Ширина линии электронного парамагнитного резонанса в двумерном гейзенберговском антиферромагнетике $S = 1/2$ со скирмионами

© С.И. Белов, Б.И. Кочелаев

Казанский государственный университет,
420008 Казань, Россия

E-mail: boris.kochelaev@ksu.ru

(Поступила в Редакцию 19 июля 1999 г.)

Исследована электронная магнитная релаксация в двумерном гейзенберговском антиферромагнетике $S = 1/2$ со скирмионами. Вычислена ширина линии электронного парамагнитного резонанса ($\Gamma_\perp$) при температурах $T \leqslant J$, J — константа взаимодействия ближайших соседей. Показано, что $\Gamma_\perp$, обусловленная взаимодействием Дзялошинского–Мория, растет с понижением температуры как r_0/a, в то время как анизотропное симметричное взаимодействие приводит к зависимости $(r_0/a)^3$, где r_0 — средний размер скирмиона, a — постоянная решетки. Полученные результаты качественно согласуются с вычислениями, проделанными на основе ренормгруппового анализа нелинейной σ-модели для $T \ll J$.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 98-02-17974).

Интенсивные исследования сверхпроводящих купратов стимулировали интерес к их родительским соединениям. Как известно, магнитные свойства недопированных материалов хорошо описываются моделью двумерного гейзенберговского антиферромагнетика со спином $S = 1/2$ и константой обменного взаимодействия $J \sim 1500\,\mathrm{K}$. Существенные успехи в изучении двумерного магнетизма связаны с ренормгрупповым анализом нелинейной σ-модели. В рамках этого подхода Чакраварти, Гальперин и Нельсон (ЧГН) [1] определили спиновую корреляционную длину и локальный параметр порядка при $T \ll J$, не используя подгоночных параметров. Однако при вычислении динамических характеристик без подгонки к эксперименту обойтись не удалось. Авторы [2] разработали теорию двумерного антиферромагнетика, применив технику $1/N$-разложения к нелинейной σ-модели с N-компонентным параметром порядка. Им удалось рассмотреть и перенормированный классический ($T \ll J$) и квантовый критический ($T \sim J$) режимы, хотя их результаты для $T \ll J$ и $T \sim J$ не согласуются друг с другом в промежуточной области температур. В работах [3–6] был предложен другой подход, основанный на возможности существования в двумерных магнетиках при $T > 0$ неоднородных устойчивых состояний, называемых топологическими возбуждениями или скирмионами. Методом функций Грина были найдены спектр элементарных возбуждений над скирмионным основным состоянием, средний размер скирмиона, играющий роль длины спиновых корреляций и скорость релаксации ядерных спинов. Оказалось, что в области перенормированного классического режима температурная зависимость скирмионного радиуса и времени ядерной релаксации очень хорошо согласуется с соответствующими выражениями теории ЧГН и $1/N$-разложения [1,2,7]. С другой стороны, в квантовом критическом режиме возникают существенные расхождения с результатами [2]. Сравнение дополнительных характеристик, вычисленных в рамках различных подходов, и сопоставление их с экспериментальными данными могли бы показать, насколько предлагаемые теории адекватны реальной системе.

Авторы [7] исследовали электронную магнитную релаксацию в La_2CuO_4, используя динамические корреляционные функции теории ЧГН [1,8]. Как известно, релаксация электронной намагниченности вызывается взаимодействиями, не коммутирующими с полным спином. Согласно [7], ширина линии ЭПР $\Gamma_\perp$, обусловленная любым анизотропным взаимодействием, билинейным по спиновым операторам, растет как $(\xi/a)^3$, где ξ — спиновая корреляционная длина, a — постоянная решетки. Поскольку наибольшую величину в La_2CuO_4 имеет взаимодействие Дзялошинского–Мория, вклад других анизотропных взаимодействий в $\Gamma_\perp$ полагался несущественным и не был принят во внимание. Однако, как было показано в [9], симметрия взаимодействия Дзялошинского–Мория уменьшает воздействие критических спиновых флуктуаций на ширину линии ЭПР и дает $\Gamma_\perp^{\mathrm{DM}} \sim \xi/a$. В то же время любое взаимодействие, симметричное по спиновым операторам, приводит к зависимости $\Gamma_\perp^{(An)} \sim (\xi/a)^3$. Оценки, сделанные в [9], показали, что симметричное и антисимметричное взаимодействия вносят приблизительно одинаковый вклад в $\Gamma_\perp$ при температурах 300–400 K.

В данной работе рассматривается электронная магнитная релаксация в двумерном гейзенберговском антиферромагнетике $S = 1/2$ со скирмионами. Впервые возможность влияния скирмионов на электронную релаксацию в слоистых магнетиках со спином $S = 5/2$ отмечалась в [10,11]. Затем была сделана попытка учесть вклад скирмионов в ширину линии ЭПР для полуклассического двумерного магнетика $S = 5/2$ [12]. Однако применимость такого подхода к квантовому антиферромагнетику со спином $S = 1/2$ вызывает сомнения. Мы использовали с самого начала квантовое рассмотрение, которое учитывает и топологические возбуждения, и спиновые флуктуации над неоднородным основным состоянием.

Оказалось, что ширина линии ЭПР, обусловленная взаимодействием Дзялошинского–Мория, зависит от скирмионного радиуса как r_0/a, в то время как симметричное анизотропное взаимодействие дает $\Gamma_\perp^{(An)} \sim (r_0/a)^3$. Если пренебречь несущественными на фоне ξ степенными факторами, эта зависимость качественно согласуется с результатами, полученными Лазутой для $T \ll J$. Кроме того, было исследовано поведение $\Gamma_\perp$ в области $T \sim J$, которая ранее не рассматривалась.

1. Вычисление ширины линии ЭПР

Ранее было показано [3,4], что число топологических возбуждений Q становится большим при температурах $T > T^* = \varepsilon_{\text{sk}}/2\ln(L/a)$, где $\varepsilon_{\text{sk}} = 4\pi\sigma(1-\sigma)J$ представляет собой перенормированную энергию скирмиона (антискирмиона), σ — локальный параметр порядка, L — линейный размер образца. При $Q \gg 1$ можно ожидать, что ближайшими соседями каждого скирмиона будут антискирмионы, и наоборот, так что полная намагниченность подрешеток обращается в нуль. Хотя дальнего порядка нет, локальный антиферромагнитный порядок внутри скирмиона (антискирмиона) сохраняется. Спиновые возбуждения над неоднородным основным состоянием описываются гамильтонианом, представленным в локальных координатных осях

$$H_0 = J\sum_{ij}\tilde{\mathbf{S}}_i\tilde{\mathbf{S}}_j = J\sum_{ij,\alpha\beta} A_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta. \qquad (1)$$

Здесь $\tilde{\mathbf{S}}_{i,j} = U^{-1}\mathbf{S}_{ij}U$, $U = \prod_{ij}\exp\left(i\varphi_i S_i^z + i\varphi_j S_j^z\right) \times \exp\left(i\theta_i S_i^Y + i\theta_j S_j^y\right)$; производится суммирование по ближайшим узлам ij двух подрешеток, $\alpha, \beta = x, y, z$. Коэффициенты $A_{ij}^{\alpha\beta}$ возникают благодаря унитарному преобразованию U от лабораторных осей квантования к локальным и определяются формой скирмиона (антискирмиона). В частности, для отдельного скирмиона

$$\operatorname{tg}(\theta/2) = r/r_0, \qquad \varphi = \phi, \qquad (2)$$

где r и ϕ — полярные координаты, r_0 — радиус скирмиона. Аналогичные выражения были получены ранее классическими методами [13,14].

Для исследования электронной релаксации рассмотрим гамильтониан

$$H = H_0 + H_z + V. \qquad (3)$$

Здесь $H_z = -\omega_0\tilde{S}^z$ — зеемановское взаимодействие с постоянным магнитным полем в единицах $\mu_B g/\hbar$; V — анизотропное спин-спиновое взаимодействие, не коммутирующее с полным спином и вызывающее релаксацию поперечной намагниченности; $\tilde{\mathbf{S}} = \sum_k \tilde{\mathbf{S}}_k$ — суммарный спин, индекс k пробегает по всем узлам квадратной решетки. Введем запаздывающую коммутаторную функцию Грина

$$G(t) = -i\theta(t)\left\langle \left[\tilde{S}^+(t), \tilde{S}^-(0)\right] \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G(\omega)\exp(-i\omega t)/2\pi, \qquad (4)$$

где $\theta(t>0) = 1$, $\theta(t<0) = 0$, $[A,B] = AB - BA$.

Ширина линии ЭПР определяется мнимой частью динамической восприимчивости, которая связана с функцией Грина соотношением $\chi(\omega) = -G(\omega)$. Функцию Грина (4) с гамильтонианом (3) всегда можно представить следующим образом:

$$G(\omega) = \frac{\left\langle \left[\tilde{S}^+, \tilde{S}^-\right] \right\rangle}{\omega - \omega_0 + \Sigma(\omega)}, \qquad (5)$$

где $\Sigma(\omega)$ зависит только от V. Тогда величина мнимой части $\Sigma(\omega)$ на резонансной частоте даст ширину линии ЭПР

$$\Gamma_\perp(\omega_0) = \operatorname{Im}\left[\Sigma(\omega_0)\right]. \qquad (6)$$

$\Sigma(\omega)$ с точностью до второго порядка по V найдем из двух первых уравнений движения для $G(t)$. Используя стандартные соотношения между гриновскими и корреляционными функциями и имея в виду, что резонансная частота намного меньше энергии элементарных спиновых возбуждений, в пределе $\omega_0 \to 0$ будем иметь

$$\Gamma_\perp = \frac{1}{4\chi_0 T}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \left[\tilde{S}^+(t), V(t)\right]\left[V, \tilde{S}^-\right] \right\rangle, \qquad (7)$$

где χ_0 — статическая магнитная восприимчивость.

Рассмотрим вклад в $\Gamma_\perp$, вносимый взаимодействием Дзялошинского–Мория и анизотропным симметричным взаимодействием [9]

$$V_{\text{DM}} = D\sum_{ij}\left(\tilde{S}_i^z\tilde{S}_j^x - \tilde{S}_i^x\tilde{S}_j^z\right), \qquad V_{\text{An}} = A\sum_{ij}\tilde{S}_i^z\tilde{S}_j^z. \qquad (8)$$

Вычисление коммутаторов в (7) дает корреляционную функцию четырех спиновых операторов, записанных в лабораторной системе координат. Сделав переход к локальным осям квантования, можно расцепить четырехспиновую функцию в приближении молекулярного поля, справедливом для локальных спинов [3,4]. Кроме того, корреляционные функции считаются отличными от нуля только для спинов, находящихся в пределах одного скирмиона, т. е. отдельные скирмионы рассматриваются как невзаимодействующие объекты. При выполнении этих условий формула (7) для $V = V_{\text{DM}}$ принимает вид

$$\Gamma_\perp^{\text{DM}} = \frac{ND^2}{(2\pi)^2\chi_0 T}\sum_{\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'}\cos\theta(r)\cos\theta(r')\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp(\omega/T) \times \left[\left|J^{(1)}(\omega,\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\right| - \left|J^{(2)}(\omega,\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\right|\right]. \qquad (9)$$

Здесь

$$J^{(1,2)}(\omega, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -2n(\omega) \sum_f \Psi_f^*(\boldsymbol{r}) \Psi_f(\boldsymbol{r}') \, \mathrm{Im} \left[G_{ff}^{(1,2)}(\omega) \right],$$

$n(\omega) = [\exp(\omega/T) - 1]^{-1}$, суммирование по $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'$ проводится по области, занимаемой отдельным скирмионом, N — число узлов квадратной решетки. Гриновские функции $G_{ff}^{(1,2)}(\omega)$ и волновые функции $\Psi_f(\boldsymbol{r})$ были найдены в работе [3];

$$G_{ff}^{(1)}(\omega) = \frac{2\sigma(\omega + 4\sigma J)}{\omega^2 - \varepsilon_f^{(2)}}, \qquad G_{ff}^{(2)}(\omega) = \frac{2\sigma(\omega + 4\sigma J)}{\omega^2 - \varepsilon_f^{(2)}},$$

$$\Psi_f(\boldsymbol{r}) = \Psi_{km}(\boldsymbol{r}) \approx C_{km} J_{m-1}(kr) \exp(im\phi), \tag{10}$$

где $J_{m-1}(kr)$ — функция Бесселя. Спектр возможных значений k дается граничным условием $\Psi_{km}(r = r_0, \phi) = 0$ и имеет вид $k = k_n \approx \pi n/r_0$, $n = 1, 2, \ldots$; m принимает целые значения; $\varepsilon_f = \varepsilon_n = 2\sqrt{2} Jak_n$ — энергия элементарных спиновых возбуждений над неоднородным основным состоянием. Подставляя (10) в (9) выполняя суммирование по $\boldsymbol{r}, m, n$ и интегрирование по ω, легко получить

$$\Gamma_\perp^{\mathrm{DM}}/\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{DM}} = 1.32 \frac{N(1-\sigma)}{\chi_0 J}(r_0/a),$$

$$\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{DM}} = \pi D^2/8\sqrt{3}J, \tag{11}$$

где $\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{DM}}$ представляет собой ширину линии при $T \to \infty$, которую можно найти, вычисляя второй и четвертый моменты линии магнитного резонанса [15]. Локальный параметр порядка σ, средний размер скирмиона r_0 и статическая магнитная восприимчивость χ_0 определяются соотношениями [3,4,6]

$$2\sqrt{2}\pi\sigma/ex = (r_0/a)\exp[2\pi(\sigma - \sigma_{\mathrm{cr}})x],$$

$$2\pi(r_0/a)^2 = \exp[4\pi\sigma(1-\sigma)/x],$$

$$\chi_0 = N\left[3(2\ln 2 - 1) + (a/r_0)^2\right]/24J\sigma(1-\sigma) \tag{12}$$

с $\sigma_{\mathrm{cr}} = 0.443$, $x = T/J$.

Аналогичное вычисление для симметричного анизотропного взаимодействия дает

$$\Gamma_\perp^{\mathrm{An}}/\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{An}} = 0.39 \frac{N}{\chi_0 J} \frac{3 + 8\sigma + 16\sigma^2}{\sigma} \frac{T}{J}(r_0/a)^3,$$

$$\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{An}} = \pi A^2/3\sqrt{3}J. \tag{13}$$

В области температур $T \ll J$, соответствующей перенормированному классическому режиму, $\chi_0(T)$ и $\sigma(T)$ в (11), (13) можно заменить на их значения при $T = 0$. Тогда выражения (11), (13) примут вид

$$\Gamma_\perp^{\mathrm{DM}}/\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{DM}} \approx 18(r_0/a), \quad \Gamma_\perp^{\mathrm{An}}/\Gamma_{\perp\infty}^{\mathrm{An}} \approx 180x(r_0/a)^3 \tag{14}$$

с $r_0/a \simeq 0.49x^{-0.53}\exp(0.93/x)$ [3,4].

В квантовом критическом режиме ($T \sim J$) $a/r_0 = 0.867x - 0.245$ [4], так что ширина линии монотонно уменьшается с ростом температуры.

2. Обсуждение результатов

Интересно сравнить выражения (14) с результатами, полученными в [9] в рамках теории ЧГН: $\Gamma_\perp^{\mathrm{DM}} \sim T^{3/2}(\xi/a)$, $\Gamma_\perp^{\mathrm{An}} \sim T^{5/2}(\xi/a)^3$, где $\xi = 0.5a \times \exp(1.13/x)$ — спиновая корреляционная длина, найденная на основе ренормгруппового анализа нелинейной σ-модели. Сравнение температурной зависимости спиновой корреляционной длины и скирмионного радиуса, проведенное в работе [3], показало, что они практически совпадают при $T \ll J$. Это означает, что наши результаты качественно согласуются с теорией ЧГН: различие сводится к степенному множителю $T^{3/2}$, который не является основным на фоне экспоненты. Для $J = 1580\,\mathrm{K}$ и $D = 0.7\,\mathrm{meV}$, $A = 3\,\mu\mathrm{eV}$ [9] оценки полной скорости электронной релаксации $\Gamma_\perp = \Gamma_\perp^{\mathrm{DM}} + \Gamma_\perp^{\mathrm{An}}$ по формулам (14) дают $\Gamma_\perp(400\,\mathrm{K}) \approx 60\,\mathrm{kG}$, $\Gamma_\perp(500\,\mathrm{K}) \approx 20\,\mathrm{kG}$, причем вклад $\Gamma_\perp^{\mathrm{An}}$ в общую величину $\Gamma_\perp$ составляет приблизительно 20% при $T = 400\,\mathrm{K}$ и 5% при $T = 500\,\mathrm{K}$. Как видно, количественное расхождение с ренормгрупповым подходом довольно велико (соответствующие выражения Лазуты приводят к значениям $\Gamma_\perp(400\,\mathrm{K}) = 1\,\mathrm{kG}$, $\Gamma_\perp(500\,\mathrm{K}) = 0.4\,\mathrm{kG}$). Большие величины, полученные в рамках скирмионной модели, могли бы объяснить отсутствие сигнала ЭПР при низких температурах. С другой стороны, наши вычисления в квантовом критическом режиме показывают, что $\Gamma_\perp$ монотонно убывает с ростом температуры, стремясь к своему пределу при $T/J \gg 1$ ($\Gamma_{\perp\infty} \approx 70\,\mathrm{G}$). При достаточно высоких температурах $\Gamma_\perp$ должна достичь реально измеряемых величин, но, как показали недавние экспериментальные исследования [16], сигнал ЭПР в слоистых купратах не наблюдался вплоть до $T = 1150\,\mathrm{K}$. Возможно, это связано с включением дополнительных механизмов (например, спин-фононного взаимодействия), ускоряющих релаксацию при высоких температурах [17].

Следует отметить, что в работе [9] $\Gamma_\perp^{\mathrm{DM}}$ зависит от T так же, как и скорость ядерной релаксации, найденная в [7]. В нашем подходе степенные множители разные ($T^{3/2}$ для ядерной и константа для электронной релаксации). Такое различие, очевидно, имеет значение в квантовом критическом режиме, когда a/ξ зависит от T не экспоненциально, а линейно. Это может оказаться существенным при рассмотрении допированных соединений, в которых квантовый критический режим возникает при значительно более низких температурах [18].

В заключение заметим, что скирмионный подход описывает, по-видимому, те же физические явления, что и методы, предлагаемые ранее. Основное различие заключается в использовании противоположных масштабов в качестве исходного пункта рассмотрения: микроскопического — в нашем случае и большого — в теориях ЧГН и $1/N$-разложения.

Список литературы

[1] S. Chakravarty, B. Halperin, D. Nelson. Phys. Rev. **B14**, *4* (1989).
[2] A.V. Chubukov, S. Sachdev, J. Ye. Phys. Rev. **B49**, *17*, 11 919 (1994).
[3] С.И. Белов, Б.И. Кочелаев. ФТТ **39**, *4*, 656 (1997).
[4] S.I. Belov, B.I. Kochelaev. Solid Stat. Commun. **103**, *4*, 249 (1997).
[5] S.I. Belov, B.I. Kochelaev. Solid Stat. Commun. **106**, *4*, 207 (1998).
[6] S.I. Belov, B.I. Kochelaev. Journal of Superconductivity (in press).
[7] S. Chakravarty, R. Orbach. Phys. Rev. Lett. **64**, *2*, 224 (1990).
[8] S. Tyc, B. Halperin, S. Chakravarty. Phys. Rev. Lett. **62**, *7*, 835 (1989).
[9] A.V. Lazuta. Physica **C181**, 127 (1991).
[10] F. Waldner. J. Magn. Magn. Mater. **54–57**, 873 (1986).
[11] F. Waldner. J. Magn. Magn. Mater. **104–107**, 793 (1992).
[12] C. Zaspel, T. Grigereit, J. Drumheller. Phys. Rev. Lett. **74**, *2*, 4539 (1995).
[13] T. Skyrme. Proc. Roy. Soc. Lond **262**, 237 (1961).
[14] А.А. Белавин, А.М. Поляков. Письма в ЖЭТФ **22**, *10*, 503 (1975).
[15] С.А. Альтшулер, Б.М. Козырев. Электронный парамагнитный резонанс. Физматгиз., М. (1961).
[16] P. Simon, J.M. Bassat, S.B. Oseroff, Z. Fisk, S.-W. Cheong, A. Wattiaux, S. Schultz. Phys. Rev. **B48**, *6*, 4216 (1993).
[17] B.I. Kochelaev. Journal of Superconductivity **12**, 53 (1999).