

СПИН-ВОЛНОВАЯ ТЕОРИЯ ЛЕГКОСНОГО
КВАЗИДВУМЕРНОГО ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

С. Г. Овчинников, О. Г. Петраковский

Рассмотрим антиферромагнетик с упорядочением G -типа

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - D \sum_i (S_i^z)^2, \quad D > 0,$$

и пусть обмен в плоскости XY равен $J < 0$, а между плоскостями $K < 0$, так что $0 < \lambda = K/J < 1$. Зависимость $T_N(D)$ исследована в [1] для трехмерного ($\lambda=1$) и двумерного ($\lambda=0$) случаев, причем анизотропия заменялась на эффективное поле $D \langle S^z \rangle S^z$. В настоящей работе анизотропия точно включается в гамильтониан нулевого приближения, и рассчитана зависимость $T_N(\lambda, D)$ при всех λ . Найдено также сокращение намагниченности за счет нулевых колебаний.

Удобно использовать представление спиновых операторов через операторы Хаббарда для точного включения анизотропии в \mathcal{H}_0 [2]. Кроме обычной спиновой функции Грина $K^{+-}(\mathbf{q}, E)$, в анизотропном случае понадобятся функции Грина $D^M(f-f', E) = \langle\langle X_f^{M+1, M} | S_{f'}^- \rangle\rangle_E$. В стандартном приближении Тябликова они имеют вид [2]

$$K_{AA}^{+-}(\mathbf{q}, E) = \frac{\Phi_A(E)}{1 - \frac{1}{4} J^2(\mathbf{q}) \Phi_1(E) \Phi_2(E)},$$

$$D_A^M(\mathbf{q}, E) = \frac{\gamma(M) (n_{M+1}^A - n_M^A)}{[E - E_A(M)] \left[1 - \frac{1}{4} J^2(\mathbf{q}) \Phi_1(E) \Phi_2(E) \right]},$$

где $\gamma^2(M) = (S - M)(S + M + 1)$, $A = 1, 2$ — индекс подрешетки, $n_M^A = \langle X_{A, M}^{M, M} \rangle$ — число заполнения уровня $|M\rangle$ в подрешетке A , $J(\mathbf{q}) = 2J [\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \lambda \cos(q_z a)]$ — энергия терма $E_{1(2)}(M) = J(0) \times \langle S_{2(1)}^z \rangle + D(2M + 1)$ и

$$\Phi_A(E) = \sum_M \gamma^2(M) [n_{M+1}^A - n_M^A] / [E - E_A(M)].$$

Ограничимся $S = 1$, считая подрешетки одинаковыми: $\langle S_1^z \rangle = -\langle S_2^z \rangle = \sigma$, $n_M^1 = n_{-M}^2$. Обозначим $\gamma(\mathbf{q}) = J(\mathbf{q})/J(0)$, $d = D/J(0)$, тогда спектр магновов есть

$$\left. \begin{aligned} E_{\pm}^2(\mathbf{q})/J^2(0) &= \sigma^2 + d^2 - \gamma^2(\mathbf{q}) \frac{\sigma^2}{2} \pm \sigma \nu(\mathbf{q}), \\ \nu^2(\mathbf{q}) &= d^2 [4 - \gamma^2(\mathbf{q}) (1 - (1 - 3n_0)^2/\sigma^2)] + \gamma^4(\mathbf{q}) \sigma^2/4 - 2\gamma^2(\mathbf{q}) d (1 - 3n_0). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Спектр (2) зависит от двух параметров: n_0 и $\sigma = n_1 - n_{-1}$, для которых из (1) следует

$$n_0 = (n_1 - n_0) P_0, \quad n_{-1} = (n_0 - n_{-1}) P_{-1}, \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} P_a &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \{ [A_{af}(E_+) - B_{cf}(-E_+)] E_- - \\ &\quad - [C_{af}(E_-) - D_{cf}(-E_-)] E_+ \} / 2E_+ E_- (E_+^2 - E_-^2), \\ A_{0(-1)} &= (E_+ - J(0) \sigma \pm D) [(E_+ + J(0) \sigma)^2 - D^2], \\ B_{0(-1)} &= (-E_+ - J(0) \sigma \pm D) [(J(0) \sigma - E_+)^2 - D^2], \\ C_{0(-1)} &= (E_- - J(0) \sigma \pm D) [(E_- + J(0) \sigma)^2 - D^2], \\ D_{0(-1)} &= (-E_- - J(0) \sigma \pm D) [(J(0) \sigma - E_-)^2 - D^2]. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

С учетом условия полноты $n_1 + n_0 + n_{-1} = 1$ из (3) находим замкнутую систему уравнений самосогласования

$$\left. \begin{aligned} \sigma &= (1 + P_0 + P_{-1}) / [(1 + 2P_0)(1 + P_{-1}) + P_0 P_{-1}], \\ n_0 &= (P_0 + P_0 P_{-1}) / [(1 + 2P_0)(1 + P_{-1}) + P_0 P_{-1}]. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Воспользуемся малостью σ при $T \rightarrow T_N$ и разложим все выражения в правой части (5) в ряд по степеням σ . Для спектра имеем

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = D \sqrt{1 \pm \xi \gamma(\mathbf{q})} \equiv D v_{\pm}, \quad \xi = \frac{J(0)}{D} (1 - 3n_0(T_N)).$$

Для P_0 и P_{-1} с учетом линейных по σ членов получим

$$P_0 = -\frac{1}{2} + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} [T(D - J(0)\sigma) / v_+^2 v_-^2 D^2 + (J(0)\sigma + D) / 2D (v_+ + v_-)],$$

$$P_{-1} = -\frac{1}{2} - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} [T(D + J(0)\sigma) / v_+^2 v_-^2 D^2 - (J(0)\sigma - D) / 2D (v_+ + v_-)].$$

Здесь мы ограничимся малой анизотропией, считая $D/J(0) \ll 1$. Тогда из (5) следует, что $\xi = 1 - D/4J(0)$, а температура Нееля равна

$$T_N = 2J(0)/3C(\lambda, D), \quad C(\lambda, D) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \xi^2 \gamma^2(\mathbf{q}))^{-1}.$$

Здесь $C(\lambda, D)$ есть аналог интеграла Ватсона, возникающего в спин-волновой теории изотропных ферро- и антиферромагнетиков. Подобная фор-

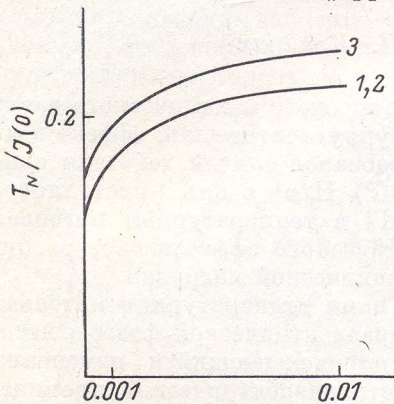


Рис. 1. Зависимость $T_N/J(0)$ от параметров λ и $d=D/J(0)$.

Кривые 1, 2, 3 соответствуют $d=0, \lambda=0, d=\lambda$.

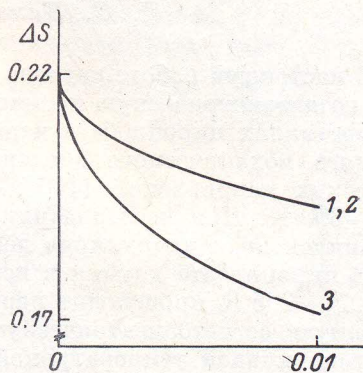


Рис. 2. Зависимость ΔS от параметров λ и $d=D/J(0)$.

Кривые 1, 2, 3 соответствуют $[d=0, \lambda=0, d=\lambda]$.

мула была также получена для квазидвумерного легкоосного ферромагнетика в [3]. На рис. 1 приведена зависимость T_N от параметров λ и d для ГЦК элементарной ячейки в антиферромагнитной фазе. Логарифмическая сингулярность $T_N(\lambda, D)$ в начале координат соответствует известному результату об отсутствии дальнего порядка в изотропной двумерной модели Гейзенберга.

Известно, что нулевые колебания приводят к уменьшению намагниченности подрешетки $\Delta S = S - \langle S^2 \rangle$ при $T=0$ [4]. Ниже мы используем систему уравнений (5) для вычисления $\Delta S(\lambda, D)$. При $T=0$ для P_0 получаем (считая $D/J(0) \ll 1$)

$$P_0 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} [J(0)\sigma + D + (J(0)\sigma)^2 [J(0)\sigma - D] / E_+ E_-] / (E_+ + E_-).$$

Найденная зависимость $\Delta S = 1 - \delta$ от λ и d приведена на рис. 2. Ранее $\Delta S(d)$ вычислялось в работе [1] при $\lambda = 1$ и $\lambda = 0$. В изотропном случае максимум ΔS достигается при $\lambda \rightarrow 0$. Для двумерного антиферромагнетика $\Delta S \rightarrow 0$ при $d \rightarrow \infty$ в модели Изинга нулевых колебаний нет, и ΔS возрастает с уменьшением d . Максимальное значение ΔS близко к величине, рассчитанной в [1] и измерившейся экспериментально, например, в K_2NiF_4 [5].

Л и т е р а т у р а

- [1] Lines M. E. J. Phys. Chem. Sol., 1970, vol. 31, N 1, p. 101—116.
 [2] Вальков В. В., Овчинников С. Г. ТМФ, 1982, т. 50, № 3, с. 466—476.
 [3] Кузьмин Е. В., Петраковский Г. А. ФТТ, 1986, т. 28, № 11, с. 3551—3553.
 [4] Anderson P. W., Phys. Rev., 1952, vol. 86, N 5, p. 694—701.
 [5] De Wijn H. W., Walstedt R. E., Walker L. R., Guggenheim H. J. J. Appl. Phys., 1974, vol. 42, N 4, p. 1595—1601.

Институт физики
 им. Л. В. Киренского СО АН СССР
 Красноярск

Поступило в Редакцию
 28 ноября 1986 г.

УДК 537.226

Физика твердого тела, том 29, в. 6, 1987
 Solid State Physics, vol. 29, № 6, 1987

УПРУГООПТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КРИСТАЛЛАХ ПИРОНИОБАТА КАДМИЯ

Л. С. Камзина, Н. Н. Крайник

В настоящей работе изучено влияние одноосного механического давления на диэлектрическую проницаемость и упругооптический эффект в монокристаллах пирониобата кадмия. Исследовался случай действия одноосного механического давления ($0 \div 3 \cdot 10^7$) Н/м² вдоль кристаллографических направлений [100], [110], [111] в температурном интервале 190—300 К. При исследовании упругооптического эффекта свет распространялся перпендикулярно действию механической нагрузки.

В пирониобате кадмия в исследуемом нами температурном интервале при $T_1 = 205$ К происходит переход из параэлектрической фазы в несобственную сегнетоэлектрическую фазу, сопровождающийся изменением наклона кривой температурной зависимости диэлектрической проницаемости, при $T_2 = 201$ К — еще один сегнетоэлектрический фазовый переход, сопровождающийся аномально узким пиком ϵ и, наконец, размытый сегнетоэлектрический фазовый переход, которому соответствует размытый максимум ϵ при $T_3 = 188$ К [1]. При приложении одностороннего давления наблюдаются следующие изменения: 1) резкое уменьшение величины ϵ в максимуме при T_3 и увеличение размытия; 2) уширение аномального пика ϵ при T_2 и смещение его в сторону низких температур линейно со скоростью $2 \cdot 10^{-7}$ К/Н/м²; 3) изменение формы аномалии при T_1 из перегиба в максимум и сдвиг перехода в сторону высоких температур. Выше T_1 в параэлектрической фазе ϵ подчиняется закону Кюри—Вейса с постоянными $c = 1.23 \cdot 10^5$ К, $T_{К-В} = 165$ К. Под действием давления постоянные Кюри—Вейса уменьшаются линейно с давлением $dc/dp = -0.2 \times 10^{-2}$ К | Н | м², $dT_{К-В}/dp = 4 \cdot 10^{-6}$ К/Н/м². Полученные величины постоянных Кюри—Вейса согласуются с данными [2] по влиянию гидростатического давления на ϵ поликристаллических образцов $Cd_2Nb_2O_7$. Под действием одностороннего давления интервал существования несобственной сегнетоэлектрической фазы расширяется. Самое большое уменьшение ϵ под давлением наблюдается в области размытого фазового перехода, что свидетельствует об уменьшении влияния ориентационных процессов.