

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Крупницька Олеся Михайлівна

ВПЛИВ АНІЗОТРОПІЇ ОБМІННОЇ ВЗАЄМОДІЇ ГАЙЗЕНБЕРГА НА ПРОЦЕС НАМАГНІЧЕННЯ ФРУСТРОВАНОВОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА У СИЛЬНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Роботу отримано 25 червня 2015 р.

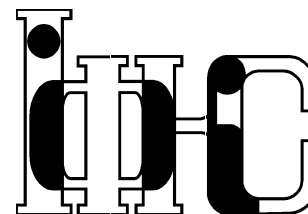
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-15-03U

О.М. Крупницька

ВПЛИВ АНІЗОТРОПІЇ ОБМІННОЇ ВЗАЄМОДІЇ  
ГАЙЗЕНБЕРГА НА ПРОЦЕС НАМАГНІЧЕННЯ  
ФРУСТРОВАНОВОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА  
У СИЛЬНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

ЛЬВІВ

УДК: 538.955

PACS: 75.10.Jm

**Вплив анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга на процес намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка у сильному магнітному полі**

О.М. Крупницька

**Анотація.** Розглядається спин- $\frac{1}{2}$  антиферромагнітна  $XXZ$  модель Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку в зовнішньому магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  або вздовж осі  $z$ . Використовуючи ефективні моделі, знайдені в наближенні сильного зв'язку для випадку взаємодії Гайзенберга з параметром анізотропії  $\Delta > 1$ , досліджено процес намагнічення фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка. Теорія застосована до пояснення експериментальних даних для природнього мінералу азуриту  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ .

**The influence of the Heisenberg exchange interaction anisotropy on magnetization process of the frustrated diamond chain in a strong magnetic field**

O.M. Krupnitska

**Abstract.** We consider the spin- $\frac{1}{2}$  antiferromagnetic  $XXZ$  Heisenberg model on the frustrated diamond spin chain in the  $z$ - or  $x$ -aligned external magnetic field. We investigate magnetization process of the frustrated diamond spin chain using the effective models found in the strong-coupling approximation for the case of the Heisenberg interaction anisotropy parameter  $\Delta > 1$ . The theory is used to explain the experimental data for natural mineral azurite  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ .

Подається в Український фізичний журнал  
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2015  
Institute for Condensed Matter Physics 2015

## 1. Вступ

В останні роки багато уваги звертається на теоретичне і експериментальне вивчення властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга [1]. На відміну від ферромагнетиків, в антиферромагнітних спінових системах можлива конкуренція взаємодій (фрустрації). Це може бути конкуренція обмінних взаємодій між сусідніми спінами і наступними після сусідніх спінами на простих ґратках (наприклад,  $J_1 - J_2$  модель на квадратній ґратці) чи взаємодія найближчих спінів на ґратках зі складною геометрією (наприклад, на ґратці кагоме).

Існує широкий клас одно-, дво- і тривимірних квантових антиферромагнетиків Гайзенберга, які можуть бути досліджені детально спеціальними методами. Це так звані фрустровані квантові антиферромагнетики Гайзенберга з бездисперсійними (плоскими) магнонними станами з найменшою енергією. Дослідження властивостей таких спінових систем у сильних магнітних полях та при низьких температурах ґрунтується на концепції локалізованих магнонів [2–6], яка дозволяє звести задачу до певного класичного ґраткового газу жорстких об'єктів. Характерними особливостями спінових систем, що допускають існування локалізованих магнонів, при  $T = 0$  (в основному стані) є плато та стрибок у кривій намагніченості при полі насичення, нестійкість Пайерлса, а також залишкова ентропія при полі насичення. Теорія розвинена в працях [2–5] стосується так званої ідеальної геометрії, коли одномагнонні стани строго локалізовані (одномагнонна зона строго бездисперсійна). Ця теорія також передбачає ізотропію обмінних взаємодій Гайзенберга (параметр анізотропії  $\Delta = 1$ ), коли напрямок прикладеного магнітного поля не є істотним. В реальних системах можливе відхилення від умов, які забезпечують строгу локалізацію магнонів, а обмінні взаємодії Гайзенберга можуть бути анізотропними ( $\Delta \neq 1$ ). Постає важливе питання: які є наслідки для спостережуваних властивостей через відхилення від ідеальної геометрії чи через довільність напрямку прикладеного магнітного поля, якщо взаємодія Гайзенберга не є ізотропною? Іншими словами, як виглядатиме теорія таких фрустрованих квантових антиферромагнетиків поблизу парадигми локалізованих магнонів?

Випадок відхилення від ідеальної геометрії досліджено у працях [7–9]. У роботі [7] для дослідження властивостей деформованого ромбічного спінового ланцюжка збудовані ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку. Дане наближення було вдосконалене у [9]. У ще одній статті [8] було запропоновано евристичний анзац для

статистичної суми деформованого ромбічного спінового ланцюжка. Ці дослідження стосувалися випадку ізотропної взаємодії Гайзенберга ( $\Delta = 1$ ).

Останні десять років багато уваги до себе привертає природний мінерал азурит  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ , магнітні властивості якого можуть бути описані моделлю фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга [10–13]. Модель азуриту відповідає набору параметрів поблизу ідеальної геометрії, яка передбачає існування локалізованих магніонів [14]. У роботі [11] приведені результати експериментальних досліджень магнітних властивостей азуриту при температурі  $T < 4.2$  К та магнітному полі  $H = 0 \dots 50$  Т. Зокрема, були отримані криві намагніченості у магнітному полі, прикладеному вздовж кристалографічної осі  $b$  та перпендикулярно до неї. Ці криві не збігаються, що може бути спричинене анізотропією обмінних взаємодій Гайзенберга у азуриті (див. [12]).

Питання про намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка з  $XXZ$  взаємодією Гайзенберга у довільно орієнтованому полі поставлене у праці [15], але аналіз обмежений випадком, коли параметр анізотропії обмінної взаємодії  $0 \leq \Delta < 1$ . Зокрема, у роботі [15] представлені результати дослідження кривих намагніченості фрустрованого ромбічного анізотропного ланцюжка Гайзенберга в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  і вздовж осі  $z$ . Для опису системи при низьких температурах були побудовані ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку, які виявились точно розв'язними моделями, а саме, спін- $\frac{1}{2}$   $XY$  ланцюжками у зовнішньому поперечному полі. Для таких спінових ланцюжків є застосовний метод ферміонізації Йордана-Вігнера [16].

У теперішній роботі розглядатимемо фрустрований ромбічний  $XXZ$  ланцюжок Гайзенберга у магнітному полі, орієнтованому вздовж осі  $x$  чи  $z$ , але тепер вважатимемо, що параметр анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга  $\Delta > 1$ . Ми знову побудуємо ефективні моделі для цього спінового ланцюжка в наближенні сильного зв'язку, отримаємо криві намагніченості при низьких температурах і дослідимо їх характерні особливості в залежності від параметра анізотропії  $\Delta$ . Ми також застосуємо розвинену теорію до визначення параметра  $\Delta$  для азуриту на основі експериментальних даних, приведених у статтях [10–12].

## 2. Ефективна теорія

Розгляньмо спін- $\frac{1}{2}$  антиферромагнітну модель з анізотропною взаємодією Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку (рис. 1). Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - h \sum_{i=1}^N s_i^\alpha, \quad (2.1)$$

$$\alpha = x, z,$$

де перша сума береться за всіма сусідніми вузлами ґратки, тоді як друга сума пробігає всі  $N$  вузлів ґратки, див. рис. 1. Крім того,  $J_{ij} > 0$  та  $\Delta \geq 1$ . Якщо  $J_2 > 0$  є найбільшою антиферромагнітною обмінною взаємодією, то можна очікувати, що у сильному магнітному полі лише два стани на вертикальному  $J_2$ -зв'язку відіграватимуть роль у низькотемпературних властивостях. Це дає можливість ефективно описати вихідну фрустровану квантову спінову систему з допомогою простішої двостанової моделі. Практично збудувати такі ефективні теорії можна, використовуючи наближення сильного зв'язку [7, 17].

Розглядатимемо два випадки: 1) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі  $z$  і 2) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі  $x$ . У першому випадку виходитимемо з гамільтоніана (2.1) з  $\alpha = z$ . Для випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $x$ , зробимо унітарне перетворення вихідного гамільтоніана (2.1) і прийдемо до гамільтоніана з анізотропною взаємодією в магнітному полі, спрямованому вздовж осі  $z$ :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + (\Delta - 1) s_i^x s_j^x] - h \sum_i s_i^z. \quad (2.2)$$

Наближення сильного зв'язку базується на припущенні, що взаємодія  $J_2$  є домінуючою, тобто  $\frac{J_i}{J_2} \ll 1$ ,  $i \neq 2$ . Тому гамільтоніан  $H$

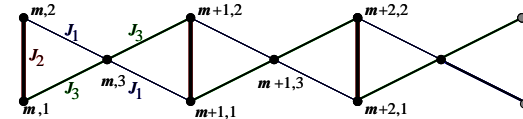


Рис. 1. Фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок. Зручно нумерувати вузли ґратки парою індексів, де перший індекс нумерує комірку ґратки  $m = 1, \dots, \mathcal{N}$ ,  $\mathcal{N} = \frac{N}{3}$ ,  $N$  – число вузлів у ґратці, а другий – позначає положення вузла в комірці.

розбиваємо на «основну частину»  $H_{\text{main}}$  (гамільтоніан, який описує взаємодію двох спінів на вертикальному зв'язку з константою  $J_2$  і взаємодію Зеємана всіх спінів з магнітним полем  $h_0$ , див. нижче) і на «збурення»  $V$ ,  $H = H_{\text{main}} + V$ . В сильних магнітних полях тільки два з чотирьох станів на вертикальному зв'язку беруться до уваги, а саме,  $|u\rangle$  і  $|d\rangle$  з енергіями  $\varepsilon_u$  та  $\varepsilon_d$  відповідно. Далі  $\varepsilon_u = \varepsilon_d$  при  $h = h_0$ . Основний стан  $|\varphi_0\rangle$  гамільтоніана  $H_{\text{main}}$  є  $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений; тут  $\mathcal{N} = \frac{N}{3}$  є число комірок у ланцюжку. Введемо оператор проєктування  $P$  на модельний простір, утворений  $2^{\mathcal{N}}$ -кратно виродженим основним станом:

$$P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} [ (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|) \otimes |\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3| ]_m. \quad (2.3)$$

Для  $J_i \neq 0$ ,  $i \neq 2$  і  $h - h_0 \neq 0$  будемо ефективний гамільтоніан, який діє тільки у модельному просторі, але дає точну енергію основного стану гамільтоніана  $H$ . Використання теорії збурень дає [18]:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots \quad (2.4)$$

Для початку розглянемо випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $z$ . В сильних магнітних полях ми маємо справу з наступними двома станами на вертикальному зв'язку: повністю поляризованим станом  $|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$  і одномагнетним станом  $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$  з енергіями  $\varepsilon_u = \Delta \frac{J_2}{4} - h$  та  $\varepsilon_d = -\frac{J_2}{2} - \frac{\Delta J_2}{4}$ , відповідно. Ефективний гамільтоніан зручно буде записати, використовуючи (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$  оператори  $T$ , які означені так:

$$T^z = \frac{1}{2} (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|), \quad T^+ = |u\rangle\langle d|, \quad T^- = |d\rangle\langle u|.$$

Перший доданок у правій стороні рівняння (2.4) на мові (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$  операторів має вигляд:

$$PHP = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[ -\frac{J_2}{4} - h + \Delta \frac{J}{2} - (h - h_1) T_m^z \right], \quad (2.5)$$

де  $h_1 = h_0 + \Delta J$ ,  $h_0 = J_2 \sqrt{\frac{1+\Delta}{2}}$ , а  $J = \frac{J_1+J_3}{2}$ . Для знаходження другого доданку у правій стороні формули (2.4) розглядаємо  $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$  збуджених станів  $|\varphi_\alpha\rangle$  – це стани з одним перевернутим спіном на вузлі, який з'єднує дві сусідні комірки (див. рис. 1), з енергією  $\varepsilon_\alpha =$

$\varepsilon_0 + h_0$ . Маємо

$$PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = -\frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2(\Delta + 1)} \times \\ \times \sum_m \left[ 1 - 2T_m^z - 2(T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y) \right]. \quad (2.6)$$

Тому для ефективного гамільтоніана  $H_{\text{eff}}$  (2.4) в наближенні сильного зв'язку отримаємо наступний вираз:

$$H_{\text{eff}} = \sum_m \left[ C - h T_m^z + J (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y) \right], \\ C = -h - \frac{J_2}{4} + \Delta \frac{J}{2} - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4(1 + \Delta)J_2}, \quad J = \frac{J_3 + J_1}{2}, \\ h = h - h_1 - \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad h_1 = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J, \\ J = \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}. \quad (2.7)$$

В границі ізотропної взаємодії Гайзенберга  $\Delta = 1$  отриманий ефективний гамільтоніан (2.7) збігається з результатами робіт [7,9]. Крім того, у границі  $\Delta \rightarrow \infty$ , але  $J_i \Delta = I_i < \infty$ , отримаємо:  $C \rightarrow -h + \frac{1}{4}(I_1 + I_3)$ ,  $h \rightarrow h - \frac{1}{2}(I_1 + I_2 + I_3)$ ,  $J \propto \frac{1}{\Delta^2} \rightarrow 0$ . Таким чином у цій границі ефективна модель (2.7) зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі.

Розглянемо далі випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $x$ . Виходитимемо з гамільтоніана (2.2). У сильному магнітному полі маємо справу з наступними двома станами  $|u\rangle$  та  $|d\rangle$  на кожному вертикальному зв'язку:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow_1\uparrow_2\rangle + \beta |\downarrow_1\downarrow_2\rangle, \\ \alpha = \frac{1}{C} \frac{\Delta - 1}{4} J_2, \\ \beta = \frac{1}{C} \left[ h - \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 + h^2} \right], \\ C = \sqrt{2} \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 - h \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 + h^2 + h^2}} \quad (2.8)$$

та

$$|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle) \quad (2.9)$$

з енергіями  $\varepsilon_u = \frac{1}{4}[J_2 - \sqrt{(\Delta - 1)^2 J_2^2 + 16h^2}]$  та  $\varepsilon_d = -\frac{1}{4}(2 + \Delta)J_2$ , відповідно. Для першого доданку в правій стороні формули (2.4) отримаємо:

$$PHP = \sum_m \left[ -\frac{h}{2} - \frac{2 + \Delta}{4} J_2 - (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) \left( \frac{1}{2} + T_m^z \right) \right], \quad (2.10)$$

де  $J = \frac{J_1 + J_3}{2}$ ,  $h_0 = J_2 \sqrt{\frac{1 + \Delta}{2}}$ , а константи  $\alpha$  і  $\beta$  визначені у формулі (2.8). Існує два класи збуджених станів, які дають ненульовий внесок у другий доданок у правій стороні рівняння (2.4). Перший з них складається з  $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$  станів, які містять один перевернутий спин на третьому вузлі, що з'єднує дві сусідні комірки, див. рис. 1. Тому

$$\begin{aligned} PV \sum_{\alpha_1 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_1}\rangle \langle \varphi_{\alpha_1}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_1}} VP \\ = \sum_m (C_1 - h_1 T_m^z + J^x T_m^x T_{m+1}^x + J^y T_m^y T_{m+1}^y), \\ C_1 = -\frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2], \\ h_1 = -\frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta, \\ J^x = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \\ J^y = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Другий клас збуджених станів складається з  $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}-1}$  станів. Стан димера комірки  $m$  в цьому випадку визначається як  $-\beta | \uparrow_1 \uparrow_2 \rangle + \alpha | \downarrow_1 \downarrow_2 \rangle$  з енергією  $\frac{1}{4}[J_2 + \sqrt{(\Delta - 1)^2 J_2^2 + 16h^2}]$ , а константи  $\alpha$  та  $\beta$  означені у формулі (2.8). Енергія цих збуджених станів є  $\varepsilon_{\alpha_2} = \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(3 + \Delta)J_2$ . Легко переконатися, що

$$\begin{aligned} PV \sum_{\alpha_2 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_2}\rangle \langle \varphi_{\alpha_2}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_2}} VP \\ = -\sum_m \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2 \left( \frac{1}{2} + T_m^z \right). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Об'єднуючи формули (2.10), (2.11), (2.12), знаходимо  $H_{\text{eff}}$ . Ефективний гамільтоніан для фрустрованого ромбічного спінового  $XXZ$  ланцюжка Гайзенберга ( $\Delta \geq 1$ ) в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ , має вигляд:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \sum_m (C - h T_m^z + J^x T_m^x T_{m+1}^x + J^y T_m^y T_{m+1}^y), \\ C &= -\frac{h}{2} - \frac{2 + \Delta}{4} J_2 - \frac{1}{2} (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) \\ &\quad - \frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2] \\ &\quad - \frac{4(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\ h &= (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) \\ &\quad - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta + \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\ J^x &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \\ J^y &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2. \end{aligned} \quad (2.13)$$

В границі  $\Delta \rightarrow 1$  отримані ефективні гамільтоніани (2.7) і (2.13) збігаються і відповідають (нефрустрованому) спин- $\frac{1}{2}$  ізотропному  $XY$  ланцюжку в поперечному магнітному полі. Для ідеального фрустрованого ромбічного ланцюжка ( $J_1 = J_3$ ) у границі  $\Delta \rightarrow \infty$ , але  $J_i \Delta = I_i < \infty$ , ефективний гамільтоніан (2.13) зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі:  $J^x = 0$ ,  $J^y = 0$ .

Формально вирази для ефективних гамільтоніанів (2.7) і (2.13) є такі ж самі, як отримані раніше у роботі [15] для  $0 \leq \Delta < 1$ , але вони описують якісно інший випадок, коли параметр анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга  $\Delta > 1$ . При цьому, у випадку  $\Delta > 1$ , вирази для констант  $\alpha$  і  $\beta$  є іншими, ніж у [15] [порівняймо формулу (2.8) та вирази для констант  $a$  і  $b$  у формулі (2.5) з [15]]. Отримані моделі (2.7) і (2.13) є точно розв'язними методом ферміонізації Йордана-Вігнера [16].

### 3. Порівняння вихідних та ефективних моделей

Для дослідження отриманих ефективних моделей (2.7) і (2.13) порівняймо їх передбачення з даними для вихідних моделей. Для прикла-

ду розглядатимемо низькотемпературні криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  та вздовж осі  $z$ , див. рис. 2 і 3. Такі криві отримуємо методом точної діагоналізації [19]. При точній діагоналізації братимемо ланцюжок з  $N = 15$  вузлів з періодичними граничними умовами і з параметрами  $J_1 = J_3 = 1$  (ідеальна геометрія),  $J_1 = 0.85$ ,  $J_3 = 1.15$  (неідеальна геометрія),  $J_2 = 3$ ,  $\Delta = 1.5$ , 3 при низькій температурі  $T = 0.001$ .

Очевидно, що коли параметр анізотропії взаємодії Гайзенберга  $\Delta = 1$ , то криві намагніченості ромбічного ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  та вздовж осі  $z$ , збігаються. Однак, коли  $\Delta$  відрізняється від одиниці, зокрема, коли  $\Delta = 1.5$  чи  $\Delta = 3$ , то криві намагніченості ромбічного ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  та вздовж осі  $z$ , відрізняються. У випадку ідеальної геометрії (див. рис. 2) крива намагніченості має вертикальний стрибок при характеристичному магнітному полі  $h_*$ . Коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $z$ , то при цьому характеристичному полі намагніченість досягає значення насичення, тобто,  $m(h_* + 0) = \frac{1}{2}$ . У магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ , значення насичення намагніченості досягається лише в границі  $h \rightarrow \infty$ , але при  $h = h_* + 0$  значення намагніченості близьке до  $\frac{1}{2}$ . Вираз для характеристичного поля  $h_*$  знаходимо з умови  $h(h_*) = 0$  [15]. Коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $z$ , то

$$h_*^z = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}. \quad (3.1)$$

Відповідно, для поля, прикладеного вздовж осі  $x$ , маємо

$$h_*^x \approx \sqrt{\frac{1 + \Delta}{2} J_2 + J} + \frac{(J_3 - J_1)^2}{4\sqrt{\frac{1 + \Delta}{2} J_2}} \Delta. \quad (3.2)$$

Ці формули, приведені у [15] при розгляді випадку  $0 \leq \Delta < 1$ , справедливі також і для  $\Delta > 1$ .

На рис. 4 показана залежність величини стрибка кривої намагніченості  $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) - m^x(h_*^x - 0)$  від параметра  $\Delta$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ , для  $J_2 = 3$ ,  $J_1 = J_3 = 1$  та  $J_1 = J_3 = 0$ . Розгляньмо випадок, коли  $J_1 = J_3 = 0$  (тоді  $h_*^x = h_0$ ). Тоді для виразу для намагніченості для сукупності вертикальних димерів із взаємодією  $J_2$  і вільних спінів у вузлах  $m$ , 3 можна отримати просту формулу. Справді, для магнітного моменту комірки з трьох

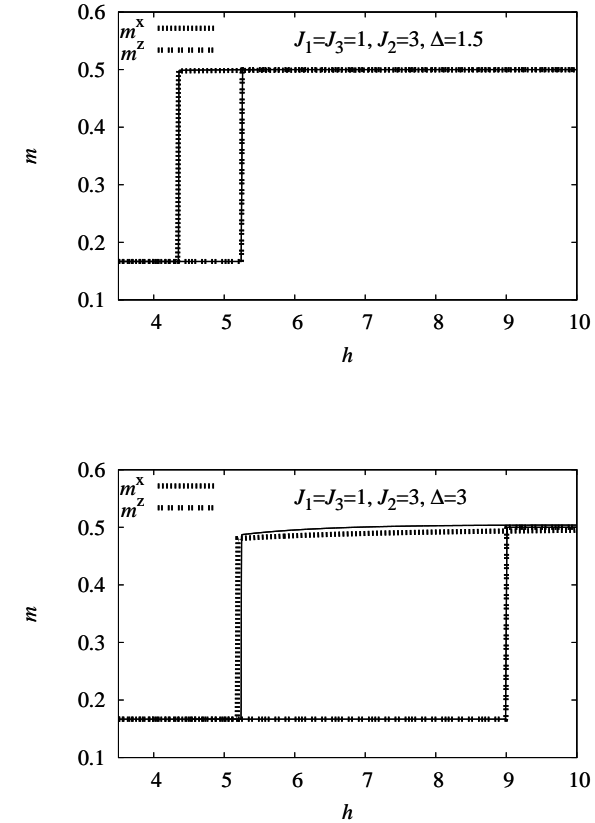


Рис. 2. Криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга з параметрами  $J_1 = J_3 = 1$ ,  $J_2 = 3$ ,  $\Delta = 1.5$  (верхня панель) і  $\Delta = 3$  (нижня панель) в магнітному полі, прикладеному вздовж осей  $z$  та  $x$  (пунктирні криві). Дані точної діагоналізації отримані для скінченного періодичного ланцюжка з  $N = 15$ . Тонкі чорні криві – результати на основі ефективної теорії з використанням ферміонізації Йордана-Вігнера для безмежно великих систем.

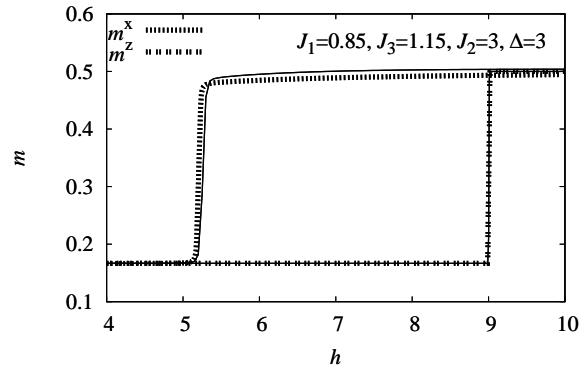
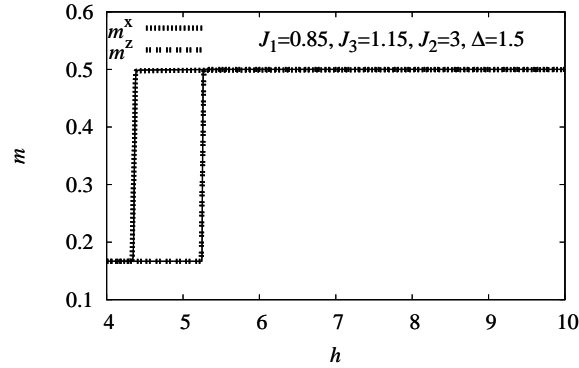


Рис. 3. Те саме, що на рис. 2, але з  $J_1 = 0.85$ ,  $J_2 = 3$ ,  $J_3 = 1.15$ .

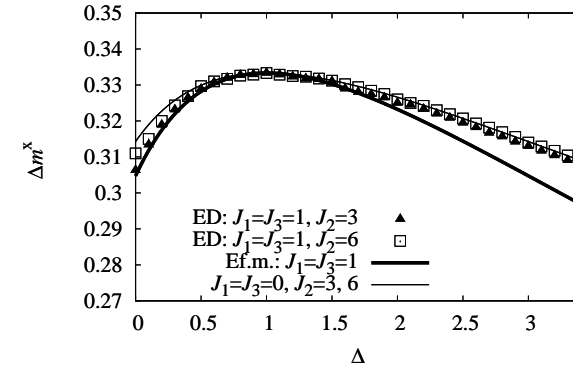


Рис. 4. Залежність величини стрибка намагніченості  $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) - m^x(h_*^x - 0)$  фрустрованого ромбічного  $XXZ$  ланцюжка Гайзенберга від параметра  $\Delta$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ .

вузлів у сильному полі маємо

$$\begin{aligned}
 & (\alpha|\uparrow\uparrow| + \beta|\downarrow\downarrow|)(s_1^z + s_2^z)(\alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\downarrow\rangle) + \frac{1}{2} \\
 & = (\alpha|\uparrow\uparrow| + \beta|\downarrow\downarrow|)(\alpha|\uparrow\uparrow\rangle - \beta|\downarrow\downarrow\rangle) + \frac{1}{2} \\
 & = \alpha^2 - \beta^2 + \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Тому для намагніченості в розрахунку на один вузол отримаємо  $m^x(h_0 + 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} + \frac{1}{6}$ . Далі,  $m^x(h_0 - 0) = \frac{1}{6}$ , так що  $\Delta m^x \equiv m^x(h_0 + 0) - m^x(h_0 - 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} \neq 0$  для будь-якого  $\Delta$  (тонка крива на рис. 4). У випадку, коли присутні взаємодії  $J_1 = J_3 \neq 0$  (випадок ідеальної геометрії), криві намагніченості можна отримати чисельно, використовуючи точну діагоналізацію для ромбічного ланцюжка з параметрами  $J_2 = 3$  і  $J_1 = J_3 = 1$  [трикутники та квадратики на рис. 4]. Нарешті величину  $\Delta m^x$  можна знайти, використовуючи ефективну модель (2.13) (товста лінія на рис. 4). Ефективна модель за умови  $J_1 = J_3$  відповідає моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі.

З рис. 4 бачимо, що зі збільшенням значення  $\Delta$  від 0 до 1 величина стрибка кривої намагніченості збільшується до максимуму при

$\Delta = 1$ , який становить  $\frac{1}{3}$ , а з подальшим ростом  $\Delta$  величина стрибка зменшується і прямує до нуля.

У випадку відхилення від ідеальної геометрії ( $J_1 \neq J_3$ ) стрибок кривої намагніченості у магнітному полі, спрямованому вздовж осі  $x$  або вздовж осі  $z$ , розмивається і намагніченість стрімко змінює своє значення в околі  $h = h_*$  (див. рис. 3). Однак, характеристичні поля  $h_*^z$  і  $h_*^x$  залишаються добре визначеними і у цьому випадку.

#### 4. Застосування до азуриту

Вважається, що найбільш доречною моделлю для азуриту є модель деформованого ромбічного спінового ланцюжка [див. формулу (2.1) і рис. 1] з параметрами [14]:  $J_1 \approx 15.51$  К,  $J_2 \approx 33$  К,  $J_3 \approx 6.93$  К. Крім того  $h = g\mu_B H$ ,  $g \approx 2.06$ ,  $\mu_B \approx 0.67171$  К/Т; магнітне поле  $H$  тут береться у теслах.

У статті [12] приведено експериментальні криві намагніченості для азуриту при температурі  $T = 1.5$  К у магнітному полі, яке було прикладене вздовж кристалографічної осі  $b$  та перпендикулярно до неї. У випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $b$  крива намагніченості має плато при  $\frac{1}{3}$  значення насичення намагніченості між  $H_{c1}^{\parallel} = 16$  Т і  $H_{c2}^{\parallel} = 26$  Т, а потім стрімко зростає до насичення при  $H_{c3}^{\parallel} = 32.5$  Т. У випадку поля, прикладеного перпендикулярно до осі  $b$ , крива намагніченості має плато при  $\frac{1}{3}$  значення насичення намагніченості між  $H_{c1}^{\perp} = 11$  Т і  $H_{c2}^{\perp} = 30$  Т, а потім стрімко зростає до насичення при  $H_{c3}^{\perp} = 32.5$  Т.

З допомогою формул (3.1) та (3.2) можна оцінити величину параметра анізотропії обмінної взаємодії  $\Delta$  для азуриту на основі експериментальних даних [11]. Припустимо, що умова  $H \parallel b$  відповідає магнітному полю  $H$ , прикладеному вздовж осі  $z$ . Тоді, використовуючи експериментальне значення магнітного поля, при якому відбувається стрибок у кривій намагніченості  $H^{\parallel} \approx 29$  Т, а також параметри для азуриту, з допомогою формули (3.1) отримуємо, що параметр анізотропії  $\Delta$  для азуриту є  $\Delta \approx 0.85$ . З іншого боку, умова  $H \perp b$  відповідає випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $x$ . Поле при якому відбувається стрибок у кривій намагніченості  $H^{\perp} \approx 31$  Т і з формули (3.2) отримуємо, що параметр анізотропії обмінних взаємодій для азуриту  $\Delta \approx 0.84$ . Таким чином, теоретичне передбачення для параметра анізотропії обмінних взаємодій у азуриті є  $\Delta \approx 0.84 \dots 0.85$ .

Криві намагнічення для параметрів для азуриту при двох температурах  $T = 0.08$  К і  $T = 1.5$  К приведені на рис. 5. Відзначимо, що

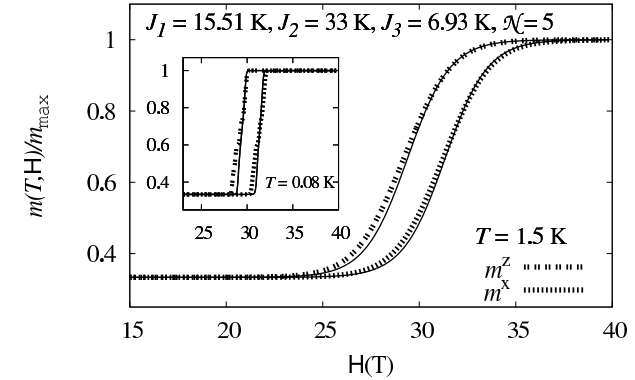


Рис. 5. Низькотемпературні криві намагніченості для фрустрованого ромбічного ланцюжка з параметрами для азуриту  $J_1 = 15.51$  К,  $J_2 = 33$  К,  $J_3 = 6.93$  К ( $J_m = 0$ ) і гіромагнітним співвідношенням  $g = 2.06$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $z$  і вздовж осі  $x$  (пунктирні криві). Тонкі чорні криві – результати на основі ефективної теорії з використанням ферміонізації Йордана-Вігнера.

для кращої згоди з експериментальними даними потрібно було б ще врахувати 1) взаємодію  $J_m$  між вузлами  $m, 3$  і  $m + 1, 3$  на рис. 1 і 2) міжланцюжкову взаємодію [6]. Ці дослідження виходять за межі даної статті.

#### 5. Висновки

В даній роботі досліджено вплив анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга на низькотемпературні властивості майже плоскостонного ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  або вздовж осі  $z$ . Аналіз стосується випадку, коли параметр анізотропії Гайзенберга  $\Delta > 1$ ; він доповнює зроблене раніше дослідження для  $0 \leq \Delta < 1$  [15].

Для опису низькотемпературних властивостей деформованого ромбічного ланцюжка у довільно орієнтованому магнітному полі побудовані ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку. Отримані результати для кривої намагнічення при низьких температурах і великих полях добре узгоджуються з даними точної діагоналізації для вихідного ромбічного ланцюжка, який складається з 15 вузлів.

Отримана залежність величини стрибка намагніченості  $\Delta m^x$  для ромбічного спінового ланцюжка у магнітному полі, прикладеному



вздовж осі  $x$ , від параметра анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга  $\Delta \geq 0$ . Найбільше значення стрибка намагніченості  $\Delta m^x$  є у ізотропному випадку  $\Delta = 1$ . Крім того,  $\Delta m^x \rightarrow 0$  при  $\Delta \rightarrow \infty$ .

Запропоновані ефективні моделі дозволяють зробити теоретичні передбачення для низькотемпературних властивостей азуриту в сильних магнітних полях (понад 30 Т). Оцінено величину параметра анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга  $\Delta$  для азуриту:  $\Delta \approx 0.84 \dots 0.85$ .

Розроблений підхід міг би бути застосований до пояснення експериментальних даних і для інших фрустрованих квантових антиферромагнетиків з майже бездисперсійними магнетонними станами з найменшою енергією, наприклад, для недавно синтезованої магнітної сполуки  $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$  [20].

## Подяки

Автор висловлює вдячність О. Держку, Т. Крохмальському, Й. Ріхтеру, а також О. Менчипшину за обговорення результатів цього дослідження та корисні поради.

## Література

- G. Misguich and C. Lhuillier, in *Frustrated Spin Systems*, edited by H. T. Diep (World Scientific, Singapore, 2005), pp. 229-306; J. Richter, J. Schulenburg, and A. Honecker, in *Quantum Magnetism*, Lecture Notes in Physics Vol. 645, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop (Springer, Berlin, 2004), pp. 85-153.
- J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **88**, 167207 (2002).
- M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, Phys. Rev. B **70**, 100403(R) (2004).
- O. Derzhko and J. Richter, Eur. Phys. J. B **52**, 23 (2006).
- O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, and H.-J. Schmidt, Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv) **33**, 982 (2007).
- O. Derzhko, J. Richter, and M. Maksymenko, Int. J. Mod. Phys. B **29**, 1530007 (2015).
- A. Honecker, S. Hu, R. Peters, and J. Richter, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 164211 (2011).
- O. Derzhko, J. Richter, and O. Krupnitska, Condensed Matter Physics (L'viv) **15**, 43702 (2012).
- O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhmalkii, Phys. Rev. B **88**, 094426 (2013); Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv) **40**, 662 (2014).
- H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).
- H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, K. Kindo, A. Matsuo, W. Higemoto, K. Nishiyama, M. Horvatić, and C. Berthier, Prog. Theor. Phys. Suppl. **159**, 1 (2005).
- H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, Phys. Rev. Lett. **97**, 089702 (2006).
- N. Ananikian, H. Lazaryan, and M. Nalbandyan, Eur. Phys. J. B **85**, 223 (2012).
- H. Jeschke, I. Opahle, H. Kandpal, R. Valenti, H. Das, T. Saha-Dasgupta, O. Janson, H. Rosner, A. Brühl, B. Wolf, M. Lang, J. Richter, S. Hu, X. Wang, R. Peters, T. Pruschke, and A. Honecker, Phys. Rev. Lett. **106**, 217201 (2011).
- J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhmalkii, and O. Derzhko, J. Magn. Magn. Mater. **379**, 39 (2015).
- E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Ann. Phys. (N.Y.) **16**, 407 (1961).
- A. Honecker and A. Läuchli, Phys. Rev. B **63**, 174407 (2001).
- P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1993), p. 77.
- A. F. Albuquerque et. al., J. Magn. Magn. Mater. **310**, 1187 (2007); B. Bauer et. al., J. Stat. Mech. P05001 (2011).
- H. Tanaka, N. Kurita, M. Okada, E. Kunihiro, Y. Shirata, K. Fujii, H. Uekusa, A. Matsuo, K. Kindo, and H. Nojiri, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 103701 (2014).

# CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

**AIMS AND SCOPE:** The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

**ABSTRACTED/INDEXED IN:** Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii.

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

## CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>