ЖЭТФ, 2003, том 124, вып. 5 (11), стр. 1080–1089

НЕАДИАБАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ СО СПИНАМИ $S = 1/2$ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

С. С. Аплеснин [*]

Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 27 февраля 2003 г.

Исследуется основное состояние двумерного антиферромагнетика со спинами $S = 1/2$, взаимодействующими с акустическими фононами в неадиабатическом приближении квантовым методом Монте-Карло. Определены критические параметры спин-фононной связи, соответствующие образованию связанных спин-фононных возбуждений, понижению кристаллической симметрии и открытию щели в спектре спиновых возбуждений, переходу антиферромагнетик – квантовая спиновая жидкость. Вычислены параметр орторомбичности, подрешеточная намагниченность, нарушение сферической симметрии спин-спиновых корреляционных функций, магнитный момент в Gd_2CuO_4, Eu_2CuO_4.

PACS: 75.10.Jm, 75.50.Ee, 75.40.Mg, 63.20.Ls

1. ВВЕДЕНИЕ

Интенсивные исследования электронных, упругих и магнитных свойств высокотемпературных сверхпроводников и манганитов с колоссальным магнитосопротивлением приводят к общему мнению о тесной взаимосвязи электронной структуры с магнитными и решеточными флуктуациями. В слабодопированных купратных сверхпроводниках одной из гипотез является образование квазищели за счет образования связанных спин-фононных возбуждений. Это подтверждают данные оптических измерений [1]: так, рамановские спектры объясняются на основе связанных возбуждений в системе, состоящей из двух магнонов и фонона. В области низких температур наблюдается ряд структурных искажений, вызванных модуляцией решетки, и сверхструктурные рефлексы имеют тетрагональную симметрию и симметрию ниже орторомбической. Для $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$ эти переходы существуют в нормальной фазе при $T < 80$ К [2]. В соединениях $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, $x < 0.05$ наблюдается изотопический эффект, сравнимый по величине с эффектом в обычных сверхпроводниках [3]. Другая особенность слабодопированных купратных сверхпроводников связана с теплопроводностью, которая не описывается теорией ферми-жидкости и подразумевает существование неких делокализованных квазичастиц [4]. Эти экспериментальные факты указывают на два характерных энергетических масштаба: электрон-фононное и спин-фононное взаимодействия.

Некоторые особенности магнитных свойств наблюдаются и в родственных соединениях с тетрагональной T'-структурой и CuO-плоскостями в R_2CuO_4, R = Eu, Gd, Nd, которые могут быть связаны с взаимодействием решеточных флуктуаций со спиновыми. Для этих соединений характерна низкая величина магнитного момента ионов меди, $\sigma \approx 0.4$, с довольно высокой температурой Нееля $T_N \approx 230$–280 К. Наблюдаются сильный ангармонизм локальных смещений в плоскости CuO в интервале температур 145 К $< T <$ 175 К при отсутствии структурных переходов вплоть до $T = 393$ К и минимум в температурной зависимости квадрата средних смещений ионов меди вдоль направления [100] при $T = 175$ К [5], вызванный антиферромагнитными спиновыми флуктуациями. В антиферромагнетике Gd_2CuO_4 с тетрагональной симметрией

[*] E-mail: apl@iph.krasn.ru

наблюдается электронный спиновый резонанс при $\omega_0 = 18.2$ см$^{-1}$ [6], который объясняется орторомбическим искажением плоскостей решетки, со стохастическим расположением векторов орторомбичности вдоль оси c. При температуре $T = 20$ К резонанс исчезает и восприимчивость резко возрастает [7], что объясняется когерентным состоянием ортоломбичности, хотя упругое рассеяние нейтронов и рентгеновские исследования не подтверждают этого. Возможно, эти эффекты связаны с образованием связанных спин-фононных квазичастиц, т. е. динамически связанных между собой решеточных и спиновых флуктуаций.

Антиферромагнетики со спин-фононным взаимодействием рассматривались в адиабатическом приближении, в рамках которого взаимодействие спинов с акустическими фононами сводится к четырехспиновому обменному взаимодействию и эффективному взаимодействию между спинами соседей, следующих за ближайшими. При определенных параметрах в этой модели образуется состояние спинового нематика с нарушением сферической симметрии спин-спиновых корреляционных функций [8] и исчезает дальний магнитный порядок [9]. Взаимодействие между спиновой и упругой подсистемами приводит к нелинейным взаимодействиям не только между спинами, но и между фононами. Поэтому корректное решение необходимо провести с учетом неадиабатического взаимодействия между спинами и фононами, что возможно проделать с использованием квантового метода Монте-Карло на основе алгоритма с непрерывным временем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

Для квазидвумерных магнетиков межплоскостной обмен по отношению к внутриплоскостному на несколько порядков меньше, и поэтому можно ограничиться взаимодействием между спинами ближайших соседей и с акустическими модами колебаний в плоскости решетки. Гамильтониан для связанной спин-фононной системы в гармоническом приближении имеет вид

$$
\begin{aligned}
H = \sum_{i,j} [J + \alpha(u_{i,j} - u_{i+1,j})] \times \\
\times \left[S^z_{i,j} S^z_{i+1,j} + \frac{1}{2}(S^+_{i,j} S^-_{i+1,j} + S^-_{i,j} S^+_{i+1,j}) \right] + \\
+ [J + \alpha(u_{i,j} - u_{i,j+1})] \times \\
\times \left[S^z_{i,j} S^z_{i,j+1} + \frac{1}{2}(S^+_{i,j} S^-_{i,j+1} + S^-_{i,j} S^+_{i,j+1}) \right] + \\
+ \frac{1}{2} M \dot{u}^2_{i,j} + \frac{1}{2} K (u_{i,j} - u_{i+1,j})^2 + \frac{1}{2} K (u_{i,j} - u_{i,j+1})^2, \quad (1)
\end{aligned}
$$

где $S^{z,\pm}$ — компоненты оператора спина $S = 1/2$ на узле решетки, $u_{i,j}$ — смещение иона по векторам трансляции решетки, M — масса иона и K — константа упругой жесткости решетки, $J > 0$. От переменных $u_{i,j}$, используя каноническое преобразование

$$
\hat{u}_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega(\mathbf{q})}} (b_{\mathbf{q}} + b^\dagger_{-\mathbf{q}})\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2)
$$

перейдем к операторам рождения $b^\dagger$ и уничтожения b фононов с импульсами $q_\beta = 2\pi n/L$, $n = 1, 2, \ldots, L$, $\beta = x, y$, постоянная решетки $a = 1$. Преобразованный гамильтониан имеет вид

$$
\begin{aligned}
H = \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{q_x, q_y} \sum_{n,m} \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega(\mathbf{q})}}\, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \times \\
\times (b_{\mathbf{q}} + b^+_{-\mathbf{q}}) [(1 - \cos q_x - i \sin q_x) \mathbf{S}_{n,m} \cdot \mathbf{S}_{n+1,m} + \\
+ (1 - \cos q_y - i \sin q_y) \mathbf{S}_{n,m} \cdot \mathbf{S}_{n,m+1}] + \\
+ \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega(\mathbf{q}) b^\dagger_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}, \quad (3)
\end{aligned}
$$

где

$$
\Omega(\mathbf{q}) = \omega_0 \sqrt{2 - \cos q_x - \cos q_y}, \quad \omega_0 = \sqrt{2K/M}.
$$

В вычислениях используются нормированные на обмен константа α спин-фононного взаимодействия и энергия ω возбуждений. В качестве метода расчета выбран квантовый метод Монте-Карло, объединяющий алгоритмы мировых линий и непрерывного времени [10] на плоскости размером $N = 32 \cdot 32$ с периодическими граничными условиями при температуре $\beta = J/T = 50$. Согласно этому методу, гамильтониан разбивается на три части: диагональную

$$
H_0 \propto J S^z_i S^z_j + \hbar\Omega(\mathbf{q}) n_{\mathbf{q}},
$$

где $n_{\mathbf{q}}$ — число заполнения фононов на одном импульсе, и две недиагональные:

$$
V_J \propto \frac{J}{2}(S^+_i S^-_j + S^-_i S^+_j),
$$

$$
V_\alpha \propto \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega(\mathbf{q})}} (b_{\mathbf{q}} + b^\dagger_{-\mathbf{q}}) \hat{S}_i \hat{S}_j.
$$

Применяя формулу Троттера [11], можно пренебречь коммутацией операторов V_j и V_α с точностью $\tau_0^2 \alpha J/(2\sqrt{\omega_0})$. Это приведет к систематической ошибке, максимальная величина которой для $\alpha = 4$, $\omega_0 = 8$, $\tau_0 = 0.5$ составит около 15%. Далее, аналогично работе [10], на отрезке мнимого времени τ_0 выразим операторы $\exp[-\tau_0(H_0/2 + V_J)]$ и $\exp[-\tau_0(H_0/2 + V_\alpha)]$ через оператор эволюции σ_{ev} в представлении взаимодействия $\exp(-\tau_0 H) = \exp(-\tau_0 H_0)\sigma_{ev}$, где

$$\sigma_{ev} = 1 - \int_0^{\tau_0} d\tau\, V_{J,\alpha}(\tau) + \ldots + (-1)^m \times \\ \times \int_0^{\tau_0} d\tau_m \ldots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 V_{J,\alpha}(\tau_m) \ldots V_{J,\alpha}(\tau_1) + \ldots, \quad (4)$$

где

$$V_{J,\alpha}(\tau) = e^{\tau H_0} V_{J,\alpha} e^{-\tau H_0}, \quad V_{J,\alpha}|\beta\rangle = -q_{\gamma\beta}(J,\alpha)|\gamma\rangle.$$

Суммирование и интегрирование двух операторов, V_J и V_α, в (4) осуществляется с помощью стохастической процедуры перебора различных конфигураций кинк–антикинк в соответствии с их весами. Вероятность образования пары кинк–антикинк

$$W = |q_{\gamma\beta}(J,\alpha)|^2 \exp[(\tau_2 - \tau_1)E_{\gamma\beta}], \quad \tau_2 - \tau_1 < \tau_0.$$

Возможен подпроцесс сдвига кинка по оси времени с вероятностью $W = \exp(\Delta\tau E_{\gamma\beta})$. Использование глобальных переворотов спина на узле и изменение числа заполнения фононов с импульсом q приводят к конечной вероятности переходов $W \sim q_{\gamma\beta}$ на интервале τ_0. В результате меняется суммарная проекция спина и образуются разрывы мировых линий с четным числом. Поскольку в процессе вычислений получается только четное число недиагональных изменений траекторий $q_{\gamma\beta}^{2n}(J)$ и $q_{\gamma\beta}^{2n}(\alpha)$, удается избежать проблемы знака «минус» за счет увеличения систематической погрешности. В качестве собственной функции гамильтониана H_0 выбирается S^z-представление спинов «↑», «↓», а числа заполнения фононов на одном импульсе $n_{\mathbf{q}} = 0, 1, 2, \ldots$ (максимум не ограничен).

Спектральную плотность магнитных и спин-фононных возбуждений определим из соответствующих временных корреляционных функций, вычисленных в мнимом времени для $\tau > 0$. Определим спиновый коррелятор в виде

$$\langle S^-(\tau)S^+(0)\rangle = \\ = \sum_\nu |\langle\nu|S^+|\mathrm{vac}\rangle|^2 \exp[-(E_\nu - E_0)\tau], \quad (5)$$

где $|\nu\rangle$ — полный набор собственных состояний гамильтониана H_0, $H_0|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle$, $H_0|\mathrm{vac}\rangle = E_0|\mathrm{vac}\rangle$. В качестве вакуумного состояния выбирается неелевское расположение спинов с энергией $E_0/NJ = 1/4$. Переопределим (5) в виде

$$\begin{aligned} &\langle S^-(\tau)S^+(0)\rangle = \int_0^\infty d\omega\, \rho_s(\omega) e^{-\omega\tau}, \\ &\rho_s(\omega) = \sum_\nu \delta(\omega - \Omega_\nu)|\langle\nu|S^+|\mathrm{vac}\rangle|^2, \\ &\Omega_\nu = E_\nu - E_0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\rho_s(\omega)$ определяет спектральную плотность магнитных возбуждений. Под спин-фононными возбуждениями будем подразумевать связанные возбуждения спинов, возникающие в результате действия операторов $\hat{S^z}, \hat{S^+}$, и фононов, индуцируемых операторами рождения $b^\dagger$, на волновую функцию вакуума $n_{\mathbf{q}} = 0$. Представим временные корреляторы в виде

$$\begin{aligned} &\langle b(\tau)S^z(\tau)b^\dagger(0)S^z(0)\rangle = \sum_\nu |\langle\nu|b^\dagger S^z|\mathrm{vac}\rangle|^2 \times \\ &\quad \times \exp[-(E_\nu - E_0)\tau], \quad \tau \ge 0, \\ &\langle b(\tau)S^-(\tau)b^\dagger(0)S^+(0)\rangle = \sum_\gamma |\langle\nu|b^\dagger S^+|\mathrm{vac}\rangle|^2 \times \\ &\quad \times \exp[-(E_\gamma - E_0)\tau], \quad \tau \ge 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Аналогично (6) определим спектральную плотность связанных спин-фононных возбуждений,

$$\rho_{sp}(\omega) = \rho_{bS^z}(\omega) + \rho_{bS^+}(\omega).$$

Методом Монте-Карло фактически вычисляется временной коррелятор на конечном интервале $0 < \tau < \tau_0$. Чтобы воспроизвести спектральную плотность в широком интервале энергий, необходимо решить интегральное уравнение (6). Для этого воспользуемся методом стохастической процедуры, оптимизирующей отклонение [12]

$$D = \int_0^{\tau_0} |G(\tau) - G_t(\tau)| G^{-1}(\tau)\, d\tau \quad (8)$$

вычисленного коррелятора $G(\tau)$ от истинного коррелятора $G_t(\tau)$ со спектральной плотностью $\rho_t(\omega)$.

Для вычисления недиагональных операторов используем симметризованное представление волновой функции в интервале мнимого времени τ_0. Так, собственное значение операторов $(b_{\mathbf{q}}^\dagger, b_{\mathbf{q}})$ при $\tau \to 0$ ищем на базисе функций

$$\nu(\tau_i) = c_1|n_{\mathbf{q}1}, n_{\mathbf{q}2}, n_{\mathbf{q}3}, \ldots\rangle + \\ + c_2|n_{\mathbf{q}1}+1, n_{\mathbf{q}2}, n_{\mathbf{q}3}, \ldots\rangle + c_3|n_{\mathbf{q}1}, n_{\mathbf{q}2}+1, n_{\mathbf{q}3}, \ldots\rangle + \ldots$$

Величина смещения иона на узле определяется в виде

$$\langle u(\mathbf{r})\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \times \\ \times \sum_{\nu} \langle \nu_j | (b_{\mathbf{q}} + b^{\dagger}_{-\mathbf{q}}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \Omega^{-1/2}(\mathbf{q}) | \nu_j \rangle. \quad (9)$$

Среднеквадратичное смещение иона определяется как

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2n_{\mathbf{q}} + 1}{\Omega(\mathbf{q})}.$$

В основном состоянии для гармонического осциллятора с $\alpha \to 0$ число фононов равно нулю. Поэтому важно вычислить изменение нулевых колебаний в результате действия магнитной системы на упругую, т. е.

$$\langle U_n^2 \rangle = \langle u^2(\alpha) \rangle - \langle u^2(\alpha = 0) \rangle.$$

Ниже будут использованы величины

$$\langle U \rangle = \frac{1}{N} \sum_r \frac{\langle u(r) \rangle}{\sqrt{\hbar/2MN\omega_0}}, \quad \langle U^2 \rangle = \sum_r \frac{\langle U_n^2(r) \rangle}{\hbar/2NM\omega_0}.$$

Коррелированные колебания ионов и их зависимость от импульса можно определить из корреляционной функции плотности фононов $\langle n(\mathbf{q}) n(\mathbf{q}+\mathbf{p}) \rangle$. Волновые векторы несоразмерности решеточных и магнитных флуктуаций определялись из структурного фактора смещения ионов

$$U(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle u_0 u_{\mathbf{r}} \rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

по двум направлениям, [10] и [01], и магнитного структурного фактора

$$S^z(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle S_0^z S_{\mathbf{r}}^z \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

В процедуре расчета первые 20000 шагов Монте-Карло на один спин отбрасывались и усреднение велось по 8000 шагов Монте-Карло на спин. Это значительно превышает время достижения термодинамического равновесия, вычисленное из подрешеточной намагниченности,

$$\langle \sigma(0)\sigma(t) \rangle - \langle \sigma(0) \rangle \langle \sigma(t_{max}) \rangle = A \exp(-t/t_0),$$

где t — число шагов Монте-Карло, $t_0 = 3000$, 7000 шагов Монте-Карло на спин соответственно для $\alpha/\alpha_c = 0.3$, 0.75, α_c — критический параметр спин-фононной связи, при котором исчезает дальний магнитный порядок. Среднеквадратичная погрешность подрешеточной намагниченности составляет примерно 3 %, энергии — 1 %, спин-спиновых корреляционных функций — 2 %, среднего числа заполнения фононов — 4 %.

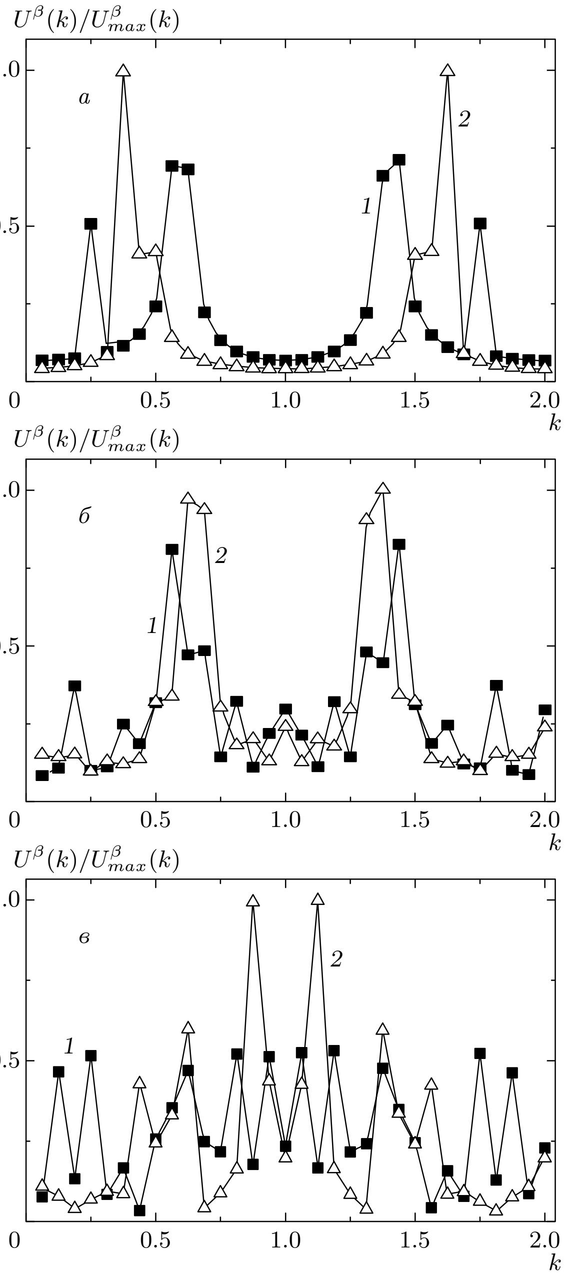

Рис. 1. Нормированный на максимальное значение решеточный структурный фактор $U^\beta(k)/U^\beta_{max}(k)$, вычисленный по двум направлениям $\beta = [10]$ (*1*) и $\beta = [01]$ (*2*), для $\omega_0/J = 6$, $\alpha/\alpha_{c3} = 0.3$ (*а*), 0.7 (*б*), 1 (*в*)

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Процессы неупругого рассеяния и образование связанных состояний магнонов и фононов зависят от плотности состояний исходных квазичастиц. В двумерной модели Гейзенберга плотность магнонных состояний логарифмически расходится в середине зоны и взаимодействие между квазичастицами является симметричным для точек Γ и X зоны. В случае пересечения дисперсионных кривых магнонов и фононов, что справедливо для $v_{ph} < v_m$ при $\omega_0/J < 2$ (v_{ph} и v_m — скорости соответственно фононов и магнонов), образуются дополнительные особенности в плотности состояний этих квазичастиц. Вычисления проведены для $\omega_0/J = 1$, 2, 4, 6, 8, 10, а на рисунках изображены два типичных случая $\omega_0/J = 1$ и $\omega_0/J = 6$. Под действием магнитной системы структурный фактор решеточных флуктуаций, изображенных на рис. 1, становится пространственно-анизотропным. В магнитной подсистеме образуются флуктуации лестничного типа, содержащие две ближайшие цепочки в направлении [01] и квазиодномерные флуктуации цепочечного типа в направлении [10], расположенные на расстоянии $r \approx$ 7–10. Энергия, приходящаяся на одну связь в антиферромагнетике с квадратной решеткой, в 1.3 раза меньше энергии антиферромагнитной цепочки. Поэтому решеточные флуктуации способствуют локальному растяжению решетки вдоль одного из симметричных направлений исходной квадратной решетки. Флуктуации лестничного типа, сопровождающиеся динамической локальной димеризацией решетки, также приводят к понижению магнитной энергии, аппроксимационная зависимость которой имеет вид

$$|E_m(\alpha) - E_m(0)| \approx A(\alpha/\alpha_{c3})^{1.80(6)},$$

$$A = \begin{cases} 0.11(1), & v_m > v_{ph}, \\ 0.18(2), & v_m < v_{ph}. \end{cases}$$

Выигрыш в магнитной энергии почти на порядок превышает проигрыш в упругой энергии.

Средняя величина смещения

$$U^{\beta}_{av} = \frac{1}{N}\sum_{i,j} u^{\beta}_{i,j}, \quad \beta = x([10]), y([01])$$

изображена на рис. 2. Анизотропия решеточных флуктуаций приводит к анизотропии величины смещения $U^x_{av} - U^y_{av}$ (рис. 2*в*) и к понижению кристаллической симметрии от тетрагональной до орторомбической. С увеличением взаимодействия между магнитной и упругой подсистемами растут нулевые колебания на определенном волновом векторе Q и их корреляция $\langle U_i^2 U_j^2 \rangle \propto \langle N(0)N(Q)\rangle$, изображенная на рис. 3. Максимальное значение коррелятора достигается на волновом векторе $Q_{max} = (0.75\text{–}0.9)\pi$, $\alpha_{c2} < \alpha < \alpha_{c3}$ и отражает когерентное колебание

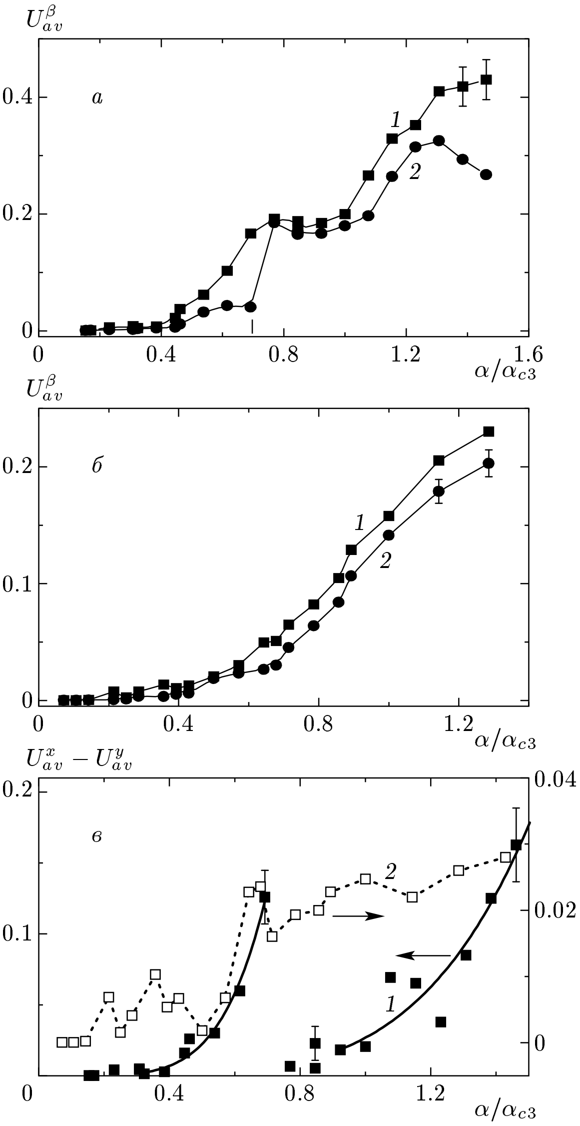

Рис. 2. Зависимости усредненных по решетке смещений ионов U^{β}, нормированных на $\sqrt{\hbar/M\omega_0}$, для $\omega_0/J = 1$ (*a*), 6 (*б*) в направлениях $\beta = [10]$ (*1*) и $\beta = [01]$ (*2*) от нормированной константы спин-фононного взаимодействия и параметра орторомбичности $U^x_{av} - U^y_{av}$ для $\omega_0/J = 1$ (*1*), 6 (*2*) от α/α_{c3} (*в*)

ионов с локализованными спиновыми возбуждениями в направлении [10]. Для $v_m > v_{ph}$ в интервале параметров $\alpha_{c2} < \alpha < \alpha_{c3}$ локальный параметр орторомбичности $U^x_{av} - U^y_{av}$, изображенный на рис. 2*в*, резко уменьшается и его величина находится в пределах погрешности вычислений. Изменение симметрии структурных искажений качественно соответствует замене конденсированной моды $(\pi, 0)$ при $\delta < 0.5$, $\delta = J_{i,i+1} - J_{i,i-1}$ оптической модой

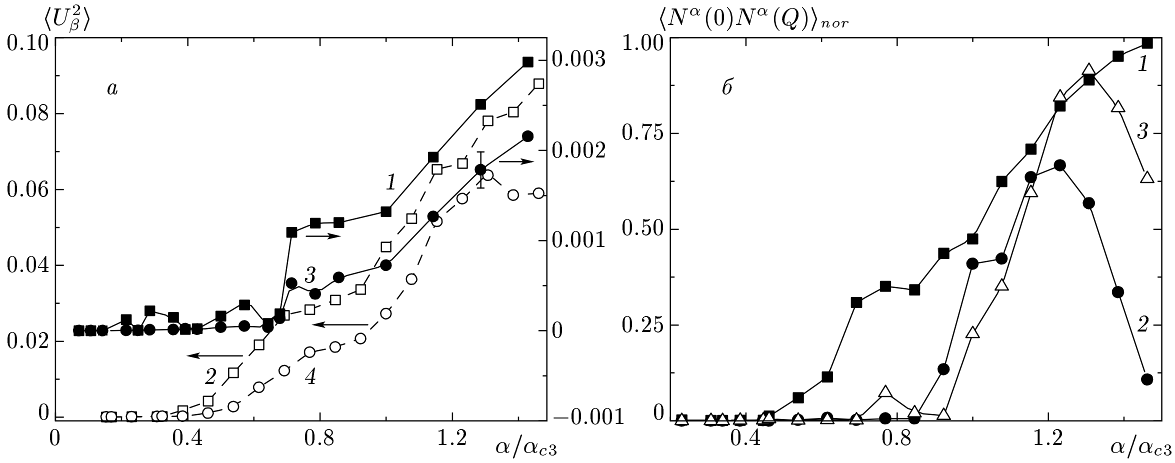

Рис. 3. Зависимости *а*) среднеквадратичного смещения ионов $\langle U_\beta^2 \rangle$, нормированного на $\hbar/M\omega_0$, для $\beta = [10]$ (*1, 2*) и $\beta = [01]$ (*3, 4*), $\omega_0/J = 1$ (*2, 4*) и $\omega_0/J = 6$ (*1, 3*) от нормированной константы спин-фононного взаимодействия и *б*) максимального значения коррелятора плотности фононов на волновом векторе Q для $\omega_0/J = 1$, $\beta = [10]$ (*1*), $[01]$ (*2*), $[11]$ (*3*) от α/α_{c3}

(π,π) при $\delta > 0.5$, вычисленной на квадратной решетке методом точной диагонализации в адиабатическом приближении [13].

Качественно другое поведение упругих и магнитных свойств наблюдается в случае $v_m < v_{ph}$. Объем решетки и параметр орторомбичности монотонно увеличиваются при $\alpha > \alpha_{c2}$, и изменение нулевых колебаний на порядок меньше по сравнению со случаем $v_m > v_{ph}$ (рис. 3*а*). Анизотропия коррелированных колебаний также растет и вычисленные результаты хорошо описываются степенной зависимостью

$$\langle U_\beta^2 \rangle - \langle U_\gamma^2 \rangle \approx 0.24(3)[(\alpha - \alpha_{c2})/\alpha_{c3}]^{0.41(3)}.$$

Изменения параметров решетки в области критических значений $\alpha_{c2,3}$, где типичные значения верхней границы зоны акустических колебаний в квазидвумерных антиферромагнетиках R_2CuO_4 (R = La, Gd, Eu, Nd) равны $\omega_0 \approx 4 \cdot 10^{12}$ Гц [14], $M \approx 4 \cdot 10^{-22} g$, $\omega_0 = J$, составляют

$$U_{c2} = 0.005(1)\ \text{Å}, \quad U_{c3} = 0.04(02)\ \text{Å},$$

для $\omega_0 \approx 10^{14}$ Гц —

$$U_{c2} = 0.002(1)\ \text{Å}, \quad U_{c3} = 0.007(2)\ \text{Å}.$$

Усредненное по всей решетке изменение обмена в области фазового перехода антиферромагнетик–квантовая спиновая жидкость составляет около одного процента, $dJ/J \approx 0.01$, что на порядок меньше локальных флуктуаций обмена.

Линейное уменьшение магнитного момента на узле с ростом константы спин-фононной связи можно аппроксимировать зависимостью

$$\frac{\sigma}{\sigma(0)} = \begin{cases} 1.14 - 1.3\alpha/\alpha_{c3}, & v_m > v_{ph}, \\ 1.12 - 0.96\alpha/\alpha_{c3}, & v_m < v_{ph} \end{cases}$$

в области параметров $0.15 < \alpha/\alpha_{c3} < 0.7$. При $\alpha = \alpha_{c3}$ магнитный момент резко исчезает. Типичные зависимости представлены на рис. 4*а*. В области критических параметров спин-фононной связи спин-спиновые корреляционные функции и радиус корреляции пространственно анизотропны и

$$\left| 1 - \frac{\sum_r \langle S^z(i,j)S^z(i,j+r)\rangle}{\sum_r \langle S^z(i,j)S^z(i+r,j)\rangle} \right| \approx 0.02\text{–}0.04,$$

и между направлениями [11] и [10] анизотропия спиновых корреляционных функций составляет величину порядка 0.1. Сферическая симметрия спин-спиновых корреляционных функций при $\alpha > \alpha_{c1}$, изображенных на рис. 4*б*, нарушается. Этот факт являлся одним из критериев определения величины параметра спин-фононного взаимодействия α_{c1} и качественно согласуется с результатами Андреева и Грищука [8], получивших спин-нематическое состояние в модели Гейзенберга с конкурирующими антиферромагнитными взаимодействиями и четырехспиновым обменом. В окрестности волнового вектора $Q = (\pi,\pi)$, соответствующего антиферромагнитному структурному

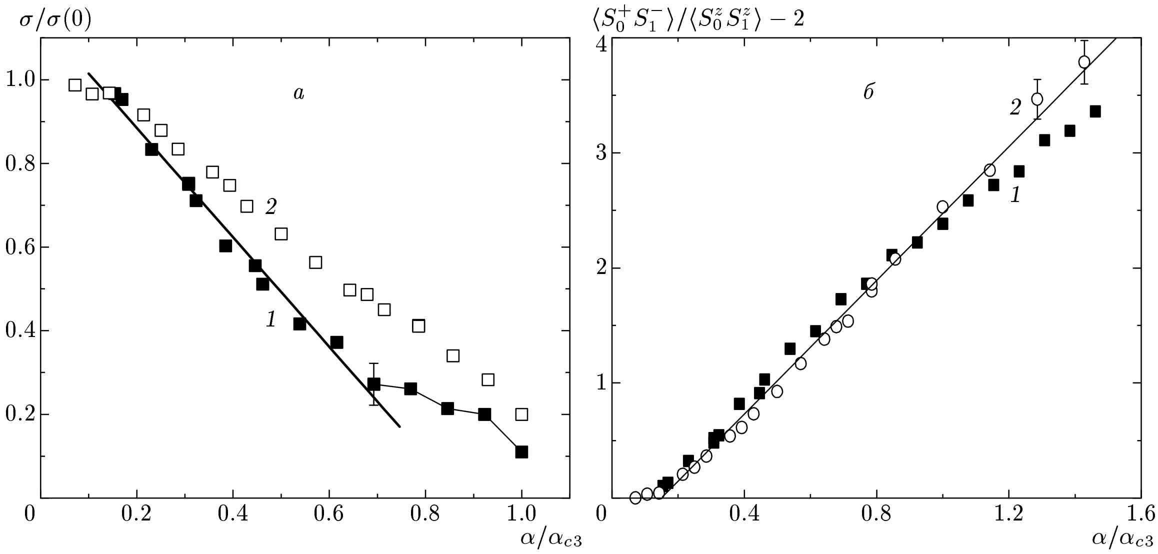

Рис. 4. Нормированная величина магнитного момента на узле, $\sigma/\sigma(0)$ (a), и отношение корреляционных функций между поперечными и продольными компонентами спинов при $r = 1$ ($б$) для $\omega_0/J = 1$ (*1*), 6 (*2*) в зависимости от параметра спин-фононного взаимодействия

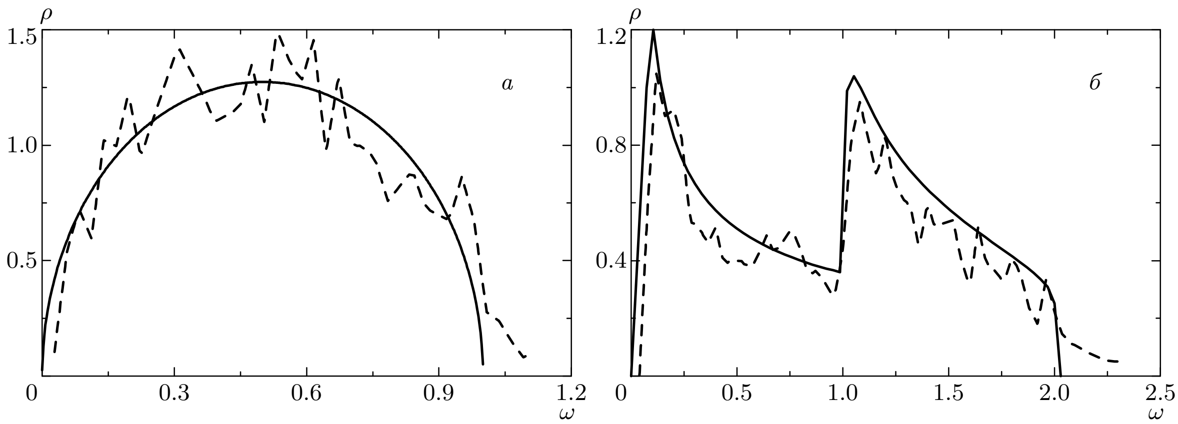

Рис. 5. Модельные плотности состояний, заданные аналитически, $\rho(\omega) = (8/\pi)\sqrt{\omega(1-\omega)}$ (a), и численно ($б$) изображены сплошными линиями; восстановленные плотности состояний — штриховыми линиями

фактору, наблюдаются сателлиты с вектором несоразмерности спиновой плотности в интервале $q_{in} = (0.7 - 0.95)\pi$. Интенсивность сателлитов варьируется в пределах

$$\frac{S^z(q_{in})}{S^z(\pi,\pi)} \approx \begin{cases} 0.05, & \alpha = \alpha_{c1}, \\ 0.15, & \alpha = \alpha_{c2}, \\ 0.3, & \alpha = \alpha_{c3}. \end{cases}$$

Использование процедуры восстановления спектральной плотности состояний [12] на заданных моделях дает хорошие результаты для определения границ зоны и положения максимумов функции $\rho(\omega)$ на энергетической шкале в пределах 5 %. Интенсивность имеет зубчатый вид и флуктуирует в пределах 10–20 %. На рис. 5 изображены восстановленные и модельные плотности состояний, заданные аналитически, $\rho(\omega) = (8/\pi)\sqrt{\omega(1-\omega)}$, и численно. Временной коррелятор

$$G(\tau) = \int\limits_0^{\omega_{max}} e^{-\omega\tau}\rho(\omega)\,d\omega$$

рассчитывался по ста точкам τ_i, $i = 1, 2, \ldots, 100$. Типичные плотности спиновых и связанных спин-фононных возбуждений изображены на рис. 6. Для

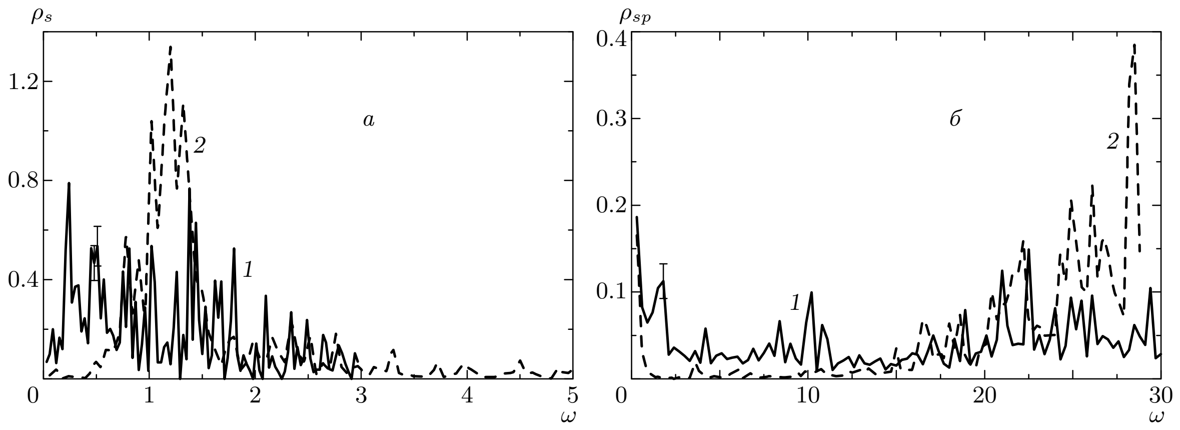

Рис. 6. Плотность состояний спиновых (*а*) и связанных спин-фононных (*б*) возбуждений при $\omega_0/J = 6$, $\alpha/\alpha_{c3} = 0.8$ (*1*), 1.14 (*2*)

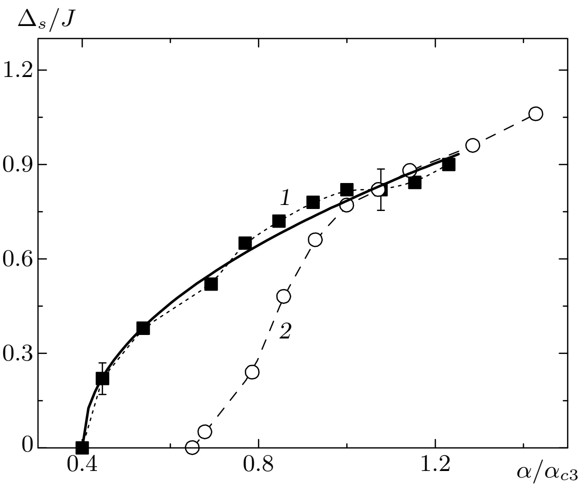

Рис. 7. Энергия Δ_s щели в спектре спиновых возбуждений в зависимости от параметра спин-фононного взаимодействия для $\omega_0/J = 1$ (*1*), 6 (*2*)

$\alpha > \alpha_{c2}$ в спектральной плотности спиновых возбуждений наблюдается щель. Зависимость энергии щели от величины спин-фононной связи вместе с аппроксимирующей степенной функцией

$$\Delta_s/J \approx [(\alpha - \alpha_{c2})/\alpha_{c3}]^{0.50(8)}, \quad \omega_0 = J$$

(сплошная линия) изображена на рис. 7. В плотности связанных спин-фононных возбуждений можно выделить квазищель. Максимальная плотность $\rho(\omega)$ приходится на квазичастицы с нулевой энергией и с энергией возбуждений квазичастиц $\omega \approx 2(\omega_0 + 2J)$, $2(\omega_0 + J), 3(\omega_0 + J)$ при $v_{ph} > v_m$ и $\omega \approx 4(\omega_0+J), 8(\omega_0+J)$ при $v_{ph} < v_m$. Эти оценки для $\omega_0 \approx 4 \cdot 10^{12}$ Гц [14], $J \approx 0.1$ эВ удовлетворительно согласуются с оптическими данными по спектрам поглощения в $Sr_2CuCl_2O_2$ [1], которые показывают широкий пик вблизи 4000 см$^{-1}$, и значениями энергии возбуждения $E^{MC} \approx 4400$ см$^{-1}$, вычисленными методом Монте-Карло. Наблюдаемые возбуждения обнаруживают тесную взаимосвязь между спиновыми и решеточными степенями свободы в плоскости CuO_2.

На плоскости «верхняя граница зоны акустических колебаний ω_0 — параметр спин-фононной связи α» можно выделить три критических линии. При достижении критической величины константы спин-фононной связи с аппроксимационной зависимостью $\alpha_{c1} = 0.16(2)\omega_0/J$ образуются связанные спин-фононные возбуждения аналогично образованию поляронов в системах с электрон-фононной связью. С ростом величины α плотность квазичастиц растет, и при $\alpha_{c2} = 0.39(6)(\omega_0/J)^{0.85(4)}$ спектральная плотность связанных спин-фононных возбуждений $\rho(\omega = 0)$ имеет конечную величину для $\omega = 0$. Открывается щель Δ_s в спектре спиновых возбуждений, понижается кристаллическая симметрия. Если щель Δ_s рассматривать как параметр порядка синглетных пар спинов, то в области параметров $\alpha_{c2} < \alpha < \alpha_{c3}$ реализуется неоднородное состояние, состоящее из дальнего магнитного порядка и синглетного состояния. Это подобно сосуществованию нормальной и аномальной фаз в жидком гелии и в сверхпроводниках второго рода в магнитном поле. При константе α_{c3}, которую можно аппроксимировать степенной зависимостью $\alpha_{c3} = 0.62(4)(\omega_0/J)^{0.85(6)}$, исчезает дальний магнитный порядок и образуется квантовая спиновая жидкость.

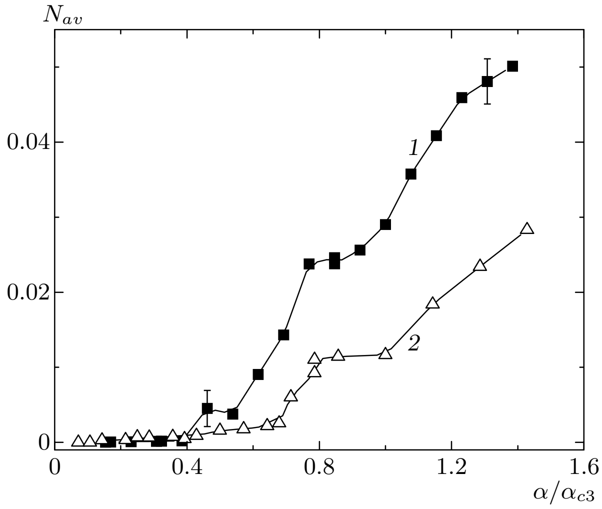

Рис. 8. Среднее число заполнения фононов в зависимости от нормированной константы спин-фононного взаимодействия при $\omega_0/J = 1$ (*1*), 6 (*2*)

Коррелированное состояние решеточных флуктуаций может быть разрушено тепловыми фононами. Критическую температуру можно оценить из условия равенства тепловой энергии фононов E_{heat} и энергии связанного состояния фононов $E_{bin} = (N_{ph} - N_{ph,c2})\omega_0/2$. В дебаевском приближении $E_{heat} = 3\pi^4 k_B T^4/(5\Theta^3)$, где Θ — температура Дебая, соответствующая критическая температура

$$T^* \approx 0.74\Theta^{3/4}[0.02(\alpha - \alpha_{c3})/\alpha_{c3}]^{1/4}.$$

Зависимость среднего числа фононов $N_{av} = (1/N) \times \times \sum_k N_k$ от нормированного значения константы спин-фононной связи представлена на рис. 8. Решеточные флуктуации связаны с магнитными, которые меняются под воздействием магнитного поля и температуры при $T \sim \Delta_s$. Для $\alpha > \alpha_{c3}$ наименьшая температура, при которой возможно разрушение солитонной решетки, обусловлена тепловыми фононами, и для $\theta = 400$ К имеем $T^*_{c3} \approx 22$ К.

Низкие значения магнитного момента: $\sigma = 0.4(1)$ в Gd_2CuO_4 и Eu_2CuO_4 [15], определенное из упругого рассеяния нейтронов, и $\sigma = 0.35(4)$, полученное из электронного спинового резонанса на ионах Gd^{3+} в Eu_2CuO_4 [16], возможно, обусловлены спин-фононным взаимодействием с параметрами $\alpha/\alpha_{c3} \approx 0.3$, 0.35, приводящим к образованию связанных спин-фононных возбуждений. Это вызовет изменения в спектре акустических возбуждений. Так, в изоструктурном соединении Nd_2CuO_4 [14] наблюдается аномалия в нижней ветви спектра акустических фононных возбуждений вдоль направления ΓX. Соответствующие изменения постоянной решетки составляют величину порядка $2 \cdot 10^{-3}$ Å и проявляются в рентгеновских спектрах в виде эллипсоидального смещения иона кислорода в плоскости ab перпендикулярно связи Cu–O [17].

Время жизни связанных спин-фононных квазичастиц и среднее время релаксации пропорциональны матричному элементу оператора спин-фононного взаимодействия для перехода фонона из основного в возбужденное состояние с одновременным изменением спиновой конфигурации двух спинов. Согласно «золотому правилу Ферми»

$$\frac{1}{\tau_0} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle \mathrm{exc}|\hat{V}_{sph}|0\rangle|^2 N_{ph},$$

время жизни квазичастицы $\tau_0 = 0.6 \cdot 10^{-7}$ с ($\langle \mathrm{exc}|$ — возбужденное состояние). Распределение времен релаксации описывается степенным законом $P(\tau) \propto (\tau/\tau_0)^{5/4}$ для $\tau < \tau_0$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, подчеркнем основные результаты. Взаимодействие между упругой и магнитной подсистемами приводит к анизотропии как упругих колебаний решетки, так и магнитных свойств, изменение которых происходит при трех характерных параметрах спин-фононной связи. При $\alpha = \alpha_{c1}$ образуются связанные решеточные и спиновые флуктуации и нарушается сферическая симметрия спин-спиновых корреляционных функций. При $\alpha = \alpha_{c2}$ открывается щель в спектре спиновых возбуждений и понижается кристаллическая симметрия. Возможно сосуществование синглетного состояния и дальнего антиферромагнитного порядка. При $\alpha = \alpha_{c3}$ исчезает магнитный момент на узле и происходит фазовый переход антиферромагнетик – квантовая спиновая жидкость. Определены константы спин-фононной связи, соответствующие уменьшению магнитных моментов в квазидвумерных антиферромагнетиках Gd_2CuO_4, Eu_2CuO_4.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. V. Struzhkin, A. F. Goncharov, H. K. Mao et al., Phys. Rev. B **62**, 3895 (2000).

2. N. Ichikawa, S. Uchida, J. M. Tranquada et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 1738 (2000).

3. T. Dahm, Phys. Rev. B **61**, 6381 (2000).

4. J. Takeya, Y. Ando, S. Komiya et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 077001 (2002).

5. Е. И. Головенчиц, В. А. Санина, А. А. Левин и др., ФТТ **39**, 1600 (1997).

6. V. A. Pashchenko, S. Huant, A. A. Stepanov, and P. Wyder, Phys. Rev. B **61**, 6889 (2000).

7. A. A. Stepanov, P. Wyder, T. Chattopadhyay et al., Phys. Rev. B **48**, 12979 (1993).

8. А. Ф. Андреев, И. А. Грищук, ЖЭТФ **87**, 467 (1984).

9. S. S. Aplesnin, ФТТ **39**, 1404 (1997).

10. N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **81**, 2514 (1998); Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, ЖЭТФ **114**, 570 (1998).

11. M. Suzuki, J. Stat. Phys. **43**, 883 (1986).

12. A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, Phys. Rev. B **62**, 6713 (2000).

13. S. Tang and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **37**, 9546 (1988).

14. E. Rampf, U. Schröder, F. W. de Wette et al., Phys. Rev. B **48**, 10143 (1993).

15. T. Chattopadhyay, J. W. Lynn, N. Rosov et al., Phys. Rev. B **49**, 9944 (1994).

16. C. Rettori, S. B. Oseroff, D. Rao et al., Phys. Rev. B **54**, 1123 (1996).

17. P. Adelman, R. Ahrens, G. Czjzek et al., Phys. Rev. B **46**, 3619 (1992).