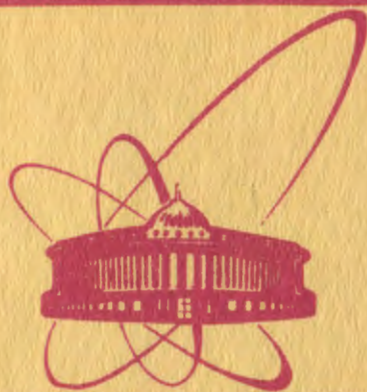


9/11-80

+



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

2455/2-80

P17-80-69

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай

ВОЗМОЖНОСТЬ НАБЛЮДЕНИЯ  
СОЛИТОННОЙ МОДЫ У  $[(CH_3)_4N][NiCl_3]$   
В ЭКСПЕРИМЕНТАХ  
ПО РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ

Направлено в "Physics Letters A"

1980

1. Растущий интерес к моделям с низкой пространственной размерностью в теории магнетизма обусловлен целым рядом причин /1,2/. Особый интерес вызывает вопрос о существовании солитонной моды возбуждений в квазиодномерных магнитных системах /3-8/. Так, в работе /3/ показано, что динамическое поведение одномерного ферромагнетика с анизотропией типа "легкая плоскость" во внешнем магнитном поле описывается уравнением синус-Гордона, а также оценен вклад солитонных решений этого уравнения в динамический структурный фактор магнетика. В /4/ представлены результаты измерения структурного фактора в экспериментах по рассеянию нейтронов на кристалле  $\text{CsNiF}_3$  и подтверждены с хорошей точностью выводы /3/.

В настоящей работе обсуждается возможность наблюдения солитонной моды возбуждений в квазиодномерной системе с изотропным гейзенберговским обменом между спинами. Рассматриваемые здесь солитоны имеют иную природу и возникают как результат взаимодействия магнитных возбуждений с колебаниями решетки /5,6/. В основу оценки вклада солитонов в корреляционную функцию системы положен феноменологический подход, предложенный Крумхансом и Шриффером /9/.

2. Будем исходить из гамильтониана системы в виде

$$\begin{aligned}
 H = T + V - \frac{1}{2} \sum_{j\delta} J(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{j+\delta}) & \left[ \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+\delta}^- + S_j^- S_{j+\delta}^+) + S_j^z S_{j+\delta}^z \right] - \\
 - \mu B \sum_j S_j^z. & \qquad (1)
 \end{aligned}$$

Здесь  $S_j^{\pm} = S_j^x \pm iS_j^y$ ,  $S_j^z$  - операторы спина на узле  $j$  ( $S \geq 1$ ),  $J$  - обменный интеграл ближайших спинов ( $\delta = \pm 1$ ),  $B$  - величина внешнего магнитного поля,  $T$  и  $V$  - кинетическая и потенциальная энергия колебаний решетки.

$$T = \frac{m}{2} \sum_j \dot{x}_j^2; \quad V = \frac{mv_0^2}{2a} \sum_j (x_{j+1} - x_j - a)^2,$$

где  $m$  - масса узла,  $v_0$  - скорость звука в кристалле,  $a$  - постоянная решетки (ниже примем  $a = 1$ ).

Рассматривая ситуацию при низких температурах, воспользуемся представлением

$$S_j^+ = \sqrt{2S} a_j; \quad S_j^- = \sqrt{2S} a_j^+; \quad S_j^z = S - a_j^+ a_j, \quad (2)$$

где  $a_j^+$ ,  $a_j$  - бозе-операторы рождения и уничтожения возбуждения на узле  $j$ . Будем исследовать низколежащие возбуждения системы, описываемые волновой функцией в шредингеровском представлении

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j C_j(t) a_j^+ |0\rangle, \quad (3)$$

где "вакуумный" вектор  $|0\rangle$  удовлетворяет соотношениям  $a_j |0\rangle = 0$ ,  $j = 1, 2, \dots$ . Функция (3) подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (4)$$

и условию нормировки  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$ . Колебания узлов решетки, в свою очередь, описываются решениями уравнений Гамильтона

$$\dot{x}_j = \frac{P_j}{m}, \quad (5)$$

$$\dot{P}_j = - \frac{\partial H}{\partial x_j},$$

где

$$H = \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle.$$

В континуальном пределе

$$x_j(t) \rightarrow x(\xi, t); \quad C_j(t) \rightarrow C(\xi, t)$$

из (4)–(5) получаем замкнутую систему дифференциальных уравнений для амплитуды  $C(\xi, t)$  и функции деформации  $x(\xi, t)$ . Предполагая, что магнитное возбуждение и деформация решетки самосогласованным образом движутся по решетке со скоростью  $v$ , из вышеуказанной системы уравнений получаем следующее уравнение на амплитуду  $C(\xi, t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial C(\xi, t)}{\partial t} = [T + U - J_0 S^2 N - \mu B S N + \frac{(2J_1 S)^2 S}{m(v_0^2 - v^2)} + \mu B] C(\xi, t) - J_0 S \frac{\partial^2 C(\xi, t)}{\partial \xi^2} - \frac{(2J_1 S)^2}{m(v_0^2 - v^2)} |C(\xi, t)|^2 C(\xi, t); \quad (6)$$

Здесь  $J_0 = J(a=1)$  и  $J_1 = -\frac{\partial J}{\partial x_j} > 0$

$$T + U = \frac{(2J_1 S)^2}{2mv_0^2} \frac{1 + \beta^2}{(1 - \beta^2)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |C(\xi, t)|^4 d\xi, \quad \beta = v/v_0.$$

Солитонное решение нелинейного уравнения Шредингера (6) имеет вид

$$C(\xi, t) = (2\Lambda)^{-1/2} \frac{e^{i[k\xi - \omega t + \phi_0]}}{\text{ch} \frac{\xi - vt - \xi_0}{\Lambda}}, \quad (7)$$

где

$$k = \frac{\hbar v}{2J_0 S}; \quad \Lambda = \frac{J_0 m v_0^2}{J_1^2 S} (1 - \beta^2) \gg 1; \quad (8)$$

$$\hbar \omega = \epsilon + \frac{\hbar^2 v^2}{4J_0 S} + \frac{(J_1 S)^4}{J_0 S (m v_0^2)^2} \cdot \frac{2 + 3\beta^2 - \beta^4}{(1 - \beta^2)^3} \beta^2 + \epsilon_0; \quad (9)$$

$$\epsilon = \mu B - \frac{(J_1 S)^4}{J_0 S (m v_0^2)^2}; \quad \epsilon_0 = -J_0 S^2 N - \mu B S N.$$

Здесь  $\epsilon_0$  - энергия основного состояния системы. В приближении малых скоростей  $\beta \ll 1$ , используя (8), энергию солитона представим как сумму потенциальной и кинетической энергий

$$E_s = \epsilon + \frac{m_s v^2}{2} ; m_s = m_0 + 4 \frac{(J_1 S)^4}{J_0 S m^2 v_0^6} , \quad (10)$$

где  $m_0 = \hbar^2 / 2J_0 S$  - масса свободного магнона.

Квантовомеханическое среднее проекции спина в узле  $j$  на ось  $Oz$  получаем с помощью (2), (3)

$$\langle \psi(t) | S_j^z | \psi(t) \rangle = S - |C_j(t)|^2 \rightarrow S - |C(\xi, t)|^2 = S^z(\xi, t) . \quad (11)$$

Итак, следствием взаимодействия магнитного возбуждения в одномерной ферромагнитной цепочке с колебаниями решетки является локализация такого возбуждения на ширине  $\Delta$ . Возбуждение движется по цепочке со скоростью  $v$  самосогласованно с деформацией решетки и характеризуется законом дисперсии (10).

3. При выведении статистических свойств системы будем исходить из представления о классическом газе невзаимодействующих солитонов. При низких температурах  $\theta$  системы это оправдано: число солитонов невелико. Фазовое пространство солитонов задается их скоростями  $v$  и начальными положениями  $\xi_0$ , а плотность состояний в этом пространстве - весовым множителем  $\exp[-E_s/\theta]$ .

Предположим, что в системе возбужден один солитон. Оценим его вклад в корреляционную функцию  $\langle S^z(\xi, t) S^z(0, 0) \rangle_1$ , где угловые скобки означают усреднение по всему фазовому пространству

$$\langle \dots \rangle_1 = \int_1^{-1} \iint \frac{dv d\xi_0}{\tilde{V}} e^{-\frac{\epsilon + m_s v^2 / 2}{\theta}} . \quad (12)$$

Здесь  $\tilde{B}$  - нормировочный множитель в фазовом пространстве, а  $\mathcal{P}_1$  определяется следующим образом:

$$\mathcal{P}_1 = \iint \frac{dv d\xi_0}{\tilde{B}} e^{-\frac{\epsilon + m_s v^2/2}{\theta}} = L \left( \frac{2\pi\theta}{m_s \tilde{B}^2} \right)^{1/2} e^{-\epsilon/\theta} \quad (13)$$

( $L$  - длина цепочки).

С помощью (7)-(13) получаем

$$\begin{aligned} \langle S^z(\xi, t) S^z(0,0) \rangle_1 &= S^2 - \frac{2S}{L} + \\ &+ \mathcal{P}_1^{-1} \cdot \frac{1}{\Lambda} \int \frac{dv}{\tilde{B}} e^{-E_s/\theta} \left\{ \left( \frac{\xi - vt}{\Lambda} \right) \frac{\text{ch}\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)}{\text{sh}^3\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)} - \frac{1}{\text{sh}^2\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)} \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Пусть в системе возбуждено  $N_s \geq 1$  солитонов с плотностью  $n_s = N_s/L \ll 1/\Lambda$ . Тогда при условии

$$\xi \ll \frac{1}{n_s}; \quad t \ll \frac{1}{vn_s}, \quad (15)$$

где  $\bar{v}$  - средняя тепловая скорость солитонов, получаем, аналогично (14),

$$\begin{aligned} \langle S^z(\xi, t) S^z(0,0) \rangle_{N_s} &= S^2 - N_s \frac{2S}{L} + \\ &+ N_s \mathcal{P}_1^{-1} \cdot \frac{1}{\Lambda} \int \frac{dv}{\tilde{B}} e^{-E_s/\theta} \left\{ \left( \frac{\xi - vt}{\Lambda} \right) \frac{\text{ch}\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)}{\text{sh}^3\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)} - \frac{1}{\text{sh}^2\left(\frac{\xi - vt}{\Lambda}\right)} \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

В основе соотношения (16) лежит представление о каноническом статистическом распределении. Оно может быть получено и на основе большого канонического распределения с точностью до замены  $N_s \rightarrow \bar{N}_s$ , где  $\bar{N}_s$  - среднее число солитонов в системе.

Исходя из идеи работы /9/, оценим величину  $\bar{N}_s$  следующим образом. Разобьем цепочку длиной  $L$  на  $N$  сегментов величиной  $\Delta$ ,  $N = L/\Delta$ . В каждом из этих сегментов может быть возбуждено не более одного солитона с энергией  $\epsilon$  (9). Поскольку возможные состояния системы различаются числом возбужденных в ней солитонов, конфигурационную статистическую сумму получаем, суммируя по всевозможным состояниям с соответствующими весами

$$Z = \sum_{N_s=0}^N \frac{N!}{(N-N_s)! N_s!} e^{-N_s \epsilon/\theta} = (1 + e^{-\epsilon/\theta})^N. \quad (17)$$

Из (17) при условии  $\theta \ll \epsilon$  находим среднюю энергию системы, число солитонов в системе и их плотность

$$\bar{E} = \epsilon N e^{-\epsilon/\theta}; \quad \bar{N}_s = N e^{-\epsilon/\theta}; \quad \bar{n}_s = \frac{1}{\Delta} e^{-\epsilon/\theta}. \quad (18)$$

Определяя динамический структурный фактор системы формулой

$$S^{\text{sol}}(q, \omega) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \iint d\xi dt \exp[i(q\xi - \omega t)] \times \quad (19)$$

$$\times \langle S^z(\xi, t) S^z(0,0) \rangle_{\bar{N}_s},$$

получаем с помощью (16) и (18) после ряда вычислений следующее выражение для него:

$$S^{\text{sol}}(q, \omega) = (S^z - 2S\bar{n}_s) \delta(q) \delta(\omega) +$$

$$+\bar{n}_s \cdot \frac{1}{2\pi|q|} \left(\frac{m_s}{2\alpha\theta}\right)^{1/2} e^{-\frac{m_s(\omega)}{2\theta} \frac{1}{q}} \cdot \frac{\left(\frac{\pi q \cdot \Lambda}{2}\right)^2}{\text{sh}^2 \frac{\pi q \cdot \Lambda}{2}}. \quad (20)$$

Из результата (20) следует, что существование солитонной моды приводит, так же, как и в /3,4/, к перераспределению интенсивности из брэгговского пика в квазиупругую часть спектра, что может быть наблюдаемо в экспериментах по рассеянию нейтронов. Ширина квази-

упругой компоненты по энергии равна  $\Delta\omega \approx q(8\theta)^{1/2} m_s^{-1/2}$  при волновых векторах  $q < 4/\pi\Delta$  ( $q$  — волновой вектор вдоль цепочки). При фиксированном  $q$  выполняются следующие свойства  $S^{\text{sol}}(q, \omega)$ : энергетическая ширина квазиупругой компоненты имеет корневую зависимость по температуре  $\theta$ ; интегральная интенсивность солитонного пика  $S^{\text{sol}}(q) = \int d\omega S^{\text{sol}}(q, \omega)$  экспоненциально зависит от температуры  $\theta$  и магнитного поля  $B$ , что обусловлено средней температурной плотностью солитонов  $\bar{n}_s = \frac{1}{\Lambda} \exp[-\epsilon/\theta]$ .

Наиболее интенсивное рассеяние на солитонах происходит при малых  $q$ .

Согласно [1], существует одномерная ферромагнитная структура, адекватно описываемая гамильтонианом (1), где  $S=1$ . Эту структуру обеспечивает  $[(\text{CH}_3)_4\text{N}][\text{NiCl}_3]$  в интервале температур  $1,6^\circ\text{K} < \theta < 79^\circ\text{K}$ . Среди параметров, входящих в выражения (7)–(10), (20), есть лишь один неизвестный параметр  $J_1$ . Он может стать подгруппочным параметром в экспериментах по рассеянию нейтронов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Longh L.I., Miedema G.R. Adv.Phys., 1974, 23, p.1.
2. Steiner M., et al. Adv.Phys. 1976, 25, p.87.
3. Mikeska H.I. I.Phys.C: Solid St.Phys., 1978, 11, p.L 29.
4. Kjems I.K., Steiner M., Phys.Rev.Lett., 1978, 41, p.1137.
5. Яцишин В.П., ТМФ, 1977, 32, с. 127.
6. Pushkarov D.I., Pushkarov Kh.I. Phys.stat.sol. (b), 1977, 81, p.703.
7. Fedyanin V.K., Yushankhai V.Iu., Phys.Lett., A, 1979, 70, p.459.
8. Nakamura K., Sadada T., Phys.Lett., A, 1974, 48, p.321.
9. Krumhansl I.A., Schrieffer I.R., Phys.Rev., B, 1975, 11, p.3535.

Рукопись поступила в издательский отдел  
30 января 1980 года.