

# Магнитные свойства квантовой модели Шастри–Сазерленда со спином $S = 1/2$

В.В. Славин, А.А. Кривчиков

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: slavin@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 29 мая 2014 г., опубликована онлайн 22 сентября 2014 г.

При помощи метода точной диагонализации изучена зависимость намагниченности от внешнего поля системы с решеткой Шастри–Сазерленда и спином  $S = 1/2$  в рамках  $xxz$ -модели при нулевой температуре. Обнаружено, что в отличие от классической модели Гейзенберга, плато, соответствующие приведенным намагниченностям  $m^* = m_{\text{sat}} = 1/4, 1/3, 1/2$  ( $m_{\text{sat}}$  — максимальная намагниченность), присутствуют даже в случае изотропного обменного взаимодействия. Изучено влияние обменной анизотропии на ширины данных плато. Показано, что в зависимости от соотношения обменных констант можно выделить три области, соответствующие различному поведению системы. Это область «неелевского» антиферромагнетика, область «димерного» антиферромагнетика и лежащая между ними промежуточная область, где наиболее ярко проявляются свойства решеток Шастри–Сазерленда. Определены границы данных областей.

За допомогою методу точної діагоналізації вивчено залежність намагніченості від зовнішнього поля системи з ґраткою Шастрі–Сазерленда та спіном  $S = 1/2$  у рамках  $xxz$ -моделі при нульовій температурі. Знайдено, що на відміну від класичної моделі Гейзенберга, плато, що відповідають намагніченості  $m^* = m_{\text{sat}} = 1/4, 1/3, 1/2$  ( $m_{\text{sat}}$  — максимальна намагніченість), існують навіть у випадку ізотропної обмінної взаємодії. Вивчено вплив обмінної анізотропії на ширини цих плато. Показано, що в залежності від співвідношення констант обміну можна виділити три області, що відповідають різній поведінці системи. Це область «неєлівського» антиферомагнетика, область «димерного» антиферомагнетика та існуюча між ними проміжна область, у якій дуже виражені унікальні властивості ґраток Шастрі–Сазерленда. Визначені границі даних областей.

PACS: 75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовую спиновую фрустрацию;  
75.30.Gw Магнитная анизотропия;  
**05.50.+q** Теория решетки и статистика (Изинга, Поттса, т.д.).

Ключевые слова: решетка Шастри–Сазерленда, точная диагонализация, квантовая спиновая система, антиферромагнетик.

## 1. Введение

Необычные физические свойства двумерных магнитных соединений с решеткой Шастри–Сазерленда (Shastry–Sutherland) привлекают внимание исследователей на протяжении долгого времени. Каждый год появляются новые экспериментальные и теоретические статьи, обзоры, посвященные этим системам. Структура решетки Шастри–Сазерленда представлена на рис. 1. Это квадратная решетка с антиферромагнитными обментами  $J$  между ближайшими соседями. Кроме того, каждый магнитный ион решетки взаимодействует с одним диагональным соседом. Это взаимодействие  $J'$  также имеет антиферромагнитную природу. Как известно, первоначально такая решетка исследовалась

исключительно как интересная абстрактная модель [1]. Однако примерно через 10 лет выяснилось, что некоторые реально существующие соединения имеют магнитную структуру, топологически эквивалентную решетке Шастри–Сазерленда. Прежде всего это купрат стронция  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ , впервые синтезированный Смитом и Келцером [2]. Это соединение имеет слоистую структуру, состоящую из плоскостей  $\text{Cu}(\text{BO}_3)$ , разделенных немагнитными атомами стронция. Ионы меди  $\text{Cu}^{2+}$  со спином  $S = 1/2$  образуют решетку, топологически эквивалентную решетке Шастри–Сазерленда [3–6]. Позднее было обнаружено, что целый ряд тетраборидов редкоземельных ионов  $\text{RB}_4$  также имеет магнитную структуру, топологически эквивалентную решетке

Шастри–Сазерленда [7–10]. Кристаллы  $\text{RB}_4$  имеют тетрагональную структуру с пространственной группой  $P4/mbm$ . Ионы редкоземельных элементов расположены в плоскостях (001) на подрешетке, состоящей из R–R димеров, альтернированных и ортогональных направлению [110]. Эта подрешетка топологически эквивалентна решетке Шастри–Сазерленда.

Одним из первых необычных свойств, на которые обратили внимание исследователи, был ряд плато в зависимости намагниченности  $m^* = m/m_{\text{sat}}$  от внешнего магнитного поля. Эти плато соответствовали хорошим рациональным значениям  $m^*$ . Например, в  $\text{SrCu}(\text{BO}_3)$  были обнаружены плато, соответствующие  $m^* = 1/4$  и  $m^* = 1/8$  [11]. Позднее в этом же соединении был обнаружен и ряд других плато намагниченности, соответствующих  $m^* = 1/k$ ,  $k = 2, 3, \dots, 9$ , а также  $m^* = 2/9$  [12]. В тетрабориде тербия были обнаружены плато, соответствующие  $m^* = 1/2$  и  $m^* = 1/3$  [13,14]. В дальнейшем при исследовании тетраборидов на основе различных редкоземельных ионов ( $R = \text{Er, Tm, Ho}$  и т.д.) были обнаружены различные последовательности плато намагниченности [7,10,15].

Несмотря на то что за последние годы появилось большое количество теоретических работ, посвященных изучению необычных свойств соединений с решеткой Шастри–Сазерленда, до сих пор нет полного понимания природы всех этих плато и непонятно, почему в одних соединениях присутствуют одни последовательности плато, а в других соединениях — другие (либо вообще отсутствуют). Основная проблема заключается в том, что подавляющее количество аналитических моделей либо требуют существенного упрощения системы, либо плохо работают именно в том диапазоне параметров, где необычные свойства данных систем проявляются наиболее ярко. Что же касается работ, использующих вычислительные методы, то в них в основном применялись классический и кванто-

вый методы Монте-Карло. Использование классического метода Монте-Карло обосновано при изучении тетраборидов редкоземельных ионов, поскольку в таких соединениях суммарный магнитный момент много больше единицы. Квантовый метод Монте-Карло хорошо работает при  $J \ll J'$  и  $J \gg J'$ . В наиболее же реалистичной и интересной с точки зрения эксперимента области параметров  $J \sim J'$  применение данного метода ограничено (либо вообще невозможно) из-за так называемой «проблемы знака».

Отдельно следует выделить работы, в которых использовался метод точной диагонализации. Данный метод позволяет привести матрицу оператора Гамильтона к диагональному виду, т.е. найти все собственные значения и собственные функции. Метод точной диагонализации применим при любом соотношении параметров модели, но обладает существенным недостатком — количество вычислительных ресурсов растет пропорционально  $(1/S)^N$ , где  $N$  — число спинов. Это, в свою очередь, накладывает весьма жесткие ограничения на размеры изучаемых систем. Во многом по этой причине работы, в которых использован данный метод для изучения свойств решетки Шастри–Сазерленда, крайне немногочисленны [4,16]. В них рассмотрен случай изотропного обменного взаимодействия и изучены системы достаточно малого размера (в основном  $6 \times 4$ ).

В данной работе при помощи метода точной диагонализации были изучены магнитные свойства решетки Шастри–Сазерленда со спином  $S = 1/2$  в рамках  $xxz$ -модели при нулевой температуре. Благодаря проведенному симметричному анализу нам удалось провести исследования для системы, состоящей из 32 спинов ( $8 \times 4$ ).

## 2. Модель и метод

В рамках  $xxz$ -модели гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{J_{xx}}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \rangle} \left( \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^x \hat{S}_{\mathbf{r}_j}^x + \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^y \hat{S}_{\mathbf{r}_j}^y \right) + \frac{J_z}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \rangle} \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z \hat{S}_{\mathbf{r}_j}^z +$$

$$+ \frac{J'_{xx}}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \delta_i} \left( \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^x \hat{S}_{\mathbf{r}_i + \delta_i}^x + \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^y \hat{S}_{\mathbf{r}_i + \delta_i}^y \right) + \frac{J'_z}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \delta_i} \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z \hat{S}_{\mathbf{r}_i + \delta_i}^z - h \sum_{\mathbf{r}_i} \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$  — координаты узлов решетки;  $i = 1, 2, \dots, N$ , где  $N$  — общее количество узлов. Символ  $\langle \dots \rangle$  означает суммирование по четырем ближайшим (вертикальным и горизонтальным) соседям.  $\delta_i$  — радиус-вектор, соединяющий  $i$ -й спин с его пятым (диагональным) соседом в решетке.  $\hat{S}_{\mathbf{r}_i}^x$ ,  $\hat{S}_{\mathbf{r}_i}^y$  и  $\hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z$  — компоненты спинового оператора на узле  $\mathbf{r}_i$ :

$$\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z) = \frac{1}{2} \hat{\sigma} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z),$$

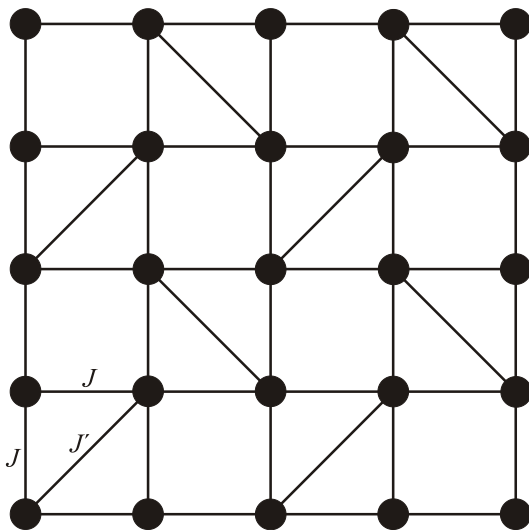


Рис. 1. Структура решетки Шастри–Сазерленда.

где  $\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z$  — соответствующие матрицы Паули.  $J_{xx}$  и  $J_z$  — константы обменного взаимодействия с ближайшими соседями, а  $J'_{xx}$  и  $J'_z$  — константы обменного взаимодействия с пятым (диагональным) соседом. В данной работе будет рассмотрен случай антиферромагнитного взаимодействия, когда все обменные константы неотрицательны. В знаменателях при обменных константах стоят двойки, необходимые для компенсации двукратного учета связей,  $h$  — внешнее магнитное поле, приложенное вдоль оси  $z$ . Все константы в (1) безразмерны.

Как указано во Введении, в данной работе в качестве инструмента исследования использован метод точной диагонализации. Прежде всего, необходимо выбрать базис, в котором будут вычисляться матричные элементы. Для  $xxz$ -модели наиболее удобным является базис, построенный на собственных функциях  $|S^z\rangle$  оператора  $\hat{S}^z$ :

$$|S^z\rangle = \frac{1}{2}(1, 0), \quad |S^z\rangle = \frac{1}{2}(0, 1).$$

Базисные волновые функции имеют вид

$$|\psi\rangle = |S_{\mathbf{r}_1}^z\rangle \otimes |S_{\mathbf{r}_2}^z\rangle \otimes \dots \otimes |S_{\mathbf{r}_N}^z\rangle. \quad (2)$$

Для того чтобы изучать системы достаточно большого (по меркам метода точной диагонализации) размера, необходимо использовать все интегралы движения. Наличие интеграла движения позволяет выделить инвариантные подпространства в полном пространстве состояний изучаемой системы и, следовательно, сократить размерности матриц, которые необходимо диагонализировать. Легче всего это сделать, если базисные функции  $|\psi\rangle$  являются собственными функциями оператора, соответствующего данному интегралу движения. Действительно, пусть  $\hat{A}$  — интеграл движения ( $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ ). Поскольку  $|\psi\rangle$  — собственные функции оператора  $\hat{A}$ , то  $\hat{A}|\psi\rangle = a_k|\psi\rangle$ , где  $a_k$  — соответствующие собственные значения ( $k = 1, 2, \dots, K$ ). Введя обозначения  $|\psi_k\rangle$  ( $\hat{A}|\psi_k\rangle = a_k|\psi_k\rangle$ ), получим

$$\langle \psi_k | \hat{H} | \psi_{k'} \rangle = 0,$$

если  $k \neq k'$ . Пространство состояний при этом разбивается на инвариантные подпространства, количество которых равно количеству собственных значений интеграла движения  $K$ . Матрица  $\hat{H}$  приобретает блочно-диагональную структуру и, следовательно, может быть записана в виде прямой суммы:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \oplus \hat{H}_2 \oplus \dots \oplus \hat{H}_K.$$

Здесь  $\hat{H}_k$  — операторы, действующие в соответствующих инвариантных подпространствах. Тогда

$$\det(\hat{H}) = \prod_{k=1}^K \det(\hat{H}_k).$$

Таким образом, диагонализацию матриц, соответствующих операторам  $\hat{H}_k$ , можно производить независимо.

Рассмотрим вначале случай  $h = 0$  и запишем гамильтониан системы (1) в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - h \sum_{\mathbf{r}_i} \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z = \hat{H}_0 - h \hat{M}_z. \quad (3)$$

Здесь  $\hat{H}_0$  — часть гамильтониана (1), не содержащая магнитное поле, а  $\hat{M}_z$  — оператор полной  $z$ -й компоненты намагниченности:

$$\hat{M}_z = \sum_{\mathbf{r}_i} \hat{S}_{\mathbf{r}_i}^z.$$

Функции  $|\psi\rangle$  построены на собственных функциях оператора  $\hat{S}^z$  и, следовательно, являются собственными функциями оператора  $\hat{M}_z$ :

$$\hat{M}_z |\psi_{m_j}\rangle = m_j |\psi_{m_j}\rangle, \quad (4)$$

где

$$m_j = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} = -\frac{N}{2} + j \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (5)$$

Поскольку  $[\hat{H}_0, \hat{M}_z] = 0$ , пространство состояний системы разбивается на  $N + 1$  инвариантное подпространство, каждое из которых соответствует определенному значению намагниченности  $m_j$ . Операторы, действующие в данных подпространствах, обозначим  $\hat{H}_{m_j}$ :

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{m_0} \oplus \hat{H}_{m_1} \oplus \dots \oplus \hat{H}_{m_N}. \quad (6)$$

Как было указано выше, диагонализацию матриц  $\hat{H}_{m_j}$  можно производить независимо. Разумеется, суммарная размерность инвариантных подпространств равна полной размерности пространства состояний системы [17]:

$$\dim(\hat{H}_0) = \sum_{j=0}^N \dim(\hat{H}_{m_j}) = \sum_{j=0}^N C_N^j = 2^N.$$

Для того чтобы использовать остальные интегралы движения, необходимо наложить на изучаемую систему периодические граничные условия:  $\hat{S}_{\mathbf{r}=\{l_x+1, y\}} = \hat{S}_{\mathbf{r}=\{1, y\}}$  и  $\hat{S}_{\mathbf{r}=\{x, l_y+1\}} = \hat{S}_{\mathbf{r}=\{x, 1\}}$ . Здесь  $l_x$  и  $l_y$  — линейные размеры системы вдоль направлений  $x$  и  $y$  соответственно ( $l_x l_y = N$ ). Определим операторы пространственной трансляции вдоль осей  $x$  и  $y$ :  $\hat{T}_x, \hat{T}_y$ . Решетка Шастри–Сазерленда имеет период магнитной

решетки вдвое больший, чем период кристаллической, следовательно,  $[\hat{H}_0, \hat{T}_x] \neq 0$  и  $[\hat{H}_0, \hat{T}_y] \neq 0$ , однако

$$[\hat{H}_0, \hat{T}_x^2] = [\hat{H}_0, \hat{T}_y^2] = [\hat{T}_x^2, \hat{T}_y^2] = 0.$$

Соответствующие собственные значения решеточного импульса  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  равны

$$k_x = 4\pi j/l_x, \quad j = 0, 1, \dots, l_x/2 - 1,$$

$$k_y = 4\pi j/l_y, \quad j = 0, 1, \dots, l_y/2 - 1.$$

Поскольку

$$[\hat{M}, \hat{T}_x^2] = [\hat{M}, \hat{T}_y^2] = 0,$$

операторы  $\hat{M}$ ,  $\hat{T}_x^2$  и  $\hat{T}_y^2$  можно использовать одновременно. Таким образом, в каждом инвариантном подпространстве, соответствующем значению намагниченности  $m_j$ , можно выделять инвариантные подпространства, соответствующие различным значениям решеточного импульса  $\mathbf{k}$ .

Далее использовались операторы пространственных инверсий  $\hat{P}_x, \hat{P}_y$  вдоль осей  $x$  и  $y$ . Их собственные значения  $p_x, p_y$  равны  $\pm 1$ . Симметрия решетки Шастри–Сазерленда такова, что  $[\hat{H}_0, \hat{P}_x] \neq 0$ ,  $[\hat{H}_0, \hat{P}_y] \neq 0$ . Однако

$$[\hat{H}_0, \hat{P}] = [\hat{M}, \hat{P}] = 0,$$

где

$$\hat{P} = \hat{P}_x \hat{P}_y.$$

Очевидно, что собственные значения оператора  $\hat{P}$  равны  $p = \pm 1$ . Кроме того,

$$[\hat{P}, \hat{T}_x^2] = [\hat{P}, \hat{T}_y^2] = 0, \quad \mathbf{k} = (0, 0), \quad \mathbf{k} = (\pi, \pi).$$

Таким образом, в подпространствах, соответствующих  $\mathbf{k} = (0, 0)$  и  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ , можно одновременно использовать такие интегралы движения, как  $\hat{M}$ ,  $\hat{T}_x^2$ ,  $\hat{T}_y^2$  и  $\hat{P}$ .

В подпространстве, соответствующем нулевому значению намагниченности ( $m_j = 0$ ), использован также интеграл движения, соответствующий спиновой инверсии  $\hat{Z}$ . Его собственные значения  $z = \pm 1$ .

$$[\hat{H}_0, \hat{Z}] = [\hat{M}, \hat{Z}] = [\hat{T}_x^2, \hat{Z}] = [\hat{T}_y^2, \hat{Z}] = [\hat{P}, \hat{Z}] = 0.$$

Базисные функции характеризуются пятью квантовыми числами — намагниченностью  $m_j$ , решеточным импульсом  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ , пространственной  $p$  и спиновой  $z$  инверсиями [17]:

$$\left| \Psi_{m_j, k_x, k_y, p, z} \right\rangle =$$

$$= a_{m_j, k_x, k_y, p, z} \sum_{j=1}^N \exp[i(x_j k_x + y_j k_y)] \hat{T}_x^{2x_j} \hat{T}_y^{2y_j} \hat{Q} \left| \Psi_{m_j} \right\rangle.$$

Здесь  $a_{m_j, k_x, k_y, p, z}$  — нормировочная константа, а  $\left| \Psi_{m_j} \right\rangle$  — любая базисная функция из инвариантного подпространства, соответствующего намагниченности  $m_j$  (4). Оператор  $\hat{Q}$  может быть записан в виде [17]:

$$\hat{Q} = \begin{cases} \hat{I} & m_j \neq 0, \mathbf{k} \neq (0, 0), \mathbf{k} \neq (\pi, \pi) \\ (1 + p\hat{P}) & m_j \neq 0, \mathbf{k} = (0, 0), \mathbf{k} = (\pi, \pi) \\ (1 + z\hat{Z})(1 + p\hat{P}) & m_j = 0, \mathbf{k} = (0, 0), \mathbf{k} = (\pi, \pi), \end{cases}$$

где  $\hat{I}$  — единичный оператор. Операторы, действующие в соответствующих подпространствах  $\hat{H}_{m_j, k_x, k_y, p, z}$ , также характеризуются пятью индексами. Окончательно получаем выражение для  $\hat{H}_0$  (6):

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=0}^N \hat{H}_{m_j}. \quad (7)$$

где

$$\hat{H}_{m_j} = \sum_{k_x, k_y, p, z} \hat{H}_{m_j, k_x, k_y, p, z}. \quad (8)$$

В (7) и (8) подразумеваются прямые суммы операторов, индексы суммирования в (8) принимают следующие значения:  $k_x = 4\pi j/l_x$ , где  $j = 0, 1, \dots, l_x/2 - 1$ ;  $k_y = 4\pi j/l_y$ , где  $j = 0, 1, \dots, l_y/2 - 1$  и  $p, z = \pm 1$ .

Полевые зависимости намагниченности были получены следующим образом. Как было указано выше,  $[\hat{H}_0, \hat{M}_z] = 0$ . Это значит, что энергия любого состояния линейно меняется во внешнем магнитном поле, приложенном вдоль оси  $z$ , а поскольку каждое инвариантное подпространство соответствует определенному значению магнитного момента  $m_j$ , то

$$\varepsilon(h) = \varepsilon - m_j h.$$

Здесь  $\varepsilon$  — любое собственное значение оператора  $\hat{H}_{m_j}$  (6), (8). Таким образом, чтобы получить зависимости энергий от магнитного поля  $h$ , достаточно произвести диагонализацию системы без внешнего поля (т.е. диагонализацию  $\hat{H}_0$ ). Зная зависимости энергий от  $h$ , можно получить и интересующие нас зависимости намагниченности системы в основном состоянии как функции внешнего поля  $m(h)$ . Для этого необходимо найти минимальные собственные значения  $\hat{H}_0$  в каждом из инвариантных подпространств, соответствующих всем значениям намагниченности  $m_j$  (т.е. минимальные собственные значения операторов  $\hat{H}_{m_j}$ ). Используемый нами метод диагонализации Лонцоша [18] является в данном случае оптимальным. Обозначим минимальные собственные значения операторов  $\hat{H}_{m_j}$  посредством  $\tilde{\varepsilon}_j$ ,  $j = 0, 1, \dots, N$ . Для каждого  $\tilde{\varepsilon}_j$  построим зависимость от поля  $h$ :

$$\tilde{\varepsilon}_j(h) = \tilde{\varepsilon}_j - m_j h, \quad (9)$$

где  $m_j = -N/2 + j$  (см. (5)). При каждом значении поля  $h$  необходимо найти  $j$ , реализующее минимум энергий (9). Обозначим такое  $j$  посредством  $\tilde{j}(h)$ :

$$\tilde{\varepsilon}_{\tilde{j}(h)}(h) = \min_{j=0,1,\dots,N} \tilde{\varepsilon}_j(h).$$

Тогда  $m(h) = -N/2 + \tilde{j}(h)$ . Для удобства часто вводят приведенную намагниченность  $m^*$ , т.е. намагниченность, отнесенную к намагниченности насыщения  $m_{\text{sat}}$ . В нашем случае  $m_{\text{sat}} = N/2$  и

$$m^*(h) = \frac{2}{N} m(h) = 2\tilde{j}(h)/N - 1.$$

### 3. Результаты и обсуждение

Основные результаты данной работы были получены при изучении системы с линейными размерами  $8 \times 4$ . На рис. 2 представлены зависимости приведенной намагниченности  $m^*$  от внешнего магнитного поля  $h$  для случая изотропного обменного взаимодействия:  $J_z = J_{xx}$ ,  $J'_z = J'_{xx}$ . Зависимость 1 соответствует случаю, когда диагональное взаимодействие отсутствует ( $J'_z = J'_{xx} = 0$ ), а  $J_z = J_{xx} = 1$ . Видно, что все плато (ступени) имеют высоты, равные  $2/N$ . Исследование систем с различными размерами показало, что высоты и ширины данных плато зависят исключительно от размеров системы и являются следствием ее конечности. Зависимость 2 получена при  $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 2$ . В этом случае ширины плато, соответствующих  $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$ , слабо зависят от размеров системы и, следовательно, отражают свойства самой модели. Здесь хотелось бы заметить, что в геометрии системы  $8 \times 4$  получить плато, точно соответствующее  $m^* = 1/3$ ,

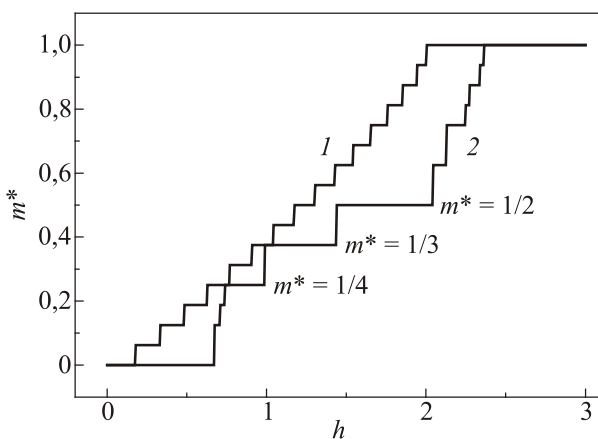


Рис. 2. Зависимости приведенной намагниченности  $m^*$  от внешнего поля  $h$  для случая изотропного обменного взаимодействия. Зависимость 1 соответствует случаю, когда диагональное взаимодействие отсутствует:  $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 0$ . Зависимость 2 получена при  $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 2$ . Размеры изучаемой системы  $8 \times 4$ .

невозможно в силу несоизмеримости образующихся структур и размеров системы. Вместо этого возникает плато  $m^* = 3/8$ . При изучении же зависимостей  $m^*(h)$  в системах, где число узлов кратно трем (например,  $6 \times 4$ ), плато  $m^* = 1/3$  было обнаружено. Важно отметить, что в классической изотропной модели Гейзенберга на решетке Шастри–Сазерленда плато вообще отсутствуют (существует лишь особенность, соответствующая  $m^* = 1/3$ ) [19].

На рис. 3 представлены зависимости  $m^*(h)$ , соответствующие различным значениям обменной анизотропии, для системы из  $8 \times 4$  спинов. Зависимость 1 соответствует изотропному обменному взаимодействию, а зависимость 2 — обменной анизотропии типа «легкая ось» ( $J_{xx} = 1$ ,  $J_z = 1,1$ ,  $J'_{xx} = 2$ ,  $J'_z = 2,1$ ). Помимо общего сдвига зависимости в область больших полей (спин-флоп) видно, что ширины плато, соответствующие  $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$ , увеличиваются. Аналогичный результат для  $m^* = 1/3$  был получен в рамках классической модели Гейзенберга в работе [19].

Таким образом, ряд плато намагниченности, экспериментально наблюдаемых в  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  [12], может быть получен в рамках  $xxz$ -модели для решетки Шастри–Сазерленда со спином  $1/2$ . В то же время некоторые серии плато намагниченности, наблюдаемые в эксперименте, в наших результатах отсутствуют. Это плато, соответствующие  $m^* = 1/k$ , где  $k = 5, 6, \dots, 9$ , а также  $m^* = 2/9$ . Возможной причиной такого несоответствия является ограниченность размеров системы. Более того, на изучаемую систему были наложены периодические граничные условия. Как указано выше, в этом случае соизмеримость образующихся магнитных структур и размеров системы может оказывать существенное влияние на получае-

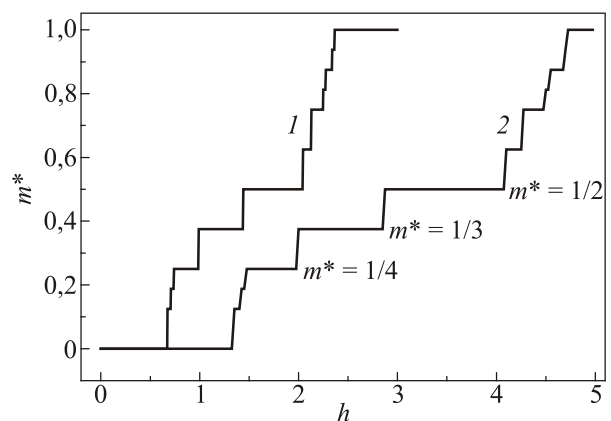


Рис. 3. Зависимости приведенной намагниченности  $m^*$  от внешнего поля  $h$ . Зависимость 1 соответствует случаю изотропного обменного взаимодействия  $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 2$ . Зависимость 2 получена при  $J_{xx} = 1$ ,  $J_z = 1,1$ ,  $J'_{xx} = 2$ ,  $J'_z = 2,1$ . Размеры изучаемой системы  $8 \times 4$ .



мые результаты. Важно также отметить, что в данной работе использовано приближение ближайших соседей. Учет взаимодействий со следующими соседями также может оказать влияние на результаты (см., например, [20], где изучалась так называемая обобщенная решетка Шастри–Сазерленда).

Отдельно было проведено исследование влияния параметров обменного взаимодействия на ширины плато  $\Delta h$  в зависимости  $m^*(h)$ . Как было указано выше, обменная анизотропия не оказывает такого существенного влияния на  $m^*(h)$ , как в случае классической модели Гейзенберга. Поэтому мы ограничились случаем изотропного обмена. Введем  $J = J_{xx} = J_z$ ,  $J' = J'_{xx} = J'_z$  и обозначим их отношение  $\alpha = J'/J$ . Зависимости  $\Delta h$ , соответствующих  $m^* = 1/2, 1/3$  и  $1/4$ , от  $\alpha$  представлены на рис. 4. Как видно на рисунке, существуют три области, характеризующиеся различными типами поведения системы. В области  $0 \leq \alpha \lesssim 1,25$  изменение  $\alpha$  не оказывает влияния на ширины плато. Они оказываются такими же, как и в случае простой квадратной решетки (т.е. в случае, когда  $J' = 0$ ). Эту область можно условно обозначить как область «неелевского» антиферромагнетика. В интервале  $1,25 \lesssim \alpha \lesssim 1,8$  происходят существенные изменения ширин плато. Это область, где специфические свойства решеток Шастри–Сазерленда проявляются в полной мере. В области  $\alpha \gtrsim 1,8$  плато  $m^* = 1/3$  и  $m^* = 1/4$  уменьшаются и в пределе остается одно плато, соответствующее  $m^* = 1/2$ . Эту область можно обозначить как область «димерного» антиферромагнетика — газа ортогональных димеров с антиферромагнитным взаимодействием [4,21,22].

Детальную информацию о структуре образующихся фаз могло бы дать изучение свойств корреляционных функций, например спин-спиновой и димер-димерной. Однако такой анализ является крайне сложным при использовании метода точной диагона-

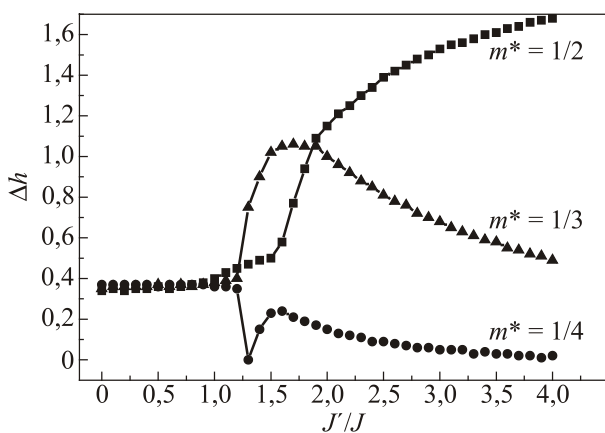


Рис. 4. Зависимости ширин плато  $\Delta h$ , соответствующих  $m^* = 1/2$  (■),  $m^* = 1/3$  (▲) и  $m^* = 1/4$  (●), от параметра  $\alpha = J'/J$ .

лизации в силу ограниченности размеров системы. Тем не менее мы планируем провести такие исследования в ближайшем будущем.

Часть расчетов была выполнена на вычислительном кластере ФТИИТ им Б.И. Веркина НАН Украины.

1. B.S. Shastry and B. Sutherland, *Physica B and C* **108**, 1069 (1981).
2. R.W. Smith and D.A. Keszler, *J. Solid State Chem.* **93**, 430 (1991).
3. S. Miyahara and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **61**, 3417 (2000).
4. S. Miyahara and K. Ueda, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, R327 (2003).
5. A. Läuchli, S. Wessel, and M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **66**, 014401 (2002).
6. M. Moliner, D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, and F. Stauffer, *Phys. Rev. B* **79**, 144401 (2009).
7. S. Yoshii, T. Yamamoto, M. Hagiwara, A. Shigekawa, S. Michimura, F. Iga, K. Takabatake, and K. Kindo, *J. Phys.: Conf. Series* **51**, 59 (2006).
8. S. Yoshii, T. Yamamoto, M. Hagiwara, T. Takeuchi, A. Shigekawa, S. Michimura, F. Iga, T. Takabatake, and K. Kindo, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1282 (2007).
9. S. Michimura, A. Shigekawa, F. Iga, M. Sera, T. Takabatake, K. Ohoyama, and Y. Okabe, *Physica B* **378–380**, 596 (2006).
10. F. Iga, A. Shigekawa, Y. Hasegawa, S. Michimura, T. Taka Yamamoto, M. Hagiwara, and K. Kindo, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, e443 (2007).
11. H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N.V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, and K. Kosuge, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
12. S.E. Sebastian, N. Harrison, P. Sengupta, C.D. Batista, S. Francoual, E. Palm, T. Murphy, N. Marcano, H.A. Dabkowska, and B.D. Gaulin, *arXiv:0707.2075v2* (2008).
13. S. Yoshii, T. Yamamoto, M. Hagiwara, T. Takeuchi, A. Shigekawa, S. Michimura, F. Iga, T. Takabatake, and K. Kindo, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1282 (2007).
14. S. Yoshii, T. Yamamoto, M.H.S. Michimura, A. Shigekawa, F. Iga, T. Takabatake, and K. Kindo, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 087202 (2008).
15. K. Siemensemeyer, E. Wulf, H.-J. Mikeska, K. Flachbart, S. Gabáni, S. Ma a , P. Priputen, A. Efdokimova, and N. Shitsevalova, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 177201 (2008).
16. A. Laeuchli, S. Wessel, M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **66**, 014401 (2002).
17. A.W. Sandvik, *arXiv:1101.3281* (2011).
18. J.K. Cullum and R.A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*, Society for Industrial and Applied Mathematics (2002).
19. V.V. Slavin and A.A. Krivchikov, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 1264 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 1006 (2011)].
20. Yu.I. Dublennykh, *Phys. Rev. E* **88**, 022111 (2013).
21. R. Darradi, J. Richter, and D.J.J. Farnell, *Phys. Rev. B* **72**, 104425 (2005).
22. H.G. Paulinelli, S.M. de Souza, and O. Rojas, *J. Phys.: Condens. Matter* **25** 306003 (2013).

The magnetic properties of the quantum  
Shastry–Sutherland model  $S = 1/2$  spin

V.V. Slavin and A.A. Krivchikov

The dependence of magnetization of the Shastry–Sutherland lattice has been studied using the by exact diagonalization method at zero temperature in the framework of  $xxz$ -model with  $S = 1/2$  spin. It is found that unlike the classical Heisenberg model, the magnetization plateaus corresponding to  $m^* = m/m_{\text{sat}} = 1/4, 1/3, 1/2$  (here  $m_{\text{sat}}$  is saturation magnetization) exist even in the case of isotropic exchange interactions. The influence of exchange interaction on the plateau widths has been studied. It is shown that there

are three areas corresponding to different types of behavior of the system: the region of “Neel” antiferromagnet, the region of “dimer” antiferromagnet, and the intermediate region with the most pronounced unique properties of Shastry–Sutherland. The boundaries of these regions have been defined.

PACS: 75.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration;  
75.30.Gw Magnetic anisotropy;  
**05.50.+q** Lattice theory and statistics (Ising, Potts, etc.).

Keywords: Shastry–Sutherland lattice; exact diagonalization; quantum spin system, antiferromagnet.