

Примесные состояния в треугольных двумерных гейзенберговских антиферромагнетиках

М. Н. Абдуллаев

*Институт физики им Г. М. Абдуллаева АН Азербайджанской республики
пр. Г. Джавида, 33, г. Баку, 370143, Азербайджан
E-mail: physic@lan.ab.az*

Статья поступила в редакцию 28 февраля 2001 г.

Теоретически исследованы спиновые возбуждения в двумерных трехподрешеточных гейзенберговских антиферромагнетиках, содержащих примесный атом в одной из подрешеток. Предполагается, что параметр связи между примесью и матрицей является положительным, вследствие чего в основном состоянии направления спинов примесного атома и атома подрешетки, в которой содержится примесь, совпадают. При использовании метода функций Грина выбираются те функции, которые состоят из комбинаций сумм и разностей операторов спиновых отклонений. Из полюса этих функций получены выражения для состояний A_1 , B_1 , E_1 и E_2 группы D_{6h} , с помощью которых определены их энергии.

Теоретично досліджено спінові збудження у двовимірних трипідграткових гейзенбергівських антиферромагнетиках, що утримують домішковий атом в одній з підграток. Припускається, що параметр зв'язку між домішкою та матрицею є додатним, внаслідок чого в основному стані напрямки спинов домішкового атома та атома підгратки, в котрій утримується домішка, співпадають. При використанні методу функцій Гріна вибирають ті функції, які складаються із комбінації сум та різниць операторів спинових відхилень. Из полюса цих функцій отримано вирази для станів A_1 , B_1 , E_1 та E_2 групи D_{6h} , за допомогою котрих визначено їх енергії.

PACS: 75.50.Ee

В последнее время большое внимание уделяется изучению магнитных свойств низкоразмерных магнитных систем [1–4]. В частности, это относится к исследованию роли магнитных и немагнитных примесей в таких магнитных системах, а также магнитных примесей в немагнитных кристаллах в различных температурных областях. Это связано с тем, что влияние примесных атомов на различные свойства (магнитные, термодинамические, сверхпроводящие и т. д.) основного кристалла в низкоразмерном случае значительно отличается от трехмерного.

Примесная задача в трехмерных магнитных системах была исследована на основе спин-волнового приближения, в котором связь между примесью и матрицей считается слабой. Хорошо известно, что введение в кристаллическую решетку примесного атома приводит к возникновению дискретных энергетических уровней. Характерной особенностью таких уровней является их расположение в континууме зонных колебаний (вирту-

альное состояние) или вне континуума (локальное состояние).

Такая задача была исследована многими авторами [5,6] как для немагнитных, так и магнитных кристаллов. Для магнитных исследований в указанных работах основными объектами были выбраны одно- и двухподрешеточные кубические кристаллы.

При слабой связи между атомными слоями ферромагнитные и антиферромагнитные кристаллы можно рассматривать как двумерные системы. Примесная задача в двумерном антиферромагнетике при $T = 0$ исследована на основе спин-волнового приближения [7], а при $T \neq 0$ — на основе последовательной спин-волновой теории [8].

Существует другая низкоразмерная магнитная структура, введение в которую примесного атома приводит, например, к смещению положения точки перехода между различными упорядоченными состояниями [9]. Хорошим примером таких соединений являются трехподрешеточные антиферромагнетики VX_2 ($X = Cl, Br, I$). В них спины

отдельных подрешеток в состоянии Нееля расположены в плоскости ac под углом 120° . Изучено изменение спектра этих кристаллов под действием спин-ядерного [10] и спин-фононного взаимодействий в идеальном случае [11]. В ходе исследования в этом направлении возникает вопрос о роли примесных атомов в процессе элементарного возбуждения в таких соединениях.

В структурах типа LiCrO_2 и AgCrO_2 спины подрешеток расположены в плоскости $c - (xy)$ под углом 120° . Расположение спинов подрешеток в тех или иных плоскостях связано с полем анизотропии относительно оси c .

В настоящей работе рассмотрено однопримесное возмущение в двумерных трехподрешеточных гексагональных антиферромагнетиках. Направление спина примесного атома совпадает с направлением спина замещенного атома одной из подрешеток. Исследовано также возникновение дискретных уровней и определены их энергии.

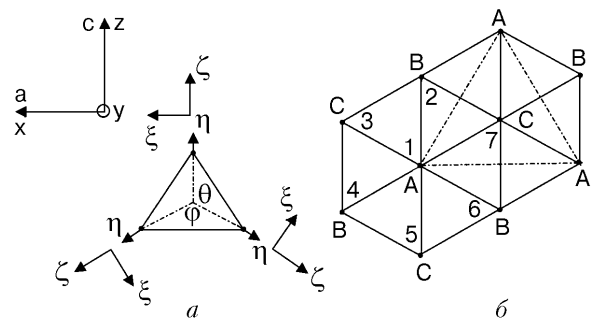


Рис. 1. а) 120° структура Нееля на трехподрешеточной структуре $A; B; C$: показана локальная координатная система для каждого узла $(\xi\eta\zeta)$, а также общая координатная система (xyz) ; θ и ϕ — углы отклонения общей координатной системы от узельной B и C соответственно. б) Химическая и магнитная элементарные ячейки представлены равносторонними треугольниками со сторонами a и $d = a\sqrt{3}$ соответственно. В химической (ABC) ячейке на вершинах находятся атомы разных подрешеток, а в магнитной (AAA) — атомы одинаковых подрешеток. Шесть ближайших соседей примесного атома 1 обозначаются 2, 3, ..., 7.

Гамильтониан системы и уравнения движения

Треугольный гейзенберговский антиферромагнетик с примесью описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned}
 H_{\text{ex}} = & 2I \sum_{l, \Delta_1} \mathbf{S}_l \mathbf{S}_{l+\Delta_1} - 2I \sum_{\Delta_1} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_{1+\Delta_1} + 2I' \sum_{\Delta_1} \mathbf{S}'_1 \mathbf{S}_{1+\Delta_1} + \\
 & + 2I \sum_{l, \Delta_2} \mathbf{S}_l \mathbf{S}_{l+\Delta_2} - 2I \sum_{\Delta_2} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_{1+\Delta_2} + 2I' \sum_{\Delta_2} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_{1+\Delta_2} + 2I \sum_{l+\Delta_1, l+\Delta_2} \mathbf{S}_{l+\Delta_1} \mathbf{S}_{l+\Delta_2}, \\
 H_{\text{ani}} = & -D \left[\sum_l (S_l^z)^2 + \sum_{l+\Delta_1} (S_{l+\Delta_1}^z)^2 + \sum_{l+\Delta_2} (S_{l+\Delta_2}^z)^2 \right] + D(S_1^z)^2 - D'(S_1'^z)^2,
 \end{aligned} \quad (1)$$

где I, I' и D, D' — параметры обменного и анизотропного полей соответственно для регулярного и примесного атомов. Симметрия рассматриваемой системы — D_{6h} .

Для того чтобы выразить гамильтониан (1) через операторы спиновых отклонений, необходим переход от общей координатной системы к узельной. Согласно рис. 1, на котором изображено расположение спинов атомов, связь между ними имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 S_{l+\Delta_1}^x = S_{l+\Delta_1}^\xi \cos \theta - S_{l+\Delta_1}^\zeta \sin \theta; & \quad S_{l+\Delta_2}^x = S_{l+\Delta_2}^\xi \cos \phi - S_{l+\Delta_2}^\zeta \sin \phi; \\
 S_{l+\Delta_1}^z = S_{l+\Delta_1}^\zeta \cos \theta + S_{l+\Delta_1}^\xi \sin \theta; & \quad S_{l+\Delta_2}^z = S_{l+\Delta_2}^\zeta \cos \phi + S_{l+\Delta_2}^\xi \sin \phi,
 \end{aligned} \quad (2)$$

где углы θ и ϕ — отклонение намагниченности первой подрешетки от второй и третьей соответственно.

Направление координатной оси Oy выбрано перпендикулярным плоскости рисунка. На рис. 1 также изображены химическая и магнитная ячейки.

Используя преобразования Гольштейна — Примакова, можно выразить спиновые операторы через бозевские операторы для каждого узла:

$$\begin{aligned}
 S_l^\xi = S - a_l^+ a_l; & \quad S_{l+\Delta_1}^\xi = S - b_{l+\Delta_1}^+ b_{l+\Delta_1}; & \quad S_{l+\Delta_2}^\xi = S - c_{l+\Delta_2}^+ c_{l+\Delta_2}, \\
 S_l^\zeta = \sqrt{s/2} (a_l + a_l^+); & \quad S_{l+\Delta_1}^\zeta = \sqrt{s/2} (b_{l+\Delta_1} + b_{l+\Delta_1}^+); & \quad S_{l+\Delta_2}^\zeta = \sqrt{s/2} (c_{l+\Delta_2} + c_{l+\Delta_2}^+), \\
 S_l^\eta = -i \sqrt{s/2} (a_l - a_l^+); & \quad S_{l+\Delta_1}^\eta = -i \sqrt{s/2} (b_{l+\Delta_1} - b_{l+\Delta_1}^+); & \quad S_{l+\Delta_2}^\eta = -i \sqrt{s/2} (c_{l+\Delta_2} - c_{l+\Delta_2}^+).
 \end{aligned} \quad (3)$$

С помощью преобразований (2) и (3) можно выразить гамильтониан (1) через операторы спиновых отклонений.

Введем в матричной форме функции Грина:

$$\begin{pmatrix} \langle\langle x_l^-(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle x_l^-(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle x_l^-(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \\ \langle\langle y_l^-(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle y_l^-(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle y_l^-(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \\ \langle\langle z_l^-(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle z_l^-(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle z_l^-(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{l;l'}^{11} & G_{l;l'}^{12} & G_{l;l'}^{13} \\ G_{l;l'}^{21} & G_{l;l'}^{22} & G_{l;l'}^{23} \\ G_{l;l'}^{31} & G_{l;l'}^{32} & G_{l;l'}^{33} \end{pmatrix} = \hat{G}, \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} \langle\langle x_l^+(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle x_l^+(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle x_l^+(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \\ \langle\langle y_l^+(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle y_l^+(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle y_l^+(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \\ \langle\langle z_l^+(t); x_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle z_l^+(t); y_{l'}^+(t') \rangle\rangle & \langle\langle z_l^+(t); z_{l'}^+(t') \rangle\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{l;l'}^{11} & H_{l;l'}^{12} & H_{l;l'}^{13} \\ H_{l;l'}^{21} & H_{l;l'}^{22} & H_{l;l'}^{23} \\ H_{l;l'}^{31} & H_{l;l'}^{32} & H_{l;l'}^{33} \end{pmatrix} = \hat{H},$$

где $x_l^\pm = a_l \pm a_l^+$, $y_l^\pm = b_l \pm b_l^+$, $z_l^\pm = c_l \pm c_l^+$.

Отметим, что нижние индексы у x_l^\pm , y_l^\pm , z_l^\pm пробегает соответственно по первой, второй и третьей подрешеткам в первой координационной сфере. Поэтому каждая матрица функции Грина в (4) имеет размеры 7×7 . Каждый столбец первой и второй матриц попарно образуют замкнутые системы уравнений движения, из решений которых их можно определить.

Функции Грина в (4) и сопряженные им функции удовлетворяют уравнениям в матричной форме и образуют отдельную систему:

$$\begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{11} & G^{12} & G^{13} \\ G^{21} & G^{22} & G^{23} \\ G^{31} & G^{32} & G^{33} \end{pmatrix} - (\hat{V}_1^0 + \hat{V}_1) \begin{pmatrix} H^{11} & H^{12} & H^{13} \\ H^{21} & H^{22} & H^{23} \\ H^{31} & H^{32} & H^{33} \end{pmatrix} = \frac{1}{\pi} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H^{11} & H^{12} & H^{13} \\ H^{21} & H^{22} & H^{23} \\ H^{31} & H^{32} & H^{33} \end{pmatrix} - (\hat{V}_2^0 + \hat{V}_2) \begin{pmatrix} G^{11} & G^{12} & G^{13} \\ G^{21} & G^{22} & G^{23} \\ G^{31} & G^{32} & G^{33} \end{pmatrix} = 0;$$

$$\begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H^{+11} & H^{+12} & H^{+13} \\ H^{+21} & H^{+22} & H^{+23} \\ H^{+31} & H^{+32} & H^{+33} \end{pmatrix} - (\hat{V}_1^0 + \hat{V}_1) \begin{pmatrix} G^{+11} & G^{+12} & G^{+13} \\ G^{+21} & G^{+22} & G^{+23} \\ G^{+31} & G^{+32} & G^{+33} \end{pmatrix} = 0, \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G^{+11} & G^{+12} & G^{+13} \\ G^{+21} & G^{+22} & G^{+23} \\ G^{+31} & G^{+32} & G^{+33} \end{pmatrix} - (\hat{V}_2^0 + \hat{V}_2) \begin{pmatrix} H^{+11} & H^{+12} & H^{+13} \\ H^{+21} & H^{+22} & H^{+23} \\ H^{+31} & H^{+32} & H^{+33} \end{pmatrix} = -\frac{1}{\pi} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Функции Грина G^+ и H^+ , содержащиеся в (6), определяются также выражениями (4), но при замене « \rightarrow » на « $+$ » и « $+$ » на « \rightarrow ».

Объединяя обе системы в одно уравнение, можно записать их в символическом виде

$$\left[\begin{pmatrix} \hat{E} & -\hat{V}_1^0 \\ -\hat{V}_2^0 & \hat{E} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\hat{V}_1 \\ \hat{V}_2 & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \hat{G} & -\hat{H}^+ \\ \hat{H} & -\hat{G}^+ \end{pmatrix} = \frac{E}{\pi} \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & \hat{1} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где

$$\hat{V}_1 = 2IS \begin{pmatrix} \varepsilon & \lambda_\theta & \lambda_\varphi & \lambda_\theta & \lambda_\varphi & \lambda_\theta & \lambda_\varphi \\ \lambda_\theta & -\rho_\theta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_\varphi & 0 & -\rho_\varphi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_\theta & 0 & 0 & -\rho_\theta & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_\varphi & 0 & 0 & 0 & -\rho_\varphi & 0 & 0 \\ \lambda_\theta & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_\theta & 0 \\ \lambda_\varphi & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_\varphi \end{pmatrix},$$

$$\hat{V}_2 = 2IS \begin{pmatrix} \varepsilon & \lambda_0 & \lambda_0 & \lambda_0 & \lambda_0 & \lambda_0 & \lambda_0 \\ \lambda_0 & -\rho_\theta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_0 & 0 & -\rho_\varphi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_0 & 0 & 0 & -\rho_\theta & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_\varphi & 0 & 0 \\ \lambda_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_\theta & 0 \\ \lambda_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\rho_\varphi \end{pmatrix}.$$

В случае однопримесного замещенного атома, отличающегося от регулярного как обменными связями с ближайшими соседями, так и спинами, матрицы возмущения будут седьмого порядка (в рассматриваемом случае). Их общий вид представлен в (7), а элементы определяются следующими соотношениями:

$$\varepsilon = -\left(\frac{I'}{I} - 1\right)(Z_1 \cos \theta + Z_2 \cos \varphi) + \frac{D}{I} \left(\frac{D'S'}{DS} - 1\right),$$

$$\lambda_0 = \left(\frac{S'}{S}\right)^{1/2} \frac{I'}{I} - 1, \lambda_\theta = \left[\left(\frac{S'}{S}\right)^{1/2} \frac{I'}{I} - 1\right] \cos \theta,$$

$$\lambda_\varphi = \left[\left(\frac{S'}{S}\right)^{1/2} \frac{I'}{I} - 1\right] \cos \varphi, Z_1 = Z_2 = 3,$$

$$\rho_\theta = \left[\left(\frac{S'}{S}\right)^{1/2} \frac{I'}{I} - 1\right] \cos \varphi,$$

$$\rho_\varphi = \left[\left(\frac{S'}{S}\right)^{1/2} \frac{I'}{I} - 1\right] \cos \varphi,$$

где Z_1 и Z_2 — числа ближайших соседей.

Угловые индексы элементов возникают из-за горизонтальных компонент S'^x, S'^z , а нулевой индекс — из-за перпендикулярной компоненты S'^y вектора спина примесного атома относительно плоскости ac .

Спектр элементарных возбуждений в двумерных трехподрешеточных антиферромагнетиках определяется полюсом функции Грина в (7), т. е.

$$\det \left| \hat{1} - \begin{pmatrix} \hat{G}^0 & -\hat{H}^{0+} \\ \hat{H}^0 & -\hat{G}^{0+} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hat{V}_1 \\ \hat{V}_2 & 0 \end{pmatrix} \right| = 0. \quad (8)$$

Для упрощения вычислений этого детерминанта приведем его к квазидиагональному виду. Эта процедура осуществляется с помощью унитарной матрицы, построение которой основано на теории групп. Используя симметризованные комбинации атомных волновых функций, можно построить соответствующую унитарную матрицу [12]:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \underbrace{A_1} & \underbrace{B_1} & \underbrace{E_1} & \underbrace{E_2} \\ \end{matrix} \quad (9)$$

При получении этой матрицы была выбрана плоскость, в которой примесный атом и его соседи расположены перпендикулярно оси шестого порядка.

С помощью унитарной матрицы (9) можно разбить детерминант (8) на произведение множителей, которые имеют следующий явный вид:

$$D_{A_1}(E) = \det \left(\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - 2IS \begin{vmatrix} H_{11}^{0+} & \sqrt{6} H_{12}^{0+} \\ \sqrt{6} H_{21}^{0+} & \sum_i H_{2i}^{0+} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \varepsilon & \sqrt{6}\lambda_0 \\ \sqrt{6}\lambda_0 & -\rho_\theta \end{vmatrix} + 2IS \begin{vmatrix} H_{11}^0 & \sqrt{6} H_{12}^0 \\ \sqrt{6} H_{21}^0 & \sum_i H_{2i}^{0+} \end{vmatrix} \right) \times$$

$$\times \left| \begin{array}{cc} \varepsilon & \frac{\sqrt{6}}{2} (\lambda_\theta + \lambda_\varphi) \\ \frac{\sqrt{6}}{2} (\lambda_\theta + \lambda_\varphi) & -\rho_\theta \end{array} \right| - \frac{(2IS)^2}{E} \left| \begin{array}{cc} G_{11}^0 & \sqrt{6} G_{12}^0 \\ \sqrt{6} G_{21}^0 & \sum_i G_{2i}^{0+} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cc} \varepsilon & \frac{\sqrt{6}}{2} (\lambda_\theta + \lambda_\varphi) \\ \frac{\sqrt{6}}{2} (\lambda_\theta + \lambda_\varphi) & -\rho_\theta \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cc} \varepsilon & \sqrt{6}\lambda_0 \\ \sqrt{6}\lambda_0 & -\rho_\theta \end{array} \right|, \quad (10)$$

$$D_{B_1}(E) = 1 - 2IS (H_{22}^0 - H_{25}^0 + 2H_{24}^0 - 2H_{23}^0 - H_{22}^{0+} + H_{25}^{0+} - 2H_{24}^{0+} + 2H_{23}^{0+}) \rho_\theta - \\ - \frac{(2IS)^2}{E} (G_{22}^0 + G_{24}^0 - G_{25}^0 - G_{23}^0) \rho_\theta^2, \quad (11)$$

$$D_{E_1}(E) = a_{11} \times a_{22} = [1 - 2IS (H_{22}^0 - H_{24}^0 + H_{23}^0 - H_{25}^0 - H_{22}^{0+} + H_{24}^{0+} - H_{23}^{0+} + H_{25}^{0+}) \rho_\theta - \\ - \frac{(2IS)^2}{E} (G_{22}^0 + G_{23}^0 - G_{24}^0 - G_{25}^0) \rho_\theta^2] \times a_{22}, \quad (12)$$

$$D_{E_2}(E) = b_{11} \times b_{22} = [1 - 2IS (H_{22}^0 - H_{24}^0 + H_{23}^0 - H_{25}^0 - H_{22}^{0+} + H_{24}^{0+} + H_{23}^{0+} - H_{25}^{0+}) \rho_\theta - \\ - \frac{(2IS)^2}{E} (G_{22}^0 - G_{23}^0 - G_{24}^0 + G_{25}^0) \rho_\theta^2] \times b_{22}. \quad (13)$$

Для получения второго диагонального элемента в детерминантах D_{E_1} и D_{E_2} необходимо заменить в (12), (13) ρ_θ на ρ_φ .

При расписывании матрицы функции Грина в (8) по элементарной ячейке появляются совпадающие элементы. Вследствие этого число их сокращается и остаются те элементы, которые содержатся в (10)–(13). Поскольку верхние и нижние индексы в них совпадают, оставим только одни из них.

Из уравнений (10)–(13) видно, что состояния типа A_1 зависят от четырех параметров

$(\varepsilon, \lambda_0, \lambda_\varphi, \rho_\theta)$; E_1 и E_2 — от двух $(\rho_\theta, \rho_\varphi)$, а B_1 — одного (ρ_φ) . Поэтому начнем решать уравнения для неприводимого представления B_1 -типа. Для того чтобы показать ясность графического решения этого уравнения, рассмотрим простой случай

$$\theta = \varphi = 2\pi/3; \quad \mathbf{k} = (k_x; 0; 0).$$

Используя нумерацию атомов первой координационной сферы (рис. 1), можно получить следующее уравнение:

$$1 - \frac{\rho}{\pi} N^{-1/3} \sum_{k_x} \left(1 + 2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} ak_x \right) \frac{M_{22} - L_{22} + M_{23} - L_{23}}{(E/2IS)^2 - A_{22} + A_{23}} + \frac{\rho^2}{\pi} N^{-1/3} \sum_{k_x} \frac{1 + 2 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} ak_x}{(E/2IS)^2 - A_{22} + A_{23}} = 0, \quad (14)$$

где

$$M_{22} - L_{22} + M_{23} - L_{23} = \frac{3}{4} \left(\frac{D}{I} + 6\gamma_{k_x} \right), \\ A_{22} - A_{23} = Z^2 \left(1 - \gamma_{k_x} + \frac{D}{4IS} \right) \left(1 + \frac{1}{2} \gamma_{k_x} - \frac{D}{IZ} \right), \quad \gamma_{k_x} = \frac{1}{Z} (1 + 2 \cos ak_x).$$

В этих выражениях волновой вектор k_x принимает все значения из первой зоны Бриллюэна,

которая построена для равносторонней треугольной прямой единичной ячейки (см. рис. 2). Как

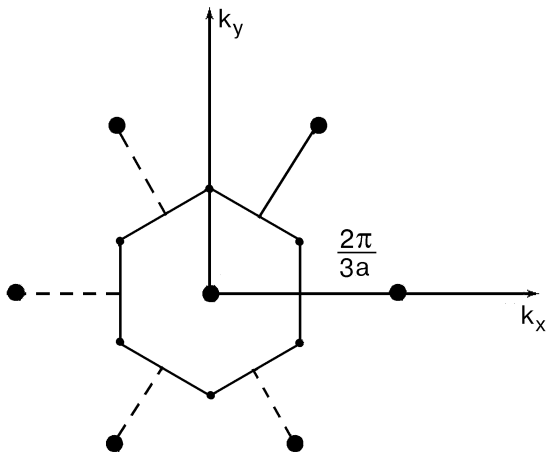


Рис. 2. Зона Бриллюэна, построенная по отношению к прямой магнитной элементарной ячейке, которая представлена равносторонним треугольником (AAA) со стороной $a\sqrt{3}$.

видно на рис. 1, длина стороны d такой примитивной ячейки равна $a\sqrt{3}$. С помощью несложного вычисления [13] можно показать, что зона Бриллюэна для двумерного трехподрешеточного антиферромагнетика имеет форму плоской гексагонали. Здесь a — постоянная решетки.

Графическое решение квадратичного уравнения относительно $1/\rho$ в (14) для неприводимого представления B_1 показана на рис. 3. Там же по вертикальной оси отложено значение величины $1/\rho$, которое попадает в область $(-\infty, -2)$ или $(0, \infty)$. Последняя определяется из выражения для ρ_φ (7) при $\varphi = 4\pi/3$. На рис. 3 видно, что уравнение (14) может иметь решения только при положительных значениях $1/\rho$. Среди последних также есть некоторые значения, для которых не существуют решения уравнения (14), так как соответствующий им волновой вектор «выпадает» из первой зоны Бриллюэна. В частности, при $k_x \rightarrow 4\pi/3\sqrt{3}$ решение уравнения стремится к нулю, т. е. $1/\rho \rightarrow 0$. Поэтому суммирование в

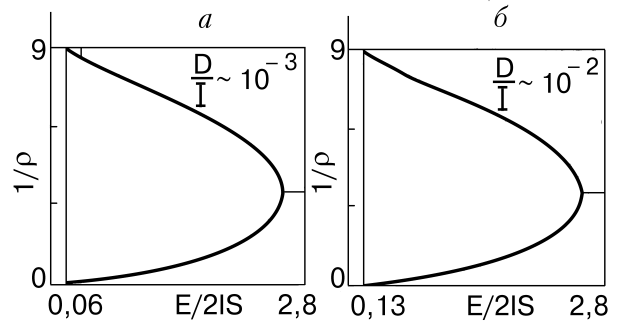


Рис. 3. Зависимость корней квадратичного уравнения относительно $1/\rho$ в (14) от безразмерной величины $E/2IS$.

(14) ведется в пределах $0 \leq k_x \leq 4\pi/3\sqrt{3}$. Энергия состояния B_1 определяется пересечением линий $1/\rho$ с кривыми, изображенными на этом рисунке.

Рассмотрим теперь состояния A_1 . Аналогично из равенства нулю вещественной части выражения (10) определяется энергия A_1 -состояния.

Поскольку это уравнение четвертой степени относительно содержащихся в нем различных комбинаций четырех параметров возмущения ($\epsilon, \lambda_0, \lambda_\theta, \rho_\theta$), решение его в графическом виде приводит к трудоемкой работе, а в аналитическом — к громоздкому выражению. Поэтому необходимо найти приближенный подход для решения этого уравнения. При $S' \neq S, I' = I$ число параметров возмущения уменьшается до трех ($\epsilon, \lambda_\theta, \rho_\theta$), а при $S' = S, I' \neq I$ — до двух (ϵ, ρ_θ), но уравнение остается четвертой степени относительно их комбинаций. При $S' = S, I' = I$ уравнение сводится к квадратичному уравнению относительно оставшегося единственного параметра возмущения $\frac{D}{I} \left(\frac{D'}{D} - 1 \right) = \epsilon'$:

$$\frac{1}{\epsilon'^2} - \frac{1}{\epsilon'} \frac{2}{\pi} N^{-1/3} \sum_{k_x} \frac{L_{11} \left[\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{22} - A_{23} \right] - L_{12} A_{21}}{\left[\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{11} \right] \left[\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{22} - A_{23} \right] - 2A_{12} A_{21}} -$$

$$- \frac{1}{\pi} N^{-1/3} \sum_{k_x} \frac{\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{22} - A_{23}}{\left[\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{11} \right] \left[\left(\frac{E}{2IS} \right)^2 - A_{22} - A_{23} \right] - 2A_{12} A_{21}} = 0,$$

где

$$\begin{aligned}
 A_{22} + A_{23} &= \left(z - \frac{D}{2I}\right) \left(z + \frac{D}{4I}\right) + \frac{1}{2} \left(z - \frac{5D}{4I}\right) z\gamma_k + \frac{3}{2} (z\gamma_k)^2, & L_{11} &= -\left(z - \frac{D}{I}\right), \\
 2A_{12}A_{21} &= \frac{1}{2} \left[z \left(z - \frac{9}{4}\right) \gamma_{k_x} - (z\gamma_{k_x})^2 \right] \left[\left(z + \frac{D}{I}\right) z\lambda_{k_x} - (z\gamma_{k_x})^2 \right], & L_{12} &= -\frac{1}{2} z\gamma_{k_x}, \\
 A_{11} &= \left(z - \frac{D}{2I}\right)^2 - (z\gamma_{k_x})^2, & A_{21} &= \frac{1}{2} z\gamma_{k_x} \left(z + \frac{D}{I} - z\gamma_{k_x}\right).
 \end{aligned} \tag{11}$$

Только в одном частном случае, при $k_x \geq 0$, $D' \gg D$, $I \sim D$, приближенное решение этого уравнения может быть получено в аналитическом виде: $E_{A_1} \approx IS\sqrt{37 - 3} (\epsilon'/2 - 1)^{-1}$, из чего следует, что уровень E_{A_1} попадает в полосу спектра, ширина которого равна $E \approx 2IS\sqrt{10}$.

1. Y. Fukumoto and A. Oguchi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3665 (1999).
2. Ю. А. Фридман, Д. В. Спирин, *ФНТ* **26**, 374 (2000).
3. J. Stolze and M. Vogel, *Phys. Rev.* **B61**, 4026 (2000).
4. J. A. Simpson, R. A. Cowley et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 8693 (1997).
5. А. Марадудин, Э. Монролл, Дж. Вейс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*, Мир, Москва (1965).
6. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
7. N. Bulut, D. Hone, and D. I. Scalapina, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2192 (1989).
8. V. Yu. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev.* **B60**, 14779 (1999).
9. M. W. Moore, P. Day, C. Wilkinson, and K. R. A. Ziebeck, *Solid State Commun.* **53**, 1009 (1985).
10. T. Suzuki and Y. Natsume, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 1577 (1987).

11. М. N. Abdullayev, *Fizika* **3**, 19 (1997).
12. В. Хейне, *Теория групп в квантовой механике*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
13. В. В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию магнетиков*, Наукова думка, Киев (1975).

Impurity states in triangular two-dimensional Heisenberg antiferromagnets

M. N. Abdullayev

The spin excitations in two-dimensional three-sublattice Heisenberg antiferromagnets with an impurity atom in one of the sublattices are investigated theoretically. It is supposed that the coupling parameter between the impurity and the matrix is positive therefore, the spin directions of the impurity atom and the sublattice one coincide in the ground state. To simplify the Green function method used in this problem, the functions consisting of sum and difference combinations of operators of spin deviation are chosen. Expressions for states A_1 , B_1 , E_1 , and E_2 of group D_{6h} are derived from the pole of these functions. These expressions are used to estimate the energies of the above states.