

Влияние диполь-дипольного взаимодействия на низкотемпературный магнетизм линейных спиновых цепочек

А.В. Журавлев, И.М. Крыгин

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: zhuravlev@kinetic.ac.donetsk.ua

Статья поступила в редакцию 27 июля 2009 г., после переработки 9 сентября 2009 г.

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в линейной цепочке спинов $S = 1/2$ с одноосной обменной анизотропией вызывает эволюцию системы энергетических уровней. С ростом магнитодипольного взаимодействия самое быстрое уменьшение энергии наблюдается для уровня с максимальным модулем спина системы. При достаточно большом отношении диполь-дипольного вклада к обменному происходит переход между спин-щелевыми состояниями — антиферромагнитным и ферромагнитным. Для узкой окрестности точки изменения типа основного состояния характерно чрезвычайно резкое изменение среднеквадратичного спина системы в области низких температур ($T < 10^{-3}$ J/k) с последующим «плато» на температурной зависимости.

Магнітна диполь-дипольна взаємодія у лінійному ланцюжку спінів $S = 1/2$ з одноосьовою обмінною анізотропією викликає еволюцію системи енергетичних рівнів. З ростом магнітодипольної взаємодії найбільш швидко зменшення енергії спостерігається для рівня з максимальним модулем спіна системи. При досить великому відношенні диполь-дипольного внеску до обмінного відбувається перехід між спін-щільними станами — антиферомагнітним і феромагнітним. Поблизу точки зміни типу основного стану характерна надзвичайно різка зміна середньоквадратичного спіна системи в області низьких температур ($T < 10^{-3}$ J/k) з наступним «плато» на температурній залежності.

PACS: 75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовую спиновую фрустрацию;
75.30.Gw Магнитная анизотропия;
75.40.Cx Статические свойства;
75.40.-s Эффекты в критических точках, удельная теплоемкость, ближний порядок.

Ключевые слова: $S=1/2$ спиновая цепочка, основное состояние, плато намагниченности, анизотропия, точная диагонализация.

Введение

Антиферромагнитные гейзенберговские цепочки спинов $S = 1/2$ (S — эффективное значение спина магнитного иона) — наиболее давний [1] и хорошо исследованный тип сильно коррелированных систем на регулярной решетке. Одномерные системы привлекают пристальное внимание как объекты, допускающие исследование в рамках относительно простых модельных представлений, а также в связи с исследованием запутанных состояний в многочастичных системах и работами по созданию квантовых компьютеров. Изучение запутанных состояний, необходимое для решения задачи адресации кубитов в квантовых регистрах [2,3], удается провести только в сравнительно простых случаях, когда возможна точная диагонализация гамильтониана многочастичной системы [4].

Свойства спиновых цепочек радикально зависят от величины спинового момента магнитных ионов. Ф.Д.М. Халдейн [5,6] установил, что щель, разделяющая основное и возбужденные состояния (щель Халдейна), конечна для однородных цепочек с целочисленным спином, и отсутствует в случае нецелочисленного. Хотя дальний порядок в однородной бесконечной одномерной $S = 1/2$ системе отсутствует, магнитная корреляционная длина оказывается бесконечной. Температура абсолютного нуля является критической точкой системы [7], а при конечных температурах система плавно переходит от антиферромагнитного предела к парамагнитному [8]. Наличие изолированной критической точки вызывает неустойчивость основного состояния цепи спинов по отношению к слабым возмущениям — магнитному полю, примесям, искажениям кристаллической структуры.

Для однородной цепочки $S = 1$ щель в спектре пропорциональна константе обменного взаимодействия, а длина спин-спиновой корреляции оказывается около семи межспиновых расстояний. Халдейновская щель наблюдалась экспериментально на соединениях с $S = 1$: $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ (NENP) [9], $\text{Ni}(\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ (NINO) [10], $\text{Ni}(\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2)_2\text{N}_3(\text{ClO}_4)$ (NINAZ) [11], Y_2BaNiO_5 [12], $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$ [13], а также допированного магнитными и немагнитными примесями $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$ [7]. В основном состоянии, в области низких температур, цепочка целочисленных спинов остается немагнитной и устойчивой по отношению к слабым возмущениям. Внешние воздействия [14], примеси [7,15] и нарушения однородности расположения магнитных ионов лишь уменьшают величину щели. На зависимости намагниченности в сильных магнитных полях щелевой характер одномерного магнетика может проявляться в виде «плато намагниченности» [16]. Наличие щели в энергетическом спектре не является исключительной особенностью цепочек целочисленных спинов. Для 1D системы с попеременным изменением значения обменного интеграла соседних спиновых пар (альтернированные цепи) щель в энергетическом спектре появляется и при полужелтых значениях S . Ширина ее монотонно зависит от величины изменения обменного интеграла (параметром альтернирования, δ) [17,18]. Как и в предыдущем случае, появление щели сопровождается переходом в немагнитное основное состояние с конечной длиной спин-спиновых корреляций. Альтернирование обмена может наблюдаться при определенной геометрии кристаллической решетки, как в CuWO_4 [19], Bi_2CuO_4 [20,21], $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [22], $(\text{CH}_3)\text{CHNH}_3\text{CuBr}_3$ [23]. Для перечисленных соединений наблюдаются особенности свойств, выходящие за рамки традиционной теории: немонотонное поведение восприимчивости и полей антиферромагнитного резонанса, несколько ветвей спиновых возбуждений и несколько энергетических щелей. Удовлетворительное описание необычных свойств альтернированных систем достигнуто в рамках квантового метода Монте-Карло в приближении подрешеточного самосогласованного поля [24]. В сильных магнитных полях и при низких температурах для альтернированных цепочек характерно появление «плато намагниченности» [25]. Экспериментально спин-щелевой характер намагниченности наблюдался на $3\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{d}_x$ [26]. Условия, при которых «плато» может реализоваться, зависят от анизотропии системы и параметров альтернирования [27,28].

В случае, когда параметр δ близок к единице, альтернированная цепь ионов разбивается на почти не взаимодействующие пары (димеризация цепочки) [22]. Основное состояние антиферромагнитного димера, являющееся немагнитным синглетом, устойчиво по отношению к слабым возмущениям, возбужденное состоя-

ние отделено щелью $\sim J$. Димеризованные цепочки могут возникать спонтанно, в результате спин-пайерловского перехода, обнаруженного в ряде органических соединений: TTF-CuBDT [29], MEM(TCNQ)₂ [30], солях на основе TMTTF [31] и в неорганическом магнетике CuGeO_3 [32].

Существуют и более сложные спин-щелевые системы: лестничные структуры [33,34], системы связанных димеров [14,35], полиаллильные цепочки [36]. Особенности, характерные для систем димеров, экспериментально наблюдались на TCuCl_3 , а также на допированном магнитными и немагнитными примесями CuGeO_3 [7]. В спиновых лестницах типа «ожерелье» обнаружен фазовый переход первого рода при нулевой температуре, сопровождающийся макроскопическим скачком намагниченности [34]. Индуцированные магнитным полем спин-щелевые явления, такие, как квантовые фазовые переходы в магнитном поле и «плато намагниченности», изучены для широкого круга «спиновых лестниц» [34,37–40].

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие (MDD) в теоретических исследованиях 1D систем обычно учитывается в виде поправок в обменном приближении, что не всегда позволяет проводить адекватное описание низкоразмерных эффектов. В соединениях с большой величиной одноузельного магнитного момента влияние MDD может быть не только существенным, но и определяющим [41]. В системе сферических диполей с конфигурационным беспорядком магнитодипольное взаимодействие не только определяет парамагнитное поведение системы, но и может приводить к магнитному упорядочению. Характер взаимодействия и наличие магнитного порядка зависит, главным образом, от концентрации диполей [42]. Для аналогичной системы линейных диполей также реализуется концентрационный переход парамагнитной системы в упорядоченное (ферромагнитное) состояние [43]. Диполь-дипольное взаимодействие, соизмеримое с обменным, может наблюдаться также в области изменения типа магнитного порядка в системах переменного состава (манганиты), а также в экспериментах при высоком всестороннем сжатии [44,45].

Точные численные методы исследования основного состояния и спектра возбуждений спиновых комплексов ограниченных размеров до настоящего времени используются для подтверждения точности или надежности теоретических моделей [9,25,28,36,37]. Исследования с применением точной диагонализации обладают универсальностью по отношению к виду учитываемых взаимодействий и соотношению их величин, что незаменимо при исследованиях систем с взаимодействиями, изменяющимися в широких пределах [44,45]. Рост интереса к объектам с ограниченным числом спиновых моментов — молекулярным магнетикам, наноструктурам и нанокластерам обеспечивает высокую востребован-

ность точных методов исследований. К ограничениям метода точной диагонализации спинового гамильтониана, являющегося приближением локализованных электронов, относится его неприменимость к объектам с большой подвижностью электронов.

В настоящей работе поставлена задача исследования основного состояния и энергетических спектров одномерной спиновой системы с конкурирующими обменными и диполь-дипольным взаимодействиями. Численными методами исследованы цепочки с четным числом спинов $S = 1/2$, связанных в общем случае анизотропным обменным и магнитодипольным взаимодействиями. Последнее в линейной цепочке имеет ферромагнитный характер, таким образом, для создания системы с конкурирующими взаимодействиями требуется антиферромагнитный характер обмена. Рассмотренная обменная анизотропия включает: изотропный, предельно анизотропный и два промежуточных случая, соответствующих XXZ-модели с выделенной осью, направленной вдоль цепочки. Исследование проведено в рамках точной (прямой) диагонализации спинового гамильтониана.

1. Энергетический спектр цепочки с учетом MDD

Расположим цепочку спинов $S = 1/2$ вдоль оси Z системы координат. При изотропном g-факторе возмущение, действующее на 2^N -кратно вырожденный уровень цепочки N взаимодействующих ионов, можно описать гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-r} \sum_{r=1}^{r_{\text{fin}}} \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \mathbf{J}^{(r)} \hat{\mathbf{S}}^{(i+r)} + D \sum_{i=1}^{N-r} \sum_{l=1}^{N-1} l^{-3} \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \mathbf{K} \hat{\mathbf{S}}^{(i+r)}, \quad (1)$$

где первое слагаемое описывает обменное взаимодействие, второе — MDD; N — число спинов (четное), $\hat{\mathbf{S}}$ — спиновый оператор, \mathbf{J} — тензор обменного взаимодействия аксиальной симметрии (далее $J_x = J_y = J_{\perp}$, $J_z = J_{\parallel}$); \mathbf{K} — тензор магнитного диполь-дипольного взаимодействия, первая сумма — по ионам цепи (i), вторая — по связям (r и l) данного иона (i); обменное взаимодействие $\mathbf{J}^{(r)}$ обрывается на ионе r_{fin} (в работе $r_{\text{fin}} = 1, 2, 3$). MDD учитывается по всей длине цепи, величину его вклада можно варьировать коэффициентом D ($D > 0$), зависящим от физического расстояния между ближайшими ионами и g-фактора.

В работе все результаты приведены в виде, нормированном на величину обменного взаимодействия ближайших соседей $J_{\parallel}^{(1)}$, т.е. в относительных единицах.

Решение будем искать среди пространства «чистых» волновых функций N невзаимодействующих ионов:

$$\langle \varphi_i | = \langle m_1, m_2, \dots, m_j, \dots, m_{N-1}, m_N |, \quad (2)$$

где $m_j = \pm 1/2$ — значения спинового момента.

Волновые функции цепочки

$$\langle \Psi_{\gamma} | = \sum_j p_{\gamma j} \langle \varphi_j |, \quad (3)$$

где коэффициенты $p_{\gamma j}$ образуют набор собственных векторов состояний системы, а $p_{\gamma j}^2$ — вероятность заполнения уровня энергии γ волновыми функциями j -й последовательности (конфигурации) спинов. Набор собственных значений матрицы возмущения E_{γ} образует энергетический спектр цепочки. Из-за вырождения количество уровней может быть намного меньше числа состояний.

Диагонализация проводилась численными методами при учете обменного взаимодействия только между ближайшими (первыми, $r_{\text{fin}} = 1$), ближайшими и вторыми соседями ($r_{\text{fin}} = 2$), а также вплоть до третьих соседей ($r_{\text{fin}} = 3$). Исследовались цепочки с четными $N = 4-12$. По соотношению компонент тензора J изучены случаи: $J_{\perp} = J_{\parallel}$ (изотропная система); $J_{\perp} = 0$, $J_{\parallel} \neq 0$ (предельно анизотропный, изинговский случай); $J_{\parallel} / J_{\perp} = 2$ и $J_{\parallel} / J_{\perp} = 10$ (XXZ-система). В работе выбрано следующее соотношение величин обменного взаимодействия для ближайших (первых), вторых и третьих соседей: $J^{(1)} : J^{(2)} : J^{(3)} = 1 : -0,5 : 0,25$ как для параллельной, так и для перпендикулярной компонент J. Это отношение по абсолютному значению заведомо нереально велико, чтобы подчеркнуть эффекты влияния дальних соседей, если таковые имеют место. Более подробное исследование вариантов соотношений $J^{(1)} : J^{(2)} : J^{(3)}$ в рамках задач, поставленных в настоящей работе, не потребовалось. Недиагональные компоненты тензора MDD для линейной цепочки отсутствуют, а диагональные: $K_{xx} = K_{yy} = K_{\perp} = 1$, $K_{zz} = K_{\parallel} = -2$. Из-за преобладания отрицательного K_{\parallel} MDD в линейной цепочке имеет ферромагнитный характер. В соответствии с задачей работы, исследование системы с конкурирующими взаимодействиями, знаки $J_{\parallel}^{(r)}$ подобраны для усиления антиферромагнитного характера обменного взаимодействия. Плавное изменение энергетического спектра одномерного магнетика при вариации величин учитываемых взаимодействий позволяет получить достаточно полное представление о характере его трансформации даже при грубых изменениях параметров гамильтониана (1).

Волновые функции состояний с различным значением суммарного спина

$$M_{\gamma} = \sum_j m_{\gamma j} \quad (4)$$

не смешиваются. Так, уровень состояния с максимальным $M_{\gamma} (M_{\text{max}})$ двукратно вырожден, так как представлен двумя последовательностями одинаково ориентированных спинов (параллельными конфигурациями) с

$M_\gamma = \pm M_{\max} = \pm N/2$. Магнитное поле расщепляет дублет на синглеты $M_\gamma = M_{\max}$ и $M_\gamma = -M_{\max}$ с «чистыми» волновыми функциями (2). Состояния с $0 < |M_\gamma| < M_{\max}$ также образуют дублеты, с той разницей, что даже расщепленные магнитным полем уровни представлены смесью волновых функций (2).

Состояния с $M_\gamma = 0$ являются синглетами и представлены наборами «чистых» волновых функций в количестве более двух (так, для $N = 4$ их 6). Поэтому удельный вес каждой из двух (например, одной из антипараллельных) никогда не достигает 1. Общее число конфигураций с нулевым суммарным спином растет с увеличением длины цепи, из-за чего удельный вес каждой из них падает. В 60-е годы прошлого столетия данная особенность формирования неограниченных систем с антиферромагнитным обменным взаимодействием бурно обсуждалась как «проблема основного состояния антиферромагнетика» [46]. Для цепочки без MDD уровни с $M_\gamma = 0$ рассредоточены по всему интервалу энергетического спектра. В изотропной системе на синглетные уровни последова-

тельно накладываются дублеты с $M_\gamma \neq 0$, т.е. степень вырождения: $L = 2M_{\gamma \max} + 1$ ($M_{\gamma \max}$ — максимальный суммарный спин данного уровня).

В отсутствие MDD ($D = 0$) энергетический спектр изинговской цепочки ($J_\perp = 0$) симметричен относительно нуля. Например, для восьми ионов 256 собственных значений представлены восемью уровнями энергии с вырождением от 2 до 70. При появлении слабого обмена в базисной плоскости исходные уровни расщепляются, максимальная степень вырождения снижается до 2, а расщепление для каждого типа уровней пропорционально J_\perp . Исходная симметрия энергетического спектра довольно быстро теряется, количество уровней возрастает. В области спектра с $E_\gamma = -0,2 \dots -0,1$ на рис. 1,б различимы пары слабо расщепленных линий, образовавшиеся из мультиплетов изинговской цепочки с $L = 2$ и $L = 4$. Дальнейшее увеличение J_\perp вызывает плавное смещение всех уровней. При достижении изотропного случая $J_\parallel = J_\perp$ энергетический спектр цепочки оказывается асимметричной системой из 70 уровней с вырождением от 1 до 9 (рис. 1,а). Межуровневое

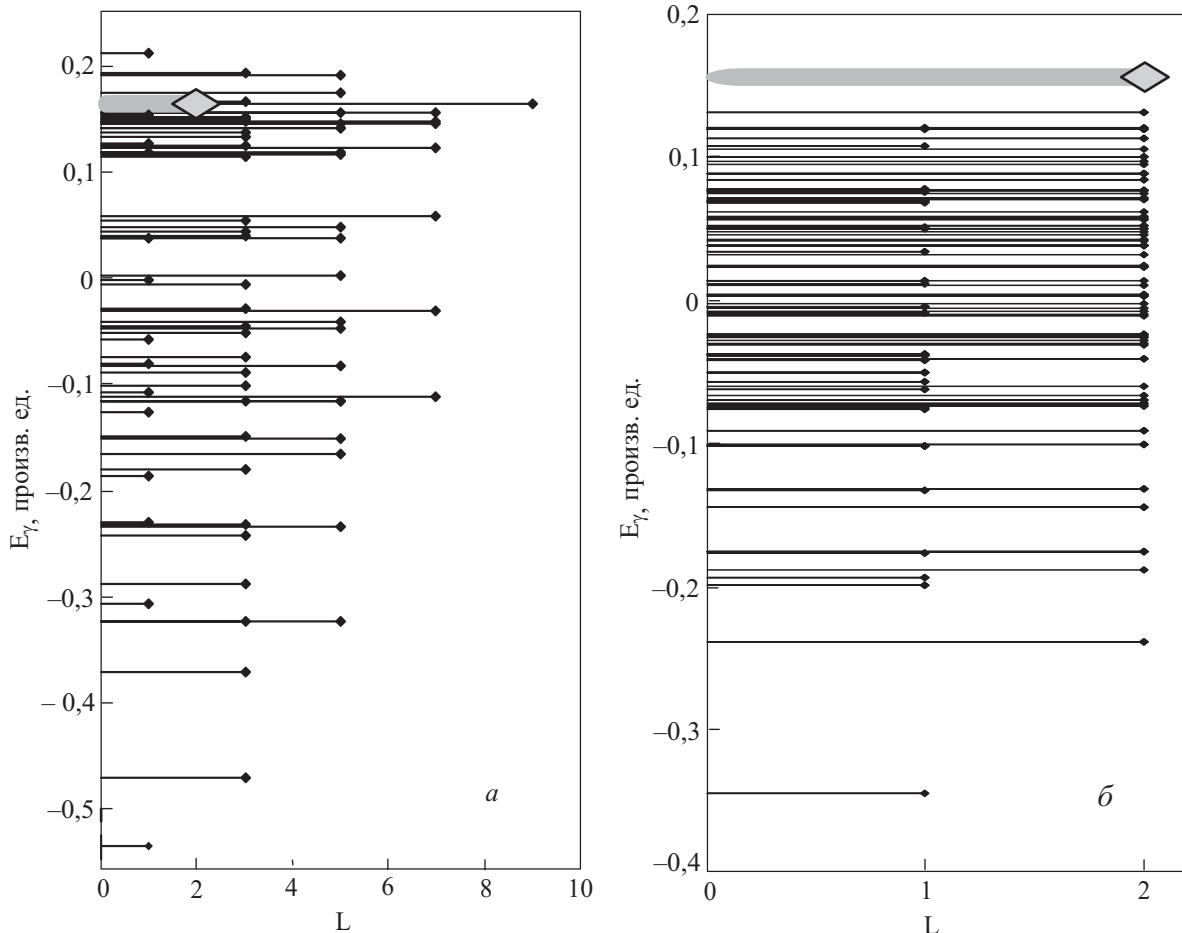


Рис. 1. Энергетический спектр цепочки из 8 ионов при учете обменного взаимодействия вплоть до третьих ($r_{\text{fin}} = 3$) соседей: изотропный случай, $J_\parallel = J_\perp$ (а), $J_\parallel = 10 J_\perp$ (б). (♦) — энергия конфигураций с максимальным модулем суммарного спина. По оси абсцисс — степень вырождения уровней.

расстояние максимально для основного и первого возбужденного уровней, его величина убывает, в первом приближении, как $1/N$ [47].

Для открытых цепочек длиной 4–12 ионов и всех указанных выше соотношений J_{\parallel} и J_{\perp} точная диагонализация позволяет получить энергетические спектры систем, аналогичных исследованным, но с ферромагнитным обменным взаимодействием, просто изменением знаков E_{γ} .

Появление диполь-дипольного взаимодействия приводит к существенной трансформации спектра одномерной системы. Имея ферромагнитный характер, MDD сдвигает вниз все уровни с $M_{\gamma} \neq 0$ и тем сильнее, чем выше суммарный спин. Максимальное и к тому же линейное смещение испытывает изначально высокоэнергетический уровень с параллельными конфигурациями ($|M_{\gamma}| = M_{\max}$), рис. 2. Воздействие MDD на состояния с $0 < |M_{\gamma}| < M_{\max}$ не столь однозначно. Значения энергии уровней с антипараллельными и близкими к ним конфигурациями уменьшаются, тогда как E_{γ} смеси конфигураций типа «ферромагнитных доменов» возрастают (рис. 2). Таким образом, полный интервал энергий, занимаемый состояниями с $|M_{\gamma}| = 0$ и спектром в целом, расширяется. В районе $D = 0-1$, $E_{\gamma} = 0,1-0,25$ наблюдается сложная картина «взаимодействия» уровней энергетического спектра (рис. 2).

Дублет с величиной $|M_{\gamma}| = M_{\max}$, изначально занимающий положение в области потолка энергетического спектра (серая прямая на рис. 2), при достижении

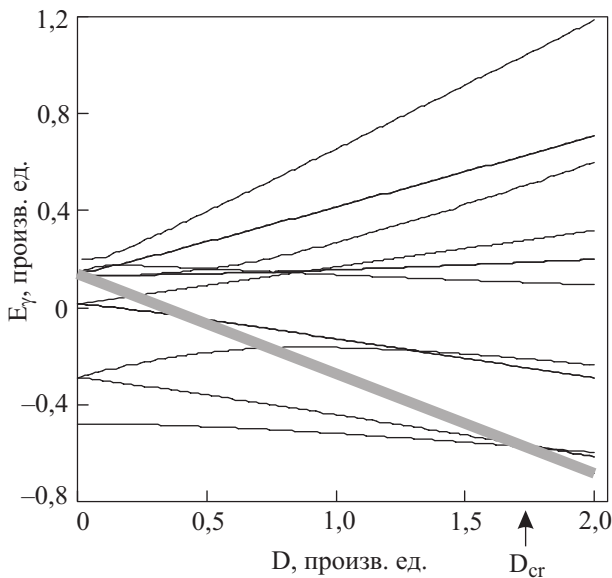


Рис. 2. Зависимость энергии уровней, занятых параллельными (серая прямая) и прочими $|M_{\gamma}| < N / 2$ (черные линии) конфигурациями, от величины D . Цепочка из 4-х ионов, обменное взаимодействие вплоть до третьих соседей ($r_{\text{fin}} = 3$).

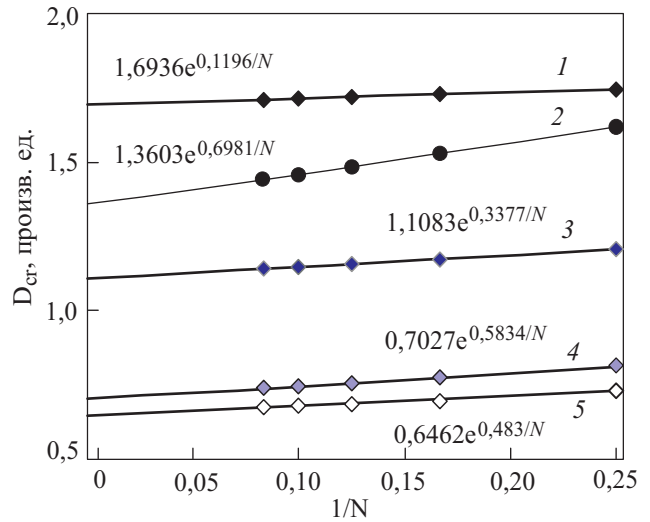


Рис. 3. Зависимость критических значений коэффициента MDD от обратной длины цепочки для изотропной системы с учетом обмена только ближайших соседей (2), а также ближайших, вторых и третьих соседей (1): изотропный случай (1), (2), $J_{\parallel}/J_{\perp} = 2$ (3), $J_{\parallel}/J_{\perp} = 10$ (4), предельно анизотропная цепочка, $J_{\parallel} = 0$ (5).

растущим MDD некоторой критической величины $D = D_{\text{cr}}$ достигает дна энергетического спектра и совпадает с нижним уровнем с $M_{\gamma} = 0$ (нижняя черная кривая на рис. 2). Зависимость D_{cr} от обратной длины цепочки для рассмотренных в работе типов анизотропии близка к линейной, однако наиболее эффективно описывается экспонентой (рис. 3). С ростом обменной анизотропии в системе значения D_{cr} падают. Изменение анизотропии в масштабе (рис. 3) выглядит более существенным фактором, чем влияние длины цепочки. Тем не менее в реальных магнитных системах изменение анизотропии обычно весьма невелико, и влияние длины цепочки может стать определяющим.

При дальнейшем увеличении вклада MDD основное состояние системы реализуется на конфигурациях с максимальным M_{γ} . Таким образом, при $D = D_{\text{cr}}$ происходит изменение основного состояния: немагнитное (синглетное) состояние переходит в магнитное, т.е. D_{cr} является критической точкой одномерной магнитной системы с MDD.

2. Спиновая цепочка с MDD при конечных температурах

При температуре T заселенность уровня (n_{γ}) энергии E_{γ} определяется распределением Больцмана:

$$n_{\gamma} = \Omega \exp\left(-\frac{E_{\gamma} - E_0}{t}\right), \quad (5)$$

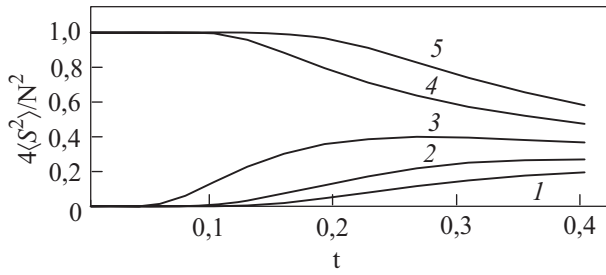


Рис. 4. Зависимость среднеквадратичного спина цепочки с $N = 4$ от приведенной температуры $t = kT / J_{\parallel}^{(1)}$ при учете обменного взаимодействия вплоть до третьих соседей. Зависимости для D от 0 (1) до 3,0 (5) с шагом 0,75.

где E_0 — энергия основного состояния, $t = kT / J_{\parallel}^{(1)}$ — приведенная температура, T — абсолютная температура.

Коэффициент перенормировки Ω :

$$\Omega = \left(\sum_{\gamma} \exp \left(-\frac{E_{\gamma} - E_0}{t} \right) \sum_j^{2^N L} p_{\gamma j}^2 \right)^{-1}, \quad (6)$$

где Γ — количество уровней системы, L — степень вырождения уровня.

В отсутствие магнитного поля суммарный (или усредненный) спин системы всегда равен нулю, и основной характеристикой магнитных свойств может послужить среднеквадратичный спин цепочки

$$\langle M^2 \rangle = \sum_{\gamma} M_{\gamma}^2 n_{\gamma}. \quad (7)$$

Отличие типов основного состояния спиновой цепочки при коэффициентах MDD больше и меньше D_{cr} определяет и различную эволюцию спиновой системы при конечных температурах, например вид температурных зависимостей $\langle M^2 \rangle$. При малых MDD среднеквадратичный спин цепочки в немагнитном основном состоянии монотонно возрастает от нулевого значения при $T = 0$ (кривые 1 и 2 на рис. 4). При увеличении коэффициента MDD вплоть до $D \cong D_{cr}$, $D < D_{cr}$ на монотонных температурных зависимостях появляется максимум, условия формирования которого подробно обсуждаются в разд. 3 (кривая 3 на рис. 4). В магнитном основном состоянии ($D > D_{cr}$) цепочка при $T = 0$ имеет $\langle M^2 \rangle = M_{max}^2$ и монотонное уменьшение среднеквадратичного спина с ростом температуры. Высокотемпературные пределы для цепочек с $D < D_{cr}$ и $D > D_{cr}$ совпадают (рис. 4). Подобная эволюция при конечных температурах весьма характерна для спин-цепочечных систем [5,6].

Крайне плавная эволюция одномерной магнитной системы при изменении как констант магнитных взаимодействий, так и внешних параметров (температура и т.д.) нарушается в окрестности критической точки, что

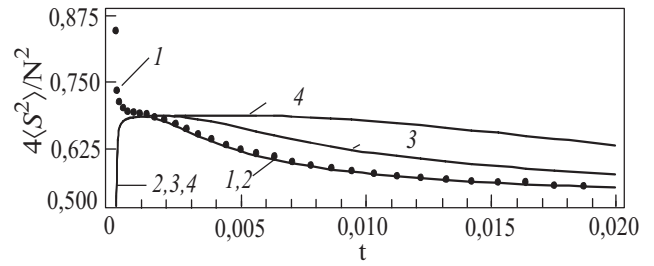


Рис. 5. Зависимость среднеквадратичного спина от приведенной температуры $t = kT / J_{\parallel}^{(1)}$ в окрестности $D = D_{cr}$ цепочки из 4-х спинов с учетом обменного взаимодействия вплоть до третьих соседей. Случаи магнитного основного состояния с изотропным обменом ($D - D_{cr} = +1 \cdot 10^{-4}$) (1) и немагнитного основного состояния ($D - D_{cr} = -1 \cdot 10^{-4}$) (2)–(4): с изотропным обменом (2), с анизотропией $J_{\parallel} / J_{\perp} = 2$ (3), с предельной анизотропией $J_{\perp} = 0$ (4).

требует более подробных исследований данной области. Рассмотрим вначале одномерную систему в немагнитном основном состоянии ($D \rightarrow D_{cr}$, $D < D_{cr}$).

Максимум среднеквадратичного спина по мере приближения D к D_{cr} растет и смещается в сторону низких температур. В близкой окрестности D_{cr} максимум становится резко асимметричным, с очень быстрым нарастанием и относительно плавным спадом, а в области пика формируется «плато» (кривые 2–4 на рис. 5). Значение максимума $\langle M^2 \rangle$ изотропной цепочки при ($D \rightarrow D_{cr}$, $D < D_{cr}$) достигает значительной величины $\cong 2 / 3 M_{max}^2$ при очень низких температурах ($7,7 \cdot 10^{-4} J$ и $3,5 \cdot 10^{-5} J$ для $N=4$ и $N=12$ соответственно). Дальнейший заметный спад $\langle M^2 \rangle$ после «плато» происходит более плавно — на интервале порядка $(10^{-2} - 10^0) J$ (кривые 2–4 на рис. 5).

Одномерная система в магнитном основном состоянии, т.е. в области $D \rightarrow D_{cr}$, $D > D_{cr}$, имеет температурную зависимость ниспадающего характера. Низкотемпературный ее участок показывает чрезвычайно резкое падение среднеквадратичного спина от значения M_{max}^2 в области от 0 до $\approx 10^{-4} J$ (рис. 5, кривая 1) с перегибом на уровне $\langle M^2 \rangle \cong 2 / 3 M_{max}^2$. Далее, с увеличением температуры $\langle M^2 \rangle$ плавно уменьшается и температурная зависимость совпадает с аналогичной для $D \rightarrow D_{cr}$, $D < D_{cr}$ (рис. 5, кривые 1,2).

Как в случае $D < D_{cr}$, так и при $D > D_{cr}$ формой линий температурных зависимостей среднеквадратичного спина в области крайне низких температур при $D \rightarrow D_{cr}$ приближается к прямоугольной, т.е. при $D \cong D_{cr}$, $T = 0$ происходит скачкообразное изменение $\langle M^2 \rangle$.

Изменение анизотропии одномерной системы приводит к изменению характера температурной зависимости среднеквадратичного спина в области плавного спада, рис. 5. При увеличении одноосной анизотропии «плато» на температурных зависимостях средне-

квадратичного спина отчетливо расширяются (кривые 2–4 на рис. 5).

3. Заключение

Температурная зависимость среднеквадратичного спина конечной линейной цепочки имеет ярко выраженный двухмасштабный характер. Так как ограниченные спиновые цепочки относятся к спин-щелевым магнетикам, начальный участок температурных зависимостей усредненных характеристик цепочки определяется величиной щели между основным (E_0) и первым возбужденным (E_1) уровнями. В условиях, когда уровень с максимальным среднеквадратичным спином намного ближе к нижнему синглетному уровню, чем все прочие, существенное заселение уровня E_1 происходит при $t \approx (E_1 - E_0)$, так что характерный масштаб для низкотемпературного участка: $(E_1 - E_0)$.

Второй участок температурной зависимости среднеквадратичного спина определяется структурой энергетического спектра выше E_1 . В данной области энергий из-за ограниченного числа уровней конечной цепочки второй возбужденный уровень (E_2) отделен от двух нижних щелью конечной ширины. Характерный масштаб дальнейшего процесса заселения второго и близких к нему уровней — порядка $(E_2 - E_1)$. Так как система рассматривается при условии $E_1 - E_0 \rightarrow 0$, отличие указанных масштабов может быть сколь угодно большим, ограничиваясь только факторами «реальности» объекта (неоднородность образца, влияние поверхности и пр.). Отличие температурных масштабов заселения при $|D - D_{cr}| \cong 10^{-4} J$, (рис. 5) составляет $\approx 10^5$. Для вполне реальных значений $D \cdot J_{||}^{(1)}$ в умеренно анизотропных системах около 1 К [41] следует ожидать при разности $|D - D_{cr}| \approx 10^2 - 10^{-3}$ К отчетливый, но не достигающий предельного значения $2/3M_{max}^2$ пик на температурной зависимости $\langle M^2 \rangle$. Такая точность совпадения величины коэффициента MDD с критическим значением, необходимая для наблюдения низкотемпературного пика и «плато» намагниченности спин-щелевой системы, исключает возможность случайного обнаружения данного эффекта в экспериментальных исследованиях.

Энергия уровней с ненулевым среднеквадратичным спином может быть понижена различными факторами: воздействием магнитного поля, введением регулярных примесей, искажением структуры и другими факторами. При сближении любого уровня с отличным от нуля среднеквадратичным спином и нижнего синглетного уровня следует ожидать появления крайне резких температурных зависимостей усредненных магнитных характеристик спиновой цепочки независимо от того, какими факторами это сближение вызвано.

«Плато» на полевых зависимостях $\langle M^2 \rangle$ реализуются несколько иначе, чем на температурных.

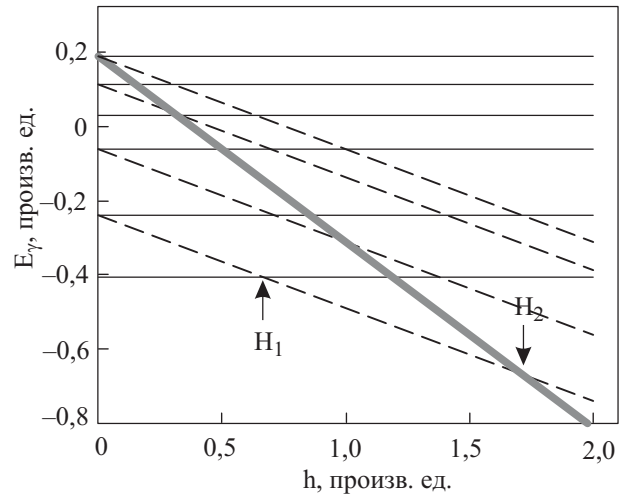


Рис. 6. Схема расщепления уровней изотропной цепочки без MDD в магнитном поле h , $N = 4$. Уровни с $M_\gamma = 0$ — сплошные черные; с $M_\gamma = -1$ — штриховые; с $M_\gamma = -2$ — серая линия. Уровни с $M_\gamma > 0$ не приведены. H_1 и H_2 — поля переходов среднеквадратичного спина на «плато $1/2$ » и в состояние насыщения.

На рис. 6 приведена качественная схема расщепления уровней изотропной 4-х спиновой цепочки в приведенном магнитном поле $h = \mu_B H / J_{||}^{(1)}$. Уровень $M_\gamma = -1$ нижнего триплета E_1 (нижняя штриховая линия на рис. 6) пересекает нижний синглет в поле H_1 , после чего среднеквадратичный спин системы скачком изменяется на единицу (при нулевой температуре). Аналогично, в поле H_2 происходит переход из состояния $\langle M^2 \rangle = 1$ в $\langle M^2 \rangle = M_{max}^2 = 4$. Для температурных зависимостей усредненного спина в той же системе «плато» может наблюдаться лишь в крайне узкой окрестности полей H_1 и H_2 , т.е. в областях, удовлетворяющих условию $E_1 - E_0 \ll E_2 - E_1$. Воздействие MDD на энергетический спектр отличается тем, что в эволюционирующей системе нижний синглет пересекается уровнем с $\langle M^2 \rangle = M_{max}^2$, а не с $\langle M^2 \rangle = 1$, как под действием магнитного поля. В критической точке спиновой цепочки с MDD следует ожидать скачкообразного изменения намагниченности от нулевого до максимально возможного значения, как, например, при метамагнитном фазовом переходе.

Авторы выражают благодарность С.Н. Орлу за консультации и ценные замечания по работе; Ю.Г. Пашкевичу и Э.Е. Зубову — за плодотворное обсуждение материалов работы.

1. Н. Bethe, *Z. Phys.* **В71**, 205 (1931).
2. Э.Б. Фельдман, М.Г. Рудаев, *Письма в ЖЭТФ* **81**, 54 (2005).
3. Е.И. Кузнецова, Э.Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **129**, 1009 (2006).
4. С.И. Доронин, А.Н. Пырков, Э.Б. Фельдман, *ЖЭТФ* **132**, 1091 (2007).

5. F.D.M. Haldane, *Phys. Lett.* **93A**, 464 (1983).
6. J. Cloiseaux and J.J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
7. А.И. Смирнов, В.Н. Глазков, *ЖЭТФ* **132**, 984 (2007).
8. J.C. Bonner and M.E. Fisher, *Phys. Rev.* **135**, A640 (1964).
9. K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi, and J.P. Renard, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 86 (1989).
10. J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault, W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W.G. Stirling, and C. Vettier, *J. Apl. Phys.* **63**, 3538 (1988).
11. A. Zheludev, S.E. Nagler, S.M. Shapiro, L.K. Chou, D.R. Talham, and M.W. Meisel, *Phys. Rev.* **B53**, 15004 (1996).
12. J. Darriet and L.P. Regnault, *Solid State Commun.* **86**, 409 (1993).
13. A. Zheludev, T. Masuda, I. Tsukada, Y.U. Uchiyama, K.U. Ucinokura, P. Böni, and S.-H. Lee, *Phys. Rev.* **B62**, 8921 (2000).
14. A. Oosawa, M. Ishi, and H. Tanaka, *J. Phys. Condens. Matter* **11**, 265 (1999).
15. A. Oosawa, T. Ono, and H. Tanaka, *Phys. Rev.* **B66**, 020405-1 (2002).
16. M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
17. Л.Н. Булаевский, *ЖЭТФ* **44**, 1008 (1963).
18. J.C. Bonner and H.W.J. Blöte, *Phys. Rev.* **B25**, 6959 (1982).
19. B. Lake, D.A. Tennant, R.A. Cowley, J.D. Axe, and C.K. Chen, *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 8613 (1996).
20. K. Yamada, K. Takada, S. Hosoya, Y. Endoh, and N. Tomonaga, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2406 (1991).
21. B. Roesli, P. Fisher, A. Furrer, G. Petrakovskii, K. Sablina, and B. Fedoseev, *J. Appl. Phys.* **73**, 6448 (1993).
22. A.W. Garrett, S.E. Nagler, D.A. Tennant, B.C. Sales, and S. Burnes, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 745 (1997).
23. M. Hirota and Y. Isao, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 1908 (1997).
24. С.С. Аплеснин, *ЖЭТФ* **17**, 218 (2000).
25. K. Hida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 2359 (1994).
26. T. Goto, Y. Ajiro, T. Asano, T. Inami, and H. Aruga-Katori, *Physica* **B216**, 294 (1996).
27. R. Sato and K. Kindo, *Physica* **B246–247**, 372 (1998).
28. T. Sakai and M. Takahashi, *Physica* **B246–247**, 375 (1998).
29. J.W. Bray, H.R. Hart, L.W. Interrante, I.S. Yakobs, J.S. Kasper, G.D. Watkins, S.H. Wee, and J.C. Bonner, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 744 (1975).
30. S. Huizinga, J. Kommandeur, G.A. Sawatzky, B.T. Thole, K. Kopinga, W.J.M. de Jonge, and J. Roos, *Phys. Rev.* **B19**, 4723 (1979).
31. C. Coulon, P. Vaca, T. Granier, and B. Gallois, *Synth. Met.* **27**, B449 (1988).
32. M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993).
33. E. Dagotto and T.M. Rise, *Science* **271**, 618 (1996).
34. В.О. Черановский, Е.В. Езерская, *ФНТ* **34**, 287 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 223 (2008)].
35. H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N.V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C.P. Slichter, T. Goto, and Y. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
36. О.А. Жикол, В.О. Черановский, *ФНТ* **22**, 793 (1996) [*Low Temp. Phys.* **22**, 609 (1996)].
37. T. Tonegawa, T. Nishida, M. Kaburagi, *Physica* **B246–247**, 368 (1998).
38. K. Hida, *Physica* **B329–333**, 992–993 (2003).
39. T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Okunishi, K. Nomura, and M. Kaburagi, *Physica* **B346–347**, 50 (2004).
40. А.А. Звугин и В.О. Черановский, *Физ. Низк. Temp.* **35**, 578 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 455 (2009)].
41. А.Г. Андерс, В.С. Бондаренко, С.Б. Бордовский, А. Фегер, А. Орендачева, *ФНТ* **23**, 1195 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 895 (1997)].
42. H. Zang and M. Widom, *Phys. Rev.* **B51**, 8951 (1995).
43. Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова, *ЖЭТФ* **124**, 656 (2003).
44. В.Т. Довгий, А.И. Линник, В.И. Каменев, В.К. Проккопенко, В.И. Михайлов, В.А. Хохлов, А.М. Кадомцева, Т.А. Линник, Н.В. Давидейко, Г.Г. Левченко, *Письма в ЖТФ* **29**, 8 (2003).
45. В.И. Вальков, Д.А. Варюхин, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, А.П. Сиваченко, В.И. Каменев, Б.М. Годрис, *ФНТ* **34**, 927 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 734 (2008)].
46. С.В. Вонсовский, М.С. Свицкий, *ЖЭТФ* **57**, 251 (1969).
47. Л.Н. Булаевский, *ЖЭТФ* **43**, 968 (1962).

The effect of dipole–dipole interaction on low-temperature magnetism of linear spin chains

A.V. Zhuravlev and I.M. Krygin

The magnetic dipole–dipole interaction in a $S = 1/2$ linear spin chain with uniaxial exchange anisotropy causes an evolution of the energy level system. As the magnetodipole interaction increases, the maximum spin level displays the fastest decrease in energy. For a rather high dipole-exchange ratio the spin system undergoes an antiferromagnetic–ferromagnetic spin-gap type state transition. In the close vicinity of critical dipolar strength the behavior of the average chain spin exhibits rapid changes at low temperatures ($T < 10^{-3} J/k$) followed by a plateau.

PACS: 72.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration;
 75.30.Gw Magnetic anisotropy;
 75.40.Cx Static properties;
75.40.–s Critical-point effects, specific heats, short-range order.

Keywords: $S = 1/2$ spin chain, ground state, magnetization plateau, anisotropy, numerical diagonalization.