

УДК 537.9

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ СИЛЬНОАНИЗОТРОПНОГО ($S = 1$) АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА В ФАЗУ КВАНТОВОГО ПАРАМАГНЕТИКА

© 2019 г. В. В. Конев¹, *, В. А. Улитко¹, Д. Н. Ясинская¹, Ю. Д. Панов¹, А. С. Москвин¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина”, Екатеринбург, Россия

*E-mail: vitaliy.konev@urfu.ru

Поступила в редакцию 07.09.2018 г.

После доработки 31.01.2019 г.

Принята к публикации 27.03.2019 г.

Показано, что структура антифазных доменных границ в антиферромагнитной (AFM) фазе сильноанизотропного магнетика с $S = 1$ на двумерной квадратной решетке существенно зависит от параметра одноионной анизотропии D . Компьютерное моделирование на больших квадратных решетках иллюстрирует изменение структуры границ от квантового парамагнетика (QP) до XY-фазы включая промежуточную QP-XY-фазу при относительно небольшом изменении положительных значений D .

DOI: 10.1134/S0367676519070238

ВВЕДЕНИЕ

В отличие от квантовых магнетиков со спином $S = 1/2$, системы со спином $S = 1$ характеризуются более сложным гамильтонианом с появлением одноионной анизотропии, биквадратичных межцентровых взаимодействий и образованием принципиально новых фазовых состояний типа квантового парамагнетика (QP), соответствующих в рамках классического подхода фазе типа легкая плоскость. Интерес к таким системам связан не только из-за сильноанизотропных магнетиков на основе Ni^{2+} ($S = 1$), например, Y_2BaNiO_5 [YBNO], $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ [NENP] [1], но и с так называемыми псевдоспиновыми системами типа “полужестких” (semi-hard-core) бозонов с ограничением на заполнение узлов решетки $n = (0, 1, 2)$ или системами ионов со смешанной валентностью типа “триплета”, $Cu^{(1+, 2+, 3+)}$ в купратах $La_{(2-x)}Sr_xCuO_4$, $Bi^{(3+, 4+, 5+)}$ в висмутатах [2, 3]. Во всех случаях фазовая диаграмма спиновых или псевдоспиновых систем с $S = 1$ существенно богаче, чем в случае аналогичных систем с квантовым (псевдо)спином $S = 1/2$, прежде всего за счет появления слагаемых в гамильтониане типа одноионной анизотропии и биквадратичных взаимодействий, а также фаз типа квантового парамагнетика и спин-нематика.

МОДЕЛЬ

Рассмотрим модельный купрат, который представляет $2D$ систему Cu-центров в CuO_2 плоскости купратов, которые могут находиться в трех различных валентных зарядовых состояниях: $Cu^{(1+, 2+, 3+)}$. Этот зарядовый триплет мы связываем с тремя состояниями псевдоспина $S = 1$, следующим образом: $Cu^{1+} \rightarrow M_S = -1$, $Cu^{2+} \rightarrow M_S = 0$, $Cu^{3+} \rightarrow M_S = 1$ и используем известные методы описания спиновых систем. Спиновая алгебра систем с $S = 1$ ($M_S = 0, \pm 1$) включает восемь независимых нетривиальных операторов (три дипольных и пять квадрупольных): S_z ; $S_{\pm} = \pm(S_x \pm iS_y)$; S_z^2 ; $T_{\pm} = \{S_z, S_{\pm}\} = S_z S_{\pm} + S_{\pm} S_z$; S_{\pm}^2 . Операторы повышения/понижения S_{\pm} и T_{\pm} меняют проекцию (псевдо)спина на ± 1 , но различным образом: $\langle 0 | S_{\pm} | \mp 1 \rangle = \langle \pm 1 | S_{\pm} | 0 \rangle = \mp 1$, $\langle 0 | T_{\pm} | \mp 1 \rangle = -\langle \pm 1 | T_{\pm} | 0 \rangle = +1$. Операторы повышения/понижения S_{\pm}^2 описывают переходы $|-1\rangle \rightarrow | +1 \rangle$, т.е. они “рождают” на узле дырочную (S_{\pm}^2) или электронную (S_{\pm}^2) пару, представляющих композитный локальный бозон, с кинематическим ограничением $S_{\pm}^2 = 0$, что подчеркивает его природу как “жесткого” (hard-core) бозона.

Локальный (узельный) недиагональный параметр XY порядка $\langle S_{\pm}^2 \rangle$, являющийся фактически

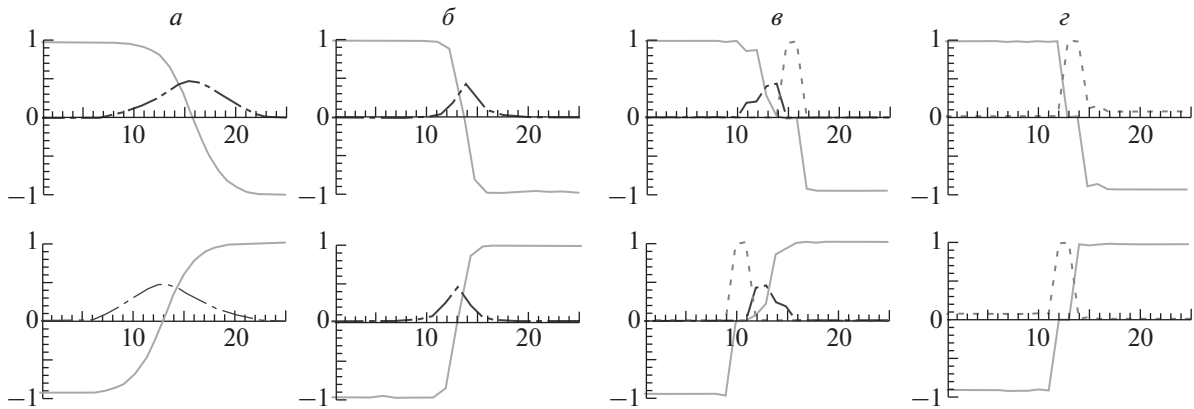


Рис. 1. Усредненное распределение поперек доменной границы для локальных параметров порядка AFM, XY-фазы и QR обозначенных соответственно сплошной, штрихпунктирной и штриховой линиями на двух подрешетках А и Б (верхняя и нижняя часть рисунка соответственно), при следующих значениях параметра D : (а) -5.0 , (б) 1.0 , (в) 1.1 , (г) 1.2 . По горизонтальной оси отложены значения в единицах постоянной решетки.

параметром локального сверхпроводящего порядка, отличен от нуля только в случае, если на узле имеется квантовая суперпозиция состояний $| -1 \rangle$ и $| +1 \rangle$.

Запишем эффективный гамильтониан, который коммутирует с z -компонентой полного спина на $n = \frac{1}{N} \sum_i S_{iz}$ и, таким образом, сохраняет намагниченность системы, как сумму потенциальной и кинетической энергии: $H = H_{pot} + H_{kin}$,

$$H_{pot} = D \sum_i S_{iz}^2 + J \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz}, \quad (1)$$

а в кинетической энергии мы учтем только вклад двухионной биквадратичной анизотропии $H_{kin} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (S_{i+}^2 S_{j-}^2 + S_{j+}^2 S_{i-}^2)$. Первое слагаемое в (1), или “одноионная анизотропия”, описывает корреляционные эффекты плотность–плотность на узлах, второе слагаемое описывает межузельные взаимодействия (корреляции) типа плотность–плотность. Ниже мы ограничиваемся учетом взаимодействия ближайших соседей с положительным (антиферромагнитным) знаком параметра межцентровых корреляций J .

В зависимости от соотношения между параметрами гамильтониана (1) и величины намагниченности (n) основное состояние системы соответствует либо однородной фазе типа квантового парамагнетика с $\langle S_z \rangle = \langle S_z^2 \rangle = 0$, реализуемой при больших положительных значениях параметра D (large- D phase), либо антиферромагнитной фазе (AFM) вдоль z -оси или XY-фазе, с отличным от нуля параметром порядка $\langle S_{\pm}^2 \rangle$.

РЕЗУЛЬТАТЫ

С использованием графического процессора NVidia в рамках метода Монте-Карло мы моделировали антиферромагнитный фазовый переход для сильноанизотропного магнетика $S = 1$ в двух-подрешеточном приближении на квадратной решетке 256×256 с периодическими граничными условиями при выборе параметров $t = 1$, $J = 0.75$, $n = 0.04$, обеспечивающим основное состояние типа антиферромагнитного упорядочения в достаточно широком диапазоне изменений параметра одноионной анизотропии D .

В процессе быстрой термализации (отжига), при $D = -5$, происходило формирование полосовой доменной структуры с появлением при низких температурах ярко выраженной нитевидной (филаментарной) XY-фазы в центре антифазных доменных границ AFM-фазы, характеризуемой, прежде всего, отличным от нуля значением модуля локального параметра XY-порядка. С ростом двухионной биквадратичной анизотропии t происходит постепенное уширение доменных границ с увеличением объема XY-состояния вплоть до полного вытеснения AFM фазы и перехода в неоднородное XY-состояние.

Интересно, что как AFM-фаза, так и XY-структура доменной границы оказались устойчивыми относительно изменения параметра локальной корреляции D в широком диапазоне, вплоть до значений $D \sim 1.0$. Однако при дальнейшем росте локальных корреляций происходит коренная перестройка структуры доменных границ.

На рис. 1 представлена картина эволюции антифазной доменной границы с ростом D . При постепенном повышении D нарушается регулярная структура нитевидной XY-фазы на краях антифазной доменной границы с появлением QR-фазы, разрастающейся вплоть до полного вытеснения

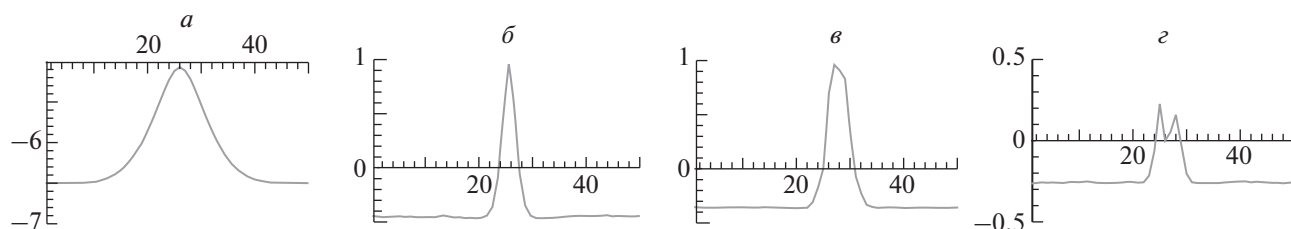


Рис. 2. Усредненное распределение поперек доменной границы для локальной энергии при следующих значениях параметра D : (а) -5.0 , (б) 1.0 , (в) 1.1 , (г) 1.2 . По горизонтальной оси отложены значения в единицах постоянной решетки, а по вертикальной оси энергия в единицах параметра t .

нитевидной XU -фазы при $D \sim 1.2$ и перехода всей границы в QR. При дальнейшем росте локальных корреляций $D > 1.5$ происходит уширение доменной границы с постепенным вытеснением AFM порядка. Другими словами, фазовый переход: AFM \rightarrow QR (large- D -phase) с ростом параметра локальных корреляций реализуется путем разрастания доменных границ.

Важно отметить, что образование зародышей QR-фазы на краях доменной границы связано с тем, что там много меньше разница энергий между QR и XU -фазой, см. рис. 2. Другими словами, появление QR-фазы на краях энергетически более выгодно, чем в центре. На рис. 2 также видно, что разница энергий фаз в домене и центре доменной границы гораздо меньше когда в центре доменной границы реализуется QR-фаза (при $D = 1.2$) чем при XU -фазе ($D = -5$). С дальнейшим ростом D это приведет к тому, что AFM-фаза в доменах станет метастабильной а QR-фаза в центре доменной границы устойчивой.

Исследование температурных эффектов показывает, что с ростом температуры в доменных стенках AFM фазы при $D = 1.0$ сперва происходит переход из XU -фазы в QR, а затем в неупорядоченное “парамагнитное”, состояние. Однако при последующем охлаждении вплоть до очень низких температур $T = 0.0001$ восстанавливается только QR, структура доменных границ, т.е. мы имеем дело с температурным гистерезисом структуры границ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами проведено исследование влияния величины одноионной анизотропии D на структуру доменных границ антиферромагнитной фазы. В ходе численного моделирования методом Монте-Карло на больших квадратных решетках мы смогли наблюдать образование при быстром отжиге полосатой доменной структуры, в антифазных доменных границах которой формируется филаментарная XU -фаза, устойчивая в широком интервале изменений D вплоть до положительных значений $D \sim 1$. Однако при дальнейшем росте локальных корреляций XU -фаза разрушалась и в границах формировалась нитевидная QR-фаза, разделяющая домены с антиферромагнитным упорядочением. Моделирование температурных эффектов указывает на наличие температурного гистерезиса структуры границ.

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации, соглашение № 02.A03.21.0006, и проектов № 2277 и № 5719 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rudowicz C. // Phys. B. Cond. Mat. 2014. V. 436. P. 193.
2. Moskvina A.S. // JETP. 2015. V. 148. № 3. P. 549.
3. Moskvina A.S., Panov Yu.D. // J. Supercond. Nov. Magn. 2018. V. 31. № 3. P. 677.