

ИНДУЦИРОВАННЫЙ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В КВАНТОВОМ ПЛАКЕТНО-ДЕФОРМИРОВАННОМ ДВУМЕРНОМ МАГНЕТИКЕ

В. В. Вальков^{a,b,c}, В. А. Мицкан^{a,b}*

^a *Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Красноярский государственный университет
660075, Красноярск, Россия*

^c *Красноярский государственный технический университет
660074, Красноярск, Россия*

Рассмотрено влияние магнитного поля на структуру основного состояния двумерного гейзенберговского квантового магнетика с плакетной деформацией. В рамках плакетного представления решена самосоглашенная задача и вычислен спектр коллективных возбуждений в магнитном поле. Получены условия, при которых во внешнем магнитном поле происходит квантовый фазовый переход из немагнитной фазы в скошенную антиферромагнитную. Смена основного состояния системы сопровождается исчезновением щели в спектре элементарных возбуждений. Проанализировано влияние фрустраций и магнитного поля на его эволюцию. Построена фазовая диаграмма, определяющая области устойчивости синглетного и магнитоупорядоченного состояний в магнитном поле.

PACS: 73.22.Lp, 75.10.Dg, 75.50.Ee

Введенная Андерсоном [1] концепция магнитного механизма куперовской неустойчивости в высокотемпературных сверхпроводниках активизировала экспериментальные и теоретические исследования квазинизкомерных магнетиков [2, 3]. В таких материалах из-за пониженной размерности и наличия фрустрированных связей квантовые спиновые флуктуации могут становиться настолько существенными, что радикально меняют как характер основного состояния, так и низкотемпературное поведение системы. В частности, во многих квазидвумерных магнетиках, например в CaV_4O_9 [4], $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_6$ [5], $\text{SrCu}_4(\text{VO}_3)_2$ [6], $(\text{C}_4\text{H}_{12}\text{N}_2)\text{Cu}_2\text{Cl}_6$ [7] при понижении температуры обнаруживается резкое падение магнитной восприимчивости. Подобное поведение наблюдается в квазиодномерных системах при спин-пайерлсовском переходе [8]. Физика перехода заключается в том, что при понижении температуры происходит димеризация антиферромагнитной (АФМ) цепочки с возникновением кол-

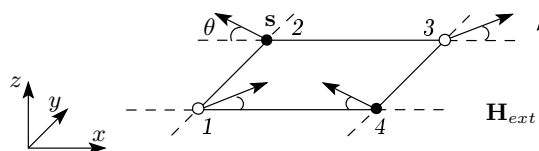


Рис. 1. Структура скошенной фазы во внешнем магнитном поле

лективной синглетной фазы. При этом в качестве механизма, индуцирующего такой переход, выступает магнитоупругое взаимодействие.

В работе [9] было рассмотрено обобщение одномерного сценария формирования синглетной фазы на двумерные системы. Рассматривался гейзенберговский магнетик на квадратной решетке, допускающей плакетную деформацию (см. рис. 1 из работы [9]). При разрушении дальнего АФМ-порядка спектр возбуждений плакетно-деформированного квантового двумерного магнетика становится щелевым. Величина этой щели определяется параметрами взаимодействия рассматриваемой моде-

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

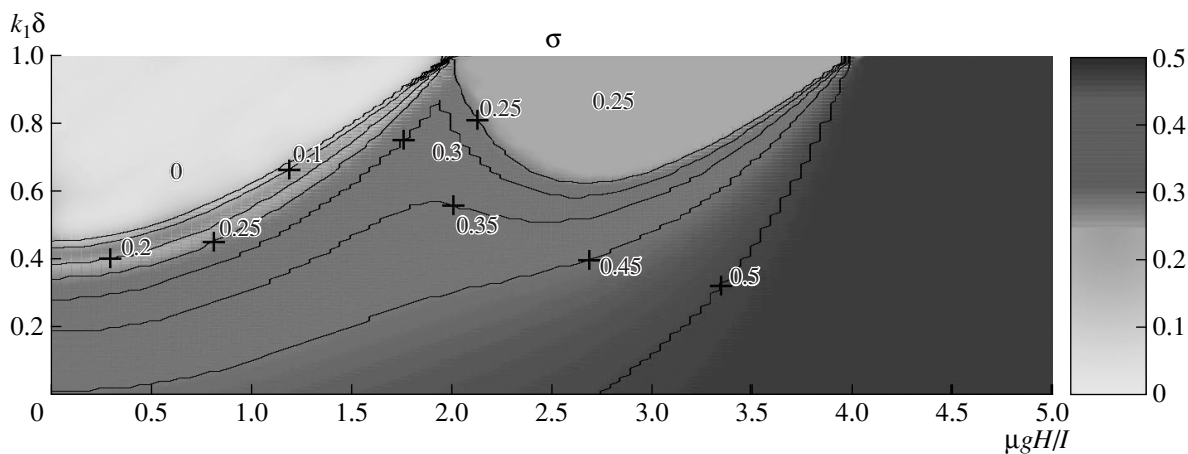


Рис. 2. Зависимости приведенной намагниченности от магнитного поля и плакетной деформации в отсутствие фрустраций ($J = 0$)

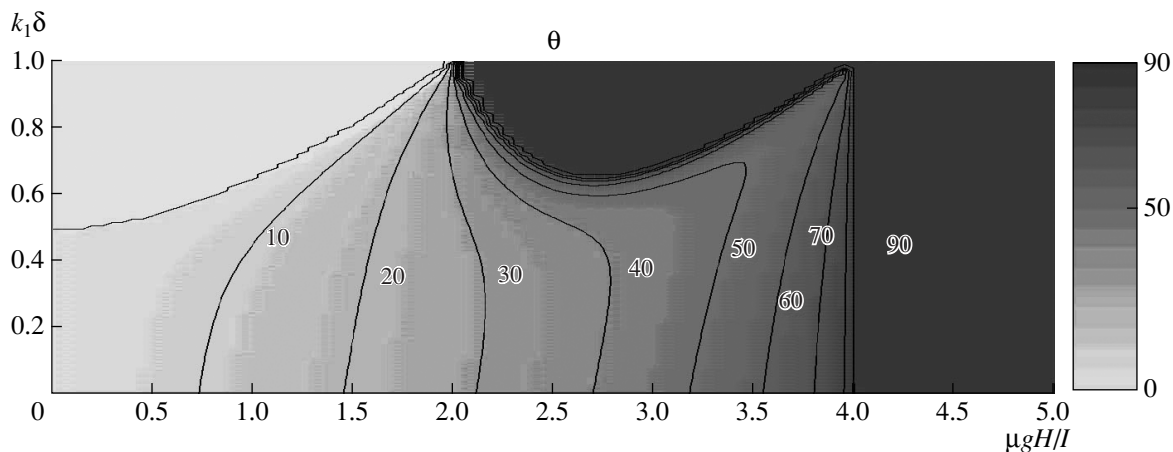


Рис. 3. Зависимости угла поворота спинов от магнитного поля и плакетной деформации в отсутствие фрустраций ($J = 0$)

ли и зависит от внешних условий, в частности, от магнитного поля. Подавление магнитным полем спин-щелевой фазы и возникновение АФМ-порядка в кристалле $TiCuCl_3$ экспериментально наблюдалось в работе [10].

В данной работе развитый в [9] метод теоретического рассмотрения синглетной фазы квантового двумерного магнетика с плакетной деформацией обобщается на случай учета внешнего магнитного поля. С этой целью плакетное представление квантового деформированного двумерного фрустрированного антиферромагнетика построено при наличии магнитного поля. Особенность представления заключается в явном учете скоса магнитных подрешеток антиферромагнетика при $H \neq 0$ (см. рис. 1).

Этот скос параметризуется посредством угла θ , как показано на рис. 1 и находится при точном учете внутриплакетных (сильных) взаимодействий. Таким образом, параметр порядка магнитоупорядоченной фазы будет описываться двумя величинами: $\sigma_x = \langle S_1^x \rangle$ и $\sigma_z = \langle S_1^z \rangle$, т.е. средними значениями проекций спина на первом узле (нумерация узлов в плакете приведена на рис. 1).

Включение магнитоупругого взаимодействия реализуется посредством учета зависимости обменных интегралов от расстояния между узлами [9]. При наложении магнитного поля происходит частичная модификация процедуры введения самосогласованного поля. Главная особенность заключается в учете ее векторного характера. При этом од-

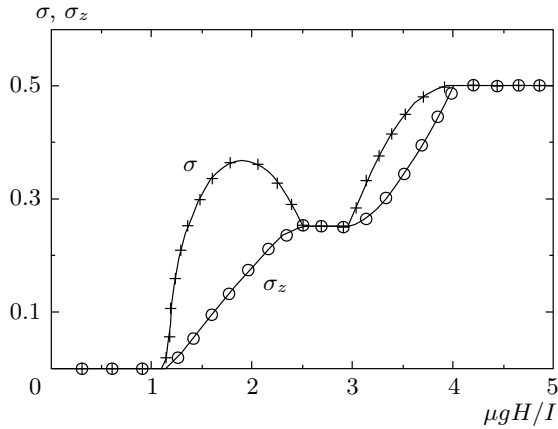


Рис. 4. Зависимость полной намагниченности и проекции намагниченности на направление магнитного поля от его величины при $k_1\delta = 0.67$ ($J = 0$)

на компонента ориентирована вдоль магнитного поля $\bar{H}_z = (2I^{ex} - (2J + J_1))\sigma_z$, а вторая — в плоскости, перпендикулярной вектору магнитного поля $\bar{H}_x = (2I^{ex} - (2J + J_1))\sigma_x$. В этом случае гамильтониан H_0 , описывающий отдельный плакет, находящийся в самосогласованном поле, запишется в виде

$$H_0 = -2\bar{H}_x\sigma_x + \bar{H}_xD^x + 2\bar{H}_z\sigma_z - \bar{H}_zF^z + I^{in}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) + J^{in}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) - \mu g \mathbf{H} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4), \quad (1)$$

где D^x и F^z — операторы, определяемые следующими выражениями:

$$D^x = (S_1^x - S_2^x + S_3^x - S_4^x), \quad (2)$$

$$F^z = (S_1^z + S_2^z + S_3^z + S_4^z).$$

Величины проекций намагниченности на оси x и z находятся из уравнений самосогласования:

$$\sigma_z = \frac{1}{4} \langle \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) | S_1^z + S_2^z + S_3^z + S_4^z | \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) \rangle, \quad (3)$$

$$\sigma_x = \frac{1}{4} \langle \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) | S_1^x - S_2^x + S_3^x - S_4^x | \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) \rangle.$$

Величина полной намагниченности и угол отклонения находятся из следующих соотношений:

$$\sigma = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_z^2}, \quad \text{tg } \theta = \sigma_z / \sigma_x. \quad (4)$$

На рис. 2 представлены зависимости намагниченности σ от величины деформации и внешнего магнитного поля в отсутствие фрустраций, а на рис. 3 — зависимости угла поворота спинов от этих же парамет-

ров. На рис. 2 светлая область соответствует параметрам, при которых величина средней намагниченности на узле равна нулю, черный цвет соответствует максимальной намагниченности $1/2$. Следует отметить возникновение коллинеарной фазы, являющейся суперпозицией четырех состояний, в каждом из которых три спина плакета направлены по полю, а четвертый — в противоположном направлении. При этом получается, что средняя намагниченность на узле составляет $1/4$. Тот факт, что эти состояния являются коллинеарными, виден из рис. 3. Как и ожидалось, наличие магнитного поля уменьшает область реализации синглетного состояния, т. е. необходимо большее значение деформации для того, чтобы система могла перейти в немагнитную фазу (в отсутствие магнитного поля при $J = 0$ переход происходит при $k_1\sigma \approx 0.42$). Наличие фрустрированного взаимодействия J , в свою очередь, способствует разрушению магнитного порядка, что приводит к увеличению области реализации синглетного состояния. При больших значениях магнитного поля ($\mu g H \sim 4I$) система переходит в ферромагнитное состояние.

При больших значениях деформации в поведении системы возникает еще одна особенность. На рис. 4 приведена зависимость средней намагниченности и ее проекции на направление магнитного поля (σ_z) от его величины при фиксированной деформации $k_1\delta = 0.67$. Как видно, при полях порядка $2I$ величина намагниченности начинает уменьшаться, но из-за скашивания спинов проекция на направление поля при возрастании H является монотонной функцией. Необходимо отметить также наличие «плато» у кривой намагничивания, когда система находится в коллинеарной фазе.

После выяснения характера основного состояния системы в различных областях параметров перейдем к вычислению спектра элементарных возбуждений. Процедура нахождения спектра в принципиальном отношении остается такой же, как и в работе [9]. Однако проведение конкретных расчетов при $\mathbf{H} \neq 0$ из-за поворота спиновых моментов становится более сложным.

Результаты численных расчетов показаны на рис. 5, где приведена эволюция спектра элементарных возбуждений с увеличением магнитного поля для нефрустрированной системы ($J = 0$) при фиксированной величине деформации $k_1\delta = 0.5$. Значение деформации выбрано таким образом, чтобы в отсутствие магнитного поля система находилась в неупорядоченной фазе. В синглетной фазе нижняя энергетическая ветвь является триплетом, и при малых

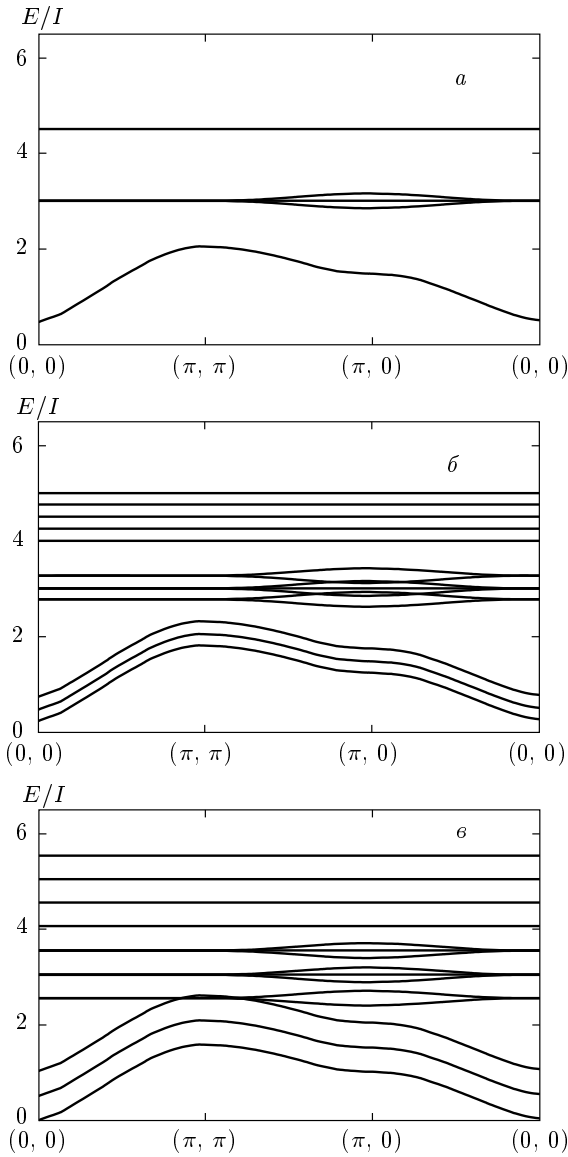


Рис. 5. Эволюция спектра элементарных возбуждений нефрустрированной системы при фиксированной деформации $k_1\delta = 0.5$; $J = 0$, $H = 0$ (а), $0.25I$ (б), $0.5I$ (в)

полях она расщепляется на три линии (см. рис. 5б), что приводит к уменьшению энергетической щели. В точке перехода в магнитоупорядоченную фазу (в данном случае при $\mu g H = 0.5$) в соответствии с теоремой Голдстоуна щель в спектре исчезает (рис. 5в). При дальнейшем увеличении магнитного поля нижняя ветвь остается бесщелевой, а две другие уходят в область более высоких энергий.

Как показали расчеты, при фиксированной деформации системы величина щели убывает линейно с увеличением магнитного поля. В работе [9] бы-

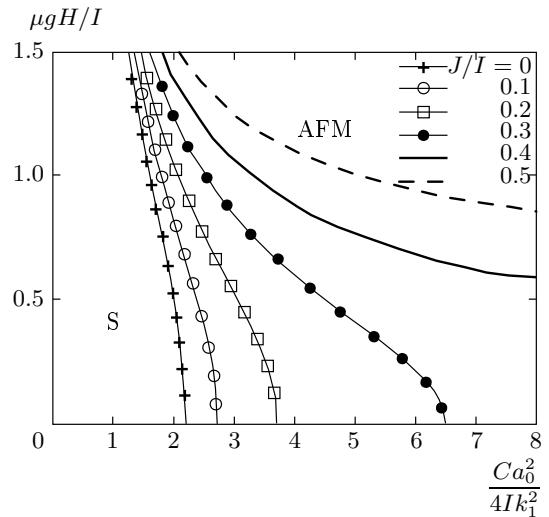


Рис. 6. Фазовая диаграмма квантового фрустрированного двумерного квантового магнетика; $k_2 = k_1$; S — синглетная фаза, AFM — скошенная антиферромагнитная фаза

ло получено аналитическое уравнение для величины энергетической щели в синглетной фазе без магнитного поля. Воспользовавшись этим уравнением, мы можем записать выражение для критического значения магнитного поля как функции деформации и интенсивности фрустраций:

$$\mu g H = I \left[\frac{11}{3} (k_1 \delta)^2 + 2k_1 \delta - \frac{5}{3} + 4 \frac{J}{I} \left(1 + k_1 \delta - \frac{1}{3} k_2 \delta (1 + k_1 \delta) \right) \right]^{1/2}. \quad (5)$$

Энергию деформации в расчете на один плакет можно записать в виде $E_{el} = 2\tilde{C}\delta^2 = 2C d^2$, где C — эффективная константа упругого взаимодействия, d — величина деформации. Тогда равновесное значение деформации δ получается из решения уравнения

$$\frac{\partial E_m(\delta)}{\partial \delta} + 4\tilde{C}\delta = 0. \quad (6)$$

В точке перехода в синглетную фазу параметр плакетной деформации δ , кроме того что является решением уравнения (8), должен соответствовать критическому значению произведения $(k_1 \delta)_c$, которое отвечает фазовому переходу. Результатом удовлетворения этих требований выступает уравнение, опре-

деляющее границу раздела антиферромагнитной и синглетно-плакетной фаз:

$$\frac{Ca_0^2}{4Ik_1^2} = \lambda \left(\frac{J}{I}, \frac{k_2}{k_1}, H \right). \quad (7)$$

Здесь λ — параметр, определяемый выражением

$$\lambda \left(J, \frac{k_2}{k_1} \right) = -\frac{1}{4(k_1\delta)_c} \left(\frac{\partial E_m}{\partial (k_1\delta)} \right)_{k_1\delta=(k_1\delta)_c}. \quad (8)$$

Таким образом, определив параметр λ , зависящий от J/I , k_2/k_1 и магнитного поля, мы однозначно определяем фазовую диаграмму. На рис. 6 приведены результаты расчета значения магнитного поля, разрушающего синглетную фазу, в зависимости от величины $Ca_0^2/4Ik_1^2$ для различных значений величины фрустрации.

В отсутствие магнитного поля при $J > 0.42I$ реализуется только синглетная фаза для любых значений λ (переход в АФМ-фазу при $J > 0.6I$ не рассматривался, так как в этом случае имеет место иной тип магнитного упорядочения).

Работа выполнена при поддержке программы президиума РАН «Квантовая макрофизика», РФФИ и ККФН (2005 Енисей, грант № 05-02-97710), Интеграционного проекта СО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
2. A. V. Chubukov, S. Sachdev, and J. Ye, *Phys. Rev. B* **49**, 11919 (1994).
3. A. P. Kampf, *Phys. Rep.* **249**, 219 (1994).
4. S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2758 (1995).
5. G. Petrákovskii, K. A. Sablina, A. M. Vorotynov et al., *Phys. Sol. St.* **41**, 610 (1999).
6. H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern et al., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
7. M. B. Stone, I. Zaliznyak, D. H. Reich et al., *Phys. Rev. B* **64**, 144405 (2001).
8. А. И. Буздин, Л. Н. Булаевский, *УФН* **131**, 495 (1980).
9. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, Г. А. Петраковский, *ЖЭТФ* **129**, 234 (2006).
10. V. N. Glazkov, A. I. Smirnov, H. Tanaka, and A. Oosava, *Phys. Rev. B* **69**, 184410 (2006).