Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Вальков, А. Д. Федосеев, Термодинамические свойства двухслойных квазидвумерных антиферромагнетиков, *ТМФ*, 2011, том 168, номер 3, 417–427

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6690>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 02:25:46

© 2011 г.

В. В. Вальков^{*†}, А. Д. Федосеев^{*†}

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ КВАЗИДВУМЕРНЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Для бислойных квазидвумерных антиферромагнетиков типа YBaCuO в приближении Тябликова исследована зависимость энергетического спектра и температуры перехода в упорядоченное состояние как от параметра квазидвумерности, так и от интенсивности обменной связи спиновых моментов, находящихся в двух близко расположенных плоскостях. Предполагается, что обменные параметры внутри CuO_2 -плоскостей существенно превышают обменные параметры, приводящие к связи спинов из первой плоскости одной элементарной ячейки со спинами из второй плоскости другой элементарной ячейки. Полученные выражения для температуры Нееля и магнитного момента подрешетки при нулевой температуре описывают зависимости этих величин от параметров межплоскостных обменных взаимодействий.

Ключевые слова: антиферромагнетизм, высокотемпературные сверхпроводники, приближение Тябликова, функции Грина.

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединение $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ привлекло к себе внимание после обнаружения высокотемпературной сверхпроводящей фазы [1]. Исследования кристаллической структуры $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ привели к установлению двуслойности [2] этого соединения: в одной элементарной ячейке находятся две CuO_2 -плоскости на расстоянии $3.2 \text{ \AA}$ друг от друга. Эти плоскости ответственны за особенности транспортных и магнитных характеристик данной системы и разделены только ионом иттрия, в то время как плоскости, разделенные зарядовым резервуаром и принадлежащие разным элементарным ячейкам, находятся на расстоянии $8.2 \text{ \AA}$. Исследования магнитных свойств выявили наличие антиферромагнитного упорядочения в исследуемой системе при малом допировании [3]. Ионы меди Cu^{2+} в CuO_2 -плоскостях обладают спиновыми моментами $S = 1/2$, упорядочены антиферромагнитно, при этом спиновые моменты лежат в CuO_2 -плоскости без выделенного направления в ней.

^{*}Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия.
E-mail: fad@iph.krasn.ru

[†]Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнова, Красноярск, Россия

Термодинамические свойства двумерных антиферромагнетиков были исследованы в работе [4], в частности, было получено выражение для температуры Нееля T_N в зависимости от поля анизотропии и вычислена намагниченность при абсолютном нуле. Позже в работе [5] было показано, что в двумерном антиферромагнетике с легкоосной анизотропией $T_N \sim J/\ln(J/\lambda)$, где J – параметр обменного взаимодействия, λ – параметр анизотропии, и это соответствовало расчетам, проведенным в работе [4]. В статье [6] было исследовано влияние межплоскостного взаимодействия на свойства легкоосного квазидвумерного антиферромагнетика, получен спектр магновов и расчетное выражение для температуры Нееля, а также проведен численный расчет температуры Нееля и намагниченности при абсолютном нуле. Однако явного аналитического выражения для температуры Нееля как функции межплоскостного обменного параметра получено не было. Расчеты авторов были проведены для случая $S = 1$, соответствующего соединению K_2NiF_4 .

Исследования антиферромагнитных систем со спином $S = 1/2$ продолжаются и в настоящее время. Так, в работах [7], [8] было исследовано основное состояние двумерного антиферромагнетика для различных значений спинового момента. Одной из последних работ по изучению антиферромагнетиков со спином $S = 1/2$ была статья [9], в которой показана важность учета обменного взаимодействия со вторыми соседями в антиферромагнетиках с ГЦК-решеткой.

Исследования двухслойных систем с антиферромагнитным типом обменного взаимодействия были проведены в работах [10], [11]. В первой из этих работ рассмотрено поведение двухслойной спиновой системы в окрестности фазового перехода антиферромагнетик–парамагнетик. Во второй работе авторы сконцентрировали свое внимание на особенностях энергетического спектра системы в парамагнитной фазе и, как следствие, восприимчивости антиферромагнетика. Кроме того, в работе [11] показана ренормировка энергетического спектра допированием CuO_2 -плоскостей. Однако в обоих случаях взаимодействием между двухслойными системами пренебрегали.

В этой связи представляется актуальным исследование термодинамических свойств квазидвумерных двуслойных антиферромагнетиков, в которых параметр квазидвумерности определяется двумя обменными интегралами, характеризующими связи между спиновыми моментами из двух плоскостей одной элементарной ячейки, а также обменные связи между спиновыми моментами из плоскостей, относящихся к соседним элементарным ячейкам. Решению этой задачи посвящена настоящая работа.

2. МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА ДЛЯ ДВУСЛОЙНОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ СИСТЕМЫ

Рассмотрим подсистему спиновых моментов, соответствующую в упорядоченной фазе антиферромагнитному состоянию $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. Учитывая наличие в элементарной ячейке двух CuO_2 -плоскостей, проведем разбиение узлов, в которых находятся спиновые моменты, на две магнитные подрешетки F и G . Для определенности будем считать, что спиновые моменты, относящиеся к подрешетке F , ориентированы вдоль оси квантования, тогда как для подрешетки G спиновые моменты имеют противоположную ориентацию. При описании квазидвумерности и двуслойности системы для нумерации координат спиновых моментов будем использовать три индекса. Первый индекс (f, f', g, g') , отвечающий двум координатам, используется для

Рис. 1. Параметризация CuO_2 -плоскостей и нумерация узлов квазидвумерного двухслойного антиферромагнетика.

описания положения спинов в CuO_2 -плоскостях. Второй индекс (n) соответствует z -компоненте элементарной ячейки. Нумерация каждой из двух CuO_2 -плоскостей в одной элементарной ячейке осуществляется с помощью третьего индекса $\alpha = \pm 1$, при этом $\bar{\alpha} = -\alpha$. Соответствие между значением индекса α и положением плоскости в элементарной ячейке показано на рис. 1.

Гамильтониан Гейзенберга, характеризующий магнитную подсистему квазидвумерного двухслойного антиферромагнетика, зададим в виде $H = H_{\text{in}} + H_{\text{ext}}$, где оператор H_{in} описывает совокупность не связанных между собой двумерных спиновых подсистем с обменным взаимодействием между спиновыми моментами, принадлежащими одной плоскости (индексы n, α фиксированы),

$$H_{\text{in}} = \sum_{n, \alpha} \left[\sum_{f, g} J_{fg} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{gn\alpha}) - \frac{1}{2} \sum_{f, f'} I_{ff'} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{f'n\alpha}) - \frac{1}{2} \sum_{g, g'} I_{gg'} (\vec{S}_{gn\alpha} \vec{S}_{g'n\alpha}) \right],$$

а $H_{\text{ext}} = H_{\text{ext}}^{(1)} + H_{\text{ext}}^{(2)}$ учитывает обменные связи между спиновыми моментами, находящимися в разных плоскостях:

$$H_{\text{ext}}^{(1)} = \sum_{n, \alpha} \left\{ \sum_{f, g} K_{fg} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{gn\bar{\alpha}}) - \frac{1}{2} \sum_{f, f'} L_{ff'} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{f'n\bar{\alpha}}) - \frac{1}{2} \sum_{g, g'} L_{gg'} (\vec{S}_{gn\alpha} \vec{S}_{g'n\bar{\alpha}}) \right\},$$

$$H_{\text{ext}}^{(2)} = \sum_{n, \alpha} \left\{ \sum_{f, g} K'_{fg} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{g(n+\alpha)\bar{\alpha}}) - \frac{1}{2} \sum_{f, f'} L'_{ff'} (\vec{S}_{fn\alpha} \vec{S}_{f'(n+\alpha)\bar{\alpha}}) - \frac{1}{2} \sum_{g, g'} L'_{gg'} (\vec{S}_{gn\alpha} \vec{S}_{g'(n+\alpha)\bar{\alpha}}) \right\}.$$

При этом оператор $H_{\text{ext}}^{(1)}$ учитывает обменное взаимодействие между спиновыми моментами, находящимися в двух близко расположенных плоскостях (см. рис. 1), тогда как оператор $H_{\text{ext}}^{(2)}$ описывает обменные связи спинов между ближайшими плоскостями из разных элементарных ячеек. Константы J_{fg} , $I_{gg'}$ и $I_{ff'}$ отвечают внутрислобностному обменному взаимодействию между спинами, принадлежащими разным подрешеткам и одной подрешетке соответственно, константы K_{fg} , $L_{ff'}$, $L_{gg'}$ – взаимодействию между ионами в ближайших плоскостях, константы K'_{fg} , $L'_{ff'}$, $L'_{gg'}$ – взаимодействию в плоскостях, находящихся в соседних элементарных ячейках. В дальнейшем будем считать, что константы обменного взаимодействия отвечают антиферромагнитному упорядочению как в плоскостях, так и в направлении, перпендикулярном к плоскостям.

Отметим, что подрешетки F и G в соседних плоскостях смещены на вектор немагнитной элементарной ячейки, расположенный перпендикулярно к оси z . Таким образом, под ионом подрешетки F находится ион подрешетки G . Эта особенность проявляется при переходе в квазиимпульсное представление.

Для нахождения спектра элементарных возбуждений запишем в приближении Тябликова [12] уравнения движения для спиновых операторов $S_{fn\alpha}^+$, $S_{gn\alpha}^+$:

$$\begin{aligned} i\dot{S}_{fn\alpha}^+ &= (J_0 + I_0 + K_0 + L_0)RS_{fn\alpha}^+ + R\sum_g J_{fg}S_{gn\alpha}^+ - R\sum_{f'} I_{ff'}S_{f'n\alpha}^+ + \\ &+ R\sum_g (K_{fg}S_{gn\bar{\alpha}}^+ + K'_{fg}S_{g(n+\alpha)\bar{\alpha}}^+) - R\sum_{f'} (L_{ff'}S_{f'n\bar{\alpha}}^+ + L'_{ff'}S_{f'(n+\alpha)\bar{\alpha}}^+), \\ i\dot{S}_{gn\alpha}^+ &= -(J_0 + I_0 + K_0 + L_0)RS_{gn\alpha}^+ - R\sum_f J_{fg}S_{fn\alpha}^+ + R\sum_{g'} I_{gg'}S_{g'n\alpha}^+ - \\ &- R\sum_f (K_{fg}S_{fn\bar{\alpha}}^+ + K'_{fg}S_{f(n+\alpha)\bar{\alpha}}^+) + R\sum_{g'} (L_{gg'}S_{g'n\bar{\alpha}}^+ + L'_{gg'}S_{g'(n+\alpha)\bar{\alpha}}^+). \end{aligned}$$

В рассматриваемом приближении корреляционные эффекты не учитываются. Выход за рамки отмеченного приближения может быть реализован в методе неприводимых функций Грина [13]. При записи уравнений движения были введены обозначения

$$\begin{aligned} J_0 &= \sum_g J_{fg}, & I_0 &= \sum_{f'} I_{ff'} = \sum_{g'} I_{gg'}, \\ K_0 &= \sum_g (K_{fg} + K'_{fg}), & L_0 &= \sum_{f'} (L_{ff'} + L'_{ff'}) \end{aligned}$$

и $R = \langle S_f^z \rangle = -\langle S_g^z \rangle$, где R – средняя величина проекции на ось квантования спинового момента иона, принадлежащего подрешетке F , в антиферромагнитной фазе.

Для вычисления термодинамических характеристик воспользуемся методом двухвременных запаздывающих функций Грина, построенных на спиновых операторах [12]. Определим обычным образом функцию Грина

$$\langle\langle S_{ln\alpha}^+(t) | S_{jm\beta}^-(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[S_{ln\alpha}^+, S_{jm\beta}^-]\rangle$$

и проведем преобразование Фурье

$$G(E, q)_{A\alpha B\beta} = \frac{4}{N} \sum_q \int \langle\langle S_{ln\alpha}^+(t) | S_{jm\beta}^-(t') \rangle\rangle e^{iE(t-t') - iq(R_{ln\alpha} - R_{jm\beta})} dE.$$

Здесь индексы A и B принимают значение F или G в зависимости от принадлежности ионов с индексами $ln\alpha$ и $jm\beta$ к той или иной магнитной подрешетке.

Вводя обозначения для параметров обменного взаимодействия в квазиимпульсном представлении,

$$\begin{aligned}\tilde{J}_0(q) &= J_0 + I_0 + K_0 + L_0 - \tilde{I}(q), \\ \tilde{I}(q) &= \sum_{f'} I_{ff'} e^{-iq(R_{fn\alpha} - R_{f'n\alpha})}, \quad \tilde{J}(q) = \sum_g J_{fg} e^{-iq(R_{fn\alpha} - R_{gn\alpha})}, \\ \tilde{K}(q) &= \sum_g K_{fg} e^{-iq(R_{fn(-1)} - R_{gn1})} + \sum_g K'_{fg} e^{-iq(R_{fn(-1)} - R_{g(n-1)1})}, \\ \tilde{L}(q) &= \sum_{f'} L_{ff'} e^{-iq(R_{fn(-1)} - R_{f'n1})} + \sum_{f'} L'_{fg} e^{-iq(R_{fn(-1)} - R_{f'(n-1)1})},\end{aligned}$$

получим следующее выражение для энергетического спектра системы квазидвумерного двухслойного антиферромагнетика $E(q)$:

$$E_{1,2}^2(q) = R^2(\tilde{J}_0^2 + |\tilde{L}|^2 - \tilde{J}^2 - |\tilde{K}|^2 \pm D(q)),$$

где

$$D(q) = [4\tilde{J}^2|\tilde{K}|^2 - 2|\tilde{L}|^2|\tilde{K}|^2 + 4\tilde{J}_0^2|\tilde{L}|^2 - 4\tilde{J}_0\tilde{J}(\tilde{K}\tilde{L}^* + \tilde{L}\tilde{K}^*) + \tilde{K}^2(\tilde{L}^*)^2 + \tilde{L}^2(\tilde{K}^*)^2]^{1/2}.$$

3. АНТИФЕРРОМАГНЕТИК БЕЗ ФРУСТРАЦИЙ

Ограничимся приближением ближайших соседей. Тогда параметры обменного взаимодействия в квазиимпульсном представлении принимают следующий вид:

$$\begin{aligned}\tilde{J}(q) &= 4J_1 \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2}, \quad \tilde{I}(q) = 0, \quad \tilde{L}(q) = 0, \\ \tilde{K}(q) &= K e^{-iq_z \delta_\perp} + K' e^{iq_z \delta'_\perp}, \quad |\tilde{K}(q)|^2 = K^2 + (K')^2 + 2KK' \cos q_z,\end{aligned}$$

а $\tilde{J}_0(q)$ перестает зависеть от квазиимпульса: $\tilde{J}_0 = 4J_1 + K + K'$, где J_1 – константа обменного взаимодействия между ближайшими спиновыми моментами в одной плоскости, K и K' – константы взаимодействия в соседних плоскостях, $\delta_\perp$ и $\delta'_\perp$ – расстояния между соответствующими плоскостями (в единицах высоты элементарной ячейки).

В рассматриваемом случае выражение для энергетического спектра принимает вид

$$E_{1,2}(q) = R\omega_{1,2}, \quad \omega_{1,2} = \sqrt{\tilde{J}_0^2 - (\tilde{J} \pm |\tilde{K}|)^2}.$$

Это выражение в пределе $K' = 0$ совпадает с выражением для энергетического спектра, полученным в работе [14]. Энергетический спектр характеризуется двумя ветвями, одна из которых является голдстоуновской с нулевой щелью. При малых значениях квазиимпульса для этой ветви $E_q \sim q$.

При значении спинового момента $S = 1/2$ уравнение самосогласования может быть представлено в виде

$$\langle S_{fn\alpha}^+ S_{fn\alpha}^- \rangle = \frac{1}{2} + \langle S_{fn\alpha}^z \rangle.$$

Входящий в это уравнение спиновый коррелятор в силу спектральной теоремы записывается в виде

$$\langle S_{fn\alpha}^+ S_{fn\alpha}^- \rangle = \frac{4}{N} \sum_q \int \frac{e^{E/T}}{e^{E/T} - 1} \left\{ -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{F\alpha F\alpha} \right\} dE,$$

где функция Грина $G_{F\alpha F\alpha}$ определяется выражением

$$G_{F\alpha F\alpha} = \frac{2R(E + \tilde{J}_0 R)(E^2 - R^2(\tilde{J}_0^2 - \tilde{J}^2 - |\tilde{K}|^2))}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}.$$

После простых вычислений получаем уравнение самосогласования:

$$R = \frac{1}{I_1 + I_2}, \quad I_j = \frac{4}{N} \sum_q \frac{\tilde{J}_0}{\omega_j} \operatorname{cth} \frac{\omega_j R}{2T}, \quad j = 1, 2. \quad (1)$$

Полученное уравнение позволяет найти температуру Нееля T_N и намагниченность подрешеток $R(0)$ при абсолютном нуле. Выражение для температуры Нееля определяется условием обращения в ноль величины R . При $R \rightarrow 0$ в разложении гиперболического котангенса в ряд по малому параметру можно ограничиться первым членом разложения: $\operatorname{cth}(\omega_j R/2T) \simeq 2T/\omega_j R$. В результате выражение для температуры Нееля для двуслойного антиферромагнетика в приближении ближайших соседей имеет следующий вид:

$$T_N = \left(2\tilde{J}_0 \frac{4}{N} \sum_q \left[\frac{1}{\omega_1^2} + \frac{1}{\omega_2^2} \right] \right)^{-1}.$$

Отсюда следует, что в случае расходимости интеграла антиферромагнитная фаза отсутствует, и система представляет собой спиновую жидкость [7], [8]. Нетрудно убедиться, что интеграл, задаваемый бесщелевой ветвью энергетического спектра, в двумерном случае (когда хотя бы один из параметров K , K' обращается в ноль) в окрестности $q = 0$ имеет логарифмическую расходимость. Это соответствует отсутствию температуры магнитного перехода. Если оба параметра K , K' отличны от нуля, то интеграл имеет конечное значение, и температура Нееля также конечна.

Если $K = K'$, то выражение для $\tilde{K}$ упрощается, $\tilde{K} = 2K \cos(q_z/2)$, и интегралы по q_z берутся в явном виде:

$$I_1 = \frac{1}{\pi^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{A_- + 2K}{A_- - 2K}}}{\sqrt{A_-^2 - (2K)^2}} + \frac{\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{A_+ - 2K}{A_+ + 2K}}}{\sqrt{A_+^2 - (2K)^2}} \right] dq_x dq_y,$$

$$I_2 = \frac{1}{\pi^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{A_- - 2K}{A_- + 2K}}}{\sqrt{A_-^2 - (2K)^2}} + \frac{\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{A_+ + 2K}{A_+ - 2K}}}{\sqrt{A_+^2 - (2K)^2}} \right] dq_x dq_y,$$

где для краткости введены обозначения $A_{\pm} = 4J_1(1 \pm \cos(q_x/2) \cos(q_y/2)) + 2K$.

В квазидвумерном случае, когда $K \ll J_1$, значения интегралов I_1 и I_2 будут определяться слагаемыми, содержащими A_- , поскольку именно эти слагаемые дают

логарифмическую расходимость интегралов в окрестности точки $q_x = q_y = 0$ при $K = 0$. В принятом приближении эти интегралы преобразуются к виду

$$I_{1,2}^{(1)} = \frac{1}{\pi J_1} \int_0^{\sqrt{J_1 Q/8K}} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}},$$

где Q – радиус области, в которой применимо разложение $\cos(q_x/2) \cos(q_y/2) = 1 - q^2/8$, $q^2 = q_x^2 + q_y^2$, а отношение параметров $K/J_1 \ll Q^2$. В этом случае сумма интегралов равна

$$I_1^{(1)} + I_2^{(1)} = \frac{1}{\pi J_1} \ln \frac{J_1}{K}.$$

Тогда температура Нееля в случае $K' = K \ll J_1$ определяется выражением

$$T_N = \frac{\pi J_1}{\ln(J_1/K) + C_1},$$

где C_1 – константа, определяемая вкладами от неучтенных слагаемых в интегралах I_1 и I_2 и интегралами за пределами рассмотренной области радиуса Q . Оценка этих вкладов для $Q = 0.1$ дает $C_1 \approx 3.5$.

Перейдем к рассмотрению случая, когда двуслойность системы проявляется наиболее ярко, т. е к тому случаю, когда одно из межплоскостных обменных взаимодействий намного слабее другого: $K' \ll K$. Тогда $\tilde{K} = K + K' \cos q_z$, и интегралы I_1 и I_2 принимают вид

$$I_1 = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{1}{\sqrt{A_-^2 - (K')^2}} + \frac{1}{\sqrt{A_+^2 - (K')^2}} \right] dq_x dq_y,$$

$$I_2 = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{1}{\sqrt{B_-^2 - (K')^2}} + \frac{1}{\sqrt{B_+^2 - (K')^2}} \right] dq_x dq_y,$$

где, как и в рассмотренном выше случае, для упрощения записи введены сокращенные обозначения

$$A_{\pm} = 4J_1 \left(1 \pm \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} \right) + K' + K \pm K,$$

$$B_{\pm} = 4J_1 \left(1 \pm \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} \right) + K' + K \mp K.$$

Аналогично случаю $K' = K \ll J_1$ в случае $K' \ll K \ll J_1$ нетрудно получить выражения для интересующих нас интегралов:

$$I_1^{(1)} + I_2^{(1)} = \frac{1}{\pi J_1} \ln \frac{J_1}{\sqrt{K'K}}.$$

Температура Нееля при этом примет вид

$$T_N = \frac{\pi J_1}{\ln(J_1/\sqrt{K'K}) + C_2}. \quad (2)$$

Нетрудно убедиться, что $C_2 \approx C_1$ при $K \ll J_1$.

Рис. 2. Зависимость температуры Нееля от отношения $\sqrt{K'K}/J_1$. Линия 1 соответствует численному решению при $K' = K$, линия 2 задается формулой (2), а линия 3 – решению при $K' = K/10$.

Как видно, в обоих предельных случаях получился один и тот же результат, и это позволяет предположить, что для любого соотношения между K и K' при условии $K, K' \ll J_1$ температура Нееля имеет одинаковую зависимость вида (2) (см. рис. 2). Приведенный на рис. 2 график качественно совпадает с графиком, полученным в работе [6] для спина $s = 1$.

Из уравнения самосогласования (1) можно найти выражение, определяющее значение проекции спинового момента при температуре, стремящейся к нулю:

$$R(0) = \left(\sum_j W_j \right)^{-1}, \quad W_j = \frac{4}{N} \tilde{J}_0 \sum_q \frac{1}{\omega_j}, \quad j = 1, 2. \quad (3)$$

Как и выше, будем работать в области квазидвумерности $K, K' \ll J_1$. Тогда интегралы, входящие в (3), можно представить как сумму:

$$W_j = W_{2D} + \Delta W_j, \quad W_{2D} = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{dq_x dq_y}{\sqrt{1 - (\cos(q_x/2) \cos(q_y/2))^2}}.$$

Здесь W_{2D} – интеграл в двумерном случае, а ΔW_j – поправка к нему. Очевидно, значимая часть поправки будет возникать при интегрировании в окрестности точки $q_x = q_y = 0$. Имея это в виду, рассмотрим интеграл W_1 в цилиндрической области

с радиусом Q и высотой 2π :

$$W_{1Q} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^Q \int_{-\pi}^{\pi} \frac{q dq dq_z}{\sqrt{q^2 + 2(K + K')(1 - \gamma_z)/J_1}} \approx \\ \approx \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \left(Q - \sqrt{\frac{2(K + K')}{J_1}(1 - \gamma_z)} \right) dq_z,$$

где

$$\gamma_z = \sqrt{1 - \frac{2K'K(1 + \cos q_z)}{(K + K')^2}}.$$

Записывая аналогичное выражение W_{2Q} для интеграла W_2 , получим искомую поправку к интегралам:

$$\Delta W_1 + \Delta W_2 \approx -\frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{2(K + K')}{J_1}} \int_0^{\pi} (\sqrt{1 - \gamma_z} + \sqrt{1 + \gamma_z}) dq_z.$$

Величина проекции спинного момента $R(0)$ при абсолютном нуле и малых значениях параметров межплоскостного обменного взаимодействия определяется выражением

$$R(0) \approx R_{2D}(0) + R_{2D}^2(0)|\Delta W_1 + \Delta W_2|,$$

где

$$\Delta W_1 + \Delta W_2 \approx \begin{cases} -\frac{8}{\pi^2} \sqrt{\frac{2K}{J_1}}, & K' = K, \\ -\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{K}{J_1}} \left(1 + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{K'}{K}} \right), & K' \ll K, \end{cases}$$

а $R_{2D}(0)$ – намагниченность при абсолютном нуле в двумерном случае.

Рассмотрим поведение проекции спинного момента R как функции температуры при малых температурах и при температурах, близких к T_N . В низкотемпературном пределе выражение для R имеет вид

$$R(T)|_{T \rightarrow 0} = \left(\frac{4}{N} \tilde{J}_0 \sum_q \left[\frac{1}{\omega_1} + \frac{1}{\omega_2} \right] + \Delta I \right)^{-1},$$

где

$$\Delta I = 2\tilde{J}_0 \int \frac{g(\omega)}{\omega} e^{-R(0)\omega/T} (1 + e^{-R(0)\omega/T}) d\omega,$$

в котором учтено, что при малых температурах можно ограничиться только возбуждениями магнонов, соответствующих бесщелевому энергетическому спектру, поскольку щель имеет порядок $\sqrt{KJ_1}$; в последнем равенстве $g(\omega)$ – плотность состояний,

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \delta(\omega - \omega_1(q)) dq_x dq_y dq_z.$$

В низкоэнергетической области плотность состояний может быть записана в виде

$$g(\omega) = \frac{\omega^2}{(4\pi J_1)^2 \sqrt{J_1 K' K / (K + K')}}.$$

Тогда искомый интеграл ΔI равен

$$\Delta I = \frac{5}{4} \frac{T^2}{2\pi^2 R^2(0) J_1 \sqrt{J_1 K' K / (K + K')}}.$$

При этом окончательное выражение для низкотемпературной намагниченности под-решетки приобретает вид

$$R(T) = R(0) - \alpha T^2, \quad \alpha = \frac{5}{8\pi^2} \frac{1}{J_1} \frac{1}{\sqrt{K J_1}} \sqrt{\frac{K + K'}{K'}}.$$

В окрестности температуры Нееля выражение для намагниченности имеет вид, соответствующий теории Ландау:

$$R(T) = \sqrt{3 \frac{T_N - T}{\tilde{J}_0}}.$$

4. ВЫВОДЫ

В работе исследованы термодинамические свойства квазидвумерного двуслойно-го антиферромагнетика. Впервые получено аналитическое выражение температуры Нееля T_N как функции двух констант межплоскостных обменных взаимодействий K и K' в пределе $K, K' \ll J_1$. Показано, что температура Нееля выражается через среднее геометрическое значение межплоскостных обменных параметров, определяющих двуслойность системы. Установлено, что в низкотемпературной области коэффициент при квадратичном по температуре члене, описывающем уменьшение намагниченности, неаналитичным образом выражается через комбинации обменных параметров.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-02-00251), Программы фундаментальных исследований Президиума РАН “Квантовая физика конденсированных сред”, Интеграционного проекта СО РАН № 53 и Федеральной целевой программы Министерства образования и науки РФ “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 гг. А. Д. Федосеев выражает благодарность Программе поддержки молодых ученых – кандидатов наук (грант МК-1300.2011.2) и конкурсу Лаврентьева молодежных проектов СО РАН.

Список литературы

- [1] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**:9 (1987), 908–910.
- [2] J. D. Jorgensen, B. W. Veal, A. P. Paulikas, L. J. Nowicki, G. W. Crabtree, H. Claus, W. K. Kwok, *Phys. Rev. B*, **41**:4 (1990), 1863–1877.
- [3] J. M. Tranquada, A. H. Moudden, A. I. Goldman, P. Zolliker, D. E. Cox, G. Shirane, S. K. Sinha, D. Vaknin, D. C. Johnston, M. S. Alvarez, A. J. Jacobson, J. T. Lewandowski, J. M. Newsam, *Phys. Rev. B*, **38** (1988), 2477–2485.
- [4] M. E. Lines, *Phys. Rev. A*, **135**:5A (1964), A1336–A1346.
- [5] С. Б. Хохлачев, *ЖЭТФ*, **70**:1 (1976), 265–271.
- [6] О. Г. Петраковский, С. Г. Овчинников, *ФТТ*, **29** (1987), 1866.
- [7] H. Shimahara, S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **60**:7 (1991), 2394–2405.

- [8] A. F. Barabanov, O. A. Starykh, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **61**:2 (1992), 704–708.
- [9] Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников, Д. Дж. Сингх, *ЖЭТФ*, **123** (2003), 1278–1285.
- [10] A. W. Sandvic, A. V. Chubukov, S. Sachdev, *Phys. Rev. B*, **51**:22 (1995), 16483–16486, arXiv: cond-mat/9502012.
- [11] Н. А. Козлов, А. Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ*, **85**:11 (2007), 673–678.
- [12] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1975.
- [13] Н. М. Плакида, *ТМФ*, **5**:1 (1970), 147–153.
- [14] S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, H. A. Mook, F. Dogan, *Phys. Rev. B*, **54**:10 (1996), R6905–R6908, arXiv: cond-mat/9605139.

Поступила в редакцию 1.03.2011