

К теории низкотемпературных свойств спиновых систем с магнитной анизотропией

О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, Ю. В. Василевская

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4
E-mail: vladimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua
oleg.b.zaslavskii@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 28 июня 1997 г.

Рассмотрено поведение легкоосных парамагнетиков в поперечном магнитном поле в зависимости от температуры. Показано, что при низких температурах восприимчивость как функция поля обладает максимумом при всех значениях спина S . При повышении температуры от нуля этот максимум сначала не размывается, а заостряется, причем его положение меняется немонотонно. Если спин $S < 3$, то при некоторой температуре профиль восприимчивости становится двугорбым; для $S \geq 3$ получается максимум с уплощенной вершиной. Аналогичные явления характерны и для двухосных парамагнетиков. Энергетический спектр системы совпадает с $2S + 1$ низколежащими уровнями энергии для частицы, движущейся в потенциальном поле простого вида, которое для достаточно малых магнитных полей имеет вид двойной ямы. Это дает возможность вычислить скорость туннелирования методами квантовой механики.

Розглянуто поведінку легкоосних парамагнетиків у поперечному магнітному полі в залежності від температури. Показано, що при низьких температурах сприйнятливості як функція поля має максимум при всіх значеннях спіна S . При підвищенні температури від нуля цей максимум спочатку не розмивається, а загострюється, до того ж його положення змінюється немонотонно. Якщо спин $S < 3$, то при деякій температурі профіль сприйнятливості стає двогорбим; для $S \geq 3$ з'являється максимум з плоскою вершиною. Аналогічні явища характерні і для двовісних парамагнетиків. Енергетичний спектр системи збігається з $2S + 1$ низькорозташованими рівнями енергії для частинки, яка рухається в потенціальному полі простого виду, що має для досить невеликих магнітних полів вигляд подвійної ями. Це дає можливість обчислити швидкість тунелювання методами квантової механіки.

PACS: 75.10.-b, 75.10.Dg, 75.30.Gw

1. Введение

В начале 80-х годов совместно с В. М. Цукерником нами была выполнена работа по изучению квантовых свойств одноосных парамагнетиков [1]. До этого подобные системы рассматривались на основе полуклассических методов, что приводило к противоречивым результатам. Тогда же удалось не только решить поставленную задачу, но и выработать для исследования более общих спиновых систем ряд оригинальных приемов, которые были развиты в наших последующих работах [2]. Другим неожиданным важным побочным результатом было обнаружение новых классов потенциальных моделей с точными решениями уравнения Шредингера [3–5].

В обзоре 1992 года [2] нами были подытожены усилия десятилетних исследований. С тех пор появились новые результаты и новые направления. Сюда нужно отнести в первую очередь расширение множества квазиточнорешаемых моделей [3], а также обнаружение подобных двумерных моделей и обобщение на многомерные случаи [6–7].

В данном сообщении мы приводим ряд новых результатов, полученных при исследовании анизотропных парамагнетиков. Причем предметом обсуждения будут только магнитная восприимчивость и спиновое туннелирование. Для определенности ограничимся случаем спиновых систем с гамильтонианом

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (1)$$

описывающим так называемый двухосный парамагнетик с константами анизотропии α , $\beta \geq 0$ в перпендикулярном магнитном поле, пропорциональном B (S_j — операторы проекций спина).

2. Магнитная восприимчивость одно- и двухосных парамагнетиков

Начнем с более детального исследования влияния температуры на восприимчивость одноосного парамагнетика ($\alpha = 0$) при различных значениях спина S (без ограничения общности будем полагать также $\beta = 1$) Мы основываемся на результатах исходной работы [1], в которой обсуждаются конкретные физические объекты и размерные величины, а также введены соответствующие безразмерные характеристики, которыми и будем пользоваться в данном сообщении. В этой работе (см. также [2]) подробно исследовано поведение магнитной восприимчивости одноосного парамагнетика в основном состоянии, т.е. при температуре $T = 0$. Результат состоял в том, что магнитная восприимчивость $\chi_0 = -2\partial^2 E_0 / \partial B^2$ основного состояния в зависимости от магнитного поля в случае спина $S \geq 2$ имеет характерный ход: с ростом магнитного поля B постепенное увеличение сменяется резким возрастанием с образованием четко локализованного, ярко выраженного возвышения в виде «горба», после чего наступает быстрый спад к малым значениям в области «критического» магнитного поля $B_0 = 2S + 1$ (см. рис. 1, где для сравнения показана также восприимчивость первого возбужденного состояния).

В той же работе было дано наглядное объяснение такого явления на основе специально разработанного метода эффективного потенциала,

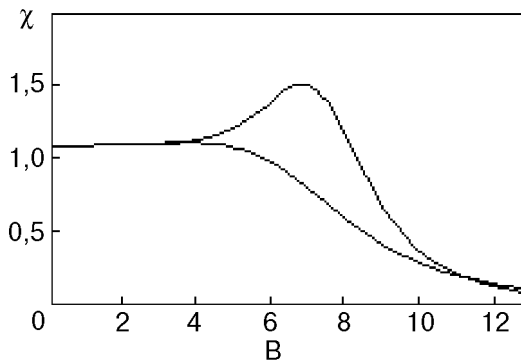


Рис. 1. Типичная зависимость восприимчивости одноосного парамагнетика от магнитного поля в основном состоянии (верхняя кривая) и первом возбужденном (нижняя кривая). Представлен случай $S = 6$.

который состоит в следующем. Поскольку спин представляет собой квантовомеханический объект существенно дискретной природы, уравнения, решение которых описывает энергетический спектр спиновых систем, имеют матричную форму. Это затрудняет анализ свойств системы стандартными квантовомеханическими методами. Оказывается, однако, что для достаточно широкого класса спиновых систем можно ввести строгое потенциальное описание, так что энергетический спектр спиновой системы совпадает с некоторыми уровнями энергии для частицы, движущейся в потенциальном поле достаточно простой формы. Такое точное спин-координатное соответствие служит также основой развития различных приближенных методов описания спиновых систем, например теории возмущений и квазиклассического приближения. Особенно важно, что для соответствующей координатной системы это приводит к нахождению новых точных решений уравнения Шредингера [3–5].

Предложенный нами подход заключается в том, что для гамильтонианов, построенных из спиновых операторов, при решении задачи об их собственных значениях и собственных векторах используется представление спиновых когерентных состояний [8]. В получающемся координатном представлении такой гамильтониан становится дифференциальным оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией. Найденные потенциалы для простых спиновых систем либо имеют форму нелокализованных ям, либо оказываются периодическими. Во всех случаях имеются как симметричные, так и несимметричные разнообразные многопараметрические потенциальные модели.

Так, если мы решаем задачу нахождения стационарных состояний легкоосного парамагнетика в перпендикулярном магнитном поле, т.е. системы с гамильтонианом $H = -S_y^2 - BS_x$ с помощью указанного метода, то приходим к стандартному одномерному уравнению Шредингера $(d^2\psi)/(dx^2) + [E - U(x)]\psi = 0$ для псевдочастицы с квадратичным законом дисперсии (спинона), движущейся в эффективном потенциальном поле, построенном из гиперболических функций

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2 x - B(S + \frac{1}{2}) \operatorname{ch} x, \quad (2)$$

где x можно считать некоторой безразмерной координатой. При этом собственные значения энергии E спиновой системы совпадают с

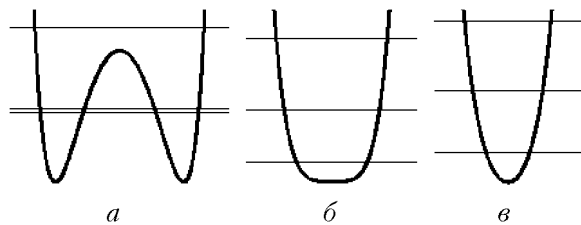


Рис. 2. Характерные формы эффективного потенциала одноосного парамагнетика.

нижними $2S + 1$ уровнями энергии спинона в потенциальном поле (2).

Оказалось, что энергетический спектр одноосного парамагнетика имеет характерную «веерную» структуру, соответствующую деформациям эффективного потенциала (рис. 2): от двукратного вырождения при $B = 0$ с попарно близкими уровнями при $B \ll B_0$ (туннельное расщепление в двойной потенциальной яме — рис. 2,а) к типичному для четверного осциллятора $U \sim x^4$ расположению энергий при $B = B_0$ (рис. 2,б) и далее при $B \gg B_0$ к эквидистантной структуре спектра гармонического осциллятора $U \sim x^2$ (рис. 2,в). При этом самая существенная перестройка энергетического спектра приходится как раз на область «предкритических» полей $B \leq B_0$, где и расположена особенность восприимчивости в виде «горба».

Представляется интересным изучить влияние температуры на поведение восприимчивости. Оказывается, что вместо ожидаемого размытия особенности появляется любопытная трансформация «горба», грубо говоря, сводящаяся к тому, что он вначале даже «заостряется» и увеличивается и лишь потом постепенно начинает размываться, исчезая при некоторой критической температуре $T_c \sim S$. Кроме того, при не очень больших значениях спина ($S < 3$) на начальной стадии образуется

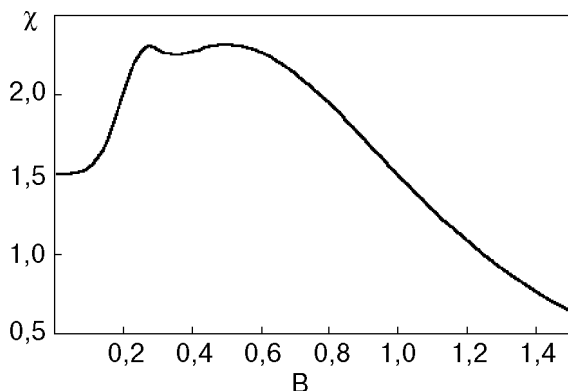


Рис. 3. Двугорбый профиль магнитной восприимчивости ($S = 3/2$, $T = 0,0028$).

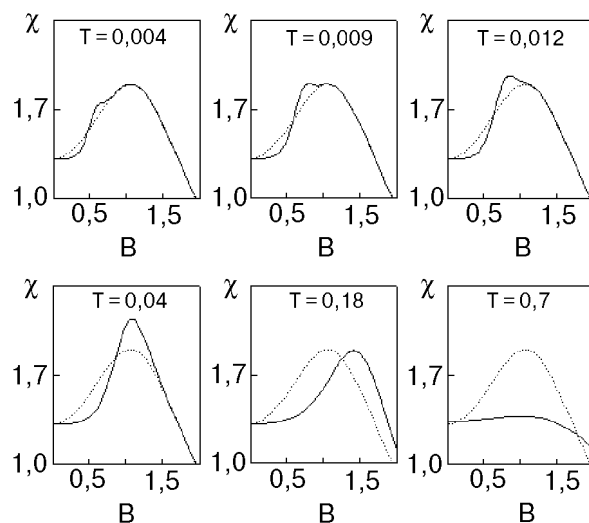


Рис. 4. Некоторые стадии низкотемпературных преобразований восприимчивости ($S = 2$).

двугорбый профиль (см. рис. 3), а при больших значениях спина ($S \geq 3$) получается уплощенная вершина горба (рудимент раздвоения). Положение максимума изменяется немонотонно: вначале он смещается в область больших значений магнитного поля, а затем совершает «обратный ход» до $B = 0$ при T_c .

Некоторые типичные стадии этих метаморфоз восприимчивости представлены на рис. 4 наряду с эталонной восприимчивостью основного состояния, обозначенной пунктиром.

Отмеченные закономерности определяются структурой энергетического спектра одноосного парамагнетика в той области магнитных полей, где расположен горб: близкое расположение основного уровня энергии и первого возбужденного при значительном удалении следующих возбужденных уровней. Так, для $S = 3$ при $B_{\max} = 2,34$ щель $E_1 - E_0 = 0,16$, тогда как $E_2 - E_1 = 3,34$.

Таким образом, в области температур $0 < T < T_c$ рассматриваемая спиновая система ведет себя как двухуровневая. Магнитную восприимчивость χ в двухуровневой аппроксимации можно записать, выделив температурную поправку $\Delta\chi$:

$$\chi = \chi_0 + \Delta\chi \quad (3)$$

Учитывая, что уровни энергии зависят от магнитного поля, после несложных преобразований статистической суммы получаем следующую формулу для восприимчивости, содержащую основной вклад в виде восприимчивости основного состояния χ_0 и двух конкурирующих температурных поправочных членов:

$$\chi = \chi_0 + \frac{(\Delta')^2}{2T \operatorname{ch}^2(\Delta/2T)} - \frac{2\Delta''}{1 + \exp(\Delta/T)}, \quad (4)$$

где $\Delta \equiv E_1 - E_0$, а штрихи обозначают производные по B .

При $T \rightarrow 0$, как и должно быть, $\chi \rightarrow \chi_0$. При любом конечном T в области малых B , где $\Delta \ll T$, имеем $\chi = (\chi_1 + \chi_0)/2$ (χ_1 — восприимчивость первого возбужденного состояния), т.е. основной вклад дает второй отрицательный поправочный член, а с возрастанием B возможно преобладание первого положительного поправочного члена, так что $\chi > \chi_0$. Двухуровневая аппроксимация (4) в полной мере описывает поведение восприимчивости в наиболее интересной области низких температур $0 < T < T_c$.

Далее можно воспользоваться степенным по магнитному полю B приближением для щели Δ между основным уровнем энергии и первым возбужденным, которое было получено в работе [2]:

$$\Delta \approx cB^{2S}, \quad c = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!}, \quad (5)$$

что дает следующую формулу для температурной поправки (3) на основе (4):

$$\Delta\chi = T^{(S-1)/S} f_S \left(\frac{cB^{2S}}{T} \right) \quad (6)$$

с универсальной функцией

$$f_S(x) = 2S(2S-1)c^{1/S} \frac{x^{(S-1)/S}}{\operatorname{ch}(x/2)} \times \left[\frac{Sx}{(2S-1)\operatorname{ch}(x/2)} - \exp(-x/2) \right]. \quad (7)$$

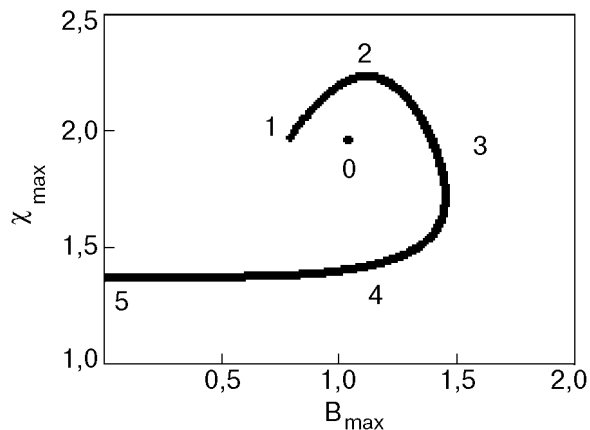


Рис. 5. Типичный виток спирали, изображающий положение и величину наибольшего максимума восприимчивости в области низких температур $0 < T < T_c$ для $S = 2$.

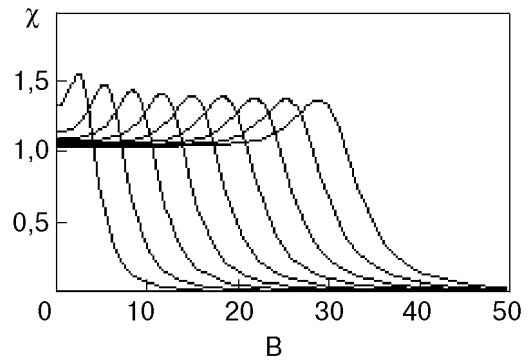


Рис. 6. Графики зависимости восприимчивости двухосного парамагнетика от магнитного поля для четных S от 4 до 20.

Сравнение такого приближения для температурной поправки к восприимчивости (6) и (7) с результатами, основанными на точных формулах для E_0 и E_1 (а также χ_0) в случае $S = 3/2; 2; 5/2; 3; 7/2$, показывает, что этим приближением достигается весьма хорошая точность в наиболее интересной области температур, где наблюдаются описанные выше трансформации профиля магнитной восприимчивости (причем для всех магнитных полей B).

Если по осям координат откладывать положение B_{\max} и величину наибольшего максимума магнитной восприимчивости χ_{\max} , то при изменении температуры $0 \leq T \leq T_c$ получается кривая в виде витка спирали с отдельной точкой внутри, наглядно иллюстрирующая отмеченные выше «аномалии» поведения максимума восприимчивости — стадии его температурного «дрейфа» (см. рис. 5). В результате на шкале температур можно выделить следующие характерные области и опорные точки по отношению к превращениям профиля магнитной восприимчивости: $T_0 = 0$ — обычный односторонний профиль (эталонный); $T_0 \leq T \leq T_1$ — небольшие деформации левого склона горба с появлением второго (левого) максимума; T_1 — двугорбый профиль с одинаковыми значениями максимумов; $T_1 < T < T_2$ — нарастание левого горба, превосходящего эталонный, с «заострением» и перемещением его вправо; T_2 — максимальная высота горба с положением примерно на месте эталонного; $T_2 < T < T_3$ — дальнейшее смещение максимума вправо с постепенным его уменьшением; T_3 — высота уменьшается до эталонной с максимальным смещением вправо; $T_3 < T < T_4$ — перемена направления смещения (влево) и размытие; T_4 — очень размытый максимум на месте эталонного; $T_4 < T < T_5$ — слабо различимый максимум продолжает смещаться влево; $T_5 \equiv T_c$ — критическая

температура, при которой совсем слабо выраженный максимум достигает точки $B = 0$ (кривая восприимчивости плавно спадает без особенностей); $T > T_c$ — уменьшение χ при всех B за счет подключения остальных возбужденных уровней энергии (выход за рамки двухуровневой аппроксимации). На рис. 5 цифрами у спирали показаны основные температурные опорные точки.

С ростом S спиралевидная кривая смещается в область больших значений B , но все качественные особенности метаморфоз сохраняются, кроме образования двугорбого профиля.

Заметим, что все расчеты велись (помимо указанных двухуровневой аппроксимации и степенного приближения) на основе точных явных формул для уровней энергии в случае $S < 4$, а в случае $S \geq 4$ — на основе точных алгебраических уравнений для собственных значений гамильтониана (1). Кроме того, аналитические и численные методы взаимно контролировались и подкреплялись графическими построениями.

Другой цикл исследований посвящен изучению поведения магнитной восприимчивости двухосных парамагнетиков. Обнаружено, что все отмеченные выше особенности восприимчивости сохраняются и в этих спиновых системах. Так, на рис. 6 приведена серия типичных профилей восприимчивости для разных значений спина S в случае равных констант анизотропии $\alpha = \beta$ при $T = 0$.

Кроме того, отдельно изучена общая зависимость различных эффектов от величины отношения констант анизотропии.

Таким образом, обнаруженные ранее особенности магнитной восприимчивости анизотропных парамагнетиков оказываются весьма устойчивыми по отношению к влиянию различных факторов, обогащаясь любопытными дополнительными деталями, как при возрастании температуры T и спина S , так и при различных соотношениях между константами анизотропии α/β .

Наконец, в случае произвольно направленного магнитного поля необходим учет тензорного характера магнитной восприимчивости, т.е. детальное изучение каждой ее компоненты. Так, в одноосном случае в силу свойств симметрии имеется фактически три величины: χ_{xx} , χ_{xy} и χ_{yy} , которые следует рассматривать в зависимости от составляющих магнитного поля B_x и B_y .

3. Квантовое туннелирование в спиновых системах

В последнее десятилетие весьма интенсивно исследовались туннельные эффекты в различных областях физики твердого тела (см. обзор [9]). При этом большая часть таких исследований исходила из картины двухуровневой системы, взаимодействующей со своим окружением, которое выполняло роль термостата. Возможность приближенно заменить реальную квантовую систему с весьма сложным энергетическим спектром на двухуровневую, отбросив вклад лежащих выше уровней, означает иначе введение эффективного спина $S = 1/2$. В нашей работе, однако, мы хотели бы указать на целую область в физике туннельных явлений, в которой появление спина служит не вспомогательным средством, а отражает реальную физику задачи — туннелирование в спиновых системах (в качестве конкретного примера можно указать туннелирование в малых ферромагнитных частицах [10]). Причем наиболее интересным здесь является случай не малых, а больших спинов $S \gg 1$.

Несмотря на то что первые указания на экспериментальные проявления спинового туннелирования фактически содержались еще в обзоре [11], теоретический аппарат для изучения рассматриваемого явления был развит только в середине 80-х годов. Это не случайно. Явление туннелирования для частицы, движущейся в потенциальной яме, было понято давно и вошло в учебники по квантовой механике. В то же время спин является существенно дискретной, чисто квантовой переменной и сам по себе столь наглядного представления не допускает. Тем более замечательно, что это оказалось возможным для спиновой системы в целом, описываемой гамильтонианом, квадратичным или квадратично-линейным по компонентам спина. Такое спин-координатное соответствие, отмеченное в предыдущих разделах статьи, позволяет перевести рассматриваемую задачу на язык обычной квантовой механики и воспользоваться уже разработанными методами — такими, как инстантонное исчисление, квазиклассическое приближение и т.д.

Рассмотрим сначала одноосный случай с анизотропией типа легкая ось, обсуждавшийся выше в другом контексте. Поскольку энергетические уровни спиновой системы совпадают, как было объяснено, с $2S + 1$ низколежащими уровнями для частицы, движущейся в потенциальном поле вида (2), то

совпадают и величины туннельного расщепления $\Delta = E_1 - E_0$ энергии основного состояния. Если интересоваться вычислением этой величины с экспоненциальной точностью, то ответ может быть найден практически сразу. Как известно [12], эта величина определяется множителем $\exp(-W)$, где W — величина евклидова действия на траектории между вырожденными минимумами:

$$W = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m(U - U_-)},$$

где m — эффективная масса частицы ($\hbar = 1$); $U_- = U_+$ — значение потенциала в точке минимума. Таким образом, если не интересоваться предэкспонентой, можно не находить уравнение инстантонной траектории в явном виде. Однако это необходимо для вычисления предэкспоненты:

$$\Delta = (\omega/\pi)^{1/2} A \exp(-W).$$

Здесь ω — частота, отвечающая малым колебаниям вблизи точки минимума, а константа A определяется из соотношения

$$\tau = \int_{x_m}^x dx \left[\frac{m}{2(U - U_+)} \right]^{1/2},$$

$$x(\tau) \cong x_+ - \frac{A}{2\omega\sqrt{m}} \exp(-\omega\tau), \quad \tau \rightarrow \infty,$$

где $x_m = 0$ соответствует средней точке потенциала между двумя минимумами; τ — евклидово время. Для рассматриваемого одноосного случая с потенциалом (1) и соответствующими безразмерными величинами инстантонная траектория находится в явном виде:

$$\text{th} \frac{x}{2} = \left(\frac{1 - B/B_0}{1 + B/B_0} \right)^{1/2} \text{th} \frac{\omega\tau}{2}, \quad \omega = \sqrt{1 - (B/B_0)^2}.$$

Используя предыдущие формулы, находим

$$\Delta = \frac{8(S + 1/2)^{3/2} \omega^{5/2} (1 - \omega^2)^S}{\sqrt{\pi} (1 + \omega)^{2S+1}} \exp[(2S + 1)\omega]. \quad (8)$$

В случае $B \ll B_0$ формула (8) при $S \gg 1$ дает результат степенного приближения для энергетической щели (6).

Подобным же образом может быть рассмотрен и двухосный случай. С общей точки зрения он

интересен тем, что энергетический спектр спинового эффективного потенциала является зонным [5]. Пусть сначала $B = 0$, а S является целым (при полуцелых значениях спина вырождение не снимается). Тогда спиновые уровни соответствуют краям слившихся зон, а расщепление основного уровня равно ширине зоны. Если же $B \sim S \gg 1$, то ширины энергетических зон, которым принадлежат E_0 и E_1 , оказываются много меньше, чем расстояния между уровнями, так что расщепление можно вычислить, игнорируя периодический характер потенциала и зонную структуру (подробности см. в обзоре [2], там же рассмотрено туннелирование в особых случаях, когда уровни энергии находятся вблизи максимума потенциального барьера).

Кроме того, в ряде случаев многочастичная система приближенно сводится к одночастичной — примером является гейзенберговский магнетик со слабой анизотропией [2], и для туннельного расщепления применимы формулы, полученные для парамагнетиков.

Наконец, при $B \ll B_0$ можно воспользоваться теорией возмущений. В данном случае интересно то, что вырождение снимается в $2S$ -м порядке.

Заключение

Таким образом, для изучения как низкотемпературного поведения восприимчивости анизотропных спиновых систем, так и туннельных переходов чрезвычайно результативным и наглядным оказался метод эффективного потенциала, предложенный В. М. Цукерником и получивший затем дальнейшее развитие.

Подчеркнем, что, в то время как классический спин параметризуется двумя переменными, в методе эффективного потенциала система является одномерной.

На первый взгляд, спиновые системы с гамильтонианами типа (1) казались достаточно элементарными, однако дальнейшее их изучение показало, что из задачи, предложенной В. М. Цукерником в начале 80-х годов, родилось фактически новое направление. Наша статья, как мы надеемся, еще одно тому подтверждение.

Авторы выражают глубокую благодарность и посвящают данную работу замечательному ученому и педагогу, чуткому и обаятельному человеку Виктору Моисеевичу Цукернику, вместе с которым были сделаны наши первые шаги в разработке новых методов теории спиновых систем.

O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov,
and Yu. V. Vasilevskaya

1. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, В. М. Цукерник, *ФНТ* **9**, 511 (1983).
2. V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rept.* **216**, 179 (1992).
3. В. В. Ульянов, О. Б. Заславский, Ю. В. Василевская, *ФНТ* **23**, 110 (1997).
4. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ЖЭТФ* **87**, 1724 (1984).
5. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ТМФ* **71**, 260 (1987).
6. A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* **118**, 467 (1988); *Contemp. Math.* **160**, 263 (1994); А. Г. Ушверидзе, *ЭЧАЯ* **20**, 1185 (1989).
7. О. В. Zaslavskii, *Phys. Lett.* **A190**, 373 (1994); *J. Phys.* **A27**, L447 (1994).
8. А. М. Переломов, *Обобщенные когерентные состояния и их применения*, Наука, Москва (1987).
9. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
10. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988); *Phys. Rev.* **B37**, 9455 (1988); A. Caldeira and K. Furuya, *J. Phys.* **C21**, 1227 (1988).
11. C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).
12. S. Coleman, *The Uses of Instantons*, in: *The Whys of Subnuclear Physics*, Plenum, New York (1979).

The temperature behaviour of easy-axis paramagnets in a transverse magnetic field is considered. It is shown that for low temperature the susceptibility as a function of field features a maximum for all values of spin S . When the temperature is increased this maximum at first sharpens (is not smoothed out), its position changing nonmonotonically. If $S < 3$ it becomes double-humped at some temperature; for $S \geq 3$ a maximum with a flat top is obtained. Similar phenomena occur also for two-axis paramagnets. The energy spectrum of the spin system coincides with $2S + 1$ low-lying levels for a particle moving in the potential of a rather simple form. It represents a double well for a magnetic field small enough. It enables one to calculate tunneling rates using methods of quantum mechanics.