

ИНСТАНТОННЫЕ ПУТИ И КОГЕРЕНТНОЕ КВАНТОВОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ СПИНОВЫХ КЛАСТЕРАХ, НАХОДЯЩИХСЯ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Б. А. Иванов^{a,b*}, В. Е. Киреев^{a**}

^a Институт магнетизма Национальной академии наук Украины
03142, Киев, Украина

^b Национальный университет им. Тараса Шевченко
03127, Киев, Украина

Поступила в редакцию 7 января 2008 г.

С использованием инстантонного формализма исследованы эффекты когерентного квантового туннелирования в антиферромагнетиках при наличии сильного внешнего магнитного поля, параллельного оси легкого намагничивания. В широкой области значений поля, включающей область фазового спин-флоп-перехода, туннелирование описывается 180-градусными инстантонами, для которых значение евклидова действия вещественно и эффекты деструктивной интерференции отсутствуют. В самой точке перехода реализуются 90-градусные инстантоны, описывающие туннелирование между коллинеарными и спин-флоп-состояниями. Евклидово действие уменьшается, а вероятность туннелирования и туннельное расщепление уровней в обеих фазах существенно увеличивается в непосредственной близости к точке спин-флоп-перехода. Обсуждается возможность наблюдения эффектов когерентного туннелирования для искусственных малых частиц (магнитных точек), сделанных из антиферромагнетиков.

PACS: 75.50.Ee, 75.45.+j, 75.50.Xx, 75.50.Tt

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время проводится систематическое изучение квантового туннелирования в макроскопических (а точнее, в мезоскопических) образцах магнетиков, к которым можно отнести малые магнитные частицы, магнитные кластеры и высокоспиновые молекулы, включающие десятки спинов с сильным обменным взаимодействием [1, 2]. Интерес к этому явлению обусловлен не только важностью проявления квантовых эффектов в макромире с общефизической точки зрения, но и возможностями их внедрения в практику, обусловленными тем, что мезоскопические объекты, способные проявлять квантовомеханические свойства, интересны как потенциальные элементы квантовых компьютеров [3, 4].

При изучении макроскопических квантовых эффектов особый интерес представляет явление когерентного макроскопического квантового туннелирования между энергетически эквивалентными, но физически различными состояниями в системах с дискретным вырождением основного состояния [2, 5, 6]. Типичным эффектом такого типа является смешивание двух классических состояний и туннельное расщепление отвечающих им уровням энергии, вырожденных в классическом случае. Первоначальные работы по теории квантового туннелирования были выполнены для малых частиц ферромагнетика [7–9], но далее оказалось, что с экспериментальной точки зрения антиферромагнетики (АФМ) представляют собой более удобный класс для исследования квантового туннелирования. Согласно расчетам [10, 11], в АФМ расщепление уровней более сильное, чем в ферромагнетиках, и эффекты могут наблюдаться при более высокой температуре. Не удивительно,

*E-mail: bivanov@i.com.ua

**E-mail: kireev@imag.kiev.ua

что первое обнаружение эффектов квантового туннелирования было осуществлено на частицах ферритина биологического происхождения, обладающего такой же антиферромагнитной структурой [12], как известный кристаллический АФМ-гематит $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$.

Для описания туннельных эффектов наиболее удобным оказался инстантонный формализм [13], который позволяет достаточно просто получить результат и при всей сложности его математических основ не лишен своеобразной наглядности. Он естественно позволяет описать ряд тонких и красивых эффектов полного [14, 15] или частичного [16] давления туннельных переходов из-за интерференции инстантонных траекторий. Возможность управления туннельными эффектами («включения» или «выключения» туннелирования за счет эффектов интерференции) является важным моментом для применения мезоскопических магнетиков в качестве элементов квантовых компьютеров [3, 4]. В чистых АФМ, т. е. при полной компенсации спинов подрешеток, эффекты интерференции отсутствуют, но они могут появляться во внешнем магнитном поле [17, 18] и при наличии некоторых типов взаимодействия Дзялошинского–Мория [19]. В присутствии магнитного поля \mathbf{H} теорема Крамерса неприменима и результат нельзя предсказать заранее.

Для анализа эффектов магнитного поля принципиально важным является как можно более точная ориентация поля относительно осей магнитной анизотропии системы, поэтому наблюдение эффектов деструктивной интерференции для разупорядоченных систем малых частиц типа ферритина затруднительно. Несмотря на то что существуют способы обойти эту сложность (один из них указан нами в работе [20]), более реальным является использование высокоспиновых молекул и их высококачественных монокристаллов с фиксированной ориентацией осей молекул [2]. Для монокристаллов высокоспиновых молекул можно получить параллельную ориентацию осей анизотропии молекул, что позволяет наблюдать осцилляции туннельного расщепления при изменении внешнего магнитного поля, параллельного оси трудного намагничивания частицы, методом измерения времени релаксации при низких температурах [21]. Недавно появилось сообщение о прямом наблюдении туннельного расщепления уровней для антиферромагнитных молекул Fe_8 методом неупругого рассеяния нейтронов [22]. Это привело к новым теоретическим исследованиям квантовых эффектов, в том числе эффектов туннелирования, для ансамблей ориентированных частиц [19, 23–27].

Здесь уместно отметить еще один класс новых

магнитных материалов, а именно, двумерные магнитные сверхструктуры типа решеток магнитных частиц (магнитных точек) с характерным размером порядка десятков или сотен нанометров, разделенных немагнитными прослойками [1]. Их чаще всего изготавливают из ферромагнитных материалов, и эффекты когерентного квантового туннелирования для них, насколько нам известно, не наблюдались. Для систем подобных частиц, изготовленных из антиферромагнитных материалов, вероятность квантового туннелирования может стать существенной. Как мы покажем, в присутствии сильного магнитного поля и особенно вблизи фазового спин-флоп-перехода, эффекты квантовой когерентности для таких частиц могут стать реальностью.

Поведение антиферромагнитных частиц во внешнем поле нетривиально уже в классическом случае. Для АФМ характерно большое разнообразие индуцированных полем фазовых переходов «порядок–порядок», например, известный спин-флоп-переход, при котором при непрерывном изменении величины магнитного поля \mathbf{H} , направленного вдоль оси легкого намагничивания, при $H = H_{sf}$ скачком изменяется направление спинов и появляется нескомпенсированный магнитный момент, см. монографии [28, 29]. Для квантовых мезоскопических магнетиков также существует эффект скачкообразного намагничивания. Он наблюдался для большого числа систем с преобладающим изотропным антиферромагнитным взаимодействием, см. обзор [30]. При наличии анизотропии возникает интересное явление смешивания его со спин-флоп-переходом [24]. Эффекты квантового туннелирования в окрестности таких переходов должны обладать рядом принципиальных особенностей. В частности, в непосредственной близости H_{sf} можно ожидать появления туннельных переходов между коллинеарным и спин-флоп-состояниями. Насколько нам известно, эти особенности ранее не рассматривались, исследовалась лишь роль поля, параллельного оси трудного намагничивания [18, 47] (простейший случай, при котором спин-флоп-перехода нет, см. ниже), или случай малых полей $H \ll H_{sf}$ [23].

В настоящей работе в квазиклассическом приближении проведено последовательное теоретическое описание квантовых свойств, в том числе туннельных явлений, для кластера спинов (спиновой пары, магнитной молекулы) с антиферромагнитным обменным взаимодействием при наличии сильного магнитного поля, параллельного оси легкого намагничивания АФМ. В разд. 2 сформулирована модель и получены эффективные уравнения спиновой ди-

намики в терминах единичного вектора антиферромагнетизма \mathbf{l} без использования приближений, обычных при выводе σ -модели. На основе этих уравнений в разд. 3 рассчитана структура инстантонов в чисто одноосной модели. В этом разделе показано, что без учета анизотропии в базисной плоскости АФМ невозможно перемешивание известных классических состояний (коллинеарного состояния и спин-флоп-состояния), существующих около характерного значения магнитного поля H_{sf} . Поэтому в разд. 4 проанализирована более общая модель, включающая в себя такую анизотропию. Для этой модели построены решения для инстантонов в коллинеарной и спин-флоп-фазах АФМ, а также решение для 90-градусного инстантона, описывающего туннелирование между существующими при $H = H_{sf}$ коллинеарным и спин-флоп-состояниями. В разд. 5 проанализированы флюктуационные эффекты для этих туннельных процессов. В заключительном разд. 6 обсуждается общая картина туннелирования в области спин-флоп-перехода.

2. МОДЕЛЬ И ЭФФЕКТИВНЫЕ УРАВНЕНИЯ СПИНОВОЙ ДИНАМИКИ

При анализе как классической, так и квантовой динамики АФМ очень удобным инструментом является σ -модель, представляющая собой динамическое уравнение для вектора антиферромагнетизма \mathbf{l} , который коллинеарен разности нормированных намагниченностей подрешеток $\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\boldsymbol{\sigma}_2$, $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 1$. При этом полная нормированная намагниченность $\mathbf{m} = (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)/2$ мала, $|\mathbf{m}| \ll 1$, вектор \mathbf{m} является подчиненной переменной и определяется вектором \mathbf{l} и его производной по времени $\partial\mathbf{l}/\partial t$. Стандартные уравнения σ -модели можно построить как исходя из симметрийных соображений [31], так и непосредственно получить из уравнений Ландау–Лифшица для намагниченостей подрешеток [32, 33], см. обзорные работы [28, 34–36]. Обычный вывод σ -модели подразумевает использование первого приближения по всем релятивистским взаимодействиям, включая магнитную анизотропию с константой $K \ll J$, где J — обменный интеграл. Эта приближенная версия использовалась практически во всех работах по исследованию туннелирования в АФМ на основе инстантонного подхода. Однако, как мы покажем далее, вблизи спин-флоп-перехода эта модель нуждается в уточнении. Действительно, даже при классическом анализе статических свойств АФМ около спин-флоп-перехода для описания перехода необходимо

дим учет следующих приближений по параметру K/J [28, 29]. Поэтому важной частью нашей работы является получение простых эффективных уравнений спиновой динамики с выходом за рамки стандартной σ -модели.

В этом разделе мы будем исходить из гамильтонiana с чисто одноосной симметрией (избранная ось z есть ось C_∞) и со взаимодействием только ближайших соседей

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} (J\hat{\mathbf{S}}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{S}}_\beta + \varkappa \hat{S}_\alpha^z \hat{S}_\beta^z) - \\ & - K \sum_\alpha (\hat{S}_\alpha^z)^2 - g\mu_B \sum_\alpha \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{S}}_\alpha.\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь в первом слагаемом суммирование распространяется на пары ближайших соседей $\langle\alpha\beta\rangle$ и каждая пара учитывается один раз. Оно описывает взаимодействие спинов, как стандартное изотропное с обменным интегралом J , так и анизотропное, в котором константа \varkappa определяет межионную анизотропию. Кроме того, в гамильтониане \hat{H} учтена также простейшая одноосная одноионная анизотропия с константой K , которая может существовать только для значений спина в узле $S \geq 1$. Последнее слагаемое описывает зеемановское взаимодействие спинов с внешним магнитным полем. Здесь и далее для наглядности мы считаем, что векторный оператор спина $\hat{\mathbf{S}}_\alpha$ параллелен намагниченности, т. е. спины ориентируются параллельно внешнему полю. Мы будем рассматривать слабоанизотропные магнетики, для которых $\varkappa, K \ll J$.

В принципе, слагаемые с одноионной анизотропией могли бы содержать и высшие инварианты, например $\tilde{K} S_z^4$. Такие инварианты уже при малых значениях $\tilde{K} \ll K$, но $\tilde{K} \geq K^2/J$ могут существенно поменять характер спин-флоп-перехода и поэтому их было бы полезно учесть. Однако если в классическом феноменологическом подходе их учет естествен, появление в квантовом случае таких слагаемых в гамильтониане трудно обосновать. В частности, слагаемые вида $\tilde{K} S_z^4$ могут присутствовать только для спина $S \geq 2$, т. е. их нет для ряда высокоспиновых молекул со спином иона $S = 3/2$ [2].

Для перехода от квантового спинового гамильтониана типа (1) к феноменологическому описанию введем магнитные подрешетки (в простейшем случае, которым мы и ограничимся, две) и будем описывать спины подрешеток единичными векторами $\boldsymbol{\sigma}_1$ и $\boldsymbol{\sigma}_2$. Эту процедуру можно провести на основе спиновых когерентных состояний, см. [37–39]. Для вывода сигма-модели нужно перейти от векторов $\boldsymbol{\sigma}_{1,2}$

к их комбинациям \mathbf{l} и \mathbf{m} , которые естественным образом описывают присущую АФМ симметрию относительно перестановки подрешеток и удобны при записи феноменологической энергии АФМ. В отличие от стандартного вывода σ -модели, сразу введем вектор антиферромагнетизма как единичный, записав

$$\boldsymbol{\sigma}_{1,2} = \mathbf{m} \pm \mathbf{l} \sqrt{1 - m^2}, \quad m^2 = \mathbf{m}^2. \quad (2)$$

В силу единичности векторов $\boldsymbol{\sigma}_{1,2}$ выполнены условия

$$\mathbf{m} \cdot \mathbf{l} = 0, \quad \mathbf{l}^2 = 1. \quad (3)$$

Заметим, что при стандартном выборе вектора $\mathbf{l}_{stand} = (\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)/2$ и выводе σ -модели второе из условий (3) имеет вид $\mathbf{m}^2 + \mathbf{l}_{stand}^2 = 1$. Ясно, что при условии $\mathbf{m}^2 \ll 1$ оба определения эквивалентны. В стандартной ситуации динамика АФМ описывается лагранжианом [34, 37]

$$\mathcal{L} = \hbar s N \mathbf{m} \cdot \left(\mathbf{l} \times \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} \right) - W(\mathbf{l}, \mathbf{m}), \quad (4)$$

где N — полное число спинов в кристалле, первое слагаемое определяет динамическую часть лагранжиана, $W(\mathbf{l}, \mathbf{m})$ — классическая энергия АФМ. Можно показать, что то же выражение (4) для динамической части оказывается справедливым и при немалом $\mathbf{m}^2 \leq 1$, если использовать модифицированное определение векторов \mathbf{l} и \mathbf{m} (2) [40]. В интересующем нас сейчас случае чисто одноосной модели (1) энергия имеет вид

$$W(\mathbf{l}, \mathbf{m}) = \frac{1}{2} s^2 N \mathbf{m}^2 [2Jz + (z\kappa + K)l_z^2] + \frac{1}{2} s^2 N [(z\kappa - K)m_z^2 - (z\kappa + K)l_z^2] - g\mu_B s N \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}. \quad (5)$$

Здесь z — число ближайших соседей.

При стандартном выводе σ -модели в этом выражении оставляются лишь главные слагаемые по малым параметрам $(\kappa, K)/J$ и \mathbf{m}^2 . В этом случае эффективная восприимчивость АФМ, которая определяется множителем перед \mathbf{m}^2 , изотропна по отношению к осям кристалла. Около спин-флоп-перехода это приближение неприменимо, и надо учитывать анизотропию восприимчивости АФМ [28, 29]. Чтобы исключить вектор \mathbf{m} и записать уравнения для единичного вектора \mathbf{l} , минимизируем лагранжиан по отношению к \mathbf{m} . Это дает уравнение $\partial \mathcal{L} / \partial \mathbf{m} = \lambda \mathbf{l}$, где λ — множитель Лагранжа, введенный для учета условия $\mathbf{m} \cdot \mathbf{l} = 0$. В результате для подчиненной переменной \mathbf{m} получается выражение

$$\begin{aligned} \mathbf{m} = & \frac{g\mu_B \tilde{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{e}_z}{s[2Jz + (2K + z\kappa)l_z^2 - K + z\kappa]} + \\ & + \frac{g\mu_B [\tilde{\mathbf{H}} - \mathbf{e}_z(\mathbf{e}_z \cdot \tilde{\mathbf{H}})]}{s[2Jz + (2K + z\kappa)l_z^2]}, \end{aligned} \quad (6)$$

где \mathbf{e}_z — единичный вектор, направленный по избранной (легкой) оси АФМ. Для сокращения записи введено эффективное поле $\tilde{\mathbf{H}}$

$$\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{H} - \frac{1}{\gamma} \left[\mathbf{l}, \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} \right] + \lambda \mathbf{l}, \quad (7)$$

$\gamma = g\mu_B/\hbar$ — гиromагнитное отношение. Достаточно громоздкая формула (6) отражает анизотропию восприимчивости АФМ как по отношению к взаимной ориентации магнитного поля \mathbf{H} и вектора \mathbf{l} , которая присутствует и в стандартной теории, так и по отношению к ориентации эффективного поля $\tilde{\mathbf{H}}$ относительно оси симметрии АФМ \mathbf{e}_z . Далее, подставляя это выражение в формулу (4), получим эффективный лагранжиан АФМ:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{N(g\mu_B \tilde{H}_z)^2}{2[2Jz + (2K + z\kappa)l_z^2 - K + z\kappa]} + \\ & + \frac{N(g\mu_B)^2 [\tilde{\mathbf{H}}^2 - \tilde{H}_z^2]}{2[2Jz + (2K + z\kappa)l_z^2]} + \frac{1}{2}(2K + z\kappa)s^2 N l_z^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Кажущаяся компактность этого выражения связана с тем, что в него через компоненты $\tilde{\mathbf{H}}$ входит множитель Лагранжа λ , который должен быть записан через компоненты вектора \mathbf{l} и $\partial \mathbf{l} / \partial t$ с использованием формул (6), (7) и условия $\mathbf{m} \cdot \mathbf{l} = 0$. После несложных, но громоздких преобразований множитель Лагранжа можно исключить и получить искомый лагранжиан, описывающий динамику АФМ в терминах только единичного вектора \mathbf{l} и его производных по времени. Для записи этого лагранжиана вектор \mathbf{l} удобно параметризовать обычными угловыми переменными:

$$l_z = \cos \theta, \quad l_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad l_y = \sin \theta \sin \varphi. \quad (9)$$

В угловых переменных θ и φ лагранжиан АФМ принимает достаточно компактный вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{N\hbar^2}{2[2Jz + (2K + z\kappa) \cos^2 \theta]} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)^2 + \\ & + \frac{N\hbar^2 \sin^2 \theta}{2(2Jz + 2K \cos 2\theta + z\kappa)} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \gamma H_z \right)^2 - NW_a. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $W_a = W_a(\theta)$ — энергия магнитной анизотропии на один спин, в которую как обменная, так и одновременная анизотропия микроскопического гамильтонiana (1) вносят аддитивный вклад

$$W_a(\theta) = s^2 K_{eff} \cdot \sin^2 \theta, \quad K_{eff} = K + \frac{1}{2} z\kappa. \quad (11)$$

Анизотропия является легкоосной при $2K + z\kappa > 0$. Далее мы ограничимся случаем, когда магнитное поле параллельно оси легкого намагничивания АФМ, и будем полагать $H_z = H$.

Динамические уравнения для вектора \mathbf{l} получаются варьированием лагранжиана (10) по угловым переменным θ и φ . Не выписывая их, отметим, что эти уравнения имеют очевидный интеграл движения,

$$E = \frac{N\hbar^2}{2[2Jz + (2K + z\kappa)\cos^2\theta]} \left(\frac{\partial\theta}{\partial t} \right)^2 + \frac{N\hbar^2\sin^2\theta}{2(2Jz + 2K\cos 2\theta + z\kappa)} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} \right)^2 + N\widetilde{W}, \quad (12)$$

который имеет смысл энергии АФМ E . Величина \widetilde{W} есть эффективная потенциальная энергия на один спин. В чисто одноосной модели (1), которую мы сейчас рассматриваем, \widetilde{W} зависит только от θ ,

$$\widetilde{W} = s^2 \left(K + \frac{1}{2}z\kappa \right) \sin^2\theta - \frac{(g\mu_B H)^2 \sin^2\theta}{2(2Jz + 2K\cos 2\theta + z\kappa)}. \quad (13)$$

В модели (1) интегралом движения является также суммарная проекция полного спина S_z^{tot} , которая сохраняется из-за независимости лагранжиана \mathcal{L} от φ и пропорциональна $\partial\mathcal{L}/\partial(\partial\varphi/\partial t)$. Мы используем его ниже для расчета структуры инстантона.

Классическое основное состояние отвечает минимуму потенциальной энергии (13). При наличии магнитного поля появляется добавочный вклад в энергию, который можно описать как появление дополнительной анизотропии с осью трудного намагничивания вдоль магнитного поля (оси z). По сути, это и есть причина переориентации спинов (спин-флоп-перехода) с ростом магнитного поля. Для гамильтонiana (1) анализ минимума энергии (13) дает следующие результаты.

При малых значениях магнитного поля, $H < H_1$, в системе устойчива коллинеарная фаза $\Phi_{||}$, в которой $\theta = 0$ или π , а при $H > H_2$ устойчива спин-флоп-фаза Φ_{\perp} , в которой $\theta = \pi/2$. Известно, что при наличии одноионной анизотропии с константой $K > 0$ спин-флоп-переход происходит как переход первого рода при поле H_{sf} . Полный спин системы S_z изменяется при этом скачком на величину

$$\Delta S_z = 2sN\sqrt{(z\kappa + 2K)/(2Jz + z\kappa - 2K)}.$$

Характерные поля H_1 и H_2 потеря устойчивости коллинеарной фазы $\Phi_{||}$ и спин-флоп-фазы Φ_{\perp} , а так-

же поле спин-флоп-перехода H_{sf} для модели (13) определяются формулами

$$H_1 = \frac{s}{g\mu_B} \sqrt{(2K + z\kappa)(2Jz + z\kappa + 2K)}, \quad (14)$$

$$H_2 = H_1^2/H_{sf}, \quad (15)$$

$$H_{sf} = \frac{s}{g\mu_B} \sqrt{(2K + z\kappa)(2Jz + z\kappa - 2K)}. \quad (16)$$

В спин-флоп-фазе намагниченность $\mathbf{m} = m\mathbf{e}_z$ линейно растет с ростом поля,

$$m = \frac{H}{H_{ex}}, \quad H_{ex} = \frac{s(2Jz + z\kappa - 2K)}{g\mu_B}, \quad (17)$$

здесь H_{ex} — обменное поле АФМ для модели (1).

В интересующем нас случае $0 < K \ll J$ значения $H_2 < H_{sf} < H_1 \ll H_{ex}$. Если величина поля H превышает H_{ex} , то $m = 1$, $\mathbf{l} = 0$ и система достигает насыщения. Переход к насыщенному состоянию $\Phi_{||}$ с $\mathbf{l} = 0$ иногда называется спин-флип переходом. Если анизотропия носит чисто обменный характер, т. е. $K = 0$, то критические поля H_1 и H_2 совпадают и возникает вырожденный случай спин-флоп-перехода. При $K < 0$ (но, естественно, при $2K + z\kappa > 0$, чтобы эффективная анизотропия была легкоосной) значения $H_1 < H_2$, области устойчивости фаз $\Phi_{||}$ и Φ_{\perp} не перекрываются и переход $\Phi_{||} \leftrightarrow \Phi_{\perp}$ идет путем двух переходов второго рода через угловую фазу со значением $\theta \neq 0, \pi/2$. Мы будем рассматривать только случай перехода первого рода (АФМ с $K > 0$), так как переходы второго рода пропадают (намагниченность изменяется непрерывно) при сколь угодно малом отклонении направления поля от оси анизотропии. Таким образом, хотя энергия магнитной анизотропии W_a , которая входит в стандартную σ -модель, в равной степени определяется обоими анизотропными слагаемыми микроскопического гамильтонiana (1), характер поведения АФМ около спин-флоп-перехода зависит от соотношения между обменной и одноионной константами. Одновременный учет обоих типов анизотропии, так же как и выписанных в этой формуле следующих степеней по малым параметрам $(K, \kappa)/J$, важен для описания всех возможных фаз АФМ и переходов между ними. Без учета этих членов невозможно описание доменных стенок около соответствующих переходов. Их учет будет необходим и для анализа инстантонов.

3. ИНСТАНТОНЫ И ТУННЕЛИРОВАНИЕ В ЧИСТО ОДНООСНОЙ МОДЕЛИ АФМ

Амплитуда вероятности перехода из одного состояния в другое (пропагатор) может быть записана через интеграл по траекториям от фейнмановской экспоненты $\exp(i\mathcal{A}/\hbar)$, где \mathcal{A} — классическое механическое действие (см., например, [13]). Если речь идет о туннелировании, т. е. о движении в классически запрещенной области, значение механического действия в обычной механике частиц, а также в простейшей версии σ -модели для АФМ является чисто мнимым. Тогда в амплитуде перехода возникает вещественное выражение $\exp(-\mathcal{A}_{Eu}/\hbar)$, где величина $\mathcal{A}_{Eu} = -i\mathcal{A}$ есть евклидово действие. Вещественная фейнмановская экспонента в классически запрещенной области возникает автоматически, но переход от $i\mathcal{A}$ к \mathcal{A}_{Eu} удобно сделать с помощью перехода к мнимому времени $\tau = -it$. Для АФМ в магнитном поле лагранжиан (10) содержит слагаемые, линейные по производным, и евклидово действие может иметь как вещественную, так и мнимую части. Вероятность перехода из двух состояний с одинаковой энергией и различными значениями вектора \mathbf{l} , $\mathbf{l} = \mathbf{l}_+^{(0)}$ в состояние с $\mathbf{l} = \mathbf{l}_-^{(0)}$ пропорциональна величине $\exp(-\mathcal{A}_{Eu}/\hbar)$, и туннелирование естественным образом определяется минимумом вещественной части евклидова действия $\mathcal{A}_{Eu}[\mathbf{l}]$ при выполнении граничных условий $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{l}_\pm^{(0)}$ и $d\mathbf{l}/d\tau \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. Определенное таким образом значение $\mathcal{A}_{Eu}[\mathbf{l}]$ совпадает со стандартной тунNELьной экспонентой в обычной квантовой механике, а суммирование по траекториям, близким к экстремальной, в гауссовом приближении определяет предэкспоненциальный множитель, см. подробнее [13].

Для описания эффектов макроскопического квантового туннелирования мы используем функционал евклидова действия, который легко получить из формулы (10) и записать в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{Eu} = \int d\tau & \left\{ \frac{N\hbar^2}{2[2Jz + (2K + z\kappa)\cos^2\theta]} \left(\frac{\partial\theta}{\partial\tau} \right)^2 + \right. \\ & + \frac{N\hbar^2 \sin^2\theta}{2(2Jz + 2K\cos 2\theta + z\kappa)} \times \\ & \left. \times \left(\frac{\partial\varphi}{\partial\tau} - i\gamma H_z \right)^2 + NW_a \right\}. \quad (18) \end{aligned}$$

Здесь $W_a = W_a(\theta)$ — введенная выше (11) энергия магнитной анизотропии на один спин. Структура инстантона определяется общей системой уравнений Эйлера–Лагранжа второго порядка для угловых переменных θ и φ . Анализ такой задачи в

рамках простой версии σ -модели был проведен нами ранее [23], но его точное инстантонное решение, пригодное до самой точки спин-флоп-перехода, может быть построено и для обобщенной модели (18). Его исследование приводит к интересным физическим результатам, поэтому обсудим его.

В чисто одноосном случае лагранжиан (18) не зависит от φ , в силу чего в системе есть дополнительный к (12) нетеровский интеграл движения и задача является интегрируемой. В евклидовом случае этот интеграл движения Ω можно записать в виде

$$\Omega = \frac{\sin^2\theta}{2Jz + 2K\cos 2\theta + z\kappa} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial\tau} - i\gamma H \right) = \text{const.} \quad (19)$$

Инстантонам, описывающим туннелирование в коллинеарной фазе АФМ, должны отвечать решения, в которых $\theta \rightarrow 0, \pi$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. Следовательно, для них значение $\Omega = 0$, т. е. φ есть простая линейная функция τ , $\varphi = i\gamma H(\tau - \tau_1)$, где τ_1 — произвольная постоянная. С учетом этой формулы и евклидовой версии интеграла движения (12) уравнение для $\theta(\tau)$ может быть записано в квадратурах:

$$\frac{\hbar^2}{[2Jz + (2K + z\kappa)\cos^2\theta]} \left(\frac{d\theta}{d\tau} \right)^2 = 2W_a(\theta). \quad (20)$$

Отсюда легко получить решение вида

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{\sqrt{2Jz - K_{eff}} \operatorname{sh}[\omega_1(\tau - \tau_0)]}{\sqrt{(2Jz - K_{eff}) \operatorname{ch}^2[\omega_1(\tau - \tau_0)] + K_{eff}}}, \\ \sin\theta &= \frac{\sqrt{2Jz}}{\sqrt{(2Jz - K_{eff}) \operatorname{ch}^2[\omega_1(\tau - \tau_0)] + K_{eff}}} \end{aligned} \quad (21)$$

где $\omega_1 = \gamma H_1$, τ_0 — произвольная постоянная. Это решение описывает изменение угла $\theta = \theta_0(\tau)$ на π при изменении τ от $\tau = -\infty$ до $\tau = \infty$, с асимптотическим поведением $\sin\theta_0 \propto \exp(-\gamma H_1|\tau|)$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. Такое поведение характерно для 180-градусного инстантона, но с учетом растущей зависимости $\exp[\varphi(\tau)]$ необходимо исследовать компоненты вектора \mathbf{l} . Для них в инстантоне вида (21) получаются формулы

$$\begin{aligned} l_x &= \operatorname{ch}[\gamma H(\tau - \tau_1)] \sin\theta_0, \\ l_y &= i \operatorname{sh}[\gamma H(\tau - \tau_1)] \sin\theta_0 \end{aligned} \quad (22)$$

с более медленным, чем в формулах (21), асимптотическим поведением типа $l_x, l_y \propto \exp[-\gamma(H_1 - H)\tau]$. Отметим наличие двух независимых произвольных постоянных, τ_0 и τ_1 , в этом решении.

Полученное инстантонное решение имеет асимптотики, отвечающие 180-градусному инстантону,

$l_{x,y} \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$, для всей области полей $H < H_1$, т. е. при всех значениях поля, меньших, чем поле неустойчивости коллинеарной фазы с $\mathbf{l} = \pm\mathbf{e}_z$. Получилось, что 180-градусный инстантон существует даже в той области полей $H_{sf} < H < H_1$, где коллинеарное состояние метастабильно, несмотря на то что в этой области эффективная энергия \widetilde{W} меняет знак. Это поведение принципиально отличается от того, что характерно для доменных стенок около спин-флоп-перехода [28, 29]. Формальное сходство между инстантонами и солитонами типа доменных стенок иногда является полезным, в частности, анализ решений для инстантонов и доменных стенок в простейшей (лоренц-инвариантной) версии сигма-модели АФМ полностью аналогичен. Здесь же мы видим, что структуры инстантонов и доменных стенок существенно различны. Структура стенки $\theta = \bar{\theta}(\xi)$, где ξ — координата, определяется уравнением

$$A \left(\frac{d\bar{\theta}}{d\xi} \right)^2 = 2\widetilde{W}(\bar{\theta}),$$

т. е. содержит полную эффективную энергию \widetilde{W} , перенормированную магнитным полем, а не энергию кристаллической анизотропии W_a , как для инстантона в чисто одноосной модели, см. уравнение (20). Поэтому для структуры доменной стенки в полной мере проявляется тот факт, что в области спин-флоп-перехода меняется зависимость эффективной энергии \widetilde{W} от θ . В области полей $H \leq H_{sf}$ в центре стенки, около значения $\bar{\theta}(\xi) \approx \pi/2$, формируется плато с шириной, пропорциональной $\ln[H_{sf}/(H_{sf} - H)]$, а при $H \rightarrow H_{sf}$ 180-градусная стенка распадается на две 90-градусные межфазные границы, разделяющие коллинеарную и спин-флоп-фазы [28, 29]. По сути, эти различия в поведении инстантонов и стенок и представляют собой наиболее яркое проявление особенностей инстантонов и туннелирования для АФМ в сильном магнитном поле. В отличие от случая нулевого поля, когда простая версия σ -модели обладает лоренц-инвариантностью, динамика АФМ в поле является гироскопической. Указанный простой пример показал, что гироскопическое слагаемое может существенно подавлять статическую перенормировку энергии анизотропии магнитным полем.

Указанная особенность проявляется и в том, что как $\theta_0(\tau)$, так и евклидово действие для решения вида (21) или (22) не зависят от H . Минимая часть $\mathcal{A}_{Eu}^{(0)}$ равна нулю, а вещественная такая же, как и при $H = 0$, определяется формулой

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{Eu}^{(0)} = & s\hbar N\sqrt{2} \times \\ & \times \ln \left[\frac{\sqrt{z(2J + \varkappa) + 2K} + \sqrt{2K + z\varkappa}}{\sqrt{z(2J + \varkappa) + 2K} - \sqrt{2K + z\varkappa}} \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Простейшей версии σ -модели отвечает предел $K_{eff}/J \rightarrow 0$, при этом выражение (23) переходит в полученное ранее [23]

$$\mathcal{A}_{Eu}^{(0)} = 2s\hbar N\sqrt{(2K + z\varkappa)/2Jz}.$$

Для чисто одноосного АФМ с лагранжианом (18) возможно точное вычисление предэкспоненциального множителя, но мы не будем останавливаться на деталях этого расчета, см. ниже разд. 5. Отметим только, что в этом случае, как и при малых полях, предэкспоненциальный множитель пропорционален A_{Eu}/\hbar , а не $\sqrt{A_{Eu}/\hbar}$, как обычно. Такой дополнительный большой параметр появляется в любой задаче с нетеровским интегралом вида (19) по той причине, что инстантонное решение (22) в модели с $\omega_p = 0$ содержит два непрерывных произвольных параметра, τ_1 и τ_0 , см. подробнее [13]. Важно также отметить, что в одноосной модели не только туннельная экспонента, но и предэкспоненциальный фактор не зависят от магнитного поля.

Таким образом, в чисто одноосной модели АФМ расщепление уровней Δ не зависит от магнитного поля, даже при учете флуктуационного детерминанта. Этот факт согласуется с результатом точного квантовомеханического рассмотрения. Действительно, в чисто одноосной модели (1) гамильтониан системы коммутирует с z -проекцией полного спина \hat{S}_z^{tot} . Следовательно, состояния системы характеризуются определенным значением $S_z^{tot} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Туннельно расщепленному дублету отвечает $S_z^{tot} = 0$, и магнитное поле никак не влияет на энергию этих состояний. Отметим, что в этих терминах спин-флоп-переход связан с тем, что при $H > H_{sf}$ нижним уровнем становится уровень со значением $S_z^{tot} > 0$. Это приводит к скачкообразному изменению S_z^{tot} при увеличении магнитного поля, что отвечает квантовому аналогу спин-флоп-перехода, который существует для малых частиц АФМ и даже такого существенно квантового объекта как спиновая пара и обсуждался нами в работе [24]. Из-за сохранения S_z^{tot} отсутствует туннельное смешивание коллинеарного и спин-флоп-состояний, которое можно было бы ожидать в точке спин-флоп-перехода, когда энергии этих фаз в классическом пределе сравниваются. Формально, это связано с отсутствием 90-градусных инстантонов в одноосной модели АФМ (1).

Таким образом, чисто одноосная модель (1) недостаточна для описания всех возможных туннельных эффектов в АФМ, и необходимо рассмотрение более общих моделей, включающих анизотропию в базисной плоскости. Как мы покажем ниже, условие того, что анизотропией в базисной плоскости можно пренебречь, при немалых полях имеет вид

$$K_p \ll (H_{sf}^2 - H^2)/J.$$

Это условие при любой слабой анизотропии в базисной плоскости заведомо нарушается около спин-флоп-перехода, когда $H \rightarrow H_{sf}$. Таким образом, для описания интересующей нас области необходимо рассматривать модели с $K_p \neq 0$, однако учет анизотропии в базисной плоскости значительно усложняет построение инстанционных решений.

4. ИНСТАНТОННЫЕ РЕШЕНИЯ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ С РОМБИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Учет анизотропии в базисной плоскости проведем максимально простым способом, считая, что лагранжиан имеет вид (4), но в энергии анизотропии присутствует зависимость от переменной φ , которую мы выберем в простейшем виде:

$$W_a(\theta, \varphi) = s^2 \sin^2 \theta (K_u + K_p \sin^2 \varphi), \quad (24)$$

где константы $K_u = K_{eff}$ и K_p описывают одноосную анизотропию и анизотропию в базисной плоскости (x, y) . При $K_u > 0$ и $K_p > 0$ оси z и y являются соответственно осями легкого и трудного намагничивания. В этом приближении не учитывается анизотропия восприимчивости АФМ в базисной плоскости (x, y) , которая возникает при последовательном построении лагранжиана. Однако наши оценки показали, что ее учет (в отличие от анизотропии по отношению к оси z , которая принципиально важна) не влияет на поведение системы около спин-флоп-перехода и приводит лишь к несущественным поправкам, малым в меру малости K_p/J .

В случае лагранжиана (18) с учетом общего вида энергии анизотропии (24) структура инстантона определяется общей системой двух уравнений Эйлера–Лагранжа второго порядка для переменных $\theta(\tau)$ и $\phi(\tau)$, которые могут быть комплексными. Таким образом, в задаче есть четыре вещественные переменные. Обсудим принципиальную возможность построения инстанционных решений такой системы.

4.1. Инстантоны в АФМ как решения динамической задачи

Для анализа инстанционных решений оказывается полезной аналогия с проблемой поиска сепаратрисных решений конечномерных динамических систем [25, 39, 41]. Границные условия для данной задачи имеют вид $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{l}_\pm^{(0)}$, $d\mathbf{l}/d\tau \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. Как уже отмечалось выше, эта задача похожа на задачу о движущейся доменной стенке, которая описывается решениями вида $\mathbf{l} = \mathbf{l}(\xi)$ (где $\xi = x - vt$, v — скорость стенки) с такими же граничными условиями при $\xi \rightarrow \pm\infty$. Следовательно, инстантону, как и солитону типа доменной стенки, отвечает гетероклиническая сепаратрисная траектория динамической системы (18), которая соединяет пару эквивалентных минимумов $\mathbf{l}_\pm^{(0)}$ потенциала $\tilde{W}(\mathbf{l})$. Для задач с более чем одной степенью свободы построить такое решение удается далеко не всегда. Для случая инстантонов ситуация еще хуже, чем для солитонов, так как решения могут не быть вещественными, при этом число степеней свободы удваивается.

Произвольное решение уравнений движения данной динамической системы можно построить, если эта система является интегрируемой. Если даже вектор \mathbf{l} вещественный (что в принципе может быть не выполнено при наличии поля), мы имеем систему с двумя степенями свободы. Для ее интегрируемости должны существовать два независимых интеграла движения. Один из них легко записать — это евклидов аналог полной энергии (12). Второй нетеровский интеграл движения существует только для случая, когда анизотропия является чисто одноосной, т. е. когда \mathcal{L}_{Eu} не зависит от φ . Мы использовали этот интеграл движения выше для построения инстанционных решений для чисто одноосного АФМ, и получили, что такая модель недостаточна для описания реального АФМ вблизи спин-флоп-перехода. Поэтому надо исследовать модель без очевидного интеграла движения.

Анализ динамических систем с более чем одной степенью свободы, в частности, построение интегрируемых систем, более ста лет является одной из важнейших задач аналитической динамики. Эта проблема интенсивно исследуется и сейчас [42]. Среди интегрируемых систем известны и модели динамики единичного вектора, например, классическая задача Неймана [43] о движении материальной точки по сфере в поле потенциала, который является квадратичной функцией декартовых координат, а также ее обобщения для ряда других полиномиальных потенциалов [44]. Однако единственное из-

вестное нам обобщение задачи Неймана связано с присутствием гиротропного слагаемого, отвечающего полю монополя [44, 45], что в физике магнетизма соответствует модели ферромагнетика при конечной раскомпенсации спинов подрешеток [46]. Интересующая нас модель двухосного АФМ в магнитном поле, по-видимому, не является интегрируемой ни при каких нетривиальных видах энергии анизотропии $W_a = W_a(\theta, \varphi)$, зависящей от φ .

Уместно отметить, что в случае ферромагнетика задача существенно упрощается. Для любой модели ферромагнетика ее можно свести к анализу стандартной (вещественной) интегрируемой гамильтоновой системы с двумя степенями свободы и дополнительным интегралом движения [25, 41]. Для АФМ с энергией анизотропии вида (24) можно также провести значительное упрощение, заметив, что эта модель допускает переход к чисто вещественной гамильтоновой системе с двумя степенями свободы. Легко видеть, что подстановка $\varphi = if(\tau)$, $\theta = \theta(\tau)$ с вещественными функциями $f(\tau)$, $\theta(\tau)$ дает для функций f, θ систему двух вещественных уравнений. Кроме того, такая подстановка делает вещественным и евклидов лагранжиан. В переменных f, θ лагранжиан можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Eu} = & \frac{N\hbar^2}{2[2Jz + (2K + z\kappa) \cos^2 \theta]} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right)^2 + \\ & + \frac{N\hbar^2 \sin^2 \theta}{2(2Jz + 2K \cos 2\theta + z\kappa)} \left(\frac{\partial f}{\partial \tau} - \gamma H \right)^2 + \\ & + Ns^2 \sin^2 \theta (K_u - K_p \operatorname{sh}^2 f). \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, искомые инстанционные решения будут иметь только вещественную компоненту для θ и мнимую для φ , а величина евклидова действия, вычисленная на этой траектории, будет вещественной. Более общее решение, как и для ферромагнетика, можно получить комплексным сдвигом аргумента, считая, что константа τ_0 , которая всегда существует в инстанционном решении, имеет мнимую часть [25]. Таким образом, как и в ферромагнетике, для АФМ в магнитном поле мы приходим к анализу вещественной гамильтоновой системы с двумя степенями свободы. Однако в АФМ для этой системы известен только один первый интеграл, что не решает проблему интегрируемости этой задачи в общем виде. Поэтому следует обсудить приближенные методы решения этой задачи.

Прежде всего установим асимптотическое поведение $f(\tau)$ и $\theta(\tau)$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. Рассмотрим для определенности нижний предел $\tau \rightarrow -\infty$, считая, что при этом $\theta \rightarrow 0$. Тогда уравнение $\delta\mathcal{L}_{Eu}/\delta\theta = 0$ в

линейном приближении по θ принимает вид уравнения Шредингера для движения частицы в потенциале, вид которого определяется функцией $f(\tau)$ и ее производной:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} + \left[\gamma^2 H_1^2 - \left(\frac{\partial f}{\partial \tau} - \gamma H \right)^2 - \right. \\ \left. - \gamma^2 H_p^2 \operatorname{sh}^2 f \right] \theta = 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь мы ввели характерное значение поля H_p , определяющее величину анизотропии в базисной плоскости,

$$H_p = \frac{s\sqrt{2K_p(2Jz + z\kappa + 2K)}}{g\mu_B}. \quad (27)$$

Потенциал в этом уравнении представляет собой сумму двух квадратов с неположительными коэффициентами, а условие $\theta \rightarrow 0$ требует, чтобы выражение в квадратных скобках было положительным при $\tau \rightarrow -\infty$. При $K_p = 0$ это отвечает неограниченному росту f по закону $f = \gamma H \tau$, но при $K_p \neq 0$ величина $[(\partial f / \partial \tau) - \gamma H]^2 + \gamma^2 H_p^2 \operatorname{sh}^2 f$ может быть конечной при $\tau \rightarrow -\infty$ только в том случае, когда предел $\lim_{\tau \rightarrow -\infty} f(\tau)$ существует и равен конечной величине f_0 . Такое поведение, $f(\tau) \rightarrow \pm f_0$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$, подтверждается численным решением задачи. Тогда для θ существует асимптотика $\theta \sim \exp[\alpha(\tau - \tau_0)]$ с некоторыми значениями параметров τ_0 и $\alpha > 0$. Сохраняя ведущие слагаемые в системе уравнений для f, θ при $\tau \rightarrow -\infty$, ее можно переписать в виде системы алгебраических уравнений для α и $\operatorname{sh} f_0$:

$$-\alpha^2 + \gamma^2 [(H_1^2 - H^2) - H_p^2 \operatorname{sh}^2 f_0] = 0, \quad (28a)$$

$$2\alpha h + \gamma^2 H_p^2 \operatorname{sh} f_0 \operatorname{ch} f_0 = 0. \quad (28b)$$

Из второго уравнения легко видеть, что $f_0 < 0$ и

$$\begin{aligned} 2H_p^2 \operatorname{sh}^2 f_0 = & \sqrt{(H_p^2 + 4H^2)^2 + 8H^2(H_1^2 - H^2)} - \\ & - (H_p^2 + 4H^2). \end{aligned} \quad (29)$$

Таким образом, величина f_0 определена и $\alpha > 0$ во всем интервале полей вплоть до точки неустойчивости коллинеарной фазы $H = H_1$. Анализ асимптотик показывает также существенное отличие решения для ромбического АФМ и построенного выше решения для $K_p = 0$. Для чисто одноосной модели потенциал в уравнении (26) равен нулю, что может быть только при неограниченном росте функции $f(\tau)$ при $\tau \rightarrow \infty$. Однако уже сколь угодно малая ромбическая анизотропия $K_p \neq 0$ приводит к конечным значениям $f(\pm\infty)$. Следовательно, найденное в

предыдущем разделе решение для $K_p = 0$ не может служить нулевым приближением для построения теории возмущений по K_p . Заметим, что для случая малой ромбичности, $H_p^2 \ll \min(H^2, H_1^2)$, не очень близко к точке спин-флоп-перехода, $H_p^2 \leq H_1^2 - H^2$ и $H_1^2 - H^2 \leq H_p^2$, величина f_0 логарифмически расходится при $H_p \rightarrow 0$:

$$f_0 = \ln \frac{2H\sqrt{H_1^2 - H^2}}{H_p\sqrt{H_p^2 + 4H^2}}. \quad (30)$$

С другой стороны, в непосредственной близости к спин-флоп-переходу $H \rightarrow H_1$ и при умеренной величине H_p величина f_0 мала:

$$f_0 = -2\sqrt{\frac{H_1^2(H_1^2 - H^2)}{H_p^2(H_p^2 + 4H^2)}}. \quad (31)$$

Следует отметить, что параметры асимптотики решения α и f_0 в существенной степени отражают основную динамику системы. Как мы покажем ниже, величина $\partial\theta/\partial\tau \leq \alpha \sin\theta$ при всех τ . В наиболее интересном случае, $H \rightarrow H_{sf}$, значение производной в центральной части инстантона (область плато) может даже быть значительно меньше, чем это требуется величиной α , см. ниже. Что касается f_0 , то эта величина является максимальным значением функции $f(\tau)$, см. ниже рис. 2, и при малом f_0 эта функция $f(\tau) \ll 1$ при всех τ . Далее мы используем факт малости $f(\tau)$ для получения приближенного решения в области спин-флоп-перехода.

4.2. Область полей вблизи спин-флоп-перехода. Коллинеарная фаза

При ненулевой ромбической анизотропии переменная f мала в меру малости величины $(H_1^2 - H^2)/H_p^2$, см. уравнения (26) или (31). Поэтому для нахождения решения задачи в области спин-флоп-перехода можно ограничиться в выражении для энергии анизотропии только квадратичным по f членом. Поскольку в этой области мало также значение $\alpha \ll \gamma H$, которое определяет масштаб производных, можно также пренебречь слагаемым, пропорциональным $(\partial f/\partial\tau)^2$ по сравнению с $\gamma H(\partial f/\partial\tau)$. Тогда лагранжиан примет вид

$$\mathcal{L}_{Eu} = \frac{\hbar^2 N}{4zJ} \left\{ F(\theta) \left(\frac{\partial\theta}{\partial\tau} \right)^2 - 2\gamma H \sin^2\theta \frac{\partial f}{\partial\tau} G(\theta) + \sin^2\theta [H_1^2 - H^2 G(\theta)] - H_p^2 f^2 \sin^2\theta \right\}, \quad (32)$$

где для сокращения записи введены обозначения

$$F(\theta) = \frac{2Jz}{2Jz + (2K + z\kappa) \cos^2\theta}, \quad (33)$$

$$G(\theta) = \frac{2Jz}{2Jz + z\kappa + 2K \cos 2\theta}. \quad (34)$$

Для лагранжиана (32) легко выписать уравнение для f , из которого получаем соотношение

$$f = -\frac{H}{\gamma H_p^2} \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{d[G(\theta) \sin^2\theta]}{d\tau}. \quad (35)$$

Подставляя это выражение в формулу (32), получим эффективный лагранжиан, описывающий в замкнутом виде динамику переменной $\theta = \theta(\tau)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{Eu} = & \frac{\hbar^2 N}{4Jz} \times \\ & \times \left\{ \left[F(\theta) + \frac{H^2}{H_p^2} \left(2G(\theta) \cos\theta + \sin\theta \frac{dG(\theta)}{d\theta} \right)^2 \right] \left(\frac{\partial\theta}{\partial\tau} \right)^2 + \right. \\ & \left. + \gamma^2 \sin^2\theta [H_1^2 - H^2 G(\theta)] \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Этот лагранжиан можно записать в форме, стандартной для обычной механики

$$\mathcal{L}_{Eu} = \frac{1}{2} M_{eff}(\theta) \left(\frac{\partial\theta}{\partial\tau} \right)^2 - U(\theta), \quad (37)$$

где $U(\theta)$ — потенциал, $M_{eff}(\theta)$ — эффективная масса, которая в данном случае зависит от координаты θ . Мы запишем входящие в него выражения M и U в главном приближении по малым параметрам $(K, z\kappa)/Jz$. Фактически, эти малые параметры нужно учитывать только в выражении для U , в котором слагаемое, пропорциональное $\sin^2\theta$, обращается в нуль в точке спин-флопа-перехода $H = H_{sf}$. В результате получаем

$$M = \frac{\hbar^2 N}{4Jz} \left(1 + \frac{4H^2}{H_p^2} \cos^2\theta \right), \quad (38)$$

$$\begin{aligned} U = & \frac{\gamma^2 \hbar^2 N}{4Jz} \times \\ & \times \sin^2\theta [H_{sf}^2 - H^2 + (H_1^2 - H_{sf}^2) \cos^2\theta]. \end{aligned} \quad (39)$$

Инстантонное решение и евклидово действие для лагранжиана (36) могут быть вычислены в виде квадратур. Инстантонная траектория в неявном виде определяется выражением

$$\begin{aligned} \gamma\tau(\theta) = & \int_{-1}^{\cos\theta} \frac{dx}{1-x^2} \times \\ & \times \sqrt{\frac{1+4(H^2/H_p^2)x^2}{H_{sf}^2 - H^2 + (H_1^2 - H_{sf}^2)x^2}}. \end{aligned} \quad (40)$$

Можно показать, что это решение имеет смысл только при $H < H_{sf}$. Оно теряет смысл в области $H_{sf} < H < H_1$, где коллинеарная фаза существует как метастабильная. Это существенно отличает АФМ с анизотропией в базисной плоскости от чисто одноосного АФМ с $K_p = 0$. Формулу для евклидова действия, определяющего туннельные переходы в коллинеарной фазе, существующей при $H < H_{sf}$, можно записать в виде определенного интеграла

$$\mathcal{A}_{Eu} = \frac{g\mu_B \hbar N}{4Jz} \int_{-1}^1 dx \times \sqrt{\left(1 + \frac{4H^2}{H_p^2}x^2\right) [H_{sf}^2 - H^2 + (H_1^2 - H_{sf}^2)x^2]}. \quad (41)$$

Мы не будем приводить точные, но достаточно громоздкие выражения для траектории и действия через неполные эллиптические интегралы, представив их на рисунках. Особо существенное упрощение задачи возникает при малых H^2/H_p^2 . Далее мы также ограничимся только наиболее интересным случаем малого значения параметра $(H_{sf}^2 - H^2)/H_{sf}^2$.

Для достаточно большой анизотропии в базисной плоскости, т. е. при выполнении условия $H_p \gg H \sim H_{sf}$, значительно более жесткого, чем использованное при получении общего выражения (41), интегралы упрощаются и можно выписать замкнутое выражение для евклидова действия для 180-градусного инстантона:

$$\mathcal{A}_{Eu} = \frac{g\mu_B \hbar N}{4Jz} \left(\sqrt{H_1^2 - H^2} + \frac{1}{2} \frac{H_{sf}^2 - H^2}{\sqrt{H_1^2 - H_{sf}^2}} \times \ln \left| \frac{\sqrt{H_1^2 - H^2} + \sqrt{H_1^2 - H_{sf}^2}}{\sqrt{H_1^2 - H^2} - \sqrt{H_1^2 - H_{sf}^2}} \right| \right). \quad (42)$$

Итак, в пределе $H_p \gg H_{sf}$ зависимость евклидова действия \mathcal{A}_{Eu} от магнитного поля такая же, как для энергии доменной стенки, и \mathcal{A}_{Eu} не зависит от H_p . Напомним, что при $H_p/H_{sf} \rightarrow 0$ зависимости этих двух величин от параметров задачи принципиально различались. Анализ интеграла (41) показал, что при конечном значении H_p/H_{sf} наблюдаются существенные отклонения от простейшего асимптотического выражения (42), см. рис. 1. Общей тенденцией является достаточно заметное увеличение \mathcal{A}_{Eu} при уменьшении значения H_p , в то время как энергия доменной стенки не зависит от H_p .

Обсудим теперь структуру инстантонов. Инстантонное решение может быть записано в явном виде

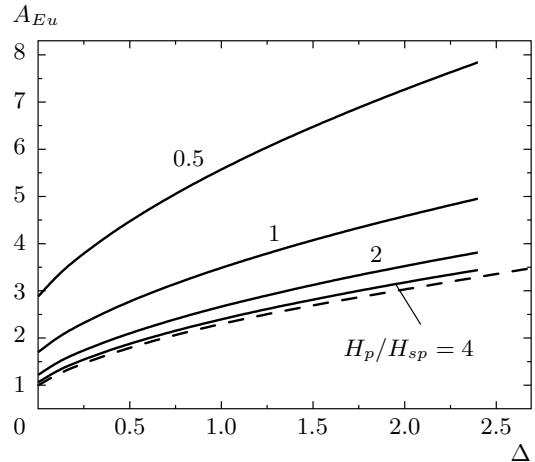


Рис. 1. Зависимость евклидова действия (в единицах $(g\mu_B \hbar N/4Jz)\sqrt{(H_1^2 - H_{sf}^2)}$) от магнитного поля для различных значений параметра H_p/H_{sf} ; $\Delta = \sqrt{(H_{sf}^2 - H^2)/(H_1^2 - H_{sf}^2)}$. Сплошные линии представляют последовательный расчет значения \mathcal{A}_{Eu} на основе формулы (41), штриховая линия представляет асимптотический результат (42)

при $H_p \gg H \sim H_{sf}$. Оно имеет ту же структуру, что и для доменной стенки в АФМ:

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{(H_{sf}^2 - H^2)} \sinh \omega_0 \tau}{\sqrt{H_1^2 - H^2 + (H_{sf}^2 - H^2) \cosh^2 \omega_0 \tau}}. \quad (43)$$

Здесь использовано обозначение $\omega_0 = \gamma \sqrt{H_1^2 - H^2}$. Величина ω_0 имеет простой физический смысл нижней частоты линейного антиферромагнитного резонанса. Уже из этого предельного решения видно, что поведение функций $l_z(\tau), f(\tau)$ в области спин-флоп-перехода существенно отличается от стандартной формы инстантона, которая задается, например, выражениями типа (22). Анализ формулы (43) показывает, что при $H_{sf}^2 - H^2 \ll H_{sf}^2$ функция $\cos \theta(\tau)$ содержит два достаточно резких подъема, с характерной шириной порядка $1/\omega_0$, разделенных интервалом $2T$ (плато). Они появляются из-за существенно немонотонной зависимости эффективного потенциала $U(x)$, у которого вблизи спин-флоп-перехода есть почти эквивалентные минимумы при $\theta = 0, \pi$ и $\theta = \pm\pi/2$, отвечающие коллинеарной и спин-флоп-фазам. Анализ общего решения (40), а также численное интегрирование полной задачи с двумя степенями свободы показывают, что такое же поведение характерно

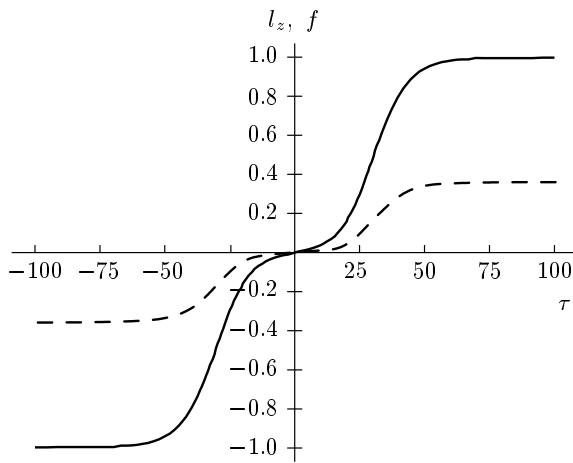


Рис. 2. Инстантонное решение $l_z(\tau)$, $f(\tau)$, полученное на основании численного решения полной системы уравнений для лагранжиана (25). Сплошной линией обозначено $l_z(\tau)$, штриховой — $f(\tau)$; $H_1^2/H_{ex}^2 = 0.1$, $H_p = H_1$, $\Delta = 10^{-5}$, величина τ измеряется в единицах zsJ/\hbar

и при произвольном соотношении между H_p и H , см. рис. 2. Расстояние между этими подъемами легко получить аналитически из уравнения траектории (40), взяв в качестве пределов интегрирования $x = \pm 1/\sqrt{2}$, при $H \rightarrow H_{sf}$ это расстояние расходится как $\ln|H - H_{sf}|/H_{sf}$. Таким образом, при $H \rightarrow H_{sf}$ 180-градусный инстантон распадается на два 90-градусных инстантона, которые описывают туннельные переходы между двумя различными коллинеарными состояниями с $\theta = 0, \pi$ и спин-флоп-состояниями, в которых $\theta = \pm\pi/2$, $\varphi = 0$.

Для такого 90-градусного инстантона при произвольном соотношении между H_p и H интеграл в (40) выражается через элементарные функции, но явная формула для связи θ и τ весьма громоздкая, и мы ее не приводим. Отметим лишь, что при $H_p \leq H$ этот инстантон, в отличие от 90-градусной доменной стенки в АФМ, разделяющей коллинеарную и спин-флоп-фазы, характеризуется асимметричным поведением при $\theta = 0, \pi$ и при $\theta = \pm\pi/2$, соответственно с асимптотиками $\exp[\pm\omega_0(H_{sf}/H_p)\tau]$ и $\exp(\pm\omega_0\tau)$. Выражение для евклидова действия 180-градусного инстантона \mathcal{A}_{Eu} при $H \rightarrow H_{sf}$ равно удвоенному значению евклидова действия 90-градусного инстантона $\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$, при $H = H_{sf}$ величина $\mathcal{A}_{Eu} = 2\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$, где

$$\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)} = \frac{s\hbar N H_p^2 \sqrt{(2K + z\zeta)K}}{12JzH_{sf}^2} \times \\ \times \left[\left(1 + \frac{4H_{sf}^2}{H_p^2} \right)^{3/2} - 1 \right]. \quad (44)$$

Тут надо отметить, что значение евклидова действия инстантона вблизи спин-флоп-перехода значительно меньше, чем при малых полях, оно содержит малый множитель K/Jz , а не $\sqrt{K/Jz}$, как при малых полях. Это статический эффект, поскольку такое же свойство есть и для энергии доменных стенок, однако формула (44) содержит также и динамический фактор $1 + 4H_{sf}^2/H_p^2$, увеличивающий значение \mathcal{A}_{Eu} . Суммарное действие этих двух факторов приводит к сложной зависимости $\mathcal{A}_{Eu}(H)$. Напомним, что общие уравнения (41) и (44) были получены при не очень жестком предположении $H_p^2 \gg H_{sf}^2 - H^2$, и вблизи спин-флопа они применимы при достаточно малых $H_p \ll H_{sf}$, когда динамический фактор существен.

Важно отметить, что записать решение в квадратурах удалось благодаря редукции фазового пространства исходной гамильтоновой системы (25) с двумя степенями свободы, которая, скорее всего, не является интегрируемой, к интегрируемой механической системе с одной степенью свободы (36). Такое упрощение может приводить к потере важных физических эффектов, поэтому мы проверили его, установив справедливость неравенств, которые были использованы при получении уравнения (36), а также сравнив результаты для евклидова действия (41) и структуры инстантона (40) с данными численного решения полной системы (25), см. ниже.

Главные сделанные нами приближения — это использование неравенств $f \ll 1$ и $(\partial f / \partial \tau) \ll \gamma H$. С помощью явного решения для лагранжиана (40) и соотношения (35) можно показать, что оба этих неравенства выполнены при

$$H_p^2 < H \sqrt{H_{sf}^2 - H^2}.$$

Поскольку величина

$$H_1^2 - H_{sf}^2 \approx s^2 K^2 / (g\mu_B)^2 \ll H_{sf}^2 \approx 4zs^2 K_{eff} J / (g\mu_B)^2$$

пропорциональна стандартному малому параметру АФМ K_{eff}/J , даже при достаточно малом, но разумном для ромбического АФМ значении анизотропии в базисной плоскости, $K_{eff}^2/J \ll K_p \ll K_{eff}$, это соотношение выполнено в интересующей нас области около спин-флоп-перехода.

Численное нахождение сепаратрисных решений динамических систем, описывающих солитоны (см. [44, 45]) или инстантоны [25, 41], представляет собой достаточно сложную математическую задачу. Поиск инстантонного решения и евклидова действия для полной задачи (25) упрощается тем, что инстантонные решения отвечают минимуму евклидова лагранжиана (18). Поэтому, в отличие от работ [25, 41], мы использовали вариационную схему поиска экстремума для дискретной версии этого лагранжиана. Область интегрирования ограничивается интервалом $[-T_0, T_0]$ и разбивается на $2K = 2T_0/h$ отрезков одинаковой длины h , нумеруемых далее целочисленным индексом k . Интеграл представляется в виде суммы по всем этим отрезкам от дискретной версии лагранжиана, в котором производные для каждого отрезка заменяются конечными разностями:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} \rightarrow \frac{\theta_{k+1} - \theta_k}{h}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \rightarrow \frac{\varphi_{k+1} - \varphi_k}{h},$$

а локальные функции — средними значениями на отрезке:

$$F(\theta, \varphi) \rightarrow \frac{1}{2}[F(\theta_{k+1}, \varphi_{k+1}) + F(\theta_k, \varphi_k)].$$

Границные условия выбираются в виде $\theta_{-K} = \pi$, $\theta_K = 0$, $\varphi_{\pm K} = \pm f_0$. Значения f_0 получены из точного выражения (29). (Мы проверили, что выбор свободных граничных условий для φ приводит к тому же решению.) Далее записываются условия экстремума евклидова действия относительно переменных $\{\theta_k, \varphi_k\}$. Полученная система нелинейных уравнений решается численно методом Ньютона с оптимальным выбором шага по ньютоновскому направлению. В качестве начального приближения для θ_k достаточно выбирать приближенное инстантонное решение, полученное с помощью формул (21) и (35) для φ_k .

Следует отметить, что плотность лагранжиана как функция от τ , вычисленная для экстремально-го решения, на концах области интегрирования экспоненциально убывает. Достаточно, чтобы выполнялось $T \lesssim T_0$, где T — максимальный временной масштаб изменения динамических переменных. Далее результат экстраполируется к бесконечным пределам суммирования путем последовательного малого расширения интервала $[-T_0, T_0]$ при неизменном шаге. И, наконец, проводится измельчение шага, т. е. по построенному решению для шага h строится решение для шага $h/2$ и так далее, и полученные значения евклидова действия экстраполируются к $h = 0$.

Найденные численно зависимости $l_z(\tau)$ и $f(\tau)$ приведены на рис. 2. Они хорошо согласуются с результатами изложенной выше приближенной теории. В частности, ясно видно наличие двух подъемов на графике $l_z(\tau)$.

4.3. Инстантоны в спин-флоп-фазе АФМ

При значении поля $H > H_{sf}$ становится выгодной спин-флоп-фаза АФМ. В этой фазе для чисто изотропной модели АФМ присутствует непрерывное вырождение основного состояния и обычна схема квантового туннелирования не реализуется. Однако стандартное инстантонное туннелирование возможно для конечной анизотропии в базисной плоскости, в которой вектор **I** перпендикулярен оси легкого намагничивания АФМ. Для ромбического АФМ это состояние двукратно вырождено и значения угловых переменных можно выбрать в виде $\theta = \pm\pi/2$, $\varphi = 0$. Рассмотрим инстантонные решения в спин-флоп-фазе АФМ при $H_{sf} < H < H_{ex}$.

Как показано в работах [18, 23, 47], в АФМ при наличии магнитного поля возможно плоское инстантонное решение, в котором вектор **I** — вещественный и поворачивается в плоскости, перпендикулярной направлению поля **H**. Эта ситуация исключительная, плоский разворот в других плоскостях симметрии АФМ невозможен [23]. Итак, в спин-флоп-фазе может существовать плоское решение с разворотом **I** в плоскости (z, y) , в котором $\theta = \pi/2$ и $\varphi = \varphi(\tau)$. Анализ его сводится к интегрируемой системе с одной степенью свободы и может быть проведен точно. В нем евклидово действие $\mathcal{A}_{Eu}^{(pl)}$ имеет вещественную и мнимую части,

$$\mathcal{A}_{Eu}^{(pl)}(H) = 2s\hbar N \sqrt{\frac{K_p}{Jz}} \pm \frac{i\pi\hbar g\mu_B H N}{2Jz},$$

знак «±» отвечает двум инстантонным путям с различным направлением разворота вектора **I**. Здесь происходит интерференция этих двух путей, которая приводит к немонотонной зависимости туннельного расщепления уровней от магнитного поля [18, 23, 47]. Однако для плоского решения вещественная часть \mathcal{A}_{Eu} не зависит от магнитного поля и ее значение при $H \rightarrow H_{sf}$ заведомо больше, чем в коллинеарной фазе (41). Следовательно, вблизи спин-флоп-перехода нужно исследовать неплоское инстантонное решение, подобное (40), в котором $\varphi = if(\tau)$, $\theta = \theta(\tau)$.

Исследование неплоских инстантонаов в приближении $f \ll 1$ проводится практически так же, как

и для коллинеарной фазы, описанной в предыдущем подразделе. Более того, можно непосредственно пользоваться эффективным лагранжианом (37) с теми же параметрами (38), что и ранее. Отличие состоит лишь в характере граничных условий, которые имеют вид $\varphi = 0, \theta \rightarrow \pm\pi/2$ при $\tau \rightarrow \pm\infty$. В результате выражение, описывающее в неявной форме инстантонное решение, приобретает вид (ср. (40))

$$\gamma\tau(y) = \int_{-1}^y \frac{dx}{1-x^2} \times \\ \times \sqrt{\frac{1+4(H^2/H_p^2)(1-x^2)}{H_{sf}^2-H^2+(2K/zJ)H_{sf}^2x^2}}, \quad (45)$$

где $y = \sin\theta$. Поведение $\sin\theta$ в решении такое же, как $\cos\theta$ для коллинеарной фазы, и мы его не обсуждаем. Выражение для евклидова действия, определяющего туннельные переходы за счет неплоских инстантонов в спин-флоп-фазе, может быть записано в виде определенного интеграла:

$$\mathcal{A}_{Eu}^{(np)} = \frac{\hbar\mu_B N}{4Jz} \sqrt{H_1^2 - H_{sf}^2} \int_{-1}^1 dx \times \\ \times \sqrt{\left[1 + \frac{4H^2}{H_p^2}(1-x^2)\right] \left[\frac{H^2 - H_{sf}^2}{H_1^2 - H_{sf}^2} + x^2\right]}. \quad (46)$$

Точное выражение для действия можно записать через неполные эллиптические интегралы. Простой анализ показывает, что для неплоского решения величина евклидова действия $\mathcal{A}_{Eu}^{(np)}(H)$ имеет минимальное значение в точке спин-флоп-перехода, в которой оно определяется выражением $\mathcal{A}_{Eu}^{(np)}(H_{sf}) = 2\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$, где значение $\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$ описывает действие для 90-градусного инстантона и определяется формулой (44). При увеличении поля от значения H_{sf} евклидово действие $\mathcal{A}_{Eu}^{(np)}(H)$ растет с ростом поля. В результате при некотором критическом значении $H = H_c$ значение действия для неплоского решения сравнивается с величиной вещественной части действия для плоского решения $\mathcal{A}_{Eu}^{(pl)}$, которая не зависит от поля. При малой анизотропии в базисной плоскости значение H_c существенно меньше, чем величина H_p ,

$$H_c = H_p \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \frac{K_p}{K} \ll H_p. \quad (47)$$

Величина H_c остается меньшей, чем H_p , даже в предельном случае $K_p/K_u \rightarrow \infty$, при этом $H_c \rightarrow 0.616H_p$.

5. ФЛУКТУАЦИОННЫЙ ДЕТЕРМИНАНТ

Важным и, наверное, наиболее сложным для исследования элементом инстантонного подхода является вычисление функционального интеграла по малым отклонениям от инстантонного пути. В современной литературе это вычисление обычно проводится в квадратичном гауссовом приближении. При его проведении будем исходить из эффективного лагранжиана (37), считая сначала, что $K_p \gg K$ и можно не учитывать зависимости M от θ . Роль этой зависимости будет обсуждена ниже в конце этого подраздела.

Для простого лагранжиана (37) флюктуационный детерминант определяется разложением евклидова действия (37) по малым отклонениям от инстантонного решения $\theta = \theta_0(\tau)$, $\theta = \theta_0(\tau) + \vartheta(\tau)$, с учетом слагаемых второго порядка по $\vartheta(\tau)$. Добавку к величине \mathcal{A}_{Eu} при $M = \text{const}$ можно записать в виде

$$\delta^2 \mathcal{A}_{Eu} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \{\vartheta \hat{\mathcal{H}} \vartheta\} d\tau, \quad (48)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -M \frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{d^2 W(\theta_0)}{d\theta_0^2}$$

с граничными условиями $\vartheta(\pm\infty) = 0$. Оператор $\hat{\mathcal{H}}$ имеет нулевое собственное значение, которому отвечает $\vartheta_0 = d\theta_0/d\tau$, что связано с наличием произвольного параметра τ_0 в инстантонном решении. Предэкспоненциальный множитель (флюктуационный детерминант) \mathcal{D} пропорционален $\mathcal{D}' \sqrt{\mathcal{A}_{Eu}/\hbar}$, где \mathcal{D}' содержит бесконечное произведение ненулевых собственных значений оператора Шредингера $\hat{\mathcal{H}}$, $\hat{\mathcal{H}}\psi_k = \lambda_k \psi_k$,

$$\mathcal{D}' = \prod_k \sqrt{\frac{1}{\lambda_k}}. \quad (49)$$

Обычно величина \mathcal{D} вычисляется с точностью до численного множителя порядка единицы, и существенным является лишь наличие аномально малых собственных чисел λ_k . Как мы покажем, одно такое число возникает вблизи спин-флоп-перехода, когда $|H_{sf} - H| \ll |H_1 - H_{sf}|$. Как отмечалось выше, в этой области инстантон имеет достаточно широкое плато с $\theta \approx \pi/2$ и шириной $T = (\lambda/\omega_0) \ln |(H_1 - H_{sf})/(H_{sf} - H)|$ (см. выше п. 4.2), которая разделяет две области с резким изменением θ на величину $\Delta\theta \approx \pi/2$. В силу этого факта в уравнении Шредингера (48) возникает двухъямы потенциал с шириной ям порядка $1/\omega_0$

и расстоянием между ямами порядка T . Для такого потенциала два нижних уровня представляют собой туннельно расщепленный дублет. Учитывая, что нижний уровень имеет $\lambda = 0$, наличие уровня с аномально малым $\lambda_1 \ll 1$ достаточно очевидно. Однако расчет зависимости $\lambda_1(H)$ на основе (48) оказывается достаточно громоздким, и удобно воспользоваться следующим простым приемом, известным как преобразование Дарбу [48].

Оператор $\hat{\mathcal{H}}$, имеющий нулевую собственную моду ψ_0 , можно расщепить на произведение двух дифференциальных операторов первого порядка \hat{L}_+ и \hat{L}_- , где

$$\hat{L}_{\pm} = \pm \frac{d}{d\tau} + \frac{1}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{d\tau}.$$

Далее вместо исходной спектральной задачи $\hat{L}_+ \hat{L}_- \psi = \lambda \psi$ можно рассмотреть вспомогательную задачу для функции $\phi = \hat{L}_- \psi$, которая (задача) записывается в виде $\hat{L}_- \hat{L}_+ \phi = \lambda \phi$ и имеет те же собственные значения, что и исходная задача, за исключением нулевого. В нашем случае оператор $\hat{L}_- \hat{L}_+$ имеет вид оператора Шредингера $-d^2/dx^2 + \tilde{U}(x)$, где $x = \omega_0 \tau$, а потенциал \tilde{U} определяется выражением

$$\tilde{U} = -\frac{d^2 W}{d\theta^2} + \frac{1}{W} \left(\frac{dW}{d\theta_0} \right)^2. \quad (50)$$

После несложных, но громоздких преобразований с использованием явного вида инстанционного решения (43) при $K_p \gg K$ этот потенциал можно записать в виде

$$\begin{aligned} \tilde{U} = 1 - \frac{2}{\text{ch}^2 x} + \\ + \frac{2(H_{sf}^2 - H^2)}{(H_1^2 - H_{sf}^2) + (H_{sf}^2 - H^2) \text{ch}^2 x}. \end{aligned} \quad (51)$$

Два первых слагаемых в \tilde{U} определяют оператор Шредингера, появляющийся в задачах о малых колебаниях на фоне солитонов или инстантонов [13]. Для него существует нулевое собственное значение с собственной функцией $\phi \propto 1/\text{ch } x$. Учет последнего слагаемого, малого при $H \rightarrow H_{sf}$, можно провести по теории возмущений с использованием функции ϕ_0 . В результате искомое аномально малое собственное значение получается в виде

$$\lambda_1 = 2(H_{sf}^2 - H^2) \frac{H_1^2 - H^2}{H_1^2 - H_{sf}^2} \quad (52)$$

или точнее

$$\begin{aligned} \lambda_1 = \frac{2\Delta(\beta + \Delta)}{\beta} - \frac{\Delta^2(\beta + \Delta)^{1/2}}{\beta^{3/2}} \times \\ \times \ln \frac{\sqrt{\beta + \Delta} + \sqrt{\beta}}{\sqrt{\beta + \Delta} - \sqrt{\beta}}, \end{aligned} \quad (53)$$

где $\Delta = H_{sf}^2 - H^2$, $\beta = H_{sf}^2 - H_1^2$.

Мы получили конкретное выражение (52) в предельном случае $K \ll K_p$, но наличие аномально малого собственного числа $\lambda_1 \sim H_{sf}^2 - H_1^2$ можно продемонстрировать в более общем случае, когда

$$M(\theta) \propto 1 + (4H^2/H_p^2) \cos^2 \theta$$

и явно зависит от θ . В этом случае введем переменную $d\xi = d\tau/M(\theta_0)$ и снова представим величину $\delta\mathcal{A}$ в виде (48):

$$\begin{aligned} \delta^2 \mathcal{A}_{Eu} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \{\vartheta \hat{\mathcal{H}} \vartheta\} d\xi, \\ \hat{\mathcal{H}} = -\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{d^2[M(\theta_0)W(\theta_0)]}{d\theta_0^2}. \end{aligned} \quad (54)$$

В этом случае даже инстанционное решение не может быть записано в явном виде, но нулевую собственную функцию оператора Шредингера в выражении (54) легко представить через θ_0 в виде

$$\psi_0 \propto \frac{d\theta_0}{d\xi} = \sqrt{2M(\theta_0)W(\theta_0)}.$$

Легко также убедиться, что характер потенциала в выражении (54) не меняется по сравнению со случаем $M = \text{const}$ и при любом значении H/H_p этот потенциал является двухъямым, с характерным расстоянием между ямами

$$T \sim (1/\omega_0) \ln(\beta/\Delta).$$

Дело в том, что отличие $M(\theta_0)$ от единицы связано со слагаемым, пропорциональным $\cos^2 \theta_0$, которое не проявляется в области плато в центральной части инстантона. Далее простую оценку λ_1 можно получить, заметив, что расщепление нижней пары уровней, которым отвечает $\lambda_0 = 0$ и λ_1 , пропорционально $\exp(-\omega_0 T)$. Поскольку

$$T \sim \ln[1/(H_{sf} - H)],$$

легко получается линейная зависимость

$$\lambda_1 \propto (H_{sf} - H),$$

такая же, как и для точно решаемого случая $M = \text{const}$. В этом случае расчет коэффициента пропорциональности в этом выражении затруднителен,

но в интересующем нас приближении такой расчет и не нужен. Важен только тот факт, что вблизи перехода присутствует аномально малое собственное значение $\lambda_1 \propto (H_{sf} - H)$, что непосредственно следует из указанного свойства потенциала.

6. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Таким образом, общая картина инстанционных решений в АФМ при немалом магнитном поле такова. В достаточно больших полях, $H_{sf} < H_c < H < H_{ex}$, туннелирование определяется плоскими инстанциями и идет по сценарию, предложеному Чиолеро и Лоссом [18], с осцилляционной зависимостью расщепления уровней от поля при почти постоянной амплитуде осцилляций. Таким образом, подтверждается предположение [47], что этот сценарий реализуется при достаточно сильном поле независимо от ориентации поля. Однако в наиболее интересной области полей $0 < H < H_c$, включающей окрестность спин-флоп-перехода $H = H_{sf}$, туннелирование описывается 180-градусными инстанциями, для которых значение евклидова действия $\mathcal{A}_{Eu} = \mathcal{A}_{Eu}(H)$ существенно и эффекты деструктивной интерференции отсутствуют. При стремлении поля к полю спин-флоп-перехода сверху или снизу, величина евклидова действия уменьшается, достигая своего наименьшего значения равного $2\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$ при $H \rightarrow H_{sf} \pm 0$. Важно отметить, что в отличие от зависимости, которая получается в рамках простейшей версии сигма-модели [23], евклидово действие в точке перехода конечно. В самой точке перехода $H = H_{sf}$ реализуются только 90-градусные инстантоны, описывающие туннелирование между коллинеарными и спин-флоп-состояниями, для них евклидово действие равно $\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}$. Следовательно, при $H \rightarrow H_{sf}$ экспоненциальный фактор в туннельном расщеплении уровней растет.

Основное изменение структуры инстантона в области, предельно близкой к точке перехода, при $H_{sf} - H \ll H_1 - H_{sf} \pm 0$, связана с увеличением размера плато в центре инстантона. Как обсуждалось выше, это слабо влияет на величину действия $\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi)}$, но приводит к резкому увеличению предэкспоненциального множителя, связанного с малым собственным значением λ_1 , см. формулу (52). Понятно, что в этой области основная зависимость туннельного расщепления уровней от поля обусловлена дополнительным предэкспоненциальным множите-

телем $1/\sqrt{H_{sf}^2 - H^2}$, который растет при приближении к точке спин-флоп-перехода. Таким образом, общей тенденцией является существенное увеличение вероятности туннелирования и туннельного расщепления уровней ΔE в обеих фазах при $H \rightarrow H_{sf}$, за счет экспоненциального множителя не очень близко от H_{sf} , и за счет предэкспоненты в непосредственной близости к точке перехода. При этом за счет предэкспоненциального множителя формально имеет место неограниченный рост ΔE при $H \rightarrow H_{sf}$, и туннельное расщепление уровней ΔE качественно может быть представлено в виде

$$\Delta E_{(\pi)} = \Delta E_0 \frac{H_{sf}}{\sqrt{H_{sf}^2 - H^2}} e^{-\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi)}/\hbar}, \quad (55)$$

где $\Delta E_0 \propto \sqrt{\mathcal{A}_{Eu}/\hbar}$ — стандартный предэкспоненциальный множитель, не содержащий расходимостей. Ясно, что квазиклассический анализ, в частности, инстанционный подход, применим только тогда, когда вероятность туннелирования мала, поэтому возникает вопрос о применимости этого подхода в узкой окрестности спин-флоп-перехода.

Чтобы объяснить этот результат, отметим, что в рамках стандартного инстанционного формализма при любых значениях поля $H \neq H_{sf}$ исследуются только переходы между двумя различными, но точно вырожденными по энергии состояниями, а именно, двумя коллинеарными состояниями при $H < H_{sf}$ и двумя спин-флоп-состояниями при $H > H_{sf}$. Однако при $H \rightarrow H_{sf}$ энергия второй пары состояний (скажем, спин-флоп-состояний при $H < H_{sf}$) приближается к энергии основного состояния. Рост расщепления отражает тот достаточно общий факт, что наличие близких по энергии (почти вырожденных) состояний увеличивает вероятность переходов. На языке инстантонов, система находится достаточно долго около этого почти вырожденного состояния, что и определяет формирование плато и присутствие аномального предэкспоненциального множителя.

С другой стороны, при точном равенстве $H = H_{sf}$ указанное приближенное вырождение становится точным, т. е. энергии коллинеарного состояния и спин-флоп-состояния совпадают и туннелирование возможно между четырьмя различными состояниями, имеющими одинаковую энергию. В этом случае туннелирование определяется 90-градусными инстантонаами со значением $\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)} = (1/2)\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi)}$, т. е. экспоненциальный множитель существенно увеличивается,

$$\exp\left(-\frac{\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}}{\hbar}\right) \sim \sqrt{\exp\left(-\frac{\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi)}}{\hbar}\right)} \gg \\ \gg \exp\left(-\frac{\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi)}}{\hbar}\right),$$

но аномальный предэкспоненциальный множитель в расщеплении уровней отсутствует, и туннельное расщепление уровней ΔE качественно может быть представлено в виде

$$\Delta E_{(\pi/2)} = \Delta E_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{A}_{Eu}^{(\pi/2)}}{\hbar}\right). \quad (56)$$

Сравнивая эти два результата, можно сделать вывод о том, что неограниченный рост ΔE при $H \rightarrow H_{sf}$ за счет предэкспоненциального множителя (см. (55)) останавливается при выполнении условия $\Delta E_{(\pi)} \sim \Delta E_{(\pi/2)}$, и при меньших значениях $|H - H_{sf}|$ будет определяться формулой (56). Здесь ситуация опять напоминает ту, что имеет место в стандартной квантовой механике: если в системе есть два состояния с энергиями E_1 и E_2 , каждое из которых дважды вырождено (аналог коллинеарных и спин-флоп-состояний) и есть некоторое возмущение, которое может давать переходы между этими уровнями, с характерным масштабом Ψ , то в рамках теории возмущений поправки к энергии порядка $|\Psi|^2/(E_1 - E_2)$ вдали от точки вырождения (при $E_1 - E_2 \gg |\Psi|$) и порядка Ψ в случае $E_1 - E_2 \leq |\Psi|$. Здесь роль возмущения Ψ играет амплитуда перехода (пропагатор) $\exp(-\mathcal{A}_{Eu}/\hbar)$ [41]. Более детальный анализ может быть проведен так же, как в работе [41], с применением эффективного четырехуровневого гамильтониана и явного вида инстантонных амплитуд. С учетом этого обстоятельства везде в окрестности точки перехода $H = H_{sf}$ туннельное расщепление уровней остается конечным и при достаточно больших значениях суммарного спина частицы sN вероятность туннелирования мала, применим квазиклассический анализ, в частности, инстантенный подход, и сохраняется туннельная картина.

Мы показали, что значение евклидова действия в точке перехода уменьшается по сравнению со стандартным значением примерно в $\sqrt{J/K_{eff}} \sim 10^2$ раз. Этот результат позволяет надеяться, что в этой области эффекты когерентного туннелирования могут стать реальностью для новых магнитных материалов, двумерных сверхструктур типа решеток магнитных частиц (магнитных точек), разделенных немагнитными прослойками, которые изготавливаются из различных магнитных материалов (обычно

металлов) с применением современных нанотехнологий [1]. Такие материалы характеризуются очень высокой регулярностью как пространственного расположения частиц, так и формой различных частиц при размере частицы до сотен или даже десятков нанометров. Конечно, эти размеры существенно больше, чем, например, для частиц ферритина, содержащих всего лишь несколько тысяч магнитных атомов, и нам не известны примеры наблюдения квантовых эффектов для решеток магнитных точек. Однако для таких частиц, изготовленных из антиферромагнитных материалов, значение евклидова действия меньше. Ситуация особо благоприятна вблизи спин-флоп-перехода, где характерное значение евклидова действия уменьшается по сравнению со стандартным значением еще примерно в $\sqrt{J/K_{eff}} \sim 10^2$ раз. Сравнивая с ситуацией для частиц ферритина, содержащих $3.5 \cdot 10^3$ атомов, можно сделать вывод о возможности наблюдения эффектов когерентного квантового туннелирования для антиферромагнитных наночастиц, содержащих до 10^5 – 10^6 спинов, что уже сравнимо с размерами магнитных точек, исследуемых в настоящее время. Что касается конкретного материала для таких частиц, можно отметить хром, обладающий антиферромагнитным порядком и часто используемый при изготовлении магнитных сверхструктур [1]. Хром характеризуется упорядочением типа почти соразмерной волны спиновой плотности [49], для него известен индуцированный полем переход с переориентацией плоскости поляризации волн спиновой плотности, который на феноменологическом уровне похож на спин-флоп-переход в обычных АФМ с локализованными спинами и описывается практически так же, как и спин-флоп-переход [50]. Поэтому можно надеяться, что эффекты когерентного квантового туннелирования могут стать наблюдаемыми для таких частиц.

Важным результатом нашей работы является вывод о том, что вблизи поля спин-флоп-перехода квантовые эффекты могут наблюдаться в достаточно больших частицах. В принципе, при достаточно большом размере кластера может оказаться более выгодным пространственно-неоднородный инстантон, сходный с закритическим зародышем новой фазы. Однако простая оценка показывает, что такой пространственно-неоднородный инстантон является предпочтительным в случае, когда размер частицы превышает характерную длину магнетика, которая совпадает с толщиной доменной стенки в соответствующем объемном материале. Известно, что вдали от поля спин-флоп-перехода для частиц

такого размера эффекты когерентного туннелирования невозможны, см., например, обзорные работы [5, 6]. Вблизи поля спин-флоп-перехода допустимый размер частицы возрастает, но одновременно уменьшается эффективная анизотропия, и, следовательно, растет характерная длина. Таким образом, критерий применимости однородного инстантона остается выполненным.

Мы признательны Е. Г. Галкиной за помощь в расчетах и В. Г. Барьяхтару за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта INTAS-05-1000008-8112, совместного гранта № 219-08 РФФИ и НАН Украины и совместного гранта Ф25.2/081 Фонда фундаментальных исследований и Министерства образования и науки Украины.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Skomski, J. Phys.: Condens. Matter **15**, R841 (2003).
2. W. Wernsdorfer, Adv. Chem. Phys. **118**, 99 (2001).
3. M. N. Leuenberger and D. Loss, Nature (London) **416**, 789 (2001).
4. W. Wernsdorfer, N. Aliaga-Alcalde, D. Hendrickson, and G. Christou, Nature (London) **416**, 406 (2002).
5. *Quantum Tunneling of Magnetization*, Vol. 301 of NATO ASI Series E, ed. by L. Gunter and B. Barbara, Kluwer, Dordrecht (1995).
6. E. M. Chudnovsky and J. Tejada, *Macroscopic Quantum Tunneling of the Magnetic Moment*, Cambridge University Press, Cambridge (1998).
7. E. M. Chudnovsky and L. Gunter, Phys. Rev. B **37**, 9455 (1988).
8. M. Enz and R. Schilling, J. Phys. C **19**, L711 (1986).
9. J. L. van Hemmen and A. Sütö, Physica B **141**, 37 (1986).
10. I. V. Krive and O. B. Zaslavskii, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 9457 (1990).
11. B. Barbara and E. M. Chudnovsky, Phys. Lett. A **145**, 205 (1990).
12. D. D. Awschalom, J. F. Smyth, G. Grinstein, D. P. DiVincenzo, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **68**, 3092 (1992).
13. A. И. Вайнштейн, В. И. Захаров, В. А. Новиков, М. А. Шифман, УФН **136**, 553 (1979).
14. D. Loss, D. P. DiVincenzo, and G. Grinstein, Phys. Rev. Lett. **69**, 3232 (1992).
15. J. von Delft and C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **69**, 3236 (1992).
16. A. Garg, Europhys. Lett. **22**, 205 (1993).
17. V. Y. Golyshev and A. F. Popkov, Europhys. Lett. **29**, 327 (1995).
18. A. Chiolero and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **80**, 169 (1998).
19. Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, ЖЭТФ **121**, 320 (2002).
20. Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, Письма в ЖЭТФ **69**, 398 (1999).
21. W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, C. Boskovic, G. Christou, and D. N. Hendrickson, Phys. Rev. B **65**, 180403 (2002).
22. O. Waldmann, C. Dobe, H. Mutka, A. Furrer, and H. U. Güdel, Phys. Rev. Lett. **95**, 057202 (2005).
23. Б. А. Иванов и В. Е. Киреев, Phys. Rev. B **70**, 214430 (2004).
24. Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, Письма в ЖЭТФ **81**, 405 (2005).
25. Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **126**, 1479 (2004).
26. E. M. Chudnovsky and X. Martínez-Hidalgo, Europhys. Lett. **50**, 395 (2000).
27. E. Kececioglu and A. Garg, Phys. Rev. B **67**, 054406 (2003).
28. V. G. Bar'yakhtar and B. A. Ivanov, in *Intermediate State and the Dynamic and Static Properties of Domain Walls in Two-Sublattice Magnets*, Vol. 6 of Sov. Sci. Rev. Sec. A-Phys., ed. by I. M. Khalatnikov, Harwood, Amsterdam (1985), p. 404.
29. К. П. Белов, А. К. Звездин, А. М. Кадомцева, Р. З. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).
30. Y. Shapira and V. Bindilatti, J. Appl. Phys. **92**, 4155 (2002).
31. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, УФН **130**, 39 (1980).
32. H.-J. Mikeska, J. Physics C **13**, 2913 (1980).
33. I. V. Bar'yakhtar and B. A. Ivanov, Sov. J. Low Temp. Phys. **5**, 361 (1979).

- 34.** B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, Phys. Rev. Lett. **74**, 1859 (1995).
- 35.** H.-J. Mikeska and M. Steiner, Adv. Phys. **40**, 191 (1991).
- 36.** A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, *Nonlinear Magnetization Waves: Dynamic and Topological Solitons*, Naukova Dumka, Kiev (1983), p. 179.
- 37.** E. Fradkin, in *Field Theories in Condensed Matter*, Addison-Wesley, Reading, MA (1991), Chap. 5.
- 38.** A. M. Переломов, УФН **123**, 23 (1977); A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, Berlin (1986).
- 39.** Б. А. Иванов, ФНТ **31**, 841 (2005).
- 40.** Е. Г. Галкина, А. Ю. Галкин, Б. А. Иванов, ФНТ **34**, № 7 (2008).
- 41.** А. И. Попов, А. Ф. Попков, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **126**, 962 (2004).
- 42.** А. М. Переломов, *Интегрируемые системы классической механики и алгебры Ли*, Наука, Москва (1990).
- 43.** C. Neumann, J. Reine Angew. Math. **56**, 46 (1859).
- 44.** В. М. Елеонский, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **84**, 616 (1983).
- 45.** В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **77**, 409 (1979).
- 46.** Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, ФНТ **25**, 1287 (1999).
- 47.** H. Hu, R. Lü, J.-L. Zhu, and J.-J. Xiong, arXiv:cond-mat/0006292.
- 48.** P. Sodano, M. El-Batanony and C. R. Willis, Phys. Rev. **B 34**, 4936 (1981); V. B. Matveev and V. A. Sal-le, *Darboux Transformations and Solitons*, Springer-Verlag, Berlin (1991).
- 49.** Т. Мория, *Спиновые флюктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1968).
- 50.** В. Г. Баръяхтар, Письма в ЖЭТФ **30**, 654 (1979).