

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

17-84-743

В.Лисы, В.К.Федянин

**ФЕНОМЕНОЛОГИЯ
ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА СОЛИТОНОВ
ДЛЯ SG-СИСТЕМ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ CsNiF_3**

1984

В экспериментах по изучению теплоемкости квазиодномерного ферромагнетика с анизотропией "Легкая плоскость", $CsNiF_3$, была найдена необычная зависимость магнитной теплоемкости от температуры и внешнего магнитного поля H в легкой плоскости^{/1,2/}. Оказалось, что теплоемкость C (при постоянном объеме) при $H = const$ нелинейно зависит от температуры T , увеличиваясь с ее ростом. Кривые теплоемкости $C(H)$ при $T = const$ обладают выраженным пиком, положение которого при увеличении T смещается в сторону больших H приблизительно линейно с T^2 . Такое поведение теплоемкости не удалось объяснить аномалиями, обусловленными примесями, так как для наблюдаемого эффекта требовалась бы относительно большая концентрация примесей с большими магнитными моментами, а зависимость C от T была бы линейной.

Авторы^{/1,2/} привлекли для объяснения экспериментов модель синус-Гордона (SG). Эта модель была предложена Микешкой^{/3/} для описания динамики спинов в "классическом" ферромагнетике $CsNiF_3$. Как известно, полностью интегрируемая модель SG обладает тремя видами мод - элементарных возбуждений: это кинки (антикинки), бризеры и нелинейные "фононы"^{/4/}. Первые два вида мод являются солитонами в строгом смысле. Естественно было попытаться интерпретировать различные статические и динамические свойства магнетика $CsNiF_3$ в терминах этих элементарных возбуждений. Уже в первой работе^{/3/} Микешка, основываясь на феноменологии идеального газа кинков, подсчитал параллельный динамический структурный фактор (ДСФ) рассеяния нейтронов на $CsNiF_3$. Последующие эксперименты подтвердили некоторые качественные предсказания^{/3/} относительно центрального пика в ДСФ. Однако дальнейшие экспериментальные результаты^{/5/} и теоретическая их интерпретация, в которой учитывался вклад кинков и бионов^{/15/}, указывали на ограниченность простой модели, предложенной в^{/3/}. В области низких температур, при которых обычно проводятся эксперименты на $CsNiF_3$, значительную роль могут играть квантовые эффекты^{/6/}. Нестабильность солитонов в $CsNiF_3$, приводящая к уходу спинов из легкой плоскости,



была обнаружена в^{/7/}. Некоторые характеристики ДСФ рассеяния нейтронов лучше, чем модель SG, объясняет линейная теория^{/8/}. Численные эксперименты также указывают на отличие SG модели от исходной гейзенберговской модели планарного ферромагнетика^{/9/}. Если даже считать, что математическая модель SG является адекватной физической модели (в определенной области экспериментальных параметров), интерпретация имеющихся экспериментов в терминах солитонных возмущений представляется неполной. В частности, как в экспериментах по рассеянию нейтронов^{/5/}, так и в экспериментах по изучению теплоемкости CsNiF₃^{/1,2/}, для интерпретации результатов использовались только кинки и фононы, а бризеры (бионы) не рассматривались.

В настоящей работе анализируются эксперименты по измерению теплоемкости CsNiF₃^{/1/} в терминах элементарных возмущений SG модели, кинков и бризеров. Отмечен ряд недостатков в попытке интерпретировать экспериментальные данные на языке солитонов, предпринятой в^{/1/}. На основе простейшего варианта феноменологии идеального газа учитывается вклад бризеров в теплоемкость магнетика CsNiF₃ в рамках модели SG.

2. Рассмотрим сначала вклад в теплоемкость кинковых возмущений. Гамильтониан для SG модели в привычных уже обозначениях^{/10/} имеет вид

$$\mathcal{H} = Aa_0 \sum_n \left[\frac{1}{2} \dot{\varphi}_n^2 + \frac{c_0^2}{2a_0^2} (\varphi_n - \varphi_{n+1})^2 + \omega_0^2 (1 - \cos \varphi_n) \right]. \quad (I)$$

φ_n здесь означает угол между направлением спина \vec{S}_n и магнитного поля \vec{H} в легкой плоскости. В континуальном пределе $\varphi_n \rightarrow \varphi(x, t)$ из (I) получается уравнение SG

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0, \quad (2)$$

с решением, отвечающим кинку (антикинку)

$$\cos \varphi(x, t) = 1 - 2 \operatorname{sech}^2 [d(x - vt - x_0) \gamma], \quad d = c_0 / \omega_0.$$

Здесь v — скорость кинка, x_0 — его начальное положение. Энергия и импульс кинка равны

$$E_K = E_K^0 \gamma, \quad p = E_K v c_0^{-2}, \quad E_K^0 = 8A\omega_0 c_0.$$

Нетрудно найти статистическую сумму для идеального газа кинков^{/12/}. Она строится из статистического интеграла для отдельного кинка

$$j_K(T) = h^{-1} \int_0^L dx_0 \int dp e^{-\beta E_K} = \frac{2LE_K^0}{hc_0} K_1(\beta E_K^0),$$

где L — длина системы, K_1 — модифицированная функция Бесселя. Все термодинамические характеристики газа кинков можно выразить через $j_K(T)$. Например, полная плотность кинков и антикинков дается формулой

$$n_K = \frac{4E_K^0}{hc_0} K_1(\beta E_K^0), \quad (3)$$

а теплоемкость на единицу длины определяется как

$$C_K = k\beta^2 \frac{\partial^2 n_K}{\partial \beta^2} = \frac{4k}{hc_0 \beta} (\beta E_K^0)^2 \left\{ K_0(\beta E_K^0) + \left(\beta E_K^0 + \frac{2}{\beta E_K^0} \right) K_1(\beta E_K^0) \right\}. \quad (4)$$

Феноменологическая теория для термодинамики идеального газа кинков, но обменивающихся степенями свободы с фононами, подробно изложена в^{/10/х/}. Вследствие взаимодействия с фононами выражение (3) модифицируется: появляется дополнительный фактор $\beta h \omega_0 / \pi$, кроме того, в^{/10/} вместо функции K_1 учитывается только первый член ее асимптотики при $\beta E_K^0 \gg 1$. Это приводит к плотности

$$\tilde{n}_K = \left(\frac{8\omega_0^2}{\pi c_0^2} \beta E_K^0 \right)^{1/2} e^{-\beta E_K^0} \quad (5)$$

и к теплоемкости

$$\tilde{C}_K = k\tilde{n}_K \left\{ (\beta E_K^0 - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{2} \right\}. \quad (6)$$

В действительности формула (6) в рамках теории^{/10/} верна лишь с точностью до членов $\sim (\beta E_K^0)^2$ в фигурных скобках. Вместо (5) при низких температурах имеем разложение

$$n_K = \tilde{n}_K \left[1 + C_1 (\beta E_K^0)^{-1} + C_2 (\beta E_K^0)^{-2} + \dots \right],$$

(C_1, C_2 известные константы). Вычисляя теплоемкость как в (4), видим, что члены при $(\beta E_K^0)^4, (\beta E_K^0)^0$ в скобках в (6) модифицируются постоянными C_1, C_2 , и мы получим

$$\tilde{C}_K \approx k\tilde{n}_K \left\{ (\beta E_K^0)^2 - \frac{5}{8} \beta E_K^0 + 2^{-7} \right\}, \quad (6a)$$

что является низкотемпературным разложением величины

^{*}/См., впрочем, обсуждение правомочности этого в^{/12/}.

$$\bar{C}_k = \frac{4k\omega_0}{\pi c_0} (\beta E_k^0)^2 \{ \beta E_k^0 K_1 - K_0 \}. \quad (7)$$

Таким образом, формула (6), найденная в [10] для $\beta E_k^0 \gg 1$, записана с превышением точности метода. В [10] эта формула использовалась для описания экспериментальных данных. Так как теория [10] справедлива только при низких температурах, очевидно, что ее применение для всей области температур и полей, как это делалось в [10], неправомерно: величина βE_k^0 в [10] изменяется вплоть до нуля. Кроме того, в [10] на основе (6) определялось положение пика теплоемкости в зависимости от H . Было получено, что теплоемкость имеет максимум при $\beta E_k^0 = 3,9$. Учитывая, что точность формулы (6) завышена, приходим к значению βE_k^0 в максимуме $\beta E_k^0 \approx 2,79$ и тем самым к еще худшему согласию с экспериментом (в эксперименте максимум пика находится при значительно больших величинах βE_k^0). Заметим, что модель газа кинков без взаимодействия с фононами дает еще меньшее значение βE_k^0 в области максимума ($\beta E_k^0 = 2,5$).

3. Бионные решения уравнения (2) имеют вид [12]:

$$\begin{aligned} \phi &= 4 \arctg \alpha e, \quad \alpha = \eta \sin \theta \operatorname{ch}^{-1} \xi, \quad \theta = \omega_0 \Omega (t - v x_0^{-2}) + \theta_0, \\ \xi &= d^{-1} \sqrt{1 - \Omega^2} \gamma (x - vt - x_0), \quad \eta = \Omega^{-1} \sqrt{1 - \Omega^2}, \\ -\infty &< x; x_0; t < \infty, \quad -c_0 < v < c_0, \quad 0 \leq \theta_0 < 2\pi, \quad 0 < \Omega < 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь v — скорость биона, θ_0 и x_0 — свободные параметры. Энергия и импульс бризера даются формулами [4]:

$$E = E^0 \gamma, \quad p = E v c_0^{-2}, \quad E^0 = 2 E_k^0 \sqrt{1 - \Omega^2} \quad (9)$$

и зависят от внутренней "частоты" бризера Ω . Термодинамика бризеров разработана в значительно меньшей степени, чем для кинков. Вычисление статистической суммы газа бризеров, взаимодействующих с фононами, привело к расходимостям [13], и для плотности бризеров в настоящее время нет общепризнанного выражения. В простейшем варианте идеального газа были найдены основные термодинамические функции бризеров в [14]. В [15], следуя [4], считалось, что каноническими сопряженными величинами, описывающими бризер, являются (x, p) (описывают движение бризера как целого) и $(\theta_0, \varphi = 16 A c_0 \arccos \Omega, 0 < \varphi < 8 \pi A c_0)$ (описывающие внутреннее состояние бризера). Эти величины определяют фазовое пространство бризера. Если это так, то при квазиклассическом квантовании для статистического интеграла отдельного бризера имеем

$$\begin{aligned} j(T) &= h^{-2} \int_0^L dx_0 \int_0^{2\pi} d\theta_0 \int_0^{8\pi A c_0} d\varphi \int dp e^{-\beta E(p)} = \\ &= L \omega_0 c_0 \left(\frac{16 \pi A}{h} \right)^2 [K_1 I_0 - I_1 K_0]. \end{aligned} \quad (10)$$

Функции Бесселя K, I здесь зависят от аргумента βE_k^0 . Большая статистическая сумма идеального газа бризеров определяется как

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} [j(T)]^N / N! = \exp [j(T) \exp(\beta \mu)],$$

с химическим потенциалом μ , который, если число бризеров определяется только температурой, следует в окончательных формулах полагать равным нулю. Если G — термодинамический потенциал, $G = -kT \ln \Xi$, то плотность бризеров равна $n_B = -L^{-1} \partial G / \partial \mu |_{\mu=0} = j(T) / L$, а точное выражение для теплоемкости имеет вид

$$C_B = \frac{2k}{\omega_0 c_0} (2\pi E_k^0 / h)^2 \{ [1 + 2(\beta E_k^0)^2 [K_1 I_0 - I_1 K_0] + 2\beta E_k^0 [K_0 I_0 - 3K_1 I_1]] \}. \quad (11)$$

При низких и высоких температурах (11) переходит в

$$\begin{aligned} C_B &\approx \left(\frac{8\pi}{h} \right)^2 \frac{A k}{\beta} = \frac{2k}{\omega_0 c_0} \left(\frac{2\pi E_k^0}{h} \right)^2 (\beta E_k^0)^{-1}, \quad \beta E_k^0 \ll 1, \\ C_B &\approx 12 k \pi^2 (h^2 \omega_0 c_0 \beta^2)^{-1}, \quad \beta E_k^0 \gg 1. \end{aligned}$$

Асимптотики других термодинамических величин имеют вид, в случае низких температур ($\beta E_k^0 \gg 1$): $n_B \approx 2(\pi/h)^2 (\omega_0 c_0 \beta^2)^{-1}$, $F = -\beta^{-1} n_B$ (плотность свободной энергии), и $u \approx (2\pi/h)^2 (\omega_0 c_0 \beta^3)^{-1}$ (плотность внутренней энергии), $s \approx 6k(\pi/h)^2 (\beta^2 \omega_0 c_0)^{-1}$ (плотность энтропии). При высоких температурах $\beta E_k^0 \ll 1$: $n_B \approx 32 A (\pi/h)^2 \beta^{-1}$, $F = -\beta^{-1} n_B$, $u \approx -F$, $s \approx A k (8\pi/h)^2 \beta^{-1}$.

Ниже мы сравним вклады кинков и бризеров с экспериментальными данными. Будем пользоваться формулами (4) и (11) (точными в модели идеального газа) и (7) — учитывающей взаимодействие с фононами. Вклад в теплоемкость спиновых волн учитывается легко; в линейной теории он постоянен и равен k/a_0 .

Уместно отметить, что приведенные выше формулы можно использовать для вычисления вклада кинков и бионов (бризеров) в равновесные характеристики любых квазиодномерных SG-систем (необходимо лишь брать значения параметров c_0, ω_0, a_0, A , диктуемые конкретной физической спецификой задачи).

4. Для сравнения с экспериментом нам нужна связь между пара-

метрами гамильтониана (I) и исходным гамильтонианом Гейзенберга, который, как считается, хорошо моделирует магнетик $CsNiF_3$ ^{/5/}:

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + D \sum_i (S_i^x)^2 - g\mu_B H \sum_i S_i^y \quad (I2)$$

$$J = 23,6 \text{ K}, \quad D = 4,5 \text{ K}, \quad g = 2,25, \quad a_0 = 2,6 \text{ \AA}.$$

Напомним приближения, используемые при выводе SG модели из (I2). Спин \vec{S}_i представляется классическим вектором $\vec{S}_i = S \{ \cos \theta_i \cos \varphi_i, \sin \varphi_i \cos \theta_i, \sin \theta_i \}$. θ_i , задающие отклонение спинов от легкой плоскости y, z , считаются малыми, а θ_i, φ_i — медленно меняющимися вдоль решетки (континуальное приближение). При этих предположениях (I2) переходит в (I) (с точностью до фактора, дающего только постоянный вклад в свободную энергию). Параметры (I) равны

$$A = \frac{\hbar^2}{2Da_0} \approx 3,44 \cdot 10^{-37}, \quad c_0^2 = \frac{2DJS^2 a_0^2}{\hbar^2} \approx 2,46 \cdot 10^5, \quad \omega_0^2 = 2DSg\mu_B H \hbar^{-2} \approx 2,33 \cdot 10^{22} \text{ H} \quad (I3)$$

Величина магнитного поля здесь подставляется в кГс, а числа записаны в единицах СИ. Безразмерный параметр βE_k^0 , фигурирующий во всех основных формулах выше, равен $\beta E_k^0 \approx 15,1 \sqrt{H} / T$. В эксперименте ^{/1/} температура изменялась в пределах 4–18К, а поле — от 0 до 8 кГс, так что βE_k^0 меняется от 0 до 10,7 (условие $\beta E_k^0 \gg 1$ не всегда выполняется). Кроме этого условия должны выполняться еще следующие неравенства, использованные при выводе уравнения SG :

$$\frac{d}{a_0} \approx \frac{12,4}{\sqrt{H}} \gg 1, \quad \frac{2DS}{g\mu_B H} \approx \frac{60}{H} \gg 1.$$

Эти неравенства в основной области экспериментальных полей H выполняются достаточно хорошо.

Численные значения для теплоемкости приведены на рисунках I и 2. На рис. I дана зависимость $C(T)$ при двух значениях поля, $H = 0$ (кривые I–4) и $H = 4$ кГс (кривые I'–4'). Кривые I, I' взяты из эксперимента ^{/1/}. Кривые 2, 2' получены по формуле (4) для идеального газа кинков и антикинков, 3, 3' описывают величину \tilde{C}_k (формула (7)) с учетом вклада фононов kN_A , 4 и 4' — вклад идеального газа бризеров (без нормировочного фактора $16\pi^2 A c_0 / \hbar \approx 40,7$). На рис. 2 дана зависимость $C(H) - C(H=0)$ при $T = 7,25$ К. Кривая I — экспериментальная ^{/1/}, 2 — формула (7), 2' — теория ^{/10/} (см. формулу (6)). Кривые 3 и 4 описывают вклад идеальных газов кинков и бризеров, соответственно.

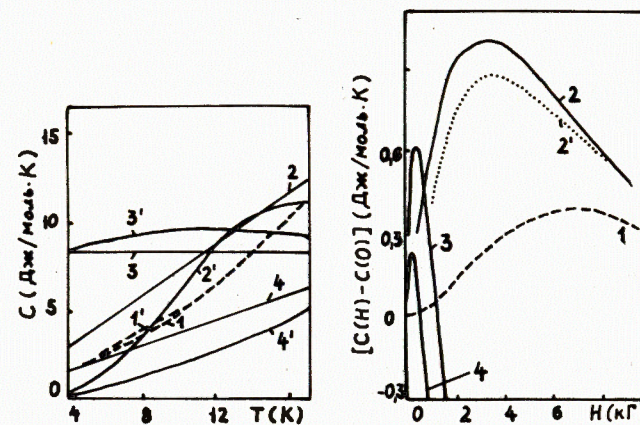


Рис. I

Рис. 2

Из приведенных графиков видно, что феноменология идеального газа элементарных возбудений в SG-системе недостаточна для описания экспериментов по измерению теплоемкости ^{/1,2/}. Модель газа кинков, взаимодействующих с фононами, дает некоторое качественное согласие с экспериментом для зависимости C от H , но не согласуется даже качественно с зависимостью C от T . Заметим, что использование формулы (7) вместо некорректной формулы (6) ^{/10/} только ухудшает согласие с экспериментом. Модель идеального газа кинков и бризеров лучше отражает температурную зависимость теплоемкости, однако слишком острые пики в зависимости от H противоречат эксперименту.

В заключение отметим, что поскольку гамильтониан (I) является только довольно грубым модельным приближением к реальной системе $CsNiF_3$, естественно тестировать пригодность интерпретации теплоемкости SG-систем в терминах газа солитонов в сравнении с результатами численного эксперимента для SG-модели. Для зависимости $C(T)$ в случае параметров, соответствующих $CsNiF_3$, такие результаты получены в ^{/16/} численным интегрированием по методу трансфер-интеграла (TI). Однако в ^{/16/} полярный угол φ изменяется в нефизических пределах $-\infty < \varphi < \infty$, хотя все конфигурации спинов, дающие вклад в статистическую сумму, получаются при изменении φ от 0 до 2π . В работе ^{/9/} упоминается, что авторы вычисляли различные термодинамические характеристики для $CsNiF_3$ методом TI, но данные о теплоемкости не приводятся. Поэтому, на наш взгляд, необходимо дополнительное исследование с использованием численного интег-

рирования поведения теплоемкости SG-систем и сравнение соответствующих результатов с результатами, полученными в рамках феноменологических теорий, и с имеющимися экспериментами.

Л и т е р а т у р а

1. Ramirez A.P., Wolf W.P., Phys.Rev.Lett., 1982, 49, p.227.
2. Ramirez A.P., Wolf W.P., J.Magn.Magn.Mat., 1983, 31-34, p.1285.
3. Mikeska H.J., J.Phys., 19 B, C11, p. L29.
4. Корепин В.Е., Фаддеев Л.Д., ТМФ, 1975, 25, с. 147.
5. Steiner M., Kakurai K., Kjems J.K., Z.Phys., 1983, B53, p.117.
6. Mikeska H.J., Physica, 1983, B120, p. 235.
7. Kumar P., Phys.Rev., 1982, B25, p. 483.
Magyari E., Thomas H., ibid., p. 531.
8. Reiter G., Phys.Rev.Lett., 1981, 46, p. 202.
9. Loveluck J.M. et al. Phys.Rev. Lett., 1982, 45, p. 1505.
10. Currie J.F. et al., Phys.Rev., 1980, B32, p. 477.
11. Федянин В.К., ОИЯИ, П17-82-268, Дубна, 1982.
12. Makhankov V.G., Fedyanin V.K., Phys.Rev., 1984, 104, p.1.
13. Bishop A.R. In: Physics in one dimension, Springer-Verlag, 1981, p. 27.
14. Fedyanin V.K., Lisy V., JINR, B17-84-223, Dubna, 1984.
15. Лисы В., Маханьков В.Г., Федянин В.К., ОИЯИ, Д17-84-407, Дубна, 1984, с. 81.
16. Schneider T., Stoll E., Phys.Rev., 1980, B22, p. 5317.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 ноября 1984 года.

Лисы В., Федянин В.К.

17-84-743

Феноменология идеального газа солитонов для SG-систем
и теплоемкость CsNiF₃

Анализируются экспериментальные данные по измерению теплоемкости магнетика CsNiF₃. Предполагается, что квазиодномерный гейзенберговский ферромагнетик CsNiF₃ описывается моделью синус-Гордона (SG). Цель работы состоит в проверке применимости феноменологии идеального газа солитонов в SG-модели для интерпретации упомянутых экспериментов. Кроме вклада кинков /в модели идеального газа без взаимодействия и с взаимодействиями с фононами/ найден вклад в теплоемкость идеального газа бризеров. Показано, что используемая феноменология приводит к значительному разногласию с экспериментом. Это свидетельствует о том, что либо SG-модель является грубым приближением к реальной системе CsNiF₃, либо феноменология идеального газа солитонов не соответствует SG-модели /возможно и то и другое/. Делается вывод о необходимости дополнительного численного исследования SG-систем и сравнения соответствующих результатов с феноменологическими теориями.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Lisy V., Fedyanin V.K.

17-84-743

Ideal Gas Phenomenology of Solitons for SG-Systems
and Specific Heat of CsNiF₃

Experimental data on specific heat of the CsNiF₃ magnet are analysed. It is assumed that the quasi-one-dimensional Heisenberg ferromagnet, CsNiF₃, is described by the sine-Gordon (SG) model. The aim of the work is to test the applicability of the soliton ideal gas phenomenology in the SG-model for the interpretation of the experiments mentioned. Besides the contribution of kinks (in the model of an ideal gas with and without interaction with phonons) the contribution of the ideal breather gas has been found. It is shown that the phenomenology used leads to considerable discrepancies with the experiment. It is concluded that wither the SG-model is a rough approximation to the real system CsNiF₃ or the ideal gas phenomenology does not correspond to the SG-model. An additional numerical investigation of the SG-systems is necessary to test the applicability of the phenomenological theories.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984