

# Спиновая структура антиферромагнитной дисклинации

Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, В. П. Воронов

Институт магнетизма НАН Украины, 252142, г. Киев, пр. Вернадского, 36 б  
E-mail: vbaryakhtar@gluk.apc.org

Статья поступила в редакцию 9 января 1997 г.

Проведен анализ спиновой структуры магнитной дисклинации — спиновой неоднородности, — появляющейся в антиферромагнетике при наличии дислокации. Анализ проводился как на основе дискретной модели, так и в рамках специально построенной обобщенной континуальной теории, базирующейся на локальном введении вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  с учетом возможности изменения этого вектора по длине. Для дисклинации построено решение без сингулярностей, в котором модуль вектора антиферромагнетизма обращается в нуль в центре дисклинации. В дискретной модели энергия дисклинации существенно зависит от расположения спинов вблизи кора и характера их взаимодействия. Предложена конкретная модель расположения спинов, для которой данные численного анализа дискретной и континуальной моделей находятся в хорошем согласии. Показано, что планарная дисклинация устойчива относительно выхода спинов из «легкой плоскости».

Проведено аналіз спінової структури магнітної дисклинації — спінової неоднорідності, — яка виникає в антиферромагнетикі при наявності дислокації. Аналіз проведено як на основі дискретної континуальної моделі, так і в межах спеціально побудованої узагальненої континуальної теорії, яка базується на локальному введенні вектора антиферромагнетизму  $\mathbf{l}$  з урахуванням можливості зміни цього вектора по довжині. Для дисклинації побудовано рішення без сингулярностей, в якому модуль вектора антиферромагнетизму обертається в нуль в центрі дисклинації. В дискретній моделі енергія дисклинації суттєво залежить від розташування спінів поблизу кора та характеру їх взаємодії. Запропоновано конкретну модель розміщення спінів, для якої дані чисельного аналізу дискретної і континуальної моделей добре узгоджуються між собою. Показано, що планарна дисклинація стійка по відкошенню до виходу спінів з «легкої площини».

PACS: 75.30.-m

## 1. Введение

Уже более пятидесяти лет антиферромагнетики (АФМ) привлекают внимание большого числа исследователей (см. обзоры [1–3]). Обычно спиновое упорядочение АФМ описывается в рамках картины конечного числа магнитных подрешеток, каждая из которых упорядочена ферромагнитно, при том что суммарный магнитный момент АФМ в обменном приближении равен нулю. В последнее десятилетие были обнаружены свойства АФМ, которые не укладываются в простую схему подрешеток. Достаточно отметить необычные квантовые свойства низкоразмерных АФМ (см. [1]) и существование фрустрированных АФМ, свойства которых не описываются, вообще говоря, простой подрешеточной моделью.

© Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, В. П. Воронов, 1997

Понятие фрустрации обычно связывают со спиновыми стеклами, в которых существует случайное распределение ферромагнитных и антиферромагнитных связей между ближайшими соседями. Однако и для магнетиков с регулярной решеткой и антиферромагнитным взаимодействием могут существовать эффекты фрустрации. Отметим АФМ с треугольной решеткой [4] или более сложной *kagomee*-решеткой [5]. Для этих АФМ характерно то, что при учете взаимодействия только ближайших соседей разбиение исходной решетки на конечное число магнитных подрешеток не может удовлетворить условию минимума энергии соседних спинов, т.е. условию их антипараллельной ориентации. В этом случае вопрос об основном состоянии даже в

приближении классических спинов становится нетривиальным. В частности, для треугольной решетки, в соответствии с численным анализом, реализуется  $120^\circ$ -ная трехподрешеточная структура, выгодность которой не очевидна, а для *kagomee*-решетки точное решение проблемы не известно. Исследование фрустрированных магнетиков представляется интересным направлением в современной физике магнетизма.

Сильная зависимость свойств АФМ от характера решетки должна приводить к существенному влиянию протяженных дефектов решетки на антиферромагнитное упорядочение. Как было отмечено Дзялошинским [6] и Ковалевым с Косевичем [7], наличие дислокации в АФМ производит «сбой» в подрешетках и приводит к появлению макроскопических магнитных дефектов — доменных стенок, заканчивающихся на особой линии — дисклинации. Поскольку дисклинация может быть рассмотрена как антиферромагнитный вихрь с полуцелым значением топологического заряда — завихренности (см. [2,3]), ее анализ в свете повышения интереса к двумерным магнитным солитонам и особенно вихрям представляет самостоятельный интерес. Как известно, магнитные вихри вносят специфический вклад в функцию отклика магнетиков [2] и приводят к появлению локализованных или квазилокальных магнитных мод [8,9]. Таким образом, появление дисклинации приводит к наблюдаемым физическим эффектам, анализ которых должен базироваться на исследовании реального распределения спинов как в ядре дисклинации, так и вдали от него.

Исследование свойств магнитных вихрей может проводиться с использованием дискретной спиновой модели и континуального подхода. Результаты этих подходов при анализе внеплоскостного вихря в ферромагнетике и АФМ хорошо согласуются даже для случая, когда параметр длины макроскопической теории — радиус кора вихря — близок к постоянной решетки  $a$  [8]. Анализ вихря в дискретных моделях может быть проведен только численно для конечных решеток (обычно не больших чем  $40 \times 40$ ). Поэтому особую роль играет применение континуального подхода, позволяющего выяснить общие закономерности для вихря в безграничной среде. Естественная неточность континуального подхода в применении к реальным магнетикам, содержащим спины в дискретных узлах, может контролироваться путем сравнения с данными численного анализа дискретных моделей. Однако

для дисклинации стандартный континуальный подход, базирующийся на рассмотрении вектора антиферромагнетизма как единичного, приводит к сингулярностям вблизи центра дисклинации и нуждается в модификации.

В работе [10] была предложена одномерная континуальная модель для описания структуры и динамики сложных магнитоструктурных топологических дефектов, предсказанных в [6,7]. В этой модели, обобщающей на случай магнитоупорядоченных сред известную модель Френкеля—Конторовой, сингулярность вблизи центра дислокации и дисклинации отсутствует. Однако вследствие одномерного характера модели она дает неверные асимптотики распределения полей на больших расстояниях от центра дефекта.

В настоящей работе проведен детальный анализ спиновой структуры дисклинации вблизи ее кора и вдали от него. Анализ проводился как на основе дискретной модели для классических спинов, так и в обобщенной континуальной модели, базирующейся на локальном введении вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  с учетом возможности изменения этого вектора по длине.

В дискретной модели энергия дисклинации существенно зависит от расположения атомов вблизи ядра дислокации и характера их взаимодействия. Для этой модели показано, что при анизотропии типа «легкая плоскость» дисклинация с планарной ориентацией спинов устойчива относительно выхода спинов из «легкой плоскости».

В континуальной модели для дисклинации в АФМ вблизи температуры Нееля построено решение без сингулярностей, в котором модуль вектора антиферромагнетизма обращается в нуль в центре дисклинации. Обсуждается возможность использования этого решения и при низких температурах. В частности, указана конкретная модель расположения спинов, для которой данные анализа дискретной и континуальной моделей находятся в хорошем согласии.

## 2. Структура кора дисклинации на основе решеточной модели

Для микроскопического описания магнетика часто используется классическая модель Гейзенберга (см., например, [2,3]). Модель, применяемая в настоящей работе, основана на двумерной квадратной решетке с изъятой полупрямой узлов (рис. 1). Каждому углу соответствует вектор спина  $\mathbf{S}_i$  постоянной длины  $\mathbf{S}_i^2 = S^2$ :

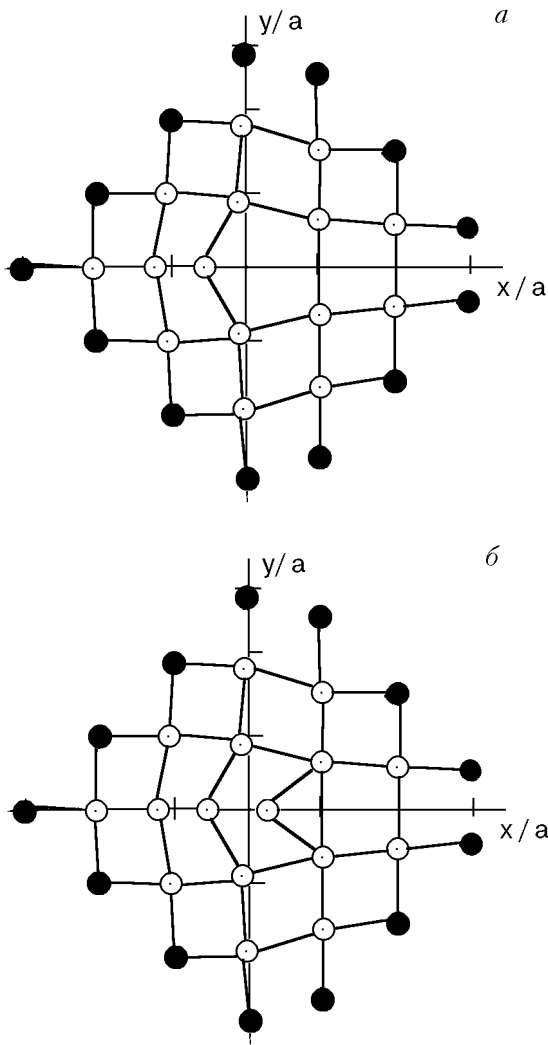


Рис. 1. Фрагменты решетки, используемые для конкретного расчета спиновой структуры дисклинации с пятиугольником (а) и треугольником (б) обменно связанных атомов в центре. Отрезки прямой линии обозначают обменные связи;  $\circ$  — атомы, ориентация спинов которых находится варьированием энергии,  $\bullet$  — атомы, спины которых фиксировались граничными условиями.

$$H = J \sum (S_{xi}S_{xj} + S_{yi}S_{yj} + \lambda S_{zi}S_{zj}) . \quad (1)$$

Здесь и далее суммирование проводится по парам ближайших соседей;  $J > 0$  — обменный интеграл, который для простоты принимают одинаковым для всех связей;  $\lambda$  — константа, описывающая магнитную анизотропию. Считая, что АФМ имеет анизотропию типа «легкая плоскость», положим  $0 \leq \lambda \leq 1$ .

Введем параметризацию

$$\begin{aligned} S_z &= S m , \quad S_x = S \sqrt{1 - m^2} \cos \varphi , \\ S_y &= S \sqrt{1 - m^2} \sin \varphi . \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь значения  $|m| \leq 1$ ;  $\varphi$  — угол между  $\mathbf{S}$  и фиксированным направлением в базисной плоскости. В этих переменных

$$\begin{aligned} H &= JS^2 \times \\ &\times \sum \left\{ \sqrt{1 - m_i^2} \sqrt{1 - m_j^2} \cos (\varphi_i - \varphi_j) + \lambda m_i m_j \right\} . \end{aligned} \quad (3)$$

Если все спины лежат в базисной плоскости (ниже мы покажем, что это предположение подтверждается численными расчетами), то достаточно исходить из выражения

$$H = JS^2 \sum \cos (\varphi_i - \varphi_j) . \quad (4)$$

При идеальном антиферромагнитном упорядочении спины соседних магнитных атомов направлены в противоположные стороны. Очевидно, что такое идеальное антиферромагнитное упорядочение может реализоваться только в том случае, если число атомов в любой замкнутой цепочке обменно связанных атомов в кристалле четное. Если же в магнитной решетке кристалла существует замкнутый контур атомов, содержащий нечетное число узлов, то такое упорядочение спинов не может быть реализовано. Перед тем как рассматривать дисклинацию, полезно обсудить модельную задачу об основном состоянии замкнутой цепочки с нечетным числом узлов  $N$  и антиферромагнитным взаимодействием.

Энергию взаимодействия спинов выберем в виде (4), считая, что суммирование проводится по спинам цепочки. Для определенности выбираем произвольный узел, приписываем ему номер  $i = 0$  и  $\varphi_i = 0$ . Нумерация ведется против часовой стрелки. Симметрия системы позволяет написать решение для углов  $\varphi_k$ , которое осуществляет минимум энергии  $E$ :

$$\varphi_k = (-1)^k \pi + \frac{2\pi k}{N} \nu , \quad (5)$$

где  $k$  — номер узла;  $\nu$  — полуцелое число, такое, что  $-N/2 < \nu < N/2$ .

Энергия цепочки, содержащей нечетно число узлов, отсчитываемая от уровня  $-JS^2N$ , определяется выражением

$$E_n = JS^2N(1 - \cos [2\pi\nu/N]) .$$

Абсолютному минимуму соответствует  $\nu = \pm 1/2$ . Устойчивым локальным минимумом отвечают  $|\nu| < N/4$ . Угол между направлениями вектора  $\boldsymbol{\sigma}_i = (-1)^i \mathbf{S}_i$  в соседних узлах цепочки одинаков для всех связей и равен  $2\pi\nu/N$ . Такое поведение  $\boldsymbol{\sigma}_i$  соответствует поведению вектора

директора  $\mathbf{n}$  при обходе вокруг дисклинации в жидких кристаллах; число  $\nu$  соответствует индексу Франка дисклинации. При обходе всей цепочки вектор  $\sigma_i$  поворачивается на  $2\pi\nu$ . Из этого вытекает полуцелый характер  $\nu$ .

Разместим узлы цепочки в вершинах правильного  $N$ -угольника, который вписан в круг радиусом  $R$ . Для направления  $\sigma$ , которое в пределе  $N \rightarrow \infty$  можно задать в каждой точке окружности, формула для  $\varphi_i$  может быть представлена в виде  $\varphi = \chi/2$ , где  $\chi$  — угловая координата данной точки окружности. Для большого числа узлов цепочки легко получить следующую асимптотику энергии основного состояния:  $E = \pi^2 JS^2/2N$ .

В кристалле с квадратной решеткой, содержащей дислокацию, вектор Бюргера которой равен постоянной решетки, любой контур, проведенный вдоль обменных связей и охватывающий ось дислокации, содержит нечетное число узлов. Как отмечалось, это приводит к появлению спиновой неоднородности — дисклинации. Варьирование гамильтониана магнетика по направлениям спинов позволяет найти спиновую конфигурацию, которая отвечает этой дисклинации.

При численном анализе спиновой структуры приходится пользоваться фрагментом решетки с конечным числом узлов. Для выяснения структуры кора достаточно выбрать фрагмент, содержащий порядка 100 узлов. Его взаимодействие с остальной частью решетки можно учесть выбором некоторых граничных условий. Обычно используют так называемые фиксированные граничные условия, т.е. для спинов, граничащих с фрагментом, выбирают определенные направления, соответствующие известной асимптотике решения. В нашем случае вид этих условий можно установить, если воспользоваться аналогией между контуром в решетке и свободной цепочкой. Рассматривая контур спинов, граничащих с фрагментом, близкий по форме к круговому, положим, что угол между  $\sigma$  и фиксированной осью составляет половину значения полярной координаты данного узла,  $\varphi = \chi/2$ . Заметим, что такая же асимптотика получается и из феноменологической теории (см. ниже). Такой подход (выбор фиксированных граничных условий вида  $\varphi = \chi$ ) использовался при изучении магнитных вихрей в [8,9]. Однако в случае дисклинации ситуация несколько сложнее. Действительно, из симметрии задачи очевидно, что центр вихря — центр полярной системы координат (полюс) — расположен в

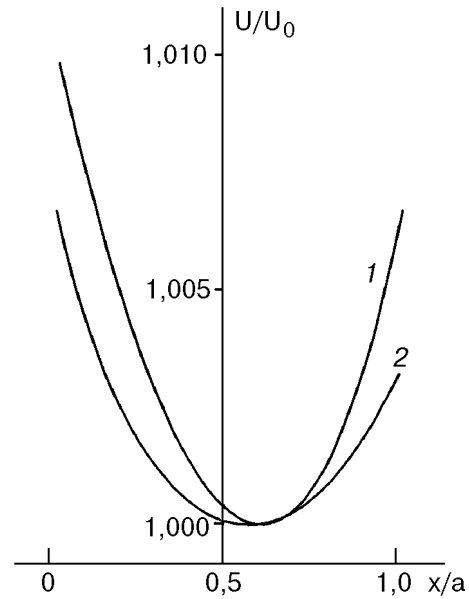


Рис. 2. Зависимость энергии распределения спинов при различных положениях полюса (центра дисклинации) от координаты полюса  $x$ . Кривые 1 и 2 соответствуют двум рассмотренным нами вариантам расположения обменных связей атомов, изображенным на рис. 1, а, б.

центре элементарной ячейки магнетика. В силу более низкой симметрии задачи о магнитной дисклинации координата полюса в направлении изъятых полупрямой атомов (оси  $x$ ) не определена и должна находиться независимо из условия минимума энергии. Поэтому поступим следующим образом. Решая уравнения  $\partial H/\partial \mathbf{S}_i = 0$  с фиксированными значениями  $\mathbf{S}$  на границе, отвечающими некоторому положению полюса  $x_0$ , находим спиновую конфигурацию и ее энергию при данном  $x_0$ . После этого, изменяя положение полюса, ищем минимум энергии фрагмента по параметру  $x_0$ .

Начнем с простейшего случая, когда все спины лежат в базисной плоскости (далее мы покажем, что эта конфигурация устойчива и отвечает абсолютному минимуму энергии дисклинации). Уравнения для  $\varphi_i$  могут быть представлены в виде

$$\operatorname{tg} \varphi_i = \frac{\sum \sin \varphi_i}{\sum \cos \varphi_i}.$$

Суммирование проводится по ближайшим соседям  $i$ -го узла. Эти уравнения решаются методом итераций с выбором начального приближения в виде  $\varphi = \chi/2$ . Для конкретных расчетов были использованы фрагменты двух видов, изображенные на рис. 1, а, б.

В граничных узлах, обозначенных на рис. 1 сплошными кружками, значения  $\varphi_i$  были фиксированы условием  $\varphi = \chi/2$ . При различных положениях полюса проводилась минимизация энергии по значениям  $\varphi_i$  во внутренних узлах и находилась энергия спиновой конфигурации. После этого определялся минимум энергии по положению центра дисклинации (полюса). Зависимость энергии от положения центра дисклинации на линии симметрии  $x_0$  приведена на рис. 2. Минимум достигается при  $x_0 = 0,570a$  для фрагмента с треугольником обменно связанных атомов в центре (см. рис. 1,б) и при  $x_0 = 0,611a$  для фрагмента с центральным пятиугольником (см. рис. 1,а). Интересно отметить, что даже для центральных атомов разница между значениями углов  $\varphi$  и величинами  $\chi/2$  невелика. В частности, для конфигурации на рис. 1,а соответствующие значения углов равны  $0, \pm 69,75$  и  $\pm 148,72^\circ$ , что достаточно близко к асимптотическим значениям  $\pm 72$  и  $\pm 144^\circ$ . Различие между этими значениями быстро убывает при удалении от центра, и увеличение размеров фрагмента практически не сказывается на ориентации спинов центральных узлов.

Проведенное исследование планарного распределения спинов должно быть дополнено анализом возможности выхода спинов из базисной плоскости. Действительно, для случая легкоосного АФМ, которому отвечает  $\lambda > 1$ , согласно анализу в работах [6,7], возникает структура типа доменной стенки, выходящей из центра дислокации, и непланарное распределение спинов. Значит, и для легкоплоскостного АФМ с  $1 > \lambda > 0$  в принципе может существовать такое  $\lambda_c > 0$ , что при  $\lambda \geq \lambda_c$  планарный характер распределения спинов нарушается хотя бы в некоторой области. Для магнитного вихря этот вопрос исследовался Вайсиным [9], значения  $\lambda_c$  для различных решеток оказались порядка 0,7–0,9.

Исследуем устойчивость планарной конфигурации спинов относительно выхода из базисной плоскости. Следуя методу в работе [9], линеаризуем полную систему уравнений  $\partial N/\partial \varphi_i = 0$ ,  $\partial N/\partial m_i = 0$  относительно  $m_i$ . Эта система в матричной форме имеет вид

$$\sum_j \left( -\frac{1}{\lambda} A_i \delta_{ij} + e_{ij} \right) m_j = 0,$$

где  $e_{ij} = 1$ , если  $i$  и  $j$  — ближайшие соседи, и  $e_{ij} = 0$  — в противоположном случае;  $A_i = \sum_j \cos(\varphi_i - \varphi_j)$  — сумма энергий связей, выходящих из  $i$ -го узла. Значение  $\lambda_c$

определяется условием, что эта система имеет нетривиальное решение, т.е.  $\det(-A_i \delta_{ij} + \lambda_c e_{ij}) = 0$ . Проведенный нами численный анализ показал, что это условие не выполняется ни при каких  $0 \leq \lambda \leq 1$ . Значит, в исследуемой модели дисклинация имеет чисто внутривекторный характер для легкоплоскостного и для изотропного ( $\lambda = 1$ ) АФМ.

Мы провели вычисление энергии основного состояния АФМ с дисклинацией для фрагментов решетки, близких к круговым, с радиусами  $5a$ ,  $6a$ ,  $7a$  и  $8a$  ( $a$  — постоянная решетки). Центр дисклинации выбирался согласно полученным выше результатам в точках  $x_0 = 0,570a$  и  $0,611a$  для фрагментов соответственно с треугольником и пятиугольником обменно связанных атомов в центре. Анализ показал, что энергия дисклинации хорошо аппроксимируется формулой

$$E = \frac{1}{4} \pi J S^2 \ln \left( \frac{CR}{a} \right), \quad (6)$$

где  $C$  — константа, значение которой достаточно сильно зависит от конфигурации обменных связей атомов в центре дислокации. Для моделей с пятиугольником и треугольником обменно связанных атомов в центре величины  $C$  равны 3,15 и 11,84. Логарифмическая зависимость энергии от размера системы совпадает с зависимостью, вытекающей из континуального приближения (см. ниже формулу (10)).

### 3. Феноменологическое описание дисклинации вблизи точки Нееля

Как уже отмечалось, в АФМ с дислокацией невозможно ввести подрешетки таким образом, чтобы спины внутри каждой из них были параллельны и разбиение на подрешетки было согласованным для всего кристалла. Однако можно ввести подрешетки с помощью следующей процедуры. Разобьем решетку на несколько областей, не содержащих ядра дислокации. В каждой из этих областей можно ввести подрешетки и определить вектор антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  как нормированную разность средних значений намагниченностей подрешеток. Для пересекающихся областей можно согласовать нумерацию подрешеток.

Рассмотрим систему  $n$  пересекающихся областей с идеальной решеткой, образующих замкнутый контур, охватывающий ядро дислокации. Проведем согласование подрешеток, двигаясь вдоль этого контура. Вернувшись к области  $1$  со стороны области  $n$ , заметим, что подрешетки поменялись местами и знак  $\mathbf{l}$

изменяется на противоположный. Значит, можно пользоваться феноменологическим описанием АФМ, введя вектор  $\mathbf{l}$  на плоскости с размером, выходящим из центра дислокации, и считая, что  $\mathbf{l}$  имеет противоположный знак на разных берегах разреза. Таким образом, вектор  $\mathbf{l}$  можно определить локально в любой области, которая не содержит центра дислокации. (Это напоминает процедуру, обычно используемую для введения поля деформаций при описании кристалла с дислокацией в теории упругости [11].) Вблизи центра направление  $\mathbf{l}$  не определено, поэтому прямое использование модели с  $|\mathbf{l}| = 1$ , применяемой для идеального АФМ, не возможно. Аналогичная трудность возникает при феноменологическом анализе блоховской точки [12], ее можно обойти таким же способом, допустив возможность изменения вектора  $\mathbf{l}$  по длине и считая, что в центре дисклинации  $|\mathbf{l}| = 0$ . Учесть вклад этого изменения в энергию системы можно, добавив к энергии слагаемые, зависящие от длины  $l$ .

При таком подходе градиент  $\mathbf{l}$  вблизи центра дисклинации не мал, что противоречит обычному предположению феноменологической теории  $|a(\nabla\mathbf{l})|^2 \ll 1$ . Но можно указать один физически интересный случай, когда не возникает проблем с переходом от дискретной к континуальной модели и континуальная теория точно описывает структуру сингулярных солитонов типа дисклинации в АФМ. Рассмотрим температуру  $T$ , близкую к точке Нееля АФМ  $T_N$ . При этом равновесное значение  $l \propto \sqrt{\tau}$ , где  $\tau = (T_N - T)/T_N$ , и соответственно характерный размер неоднородности спинов  $\Delta = \Delta(T) = \Delta_0/\sqrt{\tau}$ , где величина  $\Delta_0$  — порядка постоянной решетки  $a$ . Характерный размер кора дисклинации определяется величиной  $\Delta$  и неограниченно возрастает при  $T \rightarrow T_N$ , в силу чего условия применимости континуального приближения заведомо выполняются. Заметим, что при этом не нужно рассматривать критическую область в непосредственной близости от точки Нееля: уже при  $\tau \sim 0,1$  величина  $\Delta(T) \approx 3\Delta_0 \approx 3a$ , в этом случае, в соответствии с данными работы [8], континуальный и дискретный подходы хорошо согласуются (во всяком случае, при анализе статических свойств магнитных неоднородностей).

При построении феноменологической теории будем исходить из энергии (при конечных температурах лучше говорить о термодинамическом потенциале) вида

$$W = \frac{1}{2} A \int_{\Omega} d\mathbf{r} \left\{ (\nabla\mathbf{l})^2 + \frac{1}{\Delta_1^2} l^2 + F(l^2) \right\}. \quad (7)$$

Здесь  $A > 0$  — константа неоднородного обмена;  $F(l^2)$  — функция, определяющаяся обменным взаимодействием и описывающая изменение энергии АФМ при изменении длины вектора  $\mathbf{l}$ ;  $\Delta_1$  — характерный масштаб длины, связанный с энергией анизотропии, для слабоанизотропных магнетиков величина  $\Delta_1 \gg a$ . Область интегрирования  $\Omega$  — плоскость  $xy$  с размером, выходящим из центра дислокации. Граничные условия на верхнем и нижнем берегах разреза  $\mathbf{l}_{(+)} = -\mathbf{l}_{(-)}$ .

Для  $\mathbf{l}$  введем параметризацию

$$\mathbf{l} = l \mathbf{e}_z \cos \theta + l \sin \theta (\mathbf{e}_x \cos \varphi + \mathbf{e}_y \sin \varphi).$$

Распределение  $\mathbf{l}$  находим из уравнений Эйлера–Лагранжа функционала энергии. Варьируя, получаем систему уравнений

$$\nabla^2 l - l \left( (\nabla\theta)^2 + (\nabla\varphi)^2 \sin^2 \theta + \frac{1}{\Delta_1^2} \cos^2 \theta \right) - l \frac{dF}{dl^2} = 0,$$

$$\nabla(l^2 \nabla\theta) - l^2 \sin \theta \cos \theta \left( \nabla\varphi)^2 - \frac{1}{\Delta_1^2} \right) = 0,$$

$$\nabla(l^2 \sin^2 \theta \nabla\varphi) = 0.$$

Перейдем к полярным координатам  $(r, \chi)$ . Подстановка  $l = l(r)$ ,  $\theta = \pi/2$ ,  $\varphi = v\chi + \varphi_0$ , где  $\varphi_0$  — произвольное число, превращает последние два уравнения в тождества. Это согласуется с данными анализа дискретной модели, согласно которым в дисклинации все спины лежат в плоскости, т.е.  $\theta = \pi/2$ . Считая, что на разрезе  $\varphi_0 = 0$ , приходим к условию  $\varphi = \chi/2$ , полученному выше для области вдали от центра дисклинации. Граничное условие на разрезе,  $\mathbf{l}_{(+)} = -\mathbf{l}_{(-)}$ , определяет  $v$  как полуцелое. Уравнение для  $l$  принимает вид

$$\frac{d^2 l}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dl}{dr} - l \frac{v^2}{r^2} - l \frac{dF}{dl^2} = 0. \quad (8)$$

Для конкретности примем такой вид функции  $F(l^2)$ , какой следует из разложения Ландау:

$$F(l^2) = \frac{1}{2\Delta_0^2} (l^2 - \tau)^2,$$

где  $\tau = (T_N - T)/T_N$ ;  $\Delta_0$  — порядка постоянной решетки  $a$ . Тогда можно ввести новую

неизвестную функцию  $\psi(x) = l\tau^{-1/2}$ , зависящую от переменной  $x = r/\Delta(T)$ ,  $\Delta(T) = \Delta_0\tau^{-1/2}$ , и записать универсальное безразмерное уравнение для  $\psi(x)$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{v^2}{x^2} + \psi - \psi^3 = 0. \quad (9)$$

Граничные условия выбираем из требования отсутствия сингулярности в центре дисклинации и равновесия на бесконечности,  $\psi(0) = 0$  и  $\psi(\infty) = 1$ . Это уравнение отличается от статической версии уравнения Гросса – Питаевского для вихря в жидком гелии [13] только тем, что коэффициент при слагаемом  $1/x^2$  является полуцелым. В силу этого уравнения асимптотическое поведение  $l(r)$  можно записать в виде  $l \rightarrow (r/r_0)^v$ ,  $r_0 = x_*\tau^{-1/2}\Delta_0$  при  $r \rightarrow 0$ ,  $l \rightarrow 1 - v^2\Delta_0^2/2\tau r^2$  при  $r \rightarrow \infty$ . Параметр  $x_*$  находится численно (см. далее). Значение  $l$  отличается от единицы только в области  $r \leq r_0 \sim \tau^{-1/2}\Delta_0$ , эту область можно отождествить с кором дисклинации.

Используя асимптотическое поведение при  $r \rightarrow \infty$ , можно показать, что энергия дисклинации содержит обычную для неоднородностей типа вихрей логарифмическую зависимость от размера системы  $R$ :

$$E = \tau A \frac{v^2}{4} \ln \left( D \frac{\sqrt{\tau} R}{\Delta_0} \right), \quad (10)$$

где  $R$  — радиус образца АФМ (образец считается цилиндрическим);  $D$  — численная константа, которая может быть определена после решения дифференциального уравнения (9). Решение этого уравнения с граничными условиями  $l(0) = 0$ ,  $l(\infty) = 1$  может быть построено численно методом стрельбы, см. детали в [3], его вид приведен на рис. 3. Для упрощения вычисления энергии удобно использовать тождество  $2E\Delta_0^2 = \tau \int r dr (1 - l^4)$ , которое можно получить, умножив уравнение (9) на  $dl/dr$  и проинтегрировав по  $r$  от 0 до  $\infty$ .

Найденные значения константы  $x_*$  равны 1,272; 2,140; 2,964 для  $v = 1/2$ ;  $3/2$ ;  $5/2$  соответственно. Константы  $D$  при этих же значениях топологического параметра равны соответственно 5,50; 0,82; 0,44. Аномально большое значение  $D$  для  $v = 1/2$  объясняется тем, что в этом случае, в отличие от случаев дисклинаций с  $v = 3/2$ ;  $5/2$  или магнитного вихря, в котором  $l \rightarrow r/r_0$  при  $r \rightarrow 0$ , значение  $dl/dr$  расходится при  $r \rightarrow 0$ . Заметим, что, поскольку значения  $D$  для  $v = 1/2$  и  $3/2$

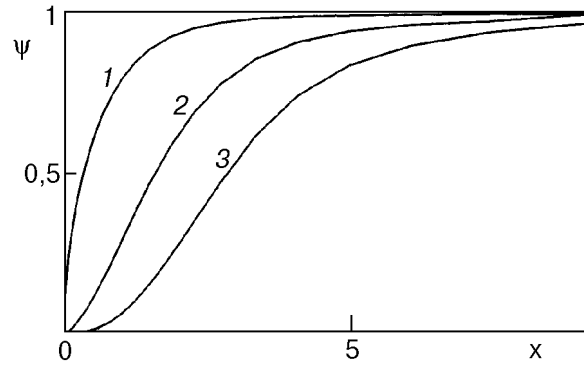


Рис. 3. Зависимость  $\psi$  от  $x = r/\Delta(T)$  при различных значениях топологического параметра  $v$ . Кривые 1, 2, 3 отвечают  $v = 1/2, 3/2, 5/2$  соответственно.

отличаются довольно сильно, при некотором значении  $R \approx \tau^{-1/2}\Delta_0$  дисклинация с  $v = 3/2$  может стать более выгодной, чем с  $v = 1/2$ . Однако для макроскопических образцов АФМ это может произойти только в непосредственной близости от точки Нееля, и далее мы будем обсуждать только случай  $v = 1/2$ .

#### 4. О возможности феноменологического описания дисклинаций при низких температурах

Таким образом, как в дискретной, так и в континуальной моделях присутствует логарифмическая зависимость энергии дисклинаций от размеров образца, а формула континуальной теории  $\phi = \chi/2$  хорошо выполняется для дискретной теории. Обсудим возможность построения такой версии континуальной теории, которая могла бы описать хотя бы полуколичественно свойства дисклинаций при низких температурах.

Вдали от кора дисклинации величина градиента  $l$  мала,  $\Delta_0(dl/dr) \sim (\Delta_0/r)^3$  и континуальной моделью можно пользоваться и при  $\Delta_0 \leq a$ . Вблизи кора дисклинации ситуация заведомо хуже, но сопоставление данных анализа внеплоскостного магнитного вихря в дискретной и континуальной моделях показало [8], что даже при  $\Delta_0 \sim a$  данные этих двух подходов неплохо согласуются друг с другом. Поэтому можно надеяться, что условие малости градиента вектора  $\mathbf{l}$  не является очень критичным.

Другая проблема связана с тем, что искомая континуальная модель должна содержать сокращение длины вектора  $\mathbf{l}$  до нуля в центре дисклинации. Обычно при построении низкотемпературной феноменологии АФМ вводят две подрешетки со спинами  $\mathbf{S}^{(1)}$  и  $\mathbf{S}^{(2)}$  и нормированные векторы намагниченности

$\mathbf{m} = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)})/2S$  и антиферромагнетизма  $\mathbf{l} = (\mathbf{S}^{(1)} - \mathbf{S}^{(2)})/2S$ , которые в силу соотношений  $|\mathbf{S}^{(1)}| = |\mathbf{S}^{(2)}| = S$  связаны условиями  $\mathbf{l}^2 + \mathbf{m}^2 = 1$ ,  $(\mathbf{m}\mathbf{l}) = 0$  [2,3]. Для АФМ с квадратной решеткой подрешетки выбираются так, что они переходят друг в друга путем элементарной трансляции на векторы  $a\mathbf{e}_x$  или  $a\mathbf{e}_y$  вдоль осей  $x$  или  $y$ . При неколлинеарной ориентации спинов вычисленное таким образом значение  $|\mathbf{l}|$  меньше единицы. Но легко видеть, что для построенной выше спиновой конфигурации, описывающей дисклинацию, не очень далеко от центра дисклинации значение  $|\mathbf{l}|$  будет зависеть от того, каким образом мы выберем этот вектор трансляций. При этом координатная зависимость  $|\mathbf{l}|$  получается анизотропной, величина  $1 - |\mathbf{l}|$  вдоль некоторого направления в решетке обращается в нуль. Более того, при использовании таких альтернативных определений эти направления различаются.

То, что в распределении  $\mathbf{l}$  возникает анизотропия с осью второго порядка, не вызывает удивления. При таком определении вектора  $\mathbf{l}$  симметрия магнитной ячейки, представляющей собой прямоугольник со сторонами  $a$  и  $2a$ , ниже, чем кристаллохимической. В принципе, это не создает проблем, и при таком определении  $\mathbf{l}$  можно описывать дисклинации в терминах анизотропных решений соответствующих уравнений для вектора  $\mathbf{l}$ . Одновременный поворот магнитной ячейки и функции  $l(\mathbf{r})$  на  $90^\circ$  восстанавливает исходную симметрию решения. Однако для наших целей более удобно ввести такую модель, в которой дисклинация описывалась бы симметричными решениями типа  $l = l(r)$ ,  $\theta = \pi/2$ ,  $\varphi = \chi/2$ , рассмотренными в предыдущем разделе.

Обсудим варианты определения вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$ . В соответствии с подходом работы [14], этот вектор представляет собой дипольный момент микроскопической спиновой плотности, вычисленный в пределах магнитной элементарной ячейки\*. Выберем эту ячейку в виде квадрата со стороной равной  $\sqrt{2}a$  и с центром в точке  $\mathbf{i}$ , в которой расположен атом,

относящийся к первой магнитной подрешетке (разбиение кристалла с дислокацией на подрешетки обсуждалось в начале предыдущего раздела). Определим вектор антиферромагнетизма  $\mathbf{l}_i$  в соответствии с формулой

$$\mathbf{l}_i = \frac{1}{2S} \left( \mathbf{S}^{(i)} - \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{a}} \mathbf{S}^{(i+\mathbf{a})} \right), \quad (11)$$

где суммирование проводится по четырем векторам элементарных трансляций  $\pm a\mathbf{e}_x$  и  $\pm a\mathbf{e}_y$ . Равновесное значение  $|\mathbf{l}| = 1$ . Можно сказать, что такое определение вытекает из записанного выше анизотропного путем некоторого усреднения по ориентациям магнитной ячейки, а также по направлениям спинов в данной подрешетке.

Поскольку трансформационные свойства вектора антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  при таком определении совпадают со стандартными, феноменологическая энергия АФМ, записанная в виде функционала вектора  $\mathbf{l}$ , должна тоже определяться формулой (7) с другими, вообще говоря, численными значениями параметров\*\*. Соответственно не изменится общая структура решения и вид уравнения (8) для функции  $l(r)$ . Поскольку нас интересует только полуколичественное описание решения, для функции  $F(l^2)$  можно использовать разложение Ландау, приняв в нем  $\tau = 1$ . Тогда функция  $l(r)$  описывается построенным выше решением универсального уравнения (9),  $l(r) = \psi(r/\Delta_0)$ , а энергия дисклинации с  $\nu = 1/2$  определяется формулой

$$E = (\pi A/4) \ln(5,5R/\Delta_0). \quad (12)$$

В это выражение входят параметры  $A$  и  $\Delta_0$ . Величину  $A$  можно определить из микроскопических выражений (1) и (11), но проще воспользоваться совпадением логарифмических асимптотик энергии в разных подходах. Сравнивая (6) и (12), получаем, что  $A = JS^2$ . Что касается параметра  $\Delta_0$ , то наиболее последовательно определять его значение путем

\* Формально это объясняет причину неоднозначности определения  $\mathbf{l}$ . Известно, что дипольный момент системы зарядов определен однозначно и не зависит от выбора начала отсчета, если суммарный заряд системы равен нулю. В нашем случае это соответствует полной компенсации спинов в пределах магнитной ячейки, что выполняется только приближенно. С другой стороны, введенное нами определение вектора  $\mathbf{l}$  предпочтительнее, так как при более симметричном выборе магнитной ячейки ее суммарный спин меньше, чем при стандартном.

\*\* Из этих же соображений следует, что лагранжиан этой модели АФМ записывается через вектор антиферромагнетизма  $\mathbf{l}$  так же, как и для двухподрешеточной модели, и динамическое слагаемое имеет стандартный вид  $(A/c^2)(\partial\mathbf{l}/\partial t)^2$ , где  $c$  — фазовая скорость магнонов.



сравнения функции  $l(r)$  в континуальной теории со значениями  $l$  в дискретных точках, полученными в решеточной модели. Используем асимптотику континуального решения при больших  $r$ , в соответствии с которой  $1 - l = \Delta_0^2/8r^2$ . Вычисляя эту же величину по формуле (11) с использованием асимптотики  $\varphi = \chi/2$ , нетрудно получить  $l(r) \approx 1 - a^2/32r^2$ . Сравнивая эти выражения, находим, что  $\Delta_0 = a/2$ .

Это соотношение не обеспечивает малости градиентов вблизи кора, но оно получено только из асимптотических свойств распределений. Оно не зависит от многих деталей континуальной или дискретной модели, в частности от атомной структуры кора дислокации, а также от вида функции  $F(l^2)$ . Действительно, вдали от кора, когда  $l \approx 1$ , в асимптотику входит только  $d^2F(l^2)/d(l^2)^2$  при  $l = 1$  и при любом виде функции  $F(l^2)$  асимптотику можно получить заменой  $\Delta_0^2$  на  $1/[d^2F(l^2)/d(l^2)^2]$ . Поэтому с учетом такой замены эту формулу можно считать справедливой для всех континуальных и дискретных моделей.

Адекватность полного феноменологического анализа дисклинации, включая описание области кора, можно проверить путем сравнения выражений для энергии, которые в отличие от асимптотических формул сильно зависят от деталей атомного строения кора. Как отмечалось выше, в дискретной модели  $E = (\pi A/4) \ln(CR/a)$  и значения  $C$  сильно различаются для различных дискретных моделей:  $C = 3,15$  и  $11,75$  с пятиугольником и треугольником обменно связанных атомов в центре соответственно.

Для континуальной модели в формулу для энергии входит параметр  $\Delta_0$ . Если рассматривать эту величину как подгоночный параметр и сравнивать эту зависимость с формулой для энергии дисклинации в дискретной модели, то можно также найти связь между параметром  $\Delta_0$  и постоянной решетки. Сопоставив две формулы для энергии, найдем, что для модели с треугольником центральных атомов  $\Delta_0 = 0,47a$ , что очень хорошо согласуется с результатом  $\Delta_0 = 0,5a$  дисклинации, расчета вклада дисклинаций в полученным из анализа асимптотик. Таким образом, для двух конкретных моделей — дискретной со строением кора дислокации, изображенным на рис. 1,б и континуальной с функцией  $F(l^2)$  в виде разложения Ландау — мы получили удивительно хорошее (учитывая полуквантовый характер теории) согласие результатов альтернативных подходов к анализу дисклинации в АФМ (как ее кора, так и асимптотик).

Этот результат можно считать в некотором смысле случайным. Для модели с пятиугольником центральных атомов сравнение энергий дает  $\Delta_0 = 1,75a$  и отличие весьма существенное. Происхождение этого отличия понятно: дело в том, что коэффициент  $C$  в энергии определяется прежде всего областью кора дисклинации. Ясно, что для различных моделей расположения атомов эти константы не могут быть одинаковыми. Различие должно быть связано хотя бы с тем, что в области ядра дислокации плотность атомов не совпадает с равновесной. В этом и в других случаях (например, при описании атомных моделей с различными значениями обменных интегралов в коре дислокации и вдали от него) адекватным может быть обобщение континуальной модели (6) путем добавления в энергию слагаемого вида  $l^2U(r)$ , где  $U(r)$  — некоторая функция, локализованная на расстоянии порядка размера ядра дислокации. Выбором интенсивности этого дополнительного слагаемого можно «регулировать» вклад области кора в энергию дисклинации, не меняя при этом асимптотического поведения вдали от кора, и построить континуальную теорию для любой дискретной модели. Детальное обсуждение таких «неоднородных» моделей выходит за рамки настоящей работы. Для нас существенно то, что можно указать такую решеточную модель дислокации, которая является достаточно простой и разумной физически при том, что в этой модели описание дисклинации на основе решения вариационных уравнения простой континуальной теории (6) хорошо согласуется с точным дискретным подходом. Поэтому можно надеяться, что предложенная континуальная модель, основанная на сокращении длины вектора  $\mathbf{l}$  (или ее неоднородные обобщения), достаточно верна и может быть использована для выяснения других, более сложных вопросов теории дисклинаций в АФМ, например анализа магнанных мод, локализованных на затухание магнонов, рассеяние нейтронов или света.

Мы благодарны В. Г. Барьяхтару, А. С. Ковалеву и А. Л. Сукстанскому за полезные обсуждения работы. Работа частично поддержана грантом 2.4/27 Фонда фундаментальных исследований Украины.

1. Н.-J. Mikeska and M. Steiner, *Adv. Phys.* **40**, 191 (1991).
2. Б. А. Иванов, А. К. Колежук, *ФНТ* **21**, 355 (1995).

3. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
4. Р. С. Гехт, *УФН* **59**, 261 (1989).
5. J. N. Reimers and A. J. Berlinsky, *Phys. Rev.* **B48**, 9539 (1993).
6. И. Е. Дзялошинский, *Письма в ЖЭТФ* **25**, 110 (1977).
7. А. С. Ковалев, А. М. Косевич, *ФНТ* **3**, 259 (1977).
8. В. А. Иванов, А. К. Kolezhuk, and G. M. Wysin, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 511 (1996).
9. G. M. Wysin, *Phys. Rev.* **B49**, 8780 (1995).
10. А. С. Ковалев, *ФНТ* **20**, 1034 (1994).
11. А. М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова думка, Киев (1978).
12. E. G. Galkina, В. А. Иванов, and V. A. Stephanovich, *JMMM* **118**, 373 (1993).
13. Л. П. Питаевский, *ЖЭТФ* **40**, 646 (1957).
14. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, *УФН* **130**, 39 (1980).

## Spin structure of antiferromagnetic disclination

В. А. Иванов, В. Е. Kireev, and V. P. Voronov

The spin structure of magnetic disclination, i.e., spin inhomogeneity appearing in an antiferromagnetic in the presence of a dislocation, is analyzed on the basis of the discrete model and specially developed generalized continuum theory introducing the antiferromagnetism vector  $\mathbf{l}$  locally and allowing for possible changes of the vector along its length. A singularities-free solution has been plotted for the disclination, in which the modulus of the antiferromagnetism vector is zero at the center of the disclination. Within the discrete model the disclination energy is much dependent on the spin arrangement around the core and on the character of spin interaction. A specific model of spin arrangement is proposed, for which consistent numerical analysis data are obtained within the discrete and continuum models. It is shown that a planar disclination is stable against spin escape from the easy plane.