

Российская Академия наук
Институт физических проблем им. П. Л. Капицы

На правах рукописи

Фарутин Александр Михайлович

К ТЕОРИИ ОБМЕННЫХ СПИНОВЫХ СТРУКТУР

Специальность 01.04.02 — теоретическая и математическая
физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н. В. И. Марченко

Москва, 2008

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	1
1 ОБМЕННЫЕ СПИНОВЫЕ СТРУКТУРЫ	6
1.1 ОБМЕННАЯ СИММЕТРИЯ	6
1.2 ИНВАРИАНТЫ ЛИФШИЦА	17
1.3 ЭНЕРГИЯ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ	18
1.4 РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ АНИЗОТРОПИИ	19
2 НИЗКОЧАСТОТНАЯ СПИНОВАЯ ДИНАМИКА В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	22
3 ДИНАМИКА ПАРАМАГНЕТИКОВ ПРИ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ	30
3.1 ОБМЕННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ	30
3.1.1 $S = 0$	31
3.1.2 $S = 1$	33
3.1.3 $S = 2$	36
3.2 ОБМЕННАЯ ДИНАМИКА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ	38
3.2.1 $S = 0$	38
3.2.2 $S = 1$	38
3.2.3 $S = 2$	41
3.3 РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ	42

4	НЕСОБСТВЕННЫЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ	49
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	51

Список иллюстраций

1.1	тетраэдр, вписанный в куб	10
1.2	икосаэдр, вписанный в куб	11
2.1	Углы Эйлера	25
2.2	12 подрешеток $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$	28
3.1	Энергия спиновых возбуждений $E = \hbar\omega$ как функция волнового вектора $q = (h, 0, 1)$ е.о.р. в парамагнитном $TlCuCl_3$. Кружки – данные неупругого рассеяния нейтронов [26], линия – спектр (3.3) с параметрами $\omega_0 = 0.16$ ТГц, $s = 0.5$ км/с.	34
3.2	Энергия спиновых возбуждений как функция волнового вектора в направлении вдоль спиновых цепочек в парамагнитном $(CH_3)_2CHNH_3CuCl_3$ согласно данным неупругого рассеяния нейтронов [27]. Линия – спектр вида (3.3), где, однако, волновой вектор отсчитывается от границы зоны Бриллюэна, с параметрами $\omega_0 = 0.28$ ТГц, $s = 0.41$ км/с.	35
3.3	Линейный закон зануления квадрата щели магнетонного спектра $E^2 = a(P_c - P)$ по давлению в парамагнитном $TlCuCl_3$ по данным работы [28]; $P_c = 1.1$ kbar, $a = 0.35$ meV ² /kbar.	36
3.4	Расщепление щели триплета в магнитном поле. Открытые кружки – $TlCuCl_3$ [29, 30] ($H_c = 5.9$ Тесла), закрытые кружки – $(CH_3)_2CHNH_3CuCl_3$ [27] ($H_c = 9.9$ Тесла).	40

3.5	Расщепление щели магннного спектра при $S = 2$. Здесь, также как и при $S = 1$, спектр полностью определяется значением щели в нулевом поле.	43
3.6	Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля $H \parallel C_2$.	45
3.7	Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля $H \parallel [201]$.	47
3.8	Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля при $H \perp (10\bar{2})$. Пунктирная линия построена с учетом лишь параметров $\beta_{xx}, \beta_{yy}, \beta_{zz}$, полученных из подгонки для двух других направлений магнитного поля.	47
4.1	Фрагмент фазовой диаграммы, полученный методом Монте-Карло при параметрах $\beta_{1,2} = 20$; $\beta_{3,4} \in (-2; 2)$; $\beta_5 = -1$. Рассмотренная в диссертации фаза обозначена серым цветом. Симметрия синей и красной фазы не допускает образования ненулевого вектора из сверток параметра порядка.	52

Список таблиц

1.1	Спиновые группы	16
2.1	Спиновые группы с разрешенной намагниченностью	23

Введение.

Как показано в работе Андреева и Марченко [1], в случае, когда релятивистские эффекты и магнитные поля много меньше обменных, а расстояния, на которых происходит изменение параметра порядка, много больше межатомных, макроскопические свойства магнетика определяются его обменной симметрией и могут быть выяснены без нахождения микроскопической структуры данного вещества и каких-либо модельных представлений. Обменная симметрия магнетика задается видом параметра порядка и тем, как при пренебрежении релятивистскими эффектами он преобразуется под действием элементов группы кристаллической симметрии. Так как обменное взаимодействие спинов зависит лишь от их относительной ориентации, функция Лагранжа не изменяется при повороте всех спинов на один и тот же угол. Поэтому спектр низкочастотных возбуждений в таких магнетиках оказывается голдстоуновским. Релятивистские поправки к функции Лагранжа фиксируют ориентацию спинов относительно кристаллографических осей и приводят к появлению небольшой щели в спектрах магнонов. Эти поправки можно разложить по компонентам параметра порядка, так как чем большей степени член, тем выше его малость по постоянной тонкой структуры. Вид этого разложения задается обменной симметрией магнетика. Величины коэффициентов определяются его микроскопической структурой и в рамках данного подхода остаются неизвестными. В работе [1] был рассмотрен случай векторного параметра порядка и показано, что его можно представить как набор не более трех взаимно-перпендикулярных векторов, преобразующихся по каким-либо неприводимым представлениям группы кристаллической симметрии. Такие магнетики характеризуются отличной от нуля сред-

ней микроскопической спиновой плотностью, и в зависимости от того, как преобразуется параметр порядка, называются ферро-, антиферро- или ферромагнетиками.

Существуют другие возможности спинового упорядочения. Андреев и Грищук [2] показали, что в случаях, когда обменные эффекты значительно превосходят релятивистские, в конденсированной среде могут возникнуть спиновые структуры особого типа. Средняя микроскопическая спиновая плотность в этих веществах равна нулю, и спонтанное нарушение симметрии обменного гамильтониана относительно группы вращений спинового пространства проявляется в возникновении анизотропии у двухточечного спинового коррелятора $\langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1)\hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2) \rangle$. Такое состояние не является магнетиком, т.к. не нарушена инвариантность относительно изменения знака времени R . Однако, спиновая корреляционная структура обладает многими свойствами, характерными для обычных векторных обменных магнетиков (низкочастотные спиновые волны, магнитный резонанс, анизотропия восприимчивости и т.д.).

В принципе возможны и более сложные структуры, в которых спонтанное нарушение обменной инвариантности и симметрии R проявляется лишь в многоточечных спиновых корреляционных функциях [3]. В случаях четных корреляционных функций состояние немагнитно – такие структуры будем называть спиновыми нематиками [2]. В случае нечетных корреляционных функций, например, в случае отличного от нуля трехточечной корреляционной функции $\langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1)\hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2)\hat{S}_\gamma(\mathbf{r}_3) \rangle$ состояние является магнетиком, т.к. симметрия $t \rightarrow -t$ нарушена. Такие структуры, характеризующиеся нечетными спиновыми корреляционными функциями, будем называть тензорными магнетиками [3]. Они существенно отличаются как от обычных магнетиков, так и от спиновых нематиков. При учете релятивистских эффектов в них обязательно появляется малая спиновая плотность. Недавно было обнаружено несколько веществ, в которых наблюдается крайне слабая спонтанная намагниченность подрешеток. Барзыкин и Горьков [4] предложили способ определения наличия у этих веществ тензорного магнитного порядка с помощью измерения упругого рассеяния нейтронов во внешнем магнитном поле.

В работах [2,3,5] были рассмотрены некоторые примеры тензорных структур без анализа трансформационных свойств спинового параметра порядка относительно кристаллографической симметрии. Барзыкин, Горьков и Сокол [6] рассмотрели в рамках теории Ландау некоторые спиновые нематические фазы, характеризующиеся парной корреляционной функцией, возникающие в результате фазового перехода второго рода в кристаллах с тетрагональной симметрией.

Настоящая диссертация посвящена различным распространениям теории обменной симметрии.

Для классификации различных видов спиновых структур удобно ввести понятие группы спиновой симметрии – подгруппы группы всех вращений спинового пространства, дополненной преобразованием обращения времени, относительно которой параметр порядка инвариантен.

Описанию обменных спиновых структур с любыми видами упорядочения, проявляемого в спиновых корреляционных функциях, посвящена первая глава данной диссертации. Выяснены все возможные типы такого упорядочения в кристаллах. Рассмотрены некоторые общие свойства макроскопической теории произвольных спиновых структур – вид энергии неоднородности, анизотропии и энергии во внешних полях.

Развитие экспериментальной техники в последнее время делает возможным детальные исследования структур со спиновым упорядочением в сильном магнитном поле (см., например, [7–10]). В полях порядка обменного, любая спиновая структура значительно деформируется и уравнения спиновой динамики [1] больше нельзя раскладывать по величине магнитного поля. Тем не менее, основные понятия этой теории остаются применимыми. Если магнитное поле все еще меньше поля насыщения, в обменной системе может быть одна квазиголдстоуновская мода связанная с инвариантностью обменной и зеемановской энергий при вращении спинового пространства вокруг направления магнитного поля на некоторый угол.

Вторая глава данной диссертации посвящена распространению теории обменных спиновых структур на случай внешних полей сравнимых с обменными. Выведено уравнение спиновой динамики для квазиголдстоуновской

моды для двух примеров коллинеарных и одного неколлинеарного антиферромагнетика. В последнем случае найдено соотношение между статическими характеристиками магнетика и коэффициентами в уравнении динамики.

В некоторых веществах парамагнитное состояние спиновой системы благодаря развитым квантовым флуктуациям наблюдается при температурах значительно меньших характерных параметров спин-спинового взаимодействия вплоть до абсолютного нуля. В случае, когда обменные эффекты значительно превосходят релятивистские, возбуждения в таком (синглетном) основном состоянии имеют определенный спин S . В обменном приближении возбуждения с данным спином вырождены по спиновой проекции и, как правило, имеют конечную энергию при любом значении квазиимпульса. Внешнее магнитное поле приводит к зеемановскому расщеплению спектра возбуждений (при $S \neq 0$). При достижении магнитным полем критического значения энергия какого-либо возбуждения при некотором значении квазиимпульса обращается в ноль. В больших полях синглетное состояние становится неустойчивым и, в зависимости от типа этой смягчающейся моды, возникает то или иное спинупорядоченное состояние.

Теория триплетных возбуждений в синглетном основном состоянии одномерных систем построена в работах Афлека [11] на основе анализа квазиклассического предела микроскопической модели (см. также [12, 13]). В случаях, когда синглетное основное состояние близко к неустойчивости при нуле температуры, возможно макроскопическое описание низкочастотной спиновой динамики парамагнетиков, не зависящее от каких-либо модельных представлений.

Построению такого описания для возбуждений с $S = 0, 1$ или 2 посвящена третья глава данной диссертации. Развита макроскопическая теория низкочастотных возбуждений в близких к неустойчивости обменных спиновых системах с синглетным основным состоянием. Рассмотрены примеры динамики в окрестности точек неустойчивости по давлению и по магнитному полю при нулевой температуре. Предложенный подход легко распространяется на произвольные S .

В работе [14] была отмечена возможность несобственного обменного фер-

ромагнетизма при антиферромагнитных фазовых переходах. В четвертой главе диссертации показано, что не только ферромагнитное, но и антиферромагнитное упорядочение может появляться как несобственное при фазовых переходах второго рода в состояние тензорного магнетизма [3].

Простейшим параметром порядка тензорного магнетика является симметричный бесследовый спиновый тензор третьего ранга $S_{\alpha\beta\gamma}$. Случай, когда он преобразуется по одномерному представлению кристаллической группы был фактически рассмотрен в работе [15] в применении к жидким кристаллам. Все фазы возникающие при таком переходе имеют высокую симметрию, не допускающую спиновые векторы ($S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu} = 0$).

В диссертации рассмотрен в рамках теории Ландау фазовый переход второго рода с параметром порядка в виде симметричного бесследового спинового тензора и продемонстрировано, при таком переходе на фазовой диаграмме есть области, где в результате перехода образуется несобственный антиферромагнитный или ферромагнитный порядок.

Результаты диссертации опубликованы в работах [16, 21, 23, 32], доложены на конференциях НТ-34 и ICFM'2007, семинарах ИФП, конференциях МФТИ.

Глава 1

Обменные спиновые структуры [16].

1.1 Обменная симметрия

Спиновые структуры характеризуются спонтанным нарушением обменной инвариантности. В обычных магнетиках отлична от нуля средняя микроскопическая плотность спина

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \langle \hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (1.1)$$

в спиновых нематиках отсутствует спиновая плотность, а самый простой коррелятор в котором проявляется нарушение обменной инвариантности составлен из четного числа спинов. В простейшем случае это двухточечный коррелятор

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1) \hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (1.2)$$

Тензорные магнетики характеризуются отличным от нуля коррелятором трех или большего нечетного числа спинов. Простейший случай трехточечного коррелятора

$$S_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \langle \hat{S}_\alpha(\mathbf{r}_1) \hat{S}_\beta(\mathbf{r}_2) \hat{S}_\gamma(\mathbf{r}_3) \rangle. \quad (1.3)$$

Симметрия обменного спинового состояния задается совокупностью пре-

образований трех типов: 1) обычных кристаллографических, 2) их комбинаций с поворотами спинового пространства и преобразованием обращения времени R (которое играет роль инверсии спинового пространства), а также 3) спиновых поворотов, относительно которых все характеристики спиновой структуры – плотность (1.1) и любые спиновые корреляционные функции – остаются инвариантными.

Совокупность последних, чисто спиновых, преобразований представляет собой некоторую группу симметрии, которая, очевидно, совпадает с одной из точечных групп симметрии [17]. Будем обозначать эти группы спиновых преобразований так же как и пространственные точечные группы, но с добавлением верхнего индекса s . Например, группами спиновой симметрии обычных обменных магнетиков являются группы $C_{\infty v}^s$ – у коллинеарных, C_s^s – у компланарных, E^s – у неколлинеарных некомпланарных структур.

Построение групп обменной симметрии обычных магнетиков основано на следующем замечании [1]. В общем случае микроскопическую спиновую плотность можно записать в виде

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = f_a^{(1)} \mathbf{a} + f_b^{(1)} \mathbf{b} + f_c^{(1)} \mathbf{c}, \quad (1.4)$$

где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ – базис в спиновом пространстве: тройка взаимно ортогональных единичных магнитных векторов, меняющих знак при изменении знака времени; f – вещественные функции координат \mathbf{r} , верхний индекс в скобках у функций f указывает ранг рассматриваемого спинового тензора. Квадрат спиновой плотности

$$\mathbf{S}^2 = (f_a^{(1)})^2 + (f_b^{(1)})^2 + (f_c^{(1)})^2 \quad (1.5)$$

вообще не меняется ни при каких поворотах спинового пространства и изменении знака времени, и, как характеристика состояния, должен быть инвариантен относительно всех преобразований обменной кристаллической группы симметрии G .

В коллинеарном случае функции f линейно зависимы, базис в спиновом пространстве можно выбрать так, что, например,

$$f_a^{(1)} = f_b^{(1)} = 0.$$

Функция $f_c^{(1)}$ должна преобразовываться только по какому-либо одномерному представлению. В компланарном магнетике базис можно выбрать так, что, например, функция $f_c^{(1)}$ будет равна нулю, тогда функции $f_a^{(1)}, f_b^{(1)}$, должны быть линейно независимы и преобразовываться либо по одному и тому же одномерному представлению, либо по разным одномерным представлениям, либо по одному двумерному представлению. В неколлинеарном магнетике общего вида все три функции линейно независимы и должны преобразовываться по одинаковым или различным одномерным представлениям, либо одна по какому-либо одномерному представлению, а две по двумерному, либо все по одному трехмерному представлению.

В перечисленных обменных магнетиках со спиновыми симметриями $C_{\infty v}^s$, C_s^s , и E^s задание спиновой плотности полностью определяет симметрию состояния и нет необходимости в специальном рассмотрении корреляционных функций.

Иная ситуация возникает в других группах спиновой симметрии. В случае минимального нарушения группы симметрии обменного гамильтониана, когда все повороты спинового пространства остаются ненарушенными и отсутствует лишь $t \rightarrow -t$ инвариантность, параметром порядка является трехточечная корреляционная функция

$$S_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = f^{(3-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)E_{\alpha\beta\gamma}, \quad (1.6)$$

Знак минус в верхнем индексе у функции f указывает на то, что речь идет об антисимметричной части спинового тензора. Изотропный тензор $E_{\alpha\beta\gamma}$ равен

$$E_{\alpha\beta\gamma} = a_\alpha b_\beta c_\gamma + b_\alpha c_\beta a_\gamma + c_\alpha a_\beta b_\gamma - b_\alpha a_\beta c_\gamma - a_\alpha c_\beta b_\gamma - c_\alpha b_\beta a_\gamma.$$

Тензор $E_{\alpha\beta\gamma}$ отличается от псевдотензора Леви-Чевита $e_{\alpha\beta\gamma}$ магнитным множителем ν

$$\nu = (\mathbf{a}[\mathbf{bc}]), \quad (1.7)$$

меняющим знак при изменении знака времени. Из условия инвариантности спиновых сверток $S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\gamma}$ относительно элементов группы G следует, что функция $f^{(3-)}$ может преобразовываться только по какому-либо одномерному представлению. Вещество является скалярным магнетиком [3]. Обменная

и магнитная симметрия такого состояния определяются симметрией произведения $\nu f^{(3-)}$. Магнитная кристаллическая группа здесь, очевидно, совпадает с обменной кристаллической группой G .

Изотропная магнитная величина (1.7) отлична от нуля также у неколлинеарных некопланарных магнетиков, в которых в спиновой плотности (1.1) все функции f линейно независимы. Эту величину естественно называть магнитной киральностью. Дзялошинский [18] обратил внимание на то, что в таких структурах возможны доменные границы особого рода. Состояния, отличающиеся знаком величины (1.7), не могут быть переведены друг в друга каким-либо поворотом спинового пространства. Структура границы между ними определяется обменными взаимодействиями и, поэтому, должна иметь атомную толщину. В отличие от обычных доменных стенок в магнетиках, толщина которых связана с конкуренцией обменных и релятивистских эффектов.

Состояние с максимальной аксиальной спиновой симметрией $\mathbf{D}_{\infty h}^s$ является аксиальным спиновым немагнетиком [2], который характеризуется анизотропной частью парной корреляционной функции

$$S_{\alpha\beta} = \frac{f_1^{(2)}}{\sqrt{6}}(3c_\alpha c_\beta - \delta_{\alpha\beta}), \quad (1.8)$$

где $f_1^{(2)}$ функция координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Из условия инвариантности относительно элементов обменной кристаллографической группы G спиновых сверток $S_{\alpha\beta}S_{\alpha\beta}$ и $S_{\alpha\beta}S_{\beta\gamma}S_{\alpha\gamma}$ следует, что функция $f_1^{(2)}$ вообще не может меняться (единичное представление).

Тензорные магнетики со спиновой симметрией \mathbf{D}_∞^s характеризуются магнитной киральностью (1.6) и парными корреляциями (1.8), причем функции $f^{(3-)}$ и $f_1^{(2)}$ могут преобразовываться по одному или по разным одномерным представлениям.

В спиновой группе $\mathbf{C}_{\infty h}^s$ в корреляционной функции, помимо симметричной по спиновым индексам части (1.8), появляется антисимметричная часть [2]

$$\frac{f_c^{(2-)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha b_\beta - b_\alpha a_\beta). \quad (1.9)$$

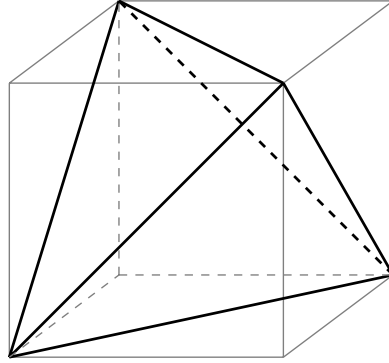


Рис. 1.1: тетраэдр, вписанный в куб

Анализ инвариантности немагнитных спиновых сверток и здесь приводит к утверждению, что функция $f_1^{(2)}$ не может меняться, а функция $f_c^{(2-)}$ преобразуется по какому-либо одномерному представлению. Параметром порядка в рассматриваемом случае служит псевдовектор \mathbf{P} в спиновом пространстве дуальный антисимметричной части корреляционной функции

$$\mathbf{P} = f_c^{(2-)}[\mathbf{ab}], \quad (1.10)$$

В спиновой группе \mathbf{C}_∞^s , помимо корреляционной функции характеризующей случай $\mathbf{C}_{\infty h}^s$ (с теми же правилами отбора для функций f), разрешен вектор

$$\mathbf{S} = f_c^{(1)}\mathbf{c}, \quad (1.11)$$

где функция $f_c^{(1)}$ преобразуется по какому-либо одномерному представлению. Такая структура, очевидно, обладает магнитной киральностью.

В конечных группах выберем ориентацию базисной тройки спиновых векторов следующим образом. В кубических группах \mathbf{O}^s , \mathbf{O}_h^s векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} направим вдоль осей четвертого порядка, то есть вдоль ребер куба.

В тетраэдрических группах \mathbf{T}^s , \mathbf{T}_d^s , \mathbf{T}_h^s , векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} направим вдоль трех взаимно ортогональных осей второго порядка, то есть вдоль ребер куба,

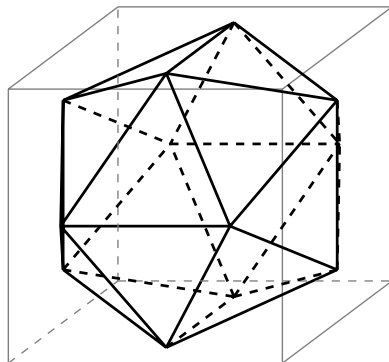


Рис. 1.2: икосаэдр, вписанный в куб

в который вписан тетраэдр (см. рис. 1.1).

В икосаэдрических группах $\mathbf{Y}^s, \mathbf{Y}_h^s$ векторы $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ направим вдоль трех взаимно ортогональных осей второго порядка, то есть вдоль ребер куба, в который вписан икосаэдр (см. рис. 1.1).

В группах с выделенной осью вектор \mathbf{c} направим вдоль главной оси. Вектор \mathbf{a} в группах $\mathbf{D}_n^s, \mathbf{D}_{nh}^s, \mathbf{D}_{nd}^s$ направим вдоль одной из осей U_2^s . В группах \mathbf{C}_{nv}^s вектор \mathbf{a} направим в плоскости симметрии σ_v^s . В группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nh}^s, \mathbf{S}_{2n}^s$ ориентация вектора \mathbf{a} , а в группе \mathbf{C}_i^s ориентация всей базисной тройки остаются свободными.

В спиновой группе \mathbf{C}_i^s , при полном нарушении обменной инвариантности и сохранении $t \rightarrow -t$ инвариантности, удобно рассмотреть антисимметричную часть парной корреляционной функции, которая в общем случае имеет вид

$$S_{\alpha\beta}^{(-)} = (f_a^{(2-)} a_\gamma + f_b^{(2-)} b_\gamma + f_c^{(2-)} c_\gamma) E_{\alpha\beta\gamma}. \quad (1.12)$$

Заметим, что при рассматриваемой группе спиновой симметрии \mathbf{C}_i^s , нет оснований для линейной зависимости между функциями f . Из условия инва-

риантности спиновой свертки $S_{\alpha\beta}^{(-)}S_{\alpha\beta}^{(-)}$ следует, что сумма

$$(f_a^{(2-)})^2 + (f_b^{(2-)})^2 + (f_c^{(2-)})^2$$

не меняется под действием элементов симметрии группы G . Таким образом, возникают те же правила отбора для представлений, по которым могут преобразовываться функции f , что и в магнетиках. Здесь, однако, есть еще требование инвариантности свертки $S_{\alpha\beta}^{(-)}S_{\beta\gamma}^{(-)}S_{\alpha\gamma}^{(-)}$, откуда следует дополнительное условие – не должно меняться произведение

$$f_a^{(2-)} f_b^{(2-)} f_c^{(2-)}.$$

Последнее условие существенно сокращает число возможных структур.

В группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nv}^s (n > 1)$ разрешен коллинеарный магнетизм (1.11). В группах \mathbf{C}_n^s спиновая структура характеризуется магнитной киральностью, и, соответственно, парная корреляционная функция имеет антисимметричную часть (1.9). В группе \mathbf{C}_2^s в корреляционной функции $S_{\alpha\beta}$ появляются дополнительные члены

$$\frac{f_2^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta) + \frac{f_3^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha b_\beta + b_\alpha a_\beta). \quad (1.13)$$

Из анализа спиновых сверток следует, что функции $f_2^{(2)}, f_3^{(2)}$ преобразуются либо по одномерным представлениям (различным или одинаковым), либо по одному двумерному. В группе \mathbf{C}_{2v}^s из двух членов (1.13) остается один, преобразующийся по одномерному представлению.

Правила отбора представлений в группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nv}^s$ при $n > 2$ такие же, как и при $n = 2$, только анизотропия проявляется в n -точечных корреляторах. При этом вместо пары тензоров фигурирующих в (1.13) нужно рассматривать пару спиновых тензоров ранга n , которые можно представить в виде

$$\{(a + ib)^n + (a - ib)^n\}, i\{(a + ib)^n - (a - ib)^n\}.$$

Здесь и ниже запись выражений в скобках $\{\}$ подразумевает очевидную расстановку спиновых индексов.

Спиновые структуры с группами спиновой симметрии \mathbf{C}_{nh}^s отличаются от случаев \mathbf{C}_n^s лишь отсутствием магнитного вектора (1.11).

В группах \mathbf{S}_{2n}^s магнитный вектор также запрещен, но отлична от нуля антисимметричная часть парной корреляционной функции (1.9). Анизотропия вокруг оси проявляется в корреляционной функции порядка $n + 3$. Имеются два тензора

$$E_{\alpha\beta\gamma} * \{(a + ib)^n + (a - ib)^n\} \text{ и } iE_{\alpha\beta\gamma} * \{(a + ib)^n - (a - ib)^n\},$$

где знак $*$ указывает на тензорное произведение. Здесь также возможны случаи одномерных и двумерных представлений для соответствующих амплитуд $f_1^{(n+3)}, f_2^{(n+3)}$.

В группах \mathbf{D}_n^s нарушение $t \rightarrow -t$ инвариантности приводит к наличию изотропных тройных корреляций (1.6).

В случае \mathbf{D}_2^s анизотропия в спиновом пространстве описывается корреляционной функцией

$$S_{\alpha\beta} = \frac{f_1^{(2)}}{\sqrt{6}}(3c_\alpha c_\beta - \delta_{\alpha\beta}) + \frac{f_2^{(2)}}{\sqrt{2}}(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta). \quad (1.14)$$

Из условия инвариантности всевозможных спиновых сверток приходим к заключению, что функции

$$(f_1^{(2)})^2 + (f_2^{(2)})^2$$

и

$$(f_1^{(2)})^3 - 3f_1^{(2)}(f_2^{(2)})^2$$

должны быть инвариантами. В любой пространственной группе G функция $f_1^{(2)}$ может преобразовываться по единичному представлению, а $f_2^{(2)}$ по какому-либо одномерному представлению. Возможны, однако, и случаи двумерных представлений. Так, в кристаллах ромбоэдрической и гексагональной систем имеются представления с $\mathbf{k} = 0$ сохраняющие инвариантность полинома

$$(f_1^{(2)})^3 - 3f_1^{(2)}(f_2^{(2)})^2 = \text{Re}(f_1^{(2)} + if_2^{(2)})^3.$$

Таковым, например, в любой пространственной группе симметрии кристаллического класса C_3 является представление по которому преобразуются x, y компоненты векторов.

Несложный анализ показывает, что в группах с выделенной осью более высокого порядка, а также в тетраэдрических группах возникают корреляционные функции, задаваемые одним тензором или двумя тензорами различного ранга с амплитудами преобразующимися только по одномерным представлениям группы G . Тензорные параметры порядка здесь имеют вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_n^s &: E_{\alpha\beta\gamma}, \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}; \\ \mathbf{D}_{nh}^s &: \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}; \\ \mathbf{D}_{nd}^s &: E_{\alpha\beta\gamma} * \{(a+ib)^n + (a-ib)^n\}; \\ \mathbf{T}^s &: E_{\alpha\beta\gamma}, T_{\alpha\beta\gamma}; \\ \mathbf{T}_d^s &: T_{\alpha\beta\gamma}; \\ \mathbf{T}_h^s &: E_{\alpha\beta\gamma} * T_{\delta\eta\mu}; \end{aligned}$$

Здесь $T_{\alpha\beta\gamma}$ – тетраэдрический тензор

$$T_{\alpha\beta\gamma} = \{abc\} = a_\alpha b_\beta c_\gamma + b_\alpha c_\beta a_\gamma + c_\alpha a_\beta b_\gamma + b_\alpha a_\beta c_\gamma + a_\alpha c_\beta b_\gamma + c_\alpha b_\beta a_\gamma.$$

В октаэдрической группе спиновой симметрии \mathbf{O}^s имеются трехточечные корреляции (1.6). Амплитуда $f^{(3-)}$ может преобразовываться по какому-либо одномерному представлению. Анизотропия в спиновом пространстве проявляется в четырехточечной корреляционной функции вида $f^{(4)}O_{\alpha\beta\gamma\delta}$, где величина $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$ есть симметричный по всем индексам бесследовый тензор с кубической симметрией

$$O_{\alpha\beta\gamma\delta} = a_\alpha a_\beta a_\gamma a_\delta + b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta + c_\alpha c_\beta c_\gamma c_\delta - \frac{1}{5}I_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)},$$

Здесь тензор $I^{(4)}$ есть симметричный тензор четвертого ранга обладающий сферической симметрией

$$I_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}.$$

Амплитуда $f^{(4)}$ должна быть инвариантом группы G так как не равна нулю свертка $O_{\alpha\beta\gamma\delta}O_{\alpha\beta\mu\nu}O_{\gamma\delta\mu\nu}$.

В кубической группе \mathbf{O}_h^s параметром порядка является тензор $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$.

В икосаэдрической группе \mathbf{Y}^s , имеются трехточечные корреляции (1.6), а

анизотропия в спиновом пространстве проявляется лишь в 6-точечной корреляционной функции вида

$$f^{(6)}Y_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu},$$

где тензор Y имеет симметрию икосаэдра. В группе \mathbf{Y}_h^s параметром порядка служит только тензор Y . Симметричный по всем индексам бесследовый тензор 6-го ранга, обладающий икосаэдрической симметрией, имеет следующий вид

$$Y = \{(c + \phi a)^6 + (c - \phi a)^6 + (a + \phi b)^6 + (a - \phi b)^6 + (b + \phi c)^6 + (b - \phi c)^6 - \frac{2(1 + \phi^2)^3}{35}I^{(6)}\}.$$

Здесь векторы $\mathbf{c} + \phi\mathbf{a}$, $\mathbf{c} - \phi\mathbf{a}$, $\mathbf{a} + \phi\mathbf{b}$, $\mathbf{a} - \phi\mathbf{b}$, $\mathbf{b} + \phi\mathbf{c}$, $\mathbf{b} - \phi\mathbf{c}$ есть радиус-векторы шести вершин икосаэдра, никакие две из которых не являются диаметрально противоположными. При этом икосаэдр оказывается обычным образом вписан в куб с ребрами равными 2 и ориентированными вдоль базисной тройки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} . Число ϕ – золотое сечение.

$$\phi = (\sqrt{5} - 1)/2.$$

Тензор $I^{(6)}$ есть симметричный тензор шестого ранга обладающий сферической симметрией

$$I_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu}^{(6)} = \delta_{\alpha\beta}I_{\gamma\delta\eta\mu}^{(4)} + \delta_{\alpha\gamma}I_{\beta\delta\eta\mu}^{(4)} + \delta_{\alpha\delta}I_{\beta\gamma\eta\mu}^{(4)} + \delta_{\alpha\eta}I_{\beta\gamma\delta\mu}^{(4)} + \delta_{\alpha\mu}I_{\beta\gamma\delta\eta}^{(4)} + \delta_{\alpha\nu}I_{\beta\gamma\delta\mu}^{(4)}.$$

В обеих икосаэдрических спиновых группах функция $f^{(6)}$ должна быть инвариантом группы G , так как не равна нулю кубическая свертка

$$Y_{\alpha\beta\gamma\delta\eta\mu}Y_{\alpha\beta\gamma\epsilon\zeta\xi}Y_{\delta\eta\mu\epsilon\zeta\xi}.$$

Отметим, что тетраэдрический, кубический и икосаэдрический тензоры в другом виде приведены в работах по теории неаксиальных нематических жидких кристаллов (см., например, [19]).

Для наглядности приведем эти результаты в виде сводной таблицы (табл. 1.1):

спиновая группа	параметр порядка
$C_{\infty v}^s$	$f\mathbf{c}$
C_s^s	$f_1\mathbf{a} + f_2\mathbf{b}$
E^s	$f_1\mathbf{a} + f_2\mathbf{b} + f_3\mathbf{c}$
$C_n^s, n > 2$	$f_1 Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\} + f_2 Im\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}; f_3\mathbf{c}$
$C_{nh}^s, n > 2$	$f_1 Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\} + f_2 Im\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}$
$C_{nv}^s, n > 2$	$f_1 Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}; f_3\mathbf{c}$
$S_{2n}^s, n > 1$	$f_1 E_{\alpha\beta\gamma} Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\} + f_2 E_{\alpha\beta\gamma} Im\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}$
$D_n^s, n > 2$	$f_1 Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}; f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
$D_{nd}^s, n > 2$	$f E_{\alpha\beta\gamma} Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}$
$D_{nh}^s, n > 2$	$f Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\};$
C_∞^s	$f_1\mathbf{a}; f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
$C_{\infty h}^s$	$f_1 E_{\alpha\beta\gamma} a_\gamma;$
D_∞^s	$f_1^\# (a_\alpha a_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}); f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
$D_{\infty h}^s$	$f^\# (a_\alpha a_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$
K^s	$f E_{\alpha\beta\gamma}$
C_i^s	$f_1 E_{\alpha\beta\gamma} a_\gamma + f_2 E_{\alpha\beta\gamma} b_\gamma + f_3 E_{\alpha\beta\gamma} c_\gamma$
C_2^s	$f_1(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta) + f_2(a_\alpha b_\beta + b_\alpha a_\beta); f_3\mathbf{c}$
C_{2v}^s	$f_1(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta); f_2\mathbf{c}$
C_{2h}^s	$f_1(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta) + f_2(a_\alpha b_\beta + b_\alpha a_\beta)$
D_2^s	$f_1(c_\alpha c_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}) + f_2(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta)$
T^s	$f_1 T_{\alpha\beta\gamma}; f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
T_d^s	$f T_{\alpha\beta\gamma}$
T_h^s	$f_1 E_{\alpha\beta\gamma} T_{\alpha\beta\gamma}$
O^s	$f_1^\# O_{\alpha\beta\gamma\lambda}; f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
O_h^s	$f^\# O_{\alpha\beta\gamma\lambda}$
Y^s	$f_1^\# Y_{\alpha\beta\gamma\lambda\mu\nu}; f_2 E_{\alpha\beta\gamma}$
Y_h^s	$f^\# Y_{\alpha\beta\gamma\lambda\mu\nu}$

Таблица 1.1: Спиновые группы

Три первых спиновых группы соответствуют векторным магнетикам из работы [1]. Знаком $^\#$ помечены те функции, которые могут преобразовываться только по единичному представлению.

1.2 Инварианты Лифшица

Однородное состояние спиновой структуры неустойчиво, если его симметрия допускает наличие обменных инвариантов Лифшица. Эти опасные инварианты имеют вид спиновых сверток полиномов от компонент $a_\alpha, b_\beta, c_\gamma$ и пространственных производных $\partial_i a_\alpha, \partial_i b_\beta, \partial_i c_\gamma$. Поскольку свертка двух базисных векторов есть либо 0, либо 1, то эти инварианты сводятся к совокупности членов вида $\tilde{a}_\alpha \partial_i \tilde{b}_\alpha$, где $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{b}}$ некоторые векторы из базисной тройки.

При бесконечно малом повороте спинового пространства на угол $\delta\theta$ любой вектор $\tilde{\mathbf{a}}$ изменяется на величину

$$\delta\tilde{\mathbf{a}} = [\delta\theta\tilde{\mathbf{a}}]. \quad (1.15)$$

Поэтому, линейная по градиентам часть энергии сводится к выражению

$$L_{i\alpha}\theta_{i\alpha},$$

где $L_{i\alpha}$ - матрица, являющаяся вектором в орбитальном пространстве и псевдовектором в спиновом пространстве, а

$$\theta_{i\alpha} = \frac{\delta\theta_\alpha}{dx_i}. \quad (1.16)$$

По аналогии с терминологией теории упругости твердого тела естественно называть величину $\theta_{i\alpha}$ угловой дисторсией (или ориентационной деформацией). Дисторсия $\theta_{i\alpha}$ есть именно псевдовектор в спиновом пространстве, поскольку из формулы (1.15) очевидно, что $\delta\theta$ – есть спиновый псевдовектор (не меняется при изменении знака времени).

Матрица $L_{i\alpha}$ является характеристикой состояния спиновой системы. Поскольку она уже не зависит от пространственных градиентов, то должна иметь симметрию однородного спинового состояния. Очевидно, что матрица $L_{i\alpha}$ отлична от нуля только в конечных группах спиновой симметрии и только в случаях, когда разрешена антисимметричная часть парной корреляционной функции, причем функции $f^{(2-)}$ должны преобразовываться по векторному представлению группы G .

1.3 Энергия ориентационных деформаций

Во всех аксиальных спиновых структурах обменная энергия при слабой пространственной неоднородности ориентации параметра порядка имеет обычный вид

$$\frac{1}{2}\Lambda_{ij}\partial_i\mathbf{c}\partial_j\mathbf{c}, \quad (1.17)$$

где тензор Λ инвариантен относительно группы G .

В общем случае неаксиальных структур квадратичная по градиентам углов спинового поворота обменная энергия равна

$$\frac{1}{2}\Lambda_{ij\alpha\beta}\theta_{i\alpha}\theta_{j\beta}, \quad (1.18)$$

где матрица Λ является симметричным тензором в орбитальном пространстве и симметричным тензором в спиновом пространстве. Очевидно, что, также как и матрица $L_{i\alpha}$, матрица Λ инвариантна относительно обменной группы симметрии исследуемого состояния.

В тетраэдрических, кубических и икосаэдрических группах спиновой симметрии матрица $\Lambda_{ij\alpha\beta}$ сводится к простому виду

$$\Lambda_{ij}^{(0)}\delta_{\alpha\beta}, \quad (1.19)$$

где пространственный тензор $\Lambda_{ij}^{(0)}$ инвариантен относительно обменной кристаллической группы G . Этот вклад, очевидно, присутствует в энергии неоднородности любой спиновой структуры.

В группах спиновой симметрии с выделенной осью $\mathbf{D}_n^s, \mathbf{D}_{nh}^s, \mathbf{D}_{nd}^s$ при $n > 2$ возникает дополнительный вклад

$$\Lambda_{ij}^{(1)}c_\alpha c_\beta, \quad (1.20)$$

где тензор $\Lambda_{ij}^{(1)}$ также инвариантен относительно группы G . Такова же ситуация в группах $\mathbf{C}_n^s, \mathbf{C}_{nv}^s, \mathbf{C}_{nh}^s, \mathbf{S}_{2n}^s$ при $n > 2$ в случаях, когда корреляционная функция порядка n (или $n + 3$) определяется одной функцией координат преобразующейся по одномерному представлению группы G .

В остальных неаксиальных спиновых структурах, так же как и в неколлинеарных магнетиках [1], для определения вида матрицы Λ необходим специальный анализ в каждом конкретном случае.

1.4 Релятивистские эффекты анизотропии

Релятивистские спин-орбитальные и магнитные диполь-дипольные эффекты приводят к зависимости энергии кристалла от ориентации спиновых структур относительно кристаллографических осей.

Как это принято, например, в теории фазовых переходов второго рода, удобно перенести законы преобразования относительно элементов симметрии кристаллографической группы G с функций f^n на сами спиновые векторы и тензоры. Тогда параметром порядка в антиферромагнетиках будут единичные антиферромагнитные векторы \mathbf{l}_i [1]. Лишь в случае, когда разрешена намагниченность \mathbf{M} , не единичный вектор $\mathbf{M}/|\mathbf{M}|$, а сама намагниченность удобно считать параметром порядка, поскольку она входит в уравнения Максвелла. В случаях же тензорных структур, параметром порядка будут служить выписанные выше тензоры с постоянными в пространстве амплитудами. В частности, в случае наличия корреляции (1.6), в качестве параметра порядка можно выбрать единичную киральность ν , меняющую знак как при изменении знака времени, так и при некоторых кристаллических преобразованиях (в согласии с законом преобразования функции $f^{(3-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$).

В обычных магнетиках энергия анизотропии сводится к разложению по компонентам магнитных векторов. Параметром разложения служит постоянная тонкой структуры α . В коллинеарных магнетиках первый член разложения, например в одноосном кристалле, можно записать как

$$\beta^{[2]}l_z^2.$$

Константа анизотропии $\beta^{[2]}$ имеет малость α^2 по сравнению с характерной объемной плотностью обменной энергии. Здесь и ниже верхний индекс в квадратных скобках у констант анизотропии указывает на степень малости по постоянной тонкой структуры. Следующий член разложения в одноосном случае

$$\beta^{[4]}l_z^4,$$

где константа $\beta^{[4]}$ имеет малость α^4 . Вообще, разложение энергии анизотропии коллинеарного магнетика содержит только четные степени n компонент

магнитного вектора и степень малости соответствующих констант есть α^n . Такая же ситуация и в энергии анизотропии неколлинеарных компланарных магнетиков – спиновых структурах с двумя векторами.

Поскольку все возможные перечисленные выше спиновые параметры порядка устроены так, что при спиновых свертках их степеней невозможно получить неизотропные или неаксиальные тензоры более низкого ранга, то эффекты анизотропии, а также ориентирующее воздействие на параметр порядка магнитных и электрических полей и однородных деформаций кристалла проявляются в полной мере лишь в членах достаточно высокого порядка по постоянной тонкой структуры и по амплитуде внешних воздействий.

Рассмотрим два примера – тетраэдрического тензорного магнетика со спиновой симметрией \mathbf{T}_d^s и кубического спинового нематика \mathbf{O}_h^s в кристаллах с обменным кристаллическим классом \mathbf{D}_{2h} .

В обоих случаях первые члены разложения энергии анизотропии по релятивистским эффектам имеют одинаковый вид

$$\beta_1 S_{zzzz} + \beta_2 S_{xxxx} + \beta_3 S_{yyyy} + \beta_4 S_{xxyy} + \beta_5 S_{yyzz} + \beta_6 S_{zzxx},$$

где тензор S имеет кубическую симметрию и в кубическом случае равен $O_{\alpha\beta\gamma\delta}$, а в тетраэдрическом

$$S_{\alpha\beta\gamma\delta} = T_{\alpha\beta\mu} T_{\mu\gamma\delta}.$$

Обратим внимание на то, что, в отличие от обычных магнетиков с кристаллическим классом симметрии \mathbf{D}_{2h} , здесь анизотропия возникает не во втором, а в четвертом порядке по постоянной тонкой структуры.

Во внешнем магнитном поле анизотропия спиновой структуры проявляется в членах обменной природы

$$\propto S_{\alpha\beta\gamma\delta} H_\alpha H_\beta H_\gamma H_\delta$$

и в смешанных обменно-релятивистских членах

$$\eta_1 S_{\alpha\beta xx} H_\alpha H_\beta + \eta_2 S_{\alpha\beta yy} H_\alpha H_\beta + \eta_3 S_{\alpha\beta zz} H_\alpha H_\beta.$$

В тетраэдрическом случае, когда функция f^3 преобразуется по единичному представлению, имеются аномальные члены: обменный

$$\propto T_{\alpha\beta\gamma} H_\alpha H_\beta H_\gamma$$

и обменно-релятивистские

$$\zeta_1 T_{\alpha xx} H_\alpha + \zeta_2 T_{\alpha yy} H_\alpha + \zeta_3 T_{\alpha zz} H_\alpha.$$

Члены такого типа линейные по \mathbf{H} ответственны за появление слабого ферромагнетизма.

Глава 2

Низкочастотная спиновая динамика в сильных магнитных полях [21].

С точки зрения обменной симметрии нет разницы между описанием спиновых структур со спиновой поляризацией, вызванной магнитным полем, и такими, в которых имеется спонтанная спиновая поляризация - ферромагнетиками. Любые спиновые структуры в магнитном поле деформируются в одну из спиновых структур с намагниченностью, спиновая симметрия получившегося состояния соответствует одной из групп (см. табл. 2.1) C_n^s , C_∞^s , C_{nv}^s , $C_{\infty v}^s$, C_s^s , E^s ($n > 1$). Классификация обменных спиновых структур основана на концепции обменной пространственной группы симметрии G (не обязательно такой же как и в нулевом поле). Это группа симметрии плотности заряда в обменном приближении (*m.e.* без релятивистских эффектов).

Распространение понятия обменной симметрии на наш случай просто. Тем не менее, следует заметить, что единственное влияние магнитного поля, которое нужно учитывать в спиновом гамильтониане – это зеемановский член $-\gamma\hat{\mathbf{S}}\mathbf{H}$. Здесь γ – это гироманнитное соотношение для свободного электрона, а $\hat{\mathbf{S}}$ – это оператор полного спина. Влиянием магнитного поля на орбитальное состояние электронов следует пренебречь. Легко проверить, что такое приближение верно для всех известных магнетиков. Именно, измене-

спиновая группа	параметр порядка
$C_{\infty v}^s$	\mathbf{M}
C_s^s	$\mathbf{M}; f\mathbf{a}$
E^s	$\mathbf{M}; f_1\mathbf{a} + f_2\mathbf{b}$
$C_n^s, n > 1$	$\mathbf{M}; f_1 Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\} + f_2 Im\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}$
$C_{nv}^s, n > 1$	$\mathbf{M}; f Re\{(\mathbf{a} + i\mathbf{b})^n\}$
C_∞^s	$\mathbf{M}; fE_{\alpha\beta\gamma}$

Таблица 2.1: Спиновые группы с разрешенной намагниченностью

ние орбитального состояния электронов остается малым даже в поле схлопывания подрешеток.

Уравнение динамики для квазиголдстоуновской степени свободы ψ может быть выведено с помощью формализма Лагранжа. Кинетическая энергия записывается как

$$I \frac{\dot{\psi}^2}{2}.$$

В малых магнитных полях момент инерции спиновой подсистемы

$$I = \frac{\chi}{\gamma^2},$$

где χ - магнитная восприимчивость (см. [1]). Можно обобщить этот результат на случай больших полей. С одной стороны, намагниченность \mathbf{M} равна производной функции Лагранжа по магнитному полю,

$$\mathbf{M} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{H}}. \quad (2.1)$$

С другой стороны, в обменном приближении намагниченность запишется как

$$\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}. \quad (2.2)$$

Механический момент спиновой подсистемы ориентирован вдоль направления магнитного поля и его величина равна

$$S = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}}. \quad (2.3)$$

Разложим функцию Лагранжа по $\dot{\psi}$

$$L = A + B\dot{\psi} + \frac{I}{2}\dot{\psi}^2 + \dots \quad (2.4)$$

Получаем соотношения

$$M = \frac{\partial A}{\partial H} + \frac{\partial B}{\partial H}\dot{\psi} + \dots = \gamma(B + I\dot{\psi} + \dots).$$

Намагниченность состоит из статической составляющей

$$M_s = \frac{\partial A}{\partial H} = \gamma B,$$

и динамической составляющей

$$M_d \approx \frac{\partial B}{\partial H}\dot{\psi} = \gamma I\dot{\psi}.$$

Можно видеть, что момент инерции

$$I = \frac{\tilde{\chi}}{\gamma^2},$$

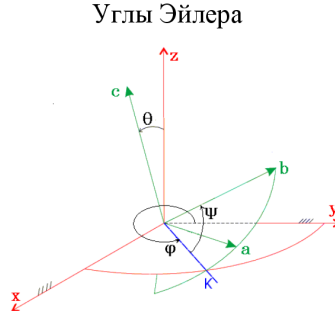
где $\tilde{\chi}$ - статическая дифференциальная восприимчивость. В действительности представленный вывод является теоремой Лармора.

В качестве первого примера рассмотрим коллинеарный антиферромагнетик. В высоких магнитных полях антиферромагнитный вектор \mathbf{L} обычно перпендикулярен направлению магнитного поля. Как легко видеть из общих следствий теории обменной симметрии [1] обменная кристаллическая группа симметрии остается той же как и в отсутствии магнитного поля. Антиферромагнитный вектор преобразуется по какому-либо одномерному представлению группы G . Ориентация вектора \mathbf{L} вокруг направления магнитного поля определяется минимумом кристаллической энергии анизотропии.

Введем углы Эйлера θ, φ, ψ между единичным ортонормированным базисом $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ в спиновом пространстве и единичным ортонормированным базисом $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ в координатном пространстве. Выберем ориентацию базисных векторов так, чтобы

$$\mathbf{c} \parallel \mathbf{H}, \quad \mathbf{a} \parallel \mathbf{L}.$$

Тогда компоненты спиновых векторов выражаются следующим образом через углы Эйлера:



x, y, z – базис в орбитальном пространстве
 a, b, c – базис в спиновом пространстве $c \parallel \mathbf{H}, a \parallel \mathbf{L}$

Рис. 2.1: Углы Эйлера

$$a_x = \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \sin \psi$$

$$a_y = \cos \theta \sin \phi \cos \psi + \cos \phi \sin \psi$$

$$a_z = -\sin \theta \cos \psi$$

$$b_x = -\cos \theta \cos \phi \sin \psi - \sin \phi \cos \psi$$

$$b_y = -\cos \theta \sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \psi$$

$$b_z = \sin \theta \sin \psi$$

$$c_x = \sin \theta \cos \phi$$

$$c_y = \sin \theta \sin \phi$$

$$c_z = \cos \theta$$

Часть энергии, которая зависит от ориентации антиферромагнитного вектора \mathbf{L} , записывается

$$U = \frac{\beta}{2} a_z^2 + \frac{g_{ik}}{2} \partial_i \psi \partial_k \psi. \quad (2.5)$$

Мы считаем здесь, что группа симметрии имеет главную ось C_3, C_4 , или C_6 и $\mathbf{z} \parallel C_n$). Тензор g_{ik} имеет обменную природу

$$g_{zz} = g_{\parallel}, g_{xx} = g_{yy} = g_{\perp}.$$

Параметр β соответствует релятивистским эффектам анизотропии. Все параметры такие, как g_{ik} и β , остаются неизвестными функциями величины магнитного поля, но не зависят от его направления.

Энергия (2.5) может быть переписана в форме

$$U = \frac{\beta}{2} \sin^2 \theta \cos^2 \psi + \frac{g_{ik}}{2} \partial_i \psi \partial_k \psi. \quad (2.6)$$

Уравнение Лагранжа соответствующее кинетической и зеемановской энергиям (2.4) и потенциальной энергии (2.5) записывается как

$$I \ddot{\psi} = \beta \sin^2 \theta \cos \psi \sin \psi + g_{ik} \partial_i \partial_k \psi. \quad (2.7)$$

А спектр спиновых волн $\omega(q)$ -

$$\omega = \left(\omega_0^2 + \frac{g_{ik}}{I} q_i q_k \right)^{1/2}, \quad (2.8)$$

где щель ω_0 для обоих возможных типов анизотропии легкой плоскости $\beta > 0$ и легкой оси $\beta < 0$

$$\omega_0 = \gamma \sqrt{\frac{|\beta|}{\tilde{\chi}}} |\sin \theta|.$$

Уравнение (2.7) выведено для случая постоянного магнитного поля \mathbf{H} . Необходимо добавить член

$$-\frac{\tilde{\chi} \dot{h}}{\gamma}$$

в правую часть уравнения (2.7) в случае, когда имеется небольшое дополнительное переменное поле $\mathbf{h} \parallel \mathbf{H}$. Этот член демонстрирует, что щель ω_0 равна частоте продольного антиферромагнитного резонанса.

В качестве второго примера рассмотрим коллинеарный антиферромагнетик со слабым ферромагнетизмом. Пусть группа кристаллической симметрии опять обладает главной осью. Тогда энергия равна

$$U = \frac{\beta_1}{2} a_z^2 + \beta_2 (a_x c_y - a_y c_x) + \frac{g_{ik}}{2} \partial_i \psi \partial_k \psi. \quad (2.9)$$

Переписав выражение (2.9) через углы Эйлера, получим

$$U = \frac{\beta_1}{2} \sin^2 \theta \cos^2 \psi - \beta_2 \sin \theta \sin \psi + \frac{g_{ik}}{2} \partial_i \psi \partial_k \psi. \quad (2.10)$$

В зависимости от величин β реализуются два типа решений. При

$$\beta_1 < 0, \left| \frac{\beta_2}{\beta_1 \sin \theta} \right| < 1$$

$$\sin \psi_0 = -\frac{\beta_2}{\beta_1 \sin \theta}. \quad (2.11)$$

В противном случае, при $\beta_2 > 0$

$$\sin \psi_0 = 1, \quad (2.12)$$

при $\beta_2 < 0$

$$\sin \psi_0 = -1. \quad (2.13)$$

Магنونный спектр здесь задается общей формулой (2.8), где для случаев (2.12) и (2.13)

$$\omega_0 = \gamma \sqrt{\frac{\beta_1 \sin^2 \theta + |\beta_2| \sin \theta}{\tilde{\chi}}},$$

а для случая (2.11)

$$\omega_0 = \gamma \sqrt{\frac{|\beta_1| \sin^2 \theta - \frac{\beta_2^2}{|\beta_1|}}{\tilde{\chi}}}.$$

Если $\beta_1 < 0$, то при

$$\sin \theta_0 = \left| \frac{\beta_2}{\beta_1} \right|$$

происходит переход второго рода из состояния соответствующего случаю (2.11) в состояние соответствующее случаю (2.12) или (2.13). В точке перехода частота ω_0 обращается в 0.

В качестве третьего примера рассмотрим неколлинеарный антиферромагнетик $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$. Его антиферромагнитный спектр был изучен в малых полях в [22]. Двенадцатиподрешеточная спиновая структура $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$ описана в терминах двух антиферромагнитных векторов преобразующихся согласно двумерному представлению E_u кристаллического класса O_h . Как выяснено в [22] спиновая плоскость стремится быть перпендикулярной магнитному полю. Поэтому наиболее вероятное состояние в высоких полях - это, когда

$$\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2 \perp \mathbf{H}.$$

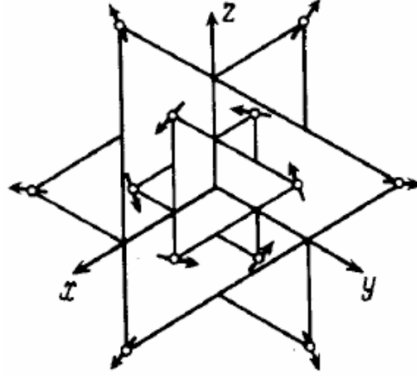
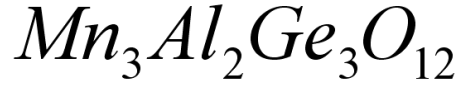


Рис. 2.2: 12 подрешеток $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$

Тогда согласно [1] обменная пространственная группа остается O_h^{10} .

В сильных магнитных полях эффекты анизотропии описываются в первом релятивистском приближении тем же инвариантом

$$U_a = \beta \left\{ \sqrt{3}(a_z^2 - b_z^2) + 2(a_x b_x - a_y b_y) \right\} \quad (2.14)$$

как и в пределе малых полей (см. [22]). Направим базисные векторы $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ в орбитальном пространстве вдоль осей четвертого порядка. Базис в спиновом пространстве выбран так, что

$$\mathbf{c} \parallel \mathbf{H}, \mathbf{a} \parallel \mathbf{L}_1, \mathbf{b} \parallel \mathbf{L}_2.$$

в терминах углов Эйлера энергия анизотропии (2.14) может быть переписана как

$$U_a = \beta f \cos 2(\psi - \psi_0),$$

где параметры f и ψ_0 записываются как

$$f = \sqrt{\cos^2 2\varphi (1 + \cos^2 \theta)^2 + (\sqrt{3} \sin^2 \theta + 2 \sin 2\varphi \cos \theta)^2},$$

$$\tan 2\psi_0 = \frac{\cos 2\varphi (1 + \cos^2 \theta)}{\sqrt{3} \sin^2 \theta + 2 \sin 2\varphi \cos \theta}.$$

Магنونный спектр здесь задается общей формулой (2.8), где

$$g_{ik} = g\delta_{ik}, \quad \omega_0 = 2\gamma\sqrt{2\frac{|\beta|f}{\tilde{\chi}}}.$$

Анизотропный член (2.14) является главной релятивистской поправкой к обменной энергии $Mn_3Al_2Ge_3O_{12}$. Этот факт приводит к новому соотношению между статическими и динамическими характеристиками. Рассмотрим анизотропную добавку к намагниченности. Энергия анизотропии основного состояния равна

$$U_a = -4|\beta|,$$

если магнитное поле направлено вдоль оси $[001]$ ($\theta = 0$), и

$$U_a = -\frac{16|\beta|}{3},$$

если магнитное поле направлено вдоль оси $[111]$ ($\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $\varphi = \frac{\pi}{4}$). Это дает нам возможность определить функцию

$$\frac{\partial\beta}{\partial H}.$$

А именно,

$$\frac{\partial|\beta|}{\partial H} = \frac{3}{4}(M_{[111]} - M_{[001]}).$$

В заключение, мы представили теорию обменной симметрии систем со спиновым упорядочением сильно деформированных высоким магнитным полем. Уравнение спиновой динамики было выведено для квазиголдстоуновской моды, которой является вращение спинового пространства вокруг направления магнитного поля. Был определен закон дисперсии спиновых волн. Было найдено новое соотношение между кривой статической намагниченности и характеристиками низкочастотной спиновой динамики в высоких магнитных полях.

Глава 3

Динамика парамагнетиков при нулевой температуре [23].

3.1 Обменное приближение

В зависимости от величины спина S возбуждения в синглетном состоянии соответствуют колебаниям следующих степеней свободы: для $S = 0$ это спиновые скаляры $\eta^{(i)}$, для $S = 1$ спиновые векторы $\boldsymbol{\eta}^{(i)}$, для $S = 2$ симметричные спиновые тензоры второго ранга с нулевым следом $\eta_{\alpha\beta}^{(i)}$ и т.д., преобразующиеся под действием кристаллической группы G по каким-либо ее неприводимым представлениям (индекс i нумерует поля принадлежащие данному n -мерному представлению).

Одним из примеров веществ, в которых парамагнитное состояние сохраняется до очень низких температур является $TlCuCl_3$. Атомы меди выстроены в нем в лестницы разделенные атомами талия. Основное состояние при этом будет синглетным, а триплетные возбуждения отделены от него щелью $\Delta \sim 7.5K$. При закрытии щели в этом веществе появляется коллинеарный антиферромагнитный порядок.

Уравнения спиновой динамики найдем из вариационного принципа. Рассмотрим примеры построения уравнений спиновой динамики в случаях $S = 0, 1, 2$, ограничившись одномерными представлениями группы G .

3.1.1 $S = 0$

Возбуждения соответствуют колебаниям спинового скаляра η . Это может быть как немагнитная (не меняющая знак при изменении знака времени), так и магнитная (меняющая знак) величина. В первом случае речь идет об изотропной в спиновом пространстве, но неинвариантной относительно элементов группы G , части спин-спиновой корреляционной функции (1.2)

$$\eta \propto \delta_{\alpha\beta} \langle S_\alpha(t, \mathbf{r}_1) S_\beta(t, \mathbf{r}_2) \rangle,$$

здесь $S_\alpha(t, \mathbf{r})$ – оператор спиновой плотности. В корреляционной функции предполагается усреднение по высоким частотам спинового движения, так что остается медленная функция времени. Во втором случае речь идет об изотропной в спиновом пространстве части трехточечной корреляционной функции (1.3)

$$\eta \propto e_{\alpha\beta\gamma} \langle S_\alpha(t, \mathbf{r}_1) S_\beta(t, \mathbf{r}_2) S_\gamma(t, \mathbf{r}_3) \rangle.$$

Плотность функции Лагранжа скалярного поля есть

$$L = \frac{I}{2} \dot{\eta}^2 - \frac{A}{2} \eta^2 - \frac{G_{ij}}{2} \partial_i \eta \partial_j \eta. \quad (3.1)$$

Обменная константа A положительна ($\eta = 0$ соответствует основному состоянию), но специально мала, что и обеспечивает возможность построения макроскопической теории низкочастотной спиновой динамики. Обменный тензор G_{ij} , определяющий энергию неоднородности, имеет естественный порядок величины и удовлетворяет условию устойчивости однородного состояния (задает положительно определенную форму). Тензор G_{ij} имеет симметрию кристаллического класса парамагнетика. Для сокращения записи во всех дальнейших формулах положим равной единице положительную обменную константу I , определяющую кинетическую энергию.

Функции Лагранжа (3.1) соответствуют уравнения спиновой динамики

$$\ddot{\eta} + A\eta - G_{ij} \partial_i \partial_j \eta = 0, \quad (3.2)$$

откуда получается спектр магнонов

$$\omega(\mathbf{q}) = \sqrt{\omega_0^2 + s^2 q^2}, \quad (3.3)$$

где $\omega_0 = \sqrt{A}$ – малая щель, и s – скорость магнонов, зависящая от направления распространения возбуждения

$$s^2 = \frac{G_{ij}q_i q_j}{q^2}.$$

Щель в магнонном спектре должна изменяться при приложении давления и может уменьшаться по мере его увеличения, обращаясь в ноль при некотором критическом значении $P = P_c$. Предполагая, что в окрестности критической точки

$$A = a(P_c - P),$$

где $a > 0$ – постоянная, для щели в магнонном спектре имеем при $P < P_c$

$$\omega_0 = \sqrt{a(P_c - P)}. \quad (3.4)$$

При $P > P_c$ парамагнитное состояние становится неустойчивым относительно возникновения параметра порядка $\eta = \eta_0 \neq 0$.

В случае, когда поле η связано с парной корреляционной функцией, происходит своеобразный структурный переход и теряются те элементы кристаллической группы под действием которых поле η меняет знак (напомним, что мы ограничились рассмотрением одномерных представлений). Как правило, переход должен сопровождаться соответствующим понижением симметрии изменением координат атомных ядер. Однако, принципиально возможно и проявление нарушения симметрии лишь в электронной подсистеме, если из смещений ядер нельзя составить величины, преобразующейся по представлению группы G , по которой преобразуется поле η . В случае, когда поле η связано с тройной корреляционной функцией, после перехода реализуется состояние скалярного магнетика [3].

Учитывая обменный инвариант четвертого порядка

$$\frac{B\eta^4}{4}$$

в потенциальной энергии (предполагаем, что $B > 0$), в окрестности критического давления при $P > P_c$ получим

$$\eta_0^2 = -\frac{A}{B} = \frac{a(P - P_c)}{B}. \quad (3.5)$$

После перехода магنونный спектр сохраняет вид (3.3), но щель теперь равна

$$\omega_0 = \sqrt{2a(P - P_c)}, P > P_c. \quad (3.6)$$

Отметим, что рассматриваемое описание низкочастотной динамики применимо не только к спиновым возбуждениям, но и к любым близким к неустойчивости бозевским степеням свободы в конденсированных средах. Специфика спиновой динамики проявляется при ненулевых спинах возбуждений, особенно во внешнем магнитном поле.

3.1.2 $S = 1$

Возбуждения системы описываются вектором в спиновом пространстве $\boldsymbol{\eta}$. Речь при этом может идти либо о магнитной величине, меняющей знак при изменении знака времени, тогда $\boldsymbol{\eta}$ связан со спиновой плотностью (1.1)

$$\eta_\alpha \propto \langle S_\alpha(t, \mathbf{r}) \rangle,$$

либо о спиновом векторе дуальном антисимметричной по спиновым индексам части спин-спиновой корреляционной функции (1.2)

$$\eta_\alpha \propto e_{\alpha\beta\gamma} \langle S_\beta(t, \mathbf{r}_1) S_\gamma(t, \mathbf{r}_2) \rangle,$$

инвариантной относительно изменения знака времени.

Плотность функции Лагранжа векторного поля есть

$$L = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}^2 - \frac{A}{2} \boldsymbol{\eta}^2 - \frac{G_{ij}}{2} \partial_i \boldsymbol{\eta} \partial_j \boldsymbol{\eta}. \quad (3.7)$$

Соответствующие уравнения спиновой динамики

$$\ddot{\boldsymbol{\eta}} + A\boldsymbol{\eta} - G_{ij} \partial_i \partial_j \boldsymbol{\eta} = 0 \quad (3.8)$$

приводят к трехкратно вырожденному магنونному спектру вида (3.3). Такой спектр соответствует данным [26] по неупругому рассеянию нейтронов в TlCuCl_3 (см. рис.3.1). Малое отношение минимума энергии возбуждений (при $q = 0$) к максимуму (при $q \sim 0.3$ единиц обратной решетки.) является основным малым параметром макроскопической теории. В кристаллах

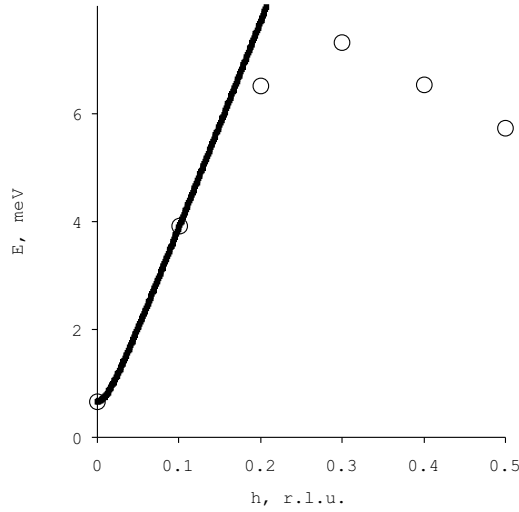


Рис. 3.1: Энергия спиновых возбуждений $E = \hbar\omega$ как функция волнового вектора $q = (h, 0, 1)$ е.о.р. в парамагнитном TlCuCl_3 . Кружки – данные неупругого рассеяния нейтронов [26], линия – спектр (3.3) с параметрами $\omega_0 = 0.16$ THz, $s = 0.5$ км/с.

$(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{CuCl}_3$ реализуется квазиодномерная обменная спиновая система с синглетным основным состоянием. Здесь обнаружена [27] триpletная ветвь магнитных возбуждений с глубоким минимумом по волновому вектору на границе зоны Бриллюэна (см. рис.3.2). Отметим, что в рамках макроскопической теории нет никакой разницы в описании низкочастотной спиновой динамики для этих двух случаев.

Щель в окрестности критического давления здесь также задается формулой (3.4). Такой простой закон согласуется (см. рис.3.3) с экспериментальными результатами [28] в TlCuCl_3 .

При $P > P_c$ парамагнитное состояние становится неустойчивым относительно возникновения антиферромагнитного (либо нематического [2]) параметра порядка $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}_0 \neq 0$. Модуль $|\boldsymbol{\eta}_0|$ снова определяется выражением (3.5), где B коэффициент в обменном инварианте четвертого порядка

$$\frac{B(\boldsymbol{\eta}^2)^2}{4} \quad (3.9)$$

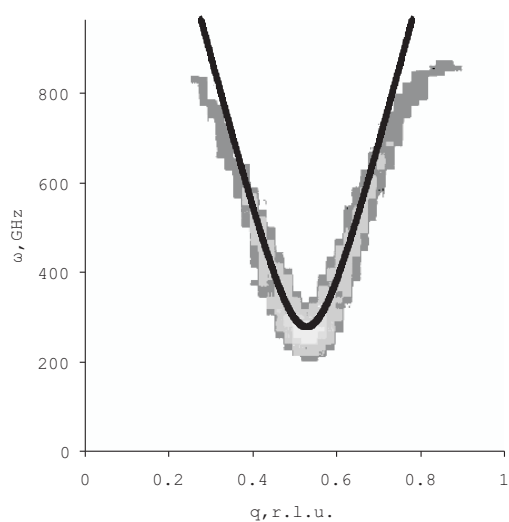


Рис. 3.2: Энергия спиновых возбуждений как функция волнового вектора в направлении вдоль спиновых цепочек в парамагнитном $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{CuCl}_3$ согласно данным неупругого рассеяния нейтронов [27]. Линия – спектр вида (3.3), где, однако, волновой вектор отсчитывается от границы зоны Бриллюэна, с параметрами $\omega_0 = 0.28$ ТГц, $s = 0.41$ км/с.

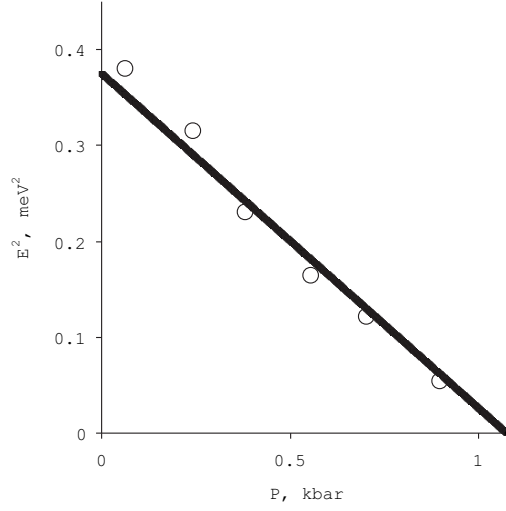


Рис. 3.3: Линейный закон зануления квадрата щели магнного спектра $E^2 = a(P_c - P)$ по давлению в парамагнитном TlCuCl_3 по данным работы [28]; $P_c = 1.1\text{kbar}$, $a = 0.35\text{meV}^2/\text{kbar}$.

в потенциальной энергии. После перехода трехкратное вырождение спектра снимается. Возникает обычный бесщелевой двукратно вырожденный спектр $\omega = sq$ ориентационных колебаний коллинеарного антиферромагнетика (или спинового нематика с аксиальной симметрией) и ветвь продольных колебаний антиферромагнитного вектора вида (3.3) со щелью (3.6).

3.1.3 $S = 2$

Возбуждения системы описываются бесследовым симметричным спиновым тензором $\eta_{\alpha\beta}$. Плотность функции Лагранжа есть

$$L = \frac{1}{2}\dot{\eta}_{\alpha\beta}^2 - \frac{A}{2}\eta_{\alpha\beta}^2 - \frac{G_{ij}}{2}\partial_i\eta_{\alpha\beta}\partial_j\eta_{\alpha\beta}. \quad (3.10)$$

Уравнения спиновой динамики

$$\ddot{\eta}_{\alpha\beta} + A\eta_{\alpha\beta} - G_{ij}\partial_i\partial_j\eta_{\alpha\beta} = 0 \quad (3.11)$$

приводят к магннному спектру вида (3.3) с $2S + 1 = 5$ кратным вырождением.

При стремлении к критическому давлению здесь также получается зануление щели по закону (3.4). Если тензор $\eta_{\alpha\beta}$ преобразуется по единичному представлению группы G , то имеется кубический инвариант $\eta_{\alpha\beta}\eta_{\beta\delta}\eta_{\delta\alpha}$. В итоге критическая точка в равновесных условиях оказывается недостижимой, т.к. раньше должен происходить фазовый переход первого рода. Для одномерного неединичного представления поведение системы при $P > P_c$ несколько сложнее, чем в скалярном и векторном случаях, так как в разложении потенциальной энергии необходимо учитывать, помимо члена четвертого порядка, обменный инвариант шестого порядка [6]

$$\frac{B}{4}(\eta_{\alpha\beta}^2)^2 + \frac{C}{6}(\eta_{\alpha\beta}\eta_{\beta\delta}\eta_{\delta\alpha})^2. \quad (3.12)$$

Если $C < 0$, то возникает параметр порядка спинового нематика [2] с аксиальной симметрией (1.8)

$$\eta_{\alpha\beta} = \frac{\eta_0}{\sqrt{6}}(3c_\alpha c_\beta - \delta_{\alpha\beta}),$$

здесь \mathbf{c} – единичный вектор в спиновом пространстве. Модуль параметра порядка η_0 определяется выражением (3.5). Как показано в главе 1 один такой параметр порядка может преобразовываться лишь по единичному представлению пространственной группы симметрии, поэтому при фазовом переходе симметрия кристалла неминуемо понизится. Магنونный спектр, в этом случае, содержит бесщелевую двукратно вырожденную моду $\omega = sq$ ориентационных колебаний вектора \mathbf{c} и три оптические моды вида (3.3) со щелями

$$\begin{aligned} \omega_0^{(1)} &= \sqrt{2|A|} \propto \sqrt{P - P_c}; \\ \omega_0^{(2)} = \omega_0^{(3)} &= \frac{2|A|}{B} \sqrt{\frac{|C|}{3}} \propto P - P_c. \end{aligned}$$

Если $C > 0$, то возникает тензор

$$\eta_{\alpha\beta} = \frac{\eta_0}{\sqrt{2}}(a_\alpha a_\beta - b_\alpha b_\beta), \quad (3.13)$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} взаимно ортогональные единичные спиновые векторы. Модуль параметра порядка η_0 определяется также выражением (3.5). Спиновая симметрия (см. главу 1) параметра порядка (3.13) есть группа D_2^S . Магنونный спектр, в этом случае, содержит бесщелевую трехкратно вырожденную моду

$$\omega = sq$$

ориентационных колебаний спиновой структуры с полным нарушением обменной симметрии и две оптические моды вида (3.3) со щелями

$$\omega_0^{(1)} = \sqrt{2|A|} \propto \sqrt{P - P_c}; \quad \omega_0^{(2)} = \frac{|A|}{B} \sqrt{\frac{C}{2}} \propto P - P_c. \quad (3.14)$$

3.2 Обменная динамика в магнитном поле

3.2.1 $S = 0$

При наличии магнитного поля малого по сравнению с характерным обменным в функцию Лагранжа скалярной степени свободы можно было бы добавить единственный обменный инвариант

$$H^2 \eta^2.$$

Появление такого инварианта, однако, противоречит общему требованию обменного приближения: намагниченность спиновой системы (2.1) и механический спиновый момент

$$\mathbf{S} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{\theta}}}, \quad (3.15)$$

где $\dot{\boldsymbol{\theta}}$ – скорость вращения спинового пространства, связаны соотношением (2.2) по теореме Лармора. Действительно, по формуле (3.15) $\mathbf{S} = 0$, так как η не меняется при поворотах, а значит, и $\mathbf{M} = 0$. Таким образом, в обменном приближении магнитное поле вообще не влияет на динамику скалярного спинового поля.

3.2.2 $S = 1$

В функции Лагранжа векторного поля $\boldsymbol{\eta}$ при наличии магнитного поля могут появиться следующие обменные инварианты

$$(\dot{\boldsymbol{\eta}}[\boldsymbol{\eta}\mathbf{H}]), \quad \eta^2 H^2, \quad (\boldsymbol{\eta}\mathbf{H})^2.$$

Коэффициенты при этих инвариантах не могут быть произвольными. Запишем функцию Лагранжа для однородного состояния.

$$L = \frac{1}{2} \dot{\boldsymbol{\eta}}^2 + I'(\dot{\boldsymbol{\eta}}[\boldsymbol{\eta}\mathbf{H}]) + I'' \eta^2 H^2 + I''' (\boldsymbol{\eta}\mathbf{H})^2 - \frac{A}{2} \eta^2.$$

Тогда намагниченность (2.1)

$$\mathbf{M} = I'[\dot{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{\eta}] + 2I''\boldsymbol{\eta}^2\mathbf{H} + 2I'''(\boldsymbol{\eta}\mathbf{H})\boldsymbol{\eta},$$

а механический момент спиновой подсистемы (3.15)

$$\mathbf{S} = [\dot{\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{\eta}] + I'(\boldsymbol{\eta}^2\mathbf{H} - (\boldsymbol{\eta}\mathbf{H})\boldsymbol{\eta}).$$

По теореме Лармора (2.2) получим,

$$I' = \gamma, I'' = -I''' = \frac{\gamma^2}{2}.$$

Окончательно функция Лагранжа запишется в виде

$$L = \frac{(\dot{\boldsymbol{\eta}} + \gamma[\boldsymbol{\eta}\mathbf{H}])^2}{2} - \frac{A}{2}\boldsymbol{\eta}^2 - \frac{G_{ij}}{2}\partial_i\boldsymbol{\eta}\partial_j\boldsymbol{\eta}.$$

Соответственно, уравнения спиновой динамики векторного поля приобретают вид

$$\ddot{\boldsymbol{\eta}} + 2\gamma[\dot{\boldsymbol{\eta}}\mathbf{H}] - \gamma^2[\mathbf{H}[\boldsymbol{\eta}\mathbf{H}]] + A\boldsymbol{\eta} - G_{ij}\partial_i\partial_j\boldsymbol{\eta} = 0. \quad (3.16)$$

Отсюда находим спектр спиновых волн $\omega(\mathbf{q}, \mathbf{H})$:

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 + s^2q^2 + \gamma S_{\mathbf{H}}H}, \quad (3.17)$$

где $S_{\mathbf{H}}$ – проекция спина возбуждения на направление магнитного поля: $S_{\mathbf{H}} = 0$ соответствует колебаниям поля $\boldsymbol{\eta}$ поляризованным вдоль \mathbf{H} , $S_{\mathbf{H}} = \pm 1$ – циркулярным поляризациям в плоскости перпендикулярной \mathbf{H} .

При достижении критического магнитного поля

$$H_{c0} = \frac{\omega_0}{\gamma}$$

минимальная из частот (3.17), соответствующая $\gamma S_{\mathbf{H}} < 0$, обращается в ноль и состояние $\boldsymbol{\eta} = 0$ становится неустойчивым. Поэтому в функции Лагранжа следует учесть следующий член разложения (3.9). В полях $H > H_{c0}$ минимум энергии однородного состояния

$$U_0 = -\frac{1}{2}\gamma^2[\boldsymbol{\eta}\mathbf{H}]^2 + \frac{A}{2}\boldsymbol{\eta}^2 + \frac{B}{4}(\boldsymbol{\eta}^2)^2 \quad (3.18)$$

достигается при возникновении антиферромагнитного параметра порядка

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}_0 \perp \mathbf{H},$$

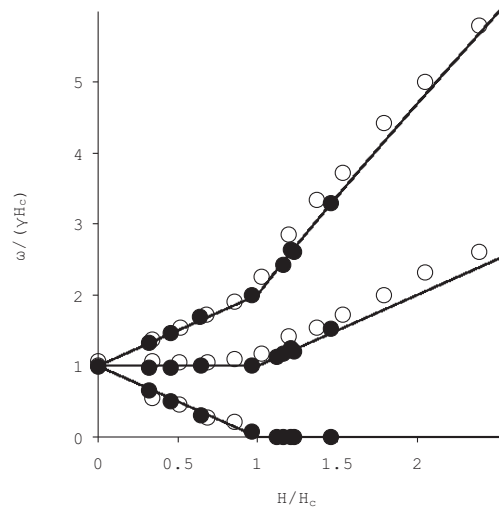


Рис. 3.4: Расщепление щели триплета в магнитном поле. Открытые кружки – TlCuCl_3 [29,30] ($H_c = 5.9$ Тесла), закрытые кружки – $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{CuCl}_3$ [27] ($H_c = 9.9$ Тесла).

где

$$\eta_0^2 = \gamma^2 \frac{H^2 - H_{c0}^2}{B}.$$

Новый член в функции Лагранжа приводит к появлению нелинейной добавки $B\eta^2\eta$ в уравнении спиновой динамики (3.16). Линеаризуя уравнение по амплитуде малых колебаний вблизи положения равновесия $\delta\eta = \eta - \eta_0$, найдем спектр спиновых волн в антиферромагнитном состоянии:

$$\omega^0 = \sqrt{\gamma^2 H^2 + s^2 q^2}$$

для колебаний $\delta\eta \parallel \mathbf{H}$, что соответствует частоте магнитного резонанса $\omega = \gamma H$ и [11]

$$\omega^\pm = \sqrt{\frac{\omega_\perp^2}{2} + s^2 q^2} \pm \sqrt{\frac{\omega_\perp^4}{4} + 4\gamma^2 H^2 s^2 q^2} \quad (3.19)$$

для колебаний $\delta\eta \perp \mathbf{H}$ с эллиптическими поляризациями, здесь ω_\perp – частота второго магнитного резонанса

$$\omega_\perp = \gamma \sqrt{2(3H^2 - H_{c0}^2)}.$$

В рассматриваемом приближении частота ω_- обращается в 0 при $q = 0$, $H > H_{c0}$ (голдстоуновская мода – повороты спиновой структуры вокруг магнитного поля (см. главу 2)). Наблюдаемое расщепление щели триплета в магнитном поле в TlCuCl_3 [29, 30] и в $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{CuCl}_3$ [27]) вместе с полученными теоретическими кривыми представлены на рис.3.4.

3.2.3 $S = 2$

Для $S = 2$ старшие члены функции Лагранжа в магнитном поле для однородного состояния выглядят как

$$L = \frac{1}{2}\dot{\eta}_{ij}^2 + \frac{I'}{2}e_{ikl}\eta_{ij}\dot{\eta}_{kj}H_l + \frac{I''}{2}H^2\eta_{ij}^2 + \frac{I'''}{2}(\eta_{ij}H_j)^2 - \frac{A}{2}\eta_{ij}^2$$

Аналогично случаю $S = 1$ в обменном приближении коэффициенты I' , I'' и I''' можно определить. Действительно, найдем намагниченность (2.1)

$$M_l = \frac{\partial L}{\partial H_l} = \frac{I'}{2}e_{ikl}\eta_{ij}\dot{\eta}_{kj} + I''H_l\eta_{ij}^2 + I'''\eta_{ij}H_j\eta_{il} \quad (3.20)$$

и механический момент спиновой подсистемы (3.15)

$$S_l = \frac{\dot{\eta}_{ij}\delta\eta_{ij} + \frac{I'}{2}e_{ikm}\eta_{ij}H_m\delta\eta_{kj}}{\delta\theta_l}, \quad (3.21)$$

где $\delta\eta_{ij}$ изменение параметра η_{ij} при бесконечно малом повороте $\delta\theta$

$$\delta\eta_{ij} = e_{ikl}\eta_{kj}\delta\theta_l + e_{jkl}\eta_{ik}\delta\theta_l. \quad (3.22)$$

Подставим (3.22) в (3.21)

$$S_l = \dot{\eta}_{ij}(e_{ikl}\eta_{kj} + e_{jkl}\eta_{ik}) + \frac{I'}{2}e_{ikm}\eta_{ij}H_m(e_{knl}\eta_{nj} + e_{jnl}\eta_{kn}).$$

Теперь выразим произведение псевдотензоров Леви-Чевита через символы Кронекера

$$S_l = -2e_{ikl}\eta_{ij}\dot{\eta}_{kj} + \frac{I'}{2}[\eta_{ij}\eta_{nj}H_m(\delta_{mn}\delta_{il} - \delta_{ml}\delta_{in}) + \eta_{ij}\eta_{kn}H_m \times \\ \times (\delta_{ij}\delta_{kn}\delta_{ml} + \delta_{in}\delta_{kl}\delta_{mj} + \delta_{il}\delta_{kj}\delta_{mn} - \delta_{in}\delta_{kj}\delta_{ml} - \delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{mn} - \delta_{il}\delta_{kn}\delta_{mj})]$$

Окончательно, приведя подобные члены, получим

$$S_l = -2e_{ikl}\eta_{ij}\dot{\eta}_{kj} + \frac{I'}{2}(3\eta_{ij}H_j\eta_{il} - 2\eta_{ij}^2H_l).$$

По теореме Лармора (2.2) сравнивая M (3.20) и γS (3.21), получим

$$I' = -4\gamma, I'' = 4\gamma^2, I''' = -6\gamma^2.$$

Подставим найденные константы в функцию Лагранжа

$$L = \frac{1}{2}(\dot{\eta}_{ij}^2 - 4\gamma e_{ikl}\eta_{ij}\dot{\eta}_{kj}H_l + 4\gamma^2 H^2 \eta_{ij}^2 - 6\gamma^2 (\eta_{ij}H_j)^2) - \frac{A}{2}\eta_{ij}^2 - g_{ij}\partial_i\eta_{kl}\partial_j\eta_{kl}. \quad (3.23)$$

В полях

$$H < H_c = \frac{\sqrt{A}}{2\gamma} = \frac{\omega_0}{2\gamma}$$

магнонный спектр определяется общим выражением (3.17), где теперь проекция S_H пробегает значения -2,-1,0,1,2.

В полях бóльших H_c состояние с $\eta_{ij} = 0$ становится неустойчивым и происходит спонтанное нарушение аксиальной симметрии вокруг направления поля. В функции Лагранжа необходимо учесть член четвертого порядка

$$-\frac{B}{4}(\eta_{ij}^2)^2.$$

(Предполагаем, что $B > 0$), в результате возникает параметр порядка вида (3.13) с амплитудой

$$\eta_0 = 2\gamma\sqrt{\frac{H^2 - H_c^2}{B}}.$$

Вектора \mathbf{a} и \mathbf{b} лежат в плоскости нормальной к магнитному полю. Магнонный спектр при этом имеет голдстоуновскую моду поворотов вокруг магнитного поля и четыре оптических моды со следующими щелями (см. рис. 3.5):

$$\omega_0^{(1)} = \gamma H, \omega_0^{(2)} = 2\gamma H, \omega_0^{(3)} = 3\gamma H, \omega_0^{(4)} = 2\gamma\sqrt{5H^2 - H_c^2}.$$

3.3 Релятивистские поправки

Процедуру учета релятивистских поправок рассмотрим на примере TlCuCl_3 , где проведены детальные экспериментальные исследования [8] щели смягча-

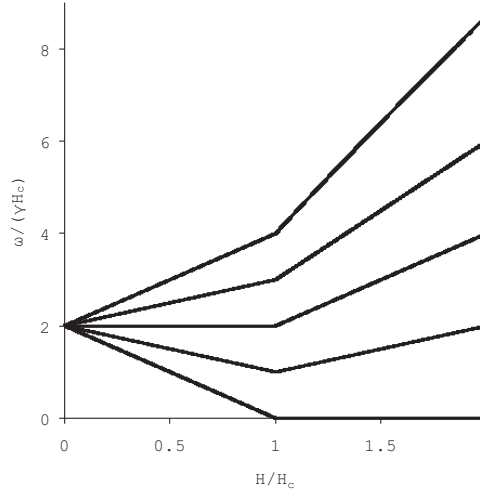


Рис. 3.5: Расщепление щели магнонного спектра при $S = 2$. Здесь, также как и при $S = 1$, спектр полностью определяется значением щели в нулевом поле.

ющейся магнонной ветви методом магнитного резонанса в окрестности перехода по магнитному полю.

Обменная симметрия поля $\boldsymbol{\eta}$ определяется его трансформационными свойствами при соответствующих элементам симметрии решетки перестановках атомов [1]. Магнитная ячейка антиферромагнитного состояния TiCuCl_3 совпадает с парамагнитной. Поэтому достаточно указать лишь действие поворотных элементов кристаллического класса C_{2h} . Из результатов магнитного упругого рассеяния нейтронов [31] следует, что

$$C_2\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\eta}, \sigma_h\boldsymbol{\eta} = -\boldsymbol{\eta}.$$

Отсюда ясно, что в антиферромагнитном состоянии нет инвариантов Дзялошинского, приводящих к слабому ферромагнетизму. Тогда, основной квадратичный релятивистский вклад в функцию Лагранжа сводится к анизотропии

$$\frac{\beta_{\alpha\beta}}{2}\eta_\alpha\eta_\beta,$$

где тензор $\beta_{\alpha\beta}$ имеет симметрию C_{2h} . Так как состояние близко к неустойчивости уже в нулевом поле, то компоненты тензора $\beta_{\alpha\beta}$ могут оказаться

сравнимы с малой обменной константой A . Для сокращения записи объединим обозначения релятивистских и обменного членов, положив $\beta_{\alpha\alpha} = A$. Так как мы предполагаем величину вектора $\boldsymbol{\eta}$ малой, то можно пренебречь релятивистскими эффектами в членах четвертого порядка.

Тензор $\beta_{\alpha\beta}$ имеет симметрию кристалла C_{2h} . Направим ось \mathbf{z} вдоль оси второго порядка, а оси \mathbf{x} , \mathbf{y} вдоль собственных осей тензора $\beta_{\alpha\beta}$, так чтобы выполнялось неравенство $\beta_{xx} < \beta_{yy}$. Согласно экспериментальным данным [31] легкая ось лежит в плоскости (xy) под углом 13° к кристаллическому направлению [201]. В наших обозначениях это ось \mathbf{x} .

При произвольном направлении магнитного поля получаются весьма громоздкие дисперсионные уравнения. Ограничимся приведением аналитических выражений для частот однородных колебаний в случае, когда поле направлено вдоль или перпендикулярно одной из собственных осей тензора анизотропии, например \mathbf{z} . Для $H \parallel \mathbf{z}$ в полях меньших критического (для данного направления) частота колебаний поляризованных вдоль поля (η_z) равна $\omega_0 = \sqrt{\beta_{zz}}$. Частоты эллиптически поляризованных колебаний компонент η_x, η_y определяются уравнением

$$\omega_{\pm}^2 = \gamma^2 H^2 + \frac{\beta_{xx} + \beta_{yy}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\beta_{xx} - \beta_{yy}}{2}\right)^2 + 2\gamma^2 H^2(\beta_{xx} + \beta_{yy})}. \quad (3.24)$$

Частота ω_- обратится в ноль при поле

$$H_c = \frac{\sqrt{\beta_{xx}}}{\gamma}.$$

Равновесные значения компонент антиферромагнитного вектора после перехода равны

$$\eta_x = \gamma \sqrt{\frac{(H^2 - H_c^2)}{B}}, \quad \eta_y = \eta_z = 0.$$

При этом, частоты малых колебаний вблизи равновесия равны

$$\omega_0 = \sqrt{\beta_{zz} - \beta_{xx} + \gamma^2 H^2},$$

для компоненты $\delta\eta_z$, и для эллиптически поляризованных компонент $\delta\eta_x, \delta\eta_y$

$$\omega_{\pm}^2 = 3\gamma^2 H^2 - \frac{3\beta_{xx} - \beta_{yy}}{2} \pm \sqrt{\left(3\gamma^2 H^2 - \frac{3\beta_{xx} - \beta_{yy}}{2}\right)^2 - 2(\beta_{yy} - \beta_{xx})(\gamma^2 H^2 - \beta_{xx})}. \quad (3.25)$$

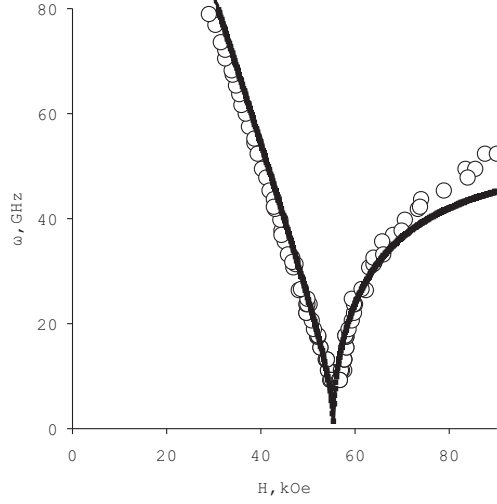


Рис. 3.6: Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля $H \parallel C_2$.

Частоты ω_- (3.25) и (3.24) соответствуют экспериментальным данным (рис.3.6) при следующем выборе параметров

$$\beta_{xx} = 3.3 \cdot 10^4 \text{GHz}^2, \beta_{yy} = 2.4 \cdot 10^4 \text{GHz}^2.$$

Пусть теперь поле лежит в плоскости \mathbf{x}, \mathbf{y} , под углом θ к оси \mathbf{x} .

$$H_x = H \cos \theta, H_y = H \sin \theta.$$

Тогда все три частоты получаются как корни бикубического уравнения

$$a_0 + a_1 \omega^2 + a_2 \omega^4 + \omega^6 = 0, \quad (3.26)$$

где

$$a_0 = (\gamma^2 H^2 - \beta_{zz}) (\beta_{xx} \beta_{yy} - \gamma^2 H^2 (\beta_{xx} \cos^2 \theta + \beta_{yy} \sin^2 \theta)),$$

$$a_1 = \gamma^4 H^4 - \gamma^2 H^2 (\beta_{xx} + \beta_{yy} + \beta_{zz}) + \beta_{xx} \beta_{yy} + \beta_{yy} \beta_{zz} + \beta_{zz} \beta_{xx} + 3\gamma^2 H^2 (\beta_{xx} \cos^2 \theta + \beta_{yy} \sin^2 \theta),$$

$$a_2 = -2\gamma^2 H^2 - \beta_{xx} - \beta_{yy} - \beta_{zz}.$$

Если $a_0 = 0$, то один из корней обратится в ноль. Поэтому критическим полем H_c будет меньшее из полей

$$\frac{\sqrt{\beta_{zz}}}{\gamma}, \quad (3.27)$$

$$\sqrt{\frac{\beta_{xx}\beta_{yy}}{\gamma^2(\beta_{xx}\cos^2\theta + \beta_{yy}\sin^2\theta)}}, \quad (3.28)$$

В первом случае при $H > H_c$ (3.27)

$$\eta_0 \parallel \mathbf{z}, \quad \eta_0^2 = \frac{\gamma^2 H^2 - \beta_{zz}}{B}.$$

Частоты получаются как корни уравнения (3.26) с коэффициентами

$$\begin{aligned} a_0 &= 2((\beta_{zz} - \beta_{xx})(\beta_{zz} - \beta_{yy}) - \gamma^2 H^2(\beta_{zz} - \beta_{xx}\sin\theta - \beta_{yy}\cos\theta))(\beta_{zz} - \gamma^2 H^2), \\ a_1 &= 2(\gamma^2 H^2 - \beta_{zz})(\gamma^2 H^2 - 2\beta_{zz} + \beta_{xx} + \beta_{yy}) + (\beta_{zz} - \beta_{xx})(\beta_{zz} - \beta_{yy}) - \\ &\quad - \gamma^2 H^2(5\beta_{zz} - \beta_{xx}(3\cos^2\theta + 1) - \beta_{yy}(3\sin^2\theta + 1)) + 4\gamma^4 H^4, \\ a_2 &= -7\gamma^2 H^2 + 4\beta_{zz} - \beta_{xx} - \beta_{yy}. \end{aligned}$$

Во втором случае при $H > H_c$ (3.28) $\eta_0 \perp \mathbf{z}$,

$$\eta_{0x}^2 = \frac{\sqrt{a^2 + b^2} - a}{2\sqrt{a^2 + b^2}} \eta_0^2, \quad \eta_{0y}^2 = \frac{\sqrt{a^2 + b^2} + a}{2\sqrt{a^2 + b^2}} \eta_0^2, \quad \eta_0^2 = \frac{\sqrt{a^2 + b^2} - c}{B},$$

для упрощения записи были введены параметры

$$a = \frac{\beta_{xx} - \beta_{yy} + \gamma^2 H^2(\cos^2\theta - \sin^2\theta)}{2},$$

$$b = -\gamma^2 H^2 \cos\theta \sin\theta, \quad c = \frac{\beta_{xx} + \beta_{yy} - \gamma^2 H^2}{2}.$$

Частоты получаются как корни уравнения (3.26) с коэффициентами

$$\begin{aligned} a_0 &= 4\sqrt{a^2 + b^2}(\sqrt{a^2 + b^2} - c)(\gamma^2 H^2 - \beta_{zz} + c - \sqrt{a^2 + b^2}), \\ a_1 &= 2c^2 + 8(a^2 + b^2) - 10c\sqrt{a^2 + b^2} + 2(\gamma^2 H^2 + \beta_{zz}) \times \\ &\quad \times (-c + 2\sqrt{a^2 + b^2}) + 8\frac{bc}{\sqrt{a^2 + b^2}} - \frac{4ac\gamma^2 H^2(\sin^2\theta - \cos^2\theta)}{\sqrt{a^2 + b^2}}, \\ a_2 &= -3\gamma^2 H^2 - 5\sqrt{a^2 + b^2} + 3c - \beta_{zz}. \end{aligned}$$

В работе [8] исследован также низкочастотный магнитный резонанс при направлениях магнитного поля в плоскости перпендикулярной оси C_2 вдоль

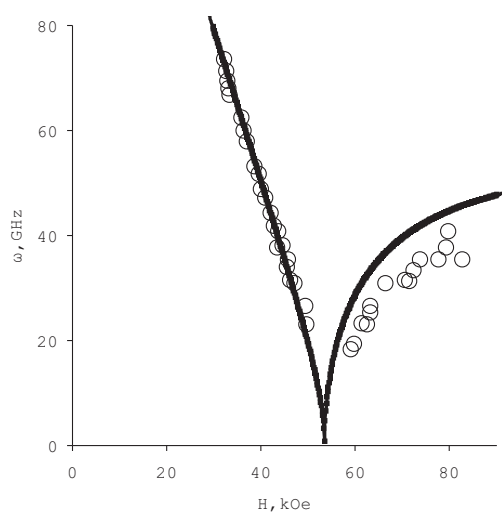


Рис. 3.7: Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля $H \parallel [201]$.

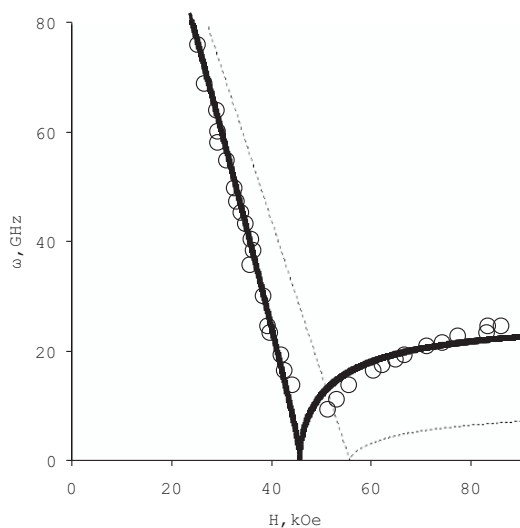


Рис. 3.8: Поведение низкочастотной ветви магнитного резонанса в TlCuCl_3 в окрестности критического магнитного поля при $H \perp (10\bar{2})$. Пунктирная линия построена с учетом лишь параметров β_{xx} , β_{yy} , β_{zz} , полученных из подгонки для двух других направлений магнитного поля.

кристаллографической оси [201] и перпендикулярно к плоскости $(10\bar{2})$. Поведение частоты при $H \parallel [201]$ представлено на рис.3.7. Согласование с теоретическими кривыми дает третий параметр

$$\beta_{zz} = 2.3 \cdot 10^4 GHz^2.$$

Оказывается, что поведение частоты при направлении поля $H \perp (10\bar{2})$ не может быть описано при учтенных главных эффектах анизотропии. Это означает, что здесь имеется аномально большой вклад от следующих поправок. В силу низкой симметрии кристалла, однако, имеется большое число таких релятивистских и обменно-релятивистских членов вида:

$$\dot{\eta}_\alpha \dot{\eta}_\beta, [\boldsymbol{\eta} \dot{\boldsymbol{\eta}}]_\alpha H_\beta, (\mathbf{H} \boldsymbol{\eta}) H_\alpha \eta_\beta, H^2 \eta_\alpha \eta_\beta, \boldsymbol{\eta}^2 H_\alpha H_\beta.$$

Для подгонки достаточно учесть лишь один обменно-релятивистский член

$$\frac{\tilde{\beta}_{xx}}{2} H_x^2 \boldsymbol{\eta}^2,$$

не влияющий на спектр при направлении поля $H \parallel C_2$ и практически не влияющий на спектр при $H \parallel [201]$. Теоретические кривые на рис.3.8 построены при выборе значения четвертого параметра

$$\tilde{\beta}_{xx} = -0.42 \left(\frac{GHz}{kOe} \right)^2.$$

Заключение

Развитая теория полностью соответствует общим свойствам спиновых структур с синглетным основным состоянием при нуле температуры [5]: зеemannовское снятие вырождения энергии спиновых мультиплетов (спиновых возбуждений с произвольным волновым числом) во внешнем поле, отсутствие магнитной восприимчивости вплоть до критического магнитного поля (давления). Низкочастотные спектры, возникающих в полях выше критического спиновых структур, соответствуют спектрам антиферромагнетиков, спиновых нематиков или тензорных магнетиков. Вопрос о том, какие именно типы возбуждений существуют в данном синглетном состоянии и какие из них становятся неустойчивыми остается за рамками макроскопической теории.

Глава 4

Несобственный антиферромагнетизм [32] .

Покажем, что в рамках теории Ландау при фазовом переходе второго рода с параметром порядка в виде симметричного бесследового спинового тензора третьего ранга $S_{\alpha\beta\gamma}$ могут образоваться фазы с ненулевой намагниченностью подрешеток в обменном приближении.

Для начала кратко перечислим результаты, полученные для такого параметра порядка, преобразующегося по одномерному представлению [15]. Старшие члены разложения энергии по S записываются как

$$E = \frac{1}{2}\tau S_{\alpha\beta\gamma}^2 + \frac{1}{4}\beta_1 (S_{\alpha\beta\gamma}^2)^2 + \frac{1}{4}\beta_2 S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\lambda} S_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu\lambda}.$$

Еще один инвариант четвертой степени $S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\lambda\mu} S_{\beta\lambda\nu} S_{\gamma\mu\nu}$ оказывается линейно зависим с остальными. При $\beta_2 > 0$ возникает фаза со спиновой симметрией T_d^s , выбором базиса в спиновом пространстве \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , это решение можно свести к виду

$$S_{\alpha\beta\gamma} = \rho(a_\alpha b_\beta c_\gamma + a_\alpha c_\beta b_\gamma + b_\alpha a_\beta c_\gamma + b_\alpha c_\beta a_\gamma + c_\alpha a_\beta b_\gamma + c_\alpha b_\beta a_\gamma),$$

$$\rho = \sqrt{\frac{-\tau}{6\beta_1 + 2\beta_2}}.$$

При $\beta_2 < 0$ симметрия фазы D_{3h}^s , а решение можно записать как

$$S_{\alpha\beta\gamma} = \rho(b_\alpha b_\beta b_\gamma - b_\alpha c_\beta c_\gamma - c_\alpha b_\beta c_\gamma - c_\alpha c_\beta b_\gamma),$$

$$\rho = \sqrt{\frac{-\tau}{4\beta_1 + 2\beta_2}}.$$

В обеих получившихся фазах спиновая симметрия параметра порядка запрещает образование из него вектора.

Рассмотрим теперь случай двумерного представления. Для простоты возьмем кристалл класса C_{3v} , его точечная группа симметрии имеет одно двумерное представление E . Как обычно, перенесем законы преобразования под действием кристаллической группы на сами тензоры $S_{\alpha\beta\gamma}^{(1)}$, $S_{\alpha\beta\gamma}^{(2)}$. Введем комплексный тензор

$$S_{\alpha\beta\gamma} = S_{\alpha\beta\gamma}^{(1)} + iS_{\alpha\beta\gamma}^{(2)}.$$

Под действием оси третьего порядка он умножается на $e^{2\pi i/3}$, а под действием плоскости симметрии $S \rightarrow S^*$. Обменная инвариантность требует, чтобы все члены в разложении свободной энергии были свертками S и S^* . Инвариантность энергии под действием оси третьего порядка приводит к тому, что в разложении до четвертой степени по S и S^* участвуют лишь члены, в которых S и S^* поровну. Это приводит к следующей записи энергии:

$$\begin{aligned} E = & \tau S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\gamma}^* + \beta_1 (S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\gamma}^*)^2 + \beta_2 S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\gamma} S_{\lambda\mu\nu}^* S_{\lambda\mu\nu}^* + \\ & + \beta_3 S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\lambda}^* S_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu\lambda}^* + \beta_4 S_{\alpha\beta\gamma}^* S_{\alpha\beta\lambda} S_{\mu\nu\gamma} S_{\mu\nu\lambda}^* + \beta_5 S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\beta\lambda} S_{\mu\nu\gamma}^* S_{\mu\nu\lambda}^*. \end{aligned}$$

Аналогично случаю с одномерным представлением инвариант $S_{\alpha\beta\gamma} S_{\alpha\lambda\mu} S_{\beta\lambda\nu}^* S_{\gamma\mu\nu}^*$ линейно зависим с остальными.

Пусть \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} – базис в спиновом пространстве, обозначим два комплексных вектора

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \frac{i\mathbf{b} - \mathbf{c}}{2}, \quad \mathbf{v} = \frac{i\mathbf{b} + \mathbf{c}}{2} \\ u_\mu u_\mu &= v_\mu v_\mu = 0, \quad u_\mu v_\mu = -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Удобно разложить тензор по следующему базису симметричных бесследовых тензоров третьего ранга.

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta\gamma}^3 &= u_\alpha u_\beta u_\gamma, \\ T_{\alpha\beta\gamma}^2 &= a_\alpha u_\beta u_\gamma + u_\alpha a_\beta u_\gamma + u_\alpha u_\beta a_\gamma, \\ T_{\alpha\beta\gamma}^1 &= a_\alpha a_\beta u_\gamma + a_\alpha u_\beta a_\gamma + u_\alpha a_\beta a_\gamma + u_\alpha u_\beta v_\gamma + u_\alpha v_\beta u_\gamma + v_\alpha u_\beta u_\gamma, \end{aligned}$$

$$T_{\alpha\beta\gamma}^0 = a_\alpha a_\beta a_\gamma + a_\alpha u_\beta v_\gamma + a_\alpha v_\beta u_\gamma + u_\alpha a_\beta v_\gamma + u_\alpha v_\beta a_\gamma + v_\alpha a_\beta u_\gamma + v_\alpha u_\beta a_\gamma$$

$$T_{\alpha\beta\gamma}^{-1} = a_\alpha a_\beta v_\gamma + a_\alpha v_\beta a_\gamma + v_\alpha a_\beta a_\gamma + v_\alpha v_\beta u_\gamma + v_\alpha u_\beta v_\gamma + u_\alpha v_\beta v_\gamma,$$

$$T_{\alpha\beta\gamma}^{-2} = a_\alpha v_\beta v_\gamma + v_\alpha a_\beta v_\gamma + v_\alpha v_\beta a_\gamma,$$

$$T_{\alpha\beta\gamma}^{-3} = v_\alpha v_\beta v_\gamma.$$

Фазовая диаграмма получалась минимизацией энергии на компьютере. Большое количество коэффициентов и переменных приводит к довольно сложному процессу минимизации, но, чтобы показать возможность несобственного антиферромагнетизма, достаточно ограничиться областью

$$\beta_1, \beta_2 > -10\beta_5, \quad \beta_3 \in (-1.45\beta_5, -1.55\beta_5), \quad \beta_4 \in (-0.95\beta_5, -1.05\beta_5), \quad \beta_5 < 0,$$

в которой решения соответствуют одной фазе с параметром порядка, представимым в достаточно простом виде (см. рис. 4.1, кроме семи фаз изображенных на фрагменте есть еще две в другой области фазовой диаграммы). Как будет показано, в данной фазе кроме антиферромагнетизма есть еще и ненулевая намагниченность, что соответствует ферримагнитному упорядочению. Выбором осей \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} в спиновом пространстве параметр порядка можно привести к виду

$$S_{\alpha\beta\gamma} = \eta T_{\alpha\beta\gamma}^3 + \zeta T_{\alpha\beta\gamma}^{-1}, \quad (4.1)$$

η и ζ – комплексные числа,

$$|\eta| = \sqrt{8}\rho \sin \phi, \quad |\zeta| = \sqrt{8/15}\rho \cos \phi,$$

$$\cos \phi = \sqrt{\frac{15}{4} \frac{3\beta_3 - 7\beta_4 + \beta_5}{13\beta_3 - 37\beta_4 + 3\beta_5}},$$

$$\rho = \sqrt{\frac{-\tau}{2\beta_1 + \tilde{\beta}}},$$

$$\tilde{\beta} = \frac{9\beta_3^2 - 25\beta_4^2 + \beta_5^2 - 16\beta_3\beta_4 + 6\beta_3\beta_5 - 8\beta_4\beta_5}{13\beta_3 - 37\beta_4 + 3\beta_5}.$$

Члены четвертого порядка зависят лишь от модулей η и ζ , для выяснения их аргументов необходимо рассмотреть члены старшего порядка. Заметим

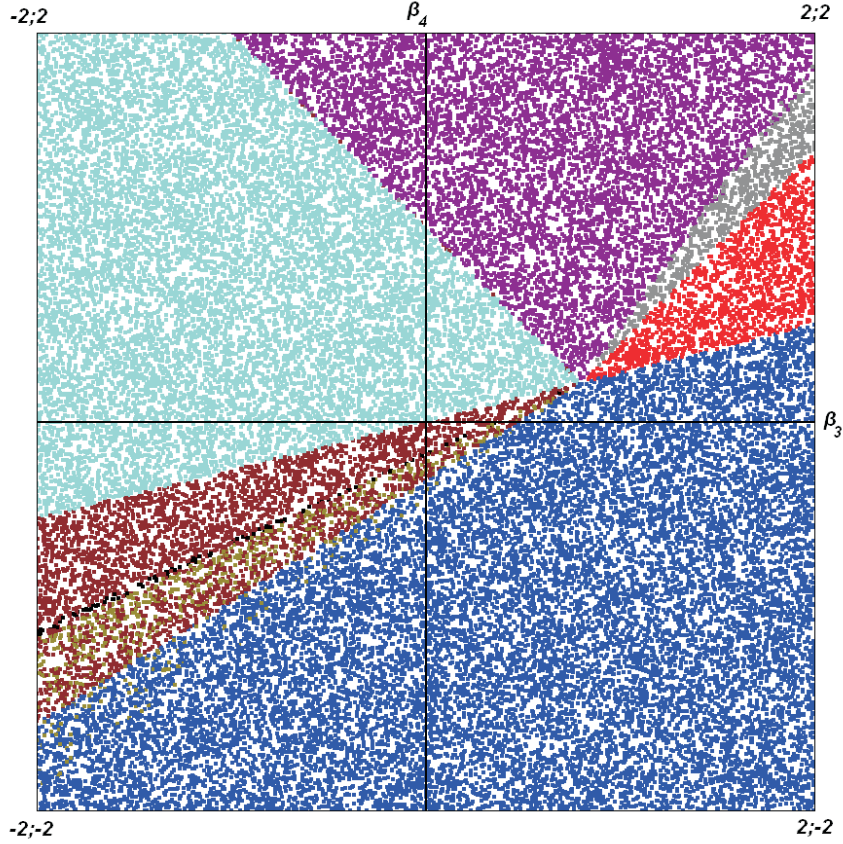


Рис. 4.1: Фрагмент фазовой диаграммы, полученный методом Монте-Карло при параметрах $\beta_{1,2} = 20$; $\beta_{3,4} \in (-2; 2)$; $\beta_5 = -1$. Рассмотренная в диссертации фаза обозначена серым цветом. Симметрия синей и красной фазы не допускает образования ненулевого вектора из сверток параметра порядка.

что при повороте вокруг вектора \mathbf{a} на угол θ вид тензора (4.1) сохраняется, а константы η и ζ умножаются на $e^{3i\theta}$ и $e^{-i\theta}$ соответственно, поэтому энергия может зависеть только от аргумента комбинации $\eta\zeta^3$. Эта зависимость проявится в членах двенадцатой степени по S и S^* . Нет необходимости выписывать все эти члены, достаточно заметить, что зависимость энергии от аргумента $\eta\zeta^3$ выглядит как

$$E_{12} = C\eta^3\zeta^9 + C^*\eta^{*3}\zeta^{*9}.$$

Плоскость симметрии переводит η и ζ в комплексно сопряженные, не меняя

энергию, отсюда получаем, что C действительно. При $C < 0$

$$\arg(\eta\zeta^3) = \frac{2\pi k}{3},$$

при $C > 0$

$$\arg(\eta\zeta^3) = \frac{\pi(2k+1)}{3},$$

где k – целое число.

Спиновая симметрия (см. главу 1) полученного состояния C_s^s , что соответствует неколлинеарному компланарному антиферромагнетику. В указанной ориентации плоскость симметрии перпендикулярна \mathbf{a} , так что все векторы, которые могут быть получены путем сворачивания из $S_{\alpha\beta\gamma}$ лежат в плоскости (b, c) . Из свертки трех тензоров можно получить векторы

$$S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu} = \frac{7}{32}\eta\zeta^2u_\mu,$$

$$S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu}^* = \zeta \left(\frac{9}{16}\zeta\zeta^* - \frac{1}{16}\eta\eta^* \right) v_\mu,$$

$$S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}^*S_{\gamma\lambda\mu} = \zeta \left(\frac{3}{8}\zeta\zeta^* + \frac{1}{16}\eta\eta^* \right) v_\mu$$

и векторы сопряженные с ними. Первый из векторов и его сопряженный не меняются под действием оси C_3 .

Добавим в разложение энергии члены, связывающие параметр порядка с антиферромагнитным вектором

$$D_1(S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu}^*Z_\mu^* + S_{\alpha\beta\gamma}^*S_{\alpha\beta\lambda}^*S_{\gamma\lambda\mu}Z_\mu) + \\ + D_2(S_{\alpha\beta\gamma}^*S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu}Z_\mu^* + S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}^*S_{\gamma\lambda\mu}^*Z_\mu),$$

где $\mathbf{Z} = \mathbf{l}_1 + i\mathbf{l}_2$, $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2$ – пара антиферромагнитных векторов преобразующихся по двумерному представлению кристаллической группы C_{3v} . Если теперь добавить к энергии $FZ_\alpha Z_\alpha^*$ и минимизировать по \mathbf{Z} при постоянном S , получим что

$$|l_1| = |l_2| \sim \sqrt{-\tau^3} \sim |T_c - T|^{3/2}.$$

Свертка $S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu}$ и ее сопряженная не меняются под действием оси третьего порядка, поэтому в разложение энергии можно добавить члены

$$D_3(S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu} + S_{\alpha\beta\gamma}^*S_{\alpha\beta\lambda}^*S_{\gamma\lambda\mu}^*)M_\mu +$$

$$+iD_4(S_{\alpha\beta\gamma}S_{\alpha\beta\lambda}S_{\gamma\lambda\mu} - S_{\alpha\beta\gamma}^*S_{\alpha\beta\lambda}^*S_{\gamma\lambda\mu}^*)L_\mu.$$

Магнитный вектор \mathbf{M} преобразуется по единичному представлению кристаллической группы, и поэтому является намагниченностью. Вектор \mathbf{L} , сохраняющийся под действием оси третьего порядка и меняющий знак под действием плоскости симметрии, соответствует коллинеарному антиферромагнетизму. Модули и этих магнитных векторов зависят от температуры как

$$|M|, |L| \sim \sqrt{-\tau^3}.$$

В случае, когда магнитная ячейка больше кристаллической (например, S и S^* меняют знак при сдвиге на один из периодов кристаллической решетки), разложение энергии и фазовая диаграмма остаются такими же, но намагниченность оказывается равной нулю, и образуется несобственный антиферромагнитный порядок.

Заключение.

Основные результаты диссертации:

- Дана классификация тензорного спинового упорядочения в кристаллах
- Построена теория низкочастотной спиновой динамики в сильных магнитных полях.
- Построена теория низкочастотной спиновой динамики парамагнетиков при нуле температуры.
- Установлена возможность несобственного антиферромагнетизма при фазовых переходах с тензорным параметром порядка.

Благодарю В.И. Марченко за руководство и всестороннюю поддержку и всех сотрудников института за доброжелательное отношение и полезное сотрудничество.

Литература

- [1] А.Ф. Андреев, В.И. Марченко, УФН, **130**, 39 (1980).
- [2] А.Ф. Андреев, И.А. Грищук, ЖЭТФ, **87**, 467 (1984).
- [3] В.И. Марченко, Письма в ЖЭТФ, **48**, 387 (1988).
- [4] V. Barzykin, L.P. Gorkov, Phys.Rev.Lett.**70**, 2479 (1992).
- [5] В.И. Марченко, Письма в ЖЭТФ, **59**, 590 (1994).
- [6] V. Barzykin, L.P. Gorkov, A.V. Sokol, Europhys. Lett. **15**, 869 (1991).
- [7] M. Hagiwara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 177601 (2003).
- [8] V.N. Glazkov, A.I. Smirnov, H. Tanaka, and A. Oosawa, Phys. Rev. B **69**, 184410 (2004).
- [9] B. Grenier *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 177202 (2004).
- [10] M. Hagiwara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 177202 (2005).
- [11] I. Affleck, Phys. Rev. B **41**, 6697 (1990); **43**, 3215 (1991).
- [12] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, M. Sigrist, Phys. Rev. B **69**, 054423 (2004).
- [13] A. K. Kolezhuk, V. N. Glazkov, H. Tanaka, A. Oosawa, Phys. Rev. B **70**, 020403(R) (2004).
- [14] В.И. Марченко, Письма в ЖЭТФ **87**, 387 (2008)
- [15] T.C. Lubensky, L. Radzihovsky, Phys.Rev. E **66**, 031704 (2002)

- [16] А. М. Фарутин, В. И. Марченко, *ЖЭТФ* **127**, 1106 (2005).
- [17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика*. Москва, Наука (1974).
- [18] И.Е. Дзялошинский, *Письма в ЖЭТФ*, **25**, 442 (1977).
- [19] L.G. Fel, *Phys. Rev. E* **52**, 2692 (1995).
- [20] V. Halperin, and W.M. Saslow, *Phys. Rev. B* **16**, 2154 (1977).
- [21] А. М. Фарутин, В. И. Марченко, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 282 (2006).
- [22] L.A. Prozorova, V.I. Marchenko, and Yu.V. Krasnyak, *JETP Lett.* **41**, 637 (1986).
- [23] А. М. Фарутин, В. И. Марченко, *ЖЭТФ* **131**, 860 (2007).
- [24] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, часть 1, Москва, Наука (1995)
- [25] A. Oosawa, M. Ishii, H. Tanaka, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 265 (1999).
- [26] A. Oosawa, T. Kato, H. Tanaka, *et al.*, *Phys. Rev. B* **65**, 094426 (2002).
- [27] V. O. Garlea, A. Zheludev, T. Masuda, *et al.*, cond-mat/0608566.
- [28] Ch. Rüegg, A. Furrer, D. Sheptykov, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 257201 (2004)
- [29] Ch. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, *et al.*, *Appl. Phys. A* **74**, S840 (2002).
- [30] Ch. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, *et al.*, *Nature* **423**, 62 (2003).
- [31] H. Tanaka, A. Oosawa, T. Kato, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **70**, 939 (2001).
- [32] А.М. Фарутин, *Письма в ЖЭТФ* **87**, (2008)