ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТРЕУГОЛЬНЫХ (РЯДОБРАЗНЫХ) ДВУМЕРНЫХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

М.Н.АБДУЛЛАЕВ

Институт физики НАН Азербайджана AZ 1143, Баку, пр.Г.Джавида 33

Рассмотрены примесные состояния в треугольных двумерных антиферромагнетиках. Расчеты относятся к двумерным гексагональным структурам, в которых расположение магнитных подрешеток представлено как совокупность двух прямоугольников, вставленных один в другой. Вычисление выполнено с помощью метода функции Грина, из полюса которой получены уравнения для состояний A_1 , B_1 , B_2 , B_3 группы D_{2h} , а их решения дают энергии соответствующих состояний. Показано, что параметры возмущений, содержащиеся в уравнениях для состояний B_1 и B_2 связаны с антипараллельными спинами примесного и замещенного атомов, а для остальных B_3 и A_1 как с паралельными, так и антипараллельными.

В последние годы большое внимание уделяется изучению магнитных и немагнитных свойств фрустационной магнитной системы [1-4]. В частности, это относится к исследованию роли эффекта фрустации в процессе структурных и магнитных фазовых переходов. Это связано с тем, что многие их свойства отличаются от свойств нефрустационных магнитных кристаллов. Хорошим примером таких систем являются трехподрешеточные антиферромагнетики, в которых спины отдельных подрешеток в состоянии Нееля расположены в плоскости "с" под углом 120°. Роль фрустации в различных магнитных системах определяется взаимодействием между магнитными ионами, так что учет дальнего порядка ближайших соседей приводит к увеличению роли явления фрустации в магнитных системах. Такое изменение отражает высокую чувствительность рассмотренных спиновых различного рода возмущающим систем к взаимодействиям, возмущение магнитного среди которых есть кристалла, вносимое примесными атомами.

Примесная задача как в трехмерных, так и в двумерных магнитных системах была исследована на основе спин-волнового приближения, в котором связь между примесью и матрицей считается слабой [5-7]. Известно, что введение в

кристаллическую решетку примесного атома приводит к возникновению дискретных энергетических уровней. Характерной особенностью таких уровней в влияние двумерных магнитных кристаллах является этих уровней на поверхностные возбуждения. Существует другая низкоразмерная магнитная структура, введение в которую примесного атома приводит, например, к смещению положения точки перехода между различными упорядоченными состояниями [8]. треугольных двумерных задача в гейзенберовских анти-Примесная ферромагнетиках была теоретически исследована на основе спин-волнового приближения [9]. При этом возникает вопрос о продолжении исследования такой задачи в более сложных фрустационных двумерных магнитных системах. Как пример можно привести для этих структур рядобразную, соты и линейную модели, которыми описываются структуры представлений кристаллов, соответственно, (RbFeCl₃, CsFeCl₃, CsFeBr₃). Характерной особенностью этих соединений является то, что в первом из них из-за сильного обменного взаимодействия фазовые переходы происходят без внешнего поля, а во втором обменное взаимодействие не состоянии вызвать упорядочение. Есть еще И другая особенность, заключающаяся в том, что взаимодействие между магнитными ионами в одном направлении - ферромагнитное, а в другом – антиферромагнитное. В связи с этим

возникает вопрос о направлении спина примесного атома относительно ферромагнитного и антиферромагнитного направлений магнитных ионов в матрице.

В настоящей работе рассмотрено однопримесное возмущение в двумерных гексагональных ферромагнитных-антиферромагнитных системах. Направление спина примесного атома совпадает с направлением замещенного атома ферромагнитной части рассмотренной системы. Аналогично можно выполнить расчет для замещенного атома антиферромагнитной части системы.

ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ И УРАВНЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ

Рассмотрим плоскую модель рядобразного антиферромагнитного кристалла, в котором расположение магнитных атомов образует гексагональную структуру. Эти атомы в гексагональной примитивной ячейке занимают позиции двух типов: ферромагнитные и антиферромагнитные. Симметрия такой примитивной ячейки не отражает симметрию решетки Браве для рассматриваемого магнитного кристалла. Основываясь на этих свойствых примитивных ячеек, мы можем построить элементарную ячейку кристалла, обладающую симметрией решетки Браве. Как видно из Рис.1, элементарную ячейку можно представить, как совокупность двух прямоугольников, вставленных один в другой так, что у каждого атома подрешетки "a" все ближайшие соседи внутри прямоугольника являются атомами подрешетки "b", а вне прямоугольника - атомами подрешетки "a" и наоборот. Группа симметрии такого расположения магнитных атомов D_{2h}. Элементы симметрии этой



группы переводят один атом в другой внутри каждой позиции.

Рис.1.

Рядобразный подрешеточный антиферромагнетик. Химическая (ABB) и магнитная (AAA) элементарные ячейки представлены равносторонними треугольниками со сторонами *a* и *d*=2*a*, соответственно.

Рядобразный двумерный магнитный кристалл с примесь описывается гамильтонианом:

$$H = -J_{a} \sum_{j,\Delta_{1}} \vec{S}_{j} \vec{S}_{j+\Delta_{1}} + J_{b} \sum_{j,\Delta_{2}} \vec{S}_{j} \vec{S}_{j+\Delta_{2}} + J_{a} \sum_{\Delta_{1}} \vec{S}_{1} \vec{S}_{1+\Delta_{1}} - J_{a} \sum_{\Delta_{1}} \vec{S}_{1} \vec{S}_{1+\Delta_{1}} - J_{b} \sum_{\Delta_{2}} \vec{S}_{1} \vec{S}_{1+\Delta_{2}} + J_{b}^{\dagger} \sum_{\Delta_{2}} \vec{S}_{1} \vec{S}_{1+\Delta_{2}} - D \sum_{j} \left(S_{j}^{z} \right)^{2} + D \sum_{j+\Delta_{2}} \left(S_{j+\Delta_{2}} \right)^{2} + D \left(S_{1}^{z} \right)^{2} - D^{\dagger} \left(S_{1}^{z} \right)^{2}$$

$$(1)$$

здесь Δ_1 и Δ_2 пробегают по ближайшим соседям, соответственно, с параллельными и антипараллельными спинами; J_a и J_b параметры обменного "поля" между магнитными ионами с параллельными и антипараллельными спинами; D параметр анизотропного поля; штрих в (1) относится к примесным атомам.

С помощью преобразований, представленных в работе [9], можно выразить гамильтониан (1) через операторы спиновых отклонений. Введем функцию Грина в следующей форме:

$$G_{j,l}^{aa}(t-t') = \langle \langle a_{j}(t); a_{l}^{+}(t') \rangle \rangle, G_{l,l'}^{bb}(t-t') = \langle \langle b_{l}^{+}(t); b_{l'}(t') \rangle \rangle,$$

$$H_{j+\Delta_{2},l}^{ba}(t-t') = \langle \langle b_{j+\Delta_{2}}^{+}(t); a_{l}^{+}(t') \rangle \rangle, H_{l-\Delta_{1};l'}^{ab}(t-t') = \langle \langle a_{l-\Delta_{1},l'}(t); b_{l'}(t') \rangle \rangle.$$

$$(2)$$

Здесь a_j и b_l операторы спиновых отклонений, относящиеся к атомам j и l в подрешетках "a" и "e" соответственно.

Функции Грина в (2) удовлетворяют уравнениям в матричной форме:

$$\begin{cases} \left(\oint^{\oplus aa} & \oint^{\oplus ab} \\ \oint^{\oplus ba} & \oint^{\oplus bb} \\ \end{array} \right)^{-1} + V \\ \left(\oint^{\oplus aa} & \oint^{\oplus bb} \\ \oint^{\oplus ab} \\ \int^{-1} + V \\ \end{array} \right) \\ \left(\oint^{\oplus ab} \\ \oint^{\oplus ba} & \oint^{\oplus bb} \\ \end{array} \right)^{-1} + V \\ \left(\oint^{\oplus ab} \\ \oint^{\oplus bb} \\ \end{bmatrix} \\ \left(\oint^{\oplus ab} \\ \oint^{\oplus bb} \\ \end{bmatrix} = \frac{\overline{1}}{2\pi} \\ \left(\oint^{\oplus} \\ f \\ f \\ \end{smallmatrix} \right)$$
(3)

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

$$\begin{cases} \left(\begin{array}{cc} \mathbf{O}^{\oplus aa} & \mathbf{I} \mathbf{f}^{\oplus ab} \\ \mathbf{I} \mathbf{f}^{\oplus ba} & \mathbf{O}^{\oplus bb} \end{array} \right)^{-1} + \mathbf{V} \mathbf{f} \end{cases} \left(\begin{array}{cc} \mathbf{O}^{\oplus aa} & \mathbf{I} \mathbf{f}^{\oplus ab} \\ \mathbf{I} \mathbf{f}^{\oplus aa} & \mathbf{O}^{\oplus bb} \end{array} \right) = \frac{\overline{1}}{2\pi} \begin{pmatrix} \mathbf{f} \mathbf{f} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} \mathbf{f} \mathbf{f} & -\mathbf{f} \mathbf{f} \end{pmatrix}$$
(4)

Индекс "0" на функциях Грина означает, что они составлены для идеального кристалла, нижние индексы j и l функции Грина в (2) пробегают по ферромагнитным и антиферромагнитным ионам, поэтому матрица функции Грина и оператора возмущения имеют размеры 7х7. Простой расчет для функций H^{0ba} и H^{oab} показывает, что между ними имеется соотношение H^{0ba}=H^{oab}. Учитывая это, матрицы функций Грина и оператор возмущения можно представить в виде:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{\Phi}^{0aa} & -\mathbf{H}^{0aa} \\ \mathbf{H}^{0ba} & \mathbf{\Phi}^{0aa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11}^{0aa} & G_{12}^{0aa} & G_{12}^{0aa} & H_{41}^{0ba} & H_{41}^{0ba} & H_{41}^{0ba} \\ G_{21}^{0aa} & G_{11}^{0aa} & G_{23}^{0aa} & G_{23}^{0aa} \\ G_{21}^{0aa} & G_{23}^{0aa} & G_{11}^{0aa} & H_{52}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & H_{52}^{0ba} \\ G_{21}^{0aa} & G_{23}^{0aa} & G_{11}^{0aa} & H_{52}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} \\ H_{41}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & G_{44}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{46}^{0b\phi} & G_{47}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{44}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{44}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & G_{46}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & G_{46}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} \\ H_{41}^{0ba} & H_{42}^{0ba} & H_{52}^{0ba} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{45}^{0b\phi} & G_{44}^{0b\phi} \end{pmatrix}$$

(5)
·	/

$$\mathbf{V} \in = \begin{pmatrix} \varepsilon & -\lambda_{a} & -\lambda_{a} & \lambda_{b} & \lambda_{b} & \lambda_{b} & \lambda_{b} & \lambda_{b} \\ -\lambda_{a} & \rho_{a} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_{a} & 0 & \rho_{a} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{b} & 0 & 0 & \rho_{b} & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{b} & 0 & 0 & 0 & \rho_{b} & 0 & 0 \\ \lambda_{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{b} & 0 \\ \lambda_{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{b} & 0 \\ \end{pmatrix}$$

где

 $ε = \{z_{,}J_{a}(1-J'_{a}/J_{a})+z_{2}2J_{b}(1-J'_{b}/J_{b})+2D(1-D'S'/DS)\}S$ $\lambda_{a}=J_{a}S(1-(J'_{a}/J_{a})\sqrt{S'/S}); \quad \lambda_{b}=J_{b}S(1-(J'_{b}/J_{b})\sqrt{S'/S})$ $\rho_{a}=J_{a}S(1-J'_{a}S'/J_{a}S); \quad \rho_{b}=J_{b}S(1-J'_{b}S'/J_{b}S),$ 3.465 J. H. Z. HICLO DIMENSITY COCCLEME B. (DEPROMACHINE)

здесь z₁ и z₂ число ближайших соседей в ферромагнитной и антиферромагнитной позициях соответственно.

СПЕКТР ПРИМЕСНЫХ УРОВНЕЙ

Спектр элементарных возбуждений в плоской ферромагнитной и антиферромагнитной гексагональной системе определяется полюсом функции Грина в (4), т.е.

$$\det \left\{ 1 + \begin{pmatrix} \mathbf{\Phi}^{0aa} & \mathbf{H}^{0ab} \\ \mathbf{H}^{0ba} & \mathbf{\Phi}^{0bb} \end{pmatrix} \right\} = 0$$
(6)

Для упрощения вычислений этого детерминанта приведем его к квазидиагональному виду. Эта процедура осуществляется с помощью унитарной матрицы, построение которой основано на теории групп [10].

Поскольку атомы с параллельными и антипараллельными спинами, занимающие различные кристаллические позиции, не могут быть связаны элементами группы-D_{2h}, то симметризованные функции неприводимых представлений этой группы построены для каждой позиции отдельно. С помощью этих функций можно построить унитарную матрицу для каждой позиции в следующем виде:

$$U^{\text{E}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{A_{1}} & B_{3} \end{vmatrix} \qquad U^{\text{E}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac$$

Комбинируя эти матрицы в единую матрицу [11], можно записать на основе (6) полную унитарную матрицу

$$\mathcal{U} \in = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}$$

Действие унитарной матрицы в (8) на детерминант в (6) приводит к произведению множителей, соответствующих неприводимым представлениям группы D_{2h}.

$$\begin{aligned} \det \left(\mathbf{f}_{B_{2}}^{e} \middle| \mathbf{f}_{+} \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{0}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \\ \mathbf{f}_{0}^{0ba} & \mathbf{f}_{0}^{0bb} \end{array} \right) \mathbf{V} \middle| \mathbf{f}_{B_{2}}^{e} \right) &= 1 - \left(G_{44}^{0bb} + G_{45}^{0bb} - G_{46}^{0bb} - G_{47}^{0bb} \right) \rho_{b} = 0 \\ \det \left(\mathbf{f}_{B_{1}}^{e} \middle| \mathbf{f}_{+} \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{0}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \\ \mathbf{f}_{0}^{0bb} & \mathbf{f}_{0}^{0bb} \end{array} \right) \mathbf{V} \middle| \mathbf{f}_{B_{1}}^{e} \right) &= 1 - \left(G_{44}^{0ab} - G_{45}^{0bb} + G_{46}^{0bb} - G_{47}^{0bb} \right) \rho_{b} = 0 \\ \det \left(\mathbf{f}_{B_{1}}^{e} \middle| \mathbf{f}_{+} \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{0}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \\ \mathbf{f}_{0}^{0ba} & \mathbf{f}_{0}^{0bb} \end{array} \right) \mathbf{V} \middle| \mathbf{f}_{B_{3}}^{e} \right) &= \\ &= \det \left(\mathbf{f}_{e} \middle| \left| \int_{\sqrt{2} \left(\mathbf{f}_{10}^{0aa} - G_{23}^{0aa} & \sqrt{2} \left(\mathbf{h}_{42}^{0ab} - H_{52}^{0ab} \right) \\ \mathbf{f}_{24}^{0bb} - G_{45}^{0bb} - G_{45}^{0bb} - G_{46}^{0bb} - G_{47}^{0bb} \right) \right| \rho_{a} = 0 \\ \det \left(\mathbf{f}_{e} \middle| \left| \mathbf{f}_{+} \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{0}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \\ \mathbf{f}_{20}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \end{array} \right) \mathbf{V} \middle| \mathbf{f}_{e} \right| \right) &= \\ &= \det \left(\mathbf{f}_{e} \middle| \left| \left| \mathbf{f}_{+} \left(\begin{array}{c} \mathbf{f}_{0}^{0aa} & \mathbf{f}_{0}^{0ab} \\ \mathbf{f}_{21}^{0ab} & \mathbf{f}_{22}^{0aa} \end{array} \right) \mathbf{V} \middle| \mathbf{f}_{e} \right| \right) \right| &= \\ &= \det \left(\mathbf{f}_{e} \middle| \left| \left| \begin{array}{c} G_{11}^{0aa} & \sqrt{2} G_{12}^{0aa} & \sqrt{2} (H_{12}^{0aa} + H_{23}^{0aa} \\ \sqrt{2} G_{21}^{0aa} & \mathbf{f}_{11}^{0ab} \\ 2H_{0}^{0ba} & \sqrt{2} (H_{12}^{0ab} + H_{52}^{0aa}) \\ 2H_{0}^{0ba} & \sqrt{2} (H_{42}^{0ab} + H_{52}^{0aa}) \\ \sum_{i=4}^{7} G_{4}^{ibb} \right| \right| \right| \left| \begin{array}{c} \varepsilon & -\sqrt{2}\lambda_{a} & \sqrt{2}\lambda_{b} \\ -\sqrt{2}\lambda_{a} & \rho_{a} & 0 \\ \sqrt{2}\lambda_{b} & 0 & \rho_{b} \\ \right| \right| \right| \right) = 0 \end{array} \right) \right| \\ &= 0 \end{aligned}$$

При составлении функций Грина в (9) использована нумерация атомов первой координатной сферы. Нижние индексы в них означают разность координат атомов. При этом координатная система выбирается так, что начало ее совпадает с примесным атомом. Начало координатной системы на ферромагнитном и антиферромагнитном атомах выбрана произвольно.

Итак, для получения энергии примесных уровней в плоской гексагональной структуре необходимо решить каждое уравнение в (9), хотя бы графически. Рассмотрим сначала уравнения для неприводимых представлений В₂ и В₁ типов. Из матрицы возмущения в (5) видно, что они описывают примесные состояния, имеющиеся в обычных антиферромагнитных системах.

$$B_{2}: \frac{1}{\rho_{b}} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{N^{2}} \sum_{k_{x},k_{y}} \frac{1}{E_{1} + E_{2}} \left\{ \frac{E_{1} - E_{0} + J_{a} \cdot S \cos ak_{x}}{E - E_{1}} + \frac{E_{2} + E_{0} - J_{a} \cdot S \cos ak_{x}}{E + E_{2}} \right\} \times \\ \times \left(1 - e^{-iak_{x}} \right) \left(1 - e^{-ia\sqrt{3}k_{y}} \right)$$

$$B_{1}: \frac{1}{\rho_{b}} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{N^{2}} \sum_{k_{x},k_{y}} \frac{1}{E_{1} + E_{2}} \left\{ \frac{E_{1} - E_{0} + J_{a} \cdot S \cos ak_{x}}{E - E_{1}'} + \frac{E_{2} + E_{0} - J_{a} \cdot S \cos ak_{x}}{E + E_{2}'} \right\} \times \\ \times \left(1 + e^{-iak_{x}} \right) \left(1 - e^{-ia\sqrt{3}k_{y}} \right)$$

$$(10)$$

где

$$E_{1,2}' = \pm \frac{1}{2} \left\{ \left\{ E_1 - E_0 + J_a S \cos ak_x \right\}^2 + 4 \left\{ E_1 \left(E_0 - J_a S \cos ak_x \right) - \left(J_b S \cos ak_x \cos(\sqrt{3}/2) ak_y \right)^2 \right\}^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(E_1 - E_0 + J_a S \cos ak_x \right) \right\}$$

В этих выражениях компоненты двумерного волнового вектора $k_{II}=(k_x,k_y)$ принимают все значения из первой зоны Бриллюэна, которая построена для равносторонней треугольной прямой единичной ячейки (Рис.2). Как видно из Рис.1, длина стороны треугольника (ААА) равна 2a (a – постоянная решетки). С помощью несложного вычисления можно показать, что зона Бриллюэна для двумерного ряд-образного антиферромагнетика имеет форму плоской гексагонали

[12].





Рис.2.

Зона Бриллюэна, построенная по отношению к прямой магнитной элементарной ячейке, которая представлена равносторонним треугольником (ААА) со стороной 2*a*.

Рис.3.

Графическое решение уравнения (9) для неприводимого представления В₃. Прямые линии, соответствующие 1/р (или S'J'/SJ), определяют появление виртуальных и локальных состояний. Виртуальные состояния появляются при некоторых значениях S'J'/SJ. крайние значения которых показаны прямыми линиями. Локальное В₃ состояние появляется при S'J'/SJ>1 и попадает ниже нижней линии.

Графическое решение уравнения относительно 1/ρ₆ в (10) для неприводимых представлений B₁ и B₂ аналогично решению соответствующих уравнений для примесных состояний в простых антиферромагнетиках.

Рассмотрим теперь состояния В₃, описывающиеся квадратичным уравнением относительно параметров возмущений.

$$1 - \left\{ \rho_a \left(G_{11}^{0\,aa} - G_{23}^{0\,aa} \right) + \rho_b \left(G_{44}^{0\,bb} - G_{45}^{0\,bb} - G_{46}^{0\,bb} + G_{47}^{0\,bb} \right) - \left(11 \right) \right. \\ \left. \rho_a \rho_b \left(G_{11}^{0\,aa} - G_{23}^{0\,aa} \right) \left(G_{44}^{0\,bb} - G_{45}^{0\,bb} - G_{46}^{0\,bb} + G_{47}^{0\,bb} \right) + 2\rho_a \rho_b \left(H_{42}^{0\,ab} - H_{52}^{0\,ab} \right)^2 \right\} = 0$$

$$(11)$$

Поскольку это уравнение с двумя неизвестными (ρ_a , ρ_b), его точное решение ни в аналитическом, ни в графическом виде получить нельзя. Поэтому возникает необходимость нахождения какой-нибудь связи между этими неизвестными. Заметим, что при $\rho_a = \rho_b = \rho$ уравнение в (11) сводится к квадратичному уравнению относительно 1/ ρ , графическое решение которого представлено на Рис.3.

Наконец, рассмотрим состояния типа A₁. В уравнении (9), которое описывает эти состояния, имеется сложная зависимость от параметров возмущений. Поэтому необходимо найти приближенный подход для решения этого уравнения. Если

М.Н.АБДУЛАЕВ

ограничимся линейными членами по параметрам воэмущений, то оно сильно упрощается, но такое упрощение не помогает решению уравнения (9) в аналитическом виде. Поэтому мы продолжаем искать другой приближенный подход для решения этого уравнения. При $J'_b=J_b$, S'=S источник возмущения примесного атома переходит в ферромагнитную позицию, а при $J'_a=J_a$, S'=S - в антиферромагнитную. В обоих случаях число параметров воэмущений больше одного, что затрудняет решение уравнения. Только при одновременном выполнении вышеуказанных условий получается следующее уравнение:

$$\frac{1}{\varepsilon} = G_{11}^{0^{aa}} (E) = \frac{1}{N} \sum_{k_x} \frac{E + (z_2 J_b + 2D)S}{E^2 - (z_2 J_b + 2D)^2 S^2 + (z_2 J_b S \gamma_{k_x})^2},$$
(12)
где $\varepsilon' = 2DS \left(1 - \frac{D}{D} \cdot \frac{S}{S} \right).$

При k_x≥0 приближенное решение этого уравнения может быть получено в аналитическом виде: $E_{A_1} \cong 2S\sqrt{\Delta + \varepsilon \Delta + \varepsilon^{2}}$. Откуда видно, что уровень E_{A_1} попадает вне полосы спектра, ширина которого равна $E \cong 2S\sqrt{\Delta} = 2S\sqrt{z_2J_b - D + D^2}$.

- 1. W.M.Zhang, W.M.Saslow, Phys. Rev., B42 (1993)10204.
- 2. Ch.Waldtmann, H.kreutzmann, U.Schollwock, etc., Phys. Rev., B62 (2000) 9472.
- 3. Yoshihiro Takushima, Akihiso Koga, Norio Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn., 70 (2001) 1369.
- 4. C.Knetter, A.Buhler, E.M.Hartmann etc., Phys. Rev. Lett., 85 (2000) 3958.
- 5. T.Wolfram, J.Callaway, Phys. Rev., 130 (1963) 2207.
- 6. S.Takeno, Progr. Theor. Phys., 30 (1963) 731.
- 7. Н.Г.Гусейнов, Ю.М.Сеидов, ЖЭТФ, **51** (1966) 1084.
- 8. M.W.Moore, P.Day, C.Wilkinson, K.R.A.Ziebeck, Solid State Commun., 53 (1985) 1009.
- 9. М.Н.Абдулаев, ФНТ, **27** (2001) 865.
- 10. В.Хейне, Теория групп в квантовой механике, Москва, (1963).
- 11.Ю.А.Изюмов. В.Е.Найш, Р.П.Озеров, *Нейтронография магнетиков*, *Атомиздат, Москва*, **2** (1981).
- 12. В.В.Еременко, Введение в оптическую спектроскопию, Наукова думка, Киев, (1975).

ÜÇBUCAQ (SERAYABƏNZƏR) İKİÖLÇÜLÜ ANTİFERRMAQNİTLƏRDƏ AŞQAR ATOM SƏVİYYƏLƏRİ

M.N.ABDULLAYEV

İkiölcülü üçbucaq antiferromaqnitlərdə aşqar atom səviyyələri nəzəri cəhətdən öyrənilmişdir. Hesablama heqsoqonal qurluşlu maqnit kristallarında aparılmışdır. Qrin funksiyası metodu əsacında D_{2h} qruppasının A₁, B₁, B₂ və B₃ qeyri keçrici təsvirləri ilə təsvir olunan hallar üçün enerji hesablanmışdır.

IMPURITY STATES IN TRIANGLAR (ROW MODEL) TWO-DIMENSIONAL ANTIFERROMAGNETS

M.N.ABDULLAEV

Impurity atom states in the triangular two-dimensional antiferromagnets were investigated theoretically. Calculations were made in hexagonal magnetic crystals. Energies were obtained for the states A_1 , B_1 , B_2 and B_3 of the group D_{2h} by Green's function method.

Редактор: Ф.Гашимзаде