Спиновая дисклинация в слоистом антиферромагнетике с винтовой дислокацией

Б. А. Иванов[1)], *В. Е. Киреев*

Институт магнетизма НАН Украины, 03142 Киев, Украина

Поступила в редакцию 12 января 2001 г.

В слоистых антиферромагнетиках с ферромагнитным обменным взаимодействием спинов в атомных плоскостях и антиферромагнитным взаимодействием между плоскостями винтовая дислокация, перпендикулярная слоям, приводит к появлению несингулярных дисклинаций с ферромагнитным ядром.

PACS: 61.72.-y, 75.25.+z

Спиновое упорядочение в антиферромагнетиках (АФМ) описывается в рамках картины конечного числа магнитных подрешеток, каждая из которых упорядочена ферромагнитно, при том, что суммарный магнитный момент АФМ в обменном приближении равен нулю. АФМ упорядочение чувствительно к дефектам кристаллической решетки, которые разрушают подрешеточную структуру, характерную для идеального АФМ. При этом дефекты решетки могут приводить к появлению неоднородного распределения спинов, см. [1, 2].

Исторически первый пример подобных неоднородностей был предложен Дзялошинским [3] и Ковалевым, Косевичем [4], которые отметили, что наличие краевой дислокации в АФМ производит “сбой” в подрешетках и приводит к появлению макроскопических магнитных дефектов – доменных стенок и дисклинаций. Подобные эффекты возникают при наличии атомной ступеньки на поверхности раздела АФМ и ферромагнетика (ФМ), см. [5, 6] и ссылки там. Общим свойством всех этих неоднородностей является появление АФМ дисклинаций, которые могут рассматриваться как антиферромагнитный вихрь с полуцелым значением топологического заряда – завихренности, см. [1, 2]. Анализ дисклинации в свете повышения интереса к двумерным магнитным солитонам и особенно вихрям представляет самостоятельный интерес, см. [7 – 10].

Во всех упомянутых выше работах рассматривалась краевая дислокация в АФМ с шахматным порядком. Наличие скачка АФМ вектора $\mathbf{l}$ на некоторой поверхности, которая опирается на линию дислокации и простирается до поверхности кристалла, есть общее свойство всех дисклинаций в АФМ с дислокацией в решетке. Однако конкретное распределение спиновой плотности для различных типов АФМ может сильно отличаться от того, что характерно для описанной выше АФМ дисклинации. Чтобы продемонстрировать это, рассмотрим спиновую неоднородность, которая возникает в слоистых АФМ типа $CoCl_2$, $FeCl_2$, $NiCl_2$ с винтовой дислокацией, перпендикулярной слоям. В указанных АФМ обменное взаимодействие спинов в плоскостях ферромагнитно (обменный интеграл J), а соседние плоскости связаны АФМ взаимодействием с обменным интегралом J', обычно более слабым. Характерное значение $J/J' \approx 10 \div 100$ и достигает $10^4 \div 10^6$ для интеркалированных систем [11]. Как мы покажем, малость величины J'/J приводит к существованию несингулярных дисклинаций, которые могут быть последовательно описаны в рамках континуальной теории.

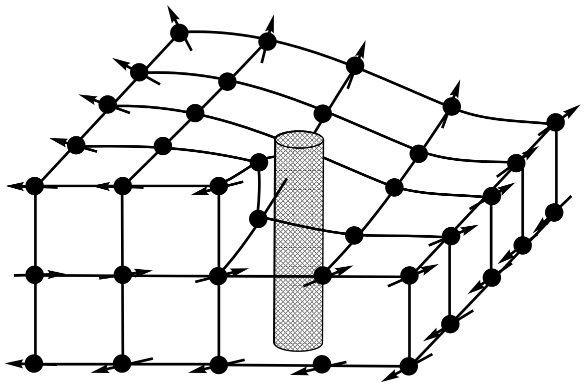
Гамальтониан идеального магнетика указанного выше типа может быть представлен в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{N_z} \sum_{\mathbf{r},\boldsymbol{\delta}} [-J\mathbf{S}_{n,\mathbf{r}}\mathbf{S}_{n,\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}} + + J'\mathbf{S}_{n,\mathbf{r}}\mathbf{S}_{n+1,\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}} + K(S^z_{n,\mathbf{r}})^2], \qquad (1)$$

где n нумерует слои с ФМ взаимодействием (обменный интеграл J), $\mathbf{r}$ определяет узлы в одном слое, $\boldsymbol{\delta}$ – векторы ближайших соседей, направленные к данному узлу внутри слоя, $J' \ll J$ – обменный интеграл между слоями, $N_z = L_z/a_z$ – число атомных плоскостей. Мы учли также легкоплоскостную анизотропию с константой K.

В гамильтониане (1) суммирование проводится по спинам внутри каждого слоя и затем по отдельным слоям. При введении в кристалл винтовой дислокации в любой области кристалла, которая не содержит линии дислокации, можно ввести такую же классификацию, но глобально система атомных плоскостей превращается в винтовую поверхность, см. подробнее [12] и рисунок. Удобно параметризовать эту по-

[1)]e-mail: bivanov@i.com.ua



Винтовая дислокация в магнетике (область ядра дислокации условно обозначена цилиндром) и распределение спинов (стрелки) на спиральной линии, охватывающей линию дислокации

верхность координатами r, χ, где величина χ меняется непрерывно от 0 до $2\pi N_z$. С использованием этих координат можно легко перейти к континуальному пределу для спиновой плотности $\mathbf{S} = S\mathbf{m}$, $\mathbf{m}^2 = 1$. Используем длинноволновое приближение для спинов, находящихся локально в той же плоскости (заменяя, например, $\mathbf{S}(\mathbf{r} + a\mathbf{e}_x) + \mathbf{S}(\mathbf{r} - a\mathbf{e}_x)$ на $2\mathbf{S}(r) + a^2\partial^2\mathbf{S}/\partial x^2$ и т.д.), и сохраним дискретное описание для соседних плоскостей. Тогда для макроскопической энергии магнетика можно получить формулу

$$\mathcal{W} = JS^2 \int_0^R r\,dr \int_0^{2\pi L_z/a_z} d\chi \left\{ \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{m})^2 + \right.$$
$$+ \frac{j}{a^2}\mathbf{m}(r,\chi)[\mathbf{m}(r,\chi+2\pi) +$$
$$\left. +\mathbf{m}(r,\chi-2\pi)] + \frac{K}{Ja^2}m_z^2(r,\chi) \right\}. \quad (2)$$

Здесь градиент берется только в данной плоскости, $j = J'/J$, значения $\mathbf{m}(r,\chi)$ и $\mathbf{m}(r,\chi+\pi)$ соответствуют спинам, расположенным в соседних плоскостях, ось z перпендикулярна слоям. Для простоты мы считаем, что образец имеет цилиндрическую форму и радиус R.

Начнем с анализа простого случая XY-модели, когда легкоплоскостная анизотропия предельно сильная, все спины лежат в плоскости xy, то есть $m_z = 0$, $m_x = \cos\phi$, $m_y = \sin\phi$. В случае XY-модели задача может быть проанализирована точно. В частности, можно продемонстрировать наличие фазового перехода второго рода однородное состояние – спиновая дисклинация. Затем мы покажем, что при конечной анизотропии и возможности выхода спинов из плоскости XY может возникать несингулярная дисклинация с ферромагнитным ядром.

Для XY-модели энергия (2) принимает вид

$$\mathcal{W} = JS^2 \int_0^R r\,dr \int_0^{2\pi L_z/a_z} d\chi \left\{ \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \right.$$
$$+ \frac{j}{a^2}\big[\cos[\phi(\chi) - \phi(\chi+2\pi)] +$$
$$\left. + \cos[\phi(\chi) - \phi(\chi-2\pi)] + 2\big] \right\}. \quad (3)$$

Экстремали функционала (3) определяются уравнением

$$\nabla^2\phi + \frac{j}{2a^2}\sin[\phi(\chi) - \phi(\chi+2\pi)] +$$
$$+ \frac{j}{2a^2}\sin[\phi(\chi) - \phi(\chi-2\pi)] = 0. \quad (4)$$

Легко убедиться, что однородное вращение типа

$$\phi = \frac{\alpha\chi}{2} + \phi_0 \quad (5)$$

отвечает точному решению этого уравнения. Отметим, что величина α, в отличие от случая вихря или обычной дисклинации, где α – целое или полуцелое число, соответственно может принимать произвольные значения. Такое поведение α определяется свойствами римановой поверхности, на которой задается переменная ϕ, а именно тем, что не нужно вводить условия непрерывности для $\cos\phi$ и $\sin\phi$ при повороте χ на 2π.

Подставляя решение (5) в выражение (3) и учитывая, что в силу (5) $(\nabla\phi)^2 = \alpha^2/4r^2$, получим энергию магнетика как функцию параметра решения α, величины J'/J и размеров системы:

$$\mathcal{W} = \pi JS^2 \frac{L_z}{a}\left[\frac{\alpha^2}{4}\ln\left(\frac{R}{r_0}\right) + \frac{jR^2}{a^2}(1+\cos\pi\alpha)\right], \quad (6)$$

где r_0 – радиус обрезания порядка постоянной решетки в слое.

Условие минимума энергии $d\mathcal{W}/d\alpha$ дает, что возможны два типа состояний магнетика: однородное с $\alpha = 0$, и неоднородные, которым отвечают значения α, являющиеся решениями трансцендентного уравнения

$$\frac{\sin\pi\alpha}{\pi\alpha} = \frac{\ln(R/r_0)}{2\pi^2 j(R/a)^2}. \quad (7)$$

Однородное (ферромагнитное) состояние невыгодно с точки зрения АФМ взаимодействия между слоями, ему отвечает энергия магнетика $\mathcal{W}_{hom} = 2J'S^2V/v_0$, где $V = \pi R^2 L_z$ – объем магнетика, $v_0 = a^2 a_z$ – объем элементарной ячейки. Неоднородные решения существуют только для достаточно больших частиц, при $R > R_c$, где R_c определяется соотношением

$$2\pi^2 j \left(\frac{R_c}{a}\right)^2 = \ln\frac{R_c}{r_0}. \qquad (8)$$

При малых значениях $j \ll 1$ величина R_c является макроскопической, $R_c \gg a$. Поэтому имеет смысл рассмотреть переход от неоднородного состояния, которое может существовать при $R > R_c$, к однородному, которое только и является возможным при $R \leq R_c$. Роль параметра порядка играет α, вблизи точки перехода $\alpha \propto \sqrt{(R-R_c)/R_c}$. Если же величина $R \gg R_c$, то правая часть уравнения (7) мала, величина α близка к единице, $\alpha = 1 - (R_c/R)^2$, и распределение спинов почти такое же, как и распределение вектора $\mathbf{l}$ в АФМ дисклинации, где $\phi = \chi/2 + \phi_0$, а энергия в (3) определяется формулой

$$E = \frac{\pi J L_z}{4a} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \ll J N_{at} \ll \mathcal{W}_{hom}. \qquad (9)$$

В этом случае в соседних слоях спины почти антипараллельны и можно перейти к описанию в терминах вектора антиферромагнетизма $\mathbf{l}$, который для слоистых АФМ определяется как разность спинов, расположенных "друг над другом". Ясно, что такой вектор можно ввести локально для области, не содержащей линию дислокации. Вектор антиферромагнетизма $\mathbf{l}$, определенный таким образом, будет иметь разрыв на некой поверхности, которая опирается на линию дислокации и простирается до поверхности кристалла.

Учет реальной трехмерной природы спинов, актуальный при $K \ll J$ (при любом соотношении между K и J' при условии, что $J' \ll J$), приводит к существенно более сложным уравнениям, и мы ограничимся случаем больших R. Энергию (3) в данном случае удобно привести в обычных угловых переменных для единичного вектора спина $S_z = S\cos\theta$, $S_x = S\sin\theta\cos\phi$, $S_y = S\sin\theta\sin\phi$. В этой параметризации энергия принимает вид

$$\mathcal{W} = JS^2 \int_0^R r\,dr \int_0^{2\pi L_z/a_z} d\chi \left\{ \frac{1}{2}[(\nabla\theta)^2 + (\nabla\phi)^2 \sin^2\theta] + \right.$$
$$+ \frac{1}{2\Delta_0^2}\cos^2\theta + \frac{j}{a^2}[\cos\theta(\cos\theta_+ + \cos\theta_-) +$$
$$+ \sin\theta\sin\theta_+\cos(\phi-\phi_+) +$$
$$\left. + \sin\theta\sin\theta_-\cos(\phi-\phi_-)] \right\}. \qquad (10)$$

Здесь введены параметр Δ_0 с размерностью длины, $\Delta_0^2 = Ja^2/K$, и обозначения $\theta_\pm = \theta(r, \chi \pm 2\pi)$, $\phi_\pm = \phi(r, \chi \pm 2\pi)$. Легко убедиться, что система уравнений Эйлера – Лагранжа для функционала (10) имеет решение вида

$$\theta = \theta_0(r), \quad \phi = \frac{\alpha\chi}{2} + \phi_0. \qquad (11)$$

При этом для функции θ получается обыкновенное дифференциальное уравнение такого же типа, как для вихрей в магнетиках, см. [1, 2],

$$\frac{d^2\theta}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\theta}{dr} + \sin\theta\cos\theta\left(\frac{1}{\Delta_\alpha^2} - \frac{\alpha^2}{4r^2}\right) = 0, \qquad (12)$$

с теми лишь различиями, что величина α теперь может быть произвольной, а не целой, и что характерная длина Δ_α зависит от параметра α,

$$\Delta_\alpha^2 = \frac{Ja^2}{K + 2J'\sin^2(\pi\alpha/2)} < \Delta_0^2. \qquad (13)$$

Естественные граничные условия для этого уравнения определяются отсутствием сингулярностей в центре ($\theta = 0$ или π при $r = 0$) и тем, что вдали от центра дисклинации спины ложатся в легкую плоскость xy, формируя такую же структуру, что была рассмотрена выше для дисклинации в XY-модели,

$$\cos\theta = p \text{ при } r \to 0,\ p = \pm 1,\ \theta \to \pi/2 \text{ при } r \to \infty. \qquad (14)$$

Таким образом, в задаче возникает еще один дискретный параметр p, который играет ту же роль, что и поляризация для внеплоскостного вихря в легкоплоскостных ФМ, см. [2]. Состояние дисклинации вырождено не только по знаку α, но и по величине p.

Решение уравнения (12) с учетом (14) и асимптотики $\sin\theta \simeq (r/\Delta_\alpha)^{\alpha/2}$ при $r \to 0$ легко построить численно. Для больших R величина $\alpha \simeq 1$ и энергия дисклинации

$$E = \frac{\pi J S^2}{4}\ln\left(\frac{R}{C\Delta}\right), \quad \Delta = a\sqrt{\frac{J}{K + 2J'}}. \qquad (15)$$

Таким образом, эта дисклинация имеет характерную логарифмическую зависимость от размеров образца. Но, фактически, на этом сходство между дисклинацией в слоистом АФМ и рассмотренными ранее дисклинациями в АФМ с шахматной структурой заканчиваются. Перечислим их различия.

Дисклинацию в слоистом АФМ уместно назвать *ферромагнитной*, так как в ядре упорядочение спинов ферромагнитно вдоль всей линии дисклинации и в каждом из локальных участков атомных плоскостей расположение спинов близко к ферромагнитному. Для магнитной частицы, состоящей из нечетного числа атомных плоскостей, суммарная намагниченность в базисной плоскости макроскопическая и близка к $(1/2)2\mu_B S N_{at}$, где N_{at} – число атомов в плоскости.

При выполнении разумных условий $K \ll J$ и $J' \ll J$ ядро ФМ дисклинации не содержит сингулярностей, параметр обрезания в энергии является макроскопической величиной, $\Delta \gg a$.

Состояние ФМ дисклинации вырождено по двум дискретным числам, p и знаку α, а не по одному, как для сингулярной АФМ дисклинации. Это может проявляться в эффектах макроскопического квантового туннелирования для спиновых дисклинаций, см [13].

Мы благодарны В. Г. Барьяхтару, А. С. Ковалеву и С. М. Рябченко за полезные обсуждения. Работа поддержана грантом INTAS # 97-31-311.

---

1. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Киев: Наукова думка, 1983.
2. V. G. Bar'yakhtar and B. A. Ivanov, *Solitons and Thermodynamics of Low-Dimentional Magnets*, Sov. Sci. Rev. A Phys., Ed. I. M. Khalatnikov, **16**, 1–223 (1992).
3. И. Е. Дзялошинский, Письма в ЖЭТФ **25**, 110 (1977).
4. А. С. Ковалев, А. М. Косевич, ФНТ **3**, 259 (1977).
5. R. L. Stamps and R. E. Camley, Phys. Rev. **B54**, 15200 (1996); R. L. Stamps, R. E. Camley, and R. J. Hicken, Phys. Rev. **B54**, 4159 (1996).
6. О. К. Дудко, А. С. Ковалев, ФНТ **25**, 25 (1999).
7. А. С. Ковалев, ФНТ **20**, 1034 (1994).
8. Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, В. П. Воронов, ФНТ **23**, 845 (1997).
9. О. К. Дудко, А. С. Ковалев, ФНТ **24**, 559 (1998).
10. О. К. Дудко, А. С. Ковалев, ФНТ **26**, 821 (2000).
11. D. C. Wiesler, H. Zabel, and S. M. Shapiro, Z Phys. **B93**, 277 (1994).
12. А. М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова Думка, Киев, 1978.
13. B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, in: *Frontiers in Magnetism of Reduced Dimension Systems*, Eds. V. G. Bar'yakhtar, P. E. Wigen, and N. A. Lesnik, vol. **49** of NATO ASI Series 3, High Technology, Kluwert, Dordrecht, 1998.