

537.611

СОЛИТОНЫ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ МАГНЕТИКАХ И ИХ ИССЛЕДОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Ю. А. Изюмов

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|-----|
| Введение | 553 |
| 1. Нелинейная динамика квазиодномерного ферромагнетика с анизотропией «легкая плоскость» в магнитном поле | 555 |
| 1.1. Сведение динамики к уравнению синус-Гордона. 1.2. Динамические структурные факторы солитона. 1.3. Интерференция между солитонами и магнонами. | |
| 2. Исследование солитонов в квазиодномерном ферромагнетике CsNiF ₃ методами рассеяния нейтронов | 564 |
| 2.1. Общие выражения для сечения рассеяния. 2.2. Эксперименты с неполяризованными нейтронами. 2.3. Эксперименты на поляризованных нейтронах. | |
| 3. Термодинамика квазиодномерного ферромагнетика с конечной анизотропией | |
| 3.1. Флуктуации с выходом спинов из базисной плоскости. 3.2. Проявление солитонов в термодинамике магнетика. | |
| 4. Учет квантовых поправок и дискретности цепочки | 575 |
| 4.1. Квантовые поправки в квазиклассическом приближении. 4.2. За пределами квазиклассического приближения. 4.3. Солитоны в дискретной ферромагнитной цепочке. | |
| 5. Солитоны в квазиодномерном антиферромагнетике с анизотропией «легкая плоскость» | 579 |
| 5.1. Сведение динамики к уравнению синус-Гордона. 5.2. Особенности динамических структурных факторов. 5.3. Исследование спиновой динамики в кристалле ТММС методами неупругого рассеяния нейтронов. | |
| 6. Солитоны в квазиодномерных антиферромагнетиках с анизотропией «легкая ось» | 588 |
| 6.1. Нелинейная динамика квазиодномерного ферромагнетика изинговского типа. 6.2. Исследование спиновой динамики в кристаллах CsCoCl ₃ и CsCoBr ₃ . | |
| Заключение | 599 |
| Список литературы | 505 |

ВВЕДЕНИЕ

Более десяти лет назад Крумхансл и Шриффер¹, рассматривая одномерную модель атомной цепочки с двухъямным потенциалом (ϕ^4 -модель), показали, что ее нелинейные локализованные состояния — доменные стенки — могут рассматриваться как элементарные возбуждения системы наряду с линейными возбуждениями малой амплитуды — фононами. Доменные стенки представляют локализованные образования (солитоны), которые находятся в термодинамическом равновесии друг с другом и с фононами, так что при достаточно низких температурах, когда плотность солитонов мала, система может описываться газом солитонов и фононов. Позднее было показано², что концепция газа локализованных и нелокализованных квазичастиц может быть применена к различным одномерным системам, описываемым, например, уравнением синус-Гордона или другим нелинейным уравнением. Оказалось при этом, что взаимодействие солитонов с линейными возбуждениями сводится лишь к сдвигу фазы при рассеянии их на солитоне.

Экспериментальную проверку концепции идеального газа солитонов в квазиодномерных системах проще всего выполнить на магнитных систе-

мах — квазиодномерных ферромагнетиках и антиферромагнетиках, поскольку в достаточно анизотропных кристаллах легче всего достичь условий, в которых магнитная система вела бы себя как одномерная. В 1978 г. Микеска³ показал, что динамика квазиодномерного ферромагнетика с анизотропией «легкая плоскость» во внешнем магнитном поле, лежащем в этой плоскости, сводится к уравнению синус-Гордона (SG-уравнению), которое имеет солитонное решение, описывающее локализованный поворот на 2π магнитных моментов, лежащих в легкой плоскости, при движении вдоль цепочки. Был рассчитан динамический структурный фактор солитона, определяющий сечение неупругого рассеяния нейтронов, и оказалось, что рассеяние на солитоне приводит к центральному (квазиупругому) пику с гауссовым распределением по переданным энергиям. В том же году Кьемс и Стейнер⁴ наблюдали такой пик в известном квазиодномерном ферромагнетике CsNiF_3 и интерпретировали это как первое экспериментальное наблюдение солитона в квазиодномерной магнитной системе. Вскоре Рейтер⁵ выдвинул серьезное возражение против солитонной интерпретации наблюдаемого эффекта, поскольку двухмагнонное рассеяние (с одновременным испусканием и поглощением магнона) также должно давать центральный пик с аналогичной зависимостью ширины от переданного импульса.

Эти работы дали толчок для интенсивного экспериментального^{6–15} и теоретического^{16–24} исследования солитонов в CsNiF_3 . Использование поляризованных нейтронов позволило разделить вклады в динамический структурный фактор от продольных и поперечных по отношению к магнитному полю компонент спина и тем самым определить структуру солитона в двух ортогональных направлениях.

В теории возникло множество вопросов, из которых важнейшими первоначально были два: как учесть интерференцию солитонов и магнонов и насколько справедливы для CsNiF_3 упрощения, сводящие спиновую динамику гейзенберговской спиновой цепочки к SG-уравнению. Решение первого вопроса¹⁷ было намечено уже в весьма общей работе², тогда как второй вопрос распался на ряд отдельных трудных проблем: учет при конечной величине анизотропии флуктуации, выводящих спины из легкой плоскости²⁵; роль квантовых эффектов для цепочки с конечными значениями спина^{19,26,27}; роль дискретности^{21,28}.

Между тем теоретически²⁹ и экспериментально³⁰ было показано, что солитонный вклад в термодинамику приводит к характерному поведению теплоемкости с температурой и полем, так что исследование аномалий термодинамических величин стало дополнительным к нейтронной спектроскопии средством изучения солитонов в квазиодномерных магнетиках.

Круг изучаемых в настоящее время объектов сильно расширился. Так, было показано теоретически³¹, что динамика квазиодномерного антиферромагнетика с анизотропией «легкая плоскость» также сводится к SG-уравнению, но только с вращением спина на половину полного оборота (π -солитон), и аномалии, связанные с этим обстоятельством, были выявлены в экспериментах с рассеянием нейтронов^{32,33} на известном квазиодномерном антиферромагнетике ТММС. К настоящему времени исследовано различными экспериментальными методами довольно много квазиодномерных магнетиков, и в ряде из них совокупность экспериментальных данных показывает, что их динамика в определенном интервале температур и полей не может быть объяснена без привлечения понятия о солитоне как квазичастице. Следует добавить, что нелинейные возбуждения исследовались теоретически³⁴ и экспериментально³⁵ и в другом типе квазиодномерных систем, с анизотропией «легкая ось» (изинговский тип магнетика) без приложенного поля.

Отметим, что нелинейные объекты в трехмерных кристаллах с модулированными магнитными структурами — солитонные решетки — исследовались с помощью рассеяния нейтронов^{36–39}, однако это были элементы структуры с макроскопическим числом спинов в каждом из них, и они не могут

дать собственного вклада в динамику и в неупругое рассеяние нейтронов соответственно. Только в квазиодномерных системах солитон ведет себя как подвижная квазичастица и может проявить себя в неупругом рассеянии нейтронов и в термодинамике таких систем.

Целью настоящего обзора является систематическое изложение теории и анализ на ее основе имеющихся многочисленных экспериментальных исследований нелинейной динамики квазиодномерных магнетиков. Выводы, получаемые из этих исследований, весьма поучительны и во многом определяют общее поведение нелинейных возбуждений в квазиодномерных системах.

1. НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА КВАЗИОДНОМЕРНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА С АНИЗОТРОПИЕЙ «ЛЕГКАЯ ПЛОСКОСТЬ» В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1.1. Сведение динамики к уравнению синус - Гордона

Рассмотрим одномерную цепочку атомов в направлении единичного вектора $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$, находящуюся в магнитном поле \mathbf{H} . Простейший гамильтониан, включающий обменное взаимодействие и одноионную анизотропию,

$$\mathcal{H} = -J \sum_l \mathbf{S}_l \mathbf{S}_{l+1} + A \sum_l \tilde{S}_l^2 - g\mu_0 \mathbf{H} \sum_l \mathbf{S}_l, \quad (1.1)$$

описывает ферромагнетик типа «легкая плоскость», если $J > 0$ и $A > 0$.

В классическом пределе ($S \gg 1$) динамика спина описывается общим уравнением

$$\hbar \frac{d\mathbf{S}_l}{dt} = [\mathbf{S}_l \mathbf{H}_{\text{эфф}}], \quad (1.2)$$

где эффективное поле

$$\mathbf{H}_{\text{эфф}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_l} = J (\mathbf{S}_{l-1} + \mathbf{S}_{l+1}) - 2AS_l^2 \mathbf{n} + g\mu_0 \mathbf{H} \quad (1.3)$$

зависит само от векторов \mathbf{S}_l , благодаря чему уравнение движения для спина является нелинейным. Запишем это уравнение в полярной системе координат с осью z , направленной вдоль вектора цепочки \mathbf{n} :

$$\mathbf{S}_l = S (\sin \theta_l \cos \varphi_l, \sin \theta_l \sin \varphi_l, \cos \theta_l). \quad (1.4)$$

В континуальном пределе (параметр решетки $a \rightarrow 0$) разностная система уравнений сводится к паре дифференциальных уравнений для углов $\theta(z, t)$, $\varphi(z, t)$. Рассмотрим далее случай, когда внешнее поле приложено в плоскости анизотропии (вдоль оси x) и выполнены условия

$$g\mu_0 H \ll A \ll J. \quad (1.5)$$

В этих условиях уравнения для θ и φ имеют вид

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \cos \theta &= -g\mu_0 H \sin \theta \cdot \sin \varphi + Sa^2 J \frac{\partial}{\partial z} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \\ \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= 2AS \cos \theta. \end{aligned} \quad (1.6)$$

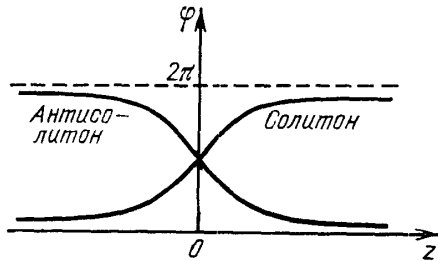
При сильной анизотропии спины должны лежать в основном в плоскости анизотропии, поэтому угол $\theta \approx \pi/2$, т. е. $\sin \theta \approx 1$. Комбинируя оба уравнения (1.6) и заменяя $\sin \theta$ на 1, получаем приближенное уравнение для азимутального угла $\varphi(z, t)$ ³:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = k_0^2 \sin \varphi, \quad (1.7)$$

где введены постоянные c — размерности скорости и k_0 — размерности обратной длины:

$$c^2 = \frac{2AJ S^2 a^2}{\hbar^2}, \quad k_0^2 = \frac{g\mu_0 H}{SJa^2}. \quad (1.8)$$

Таким образом, движение вектора магнитного момента (спина) в плоскости анизотропии определяется известным нелинейным уравнением синус-Гордона. Его частные решения вида $\varphi(z, t) = \varphi(\xi)$, где $\xi = z - vt$, могут быть легко получены интегрированием левой и правой части уравнения (1.7) по φ . Для граничных условий



$$\frac{d\varphi}{d\xi} = 0 \text{ при } \varphi = 0, 2\pi \quad (1.9)$$

они имеют вид

$$\varphi(z, t) = 4 \operatorname{arctg} \exp [\pm k_0 \gamma (z - vt - z_0)], \quad (1.10)$$

где $\gamma = [1 - (v^2/c^2)]^{-1/2}$, а v и z_0 — постоянные интегрирования, имеющие смысл скорости и начальной координаты.

Оба решения описывают локализованное изменение фазы от двух физически эквивалентных значений $\varphi = 0$ и $\varphi = 2\pi$ (рис. 1), что означает

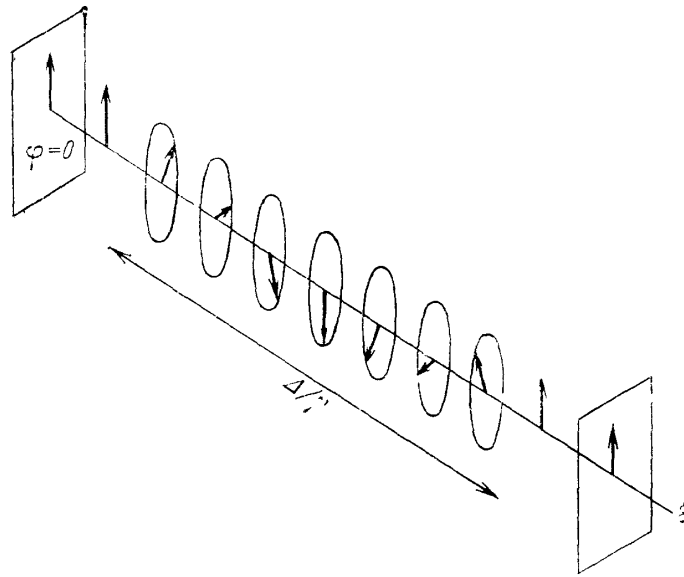


Рис. 2. Солитон в одномерной цепочке спинов с анизотропией «легкая плоскость»

поворот вектора спина S в плоскости на угол 2π на интервале ξ порядка $1/k_0\gamma$ (рис. 2). Эти локализованные решения принято называть солитоном и антисолитоном.

Подсчитаем энергию E_{sol} образования спинового возмущения в цепочке, описываемого солитоном (1.10). Записывая гамильтониан (1.1) в континуальном пределе и производя приближения, соответствующие условиям (1.5), получаем

$$\frac{\hbar c}{S^2 J a} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \right] + k_0^2 (1 - \cos \varphi) \right\}. \quad (1.11)$$

Отметим, что минимизация этого функционала энергии дает SG-уравнение для фазы, используя которое, получаем для односолитонного решения

$$\frac{E_{\text{sol}}}{S^2 J a} = k_0 \gamma \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(\frac{d\varphi}{d\xi} \right)^2 = 8k_0 \gamma. \quad (1.12)$$

Вид решения (1.10) позволяет интерпретировать солитон как движущуюся со скоростью v локализованную в точке z_0 «релятивистскую» частицу с энергией покоя $\varepsilon_s = 8k_0 S^2 J a$ и массой $m_s = \varepsilon_s / c^2$. В этих терминах в нерелятивистском пределе ($v \ll c$) получаем энергию солитона:

$$E_{\text{sol}} = \varepsilon_s \gamma = \varepsilon_s + \frac{m_s v^2}{2} + \dots \quad (1.13)$$

Предельная скорость c является скоростью линейных флуктуации фазы магнитного момента (магнонов), описываемых линеаризованным SG-уравнением:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = k_0^2 \Phi, \quad (1.14)$$

которым отвечает закон дисперсии частот

$$\omega_k = c (k_0^2 + k^2)^{1/2}. \quad (1.15)$$

Таким образом, динамика магнитного момента одномерного легкоплоскостного магнетика в поперечном цепочке магнитном поле описывается линейными нелокализованными возбуждениями — спиновыми волнами и нелинейными локализованными возбуждениями — солитонами. Кроме простейших решений (1.10) уравнение синус-Гордон имеет много других нелинейных решений. В классе локализованных решений (в солитонном секторе) имеется два типа решений: n -солитоны и бризеры⁴⁰. Первые из них можно рассматривать как совокупность n отдельных солитонов, каждый со своими параметрами v_j и z_{0j} — скоростью и координатой центра, для которых выполняется принцип асимптотической суперпозиции. Он заключается в том, что отдельные солитоны после столкновения восстанавливают свою форму, так что единственным результатом их столкновения является изменение фазы. Именно это обстоятельство и позволяет трактовать n -солитонное решение (при малой плотности солитонов в системе) как суперпозицию независимых квазичастиц^{1,2}.

Второй тип решений — бризеры описывают локализованные состояния с некоторыми внутренними степенями свободы и могут в определенном смысле трактоваться как связанные состояния солитонов (солитон + анти-солитон).

В отличие от солитонов (1.10) бризеры зависят от двух параметров v и ω ⁴¹:

$$\varphi_B(z, t) = 4 \arctg \frac{[(\omega_0^2/\omega^2) - 1]^{1/2} \sin \{\gamma \omega [t - (vz/c^2)]\}}{\text{ch} \{k_0 \gamma (z - vt) [1 - (\omega^2/\omega_0^2)]^{1/2}\}},$$

один из которых v — скорость, а другой ω — частота прецессии, причем $v < c$, а $\omega < \omega_0$, где $\omega_0 = \omega_{k=0}$ — минимальная частота спиновых волн. Энергия бризера E_B связана с энергией солитона соотношением

$$E_B = 2E_{\text{sol}} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_0^2}\right)^{1/2}.$$

Энергия покоя бризера меняется от $2E_{\text{sol}}$ до 0 при изменении ω , а ширина его меняется при этом от $1/k_0$ до ∞ . Таким образом, эти два нелинейных возбуждения — солитон и бризер — имеют очень различные свойства: солитон всегда остается локализованным возбуждением, в то время как бризер постепенно переходит от локализованного состояния к делокализованному, когда $\omega \rightarrow \omega_0$.

Линейные нелокализованные решения, описываемые плоскими волнами, должны изменять характер с ростом амплитуды возбуждений, но при не слишком больших амплитудах это изменение можно рассматривать как возмущение за счет взаимодействия с солитонами. Итак, в общем случае магнитное состояние ферромагнитной цепочки спинов следует рассматривать как совокупность спиновых волн, солитонов и бризеров, взаимодействующих друг с другом.

Мы будем изучать динамику такой системы при низких температурах ($kT \ll E_{\text{sol}}$), когда число термически возбужденных солитонов мало и в нулевом приближении их можно рассматривать как газ частиц, не взаимодействующих друг с другом, а также со спиновыми волнами.

1.2. Динамические структурные факторы солитона

Микеска³ впервые показал, каким образом в неупругом рассеянии нейтронов должны проявляться нелинейные возбуждения магнитной цепочки, описываемые солитонами SG-уравнения. Сечение неупругого магнитного рассеяния определяется динамическим структурным фактором $S^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$, который представляет собой фурье-компоненту по пространственно-временным переменным от коррелятора магнитного (спинового) момента

$$G_{ll'}^{\alpha\beta}(t) = \langle S^{\alpha}(t) S_l^{\beta}(0) \rangle; \quad (1.16)$$

здесь $\langle \dots \rangle$ — символ статистического усреднения системы с полным гамильтонианом \mathcal{H} .

Введем структурные факторы $S^{\parallel}(\mathbf{q}, \omega)$ и $S^{\perp}(\mathbf{q}, \omega)$, отвечающие корреляциям продольных (по отношению к магнитному полю) компонент спина $\langle S_x^{\parallel}(t) S_x^{\parallel}(0) \rangle$ и поперечных $\langle S_y^{\perp}(t) S_y^{\perp}(0) \rangle$. Полагая полярный угол $\theta \approx \pi/2$ в выражении (1.4), рассмотрим величины

$$S^{\parallel}(\mathbf{q}, \omega) = S^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int dz dt \exp[i\mathbf{q}z - i\omega t] \langle \cos \varphi(z, t) \cos \varphi(0, 0) \rangle, \quad (1.17)$$

$$S^{\perp}(\mathbf{q}, \omega) = S^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int dz dt \exp[i\mathbf{q}z - i\omega t] \langle \sin \varphi(z, t) \sin \varphi(0, 0) \rangle, \quad (1.18)$$

содержащие полную информацию о рассеянии на возбуждениях цепочки, при которых все спины удерживаются в плоскости анизотропии.

Вычислим сначала эти интегралы для случая, когда в цепочке термически возбужден только один солитон. От этого случая затем легко перейти к системе конечной малой плотности солитонов в условиях $kT \ll E_{\text{sol}}$. При наличии одного солитона в системе усреднение $\langle \dots \rangle_1$ подразумевает интегрирование по z_0 и p (p — импульс, сопряженный координате z_0), т. е. по фазовому пространству солитона со статистическим весом — гиббсовской функцией распределения, т. е.

$$\langle \dots \rangle_1 = \frac{1}{Z_1} \int \int \frac{dp dz_0}{B} (\dots) e^{-E_{\text{sol}}(v)/kT}, \quad (1.19)$$

$$Z_1 = \int \int \frac{dp dz_0}{B} e^{-E_{\text{sol}}(v)/kT}, \quad (1.20)$$

где B — некоторая нормировочная константа, а индекс 1 указывает, что в цепочке имеется один солитон.

Вычислим сначала Z_1 . Из уравнения $z_0 = v = dE_{\text{sol}}/dp$ и $E_{\text{sol}} = \varepsilon_s \gamma$ находим связь между p и v : $dp = (1/c^2) \varepsilon_s \gamma^3 dv$. От интегрирования по v удобно перейти к переменной x : $v/c = \text{th } x$. Тогда из (1.20) получаем

$$Z_1 = \frac{\varepsilon_s}{Bc} L \int_0^{\infty} dx \text{ch } x e^{-\varepsilon_s \text{ch } x/kT} = \frac{\varepsilon_s L}{Bc} K_1\left(\frac{\varepsilon_s}{kT}\right),$$

где $K_1(z)$ — модифицированная функция Ганкеля. Беря асимптотику при больших аргументах $K_1(z) \rightarrow (\pi/2z)^{1/2} e^{-z}$, находим низкотемпературный предел:

$$Z_1 = \frac{L}{Bc} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \varepsilon_s \left(\frac{kT}{\varepsilon_s}\right)^{1/2} e^{-\varepsilon_s/kT}.$$

Найдем связь Z_1 со средним числом солитонов N . Предполагая, что плотность солитонов мала и они, таким образом, не взаимодействуют между собой, можно записать выражение для статистической суммы солитонного газа:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} Z_1^n e^{\mu n/kT} = \exp(Z_1 e^{\mu/kT}),$$

где μ — химический потенциал солитонов. С помощью известного термодинамического тождества находим

$$N = -\frac{\partial F}{\partial \mu} = kT \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = Z_1 e^{\mu/kT}. \quad (1.21)$$

Таким образом, $N \sim Z_1$. Коэффициент пропорциональности, определенный химпотенциалом, должен определяться из вычисления полной статистической суммы SG-системы. В методе трансфер-матрицы этот коэффициент явно вычисляется, и формула (1.21) приводит к следующему выражению для плотности солитонов ¹:

$$n_s = \frac{N}{L} = 4k_0 \left(\frac{\varepsilon_s}{2\pi kT} \right)^{1/2} e^{-\varepsilon_s/kT}. \quad (1.22)$$

В формуле (1.22) учитываются солитоны и антисолитоны. Иногда под n_s понимают плотность только солитонов, тогда соответствующее выражение будет в два раза меньше (1.22).

Для вычисления динамических структурных факторов следует подставить в формулы (1.17) и (1.18) односолитонное решение (1.10). Имеем для него

$$\cos \varphi = 1 - 2 \operatorname{sech}^2 [k_0 \gamma (z - vt - z_0)]. \quad (1.23)$$

После подстановки этого выражения в формулу (1.17) удобно сначала проинтегрировать по t и z , а уже потом взять интеграл по z_0 и p , т. е. произвести усреднение по статистическому ансамблю. Это приводит к следующему ответу ³:

$$S^{\parallel}(q, \omega) = S^2 \left(1 - 8 \frac{n_s}{k_0} \right) \delta(q) \delta(\omega) + \frac{8n_s S^2}{\pi^2 k_0^2} \left(\frac{2\pi\varepsilon_s}{c^2 q^2 kT} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\varepsilon_s}{2c^2 q^2 kT} \omega^2 \right) \frac{(\pi q/2k_0)^2}{\operatorname{sh}^2(\pi q/2k_0)}. \quad (1.24)$$

При получении этого выражения мы умножили вклад одного солитона на полное число солитонов в системе, заменив фактор $1/L$, возникающий при вычислении выражения (1.17) с одним солитоном, на фактор $N/L \sim n_s$.

Аналогично вычисляется поперечный динамический фактор (1.18) ¹⁵:

$$S^{\perp}(q, \omega) = \frac{8n_s S^2}{\pi^2 k_0^2} \left(\frac{2\pi\varepsilon_s}{c^2 q^2 kT} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\varepsilon_s}{2c^2 q^2 kT} \omega^2 \right) \frac{(\pi q/2k_0)^2}{\operatorname{ch}^2(\pi q/2k_0)}. \quad (1.25)$$

Отметим, что формулы (1.24) и (1.25) получены при использовании нерелятивистского приближения (1.13) в энергии солитона, что и приводит к гауссову распределению по частоте ω . Если сохранить полную лоренц-инвариантную формулу для энергии солитона $E_{\text{sol}} = \varepsilon_s \gamma$, то мы будем иметь более сложное распределение по частотам. Например, для функции $S^{\perp}(q, \omega)$ имеем

$$S^{\perp}(q, \omega) = \frac{16S^2\varepsilon_s}{\pi^2 k_0 kT} \frac{1}{cq [1 - (\omega^2/q^2 c^2)]^{1/2}} \times \\ \times \exp \left[-\frac{\varepsilon_s}{kT} \left(1 - \frac{\omega^2}{q^2 c^2} \right)^{-1/2} \right] \left\{ \frac{(\pi q/2k_0) [1 - (\omega^2 c^2/q^2)]^{1/2}}{\operatorname{ch} \{ (\pi q/2k_0) [1 - (\omega^2/c^2)]^{1/2} \}} \right\}^2$$

и аналогично для $S^{\parallel}(q, \omega)$ с заменой в знаменателе ch на sh ^{6,42}.

Вернемся теперь к формулам (1.24) и (1.25), определяющим при низких температурах частотную и угловую зависимости рассеяния на солитонах. Мы видим, что продольный динамический фактор описывает упругий брэггов-

ский пик и квазиупругий пик гауссовой формы с шириной

$$\delta\omega = cq \left(\frac{kT}{\varepsilon_s} \right)^{1/2}, \quad (1.26)$$

имеющей характерную зависимость от T и q .

Аналогичным образом можно вычислить динамический структурный фактор $S^{zz}(q, \omega)$, определяющий внеплоскостные корреляции. Как следует из второго уравнения в (1.6), которое можно переписать в виде $S^z = (\hbar/2A) \dot{\phi}$, эти корреляции имеют динамический характер, поскольку компонента спина S^z появляется лишь за счет изменения фазы ϕ со временем. Используя явный вид решения (1.10), получим выражение

$$\dot{\phi} = \mp \frac{2k_0\gamma v}{\text{ch}[k_0\gamma(z - vt - z_0)]},$$

позволяющее сосчитать коррелятор $S^{zz} \sim \langle \dot{\phi}\dot{\phi} \rangle$, а также корреляторы S^{yz} и S^{xz} .

Полную совокупность корреляторов S^{xx} , S^{yy} , S^{zz} , S^{yz} , S^{xy} , вычисленных в нерелятивистском приближении, запишем в виде

$$S_{\text{sol}}^{\alpha\beta}(q, \omega) = n_s \frac{8S^2}{\pi^2 k_0^2} \left(\frac{2\pi\varepsilon_s}{c^2 q^2 kT} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_s}{2c^2 q^2 kT} \omega^2\right) f_\alpha(q) f_\beta^*(q), \quad (1.27)$$

где

$$f_x(q) = \frac{\pi q/2k_0}{\text{sh}(\pi q/2k_0)}, \quad f_y(q) = i \frac{\pi q/2k_0}{\text{ch}(\pi q/2k_0)}, \quad f_z(q) = \frac{(\pi k_0/4q) \hbar \omega/A}{\text{ch}(\pi q/2k_0)}$$

— форм-факторы солитона в различных направлениях. В направлении цепочки форм-фактор оказывается динамическим и равен нулю при $\omega = 0$. Корреляторы S^{xz} и S^{xy} (и симметричные им) равны нулю за счет суммирования по солитонам и антисолитонам, которые дают в них вклад с разным знаком.

1.3. Интерференция между солитонами и магнонами

Выражения (1.24) и (1.25) получены при полном игнорировании линейных магнонов. Интерференция между солитонами и магнонами ведет к важным поправкам, существенно изменяющим интенсивность рассеяния на обоих типах квазичастиц — локализованных и нелокализованных. Для учета этих поправок при низких температурах ($kT \ll \varepsilon_s$) можно воспользоваться видом нелокализованного решения SG-уравнения с волновым вектором q и частотой ω_q в присутствии одного солитона, движущегося со скоростью v_j и находящегося в начальный момент времени $t = 0$ в точке z_{0j} :

$$\psi_q(z, t) = \exp[i(qz - \omega t)] A_{qj}(z, t) \exp(i\Phi_{qj}(z, t)), \quad (1.28)$$

где амплитуда и фаза в нерелятивистском пределе ($v_j \ll c$) задаются выражениями^{17,43}

$$A_{qj}(z, t) = \left\{ 1 - k_0^2 \frac{1 - \text{th}^2[k_0(z - v_j t - z_{0j})]}{[q - (v_j \omega_q/c^2)]^2 + k_0^2} \right\}^{1/2}, \quad (1.29)$$

$$\Phi_{qj}(z, t) = \text{arctg} \frac{k_0 \text{th}[k_0(z - v_j t - z_{0j})]}{q - (v_j \omega_q/c^2)} + \text{arctg} \frac{k_0 \text{th}(k_0 z_{0j})}{q - (v_j \omega_q/c^2)}. \quad (1.30)$$

Как видим, возмущение магнонного решения $\exp[i(qz - \omega t)]$ сводится к понижению амплитуды магнона вблизи солитонного центра и к асимптотическому сдвигу фазы (для покоящегося солитона):

$$\Delta\Phi_q = 2 \text{arctg} \frac{k_0}{q}. \quad (1.31)$$

Этот сдвиг выражает изменение в плотности состояний непрерывного спектра²

$$\rho(q) = \frac{L}{2\pi} + \frac{1}{2\pi} \frac{d\Delta\Phi_q}{dq} = \frac{L}{2\pi} \left(1 - \frac{2}{L} \frac{k_0}{q^2 + k_0^2} \right). \quad (1.32)$$

При конечной плотности солитонов n_s величина $1/L$ должна быть заменена на n_s и вместо формулы (1.32) теперь имеем

$$\rho(q) = \frac{L}{2\pi} \left(1 - 2n_s \frac{k_0}{q^2 + k_0^2} \right). \quad (1.33)$$

При низких температурах в первом порядке по n_s достаточно учесть только те конфигурации, в которых расстояние между солитонами много больше ширины солитона, поэтому односолитонное решение (1.28) можно обобщить на случай N солитонов следующим образом:

$$\psi_q(z, t) = \exp[i(qz - \omega_q t)] \prod_{j=1}^N A_{qj}(z, t) \exp(i\Phi_{qj}(z, t)). \quad (1.34)$$

Для того чтобы исследовать интерференцию между солитонами и магнонами, мы представим поле φ как линейную суперпозицию N односолитонных решений SG-уравнения и делокализованных магنونных решений с произвольными амплитудами:

$$\varphi(z, t) = \sum_{j=1}^N \varphi_{\text{sol}}^j(z - v_j t - z_{0j}) + \text{Re} \sum_q \eta_q \psi_q(z, t). \quad (1.35)$$

Нетрудно представить вклад в продольную корреляционную функцию (1.17) в виде ряда по степеням η_q . Вычисления с точностью до членов η_q^2 позволяют записать $S^{\parallel}(q, \omega)$ в виде трех вкладов¹⁷:

$$S^{\parallel}(q, \omega) = S_{\text{Bragg}}(q, \omega) + S_{\text{sol}}^{\parallel}(q, \omega) + S_{\text{m}}^{\parallel}(q, \omega), \quad (1.36)$$

где

$$S_{\text{Bragg}}(q, \omega) = \left(1 - \frac{kT}{2S^2 J a k_0} - 8 \frac{n_s}{k_0} + \frac{13}{3} \frac{n_s}{k_0} \frac{kT}{S^2 J k_0 a} \right) \delta(q) \delta(\omega). \quad (1.37)$$

$$S_{\text{sol}}^{\parallel}(q, \omega) = \left[1 - \frac{kT}{2S^2 J a k_0} \left(1 - \frac{k_0^2 + q^2}{12k_0^2} \right) + \dots \right] S_{\text{sol}}^{0\parallel}(q, \omega); \quad (1.38)$$

здесь $S_{\text{sol}}^{0\parallel}$ соответствует второму члену в выражении (1.24).

Магنونный вклад $S_{\text{m}}^{\parallel}(q, \omega)$ представляется в виде сложного выражения, и мы приведем лишь $S_{\text{m}}^{\parallel}(q)$, представляющее интеграл по энергии ω . В пределе больших волновых векторов $\pi q \gg 2k_0$ $S_{\text{m}}^{\parallel}(q)$ становится весьма простым:

$$S_{\text{m}}^{\parallel}(q) = \frac{8}{3} \frac{n_s}{k_0} \frac{q^2}{q^2 + k_0^2} S_{\text{m}}^{\perp}(q), \quad (1.39)$$

где $S_{\text{m}}^{\perp}(q)$ — интегральный вклад в магنونную часть поперечной корреляционной функции $S^{\perp}(q, \omega)$.

При получении выражений (1.37) — (1.39) было проведено усреднение магنونных амплитуд $\langle |\eta_k|^2 \rangle$ с помощью гиббсовского распределения с энергией магنونной подсистемы:

$$E_{\text{m}} = \frac{S^2 J a^3}{2} \int dk (k^2 + k_0^2) |\eta_k|^2, \quad (1.40)$$

возникающей при линеаризации функционала (1.11). Усреднение сводится к вычислению элементарного гауссового континуального интеграла и приводит к ответу

$$\langle |\eta_k|^2 \rangle = \frac{kT}{S^2 J a} \frac{1}{k^2 + k_0^2}. \quad (1.41)$$

Кроме того, при вычислении сумм по волновым векторам магнонов использовалось интегрирование по непрерывному спектру

$$\sum_k \dots = \int dk \rho(k) \dots$$

с возмущенной солитонами плотностью состояний (1.33).

Обсудим теперь результаты, выраженные формулами (1.36) — (1.39). В формулы для интенсивности брэгговского и квазиупругого солитонного пиков входят поправки, пропорциональные kT как мере плотности магнонов в классическом пределе. В брэгговском пике присутствие солитонов и магнонов ослабляет его интенсивность в меру плотности этих квазичастиц, однако имеется член $\sim kT n_s$, описывающий интерференцию солитонов и магнонов, который задерживает ослабление упругого когерентного пика.

За счет магнонного рассеяния происходит значительное подавление квазиупругого пика, так что при температуре $kT = 2JS^2(k_0a)$ он формально обращается в нуль, однако при столь высоких температурах следовало бы учитывать в ряду (1.38), а также (1.37) следующие степени температуры за счет ангармонических поправок, поэтому полученные выражения (1.36) — (1.39) нужно рассматривать как первые члены ряда

$$S^{\parallel}(q, \omega) \sim \sum_{n=0}^{\infty} c_n T^n e^{-\varepsilon_s/kT}. \quad (1.42)$$

Другим эффектом проявления солитон-магнонной интерференции является появление магнонного вклада в продольном корреляторе, интенсивность которого пропорциональна плотности магнонов. Мы не привели спектральную зависимость этого вклада в $S^{\parallel}(q, \omega)$, но отметим лишь, что наряду с центральным распределением около $\omega = 0$, описываемым солитонным вкладом (1.38), имеются боковые распределения вокруг $\omega = \pm \omega_q$, интенсивность которых и определяется формулой (1.39).

Поперечная корреляционная функция содержит два вклада:

$$S^{\perp}(q, \omega) = S_{\text{sol}}^{\perp}(q, \omega) + S_{\text{m}}^{\perp}(q, \omega). \quad (1.43)$$

Солитонный вклад перенормируется точно так же, как и в $S^{\parallel}(q, \omega)$, а именно

$$S_{\text{sol}}^{\perp}(q, \omega) = \left[1 - \frac{kT}{2S^2 J k_0 a} \left(1 - \frac{k_0^2 + q^2}{12k_0^2} \right) + \dots \right] S_{\text{sol}}^{0\perp}(q, \omega), \quad (1.44)$$

где $S_{\text{sol}}^{0\perp}$ — выражение нулевого приближения (1.25).

Магнонный вклад в поперечный коррелятор — основной; в частотном распределении $S_{\text{m}}^{\perp}(q, \omega)$ имеются пики при $\omega = \pm \omega_q$, и их интегральная интенсивность дается выражением

$$S_{\text{m}}^{\perp}(q) = \left[1 - \frac{2n_s k_0}{q^2 + k_0^2} \left(1 + \frac{4}{3} \frac{q^2}{k_0^2} \right) + \dots \right] S_{\text{m}}^{0\perp}(q). \quad (1.45)$$

Уменьшение интенсивности магнонного вклада в поперечный коррелятор происходит за счет появления магнонного вклада в продольном корреляторе. Оба эффекта имеют меру малости $\sim n_s$.

В работе¹⁷ показано, что интерференция магнонов с солитонами приводит к уширению магнонных пиков на величину

$$\Gamma_i = 2 \frac{n_s}{k_0} \omega_q \left(\frac{k_0 c}{\omega_q} \right)^3 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{kT}{\pi S^2 J k_0 a} \right)^{1/2} + \frac{c |q|}{\omega_q} \right]. \quad (1.46)$$

Приведенными формулами исчерпываются эффекты солитон-магнонной интерференции в наинизшем порядке по плотности солитонов. В интенсивностях различных вкладов в корреляторы они выражаются поправками $\sim n_s T$ или T . Члены $\sim T^2$ могут появиться лишь за счет ангармонизма в системе магнонов. Для получения этих эффектов представим функционал (1.11) в виде

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{anh}}$, где \mathcal{H}_0 соответствует линейным магнонам, а \mathcal{H}_{anh} содержит члены $\sim \varphi^4$ за счет разложения в (1.11) $\cos \varphi$.

Стандартные вычисления дают ¹⁷

$$S_{2m}^{\parallel}(q, \omega) = \left(\frac{c^2}{2S^2J} \right)^2 \frac{1}{2\pi N} \sum_k \frac{n_{k-(q/2)} n_{k+(q/2)}}{\omega_{k-(q/2)} \omega_{k+(q/2)}} \left[\delta(\omega_{k-(q/2)} - \omega_{k+(q/2)} - \omega) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta(\omega_{k-(q/2)} + \omega_{k+(q/2)} - \omega) + \frac{1}{2} \delta(\omega_{k-(q/2)} + \omega_{k+(q/2)} + \omega) \right], \quad (1.47)$$

где n_k — бозевская функция распределения, которую следует брать в классическом приближении $n_k = kT/\hbar\omega_k$. Мы видим, что имеется два типа двухмагнонных процессов. Один идет с одновременным испусканием и поглощением спиновой волны и дает распределение вокруг энергии $\omega = 0$, два другие представляют одновременное рождение или уничтожение двух спиновых волн. Они начинаются с пороговых энергий $\omega = \pm 2\omega_{q/2}$. Интегральная интенсивность этих двух вкладов может быть вычислена непосредственно из (1.47):

$$\int_{-cq}^{cq} d\omega S_{2m}^{\parallel}(q, \omega) = 2 \int_{2\omega_{q/2}}^{\infty} d\omega S_{2m}^{\parallel}(q, \omega) = \\ = \frac{1}{32\pi k_0} \left(\frac{kT}{S^2 J a k_0} \right)^2 \frac{1}{1 + (q/2k_0)^2}. \quad (1.48)$$

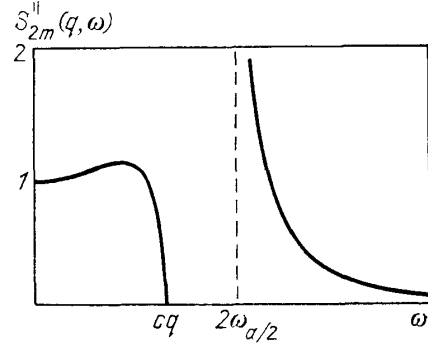


Рис. 3. Двухмагнонный вклад в продольный коррелятор $S^{\parallel}(q, \omega)$ ¹⁷.

Масштаб по оси ординат произвольный. П а р $aq = \pi/10a, \text{ так } \hbar = 0.185$

Спектральное распределение $S_{2m}^{\parallel}(q, \omega)$ показано на рис. 3. Видим, что частотная зависимость центрального пика очень слаба вплоть до $\omega \approx cq$, где распределение довольно резко обрывается. Ширина этого пика зависит линейно от волнового вектора, но не зависит от температуры (в этом классическом пределе). Ширина распределения от солитонного вклада (формула (1.25)) также линейно зависит от q , но имеется существенная зависимость от температуры. Разделение солитонного и двухмагнонного вкладов в квазиупругом центральном пике представляет, очевидно, существенную проблему в интерпретации нейтронного эксперимента.

Аналогичный учет ангармонизма в задаче о поперечной корреляционной функции приводит к следующему выражению для магнонной ее части:

$$S_m^{\perp}(q, \omega) = \left\{ 1 - \frac{kT}{2S^2 J k_0 a} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1}{1 + (q^2/k_0^2)} \right] + \dots \right\} S_m^{0\perp}(q, \omega). \quad (1.49)$$

Снова мы видим появление поправочного члена $\sim T$. Интегральная интенсивность этого вклада при $q = 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S_m^{\perp}(0, \omega) = \frac{kT}{2\pi k_0 S^2 J a k_0} \left(1 - \frac{kT}{4S^2 J a k_0} \right) + O(T^3)$$

находится в согласии с правилом сумм, данным в ⁴⁴.

Нетрудно получить квантовый аналог формулы (1.46) ⁵. Квантовое выражение приводит к температурной зависимости ширины центрального пика: ширина резко возрастает с ростом T и быстро выходит на насыщение.

В заключение отметим место бризеров в этой картине статистического поведения системы, описываемой SG-уравнением. Бризеры являются локализованными возбуждениями с шириной большей, чем k_0^{-1} , и с энергией покоя, меняющейся от нуля до $2\varepsilon_s$. Вследствие того, что их спектр непрерывно распределен и начинается с нуля, их вклад в термодинамические величины должен иметь степенной характер, подобно магнонному вкладу (при $kT \gg \hbar k_0$). В области низких температур ($kT \ll \varepsilon_s$), который мы только и

рассматриваем, вклад от солитонов имеет по температуре неаналитический характер $\sim e^{-e_s/\hbar T}$, тогда как от магнонов и бризеров он должен быть аналитическим (степенным). Это означает, что он может быть получен по теории возмущений, если рассматривать ангармонические поправки в функционале энергии (1.11). Именно это и было продемонстрировано выше, где были получены поправки порядка T и T^2 . После таких вычислений, однако, не остается места для каких-то особых поисков вклада бризеров в термодинамику: их вклад неявным образом уже учтен в степенном ряде вида (1.42)¹⁷.

Динамические структурные факторы бризеров и возможности выделения соответствующего вклада в неупругое рассеяние нейтронов обсуждаются в работах⁷⁸⁻⁸⁰.

На базе изложенного теоретического материала в следующем разделе рассмотрим результаты экспериментального исследования солитонов методом неупругого рассеяния нейтронов.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ СОЛИТОНОВ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ CsNiF₃ МЕТОДАМИ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

2.1. Общие выражения для сечения рассеяния

Дважды дифференциальное сечение магнитного рассеяния с передачей импульса \mathbf{Q} и энергии ω определяется хорошо известным выражением⁴⁵

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dQ} \sim \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega), \quad (2.1)$$

где $S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega)$ — динамический структурный фактор, представляющий фурье-компоненту спинового коррелятора (1.16), а e_α — проекция единичного вектора рассеяния $\mathbf{e} = \mathbf{Q}/Q$.

Угловой фактор в выражении (2.1) такой, что в сечение входят лишь корреляторы от компонент векторов спина, перпендикулярных вектору рассеяния,

$$\mathbf{e} = (1, 0, 0): S^{yy} + S^{zz}, \quad \mathbf{e} = (0, 1, 0): S^{xx} + S^{zz}, \quad \mathbf{e} = (0, 0, 1): S^{xx} + S^{yy}. \quad (2.2)$$

Таким образом, в экспериментах с неполяризованными нейтронами возможно определить лишь сумму двух структурных факторов. Чтобы понять, какую информацию можно получить из этих измерений о солитонах, выпишем основные формулы проведенного теоретического анализа для вкладов в динамический структурный фактор от солитонов и от 2m-процессов. Согласно формулам (1.24) и (1.25), интегральная интенсивность (по переданной энергии) рассеяния на солитонах

$$I_{\text{sol}}^{\parallel} = \int S_{\text{sol}}^{\parallel}(q, \omega) d\omega \sim n_s \left[\frac{\pi q/2k_0}{\text{sh}(\pi q/2k_0)} \right]^2, \quad (2.3)$$

$$I_{\text{sol}}^{\perp} = \int S_{\text{sol}}^{\perp}(q, \omega) d\omega \sim n_s \left[\frac{\pi q/2k_0}{\text{ch}(\pi q/2k_0)} \right]^2, \quad (2.4)$$

определяется квадратом структурного фактора солитона в соответствующем направлении относительно магнитного поля. Величина q здесь представляет компоненту вектора рассеяния \mathbf{Q} на направление цепочки. Интегральный вклад в $S^{zz}(q, \omega)$ оказывается малым по сравнению с $I_{\text{sol}}^{\parallel}$ и I_{sol}^{\perp} , поскольку $S^{zz}(q, \omega)$ содержит дополнительный малый множитель $\sim \omega^2$. Вклады в рассеяние от 2m-процессов содержатся только в продольном корреляторе причем их интегральная интенсивность, согласно (1.48),

$$I_{2m}^{\parallel} \sim \left(\frac{kT}{J S^2 a k_0} \right)^2 \frac{1}{1 + (q/2k_0)^2}. \quad (2.5)$$

Из приведенного ясно, что для выделения вклада от солитонов следует измерить в первую очередь $S^\perp(q, \omega)$ структурный фактор, поскольку $2m$ -процессы вклада в него не дают. Величина $S^\parallel(q, \omega)$ содержит вклад и от солитонов, и от $2m$ -процессов.

2.2. Эксперименты с неполяризованными нейтронами

Идеальным объектом для экспериментального исследования на основе изложенной выше нелинейной динамики является CsNiF_3 . Кристалл состоит из цепочек ионов Ni, окруженных октаэдрами F, которые направлены вдоль гексагональной оси и разделены друг от друга большими ионами Cs⁴⁶. Расстояние между цепочками Ni 6,3 Å, а между атомами Ni вдоль цепочки всего 2,6 Å. Вследствие столь сильной анизотропии разница обменных взаимодействий вдоль цепочки и между цепочками огромна ($\sim 10^3$). При $T_N = 2,61$ К кристалл становится антиферромагнитно упорядоченным за счет слабого отрицательного взаимодействия между цепочками, тогда как вдоль цепочек положительное обменное взаимодействие удерживает спины параллельными. При $T > T_N$ дальний порядок между цепочками разрушается и кристалл может рассматриваться как совокупность независимых одномерных цепочек Ni с ферромагнитным взаимодействием.

Гамильтониан отдельной цепочки, предполагается, имеет форму (1.1) со следующими параметрами:

$$\frac{J}{k} = 23\text{K}, \quad \frac{A}{k} = 5\text{K}, \quad S = 1, \quad g = 2,4, \quad (2.6)$$

полученными из интерпретации линейной динамики магнонов на основе классической трактовки системы (хотя величина спина не удовлетворяет условию $S \gg 1$)⁴⁷. При $T < (AJ/k)^{1/2} \approx 10$ К спины удерживаются, главным образом, в плоскости, поэтому в интервале температур $3\text{K} \lesssim T \lesssim 17$ К она может рассматриваться как легкоплоскостной квазиодномерный ферромагнетик.

Первые исследования на CsNiF_3 показали существование квазиупругого центрального пика⁴, последующее детальное изучение⁶⁻¹⁴ позволило провести сравнение экспериментальных результатов с теорией и дать убедительную интерпретацию их в терминах рассеяния на солитонах. Приведем некоторые из основных результатов по рассеянию нейтронов¹¹.

На рис. 4 и 5 приводятся результаты по неупругому рассеянию нейтронов на CsNiF_3 в зависимости от температуры или волнового вектора. Из рис. 4, а видно, что величина $S^\parallel + S^{zz}$ имеет центральный пик, который увеличивается с ростом температуры. Два боковых пика, наблюдаемых при $T = 3,2$ К, соответствуют рассеянию на спиновых волнах. Рис. 4, б представляет величину $S^\perp + S^{zz}$. Отчетливо видны боковые пики, но нет никакого центрального пика в соответствии с формулой (2.4), согласно которой $S_{\text{sol}}^- = 0$ при $q = 0$. При конечных q в такой геометрии рассеяния должен появиться центральный пик, интенсивность которого проходит через максимум, что мы и наблюдаем на рис. 5. Интегральная интенсивность центрального пика в зависимости от волнового вектора показана на рис. 6. Сплошная и пунктирная кривые вычислены по формуле (2.4) с использованием экспериментального значения интенсивности при $q = 0,045$ и $T = 12$ К. Таким образом, указанное поведение центрального пика в $S^\perp(q, \omega)$ хорошо согласуется с теорией солитонов для SG-приближения.

Интерпретация центрального пика в $S^\parallel(q, \omega)$ требует анализа вклада от солитонов и $2m$ -процессов. Наблюдение сильной температурной зависимости ширины пика указывает на существенный вклад солитонов, поскольку $2m$ -процессы дают ширину пика, не зависящую от температуры. Результа-

ты различных измерений интегральных интенсивностей нейтронов на CsNiF_3 , калиброванные всегда на интенсивность рассеяния на спиновых волнах (при тех же условиях), сведены на рис. 7. Используя измеренную $I_{\text{sol}}^{\perp}(q)$,

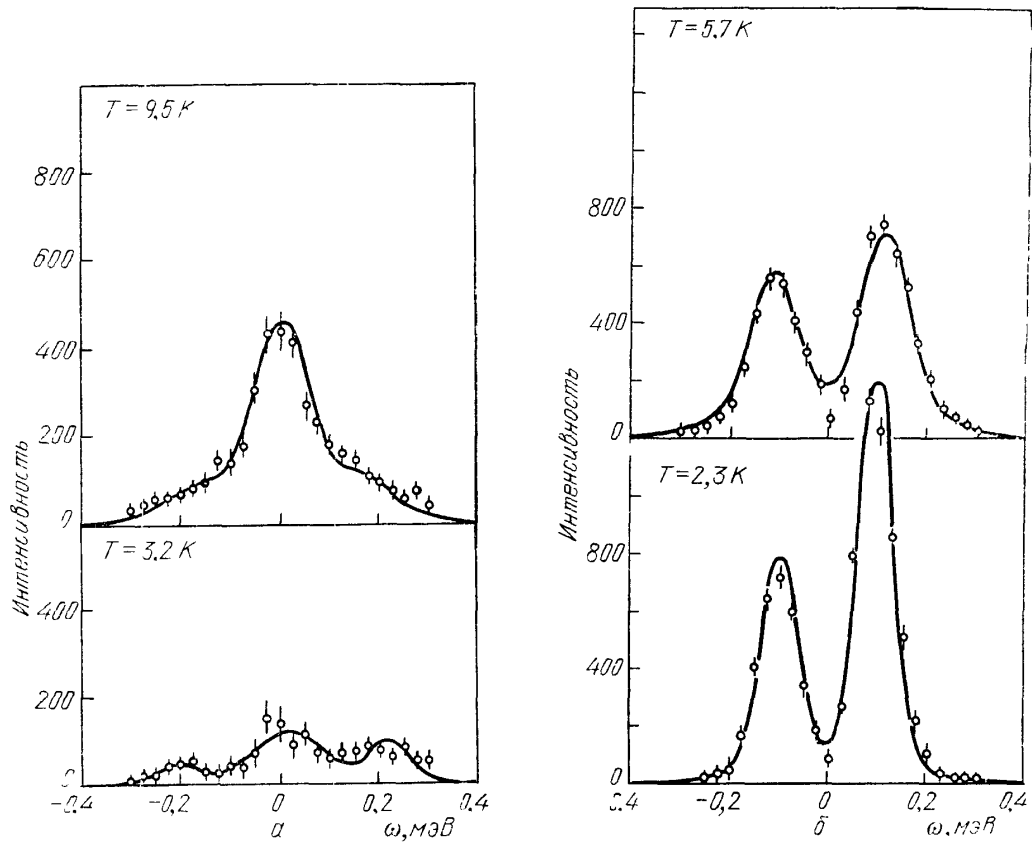


Рис. 4. Спектры нейтронов в CsNiF_3 для различных ориентации вектора рассеяния $\mathbf{Q} = (0,275; 0; 0)$ при $H = 3$ кЭ и $\mathbf{Q} \perp \mathbf{H}$ (а), $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{H}$ (б) (для рис. а счет за 12 мин, для рис. б — за 11 мин)¹¹

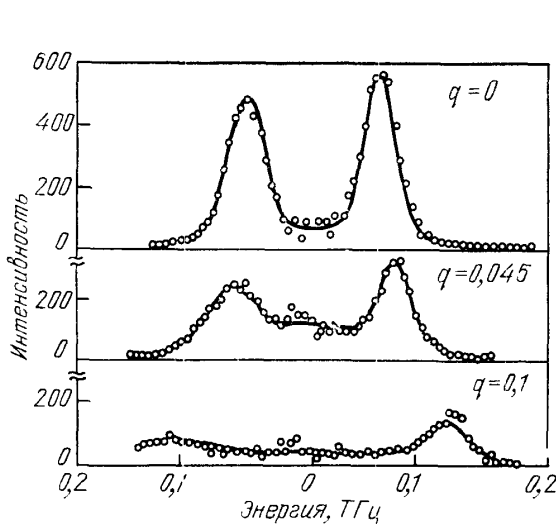


Рис. 5. Спектры нейтронов в CsNiF_3 для различных векторов рассеяния $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{H}$, $\mathbf{Q} = (0,6; 0; -q)$, $H = 10$ кЭ, $T = 12$ К (счет за 348 с)

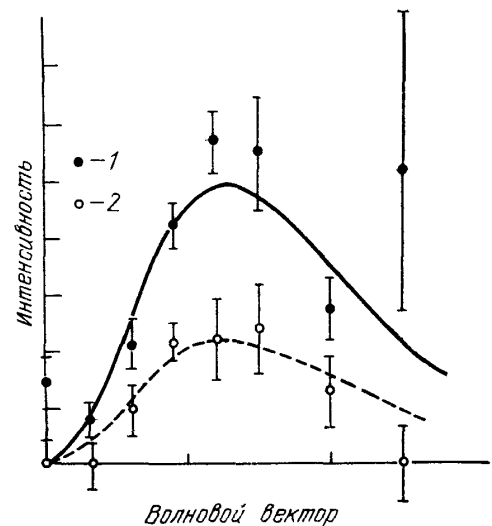


Рис. 6. Интенсивность центральной компоненты для $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{H}$ в зависимости от q при $\mathbf{Q} = (0,6; 0; -q)$ и $H = 10$ кЭ ($T = 12$ К (1) и 9 К (2))

авторы^{9,11} нашли, что вклад в центральный пик от $S^{\parallel}(q, \omega)$ при $q = 0$ от солитонов и от $2m$ -процессов при $T = 12$ К составляет $1/3$ и $2/3$ части соответственно. Точечная кривая на рисунке — теоретическая, рассчитанная из формул для $I_{\text{sol}}^{\parallel}(q)$ и $I_{2m}(q)$ в предположении, что их интенсивности при $q = 0$ относятся как $1/3$ и $2/3$.

Мы видим, таким образом, убедительные доказательства наблюдений солитонов в CsNiF_3 .

Детальное исследование солитонных вкладов проведено в работе⁹. Температурная и q -зависимость ширины центрального пика $\delta\omega$ показывают, что он должен быть результатом наложения двух процессов: рассеяния на солитонах и двухмагнонного рассеяния.

2.3. Эксперименты на поляризованных нейтронах.

Теоретический анализ рассеяния на солитонах целиком основывался на SG-приближении, при котором игнорировались флуктуации компонент спинов, перпендикулярных легкой плоскости. Между тем численное моделирование указывает на важность этих флуктуаций в CsNiF_3 ⁴⁸. Для их экспериментального исследования необходимо выделить вклад в неупругом рассеянии от корреляций $S^{\pm\pm}(q, \omega)$. Выделение отдельных корреляций можно достичь с помощью техники рассеяния поляризованных нейтронов.

Существуют различные методики использования поляризованных нейтронов, которые обладают тем преимуществом, что позволяют отделить слабое магнитное рассеяние от ядерного рассеяния, или вовлечь в рассеяние новые корреляторы спинов при той же геометрии рассеяния за счет изменения поляризации нейтронного пучка.

Сечение рассеяния нейтронного пучка, имеющего поляризацию \mathbf{p}_0 и описывающегося матрицей плотности $\rho = (1 + \mathbf{p}_0 \boldsymbol{\sigma})/2$, выражается следующей формулой⁴⁵:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dQ} \sim \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \gamma'} K^{\gamma\gamma'} (\delta_{\alpha\gamma} - e_{\alpha} e_{\gamma}) (\delta_{\beta\gamma'} - e_{\beta} e_{\gamma'}) S^{\alpha\beta}(Q, \omega), \quad (2.7)$$

где

$$K^{\gamma\gamma'} = \text{Sp}(\sigma^{\gamma'} \rho \sigma^{\gamma}) = \delta_{\gamma\gamma'} + i \varepsilon_{\gamma\gamma'\mu} p_0^{\mu}, \quad (2.8)$$

причем $\varepsilon_{\gamma\gamma'\mu}$ — единичный антисимметричный тензор, а σ^{α} — матрицы Паули. Соотношение (2.7) выражает зависимость сечения рассеяния от поляризации падающего пучка; при $p_0 = 0$ (2.7) переходит в формулу (2.1) для неполяризованных нейтронов. Изменяя ориентацию вектора \mathbf{p}_0 , можно измерить различные комбинации корреляторов $S^{\alpha\beta}$.

Другой метод заключается в поляризационном анализе рассеянного пучка. Введем оператор $\hat{K}^{\gamma\gamma'}$, представляющий матрицу 2×2 в спиновом пространстве рассеянного пучка:

$$\hat{K}^{\gamma\gamma'} \equiv \sigma^{\gamma'} \rho \sigma^{\gamma} = \frac{1}{2} [\delta_{\gamma\gamma'} (1 - \mathbf{p}_0 \boldsymbol{\sigma}) + p_0^{\gamma} \sigma^{\gamma'} + p_0^{\gamma'} \sigma^{\gamma} + i \varepsilon_{\gamma\gamma'\mu} (\sigma^{\mu} - p_0^{\mu})]. \quad (2.9)$$

Тогда выражение типа (2.7) после замены $K^{\gamma\gamma'} \rightarrow \hat{K}^{\gamma\gamma'}$ определяет матрицу $\frac{d^2\sigma}{d\omega dQ}$ в том же пространстве. Легко записать ее матричные элементы, нумеруя их индексами $+$ и $-$. Обозначим координатные оси, в которых записывается вектор через ξ, η, ζ . Выберем вектор поляризации $\mathbf{p}_0 = (0, 0, 1)$

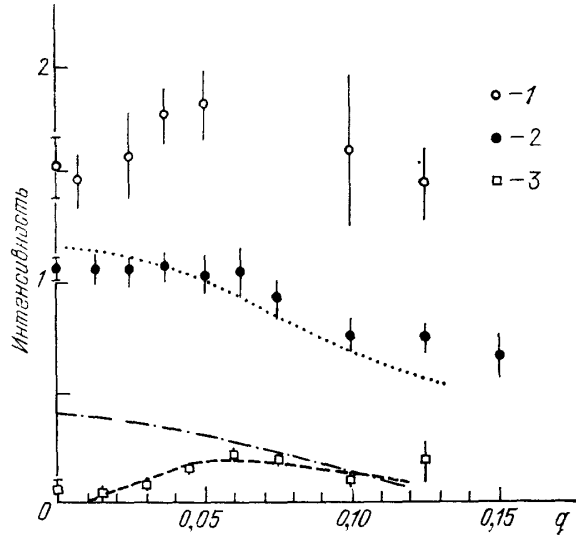


Рис. 7. q -зависимость интегральной интенсивности центрального пика для различных корреляционных функций при $H = 10$ кЭ и $T = 12$ К¹¹.

1 — $(S^{\parallel\parallel} + S^{\perp\perp})$, 2 — $(S^{\parallel\parallel} + S^{\zeta\zeta})$, 3 — $S^{\perp\perp}$
(по оси ординат отн. ед.)

и обозначим соответствующую ему проекцию в спиновом пространстве через (+). С помощью формулы (2.9) получаем

$$\frac{d^2\sigma^{++}}{d\omega dQ} \sim \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\xi} - e_{\alpha}e_{\xi}) (\delta_{\beta\xi} - e_{\beta}e_{\xi}) S^{\alpha\beta}(Q, \omega), \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ} \sim \sum_{\alpha\beta} [(\delta_{\alpha\xi} - e_{\alpha}e_{\xi}) (\delta_{\beta\xi} - e_{\beta}e_{\xi}) + (\delta_{\alpha\eta} - e_{\alpha}e_{\eta}) (\delta_{\beta\eta} - e_{\beta}e_{\eta}) - \\ - i(\delta_{\alpha\xi} - e_{\alpha}e_{\xi}) (\delta_{\beta\eta} - e_{\beta}e_{\eta}) + i(\delta_{\alpha\eta} - e_{\alpha}e_{\eta}) (\delta_{\beta\xi} - e_{\beta}e_{\xi})] S^{\alpha\beta}(Q, \omega). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Выбирая теперь $p_0 = (0, 0, -1)$ и сопоставив этой поляризации проекцию (—) в спиновом пространстве, найдем два других матричных элемента:

$$\frac{d^2\sigma^{--}}{d\omega dQ} = \frac{d^2\sigma^{++}}{d\omega dQ}, \quad \frac{d^2\sigma^{-+}}{d\omega dQ} = \frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ} \Big|_{i \rightarrow -i}. \quad (2.12)$$

Каждое из четырех выражений (2.10), (2.11) и (2.12) может быть измерено отдельно на спектрометре, снабженном дополнительными устройствами —

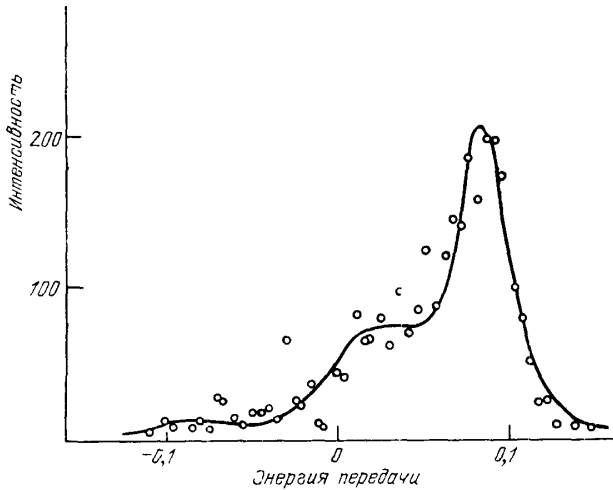


Рис. 8. Экспериментальная и теоретическая зависимость сечения рассеяния $d^2\sigma^{+-}/d\omega dQ$ в геометрии $Q \parallel B$ ($H = 10$ кЭ, $T = 12$ К) (по оси абсцисс ТГц, по оси ординат счет за 40 мин)¹⁴

двумя флипперами, могущими изменять направление поляризации падающего и рассеяного пучка на противоположное. Четырем возможным состояниям флипперов и отвечают четыре измеряемые величины σ^{++} , σ^{+-} , σ^{-+} и σ^{--} . Заметим, что сечение рассеяния неполяризованных нейтронов соответствует усреднению по начальным и суммированию по конечным состояниям в спиновом пространстве:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega dQ} = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\sigma^{++}}{d\omega dQ} + \frac{d^2\sigma^{--}}{d\omega dQ} + \frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ} + \frac{d^2\sigma^{-+}}{d\omega dQ} \right),$$

что и приводит к формуле (2.1).

Выпишем теперь общие соотношения (2.10) и (2.11) для поляри-

зационного анализа рассеяния на $CsNiF_3$. Направление магнитного поля (ось x) задает направление вектора поляризации (ось ξ). отождествим систему координат (ξ, η, ζ) с (y, z, x) . В силу симметрии модели относительно замены $S_y \rightarrow -S_y$, $S_z \rightarrow -S_z$ корреляционные функции $S^{xy} = S^{yx} = S^{xz} = S^{zx} = 0$, поэтому при двух частных ориентациях вектора рассеяния формулы (2.10) и (2.11) выглядят совсем просто²³:

$$e \parallel x: \frac{d^2\sigma^{++}}{d\omega dQ} = 0, \quad \frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ} \sim S^{yy} + S^{zz} - i(S^{yz} - S^{zy}), \quad (2.13)$$

$$e \parallel y: \frac{d^2\sigma^{++}}{d\omega dQ} \sim S^{xx}, \quad \frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ} \sim S^{zz}. \quad (2.14)$$

Таким образом, в геометрии $Q \perp H$ сечения рассеяния σ^{++} и σ^{+-} определяются отдельными корреляторами в отличие от неполяризованных нейтронов, где сечение зависит от суммы двух корреляторов. Корреляционные функции, входящие в эти выражения, содержат солитонные и магнонные вклады. Магнонные вклады от внеплоскостных флуктуаций содержатся в S^{yz} и S^{zy} . Они изучались в работах^{13,14} в геометрии $Q \parallel H$. Оказалось, что экспериментальные данные для сечений σ^{+-} и σ^{-+} очень хорошо описываются планарной моделью, которая предполагает, что спины удерживаются в легкой плоскости, а их проекции, перпендикулярные этой плоскости, малы.

В области полей $H \leq 10$ кЭ в CsNiF_3 не наблюдается никакой неустойчивости системы относительно этих флуктуаций.

Кроме спин-волнового пика в σ^{+-} , появляющегося только при $\omega > 0$, вклад в рассеяние дает и солитонный пик, содержащийся в S^{zz} и S^{yz} , причем последний оказывается асимметричным по ω (как следует из (1.27)). На рис. 8 представлены экспериментальные данные для $\frac{d^2\sigma^{+-}}{d\omega dQ}$ при $q = 0,06$ вместе с теоретически рассчитанной по формуле (2.13) кривой (сплошная линия) без использования подгоночных параметров²³. Прекрасное согласие с экспериментом указывает на согласованность приближений, используемых при описании спиновой динамики CsNiF_3 .

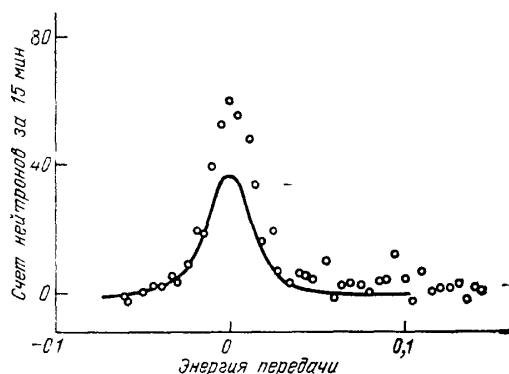


Рис. 9. Сечение рассеяния $d^2\sigma^{++}/d\omega dQ$ в геометрии $\mathbf{Q} \perp \mathbf{H}$ ($H = 10$ кЭ, $T = 12$ К) (по оси абсцисс ТГц, по оси ординат счет за 15 мин)¹⁵

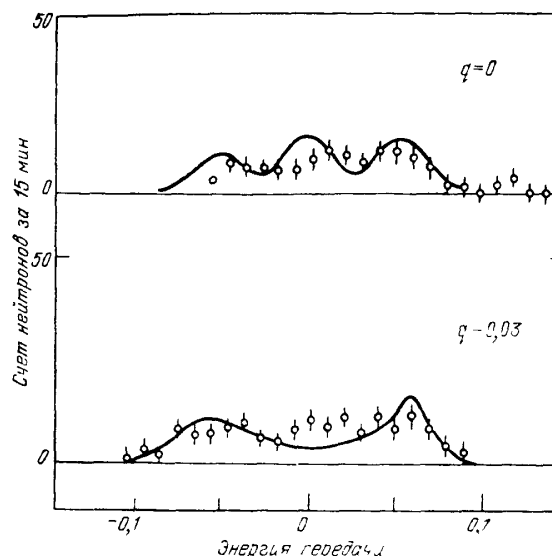


Рис. 10. Сечение рассеяния $d^2\sigma^{+-}/d\omega dQ$ в геометрии $\mathbf{Q} \perp \mathbf{H}$ ($H = 10$ кЭ, $T = 12$ К) (по оси абсцисс ТГц, по оси ординат счет за 15 мин)¹⁵

В работе¹⁵ поляризационный анализ выполнен в геометрии $\mathbf{Q} \perp \mathbf{H}$. Согласно формулам (2.14), в σ^{++} присутствует только продольный коррелятор. На рис. 9 экспериментальными точками представлен наблюдаемый центральный пик, а сплошной линией показан теоретически рассчитанный вклад двухмагнонного рассеяния. Остаток принадлежит вкладу солитонов. Отношение интенсивностей $I_{01}/I_{2m} = 1/2$ хорошо согласуется с данными по неполяризованным нейтронам, но абсолютная величина вклада от солитонов оказывается много меньше (примерно 1/5 часть от теоретического значения в SG-приближении).

В σ^{+-} в чистом виде присутствует слабое магнитное рассеяние, обусловленное внеплоскостными флуктуациями (рис. 10). Сплошные линии показывают теоретически рассчитанные солитонный и магнонный вклады в S^{zz} . В частности, центральный пик рассчитан по формуле (1.27). Мы снова видим неплохое согласие с экспериментом.

3. ТЕРМОДИНАМИКА КВАЗИОДНОМЕРНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА С КОНЕЧНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

3.1. Флуктуации с выходом спинов из базисной плоскости

Нейтронная спектроскопия — хотя и наиболее прямой, но не единственный метод исследования солитонов в квазиодномерных системах. Наличие газа новых квазичастиц в системе, каковыми являются солитоны, дает специфические вклады в термодинамику, приводящие к аномальным температурной и полевой зависимостям в теплоемкости и других величинах. Этому и посвящается данный параграф обзора, где будет вычислена прежде всего

свободная энергия с учетом двух типов возбужденных состояний в системе — магнонов и солитонов.

Отметим прежде всего, что до сих пор мы рассматривали случай предельно большой анизотропии, удерживающей спины в легкой плоскости. При конечном значении параметра анизотропии A спины могут выходить из плоскости, так что движение магнитного момента будет трехмерным. По-прежнему мы будем интересоваться нелинейными объектами спиновой системы — доменными стенками (солитонами), но будем учитывать возможность малых флуктуации относительно солитонных конфигураций с выходом спинов из легкой плоскости²⁵.

Рассмотрим возбуждение односолитонной конфигурации, при котором спины отклоняются в плоскости на величину δS , и выходят из плоскости на величину δS_{\perp} . Гамильтониан для слабовозбужденного состояния описывается квадратичной формой

$$\mathcal{K} = E_0 + \frac{1}{2} \int \frac{dz}{a} (\delta S \cdot M \delta S + \delta S_{\perp} \cdot M_{\perp} \delta S_{\perp}), \quad (3.1)$$

где операторы

$$M = JS^2 a^2 \left[-\frac{d^2}{dz^2} + k_0^2 \left\{ 1 - \frac{2}{\text{ch}^2 [k_0 (z - z_0)]} \right\} \right], \quad (3.2)$$

$$M_{\perp} = JS^2 a^2 \left[-\frac{d^2}{dz^2} + 2\alpha a^{-2} + k_0^2 \left\{ 1 - \frac{6}{\text{ch}^2 [k_0 (z - z_0)]} \right\} \right] \quad (3.3)$$

имеют вид квантовых гамильтонианов частицы, находящейся в потенциальной яме, форма которой определяется формой SG-солитона. (Здесь $\alpha = A/J$, а k_0^2 определяется прежним выражением (1.8).)

Собственные значения и собственные функции обоих операторов хорошо известны⁴⁹. Оператор M имеет непрерывный спектр и один дискретный уровень:

$$E_k = JS^2 a^2 (k^2 + k_0^2), \quad E_0 = 0, \quad (3.4)$$

тогда как оператор M_{\perp} кроме непрерывного спектра имеет два дискретных уровня:

$$\begin{aligned} E_k^{\perp} &= JS^2 a^2 (k^2 + k_0^2 + 2\alpha a^{-2}), \\ E_0^{\perp} &= JS^2 a^2 (2\alpha a^{-2}), \quad E_1^{\perp} = JS^2 a^2 (2\alpha a^{-2} - 3k_0^2). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Непрерывные спектры E_k и E_k^{\perp} совпадают со спектрами линейных возбуждений нуль-солитонной конфигурации, т. е. состояния со всеми спинами, ориентированными в направлении магнитного поля, при этом E_k описывает спектр линейных спиновых волн, когда все спины удерживаются в плоскости, тогда как E_k^{\perp} отвечает спиновым волнам с выходом спинов из плоскости анизотропии.

Волновые функции возбуждений нуль-солитонной конфигурации — плоские волны, а для односолитонной конфигурации они искажены в области локализации солитона. Дискретному уровню E_0 отвечает трансляционная мода, восстанавливающая трансляционную симметрию, нарушенную зависимостью односолитонной конфигурации от координаты z_0 — центра солитона. Согласно теореме Голдстоуна, энергия такой моды должна равняться нулю. Уровень E_0^{\perp} принадлежит локализованной моде, описывающей колебание односолитонной конфигурации, при котором спины выходят из плоскости анизотропии за счет вращения вокруг направления поля (в отсутствие анизотропии, т. е. для изотропного гейзенберговского магнетика, она является голдстоуновской, вращательной относительно магнитного поля, модой). Наконец, уровень E_1^{\perp} отвечает локализованной моде качания (тилтинг) так же с выходом спина из плоскости анизотропии.

Эти результаты легко обобщаются для n -солитонной конфигурации низкой плотности солитонов. Очевидно, состояния дискретного спектра являются n -кратно вырожденными. В непрерывном спектре необходимо учесть изменение плотности состояний $\rho(k)$ за счет выпадения n уровней E_0 и в $\rho^\perp(k)$ за счет выпадения n уровней E_0^\perp и n уровней E_1^\perp . Как известно, указанное изменение в непрерывном спектре можно выразить через сдвиги фазы волновой функции при рассеянии на солитоне. Для рассматриваемых операторов M и M_\perp измененные плотности состояний определяются формулами²⁵

$$\begin{aligned}\rho(k) &= \rho_0 - n \frac{1}{\pi} \frac{k_0}{k^2 + k_0^2}, \\ \rho^\perp(k) &= \rho_0 - n \frac{1}{\pi} \frac{k_0}{k^2 + k_0^2} - n \frac{1}{\pi} \frac{2k_0}{k^2 + 4k_0^2},\end{aligned}\quad (3.6)$$

где $\rho_0 = L/2\pi$ — плотность в спектре возбуждений нуль-солитонного вакуума.

3.2. Проявление солитонов в термодинамике магнетика

Запишем теперь статистическую сумму Z . При низких температурах следует учесть все вклады n -солитонных спиновых конфигураций, минимизирующих гамильтониан, и спиновые флуктуации около локальных минимумов, отвечающих отдельной спиновой конфигурации^{2, 30, 37, 75}. Представим Z как сумму по таким конфигурациям, в которой каждый член представляет континуальный интеграл по соответствующим флуктуациям δS и δS_\perp ²⁵:

$$\begin{aligned}Z &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon_s/kT} \frac{1}{n!} \sum_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n} \int \delta S(z) \delta S_\perp(z) \times \\ &\times \exp \left[-\frac{JS^2 a}{2kT} \int dz (\delta S \cdot M^{(n)} \delta S + \delta S_\perp \cdot M_\perp^{(n)} \delta S_\perp) \right].\end{aligned}\quad (3.7)$$

Фактор $1/n!$ учитывает тождественность солитонов в n -солитонной конфигурации; $\sum_{\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n}$ означает суммирование по солитонам различной спиральности

(топологическим зарядом), т. е. по солитонам и антисолитонам. Операторы $M^{(n)}$ и $M_\perp^{(n)}$ являются обобщением односолитонных выражений (3.2) и (3.3), в которых нужно z_0 заменить на z_{0i} (координату центра i -го солитона) и просуммировать по i от 1 до n .

Собственные функции операторов $M^{(n)}$ и $M_\perp^{(n)}$ строятся тривиально из собственных функций односолитонных операторов. Поскольку они образуют полный набор функций, любая флуктуация δS или δS_\perp может быть разложена в ряд по собственным функциям операторов $M^{(n)}$ и $M_\perp^{(n)}$; тогда интегрирование в (3.7) фактически ведется по коэффициентам разложений и получающийся гауссов интеграл вычисляется:

$$\begin{aligned}Z &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon_s/kT} \frac{1}{n!} (8ak_0)^{n/2} N^n 2^n \left(\frac{\pi kT}{E_0^\perp} \right)^{n/2} \left(\frac{\pi kT}{E_1^\perp} \right)^{n/2} \times \\ &\times \exp \left(\frac{1}{2} \sum_k \ln \frac{2\pi kT}{E_k} + \frac{1}{2} \sum_k \ln \frac{2\pi kT}{E_k^\perp} \right) \equiv Z_{\text{sol}} Z_{\text{m}}.\end{aligned}\quad (3.8)$$

Множитель $(8ak_0)^{n/2}$ появляется в результате интегрирования по трансляционной моде⁵².

Сумма по n представляет вклад от солитонов и связанных с ними локализованных мод:

$$Z_{\text{sol}} = \exp \left[N \frac{8}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{JS^2}{kT} \right)^{1/2} \left(\frac{g\mu_0 H}{JS} \right)^{3/4} G \left(\frac{2AS}{g\mu_0 H} \right) e^{-\varepsilon_s/kT} \right], \quad (3.9)$$

где

$$G(\beta) = \frac{[1 + (1 - \beta)^{1/2}][2 + (1 + \beta)^{1/2}]}{(\beta - 3)^{1/2} \beta^{1/2}} \quad (3.10)$$

представляет функцию, учитывающую анизотропию. В пределе большой анизотропии $A \rightarrow \infty$ функция $G(\beta) \rightarrow 1$ и мы получаем результаты SG-приближения.

Z_m , связанная с непрерывным спектром флуктуации, вычисляется с использованием функции плотности состояний в дискретном спектре:

$$Z_m = \left(\frac{2e^2 kT}{\pi JS^2} \right)^N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{g\mu_0 H}{JS} \right) + \left(\frac{g\mu_0 H}{JS} + \frac{2A}{J} \right)^{1/2} \right] \right\}. \quad (3.11)$$

Вследствие мультипликативности Z свободная энергия в низкотемпературном районе ($kT \ll \varepsilon_s$) состоит из двух вкладов: магнетонного F_m и солитонного F_{sol} :

$$\frac{F_m}{N} = kT \left[-\ln \frac{\pi JS}{2e^2 kT} + \frac{1}{2} \left(\frac{g\mu_0 H}{JS} \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \left(\frac{g\mu_0 H}{JS} + \frac{2A}{J} \right)^{1/2} \right], \quad (3.12)$$

$$\frac{F_{sol}}{N} = -kT n_s, \quad (3.13)$$

где

$$n_s = \frac{8}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{JS^2}{kT} \right)^{1/2} \left(\frac{g\mu_0 H}{JS} \right)^{3/4} G \left(\frac{2AS}{g\mu_0 H} \right) e^{-\varepsilon_s/kT} \quad (3.14)$$

— плотность солитонов, учитывающая конечную анизотропию.

Спин-волновая часть F имеет температурную зависимость $F_m \sim NT \ln T$, характерную для классической системы с непрерывным спектром мод, имеющих две степени свободы на спин. Из соотношений

$$E = F + TS, \quad S = -\frac{dF}{dT} \quad (3.15)$$

получаем среднюю энергию и энтропию на один спин:

$$\frac{E_m}{N} = kT, \quad \frac{S_m}{N} \sim \ln T.$$

Первое соотношение согласуется со значением $kT/2$ на одну степень свободы в идеальном газе частиц, если учесть, что имеется два типа — внутриплоскостные и внеплоскостные спиновые флуктуации. Энтропия, как видим, расходится при нуле температур. Это нарушение теоремы Нернста происходит из-за классической трактовки системы, полностью игнорирующей квантовые поправки.

Солитонная часть F_{sol} свободной энергии учитывает существование газа магнетонов через предэкспоненциальный фактор в формуле (3.14) для плотности солитонов. Механизм этого влияния обсуждается детально в фундаментальной работе²⁵, и он заключается в данной ситуации в захвате солитоном трех мод из спин-волнового резервуара. Эти моды становятся локализованными и проявляются как трансляционная мода в плоскости и две внеплоскостных моды — вращения и качания. Трансляционная мода приводит к фактору $T^{-1/2}$, который весьма обычен для одномерных систем, описываемых солитонами^{2,53}, но полевая зависимость $\sim H^{3/4}$ специфична для данной модели. Если представить предэкспоненту в (3.13) в виде некоторой экспоненты, мы можем интерпретировать эффект присутствия локализованных мод как перенормировку энергии солитона.

Следует отметить, что при достаточно сильных полях

$$H > H_c = \frac{2}{3} \frac{AS}{g\mu_0} \quad (3.16)$$

анизотропная функция расходится, что указывает на неустойчивость неподвижного солитона относительно движения через локализованную моду качания⁵⁴.

На основе выражений (3.12) — (3.14) можно вычислить теперь удельную теплоемкость, используя термодинамическое соотношение $C/N = -T \frac{d^2 F}{dT^2}$. Получаем выражение

$$\frac{C}{N} = k + k \frac{1}{\sqrt{8\pi}} G \left(\frac{2AS}{g\mu_0 H} \right) \frac{\varepsilon_s}{JS^2} \left(\frac{\varepsilon_s}{kT} \right)^{5/2} e^{-\varepsilon_s/kT}. \quad (3.17)$$

Отсюда можно записать величину $\Delta C = C(H) - C(0)$ в следующей форме:

$$\Delta C = k \left(\frac{\varepsilon_s}{kT} \right)^2 n_s, \quad (3.18)$$

где

$$n_s = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \frac{\varepsilon_s}{JS^2} \left(\frac{\varepsilon_s}{kT} \right)^{1/2} G \left(\frac{2AS}{g\mu_0 H} \right) e^{-\varepsilon_s/kT} \quad (3.19)$$

— эквивалентное (3.14) выражение для плотности солитонов.

Таким образом, ΔC как функция температуры имеет максимум. Вспомогая, что $\varepsilon_s = 8S(SJg\mu_0 H)^{1/2}$, видим, что имеется также максимум в зависимости ΔC от магнитного поля. Такое поведение теплоемкости позволяет надеяться, что наблюдение соответствующих максимумов на эксперименте должно свидетельствовать о существовании в одномерных легкоплоскостных магнетиках термически возбужденных солитонов. Эксперимент³⁰ действительно обнаруживает в полевой зависимости теплоемкости CsNiF_3 выраженный максимум, однако положение его существенно отличается от вычисленного из формулы (3.18). Величина наблюдаемых максимумов (в некотором районе температур) на порядок меньше вычисленной. Это расхождение поставило под сомнение приближения, использованные при рассмотрении спиновой системы, описывающейся гамильтонианом (1.1), а именно: переход к континуальному приближению, идеологию идеального газа солитонов и метод перевала при вычислении статистической суммы. Чтобы установить причину расхождений, были проведены вычисления теплоемкости на основе классического гамильтониана (1.1) методом Монте-Карло²⁹. Результаты расчетов и сравнение с экспериментом дается на рис. 11. Имеются значительные количественные разногласия между всеми группами кривых. Разногласие в двух теоретических подходах становится еще большим, если вычислить температурную зависимость ΔC_s (рис. 12)⁵⁵. Следует при этом заметить, что максимумы на кривых континуальной модели отвечают температурам, где уже нарушено условие $kT \ll \varepsilon_s$. Отсюда вообще возникают сомнения, связаны ли пики в теплоемкости, которые возникают в вычислениях по методу Монте-Карло или в эксперименте, с солитонами. К тому же пики в теплоемкости появляются и в других моделях, например для изотропной цепочки в поле. В этой модели при низких температурах вклад в термодинамику определяется главным образом линейными спиновыми волнами⁵⁶.

Что касается аномалии, предсказанной континуальной моделью для критического поля (3.16), она, по-видимому, является результатом приближений. Действительно, для параметров CsNiF_3 критическое поле $H_c \sim 18$ кЭ. В свете работ^{20,54} становится ясно, что аномалия, вызванная расходимостью анизотропной функции $g(\beta)$ при $\beta = 3$, приходит от статического приближения. В критическом поле статический солитон через тилтинг-моду зацепляет-

ся с движущимся солитоном, и свободная энергия вместе с ее производными по H и T предстает гладкой функцией в окрестности «критического» поля H_c . Никаких аномалий в системе не возникает, как следует из классических расчетов по методу Монте-Карло²⁹.

Более существенным кажется расхождение в поведении теплоемкости между численными результатами для классической модели (1.1) и экспери-

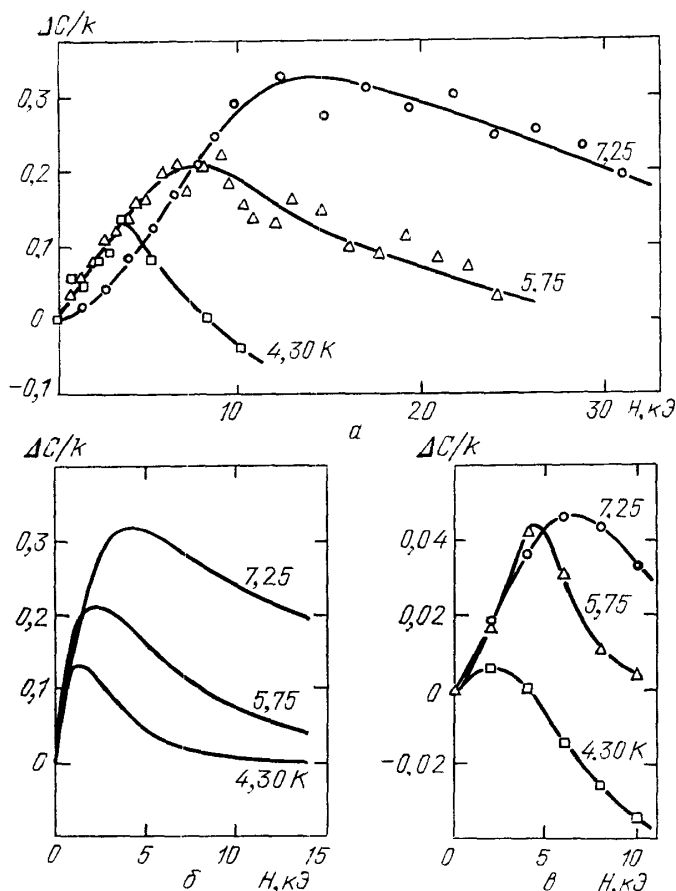


Рис. 11. Теплоемкость CsNiF_3 как функция поля для трех различных температур²⁹.
 а — Расчет методом Монте-Карло на основе классического дискретного гамильтониана. б — Расчет по формуле (3.17). в — Эксперимент

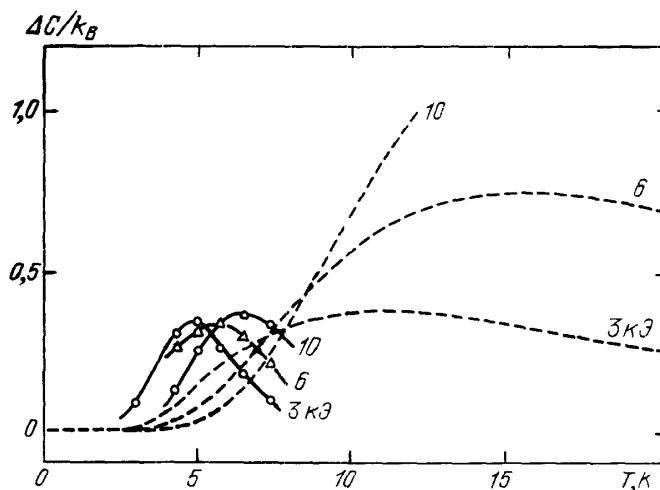


Рис. 12. Теплоемкость CsNiF_3 как функция температуры, рассчитанная по методу Монте-Карло (сплошные кривые) и в непрерывном приближении (штриховые)⁵⁵

ментом, отмеченное выше. Это указывает, что квантовые эффекты, по крайней мере для CsNiF_3 , должны играть важную роль. Это предположение подтверждается численными расчетами квантовой модели одномерного магнетика⁵⁷.

4. УЧЕТ КВАНТОВЫХ ПОПРАВКИ И ДИСКРЕТНОСТИ ЦЕПОЧКИ

4.1. К в а н т о в ы е п о п р а в к и
в к в а з и к л а с с и ч е с к о м п р и б л и ж е н и и

При вычислении статистической суммы Z для легкоплоскостного одномерного ферромагнетика мы использовали классическое приближение. В области низких температур ($kT \ll \varepsilon_s$) ведущий вклад в Z возникает от термически возбужденных статических солитонных конфигураций, отвечающих локальным минимумам гамильтониана \mathcal{H} , и от линейных статических флуктуаций этих конфигураций.

Вычисление Z для квантовой цепочки спинов в магнитном поле представляет большую трудность, поэтому в пределе больших спинов $S \gg 1$ предлагается использовать квазиклассическое приближение. В приближении идеального газа солитонов при $kT \ll \varepsilon_s$ оказывается возможным рассматривать солитоны как классические объекты и квантовать лишь линейные возбуждения солитонных конфигураций — магны

гноны²⁶. Удобно ввести переменные действие — угол (операторы δS^z и $\delta\varphi$), удовлетворяющие коммутаторному соотношению⁵⁸

$$[\delta S^z(x), \delta\varphi(y)] = -i\delta(x-y); \quad (4.1)$$

здесь δS^z — проекция спина вдоль цепочки, а $\delta\varphi$ — азимутальный угол, характеризующие внеплоскостные и внутривплоскостные флуктуации. В соответствии с общим выражением (3.11) в этих переменных, запишем гамильтониан односолитонной конфигурации в виде

$$\mathcal{H} = E_{\text{sol}} + \frac{1}{2} \int \frac{dx}{a} (\delta\varphi \cdot M \delta\varphi + \delta S^z \cdot M_{\perp} \delta S^z), \quad (4.2)$$

где операторы M и M_{\perp} определены в (3.2) и (3.3).

Квадратичная форма (4.2) с операторными величинами δS^z и $\delta\varphi$ диагонализуется с помощью известного унитарного преобразования, приводящего к гамильтониану квантовых осцилляторов

$$\mathcal{H} = E_{\text{sol}} + \frac{1}{2} \sum_{\nu} (p_{\nu}^2 + \omega_{\nu}^2 q_{\nu}^2), \quad (4.3)$$

с коммутаторными свойствами $[p_{\nu}, q_{\mu}] = -i\hbar\delta_{\nu\mu}$. Частоты определяются из уравнения на собственные значения

$$M_{\perp}^{1/2} M M_{\perp}^{1/2} \psi_{\nu} = (\hbar\omega_{\nu})^2 \psi_{\nu}. \quad (4.4)$$

Оказывается, что спектр состоит из полосы непрерывных частот ω_k и двух дискретных частот ω и 0 , принадлежащих линейным спиновым волнам, локальной моде и трансляционной моде соответственно (рис. 13). Их энергии равны²⁶

$$\hbar\omega_k = JSa^2 [(k^2 + k_0^2 + 2\alpha a^{-2})(k^2 + k_0^2)]^{1/2}, \quad (4.5)$$

$$\hbar\omega = \hbar\Delta \left(1 - \frac{8}{9} \beta^{-2} + \dots \right), \quad (4.6)$$

где $\hbar\Delta = \hbar\omega_{k=0}$ — магнонная щель, и параметр $\beta = 2AS/g\mu_0 H$. Собственные значения квантового гамильтониана (4.3) теперь можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \varepsilon_s + \frac{p^2}{2m_s} + \hbar\omega(\nu + \gamma) + \int dk \rho(k) \hbar\omega_k(\nu_k + \gamma_k), \quad (4.7)$$

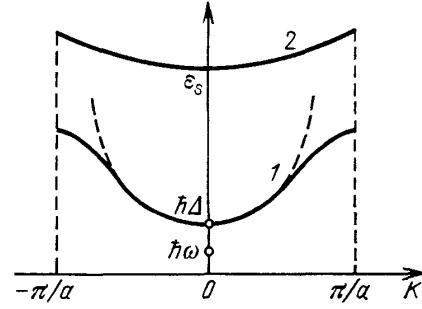


Рис. 13. Непрерывный спектр возбужденных состояний квазиодномерного ферромагнетика.

1 — для магнонов, 2 — для солитонов

где $v, v_k = 0, 1, 2, \dots$, а γ и γ_k — неопределенные в схеме квазиклассического квантования параметры; p и m_s — импульс и масса солитона. Представим $\rho(k)$ в виде

$$\rho(k) = \frac{N}{2\pi} + \Delta\rho(k),$$

перепишем (4.7) в форме эффективного гамильтониана, описывающего взаимодействие между газом магнонов, локализованной модой и единственным солитоном:

$$\mathcal{H} = E_s + \frac{p^2}{2m_s} + \hbar\omega n + N \int \frac{dk}{\pi} \hbar\omega_k v_k + \int dk \Delta\rho(k) \hbar\omega_k v_k, \quad (4.8)$$

где

$$E_s = \varepsilon_s + \hbar\omega\gamma + \int dk \Delta\rho(k) \hbar\omega_k \gamma_k \quad (4.9)$$

— перенормированная энергия солитона за счет нулевых колебаний локальной и непрерывных спиновых волн.

При вычислении статистической суммы необходимо интегрировать по импульсам солитона и по квантовым числам v и v_k . В итоге получаем выражение

$$\begin{aligned} Z = \exp \left[-N \int \frac{dk}{2\pi} \ln(1 - e^{-\hbar\omega_k/kT}) \right] \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2^n N^n (2\pi k T m_s)^{n/2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} e^{-nE_s/kT} (1 - e^{-\hbar\omega/kT})^{-n} \times \\ \times \exp \left[-n \int dk \Delta\rho(k) \ln(1 - e^{-\hbar\omega_k/kT}) \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

в полной аналогии с классическим выражением (3.8). Численный фактор 2^n связан с суммированием по четности солитона (солитон, антисолитон).

Отсюда легко получить, что теплоемкость C состоит из двух аддитивных вкладов: C_m — от спиновых волн и C_{sol} — от солитонов, причем

$$C_m = ka \int \frac{dk}{2\pi} \left[\frac{\hbar\omega_k/2kT}{\text{sh}(\hbar\omega_k/2kT)} \right]^2, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} C_{sol} = k \frac{2a}{2\pi\hbar} (2\pi m_s kT)^{1/2} (1 - e^{-\hbar\omega/kT})^{-1} \left(\frac{E_s}{kT} \right)^2 e^{-E_s/kT} \times \\ \times \exp \left[- \int dk \Delta\rho(k) \ln(1 - e^{-\hbar\omega_k/kT}) \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Последний множитель в (4.12) учитывает интерференцию спиновых волн и солитонов посредством величины $\Delta\rho$, выражающейся через сдвиг фазы спиновой волны при рассеянии ее на солитоне. Как показано в ², в приближении низкой плотности солитонного газа изменение плотности состояний в непрерывном спектре линейных возбуждений является единственным эффектом интерференции с солитоном, который дает вклад в термодинамику системы при низких температурах.

Эти выражения совместно с формулами для ω_k, ω , а также для $\Delta\rho$ ²⁶ предполагаются справедливыми при условиях

$$S \gg 1, kT \ll E_s, k_0 a \ll 1, \beta \gg 1. \quad (4.13)$$

Классический предел C получается при условии $S \rightarrow \infty$ (с сохранением JS^2, k_0 и α фиксированными), т. е. при $\omega_k \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0, E_s \rightarrow \varepsilon_s$. Формулы (4.11) и (4.12) в этом пределе дают выражение

$$\begin{aligned} C_{sol} = k + k \frac{2a}{2\pi\hbar} (2\pi m_s kT)^{1/2} \frac{kT}{\hbar\omega} \left(\frac{\varepsilon_s}{kT} \right)^{-\varepsilon_s/kT} \times \\ \times \exp \left(- \int dk \Delta\rho(k) \ln \frac{\hbar\omega_k}{kT} \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

вполне согласующееся с (3.17). В пределе большой анизотропии $\beta \rightarrow \infty$ спин-волновая энергия (4.5)

$$\hbar\omega_k \rightarrow JSa\alpha^{1/2}(k^2 + k_0^2)^{1/2}, \quad (4.15)$$

масса солитона $m_s \rightarrow 4\hbar^2 \frac{k_0}{Aa}$, и мы приходим к формуле (3.17) для $g(\beta) \rightarrow 1$, т. е. к результату SG-приближения. Удерживая в (4.14) члены порядка $1/\beta$, получим формулу (3.17), где анизотропная функция $g(\beta)$ (см. определение (3.11)) возникает в ведущем порядке по этому параметру, т. е. $g(\beta) = 1 + 3\beta^{-1/2}$.

Для явного вычисления по формуле (4.12) полевой или температурной зависимости солитонного вклада в теплоемкость необходимо знать сдвиги фаз $\Delta\rho(k)$ спиновых волн. Они были рассчитаны в первом борновском приближении²⁶, и результаты для C_{sol} представлены на рис. 14.

Видно значительное уменьшение в C_{sol} , вызванное включением квантовых эффектов. Тем не менее даже при учете квантовых поправок сравнение с экспериментом по полевой зависимости C_{sol} для CsNiF_3 , а также температурного поведения C_{sol} в различных полях показывает существенное количественное различие. Теория переоценивает величину теплоемкости. Причина расхождений состоит, по-видимому, в недостаточности квазиклассического приближения для этого магнетика с атомным спином $S = 1$. Роль квантовых эффектов, свидетельствует эксперимент, должна быть еще сильнее.

В рамках квазиклассического подхода нетрудно вычислить также корреляционные функции. Например, для продольных компонент спинов солитонная часть динамической корреляционной функции имеет такую же частотную зависимость, что и для классического SG-приближения (см. (1.24)):

$$S_{sol}^{||}(q, \omega) \sim n_s e^{-m_s \omega^2 / 2q^2 kT}, \quad (4.16)$$

где n_s — плотность солитонов. Формула для нее немедленно следует из выражения (4.10) для статистической суммы:

$$n_s = \frac{2}{2\pi\hbar} (2\pi m_s kT)^{1/2} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} e^{E_s/kT} \times \\ \times \exp \left[- \int dk \Delta\rho(k) \ln(1 - e^{-\hbar\omega_k/kT}) \right]. \quad (4.17)$$

Сравнение расчетов в классическом и квазиклассическом приближении показывает уменьшение величины квантовой корреляционной функции приблизительно на 50% от классической (рис. 15). Аналогичная тенденция сохраняется и для других корреляционных функций. Так, поперечная

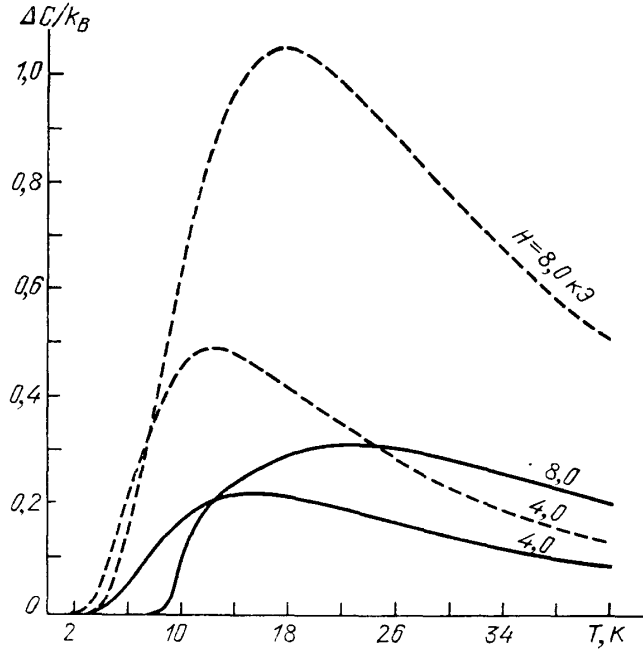


Рис. 14. Температурная зависимость рассчитанного для CsNiF_3 солитонного вклада в теплоемкость в квазиклассическом (сплошные кривые) и классическом (штриховые) приближениях

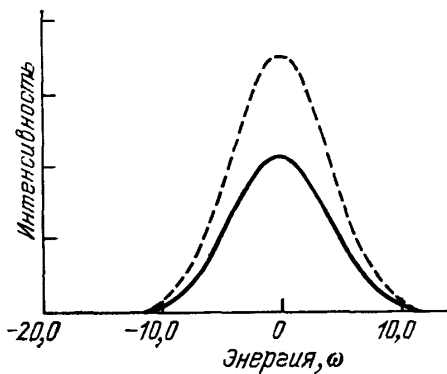


Рис. 15. Продольная корреляционная функция, рассчитанная для CsNiF_3 в квазиклассическом (сплошная линия) и классическом (штриховая) приближениях ($T = 10$ К, $H = 10$ кЭ)

функция $S^\perp(q, \omega)$ состоит из центральной компоненты, связанной с солитонами, и двух боковых пиков, обусловленных спиновыми волнами. Центральный пик значительно уменьшается в квантовом расчете, тогда как боковые пики не меняются.

4.2. За пределами квазиклассического приближения

Учет квантовых поправок за пределами квазиклассического приближения представляет сложную задачу. В работах^{19,27} выявлено, что в пределах квазиклассического подхода мерой квантовости системы служит параметр $g^2 = \frac{1}{S} \left(\frac{2A}{J} \right)^{1/2}$ или перенормированный параметр $g'^2 = g^2 [1 - (g^2/8\pi)]^{-1}$.

В рамках континуального приближения уменьшение солитонной энергии за счет квантовых эффектов в первом порядке по $1/S$ составляет $\sim 10\%$ ¹⁹, что приблизительно в два раза меньше наблюдаемого значения для CsNiF_3 ⁸.

Более корректный анализ роли квантовых поправок следует искать в точных решениях для квантовой спиновой цепочки (см., например,⁵⁹). Известно, что в континуальном приближении анизотропная гайзенберговская цепочка эквивалентна квантовой SG-системе⁶⁰, спектр которой хорошо изучен^{61,62}.

Наряду с солитонами в такой системе возникают бозеподобные частицы с дискретным спектром масс

$$M_n = M \sin \frac{ng'^2}{4\pi} \quad (n = 1, 2, \dots) < 8\pi g'^{-2}, \quad (4.18)$$

которые можно рассматривать как связанные состояния солитона и антисолитона. Они соответствуют квантованию бризеров классической SG-системы, в которой состояние бризера характеризовалось непрерывным параметром ω (см. п. 1); в квантовой системе ему соответствует дискретный индекс n . Состояние с $n = 1$ соответствует перенормированному магнону⁶², и, таким образом, бризеры исчерпывают все бозевские возбуждения квантовой SG-системы. Лоренцевская инвариантность SG-уравнения позволяет записать энергетический спектр частиц с массой, определяемой соотношением (4.18):

$$E_n = (M_n c^4 + c^2 p^2)^{1/2}. \quad (4.19)$$

Эти бризеры дают вклад в термодинамику, который при достаточно низких температурах имеет не степенной характер, как для классической системы, а экспоненциальный. Следует, однако, иметь в виду, что имеются определенные трудности сведения динамики квантовой гейзенберговской цепочки в поперечном магнитном поле к квантовому SG-уравнению⁶⁰. Таким образом, в настоящее время мы не имеем последовательной квантовой теории квазиодномерного ферромагнетика типа CsNiF_3 .

4.3. Солитоны в дискретной ферромагнитной цепочке

До сих пор при теоретическом анализе мы использовали континуальное приближение, справедливое при условии $k_0^{-1} \gg a$ (ширина солитона много больше параметра решетки). При достаточно больших полях безразмерный параметр $k_0 a$ может стать порядка 1, и тогда необходимо учитывать дискретность спиновой цепочки. Таким образом, этот параметр является мерой важности дискретных эффектов в системе^{21,28}.

Наиболее полно эти эффекты исследованы недавно в работе²¹, где рассматривалась одномерная классическая ферромагнитная цепочка с анизотропией «легкая плоскость» и одновременно с обменной анизотропией. Уравнение, определяющее равновесную спиновую конфигурацию без выхода спи-

нов из плоскости, имеет вид

$$\sin(\phi_{l+1} - \phi_l) - \sin(\phi_l - \phi_{l-1}) = (ak_0)^2 \sin \phi_l, \quad (4.20)$$

где ϕ_l — азимутальный угол, отсчитываемый от направления поля (оказывается, такая конфигурация всегда статична).

Имеются два солитонных решения типа кинка для этого уравнения, различающиеся по симметрии: одно (назовем его «S») с центром, локализованным на узле решетки, и второе (назовем его «B») с центром посередине между узлами. В континуальном пределе, разумеется, эти решения неразличимы, и мы имеем единственное односолитонное решение SG-уравнения. Численное решение уравнения (4.20) показывает, что B-солитон существует только при $(ak_0)^2$ меньших критического значения $(ak_{0c})^2 = 0,2723\dots$ Различие в энергиях S- и B-солитонов $\Delta E = E_s(k_0) - E_B(k_0)$ при фиксированном поле очень мало. Так, для $(ak_0)^2 < 0,2$ $\Delta E/E_s < 2 \cdot 10^{-5}$ и вблизи k_{0c} достигает лишь значения 10^{-3} . Теория возмущений по параметру k_0 ²¹ приводит к оценке

$$\Delta E \sim JS^2 e^{-\pi^2/k_0 a}. \quad (4.21)$$

Эту величину, определяющую масштаб различия энергий при изменении положения солитона в пределах параметра решетки, называют энергией пининга солитона⁶³. Появление этой характеристики является одним из важных эффектов дискретности цепочки.

Анализ показывает, что S-солитон нестабилен относительно флуктуации в легкой плоскости во всей области существования решения. B-солитон оказывается стабильным при всех $k_0 < k_{0c}$. Внеплоскостные флуктуации делают его нестабильным при некотором (достаточно малом) значении параметра анизотропии α .

Методом молекулярной динамики исследовался движущийся солитон в дискретной цепочке²¹. Критическое поле, при котором солитон становится нестабильным, быстро падает с ростом его скорости v . Увеличение магнитного поля ведет к сужению и пинингу движущегося солитона, пока он не распадется.

В заключение отметим, что основные эффекты дискретности ферромагнитной цепочки — распад солитонов в сильных полях и пининг — возникают при условии $k_0 a \sim 1$. Это условие трудно выполнимо, например, в нейтронографических экспериментах с CsNiF_3 , поэтому анализ текущего эксперимента можно проводить на основе континуального приближения.

5. СОЛИТОНЫ В КВАЗИОДНОМЕРНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ С АНИЗОТРОПИЕЙ «ЛЕГКАЯ ПЛОСКОСТЬ»

5.1. Сведение динамики к уравнению синус-Гордона

Перейдем теперь к случаю квазиодномерного антиферромагнетика с анизотропией легкая плоскость. Гамильтониан системы определяется прежним выражением (1.1), но с обменным интегралом $J < 0$. Как и в случае ферромагнетика, приложим магнитное поле в легкой плоскости, перпендикулярной цепочке, вдоль оси x и будем искать солитонные решения динамических уравнений. Оказывается, что уравнение Ландау — Лифшица и для этого случая в условиях соотношений на параметры (1.5) сводится к SG-уравнению, хотя этот вывод не столь тривиален, как в ферромагнитном случае, и пространственное распределение магнитного момента в состоянии с одним солитоном существенно отличается от такового для ферромагнетика^{31,64,65}.

Хотя дальнего магнитного порядка в одномерной цепочке не существует, при $J < 0$ возникает сильная корреляция, выстраивающая соседние спины

Запишем теперь с помощью этих соотношений уравнения движения $\hbar \dot{\theta}_s =$ и выражения для величин ϑ и φ :

$$\vartheta = -\frac{\hbar}{2|J|S} \frac{1}{1+\alpha/2} \Phi, \quad \varphi = -\frac{\hbar}{2|J|S} \dot{\theta}_s - \frac{1}{2} a k_0 \sin \Phi. \quad (5.8)$$

Можно было бы сразу составить уравнения движения для двух других величин θ_s и Φ , однако удобно поступить иначе, а именно подставить выражение (5.8) в (5.2) и получить функционал энергии относительно основных переменных θ_s и Φ :

$$\mathcal{H} = \frac{|J|S^2a}{2} \int dz \left[\left(\frac{\partial \theta_s}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{c_m^2} \left(\frac{\partial \theta_s}{\partial t} \right)^2 + 2\alpha a^{-2} \theta_s^2 + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2 - \kappa_0^2 \sin^2 \Phi \right], \quad (5.9)$$

где введены два параметра размерности скорости

$$c_m = \frac{|J|Sa}{\hbar}, \quad c = \left(1 + \frac{\alpha}{2} \right)^{1/2} \frac{|J|Sa}{\hbar}. \quad (5.10)$$

Видим, что в переменных θ_s и Φ гамильтониан разделяется; первая часть описывает линейные возбуждения — спиновые волны с законом дисперсии

$$\omega_R = c_m (k^2 + 2\alpha a^{-2})^{1/2}, \quad (5.11)$$

а вторая часть в терминах переменной $\psi = 2\Phi - \pi$ приобретает вид гамильтониана для SG-системы:

$$\mathcal{H}_{SG} = \frac{|J|S^2a}{4} \int dz \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{2c^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \kappa_0^2 (1 - \cos \psi) \right]. \quad (5.12)$$

Взяв для ψ решение в форме (1.10), имеем выражение (1.12) для энергии солитона $E_{sol} (|J|S^2a/4)^{-1} = 8\kappa_0\gamma$, откуда в нерелятивистском приближении получаем

$$E_{sol} = g\mu_0 H S \gamma = \epsilon_s + \frac{m_s v^2}{2}. \quad (5.13)$$

Таким образом, в антиферромагнетике энергия SG-солитона линейна по H в отличие от ферромагнетика, где $E_{sol} \sim H^{1/2}$.

Другое важное отличие антиферромагнетика — иное пространственное распределение x -проекции спина в солитоне, выражаемое формулой

$$\cos \Phi = \operatorname{sech} [\kappa_0 \gamma (z - z_0 - vt)], \quad (5.14)$$

в отличие от ферромагнетика, где $\cos \Phi = 1 - 2 \operatorname{sech}^2 [k_0 \gamma (z - z_0 - vt)]$. Это приводит к форм-фактору

$$\int dz e^{iqz} \cos \Phi(z) = \frac{\pi}{\kappa_0} \operatorname{sech} \frac{\pi q}{2\kappa_0} \quad (5.15)$$

в отличие от форм-фактора, содержащегося в (1.24).

5.2. Особенности динамических структурных факторов

Продольная корреляционная функция является знакопеременной благодаря антиферромагнитному основному состоянию

$$\langle S_l^z(t) S_0^z(0) \rangle = S^2 (-1)^l \langle \cos \Phi_l(t) \cos \Phi_0(0) \rangle,$$

благодаря чему фурье-компонента содержит волновой вектор антиферромагнитной структуры π/a в направлении цепочки

$$S(q, \omega) = \frac{S^2}{(2\pi)^2} \int dz dt \exp \left[i \left(q + \frac{\pi}{a} \right) z + i\omega t \right] \langle \cos \Phi(z, t) \cos \Phi(0, 0) \rangle.$$

Вычисление этого выражения производится стандартным образом, как и в § 1, и приводит к результату

$$S^{\perp}(q, \omega) = S^2 \frac{\varepsilon_s}{kTq_a c} \frac{1}{\kappa_0} e^{-\varepsilon_s/kT} e^{-\varepsilon_s \omega^2 / kT c^2 a^2} \frac{1}{\text{ch}^2(\pi q_a / 2\kappa_0)}, \quad (5.16)$$

где q_a отсчитывается от π/a .

Вычисление поперечной корреляционной функции

$$S^{\perp}(q, \omega) = \frac{S^2}{(2\pi)^2} \int dz dt \exp \left[i \left(q + \frac{\pi}{a} \right) z + i\omega t \right] \langle \sin \Phi(z, t) \sin \Phi(0, 0) \rangle \quad (5.17)$$

не столь тривиально, поскольку

$$\sin \Phi(z, t) = \pm \text{th}[\kappa_0(z - z_0 - vt)] \quad (5.18)$$

(знаки «+» и «−» относятся к солитону и антисолитону соответственно) и при наличии нескольких солитонов вклад в (5.17) не может быть представлен в виде суммы вкладов отдельных солитонов. Однако солитон (5.18) описывает кинк — доменную стенку. В случае антиферромагнетика — это антифазная граница двух эквивалентных состояний. Коррелятор в (5.17) может быть вычислен в пределе очень узкой доменной стенки ($k_0^{-1} \sim a$), когда

$$\text{th}[\kappa_0(z - z_0 - vt)] \rightarrow \text{sign}(z - z_0 - vt), \quad (5.19)$$

и наличие солитона или антисолитона сводится к изменению знака величины изинговского типа $\sigma(z, t) = \sin \Phi(z, t) \rightarrow \pm 1$. Подобные корреляционные функции уже вычислялись для одномерной модели Φ^4 , и метод состоит в подсчете среднего значения величины $\sigma(z, t) \sigma(0, 0) = (-1)^m$, где m — число солитонов в пространственно-временном интервале между точками (z, t) и $(0, 0)$. Поскольку в газе солитонов вероятность $p(m)$ появления m солитонов при среднем значении их N подчиняется распределению Пуассона $p(m) = (N^m/m!) e^{-N}$, то получаем соотношение

$$\langle \sigma(z, t) \sigma(0, 0) \rangle = \langle (-1)^m \rangle = \sum_m p(m) (-1)^m = e^{-2N(z, t)}, \quad (5.20)$$

выражающее интересующий нас коррелятор через величину $N(z, t)$. $N(z, t)$ складывается из среднего числа солитонов, находящихся в $t = 0$ в интервале $[0, z]$, кроме тех, которые пройдут через точку z за время t , а также из солитонов, которые при $t = 0$ были вне интервала $[0, z]$ и за время t прошли через z . Учитывая гиббсовскую вероятность распределения солитонов по скоростям

$$n(v) = \frac{2\varepsilon_s \kappa_0}{\pi kTc} \exp \left[-\frac{\varepsilon_s - (m_s v^2/2)}{kT} \right], \quad (5.21)$$

имеем

$$\begin{aligned} N(z, t) &= \left(\int_{-\infty}^0 dv \int_0^{z-vt} dz_0 + \int_0^{z/t} dv \int_0^{z-vt} dz_0 + \int_{z/t}^{\infty} dv \int_{z-vt}^0 dz_0 \right) n(v) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dv |z - vt| n(v) = 2n_s u t f\left(\frac{z}{ut}\right), \end{aligned} \quad (5.22)$$

где $u = c(2kT/\varepsilon_s)^{1/2}$ — параметр размерности скорости и

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(e^{-y^2} + 2y \int_0^y dz e^{-z^2} \right).$$

Таким образом, в пределе узких доменных стенок мы вычислили поперечную корреляционную функцию

$$\langle \sin \Phi(z, t) \sin \Phi(0, 0) \rangle = \exp \left\{ -4n_s u t f\left(\frac{z}{ut}\right) \right\}.$$

Если аппроксимировать $f(y)$ функцией $(1/\sqrt{\pi})(1 + \sqrt{\pi}y)^{31}$, то легко получить динамический структурный фактор

$$S^{\perp}(q, \omega) = \frac{S^2}{\pi^2} \frac{\Gamma_q}{q_a^2 + \Gamma_q^2} \frac{\Gamma_{\omega}}{\omega^2 + \Gamma_{\omega}^2}, \quad (5.23)$$

где $\Gamma_q = 4n_s$, $\Gamma_{\omega} = 4n_s u / \sqrt{\pi}$ — ширины распределений по волновому вектору и по энергии. При другой аппроксимации $f(y)$ функцией $1/\sqrt{\pi} [1 + (\sqrt{\pi}y)^2]^{1/2}$ приходим к выражению

$$S^-(q, \omega) = \frac{S^2}{2\pi} \frac{\Gamma_{\omega}^2 \Gamma_q}{[\omega^2 + (\Gamma_{\omega}^2 \Gamma_q^2) q_a^2 + \Gamma_{\omega}^2]^{3/2}}, \quad (5.24)$$

также имеющему максимумы при $q_a = 0$ и $\omega = 0$, однако ширина пика по ω зависит от q_a и наоборот.

Вывод $S_{\perp}(q, \omega)$, приводящий к формулам (5.23) или (5.24), использовал приближение $\sin \Phi = \pm 1$. Учет конечной ширины доменной стенки приводит к появлению в этих формулах фактора $\langle \sin^2 \Phi \rangle$, который при $\frac{\epsilon_s}{kT} \gg 1$ выражается рядом⁶⁵

$$\langle \sin^2 \Phi \rangle = 1 - \frac{kT}{\epsilon_s} - \frac{1}{4} \left(\frac{kT}{\epsilon_s} \right)^3 - \dots$$

Изложенные здесь теоретические результаты иллюстрируются на рис. 17.

Мы видим из формул (5.23) и (5.24), что поперечный коррелятор в антиферромагнетике имеет другую природу, чем в ферромагнетике, где он опре-

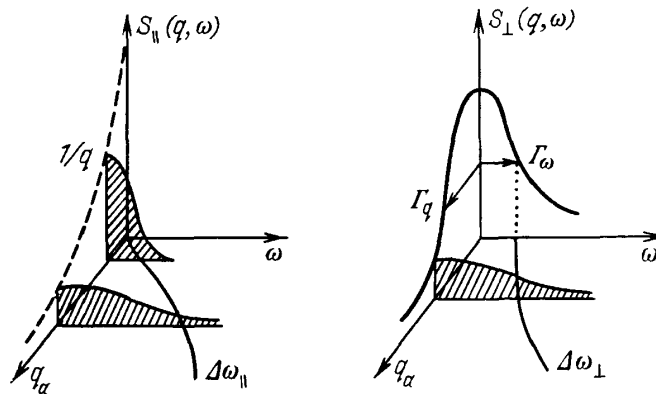


Рис. 17. Продольные и поперечные динамические структурные факторы для квазиодномерного антиферромагнетика³².

Ширины распределения по энергиям $\Delta\omega_{\parallel} \sim q$, $\Delta\omega_{\perp} \sim [1 + (q^2 \Gamma_q^2)]^{1/2}$, как следует из формул (5.24)

деляется структурным фактором одного солитона в направлении, перпендикулярном полю. В частности, ширины распределений по q_a и ω пропорциональны в антиферромагнетике плотности солитонов, что указывает на интерференционные эффекты в рассеянии, так что центральный пик рассеяния не связан с рассеянием на отдельном солитоне. Величина, обратная ширине распределения по q , представляет корреляционную длину, которая характеризует средний размер антиферромагнитного участка между двумя доменными стенками. Нейтроны рассеиваются когерентно на этих участках цепочки.

Различная природа поперечных корреляций в ферро- и антиферромагнитных цепочках проявляется в разной зависимости интенсивности центрального пика от температуры. Если в ферромагнетике она увеличивается с повышением T в меру роста плотности солитонов, то в антиферромагнетике — уменьшается, будучи обратно пропорциональной Γ_q , т. е. плотности солитонов. Что касается продольных корреляций, они целиком обусловлены структурным фактором одного солитона и ведут себя сходно с ферромагнети-

ком. Таким образом, в области параметров, где интенсивность поперечных корреляций велика, для продольных корреляций она должна быть малой.

Предсказанные данной теорией особенности рассеяния в антиферромагнетике были подтверждены при тщательном нейтронном исследовании ТММС³².

5.3. Исследование спиновой динамики в кристалле ТММС методами неупругого рассеяния нейтронов

Так называют кристалл $(\text{CH}_3)_4\text{NMnCl}_3$, имеющий ту же гексагональную структуру, что и CsNiF_3 , если атом Cs заменить на группу $(\text{CH}_3)_4\text{N}$. В этом кристалле цепочки формируются атомами Mn, причем расстояние между ними оказывается 3,25 Å в цепочке и 9,15 Å между цепочками. Температура

антиферромагнитного упорядочения $T_N = 0,85 \text{ К}$, так что при $T > T_N$ кристалл можно считать квазиодномерным антиферромагнетиком. Ранние исследования линейной динамики этого квазиодномерного антиферромагнетика показали, что он относится к легкоплоскостному типу со следующими параметрами гамильтониана (1.1):

$$\text{ТММС: } \frac{J}{k} = -13 \text{ К},$$

$$\frac{A}{k} = 0,15 \text{ К}, \quad S = \frac{5}{2}, \quad g = 2, \quad (5.25)$$

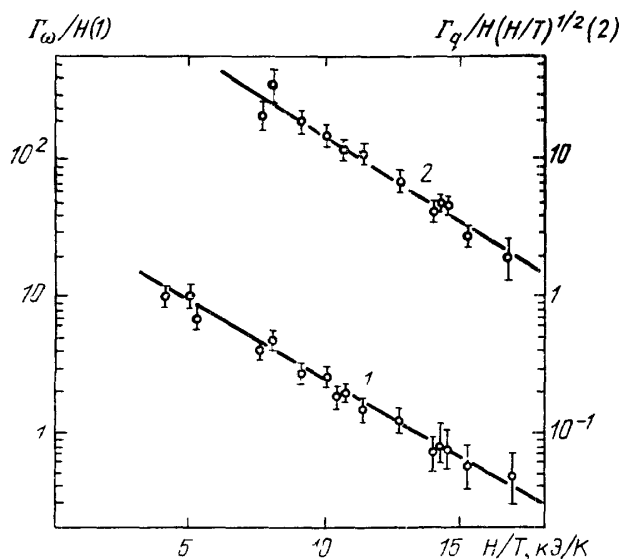


Рис. 18. Зависимость ширины распределения по импульсу q и энергии ω поперечного центрального пика в ТММС от магнитного поля и температуры³²

благодаря чему его динамика может описываться SG-уравнением при $T \lesssim 5 \text{ К}$.

Исследования³² в интервале магнитных полей $H = 0-50 \text{ кЭ}$ и температур $T = 1,5-5 \text{ К}$ показали,

что для $H/T \gtrsim 10 \text{ кЭ/К}$ наблюдаемые явления находятся в хорошем согласии с теорией. В частности, величины Γ_q и Γ_ω , характеризующие ширину по q и ω центрального пика, зависят экспоненциальным образом от величины H/T в полном соответствии с формулами для Γ_q и Γ_ω (рис. 18).

Величина энергии солитона, однако, не столь хорошо согласуется с экспериментом. Согласно теоретической формуле (5.13), для ТММС получаем

$$\frac{\varepsilon_s}{k} = \frac{g\mu_0 S}{h} H \equiv bH, \quad b = 0,336 \text{ К} \cdot \text{кЭ}^{-1}. \quad (5.26)$$

Существенное отличие экспериментального значения $b_{\text{exp}} = 0,26 \pm 0,02 \text{ К} \cdot \text{кЭ}^{-1}$ от теоретического указывает, по-видимому, на необходимость учета квантовых поправок.

Тот факт, что величина атомного спина для ТММС оказывается достаточно большой ($S = 5/2$), объясняет, по-видимому, адекватность классического описания антиферромагнитной цепочки эксперименту. При величине спина $S = 1/2$ классический подход для описания квазиодномерного антиферромагнетика вообще был бы невозможен. Задача об основном состоянии и о классификации спектра возбуждений изотропной гейзенберговской антиферромагнитной цепочки для спина $S = 1/2$ решена точно с помощью анзаца Бете⁸¹. Из этого решения следует, что основное состояние синглетно, и его можно представить как суперпозицию $N/2$ спиновых волн по отношению к состоя-

нию с параллельно выстроенными спинами. Это утверждение еще не описывает полностью структуру основного состояния, которая отражалась бы наиболее полно в корреляционной функции при $T = 0$. Корреляционные функции для этой ситуации неизвестны, однако можно ожидать, что они имеют резкие максимумы в зависимости от волнового вектора при $q = \pi/a$, т. е. в середине одномерной зоны Бриллюэна.

В трехмерной системе такие максимумы, проявляющиеся в нейтронном рассеянии в виде брэгговских пиков, означают существование дальнего антиферромагнитного порядка, в одномерной — ближнего порядка. Наблюдение этих максимумов не означает существование магнитных подрешеток (или неелевского классического состояния), но является проявлением антиферромагнитных корреляций в системе. Невозможность классического описания антиферромагнетика с $S = 1/2$ связана, таким образом, не с фактом отсутствия магнитных подрешеток, а с дискретностью спинового пространства состояний, которая проявляется тем сильнее, чем меньше величина атомного спина.

В следующем разделе будет рассматриваться другой класс антиферромагнетиков со спином $1/2$, однако для описания их будет использоваться не классический, а квантовый подход, основанный на специальной теории возмущений.

Мы дали весьма полное обсуждение результатов экспериментального исследования солитонов в легкоплоскостном ферромагнетике CsNiF_3 и антиферромагнетике ТММС. Это не единственные представители квазиодномерных магнетиков, в которых подозревается важная роль солитонного вклада. Наиболее изученным из других объектов является квазиодномерный ферромагнетик $(\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NH}_3)\text{CuBr}_3$ (сокращенно СНАВ) ⁷¹.

Трехмерное магнитное упорядочение наступает в нем при $T_N = 1,5$ К а при температурах вплоть до 16 К СНАВ ведет себя, как легкоплоскостной магнетик с обменной анизотропией, имеющей следующие параметры:

$$\frac{J}{k} = 110 \text{ К}, \quad \frac{J_{zz} - J}{J} = -0,05, \quad S = \frac{1}{2}.$$

В интервале температур $1,5 \text{ К} < T < 10 \text{ К}$ и полей $0 < H < 7 \text{ кЭ}$ в теплоемкости, как функции температуры и поля, обнаружены максимумы, аналогичные тем, которые были найдены в CsNiF_3 . Измерения времени продольной спиновой релаксации с помощью ядерного магнитного резонанса также показали типичное поведение, которое следует из солитонной теории ⁷¹. Согласие с классической теорией, основанной на SG-приближении, оказалось более чем качественным, хотя это и удивительно, поскольку СНАВ должен быть типично квантовым магнетиком со спином $1/2$.

Отметим также, что подобные аномалии теплоемкости обнаружены в ТММС ⁷², подтверждая вывод о солитонной динамике этого антиферромагнетика, сделанный из экспериментов по нейтронному рассеянию.

6. СОЛИТОНЫ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ С АНИЗОТРОПИЕЙ «ЛЕГКАЯ ОСЬ»

6.1. Нелинейная динамика квазиодномерного ферромагнетика изинговского типа

До сих пор мы рассматривали магнетики с анизотропией, стремящейся удержать спины в базисной плоскости. Реализуется и другой предельный случай, когда анизотропия стремится ориентировать спины вдоль цепочки. При большой величине константы анизотропии магнетик ведет себя как изин-

гоподобный; для случая спина $S = 1/2$ он описывается гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{4} \sum_l [\sigma_l^z \sigma_{l+1}^z + \varepsilon (\sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y)], \quad (6.1)$$

где $|\varepsilon| \ll 1$, а σ^α — матрицы Паули.

При $J < 0$ вследствие того, что $|\varepsilon|$ мало, основное состояние $|0\rangle$ является близким к неелевскому, в котором направления спинов образуют антиферромагнитную последовательность

$$|0\rangle = |+-+ - + - \dots\rangle.$$

Элементарное возбуждение является состоянием с двумя параллельными соседними спинами

$$\left|n + \frac{1}{2}\right\rangle = |+_n -_{n+1} \dots +_n -_{n+1} +_{n+2} \dots\rangle, \quad (6.2)$$

которое удобно задать, указав место $n + 1/2$, разделяющее два домена неелевской структуры. Таким образом, $|n + 1/2\rangle$ является состоянием с одной антифазной границей.

Нетрудно записать матричный элемент гамильтониана между функциями (6.2) (энергию отсчитываем от величины $\frac{|J|N}{4}$ — энергии неелевского состояния):

$$\left\langle n + \frac{1}{2} \left| \mathcal{H} \right| n' + \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{|J|}{2} \{\delta_{n, n'} + \varepsilon (\delta_{n', n+2} + \delta_{n', n-2})\}, \quad (6.3)$$

откуда видно, что линейная суперпозиция

$$|k\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{n=1}^N \exp \left[-ik \left(n + \frac{1}{2} \right) a \right] \left| n + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.4)$$

является собственной функцией гамильтониана для собственного значения

$$\varepsilon_k = \frac{|J|}{2} (1 + 2\varepsilon \cos 2ak). \quad (6.5)$$

Состояние (6.4) описывает движение доменной границы с энергией, включающей энергию активации $|J|/2$ и дисперсию $\sim \varepsilon$.

Вычислим корреляционную функцию $\langle \sigma_q^z \sigma_{-q}^z(t) \rangle$ на базе функций с одной антифазной границей. Используя удобное выражение для матричного элемента

$$\left\langle l + \frac{1}{2} \left| \sigma_n^z \right| l' + \frac{1}{2} \right\rangle = \delta_{l, l'} (-1)^n \operatorname{sign} \left(n - l - \frac{1}{2} \right)$$

и уравнение движения $\dot{\sigma}_n^z = (i/\hbar) [\mathcal{H}, \sigma_n^z]$ для оператора σ_n^z , получим

$$\begin{aligned} \langle \sigma_l^z \sigma_{l+q}^z(t) \rangle_1 &= \frac{1}{ZN} \sum_h \frac{\exp \left[-(\varepsilon |J|/kT) \cos 2ak \right]}{\cos^2(qa/2)} \times \\ &\times \exp \left\{ i \frac{2}{\hbar} \varepsilon |J| t \sin qa \cdot \sin [(2k - q)a] \right\}, \quad (6.6) \end{aligned}$$

где

$$Z = \frac{1}{N} \sum_h \exp \left(-\frac{\varepsilon |J|}{kT} \cos 2ak \right).$$

Символ $\langle \dots \rangle_1$ означает усреднение по состояниям с одной границей (будем говорить — солитон). Полная корреляционная функция для состояний, имеющих N_s солитонов, получается умножением величины (6.6) на $N_s = Ln_s$,

где n_s — плотность солитонов,

$$\langle \sigma_q^z \sigma_{-q}^z(t) \rangle = L n_s \langle \tau_q^z \sigma_{-q}^z(t) \rangle_1. \quad (6.7)$$

Для получения величины n_s сравним это выражение при $t = 0$ с тем, которое можно легко получить в приближении $\epsilon = 0$, когда имеем

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n^z \sigma_{n+m}^z \rangle &= \frac{\text{Sp} \left\{ \sigma_n^z \sigma_{n+m}^z \exp \left[(J/4kT) \sum_l \sigma_l^z \sigma_{l+1}^z \right] \right\}}{\text{Sp} \exp \left[(J/4kT) \sum_l \sigma_l^z \sigma_{l+1}^z \right]} = \\ &= \left(\text{th} \frac{J}{4kT} \right)^m = (-1)^m e^{-\kappa m}, \end{aligned}$$

где $e^{-\kappa} = \text{th} (|J|/4kT)$. Отсюда следует выражение для малых κ (низких T):

$$\langle \sigma_q^z \sigma_{-q}^z \rangle = \frac{1 - e^{-2\kappa}}{(1 - e^{-\kappa})^2 + 4e^{-\kappa} \cos^2(qa/2)} \approx \frac{2\kappa}{\kappa^2 + 4 \cos^2(qa/2)}. \quad (6.8)$$

При $t = 0$ и $\cos^2(qa/2) \gg \kappa^2$ выражение (6.7), с учетом (6.6), должно совпадать с выражением (6.8). Сравнивая их, находим $n_s = \kappa/2a$.

Вычисляя фурье-образ выражения (6.6) по времени, получаем окончательную формулу для продольной корреляционной функции³⁴:

$$\begin{aligned} S^{zz}(q, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle S_q^z S_{-q}^z(t) \rangle = \\ &= \frac{1}{4\pi Z} \frac{2\kappa}{\kappa^2 + 4 \cos^2(qa/2)} \frac{1}{(\Omega_q^2 - \omega^2)^{1/2}} e^{\hbar\omega/2kT} \text{ch} \left[\frac{\hbar(\Omega_q^2 - \omega^2)^{1/2}}{2kT} \text{ctg} qa \right] \end{aligned} \quad (6.9)$$

при $|\omega| < |\Omega_q|$; для частот $|\omega| > |\Omega_q|$ она равна нулю. Здесь обозначено

$$\Omega_q = \frac{2\epsilon |J|}{\hbar} \sin qa. \quad (6.10)$$

Кроме того, $Z = I_0(\epsilon |J|/kT)$, где $I_0(x)$ — функция Бесселя от мнимого аргумента, а малая величина $\kappa \approx 2e^{-|J|/2kT}$.

Поперечная корреляционная функция в этих приближениях равна⁶⁷

$$\begin{aligned} S^{\perp}(q, \omega) &= \frac{\kappa}{2\pi Z} e^{\hbar\omega/2kT} \left\{ \frac{1}{(\Omega_q^2 - \omega^2)^{1/2}} \text{ch} \left[\frac{\hbar(\Omega_q^2 - \omega^2)^{1/2}}{2kT} \text{ctg} qa \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\Omega_q} \text{sh} \left[\frac{\hbar(\Omega_q^2 - \omega^2)^{1/2}}{2kT} \text{ctg} qa \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Выражение (6.9) показывает, что продольная корреляционная функция существует в интервале частот $-\Omega_q < \omega < \Omega_q$, на краях которого имеет корневую сингулярность, а в середине — пологий минимум. Соответствующие корреляции обусловлены движением антифазных доменных границ, которые предполагаются невзаимодействующими. Учет столкновений доменных границ приводит к размытию этих сингулярностей при $\omega = \pm \Omega_q$. Ширина размытия $\delta\omega \sim 1/\tau$, где τ — среднее время между столкновениями. Его можно оценить по формуле $\tau = 1/n_s |v_k|$, где $1/n_s$ — среднее расстояние между стенками, а

$$v_k = \frac{d\epsilon_k}{dk} = \frac{2a\epsilon |J|}{\hbar} \sin(2ka)$$

— скорость стенки. Доменная стенка с энергией $\omega = \pm \Omega_q$ — это стенка с импульсом (ср. формулы (6.10) и (6.5)) $k = q/2 \pm \pi/4$, поэтому из приведенных рассуждений вытекает оценка

$$\delta\omega = \frac{|\epsilon J \cos qa|}{\hbar} \kappa. \quad (6.12)$$

Формулы (6.9) и (6.10) не справедливы для $q \approx 0$ или $q \approx \pi/a$. Эти области q можно исследовать на основе феноменологической картины движущихся без столкновений узких доменных стенок, которую мы использовали в § 5 при описании антиферромагнетика. Аналогично (5.20) получим

$$\langle S^z(0, 0) S^z(z, t) \rangle = \frac{1}{4} e^{-2N(z, t)}, \quad (6.13)$$

где фактор $N(z, t)$ имеет тот же смысл, что и в § 5, и дается выражением типа (5.22)

$$N(z, t) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk |z - v(k)t| n(k), \quad (6.14)$$

причем $n(k)$ — плотность солитонов с импульсом k , которая определяется больцмановским фактором:

$$n(k) = \frac{1}{a} e^{-\varepsilon_k/kT}.$$

Сложная функция $N(z, t)$ аппроксимируется выражением

$$N(z, t) = \bar{n}_s (z^2 + u_0^2 t^2)^{1/2},$$

где

$$\bar{n}_s = \frac{1}{a} e^{-|J|/2kT} I_0 \left(\frac{\varepsilon |J|}{kT} \right), \quad u_0 = \frac{4kTa}{\pi \hbar} \frac{\text{sh}(|J| \varepsilon/kT)}{I_0(|J| \varepsilon/kT)}$$

— параметры размерности плотности и скорости. Вычисление фурье-образа выражения (6.13) приводит к ответу⁶⁸

$$S^{zz}(q, \omega) = \frac{1}{4} \frac{\Gamma_\omega^2 / \Gamma_q}{[\omega^2 + (\Gamma_\omega^2 / \Gamma_q^2) q_a^2 + \Gamma_\omega^2]^{3/2}}, \quad (6.15)$$

где $\Gamma_\omega = 2\bar{n}_s u_0$, $\Gamma_q = 2\bar{n}_s$. Величина \bar{n}_s для $kT \gg \varepsilon |J|$ совпадает с n_s — плотностью солитонов, поэтому выражения (6.15) и (5.24) совпадают по существу.

Итак, динамический структурный фактор изингоподобного антиферромагнетика описывается формулой (6.9) для импульсов q , не близких к 0 или π/a , а в окрестности 0 или π/a — формулой (6.15). Оба результата справедливы в интервале температур $\varepsilon |J| \ll kT \ll |J|$. Качественное поведение $S^{zz}(q, \omega)$ на плоскости q, ω показано на рис. 19.

6.2. Исследование спиновой динамики в кристаллах CsCoCl₃ и CsCoBr₃

Оба вещества имеют ту же кристаллическую структуру, что и CsNiF₃. Оба они при низких температурах имеют трехмерное антиферромагнитное упорядочение с температурой Нееля $T_N = 21$ К (CsCoCl₃) и $T_N = 28,3$ К (CsCoBr₃). Изучение линейной спиновой динамики при низких температурах показало, что их спин-система описывается гамильтонианом (6.1) со следующими параметрами:

$$\text{CsCoCl}_3: \frac{J}{k} = -150 \text{ К}, \quad \varepsilon = 0,12^{69} \quad (6.16)$$

$$\text{CsCoBr}_3: \frac{J}{k} = -155,2 \text{ К}, \quad \varepsilon = 0,137^{67}. \quad (6.17)$$

В работах^{69,70} с помощью рассеяния нейтронов тщательно исследована спиновая динамика в CsCoCl₃, а в^{35,67} — в CsCoBr₃, и полученные экспери-

ментальные результаты находятся в хорошем согласии с изложенной теорией. Так, например, рис. 20 дает спектры неупругого рассеяния нейтронов на CsCoBr_3 ³⁵. Точнее, на нем представлены результаты измерений интенсивностей рассеяния нейтронов в методе $\omega = \text{const}$. Как видно из схематического рис. 19, при малых ω должен наблюдаться пик в рассеянии при $q = \pi/a$; с ростом ω постепенно возникают два симметрично расположенных пика, соответствующих рассеянию на солитонах — движущихся доменных стенках, а интенсивность центральной падает в соответствии с формулой (6.15). Именно такое поведение рассеяния и показывает рис. 20.

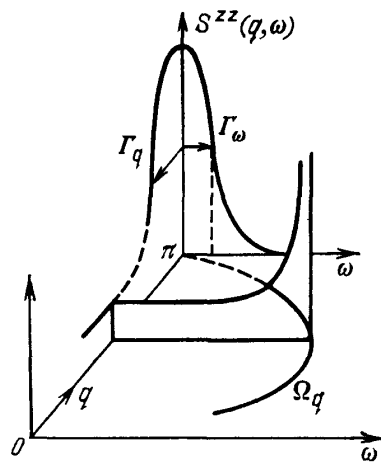


Рис. 19. Динамический структурный фактор продольных флуктуаций для изингоподобного антиферромагнетика⁶⁹

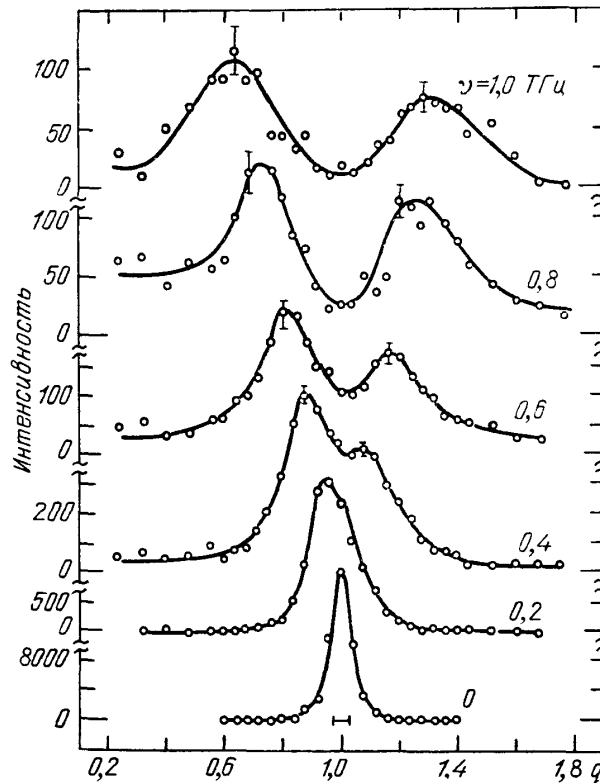


Рис. 20. Интенсивность неупругого рассеяния нейтронов на CsCoBr_3 при различных энергиях передачи ω в зависимости от переданного импульса q ($T = 35$ K, $Q = (1,45; 0; q)$)³⁵

В⁶⁷ приведены экспериментальные и теоретические интегральные интенсивности рассеяния на продольных и поперечных компонентах спина, как функции волнового вектора. Наблюдается резкое увеличение рассеяния от продольных компонент вблизи $q = \pi/a$ в соответствии с предсказаниями теории. В области волновых векторов близких к π/a подтверждается формула (6.15) для частотной и q -зависимости $S^{zz}(q, \omega)$ в виде лоренциана с показателем степени $-3/2$ ⁶⁷.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обсудим теперь вопрос о количественном согласии теории и эксперимента. Наиболее исследованный ферромагнетик CsNiF_3 , для которого $S = 1$, обычно анализируется на основе классической SG-теории. Мы уже отмечали выше, что имеются существенные количественные различия между теорией и экспериментом. Одно из самых существенных — в абсолютной интенсивности продольного динамического структурного фактора, который оказывается в несколько раз меньше, чем по предсказанию SG-теории. Эти расхождения могут происходить от нескольких причин: использования континуального приближения, недостаточного учета внеплоскостных флуктуаций, классического подхода к системе с малым значением атомного спина и, наконец, еще в недостаточной мере обоснованной концепции о возможности описания термодинамики нелинейной системы идеальным газом солитонов.

В работе⁷³ исследовался только один из аспектов приближений, используемых при описании системы с гамильтонианом (1.1), а именно — трактовка магнетика как классической системы спинов. Методом трансфер-матрицы

численно рассчитывались такие величины, как температурная и полевая зависимость намагниченности, теплоемкости, корреляционной длины спиновых волн, восприимчивости. Несмотря на то, что в расчете не использовалось континуальное приближение и переход к SG-уравнению, остались значительные количественные расхождения во всех этих величинах для CsNiF_3 при сравнении расчетов с экспериментом. Это исследование прямо указывает на важность квантовых эффектов в CsNiF_3 . Эти результаты для CsNiF_3 сильно отличаются от ситуации в ТММС⁷⁴, где классическая модель лучше воспроизводит данные по теплоемкости⁷⁵ и восприимчивости⁷⁶, по-видимому по той простой причине, что в ТММС величина атомного спина существенно больше ($S = 5/2$). Различие между предсказаниями SG-приближения и экспериментом в ТММС объясняется в работе⁷⁶ важной ролью внеплоскостных флуктуации, которые учитывались в квантовом подходе при расчете теплоемкости и корреляционной длины спиновых волн.

Таким образом, оказывается, что широко используемая при объяснении поведения квазиодномерных магнетиков классическая SG-модель может служить лишь первым приближением, дающим качественное понимание нелинейной динамики спин-системы. Количественная теория требует учета всех факторов, обсуждавшихся выше⁸². Поскольку обычно используется та или иная форма теории возмущений, представляет большой интерес для калибровки теоретических приближений исследование систем численными методами молекулярной динамики. Такие расчеты уже проводились для классических моделей⁷⁷; было бы очень важно провести подобные расчеты для квантовой модели. Что касается экспериментального аспекта, число квазиодномерных магнетиков, для которых существенна нелинейная динамика спин-системы, будет несомненно расширяться.

Автор приносит глубокую благодарность И. Кьемсу, К. Какураи, М. Стейнеру, А. Лютеру и Г. Фогедби, выполнившим пионерские экспериментальные и теоретические исследования солитонов в квазиодномерных магнетиках, за многочисленные дискуссии, которые он имел с ними во время пребывания в Дании в 1986 г.

Институт физики металлов
УНЦ АН СССР, Свердловск

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krumhansl J. A., Schrieffer J. R. // Phys. Rev. Ser. B. 1975. V. 11. P. 3535.
2. Currie J. F., Krumhansl J. A., Bishop A. R., Trullinger S. E. // Ibidem. 1980. V. 22. P. 477.
3. Mikeska H. J. // J. Phys. Ser. C. 1978. V. 11. P. L29.
4. Kjems J. K., Steiner M. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 41. P. 1137.
5. Reiter G. // Ibidem. 1981. V. 46. P. 202.
6. Steiner M. // J. Appl. Phys. 1979. V. 50. P. 7395.
7. Steiner M. // J. Magn. and Magn. Mater. 1979. V. 14. P. 142.
8. Steiner M., Kakurai K., Knop W., Pynn R., Kjems J. K. // Sol. State Commun. 1982. V. 41. P. 329.
9. Steiner M., Kakurai K., Kjems J. K. // Zs. Phys. Kl. B 1983. Bd 53. S. 117.
10. Steiner M., Kakurai K., Kjems J. K., Physica Ser. B. 1983. V. 120. P. 250.
11. Steiner M. // J. Magn. and Magn. Mater. 1983. V. 31—34. P. 1277.
12. Kakurai K., Steiner M. // Ibidem. P. 1215.
13. Kakurai K., Pynn R., Dorner B., Steiner M. // J. Phys. Ser. C. 1984. V. 17. P. L123.
14. Kakurai K., Steiner M., Pynn R., Dorner B. // J. Magn. and Magn. Mater. 1986. V. 54—57. P. 835.
15. Kakurai K., Steiner M. // Physica. Ser. B. C. 1986. V. 136. P. 349.
16. Mikeska H. J. // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. P. 1950.
17. Allroth E., Mikeska H. J. // Zs. Phys. Kl. B 1981. Bd 43. S. 209.
18. Mikeska H. J. // Physica. Ser. B. 1982. V. 120. P. 235.
19. Mikeska H. J. // Phys. Rev. Ser. B. 1982. V. 26. P. 5213.
20. Mikeska H. J., Osano K. // Zs. Phys. Kl. B 1983. Bd 52. S. 111.

21. Etrich C., Mikeska H. J., Magyar, Thomas H., Weber K.// *Ibidem*. 1985. Bd 6. S. 1.
22. Etrich C., Mikeska H. J.//*J. Phys. Ser. C*. 1983. V. 16. P. 4889.
23. Osano K.//*Ibidem*. 1984. V. 17. P. L511.
24. Osano K.//*Ibidem*. P. 843.
25. Fogedby H. C., Hedegard P., Svane A.//*Physica. Ser. B*. 1985. V. 132. P. 17.
26. Fogedby H. C., Osano K., Jensen H. J.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1986. V. 34. P. 3462.
27. Maki K.//*Ibidem*. 1981. V. 24. P. 3991.
28. Peyard M., Kruskal M. D.//*Physica. Ser. D*. 1984. V. 14. P. 88.
29. Mouritsen O. G., Jensen H., Fogedby H. C.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1984. V. 30. P. 498.
30. Ramirez A. P., Wolf W. P.//*Phys. Rev. Lett*. 1982. V. 49. P. 227.
31. Mikeska H. J.//*J. Phys. Ser. C*. 1980. V. 13. P. 2913.
32. Regnault L. P., Boucher J. P., Rossat-Mignod J., Renard J. P., Bouillot J., Stirling W. G.//*Ibidem*. 1982. V. 15. P. 1261.
33. Boucher J. P., Regnault L. P., Rossat-Mignod J., Renard J. P., Bouillot J., Stirling W. G., Mezei F.//*Physica. Ser. B*. 1983. V. 120. P. 241.
34. Villain J.//*Ibidem*. 1975. V. 79. P. 1.
35. Buyers W. J. L., Hogan M. J., Armstrong R. L., Briat B.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1986. V. 33. P. 1727.
36. Bak P.//*Rep. Prog. Phys*. 1982. V. 45. P. 587.
37. Изюмов Ю. А., Лаптев В. М.//ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 2185.
38. Изюмов Ю. А.//УФН. 1984. Т. 144. С. 439.
39. Изюмов Ю. А., Лаптев В. М.//ЖЭТФ. 1985. Т. 89. С. 1305.
40. Тахтаджан Л. А., Фаддеев Л. Д.//ТМФ. 1974. Т. 21. С. 160.
41. Теория солитонов. Метод обратной задачи/Под ред. С. П. Новикова. — М.: Наука. 1980.
42. Leung K. M., Huber D. L.//*Sol. State Commun*. 1979. V. 32. P. 127.
43. Rubinstein J.//*J. Math. Phys*. 1970. V. 11. P. 258.
44. Schneider T., Stoll E.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1980. V. 22. P. 5317.
45. Изюмов Ю. А., Черноплёков Н. А. — Нейтронная спектроскопия. — М.: Наука, 1983.
46. Steiner M., Villain J., Windsor C. G.//*Adv. Phys*. 1976. V. 25. P. 87.
47. Steiner M.//*Physics on One Dimension*/Eds J. Bernasconi, T. Schneider. — Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981. — P. 140.
48. Loveluck J. M., Schneider T., Stoll E., Jauslin H. R.//*J. Appl. Phys*. 1981. V. 52. P. 1965.
49. Rajaraman R.//*Phys. Rep*. 1975. V. 21. P. 227.
50. Bishop A. R., Krumhansl J. A., Trullinger S. E.//*Physica. Ser. D*. 1980. V. 1. P. 1.
51. Leung K. M., Bishop A. R.//*J. Phys. Ser. C*. 1983. V. 16. P. 5893.
52. Ваннштейн А. И., Захаров В. И., Новиков В. А., Шифман М. А.//УФН. 1982. Т. 136. С. 553.
53. Leung K. M.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1982. V. 26. P. 226.
54. Magyar E., Thomas H.//*J. Phys. Ser. C*. 1983. V. 16. P. L535.
55. Jensen H. J., Mouritsen O. G., Fogedby H. C., Hedegard P., Svane A.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1985. V. 32. P. 3240.
56. Tagnetti V., Rettori A., Pini M. G., Loveluck J. M., Balcar E.//*J. Phys. Ser. C*. 1983. V. 16. P. 5641.
57. Schneider T., Stoll E.//*J. Appl. Phys*. 1982. V. 53. P. 1850.
58. Ахнер А. И., Баряхтар В. Г., Пелетминский С. В. — Спинные волны. — М.: Наука, 1967.
59. Fowler M., Zotos X.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1982. V. 25. P. 5806.
60. Timonen J., Luther A.//*J. Phys. Ser. C*. 1985. V. 18. P. 1439.
61. Корепин В. Е., Фаддеев Л. Д. — ТМФ. 1975. Т. 25. С. 147.
62. Dashen R. F., Hasslacher B., Neveu A.//*Phys. Rev. Ser. D*. 1974. V. 10. P. 4130.
63. Pokrovsky V. L.//*J. de Phys*. 1981. Т. 42. P. 761.
64. Leung K. M., Hone D., Mills D. L., Riseborough P. S., Trullinger S. E.//*Phys. Rev. Ser. B*. 1980. V. 21. P. 4017.
65. Maki K.//*J. Low Temp. Phys*. 1980. V. 41. P. 327.
66. Косевич А. М., Иванов Б. А., Ковалев А. С. — Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны. — Киев: Наукова думка. 1983.

67. Nagler S. E., Buyers W. J. L., Armstrong R. L., Briat B.//Phys. Rev. Ser. B. 1983. V. 28. P. 3873.
68. Maki K.//Prog. Low Temp. Phys. 1982. V. 8. P. 3.
69. Boucher J. P., Regnault L. P., Rossat-Mignod J., Henry Y., Bouillot J., Stirling W. G.//Phys. Rev. Ser. B. 1985. V. 31. P. 3015.
70. Yoshizawa H., Hirakawa K., Satija S. K., Shirane G.//Ibidem. 1981. V. 23. P. 2298.
71. Kopinga K., Tinus A. M. C., Jonge W. J. M.//Ibidem. 1984. V. 29. P. 2868.
72. Borsa F., Pini M. G., Rettori A., Tognetti V.//Magnetic Excitations and Fluctuations: Proceedings of an International Workshop. San Miniato, Italy, 1984/Eds S. W. Lovesey, U. Balucani et al.—Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer Verlag, 1984. P. 2.
73. Pini M. G., Rettori A.//Ibidem.—P. 72.
74. Fowler M., Wright N. F., Johnson M. D.//Ibidem.—P. 99.
75. Borsa F., Pini M. G., Rettori A., Tognetti V.//Phys. Rev. Ser. B. 1983. V. 28. P. 5173.
76. Harada H., Sasaki S., Shiba H.//Sol. State Commun. 1981. V. 40. P. 29.
77. Schneider T., Stoll E.//J. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 8024.
78. Лисы В., Маханьков В. Г., Федянин В. К. Препринт ОИЯИ. Р17-85-410.—Дубна, 1985.
79. Fedyanin V. K., Lisy V. Preprint of JINR E17-84-223.—Dubna. 1984.
80. Makhanov V. G., Fedyanin V. K.//Phys. Rep. 1984. V. 104. P. 3.
81. Takhtajan L. A., Faddeev L. D.//Phys. Lett. Ser. A. 1981. V. 85. P. 375.
82. Steiner M., Bishop A. R.//Solitons/Eds. S. E. Trullinger, V. E. Zakharov, V. L. Pokrovski.—Amsterdam: Elsevier, 1986.—P. 703.