_{k2}-a_{k3}-a_{k4}),$$
$$f_{k4}=\frac{1}{2}(a_{k1}-a_{k2}-a_{k3}+a_{k4}). \qquad (6)$$

Тогда с учетом (5) гамильтониан (2) в новых операторах $f_{k\gamma}$, $f_{k\gamma}^{+}$ имеет вид

$$H_M=\sum_{k\gamma}[C_\gamma f_{k\gamma}^{+}f_{k\gamma}+\frac{1}{2}D_\gamma(f_{k\gamma}^{+}f_{-k\gamma}^{+}+f_{k\gamma}f_{-k\gamma})], \qquad (7)$$

где

$$C_1=A^{11}+A^{12}+A^{13}+A^{14},$$
$$C_2=A^{11}-A^{12}+A^{13}-A^{14},$$
$$C_3=A^{11}+A^{12}-A^{13}-A^{14},$$
$$C_4=A^{11}-A^{12}-A^{13}+A^{14} \qquad (8)$$

и D_γ аналогично выражаются через компоненты матрицы B.

Разделим C_γ и D_γ на слагаемые, не содержащие величину $\delta\theta$, и слагаемые, содержащие $\delta\theta$:

$$C_\gamma=C_{0\gamma}+\Delta C_\gamma,\ D_\gamma=D_{0\gamma}+\Delta D_\gamma.$$

В гамильтониане (7) с помощью канонического u,v-преобразования Боголюбова [14]

$$f_{k\gamma}=u_{k\gamma}c_{k\gamma}+v_{k\gamma}^{*}c_{-k\gamma}^{+}, \qquad (9)$$

$$u_{k\gamma}=\frac{\sqrt{C_\gamma+D_\gamma}+\sqrt{C_\gamma-D_\gamma}}{2\sqrt{\varepsilon_{k\gamma}^M}},$$

$$v_{k\gamma}=-\frac{\sqrt{C_\gamma+D_\gamma}-\sqrt{C_\gamma-D_\gamma}}{2\sqrt{\varepsilon_{k\gamma}^M}}, \qquad (10)$$

$$\varepsilon_{k\gamma}^M=[C_\gamma^2-D_\gamma^2]^{1/2}=[C_{0\gamma}^2-D_{0\gamma}^2]^{1/2}+\Delta\varepsilon_\gamma$$

перейдем к магнонным операторам $c_{k\gamma},c_{k\gamma}^{+}$, $\gamma=1,...,4$. Диагонализованный гамильтониан имеет стандартный вид

$$H_M=\sum_{k\gamma}(\varepsilon_{k0\gamma}^M+\Delta\varepsilon_\gamma)c_{k\gamma}^{+}c_{k\gamma}, \qquad (11)$$

где $\varepsilon_{k0\gamma}^M$ – энергия спиновых волн коллинеарного антиферромагнетика, $\Delta\varepsilon_\gamma$ – поправка к энергии, связанная с неколлинеарностью подрешеток,

$$\Delta\varepsilon_1=-\frac{\mu M_0 I\delta\theta^2}{2\sqrt{C_{01}^2-D_{01}^2}}(6C_{01}+2D_{01}),$$

$$\Delta\varepsilon_2=-\frac{\mu M_0 I\delta\theta^2}{2\sqrt{C_{02}^2-D_{02}^2}}(4C_{02}-2D_{02}),$$

$$\Delta\varepsilon_3=-\frac{\mu M_0 I\delta\theta^2}{2\sqrt{C_{03}^2-D_{03}^2}}(6C_{03}+2D_{03}),$$

$$\Delta\varepsilon_4=-\frac{\mu M_0 I\delta\theta^2}{2\sqrt{C_{04}^2-D_{04}^2}}(4C_{04}-2D_{04}).$$

Если $I\approx 10^3,\delta\theta\approx 10^{-3}$, то поправки к спектрам спиновых волн, определяемые неколлинеарностью магнитных подрешеток, будут иметь порядок:

$$\Delta\varepsilon_1/\varepsilon_{k01}^M\approx 10^{-1},\qquad \Delta\varepsilon_2/\varepsilon_{k02}^M\approx 10^{-1},$$
$$\Delta\varepsilon_3/\varepsilon_{k03}^M\approx 10^{-4},\qquad \Delta\varepsilon_4/\varepsilon_{k04}^M\approx 10^{-4}.$$

Линейная зависимость поправки $\Delta\varepsilon_\gamma$ от обменного параметра I и квадратичная зависимость от угла скоса $\delta\theta$ может привести в некоторых случаях к немалым изменениям спектра спиновой волны. Таким образом, пренебрежение неколлинеарностью магнитных моментов в кристаллической решетке не всегда является оправданным. Не надо забывать, что в таких системах существует сильное обменное взаимодействие локализованных магнитных моментов, которое может привести к дополнительным изменениям величины щели в спектре спиновых волн.

Список использованной литературы:
1. D.Vaknin, S.K.Sinha, D.E.Moncton et al., Phys. Rev. Lett. 58, 2802 (1987).
2. D.C.Johnson, S.K.Sinha, A.J.Jacobson, J.M.Newsam, Physica C. 153, 572 (1988).
3. C.Shirane, Y.Endoh, R.J.Birgineau et al., Phys. Rev. Lett. 59, 1613 (1987).
4. T.Freltoft, J.E.Fischer, G.Shirane et al., Phys. Rev. B. 36, 826 (1987).
5. M.A.Kastner, R.J.Birgeneau, T.R.Thurston et al., Phys. Rev. B. 38, 6636 (1988).
6. T.Thio, T.R.Thurston, N.W.Preyer et al., Phys. Rev. B. 38, 905 (1988).
7. Y.Endoh, K.Yamada, R.J.Birgeneau et al., Phys. Rev. B. 37, 7443 (1983).
8. А.С.Боровик-Романов, А.И.Буздин, Н.М.Крейнес, С.С.Кротов, Письма в ЖЭТФ. 47, 600 (1988).
9. А.У.Абдуллин, М.А.Савченко, М.Х.Харрасов, ДАН. 342, 753 (1995).
10. S.M.Hayden, G.Aeppli, R.Osborn et al., Phys. Rev. Lett. 67, 3622 (1991).
11. S.M.Hayden, G.Aeppli, H.A.Mook et al., Phys. Rev. B. 42, 10220 (1990).
12. G.Aeppli, S.M.Hayden, H.A.Mook et al., Phys. Rev. Lett. 62, 2052 (1989).
13. С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, (1965).
14. T.Holstein, H.Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
15. Н.Н. Боголюбов (мл.), Б.И. Садовников, А.С. Шумовский. Математические методы статистической механики модельных систем. М.: Наука, (1989).