Физика низких температур, 1999, т. 25, № 12, с. 1287–1294

Точное инстантонное решение для квантового туннелирования в нескомпенсированном антиферромагнетике

Б. А. Иванов, В. Е. Киреев

Институт магнетизма НАН Украины, Украина, 252142, г. Киев, пр. Вернадского, 36,б
E-mail: vbaryakhtar@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 21 апреля 1999 г.

Построено точное инстантонное решение, описывающее макроскопическое квантовое туннелирование для малой антиферромагнитной частицы с нескомпенсированным спином и двухосной квадратичной анизотропией. Решение пригодно для любых соотношений между параметрами анизотропии и относительной величиной нескомпенсированного спина. Исходя из полученного решения, вычисляется амплитуда туннелирования с учетом предэкспоненциального фактора. Эта амплитуда характеризуется неаналитической зависимостью от соотношения между малыми параметрами задачи — анизотропией в базисной плоскости и величиной нескомпенсированного спина.

Побудовано точний інстантонний розв'язок, який описує макроскопічне квантове тунелювання для антиферомагнітної частинки з нескомпенсованим спіном та двохосною анізотропією. Рішення дійсне для будь-яких співвідношень між параметрами анізотропії та нескомпенсованим спіном. Виходячи з отриманного розв'язку, обчислено амплітуду тунелюванння з урахуванням предекспоненційного фактора. Ця амплітуда неаналітично залежить від співвідношення між малими параметрами задачі — анізотропією у базовій площині та відносним нескомпенсованим спіном.

PACS: **03.65.–w**, 75.10.Jm, 75.30.Gw

Введение

В последнее десятилетие вопросы макроскопического квантового туннелирования в магнитных системах широко изучаются как экспериментально, так и теоретически [1]. Особый интерес вызывает явление когерентного макроскопического квантового туннелирования (КМКТ) между энергетически эквивалентными, но физически различными состояниями в системах с дискретным вырождением основного состояния. Экспериментально его можно наблюдать по резонансному поглощению электромагнитных волн на туннельно расщепленных уровнях. Интерес к этому явлению обусловлен двумя факторами. Во-первых, в этих задачах возникают тонкие и красивые эффекты интерференции инстантонных траекторий, которые приводят к подавлению туннелирования при полуцелом полном спине системы [2,3], а также к осцилляционным зависимостям туннельного расщепления уровней от внешних параметров [4,5]. Во-вторых, проявление эффектов КМКТ, в отличие от эффектов квантового «убегания» из метастабильного состояния в стабильное, не маскируется тепловыми флуктуациями.

Первоначальные работы [6,7] были выполнены для малых частиц ферромагнетика в предположении, что все спины в частице параллельны друг другу (модель большого спина). Затем оказалось, что антиферромагнетики (АФМ) представляют собой более удобный класс для исследования КМКТ. Согласно расчетам [8,9], в АФМ расщепление уровней более сильное, чем в ФМ и эффекты могут наблюдаться при более высокой температуре. Неудивительно, что первое обнаружение эффектов КМКТ было осуществлено на частицах ферритина, обладающего антиферромагнитной структурой [10].

В работах [11–13] обращалось внимание на то, что на мезоскопическом уровне не бывает чистых АФМ, т.е. АФМ с полной компенсацией спина. Сейчас широко обсуждаются так называемые высокоспиновые комплексы, характеризующиеся антиферромагнитным взаимодействием при наличии нескомпенсированного спина. Исследование туннелирования в нескомпенсированном АФМ было проведено Чиолеро и Лоссом [13] на основе обобщения σ-модели, используемой обычно для чистых АФМ, на случай неполной компенсации. Эти уравнения представляют собой комбинацию лоренц-инвариантной σ-модели и уравнений Ландау–Лифшица (см. [13–15]). Особенностью их решений является то, что переход от антиферромагнитного поведения к ферромагнитному происходит при достаточно малой раскомпенсации (отношении разности спинов подрешеток к их сумме), что проявляется как в динамике нелинейных волн [14], так и при КМКТ [13]. Однако в работе [13] был проанализирован лишь один предельный случай — сильная легкоплоскостная анизотропия. При этом как для ФМ, так и для АФМ уравнения сводятся к лоренц-инвариантным моделям для скалярной переменной. Но для высокоспиновых комплексов $Mn_{12}Ac$ [16] или Fe_8 [17] соотношение между параметрами анизотропии иное, а именно: реализуется легкоосная анизотропия, и такое упрощение невозможно.

В настоящей работе найдено точное инстантонное решение для малой антиферромагнитной частицы с нескомпенсированным спином и двухосной квадратичной анизотропией. Решение пригодно для любых соотношений между параметрами анизотропии и относительной величиной нескомпенсированного спина. Исходя из полученного решения вычисляется ВКБ-экспонента и предэкспоненциальный фактор, который определяется флуктуационными детерминантом, для амплитуды туннелирования. Оказалось, что амплитуда КМКТ, в отличие от [13], характеризуется неаналитической зависимостью от параметров задачи, а именно от соотношения между анизотропией в базисной плоскости и величиной нескомпенсированного спина.

1. Модель

Рассмотрим систему спинов, в которой ближайшие соседи связаны антиферромагнитным взаимодействием и принадлежат двум магнитным подрешеткам. В основном состоянии суммарные спины подрешеток $\mathbf{S}_1$ и $\mathbf{S}_2$ антипараллельны друг другу. Суммарный спин $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ отличен от нуля из-за раскомпенсации подрешеток, $S_1 \neq S_2$. Поскольку нас интересует случай $|S_1 - S_2| << S_{1,2}$, динамика системы описывается в терминах единичного вектора антиферромагнетизма $\mathbf{l}$, где $\mathbf{l} = (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2)/|\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2|$, а суммарный спин является подчиненной переменной и определяется $\mathbf{l}$ и $\dot{\mathbf{l}}$ [14,15].

Для описания динамики вектора $\mathbf{l}$ будем исходить из эффективного лагранжиана, полученного в [13,15]. Евклидова версия этого лагранжиана может быть представлена в следующем виде:

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar S_{\text{tot}}}{\gamma H_e}\left[\frac{1}{2}(\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2\theta) - i\omega_n \dot{\varphi}(1 - \cos\theta)\right] + \\ + w_a(\theta, \varphi) , \tag{1}$$

точкой обозначена производная по мнимому времени τ; θ, φ — полярные координаты единичного вектора $\mathbf{l}$; $S_{\text{tot}} = S_1 + S_2$ — максимальное значение спина системы; H_e — обменное поле; $\gamma = 2\mu_B/\hbar$ — гиромагнитное отношение; $\omega_n = \gamma H_e S_{\text{ex}}/S_{\text{tot}}$ — параметр с размерностью частоты, описывающий величину раскомпенсации, $S_{\text{ex}} = |S_1 - S_2|$; $w_a(\theta, \varphi)$ — энергия магнитной анизотропии, вид которой мы пока не конкретизируем.

Лагранжиан (1) состоит из трех слагаемых. Это кинетический член, пропорциональный $\dot{\mathbf{l}}^2$, который обычен для чистых АФМ с $S_1 = S_2$; гироскопический член, пропорциональный первой производной по τ от компонент вектора $\mathbf{l}$ и характерный для ферромагнетика; роль потенциальной энергии играет анизотропия.

Обсудим возможные предельные случаи. Если $S_1 = S_2$, т.е. $\omega_n = 0$, то мы, естественно, получаем лагранжиан σ-модели чистого АФМ. Переход к лагранжиану ферромагнетика является не столь тривиальной операцией. Динамика вектора $\mathbf{l}$ приближенно отвечает динамике ферромагнетика при увеличении ω_n до значений порядка $\gamma(H_e H_a)^{1/2}$, где H_a — поле анизотропии. Формально можно получить из (1) лагранжиан ферромагнетика, если устранить квадратичное по производным слагаемое, например, с помощью замены $\hbar S_{\text{tot}}/\gamma H_e \to \to C\hbar S_{\text{tot}}/\gamma H_e$, $\omega_n \to \omega_n C^{-1}$ и предельного перехода $C \to 0$; для соответствия констант необходимо также положить $\omega_n = \gamma H_e$. Но такая процедура не вполне корректна, так как не следует забывать, что при исключении слагаемого, пропорционального $\dot{\mathbf{l}}^2$, меняется гамильтонова структура системы, а именно: размерность фазового пространства уменьшается вдвое. Если для АФМ углы θ и φ, параметризующие $\mathbf{l}$, можно рассматривать как канонические координаты, а соответствующие им импульсы содержат $\dot{\theta}$ и $\dot{\varphi}$, то для ферромагнетика гамильтоновы переменные выражаются только через $\mathbf{l}$. Например, в качестве канонической пары можно выбрать φ и $\cos\theta$. Иными словами, если нескомпенсированный АФМ (как и чистый АФМ) эквивалентен системе с двумя степенями свободы, то ферромагнетик отвечает системе с одной степенью свободы.

Для часто используемой модели сильной легкоплоскостной анизотропии уравнения движения дают приближенное соотношение $\theta \simeq \text{const}\,\dot{\varphi}$. В этом случае лагранжиан приобретает стандартный для механики вид: $M_{\text{eff}}(\varphi)\dot{\varphi}^2/2 + W(\varphi)$, где $M_{\text{eff}}(\varphi)$ и $W(\varphi)$ — эффективная масса и потенциал, определяемые параметрами системы. По существу, это приближение было использовано в [13] для анализа инстантонов в ферромагнетике, т.е. задача сводилась к механической системе с одной степенью свободы. Как мы покажем далее, учет реальной гамильтоновой структуры уравнений движения, эквивалентных механической системе с двумя степенями свободы, приводит к существенным особенностям инстантонных решений и важным физическим эффектам в КМКТ.

Инстантонное решение является сепаратрисной траекторией динамической системы, которая соединяет пару эквивалентных минимумов $\mathbf{l}_{\pm}^{(0)}$ потенциала w_a, т.е. граничные условия имеют вид $\mathbf{l} \to \mathbf{l}_{\pm}^{(0)}$ при $\tau \to \pm\infty$. Из них следует, что $\dot{\mathbf{l}} \to 0$ при $\tau \to \pm\infty$. Для построения произвольного решения уравнений движения системы с двумя степенями свободы необходимо знать два независимых интеграла движения этой системы. Одним из них является евклидов аналог полной энергии

$$E = \frac{\hbar S_{\text{tot}}}{\gamma H_e}\,\frac{\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2\theta}{2} - w_a(\theta, \varphi)\,. \qquad (2)$$

Однако второй интеграл движения указать не так просто. Его можно тривиально построить только для случая, когда анизотропия является чисто одноосной и w_a зависит только от проекции $\mathbf{l}$ на некоторую кристаллографическую ось $\mathbf{n}$, $w_a = w_a(\mathbf{nl})$. В частности, при $\mathbf{l}_{\pm}^{0} \parallel \mathbf{n}$ возникает чисто легкоосный случай.

К сожалению, никакой нетеровский интеграл движения (в данном случае — интеграл движения, связанный с симметрией w_a) не может быть использован для построения инстантонных решений полной системы уравнений, описывающих динамику вектора $\mathbf{l}$. Фактически, ситуация в нашем случае такая же, как и при анализе доменных стенок в ферромагнетиках. Они также описываются сепаратрисными решениями вида $\mathbf{l} = \mathbf{l}(\xi)$, где $\xi = x - vt$, где x — координата стенки; v — ее скорость (см. [18]). Единственный интеграл движения, обусловленный симметрией энергии анизотропии, есть проекция $\mathbf{l}$ на легкую ось $\mathbf{n}$, но при сохранении $\mathbf{nl}$ движение стенки невозможно.

Анализ динамических систем с более чем одной степенью свободы, в частности построение интегрируемых систем, является классической задачей аналитической динамики. Эта проблема интенсивно исследуется и сейчас, причем в последние годы получен ряд важных результатов [19]. Среди интегрируемых систем известны и модели динамики единичного вектора. В качестве примера можно привести классическую задачу Неймана [20] о движении материальной точки по сфере в поле потенциала, который является квадратичной функцией декартовых координат. В последние годы получен ряд обобщений этой задачи, в частности построен более общий вид интегрируемых потенциалов [19]; обсуждалось также и влияние гиротропных слагаемых [21].

Для нашей работы важен результат, что система с $w_a = \beta_{ik} l_i l_k$ и гиротропным слагаемым типа поля монополя (1) является интегрируемой. Случаи интегрируемых систем такого вида с иным типом потенциала, а также другими гиротропными слагаемыми нам не известны. Различные формы второго интеграла движения приведены в работах [21,22]. Интегрируемость модели (1) следует также из точной интегрируемости уравнений Ландау–Лифшица для намагниченности одномерного ферромагнетика, установленной Скляниным [23]. Действительно, лагранжиан ферромагнетика волновым анзацем $\xi = x - vt$ после некоторых переобозначений сводится к форме (1).

2. Структура инстантонного решения

Мы рассмотрим случай ромбической анизотропии второго порядка, который, как отмечалось выше, является интегрируемым. Выберем w_a в виде

$$w_a = \frac{\hbar S_{\text{tot}}}{2\gamma H_e}\left(\omega_z^2 \cos^2\theta + \omega_y^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi\right) \quad (3)$$

и примем, что $0 < \omega_y \le \omega_z$. Частоты ω_y, ω_z пропорциональны корням из обычно используемых полей анизотропий H_{az}, H_{ay}, т.е. $\omega_{z,y} = \gamma(H_e H_{ax,y})^{1/2}$. При таком выборе вида w_a и соотношений между константами Ox будет легкой осью, Oy — промежуточной, а Oz — трудной. Потенциал w_a имеет два симметричных минимума при $\theta = \pi/2$ ($\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$), между которыми возможно туннелирование.

Поскольку система уравнений интегрируема, можно проанализировать любые ее решения, например, методом разделения переменных в соответствующем уравнении Гамильтона–Якоби. В частности, таким образом можно построить периодические по τ инстантоны, необходимые для описания процессов туннелирования при конечной температуре [24,25]. Более того, возможность разделения переменных в уравнении Гамильтона-Якоби означает, что можно провести разделение переменных и в уравнении Шредингера, полученном путем канонического квантования переменных θ и φ. Этот подход применялся для систем с одной степенью свободы [26,27].

Однако для конкретного построения простейшего инстантонного решения достаточно воспользоваться одним из свойств соответствующего решения задачи в реальном времени. Известно, что в этом решении движение происходит в плоском сечении единичной сферы. Оказывается, что обобщение этого свойства можно выполнить и для мнимого времени.

С этой целью повернем $\mathbf{l}$ вокруг легкой оси Ox на угол α:

$$\begin{aligned} \cos\theta &\to \cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\varphi\sin\alpha\ , \\ \sin\theta\cos\varphi &\to -\cos\theta\sin\alpha + \sin\theta\sin\varphi\cos\alpha \end{aligned} \tag{4}$$

и преобразуем лагранжиан. Поворот (4) оставляет кинетический член инвариантным, а гироскопическое слагаемое получает добавку в форме полной производной по τ, которая несущественна для уравнений движения, но важна для вычисления действия по найденным траекториям. Уравнения движения после преобразования (4) приобретают следующий вид:

$$\begin{aligned} &-\ddot{\theta} + \dot{\varphi}^2\sin\theta\cos\theta - i\omega_n\dot{\varphi}\sin\theta + \\ &+ \sin\theta\cos\theta[(\omega_z^2\sin^2\alpha + \omega_y^2\cos^2\alpha)\sin\varphi - \\ &- (\omega_z^2\cos^2\alpha + \omega_y^2\sin^2\alpha)] + (\cos^2\theta - \sin^2\theta)\times \\ &\times(\omega_z^2 - \omega_y^2)\cos\alpha\sin\alpha\sin\varphi = 0\ , \\ &-\ddot{\varphi}\sin^2\theta - 2\dot{\theta}\dot{\varphi}\sin\theta\cos\theta + i\omega_n\dot{\theta}\sin\theta + \\ &+ (\omega_z^2\sin^2\alpha + \omega_y^2\cos^2\alpha)\sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi + \\ &+ (\omega_z^2 - \omega_y^2)\sin\alpha\cos\alpha\sin\theta\cos\theta\cos\varphi = 0\ . \end{aligned} \tag{5}$$

Граничные условия выберем в виде $\mathbf{l}_- = \mathbf{e}_x$ и $\mathbf{l}_+ = -\mathbf{e}_x$, т.е. $\theta(\pm\infty) = \pi/2$; $\varphi(-\infty) = 0$, $\varphi(+\infty) = \pi$. Положим в этой системе $\theta = \pi/2$, что не противоречит граничным условиям, и получим переопределенную систему двух уравнения для динамической переменной φ:

$$\begin{aligned} i\omega_n\dot{\varphi} &= -(\omega_z^2 - \omega_y^2)\sin\alpha\cos\alpha\sin\varphi\ , \\ \ddot{\varphi} &= (\omega_z^2\sin^2\alpha + \omega_y^2\cos^2\alpha)\sin\varphi\cos\varphi\ . \end{aligned} \tag{6}$$

Понятно, что выбором параметра α эти уравнения могут быть сделаны совместными.

Сначала рассмотрим вырожденный случай. Для чистого АФМ при $\omega_n = 0$ и $\omega_z \neq \omega_y$ первое уравнение обращается в тождество, если $\alpha = \pi k/2$, где k — целое число. Второе уравнение дает инстантонное решение стандартного вида $\sin\varphi = \pm\,\mathrm{ch}^{-1}\,\omega(\tau - \tau_0)$ с $\omega = \omega_y$ или ω_z при выборе k четным или нечетным соответственно. Первой возможности отвечают инстантоны с разворотом $\mathbf{l}$ через промежуточную ось, второй — через трудную. Как легко убедиться, пара инстантонов с α-кратным π имеет меньшее значение вещественной части евклидового действия, $\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = 2\omega_y\hbar S_{\mathrm{tot}}/\gamma H_e$, чем пара инстантонов второго типа.

В интересующем нас случае $\omega_n \neq 0$ решения существуют только при $\omega_z \neq \omega_y$, т.е. при наличии анизотропии в базисной плоскости. Мы получаем уравнение совместности переопределенной системы (6):

$$i(\omega_z^2 - \omega_y^2)\sin\alpha\cos\alpha = (\omega_z^2\sin^2\alpha + \omega_y^2\cos^2\alpha)^{1/2}\ , \tag{7}$$

из которого следует, что α — комплексное число,

$$\alpha = \frac{\pi k}{2} + \frac{i}{2}\,\mathrm{arcch}\,\frac{[(\omega_z^2+\omega_y^2+\omega_n^2)^2 - 4\omega_y^2\omega_z^2]^{1/2} - \omega_n^2}{\omega_z^2 - \omega_y^2}\ , \tag{8}$$

а преобразование (4) — композиция обычного и гиперболического поворотов. Как и в случае $\omega_n \neq 0$, здесь существуют четыре инстантона. Четные k отвечают паре инстантонов, в которых плоскость разворота $\mathbf{l}$ содержит промежуточную ось, а нечетные k — трудную ось. Инстантонные решения будут иметь вид

$$\varphi = \pm\,2\,\mathrm{arctg}\,e^{\Omega(\tau - \tau_0)}\ , \tag{9}$$

где τ_0 — произвольная постоянная и

$$\Omega = \frac{1}{2}\left[\sqrt{\omega_n^2 + (\omega_z + \omega_z)^2} \pm \sqrt{\omega_n^2 + (\omega_z - \omega_y)^2}\,\right]. \tag{10}$$

Знак «–» отвечает инстантону с разворотом $\mathbf{l}$ через промежуточную ось, а «+» — через трудную. Прямой расчет показывает, что при любых соотношениях между ω_n , ω_y и ω_z инстантоны, проходящие через промежуточную ось, имеют меньшую вещественную часть действия, чем инстантоны, проходящие через трудную ось. Последние не дают даже локального минимума $\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}}$. Как мы покажем ниже в разд. 4, оператор второй вариации действия для инстантонов с разворотом $\mathbf{l}$ через трудную ось имеет отрицательное собственное значение. Таким образом, нужно рассматривать только два инстантона с разворотом в плоскости, проходящей через промежуточную ось. Поэтому далее будем считать, что в (10) стоит минус.

Вещественная часть евклидового действия для этих инстантонов имеет вид суммы двух слагаемых:

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = 2\,\frac{\hbar S_{\mathrm{tot}}}{\gamma H_e}\,\Omega + \hbar S_{\mathrm{ex}}\,\ln\frac{\sqrt{\omega_z^2-\Omega^2}+\sqrt{\omega_y^2-\Omega^2}}{\sqrt{\omega_z^2-\omega_y^2}}\,. \tag{11}$$

Первое слагаемое пропорционально числу спинов и совпадает с соответствующим выражением для чистого АФМ. Второе слагаемое возникает из гироскопического члена в лагранжиане. Оно пропорционально избыточному спину и его можно ассоциировать с ферромагнитными свойствами системы. Появившийся в нем логарифм есть не что иное, как мнимая часть угла поворота α из (8).

Естественно, что из общей формулы (11) в качестве предельных случаев получаются известные ранее результаты. Например, при $S_2 \to 0$, $S_{\mathrm{ex}} = S$, $\omega_n = \gamma H_e$, $\Omega \ll \omega_y$, ω_z имеем известное выражение для ферромагнетика [7]:

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = \hbar S\,\ln\frac{\omega_z+\omega_y}{\omega_z-\omega_y}\,, \tag{12}$$

или

$$\exp\left(-\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}}/\hbar\right) = \left|\frac{\omega_z+\omega_y}{\omega_z-\omega_y}\right|^S,$$

при $\omega_y = \omega_z$ туннелирование, естественно, невозможно. Предельный случай сильной легкоплоскостной анизотропии, рассмотренный в [13] для нескомпенсированного АФМ, находится из (11) в пределе ω_n, $\omega_y \ll \omega_z$. При этом

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = 2\,\frac{\hbar S_{\mathrm{tot}}}{\gamma H_e}\,\omega_y\left(1+\frac{1}{2}\,\frac{\omega_n^2}{\omega_z^2}\right), \tag{13}$$

что является типичным ответом для системы с одной степенью свободы, в которой эффективная масса содержит вклад слагаемых ферромагнитной и антиферромагнитной природы [13].

Специфика нескомпенсированного АФМ как системы с двумя степенями свободы наиболее ярко проявляется в магнетиках с почти легкоосной или ромбической анизотропией, когда $\omega_y \sim \omega_z$. Введем $\Delta\omega = \omega_z - \omega_y$ в качестве характеристики анизотропии в базисной плоскости. Как мы убедимся, при этом характеристики туннелирования зависят от соотношений между параметрами ω_n, $\Delta\omega$ и $\overline{\omega} = (\omega_y + \omega_z)/2$. Формула (11) достаточно громоздка, и мы обсудим ее в наиболее характерном случае $\Delta\omega \ll \Delta\omega$, ω_n, когда

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = \frac{\hbar S_{\mathrm{tot}}}{\gamma H_e}\left[\sqrt{4\overline{\omega}^2+\omega_n^2} - \omega_n + \omega_n\,\ln\frac{\omega_n\sqrt{4\overline{\omega}^2+\omega_n^2}-\omega_n^2}{\overline{\omega}\Delta\omega}\right]. \tag{14}$$

Как легко видеть, ферромагнитное поведение (расходимость $\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}}$ при $\omega_y \to \omega_z$) может проявляться и при достаточно малых ω_n, но только при $\omega_n \gg \Delta\omega$. При $\omega_n \ll \overline{\omega}$ выражение (14) упрощается и принимает вид

$$\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}} = \frac{\hbar S_{\mathrm{tot}}}{\gamma H_e}\left(2\overline{\omega} + \omega_n\,\ln\frac{\omega_n}{\Delta\omega}\right), \tag{15}$$

но оно неаналитично по параметру $\omega_n/\Delta\omega$, что может оказаться существенным при анализе высокоспиновых молекул типа $\mathrm{Mn_{12}Ac}$. В следующем разделе мы убедимся, что еще более существенные особенности возникают при анализе предэкспоненциального фактора в амплитуде туннелирования.

3. Вычисление вероятности туннелирования

Как было показано в разд. 2, существуют две пары решений уравнений движения (5), но только одна из них отвечает минимуму вещественной части евклидового действия. Следуя методу перевала, для вычисления амплитуды туннельного перехода необходимо использовать только эту пару. В приближении малой плотности инстантонов и главном приближении по параметру $\exp(-\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\mathrm{Eu}}/\hbar)$ для физически наблюдаемой величины — расщепления основного состояния — можно записать [28]

$$\Delta_0 = 2|\cos \pi S_{\text{tot}}|\, D \exp\,(-\mathcal{A}_{\text{Eu}}/\hbar)\ . \qquad (16)$$

Множитель $|\cos \pi S_{\text{tot}}|$ возникает из-за интерференции пары инстантонов, значения действия на которых комплексно сопряжены [2,3]. Он описывает подавление туннелирования при полуцелом спине и не влияет на Δ_0 при целом S_{tot} . Величина $\exp\,(-\text{Re}\,\mathcal{A}_{\text{Eu}}/\hbar)$ является коэффициентом прозрачности барьера в квазиклассическом приближении. Множитель D — предэкспоненциальный фактор, связанный с малыми флуктуациями вокруг инстантонного решения:

$$D = \int \mathcal{D}[\vartheta]\mathcal{D}[\mu]\, \exp\left(-\frac{1}{2}\,\frac{\delta^2\mathcal{A}_{\text{Eu}}}{\hbar}\right), \qquad (17)$$

$$\delta^2\mathcal{A}_{\text{Eu}} = \frac{\hbar S_{\text{tot}}}{\gamma H_e}\,\Omega \int dx\,(\vartheta,\mu)\, A^{(2)} \begin{pmatrix}\vartheta\\ \mu\end{pmatrix} \qquad (18)$$

и

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} -\partial_x^2 + 1 + \varepsilon - 2\,\text{ch}^{-2}\,x & -i\nu(\partial_x + \text{th}\,x) \\ i\nu(\partial_x - \text{th}\,x) & -\partial_x^2 + 1 - 2\text{ch}^{-2}\,x \end{pmatrix}. \qquad (19)$$

В выражении (18) введена безразмерная переменная $x = \Omega\tau$. Здесь $\vartheta = \theta - \theta_0$ и $\mu = (\varphi - \varphi_0)\sin\theta_0$ есть поперечное и продольное отклонения от инстантонной траектории $\theta_0(\tau)$, $\varphi_0(\tau)$. Введение переменной μ удобнее, чем использование $\varphi - \varphi_0$, так как позволяет записать меру для функционального интегрирования в форме, не содержащей $\sin\theta$ ($\mathcal{D}[\vartheta]\mathcal{D}[\mu]$), а также получить в $A^{(2)}$ операторы Шредингера; $\delta^2\mathcal{A}_{\text{Eu}}$ — вторая вариация действия, вычисленная на инстантонном решении. Проще всего его получить путем линеаризации уравнений движения (5). Недиагональная структура $A^{(2)}$ соответствует двум взаимодействующим полевым степеням свободы, что существенно усложняет вычисление D по сравнению со стандартным случаем.

Оператор $A^{(2)}$ содержит два безразмерных параметра $\nu = \omega_n/\Omega$ и $\varepsilon = [(\omega_z^2 + \omega_y^2)/\Omega^2] - 2$. Для ε получаем следующее выражение:

$$\varepsilon = 2\,\frac{\pm\,[(\omega_z^2 + \omega_y^2 + \omega_n^2)^2 - 4\omega_z^2\omega_y^2]^{1/2} - \omega_n^2}{\omega_z^2 + \omega_y^2 + \omega_n^2 \mp [(\omega_z^2 + \omega_y^2 - \omega_n^2)^2 - 4\omega_z^2\omega_y^2]^{1/2}}. \qquad (20)$$

Знак «+» отвечает инстантону с разворотом **l** через промежуточную ось, а «–» — через трудную. В первом случае $\varepsilon \ge 0$, а во втором $\varepsilon \le 0$; причем $\varepsilon = 0$ возможно только при $\omega_n = 0$ и $\omega_y = \omega_z$. Отметим, что для чистого АФМ $\varepsilon = \omega_y^2/\omega_z^2 - 1$, т.е. определяется только анизотропией в базисной плоскости, и $\varepsilon \to 0$ при $\omega_y \to \omega_z$ (легкоосный предел). Наличие раскомпенсации изменяет предельное значение ε при $\omega_y \to \omega_z$ на

$$\varepsilon_0 = \frac{\omega_n^2}{\omega_y^2} + \frac{\omega_n}{\omega_y}\sqrt{4 + \omega_n^2/\omega_y^2}\ , \qquad (21)$$

т.е. этот параметр остается конечным при $\omega_y \to \omega_z$. В интересующем нас легкоосном (или ромбическом) случае ($\omega_y \sim \omega_z$) при слабой раскомпенсации ($\omega_n << \omega_y$, ω_z) величины $\nu \simeq \omega_n/\omega_y$ и ε являются малыми параметрами.

Для вычисления D необходимо провести функциональное интегрирование по $\mathcal{D}[\vartheta]$ и $\mathcal{D}[\mu]$, что можно сделать, если унитарным преобразованием привести $A^{(2)}$ к диагональному виду $A^{(2)} = \sum_n \lambda_n\eta_n^2$, т.е. фактически найти собственные значения λ_n оператора (19). Далее можно записать $\mathcal{D}[\vartheta]\mathcal{D}[\mu] = \Pi_n\, d\eta_n$ и провести гауссово интегрирование по η_n . Получаем $D = (\Pi'_n\,\lambda_n)^{-1/2}$, где Π' означает, что произведение берется по всем собственным значениям, кроме нулевых. Как известно, нулевая мода $\lambda = 0$ приводит к появлению множителя $\Omega(\text{Re}\mathcal{A}_{\text{Eu}}/2\pi\hbar)^{1/2}$ в D. Можно заметить, что он пропорционален корню из числа спинов, в то время как в Π'_n нет такой экстенсивной величины. Спектр $A^{(2)}$ может содержать дискретные моды с собственными значениями λ_1 . Эти моды дают в D множители $\lambda_1^{-1/2}$.

Перейдем к нахождению собственных значений. Как легко убедиться, уравнение (19) имеет нулевое собственное значение, которому соответствует собственный вектор $\mu = \text{ch}^{-1}\,x$, $\vartheta = 0$. Ясно, что, за исключением нефизического случая $\nu = 0$, $\varepsilon = 0$ (чистый АФМ с изотропной легкой плоскостью), второй нулевой моды не существует. Однако при $\omega_n = 0$ имеется еще один дискретный уровень с $\lambda_1 = \varepsilon$, следовательно, в задаче есть еще одно малое собственное значение. При $\omega_n \ne 0$ и $\nu << 1$ точное решение невозможно, поэтому найдем λ_1 с использованием теории возмущений по малому параметру ν. Выбирая нулевое приближение в виде $\mu^{(0)} = 0$, $\vartheta^{(0)} = \text{ch}^{-1}\,x$, $\lambda_1^{(0)} = \varepsilon$, в основном приближении по λ и ν легко записать $\lambda_1 = \varepsilon + \nu^2$.

Непрерывный спектр имеет две ветви, каждая из которых вырождена по знаку k, с законом дисперсии

$$\lambda(k) = 1 + k^2 + \frac{\varepsilon}{2} \pm \sqrt{(\varepsilon/2)^2 - \nu^2(1 + k^2)}\ . \qquad (22)$$

При $k^2 > (\varepsilon/2\nu)^2 - 1$ эти ветви имеют комплексно сопряженные λ. Комплексность λ не дает мнимого вклада в D, так как комплексно сопряженные λ при вычислении D можно объединить в вещественные пары $\Pi'_k\,[\lambda(k)\lambda^*(k)]^{-1/2}$.

Детали расчета вклада непрерывного спектра в префактор D можно найти в обзоре [28]. Мы приведем только окончательную формулу для закона дисперсии типа (22):

$$D_{\text{cont}} = \exp\left\{\frac{1}{4\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\,\frac{d\delta(k)}{dk}\,\ln\,[\lambda(k)\lambda^*(k)]\right\}. \quad (23)$$

Здесь $\delta(k)$ — фазовый сдвиг собственных функций η_{k_n} оператора $A^{(2)}$, который находится из асимптотических выражений $\eta_k \propto \exp\,(ikx \pm {}^1\!/\!_2\, i\delta(k))$, при $x \to \pm\infty$. Его производная $d\delta(k)/dk$ дает изменение плотности состояний непрерывного спектра по сравнению с однородной. Мы воспользуемся значением $\delta(k)$, которое получается в основном приближении по ν^2, а именно $\delta(k) = 2\,\mathrm{arctg}\,k$, и найдем

$$D_{\text{cont}} = 4\left(1 + \sqrt{1 + \varepsilon + \nu^2}\right)^2. \qquad (24)$$

Для рассматриваемого нами легкоосного случая $\varepsilon \sim \nu \sim \omega_n/\omega_y$, и в предэкспоненте мы можем пренебречь ν^2 по сравнению с ε. Однако мы обязаны удержать в $\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\text{Eu}}$ слагаемое, содержащее ω_n/ω_y , из-за большого логарифма при нем. Окончательно величина расщепления уровней основного состояния может быть представлена в виде

$$\Delta_0 = 8\omega_y\,\frac{(1 + \sqrt{1 + \varepsilon}\,)^2}{\sqrt{\varepsilon}}\left(\frac{\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\text{Eu}}}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \times$$
$$\times\,|\cos\,\pi S_{\text{tot}}|\;e^{-\mathrm{Re}\,\mathcal{A}_{\text{Eu}}}\ . \qquad (25)$$

Таким образом, отмеченная особенность задачи, а именно тот факт, что мы имеем дело с механической системой с двумя степенями свободы, существенно проявляется и в предэкспоненциальном факторе и приводит к появлению множителя $\varepsilon^{-1/2}$ в вероятности туннелирования.

Заключение

Проведенный анализ показал, что особые свойства модели (1) как аналога механической системы с двумя степенями свободы важны для случая одноосной или ромбической анизотропии со слабой анизотропией в базисной плоскости. При уменьшении значения ее параметра ε экспоненциальный множитель подавляет туннелирование, но появление множителя $\varepsilon^{-1/2}$ в вероятности туннелирования увеличивает значение анизотропии по сравнению со стандартным ответом. Понятно, что при $\varepsilon \to 0$ величина туннельного расщепления стремится к нулю, однако при малых, но конечных значениях ε и ν учет этих факторов необходим.

В первых работах по макроскопическому туннелированию обычно рассматривался предел сильной легкоплоскостной анизотропии для антиферромагнетиков с малой раскомпенсацией как типичный пример систем, в которых эффекты туннелирования наблюдаются для частиц, содержащих как можно большее число спинов. Это условие отвечает, например, классическому объекту физики макроскопического туннелирования— ферритину. Однако в последнее время вызывают повышенный интерес новые объекты, а именно высокоспиновые комплексы, которые содержат десятки (а не тысячи, как для случая ферритина) спинов и могут характеризоваться широким (практически любым наперед заданным) спектром значений параметров. Для таких объектов туннелирование может реализоваться и не в оптимальных условиях, например при наличии одноосной анизотропии. Тогда обычный подход, сводящий задачу (в том или другом приближении) к системе с одной степенью свободы, неприменим, и нужно использовать теории такого типа, как развитая в настоящей работе.

Мы благодарны В. Г. Барьяхтару и А. К. Колежуку за полезные обсуждения. Работа частично поддержана грантом ФФИ Украины 2.4.27.

1. E. M Chudnovsky and J. Tejada, *Macroscopic Quantum Tunneling of the Magnetic Moment*, Cambridge University Press, London (1998).
2. D. Loss, D. P. DiVincenzo, and G. Grinstein, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3232 (1992).
3. J. von Delft and C. L. Henley, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3236 (1992).
4. V. Yu. Golyshev and A. F. Popkov, *Europhys, Lett.* **29**, 327 (1995); *ЖЭТФ* **108**, 1755 (1995).
5. Б. А. Иванов, В. Е. Киреев, *Письма в ЖЭТФ* **69**, 369 (1999).

6. Е. М. Чудновский, *ЖЭТФ* **50**, 1035 (1979).
7. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661; *Phys. Rev.* **B37**, 9455 (1988).
8. B. Barbara and E. M. Chudnovsky, *Phys. Lett.* **A145**, 205 (1990).
9. I. V. Krive and O. B. Zaslavskii, *J. Phys.: Condens. Mattter* **2**, 9457 (1990).
10. D. D. Awschalom, J. F. Smyth, G. Grinstein, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3092 (1992).
11. E. M. Chudnovsky, *J. Magn. Magn. Mater.* **140-144**, 1821 (1995).
12. J. M. Duan and A. Garg, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 2171 (1995).
13. A. Chiolero and D. Loss, *Phys. Rev.* **B56**, 738 (1997).
14. Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, *ЖЭТФ* **84**, 370 (1983).
15. B. A. Ivanov and A. L. Sukstanskii, *Solid State Commun.* **50**, 523 (1984).
16. J. A. Friedman, M. P. Sarachik, J. Tejada, and R. Ziolo, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3830 (1996).
17. C. Sangregorio, T. Ohm, C. Paulsen, R. Sessoli, and D. Gatteschi, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4645 (1997).
18. V. G. Bar'yakchtar and B. A. Ivanov, *Solitons and Thermodynamics of Low-Dimensional Magnets*, *Sov. Sci. Rev.* I. M. Khalatnikov (ed.), **16** (1992).
19. А. И. Переломов, *Интегрируемые системы класссической механики и алгебры Ли*, Наука, Москва (1990).
20. C. Neumann, *J. Reine Angew. Math.* **56**, 46 (1859).
21. В. М. Елеонский, Н. Е. Кулагин, *ЖЭТФ* **84**, 616 (1983).
22. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, *ЖЭТФ* **77**, 409 (1979).
23. E. K. Sklyanin, *On complete integrability of the Landau-Lifshitz equation*, *Preprint LOMI E-3-79*, Leningrad (1979).
24. E. M. Chudnovsky, *Phys. Rev.* **A46**, 8011 (1998).
25. E. M. Chudnovsky and D. A. Garanin, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4469 (1997).
26. V. A. Kalatsky, E. Müller-Hartmann, V. L. Pokrovsky, and F. S. Uhrig, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1304 (1998).
27. J.-Q. Liang, H. J. W. Múller-Kirsten, A. V. Shurgaia, and F. Zimmerschied, *Phys. Lett.* **A237**, 169 (1998).
28. А. И. Вайнштейн, В. И. Захаров, В. А. Новиков, М. А. Шифман, *УФН* **136**, 553 (1982).

Exact instanton solution for quantum tunneling in uncompensated antiferromagnet

B. A. Ivanov and V. E. Kireev

An exact instanton solution describing macroscopic quantum tunneling for small antiferromagnetic particles with uncompensated spins and quadratic biaxial anisotropy is constructed. The solution is valid for any relationship between the anisotropy parameters and the relative value of spin non-compensation. The tunneling amplitude is calculated taking into account the pre-exponential factor. This amplitude is non-analytically dependent on the relationship between the small parameters of the problem — the anisotropy in the basal plane and the value of the uncompensated spin.