

Квантовые осцилляции магнотстрикции в двумерном антиферромагнетике со спин-фононным взаимодействием в магнитном поле

С. С. Аплеснин¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 8 декабря 2003 г.

Квантовым методом Монте-Карло исследуется основное состояние двумерного антиферромагнетика с $S = 1/2$, взаимодействующего с акустическими фононами в магнитном поле в неадиабатическом приближении. В магнитном поле найдены осцилляции амплитуды среднеквадратичного смещения ионов и среднего числа заполнения фононов. Выявлены локальные максимумы в функции распределения магнитного момента и смещения ионов на узле. Вычислена намагниченность насыщения в зависимости от константы спин-фононной связи.

PACS: 75.10.JM, 75.30.Cr, 75.80.+q

Фазовое расслоение в манганитах и образование страйпов в недодопированных купратных сверхпроводниках относится к ярким эффектам в физике конденсированного состояния. Подобные эффекты, связанные со страйп-структурами, наблюдаются и в спиновой системе с четырехспиновым взаимодействием на квадратной решетке [1]. Модель с четырехспиновым взаимодействием является частным случаем более общей модели взаимодействия спинов с акустическими фононами.

В антиферромагнетике со спин-фононным взаимодействием на квадратной решетке вычислены дополнительные несоразмерные локальные максимумы в магнитном и ядерном структурных факторах [2]. Несколько максимумов также найдены в плотности состояний связанных спин-фононных квазичастиц. Под действием внешнего магнитного поля связанное состояние спинов и фононов разрушается, что приводит к увеличению среднего числа фононов. Данное сообщение посвящено определению зависимости амплитуды среднеквадратичного смещения ионов в магнитном поле, величины намагниченности насыщения, которая при адиабатическом рассмотрении систем со спин-фононным взаимодействием имеет постоянную величину $m_s = 1$ [3, 4].

Рассмотрим основное состояние квазидвумерного магнетика с межплоскостным обменом, на несколько порядков меньшего по отношению к внутривоскостному, и поэтому ограничимся взаимодействием спинов между ближайшими соседями и с акустическими модами колебаний в плоскости решетки. Га-

милтониан для связанной спин-фононной системы в гармоническом приближении имеет вид

$$H = \sum_{i,j} [J + \alpha(u_{i,j} - u_{i+1,j})] \times \\ + [S_{i,j}^z S_{i+1,j}^z + (S_{i,j}^+ S_{i+1,j}^- + S_{i,j}^- S_{i+1,j}^+)/2] + H_i S_i^z \\ + [J + \alpha(u_{i,j} - u_{i,j+1})] \times \\ [S_{i,j}^z S_{i,j+1}^z + (S_{i,j}^+ S_{i,j+1}^- + S_{i,j}^- S_{i,j+1}^+)/2] + M \dot{u}_{i,j}^2 / 2 + \\ + K(u_{i,j} - u_{i+1,j})^2 / 2 + K(u_{i,j} - u_{i,j+1})^2 / 2, \quad (1)$$

где $S_i^{z,\pm}$ – компоненты оператора спина $S = 1/2$ на узле решетки, $u_{i,j}$ – смещение иона по векторам трансляции решетки, M – масса иона и K – константа упругой жесткости решетки, $J > 0$. От переменных $u_{i,j}$, используя каноническое преобразование

$$\hat{u}_r = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega(\mathbf{q})}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (2)$$

перейдем к операторам рождения и уничтожения фононов b^+, b с импульсами $q_\beta = 2\pi n/L$, $n = 1, 2, \dots, L$, $\beta = x, y$, постоянная решетки $a = 1$. Преобразованный гамильтониан имеет вид

$$H = \sum_{i,j} (J_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + H_i S_i^z) + \\ + \sum_{q_x, q_y} \sum_{n,m} \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega(\mathbf{q})}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \times \\ \times [(1 - \cos q_x - i \sin q_x) \mathbf{S}_{n,m} \mathbf{S}_{n+1,m} + \\ + (1 - \cos q_y - i \sin q_y) \mathbf{S}_{n,m} \mathbf{S}_{n,m+1}] + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \Omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}, \\ \Omega(\mathbf{q}) = \omega_0 \sqrt{2 - \cos(q_x) - \cos(q_y)}; \omega_0 = \sqrt{\frac{2K}{M}}. \quad (3)$$

¹⁾e-mail: apl@iph.krasn.ru

В вычислениях используются: константа спин-фононного взаимодействия α , нормированная на обмен, расстояние r , нормированное на постоянную решетки. В качестве метода расчета выбран квантовый метод Монте-Карло, объединяющий два алгоритма: мировых линий (wordline) и непрерывного времени (continuous time) [5] на плоскости размером $N = 32 \cdot 32$ с периодическими граничными условиями при температуре $\beta = J/T = 10$. Метод расчета подробно описан в статье [2].

Среднеквадратичное смещение иона определяется как

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2MN} \sum_q \frac{2n_q + 1}{\Omega(q)}.$$

В основном состоянии для гармонического осциллятора с $\alpha \rightarrow 0$ число фононов равно нулю. Поэтому важно вычислить изменение нулевых колебаний в результате действия магнитной системы на упругую подсистему, то есть $\langle U_n^2 \rangle = \langle u^2(\alpha) \rangle - \langle u^2(\alpha = 0) \rangle$. Ниже будет использована нормированная величина

$$\langle U^2 \rangle = \sum_r \langle U_n^2(r) \rangle / \frac{\hbar}{2NM\omega_0}.$$

В работе рассмотрено два характерных случая взаимодействия спиновой и упругой подсистем. Это когда верхняя граница зоны магнанных возбуждений

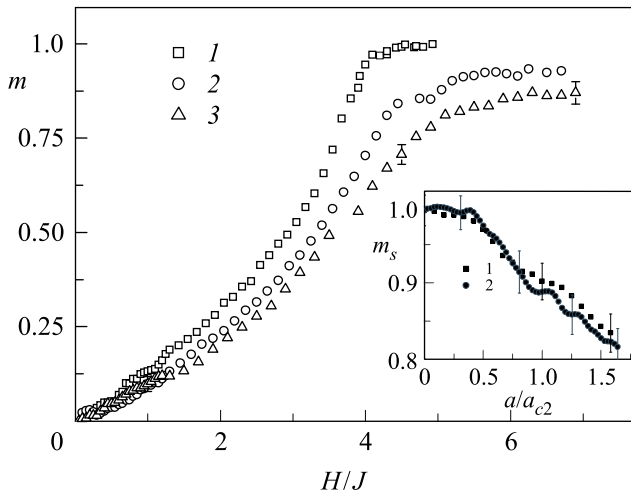


Рис.1. Зависимость намагниченности в АФМ и в спиновой жидкости от поля для $\omega_0 = J, \alpha/\alpha_{c2} = 0$ (1), 1 (2), 1.5 (3). На вставке приведена зависимость намагниченности насыщения от нормированной константы спин-фононного взаимодействия для $\omega_0/J = 1$ (1), 2 (2)

W_{tm} превышает границу зоны фононных возбуждений W_{tph} , что соответствует пересечению дисперсионных кривых магнов и фононов, например при

$\omega_0/J = 1$, и противоположный случай $W_{tph} > W_{tm}$ для $\omega_0/J = 6$. Типичные зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля представлены на рис.1 для магнитоупорядоченного и неупорядоченного синглетного состояний. Критическое поле маг-

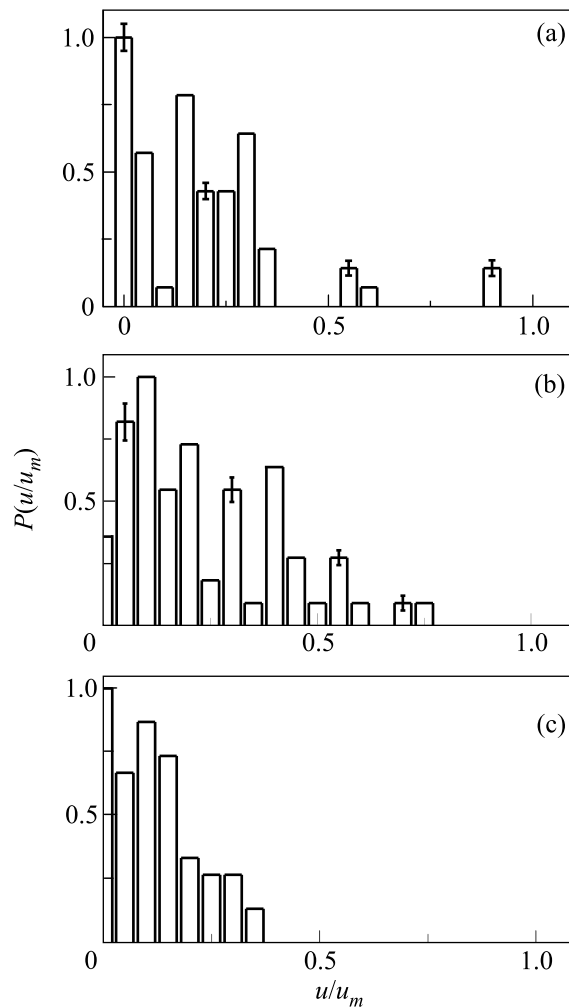


Рис.2. Функция распределения смещения ионов на узле, нормированных на максимальное смещение u_m при $H = 0$, для $\omega_0 = J, \alpha/\alpha_{c2} = 1, H/J = 0.5$ (a), 2 (b), 5 (c)

нитного насыщения для АФМ хорошо согласуется с известным результатом $H_c = 2zSJ$. Если параметр спин-фононной связи превышает критическое значение α_{c1} , при котором нарушается изотропия спин-спиновых корреляционных функций [2], поле насыщение увеличивается, а намагниченность насыщения уменьшается, m_s . Соответствующие величины m_s , определенные в интервале полей $H_c < H < 2H_c$, изображены на вставке к рис.1. Здесь используются параметры спин-фононного взаимодействия, нормированные на критическое значение α_{c2} , при котором исчезает дальний магнитный порядок и образуется

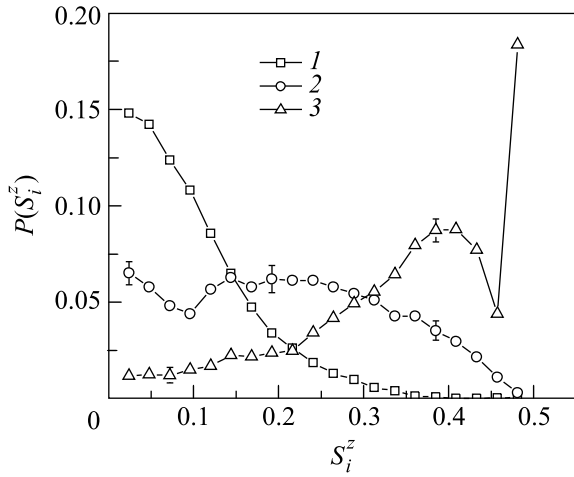


Рис.3. Функция распределения магнитного момента на узле для $\omega_0 = J$, $\alpha/\alpha_{c2} = 1$, $H/J = 0.5$ (1), 3 (2), 5 (3)

квантовая спиновая жидкость. В области малых полей намагниченность линейно растет с ростом поля даже в состоянии спиновой жидкости, но с меньшей величиной наклона $m(H)$. Эта зависимость качественно отличается от зависимости намагниченности в спиновой жидкости с димерным упорядочением, для которой $m(H) \rightarrow 0$ при $H < \Delta$, где Δ – величина щели в спектре триплетных возбуждений [6].

Упругие напряжения, индуцированные спиновой системой, имеют иерархическую структуру. Функция распределения смещения ионов, изображенная на рис.2а, имеет несколько локальных максимумов. В области локальных напряжений спины образуют синглетные состояния. Существование этих состояний подтверждается из функции распределения магнитного момента на узле $P(S^z \rightarrow 0) \neq 0$ (рис.3) и на основании вычисления четырехспиновой корреляционной функции параллельных пар спинов

$$R(r) = \langle (\sigma_i + \sigma_{i+1}) S_i^z S_{i+1}^z \times (\sigma_{i+r} + \sigma_{i+r+1}) S_{i+r}^z S_{i+r+1}^z \rangle, \quad (4)$$

$$\sigma_i = \text{sgn}(S_i^z).$$

Минимумы в зависимости четырехспиновой корреляционной функции от расстояния, приведенной на рис.4, соответствуют характерному расстоянию между узлами квадратной решетки с нулевым значением магнитного момента на узле, либо с антипараллельным расположением спинов. В магнитном поле $H < H_c$ наблюдается два таких расстояния, а в поле насыщения существует один минимум в $R(r)$. Волновую функцию данного состояния можно представить в виде линейной комбинации синглетного и триплетного состояний димеров $\psi \sim u(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) - v|\uparrow\uparrow\rangle$,

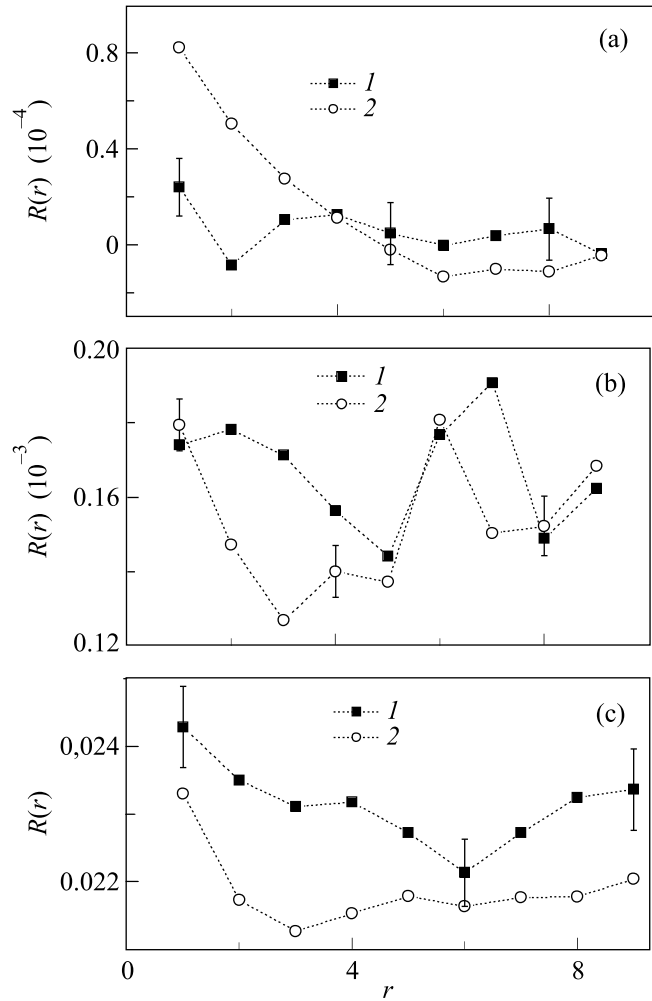


Рис.4. Четырехспиновая корреляционная функция пар параллельных спинов, вычисленных согласно (4), для $\omega_0 = J$, $\alpha/\alpha_{c2} = 1$, $H/J = 0.5$ (a), 2 (b), 5 (c) в направлениях [100] (1), [010] (2)

где коэффициенты u, v зависят от поля и от параметра спин-фононной связи $u^2 \sim (1 + \delta/J)$, $v^2 \sim (1 - \delta/J)$, $\delta = \alpha(u_i - u_{i+1})$.

Разрушение локального синглетного состояния в магнитном поле происходит через образование двух антиферромагнитных доменных границ, в которых проигрыш в зеемановской энергии триплета с эффективным обменом $J - \delta$ компенсируется выигрышем в обменной энергии границ $J + \delta$. Оценки энергии с учетом обменной энергии только по продольным компонентам спина приводят к критической величине намагниченности $m_c = \sqrt{4 + 3\delta - 1.5K(\delta/\alpha)^2}/2\sqrt{2}$, выше которой локальные напряжения исчезают.

Полевые зависимости среднего числа заполнения фононов и среднеквадратичного смещения ио-

нов изображены на рис.5. Осцилляции в зависимости $N_{ph}(H)$, $\langle U^2(H) \rangle$ вызваны разрушением связанного спин-фононного состояния $\langle S^\alpha \dots S^\beta b^\gamma \dots b^\nu \rangle \rightarrow \langle S^\alpha \dots S^\beta \rangle \langle b^\gamma \dots b^\nu \rangle$ в магнитном поле, соответ-

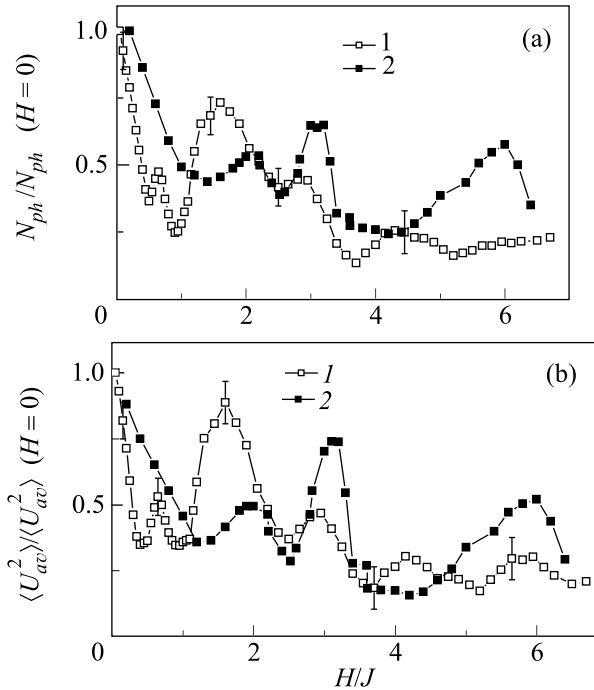


Рис.5. Среднее число заполнения фононов (а) и амплитуда среднеквадратичного смещения ионов $\langle U_{av}^2 \rangle / \langle U_{av}^2(H=0) \rangle$ (b), нормированные на максимальное значение в нулевом поле, для $\omega_0/J = 12$, $\alpha/\alpha_{c2} = 1$ (1); $\omega_0/J = 6$, $\alpha/\alpha_{c2} = 1.35$ (2) в зависимости от магнитного поля

ствующем эффективной энергии связи. Образовавшиеся фононы приводят к появлению новых локаль-

ных максимумов в функции распределения смещений ионов (рис.2b). В поле насыщения дисперсия функции распределения $P(u_i/u_{max})$ уменьшается и ее можно аппроксимировать двухпиковой гауссовской функцией, так же как функцию распределения магнитного момента на узле $P(S^z)$, изображенную на рис.3. Таким образом, в полях $H > H_c$ сохраняется неоднородное распределение спиновой плотности и упругих напряжений, которые взаимосвязаны между собой.

Итак, подчеркнем основные результаты. Взаимодействие между упругой и магнитной подсистемами приводит к неупорядоченному синглетному состоянию с иерархической структурой смещения ионов. Разрушение связанных спин-фононных частиц в магнитных полях индуцирует фононы, пиннирующие на доменных границах. В результате полевая зависимость амплитуды среднеквадратичного смещения имеет осциллирующий вид. В поле насыщения неоднородное распределение магнитного момента на узле и смещения ионов сохраняются, намагниченность насыщения монотонно уменьшается с ростом константы спин-фононного взаимодействия.

1. A.W. Sandvik, S. Daul, R.R.P. Singh, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **89**, 247201 (2002).
2. С. С. Аплеснин, ЖЭТФ, **124**, 1080 (2003).
3. F. Mila, Eur. Phys. J. **B6**, 201 (1998).
4. R. Chitra and T. Giamarchi Phys. Rev. **B55**, 5816 (1997).
5. N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **81**, 2514 (1998); Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, ЖЭТФ **114**, 570 (1998).
6. M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **89**, 077203 (2002).