

О концентрационной зависимости крыльев спектров спиновых корреляционных функций разбавленных гейзенберговских парамагнетиков

В. Е. Зобов⁺¹), М. М. Кучеров*

⁺Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

*Институт космических и информационных технологий Сибирского федерального университета, 660074 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 26 февраля 2016 г.

После переработки 11 апреля 2016 г.

Исследованы особые точки на оси мнимого времени автокорреляционной функции (АКФ), усредненной по расположению спинов в магнитоизобавленной спиновой решетке с изотропным спин-спиновым взаимодействием при высокой температуре. Для АКФ в приближении самосогласованного флуктуирующего локального поля предложены нелинейные интегральные уравнения, отражающие разделение неоднородных спиновых систем на близкие спины и остальные спины. Координаты ближайших особых точек определены через радиус сходимости рядов по степеням времени, коэффициенты которых рассчитаны по рекуррентным уравнениям. Показано, что при сильном магнитном разбавлении координаты особых точек, а, следовательно, и крылья спектра АКФ определяются модуляцией локального поля близкими парами спинов, приводящей к их логарифмической концентрационной зависимости.

DOI: 10.7868/S0370274X16110059

Крылья спектров корреляционных функций играют важную роль при описании медленных процессов установления равновесия в неоднородных спиновых системах. В настоящее время продолжается работа над решением проблем эргодичности, термализации, спинового транспорта и многочастичной локализации [1–4]. Форма крыла будет экспоненциальной, если спиновая автокорреляционная функция (АКФ) имеет особые точки на оси мнимого времени [5–7]. Координата особой точки, которая определяет показатель этой экспоненты, рассчитывалась нами для регулярных спиновых решеток в работах [6–9]. В настоящей работе, как и в [5–10], взяты системы с изотропным спин-спиновым взаимодействием, хотя тот же подход может быть применен и к более сложным системам с анизотропным взаимодействием [9, 11–13]. Изменение координаты особой точки АКФ при магнитном разбавлении, насколько нам известно, не рассматривалось и будет исследовано в данной работе. Отметим, что в работе [10] авторы заменили неоднородную систему регулярной решеткой спинов на среднем расстоянии. Однако правомерность такой замены вызывает сомнение, поскольку расчет центральной части спектра АКФ [1, 14–18] показал важность учета неоднородности распределе-

ния спинов в пространстве при определении формы спектра.

Рассмотрим парамагнетик с изотропным спин-спиновым взаимодействием

$$H = \sum_{i \neq j} b_{ij} [I_i^z I_j^z + I_i^x I_j^x + I_i^y I_j^y], \quad (1)$$

где I_i^α – α -компонента ($\alpha = x, y, z$) векторного оператора спина в узле i , $I = 1/2$, b_{ij} – константа спин-спинового взаимодействия. В локальном магнитном поле, создаваемом спинами окружения, зависящий от времени вклад одного порядка величины со статическим вкладом. При наличии у каждого спина большого числа соседей Anderson and Weiss [19] предложили описывать это флуктуирующее поле гауссовым случайным процессом. Blume and Hubbard [5] предложили для самосогласованного учета этого поля простое уравнение

$$F_B(t) = \exp\left\{-M_2 \int_0^t \int_0^{t'} F_B(t'') dt' dt''\right\}, \quad (2)$$

для АКФ:

$$F(t) = Tr\{\exp(iHt)I_i^\alpha \exp(-iHt)I_i^\alpha\} / Tr\{(I_i^\alpha)^2\}. \quad (3)$$

¹)e-mail: rsa@iph.krasn.ru

АКФ можно разложить в ряд по степеням времени

$$F(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n M_{2n} t^{2n} / (2n)!, \quad (4)$$

коэффициент которого M_{2n} является моментом порядка $2n$ спектральной плотности АКФ.

Гауссово локальное магнитное поле общего вида вызывает повороты спинов вокруг разных осей. При строгом рассмотрении необходимо учитывать порядок следования поворотов во времени, что приведет к необходимости учета поправок к уравнению (2), в котором оставлен только первый член куммулянтного разложения. Résibois and De Leener [20] предложили для АКФ самосогласованное нелинейное интегральное уравнение, ядро которого представлено в виде ряда. При сохранении первого члена ряда имеем

$$\frac{d}{dt} F_R(t) = -M_2 \int_0^t F_R^2(t-t_1) F_R(t_1) dt_1. \quad (5)$$

Общим свойством самосогласованных нелинейных уравнений для АКФ является наличие у решений особых точек на оси мнимого времени, в окрестности которых

$$F(t) \approx \frac{A}{(it \pm \tau_0)^2}. \quad (6)$$

Выполненный анализ [6, 7] показал, что функции $F_B(t)$ и $F_R(t)$ на оси мнимого времени служат мажорирующими функциями для строгого решения $F(t)$ в гауссовом самосогласованном поле, поэтому для координат ближайших особых точек найдено

$$\tau_R > \tau_0 > \tau_B, \quad (7)$$

где

$$\tau_B = 2.221/\sqrt{M_2}, \quad \tau_R = 2.781/\sqrt{M_2}, \quad \tau_0 = 2.485/\sqrt{M_2}. \quad (8)$$

Исследуем, как изменится координата особой точки АКФ при магнитном разбавлении. Возьмем исходную регулярную решетку и будем заменять магнитные атомы на диамагнитные в случайно выбранных узлах. Будем предполагать, что заполнение разных узлов независимое, а вероятность сохранения в узле магнитного атома равна средней концентрации магнитных атомов $c = N_M/N$, где N_M – число магнитных атомов, а N – полное число узлов решетки. В результате разбавления величины моментов изменятся. В качестве примера приведем второй и четвертый моменты [21]:

$$M_2 = 2cS_1, \quad M_4 = 14c^2S_1^2 - 4c^2S_3 + c4S_2(2 - 5c), \quad (9)$$

которые выражаются через решеточные суммы:

$$S_1 = \sum_j b_{ij}^2, \quad S_2 = \sum_j b_{ij}^4, \quad S_3 = \sum_{k \neq j} b_{jk}^2 b_{ik} b_{ij}. \quad (10)$$

В общем случае момент порядка $2n$ содержит решеточные суммы с числом суммирований от 1 до n . Решеточная сумма, содержащая $m + 1$ решеточных индексов, умножится на c^m . Уравнения (2)–(5) получены в условиях, когда в M_{2n} вклад, пропорциональный M_2^n , превосходит остальные вклады. Понятно, что при небольшом разбавлении ($c \approx 1$) это условие может быть, по-прежнему, выполнено и координата особой точки АКФ будет выражена через зависящий от концентрации M_2 (9) по формулам (8).

При $c \ll 1$ ситуация изменится. Если поделить четвертый момент на квадрат второго, то легко увидеть, что это отношение растет при уменьшении концентрации, поскольку при $c \ll 1$ возрастает вклад в моменты от близких пар спинов, имеющий меньшую степень малой величины c^m . Авторы работы [15] обратили внимание, что это свидетельствует о сужении центральной части спектра. Anderson [14] показал, что форма спектра становится лоренцевой в пределе сильного магнитного разбавления. Изменение центральной части спектра во всей области концентраций описано в работах Дженарова [1, 18].

Крылья спектра и моменты высокого порядка определяются видом АКФ в окрестности особенности (6):

$$g(\omega) \approx (|\omega| \rightarrow \infty) \approx A|\omega| \exp(-\tau_0|\omega|); \quad (11)$$

$$M_{2n} \approx 2A(2n + 1)!(\tau_0)^{-2n-2}.$$

При разбавлении такой вклад в момент порядка $2n$ с большим комбинаторным множителем следует умножить на c^n , тогда как вклад решеточных сумм с одним индексом суммирования будет иметь порядок величины $\sim cZb_2^{2n}$, где b_2 – константа взаимодействия между ближайшими соседями, а Z – их число. Этот вклад (вклад от близких пар спинов) станет меньше чем вклад (11), из-за большого комбинаторного множителя, при достаточно большом n : $n > \tau_0 b_2 / \sqrt{c}$.

Нерегулярное расположение спинов, наличие близких пар, близких троек и т.п. изменит величину координаты особой точки АКФ на оси мнимого времени. Для оценки этого изменения надо найти изменение самосогласованных уравнений при разбиении спиновой системы на близкие пары и остальные спины (“массу”) [1, 22]. Известным приемом самосогласованного подхода к системам с небольшим числом ближайших соседей служит приближение решеток Бете или деревьев Кэйли [23]. В таком

приближении мы ранее исследовали зависимость координаты особой точки АКФ регулярных спиновых систем от числа ближайших соседей и размерности пространства [24, 25].

Воспользуемся представлением чисел заполнения n_j узла j : $n_j = 1$, если в узле j расположен спин, и $n_j = 0$, если немагнитный атом [1, 16–18, 21]. Для систем, у которых взаимодействие спадает с расстоянием по степенному закону, например, диполь-дипольное [1] или РККУ (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) [10], каждый спин взаимодействует, формально говоря, со всеми остальными. Однако взаимодействие с Z ближайшими соседями намного сильнее взаимодействия с дальним окружением [26]. Вклад от большого числа дальних соседей будем учитывать в виде вклада (2) от гауссовского локального поля

$$D_i(t) = \exp \left\{ -2 \sum_{j \notin Z} n_j b_{ij}^2 \int_0^t \int_0^{t'} F_j(t'') dt' dt'' \right\}. \quad (12)$$

Тогда как действие ближайших соседей будем учитывать в приближении решетки Бете, полагая независимость вкладов от каждого из Z ближайших соседей:

$$F_j(t) = \prod_f^Z \left[(1 - n_f) + n_f F_{jf}^{(1)}(t) \right] D_j(t), \quad (13)$$

где $F_{jf}^{(1)}(t)$ – вклад в изменение корреляционной функции спина в узле j со стороны направления на решетке Бете, ведущего к спину f . Изменение во времени этой функции будем описывать уравнением

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F_{jf}^{(1)}(t) = & -2b_{jf}^2 \int_0^t D_f(t') \times \\ & \times \prod_{k \neq j}^{Z-1} \left[(1 - n_k) + n_k F_{fk}^{(1)}(t') \right] F_{jf}^{(1)}(t - t') dt'. \end{aligned} \quad (14)$$

Отличия уравнения (14) от уравнения (5) рассмотрены в работе [24]. Прежде всего, уравнение (5) записано для полной АКФ (13), учитывающей все связи, выходящие из узла j , тогда как уравнение (14) для вклада в АКФ от одной связи. Поэтому в ядре уравнения (14) осталась только одна из двух АКФ, относящаяся к оператору в узле f , “одетому” взаимодействием с его окружением. В этой АКФ исключено взаимодействие со спином j , уже учтенное в уравнении (14) в явном виде, что отражено в уменьшении числа множителей в произведении с Z на $Z - 1$. В уравнении (5) пренебрегается таким изменением АКФ в предположении большого числа соседей. Наконец, в уравнении (14) динамика спинов по разным

направлениям на решетке рассматривается независимо, тогда как в уравнении (5) – коррелированно.

Переходя к усреднению уравнений (12)–(14) по случайному расположению спинов, отметим, что граница разделения на близкие и дальние спины зависит от решаемой задачи. Для расчета центра спектра выполняется исследование затухания корреляционной функции на оси реального времени. Здесь в качестве масштаба выступает ширина спектра, линейная по концентрации и равная по порядку величины взаимодействию спинов на среднем расстоянии [1, 13–18]. Вклады в корреляционную функцию от слагаемых, содержащих пары на меньшем расстоянии (“близкие”), затухнут из-за быстрых осцилляций во времени. Поэтому число таких мест в исходной регулярной решетке (число “близких” спинов) растет при разбавлении и во много раз превзойдет координационное число этой решетки. Наоборот, при расчете крыльев спектра мы исследуем рост корреляционной функции на оси мнимого времени. В этом случае вклад от близких пар монотонно растет, поэтому в качестве близких спинов следует брать ближайших соседей исходной решетки.

На основании сказанного, возьмем простую модельную спиновую систему, у которой каждый спин имеет небольшое число Z ближайших соседей с равной константой взаимодействия $b_2 = b/\sqrt{2}$ и введем обозначение $c\delta^2 = M_2 - cZb^2$ для суммарного вклада от дальних соседей. Выполнив усреднение уравнений (12)–(14) по случайному расположению спинов в приближении независимого заполнения узлов, получим уравнения:

$$K(t) = \langle F_j(t) \rangle = [Y(t)]^Z D(t), \quad (15)$$

где

$$D(t) = \exp \left\{ -c\delta^2 \int_0^t \int_0^{t'} K(t'') dt' dt'' \right\},$$

а функция

$$Y(t) = [1 + c(\langle F_{jf}^{(1)}(t) \rangle - 1)] \quad (16)$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt} Y(t) = -b^2 \int_0^t [Y(t_1)]^{Z-1} D(t_1) [Y(t - t_1) - (1 - c)] dt_1. \quad (17)$$

Подставим в уравнения (17) ряды по степеням времени вида (4) входящих в него функций. Для коэффициентов получим рекуррентные уравнения:

$$Y_{n+1} = b^2 \sum_{k=0}^n G_{n-k} Y_k - b^2(1 - c)G_n, \quad (18)$$

$$G_n = \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} D_{n-k} Y_k^{(Z-1)},$$

$$D_{n+1} = c\delta^2 \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} D_{n-k} K_k,$$

где Y_n, D_n, K_n – коэффициенты порядка $2n$ рядов (4) одноименных функций, а $Y_n^{(Z-1)}$ соответствующий коэффициент для $[Y(t)]^{Z-1}$. Решая уравнения (18) численно, координату ближайшей особой точки будем определять через радиус сходимости ряда (4) для $Y(t)$, вычисленный по формуле Даламбера, как предел отношения соседних членов ряда. Результаты расчета показаны на рис. 1 и 2.

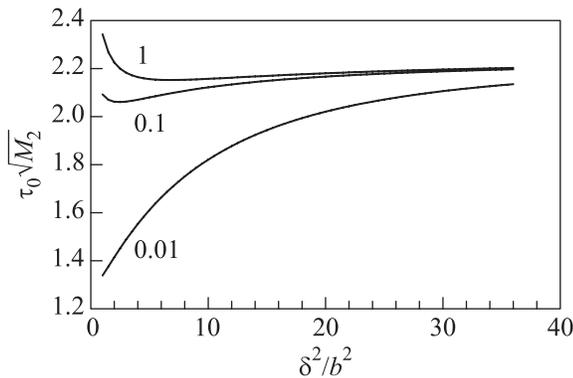


Рис. 1. Зависимости координаты особой точки от δ^2/b^2 при $Z = 3$ и при трех значениях концентрации (цифры у кривых).

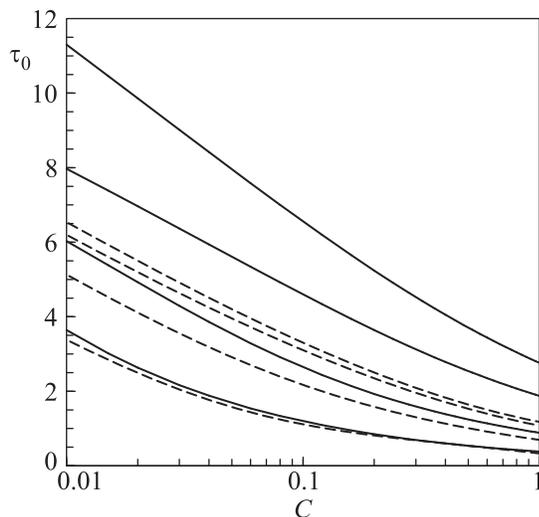


Рис. 2. Зависимости координаты особой точки (в единицах b^{-1}) от концентрации при $Z = 3$ (сплошные линии) и $Z = 5$ (штриховые линии) при разных значениях δ^2/b^2 (сверху вниз): 0; 0.03; 3; 30

На рис. 1 приведены зависимости координаты особой точки $\tau_0 \sqrt{M_2} = \tau_0 \sqrt{c(3b^2 + \delta^2)}$ от δ^2/b^2 при трех концентрациях: $c = 1, c = 0.1$ и $c = 0.01$. При $\delta^2/b^2 \gg 1$ кривые сходятся к пределу $\tau_B = 2.221/\sqrt{M_2}$ (8). Соответствующую концентрационную зависимость $\tau_0 \sim 1/\sqrt{c}$ мы видим на рис. 2 при $\delta^2/b^2 = 30$. При меньших значениях δ^2 и при сильном разбавлении $c \ll 1$ вид концентрационной зависимости координаты особой точки АКФ изменяется на логарифмическую

$$\tau_0 \sim -\frac{a}{b} \ln c, \tag{19}$$

которой в полулогарифмических координатах рис. 2 соответствуют отрезки прямых. Такая зависимость обусловлена наличием близких пар спинов. Их быстро осциллирующий на оси реального времени вклад $\langle F_{jf}^{(1)}(t) \rangle \sim \cos bt$ на оси мнимого времени $t = i\tau$ превращается в быстрорастущий вклад $\langle F_{jf}^{(1)}(t) \rangle \sim \sim chb\tau \sim e^{b\tau}/2$. Однако одна пара не даст сингулярность. Особая точка у решения нелинейного уравнения (17) возникает при объединении сигналов многих пар, которое происходит при условии быстрого роста $Y(t)$ (16), т.е. при $(\langle F_{jf}^{(1)}(t) \rangle)c > 1$. Отсюда получаем наблюдаемый вид (19) зависимости координаты особой точки. Как видно из рис. 2, коэффициент a уменьшается с ростом δ^2 . Это связано с тем, что функция $D(t)$ также дает вклад в рост ядра уравнения (17) и смещает величину τ_0 в сторону уменьшения. Коэффициент a уменьшается также и при увеличении Z , поскольку увеличение показателя степени у $Y(t)$ ускоряет рост ядра уравнения (17). С другой стороны, такое увеличение показателя степени приводит к ослаблению зависимости от δ^2 при $Z = 5$ по сравнению с $Z = 3$.

Таким образом, при магнитном разбавлении центральная часть спектра АКФ трансформируется из формы, описываемой кривой Гаусса с экспоненциальными крыльями в форму, описываемую кривой Лоренца с экспоненциальными крыльями. В то время как ширина спектра зависит от концентрации по линейному закону [1, 13–18], показатель экспоненты крыла имеет логарифмическую зависимость от концентрации:

$$g(\omega) \sim A \exp \left\{ -\frac{a\omega}{b} \ln \frac{1}{c} \right\} = Ac^{\frac{a\omega}{b}}. \tag{20}$$

Физически это означает, что большая частота возникает в системе из-за объединения частот многих пар ($k \sim \omega/b$) вследствие модуляции локального поля. Вероятность образования одной пары равна c , а k пар – c^k . Тогда как при наращивании модуляционной частоты в регулярной решетке складываются

$k \sim \omega/\omega_{\text{loc}}$ средних локальных частот $\omega_{\text{loc}} \sim \sqrt{M_2}$. Выполненный анализ позволяет сделать следующий вывод. В магниторазбавленных системах большинство спинов, как известно, располагаются на расстояниях, близких к среднему. Эти спины играют важную роль при установлении равновесия между частями системы и определяют центр спектра АКФ. Однако далекое крыло спектра определяется кластерами близких спинов, вероятность образования которых мала, но вклад в модуляционную частоту велик.

1. F.S. Dzheparov, J. Phys.: Conf. Ser. **324**, 012004 (2011).
2. J. Eisert, M. Friesdorf, and C. Gogolin, Nat. Phys. **11**, 124 (2015).
3. R. Nandkishore and D. A. Huse, Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. **6**, 15 (2015).
4. D. A. Abanin, W. De Roeck, and F. Huveneers, Phys. Rev. Lett. **115**, 256803 (2015).
5. M. Blume and J. Hubbard, Phys. Rev. B **1**, 3815 (1970).
6. V. E. Zobov, Phys. Lett. A **119**, 315 (1986).
7. В. Е. Зобов, ТМФ **77**, 426 (1988).
8. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ТМФ **131**, 491 (2002).
9. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ТМФ **136**, 463 (2003).
10. L. Faoro, L. Ioffe, and A. Kitaev, Phys. Rev. B **86**, 134414 (2012).
11. В. А. Ацаркин, Г. А. Васнева, В. В. Демидов, ЖЭТФ **91**, 1523 (1986).
12. В. Е. Зобов, М. А. Попов, Ю. Н. Иванов, А. И. Лифшиц, ЖЭТФ **115**, 285 (1999).
13. H. Hayashi, K. M. Itoh, and L. S. Vlasenko, Phys. Rev. B **78**, 153201 (2008).
14. P. W. Anderson, Phys. Rev. **82**, 342 (1951).
15. C. Kittel and E. Abrahams, Phys. Rev. **90**, 238 (1953).
16. Ф. С. Джепаров, А. А. Лундин, Т. Н. Хазанович, ЖЭТФ **92**, 554 (1987).
17. E. B. Fel'dman and S. Lacelle, J. Chem. Phys. **104**, 2000 (1996).
18. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, М. А. Веретенников, Письма в ЖЭТФ **98**, 543 (2013).
19. P. W. Anderson and P. R. Weiss, Rev. Mod. Phys. **25**, 269 (1953).
20. P. Résibois and M. De Leener, Phys. Rev. **152**, 305 (1966).
21. J. W. Tucker, J. Phys. C: Sol. State Phys. **11**, 521 (1978).
22. Ф. С. Джепаров, Е. К. Хеннер, ЖЭТФ **104**, 3667 (1993).
23. Дж. Займан, *Модели беспорядка*, Мир, М. (1982).
24. В. Е. Зобов, М. А. Попов, ТМФ **112**, 479 (1997).
25. В. Е. Зобов, ТМФ **123**, 116 (2000).
26. А. А. Лундин, Б. Н. Провоторов, ЖЭТФ **70**, 2201 (1976).