

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ, СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ СПИНОВЫХ ЛЕСТНИЧНЫХ СИСТЕМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В.В. Вальков, А.А. Рудько\*

*Методом двухвременных температурных функций Грина исследовалось поведение двухцепочечной спиновой лестничной системы с  $S=S$ . Описание системы осуществлено в рамках идеологии атомного представления. Обменное взаимодействие между спиновыми моментами, принадлежащими одной "перекладине" лестницы, учитывается точно. Волновые функции такой подсистемы, соответствующие синглетному и триплетным состояниям, использованы в качестве базиса для реализации атомного представления. При этом исходная лестничная система сведена к одномерной цепочке, в которой в качестве структурной единицы выступает синглет-триплетная подсистема. Определен спектр элементарных возбуждений, энергия и теплоемкость исследуемой системы. Показано, что в спектре элементарных возбуждений имеется энергетическая щель. Температурная зависимость теплоемкости содержит аномалию типа Шотки.*

В последнее время активизировались исследования, посвященные одномерным и квази-одномерным квантовыми спиновыми системам. Это объясняется несколькими причинами. Во-первых, к настоящему времени синтезировано большое число кристаллов, в которых реализуются одномерные цепочки спиновых моментов. Во-вторых, квази-одномерные спиновые системы поддаются как аналитическому, так и численному анализу. К таким системам относятся спиновые лестничные системы, которые представляют из себя две или более параллельные цепочки спинов, сильно связанных между собой. В узлах цепочек могут находиться частицы как с целым, так и с полуцелым значением спинового момента. Величина спина является одним из основных факторов, определяющих спектральные свойства систем, наряду с числом цепочек в лестнице.

Так, например, для антиферромагнитного взаимодействия частиц со спином  $S=S$  в узлах цепочек в спектре возбуждения наблюдаются кардинальные различия: в цепочке и лестницах с нечетным числом цепочек спектр безщелевой, а в лестницах с четным числом цепочек, напротив, имеется щель конечной энергии.

Эксперименты по нейтронному рассеянию позволили установить ряд соединений в структуре которых отчетливо выделяются спиновые лестницы.

Из лестничных систем со спином  $S=S$  двухцепочечные встречаются в соединениях  $Sr_2CuO_3$  [1] и  $Cu(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$  [2], а трехцепочечные –  $Sr_2Cu_3O_5$ ,  $La_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$  [3].

Настоящая работа посвящена исследованию термодинамических свойств двухцепочечной гейзенберговской лестничной системы  $2N$  спинов  $S=S$ . (рис 1).

В узлах решетки находятся частицы со спином  $s = 1/2$ , константы взаимодействия  $J>0$ ,  $K>0$  определяют величину антиферромагнитного взаимодействия. Цифры 1 и 2 нумеруют цепочки, индекс  $i$  - номер частицы в каждой цепочке.

Гамильтониан системы представим в виде:

$$H = J \sum_{i=1}^N (S_{i1}S_{i2}) + K \sum_{i=1}^N \{ (S_{i1}S_{i+11}) + (S_{i2}S_{i+12}) \} - h \sum_{i=1}^N (S_{i1}S_{i2}), \tag{1}$$

где  $S_{i1}$  и  $S_{i2}$  – операторы полного спина  $i$ -той частицы, принадлежащей первой или второй цепочке соответственно. Круглыми скобками обозначено скалярное произведение. Система помещена во внешнее магнитное поле  $h$ , направленное вдоль оси  $z$ , т.е.  $h=(0;0;h)$ . Суммирование производится по всем частицам одной цепочки.

В качестве базисных выбраны состояния:

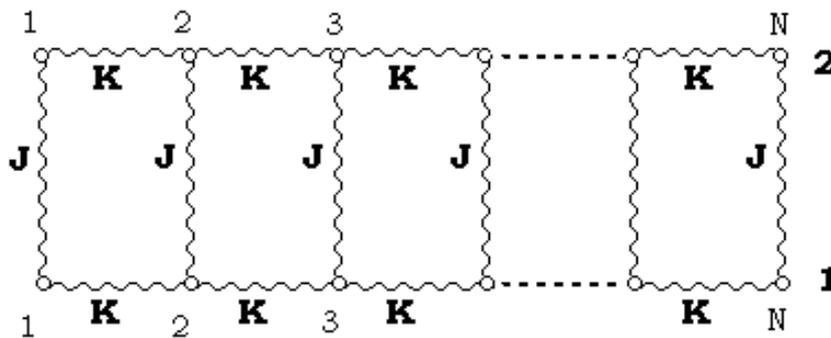


Рис 1. Спиновая лестничная система

$$\begin{aligned}
 |0\rangle &= |0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\
 |1\rangle &= |1\ 1\rangle = |++\rangle \\
 |2\rangle &= |1\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\
 |3\rangle &= |1\ -1\rangle = |--\rangle,
 \end{aligned} \tag{2}$$

которые являются собственными для не взаимодействующей части гамильтониана.

Здесь  $|+-\rangle$  означает, что частица из цепочки 1 имеет спин, направленный по полю, а спин частицы, принадлежащей второй цепочке, направлен против поля. При таком выборе элементарной ячейки гамильтониан (1) разбивается на сумму:  $H = H_0 + H_{int}$ . Здесь  $H_0$  описывает набор не взаимодействующих синглет-триплетных подсистем в атомном представлении, а  $H_{int}$  описывает взаимодействие между ячейками.

Непосредственным вычислением можно убедиться в том, что система базисных функций (2) обладает свойствами ортонормированности и полноты:

$$\langle n_i | n_j \rangle = \delta_{ij}; \quad 1 = \sum_{i=0}^3 |n_i\rangle \langle n_i|, \tag{3}$$

что является достаточным условием введения операторов Хаббарда, со стандартными бозевскими перестановочными соотношениями:

$$x^{pq} = |p\rangle \langle q|, \quad [x_f^{pq}, x_g^{st}] = \delta_{fg} (\delta_{qs} x_f^{pt} - \delta_{pt} x_f^{sq}). \tag{4}$$

Гамильтониан в операторах Хаббарда примет вид:

$$H = \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^3 E_n x_i^{nn} + \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha, \beta} (C(\alpha) \hat{V} C(\beta)) x_i^\alpha x_{i+1}^\beta + \sum_{i=1}^N \sum_{m,n=0}^3 \Gamma(m) \Gamma(n) x_i^{mm} x_{i+1}^{nn}, \tag{5}$$

где использованы обозначения:

$\alpha$	01	10	02	20	03	30	12	21	13	31	23	32
$\gamma_1^\perp(\alpha)$		$\frac{-1}{\sqrt{2}}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
$\gamma_2^\perp(\alpha)$		$\frac{1}{\sqrt{2}}$			$\frac{-1}{\sqrt{2}}$		$\frac{1}{\sqrt{2}}$				$\frac{1}{\sqrt{2}}$	
$\gamma^\parallel(\alpha)$			$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$								

n	0	1	2	3
$\Gamma(n)$	0	$\frac{1}{2}$	0	$-\frac{1}{2}$
$E_n$	$-\frac{3}{4}\mathbf{J}$	$\frac{1}{4}\mathbf{J} - h$	$\frac{1}{4}\mathbf{J}$	$\frac{1}{4}\mathbf{J} + h$

$$\hat{V} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}K & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}K & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}K & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}K & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2K \end{bmatrix} \quad C(\alpha) = \begin{bmatrix} \gamma_1^+(\alpha) \\ \gamma_1^+(-\alpha) \\ \gamma_2^+(\alpha) \\ \gamma_2^+(-\alpha) \\ \gamma^{\parallel}(\alpha) \end{bmatrix}$$

Дальнейшее решение задачи производится методом функций Грина, стартовая позиция для которого – гамильтониан (5). “Спектральное” уравнение на функцию Грина имеет вид:

$$E \langle \langle x_f^\alpha | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E = \delta_{fg} \langle [x_f^\alpha, x_g^{-\beta}] \rangle + \langle \langle [x_f^\alpha | H] | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E, \quad (6)$$

где

$$\langle \langle x_f^\alpha | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt} \langle \langle x_f^\alpha | x_g^{-\beta} \rangle \rangle dt \quad (6.1)$$

– Фурье образ двух временной температурной функции Грина.

Система уравнений на функции Грина (6) содержит функции более высокого порядка  $\langle \langle [x_f^\alpha, H] | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E$ . Для линеаризации (или замыкания) этой системы уравнений использовано расщепление Тябликова [4]. После применения процедуры линеаризации уравнение принимает вид:

$$[D_\alpha(E)]^{-1} \langle \langle x_f^\alpha | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E = \delta_{fg} \delta_{\alpha\beta} b(\alpha) + b(\alpha) \sum_{\gamma} (C(\alpha) \hat{V} C(\gamma)) (\langle \langle x_{f-1}^\gamma | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E + \langle \langle x_{f-1}^\gamma | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E), \quad (7)$$

где  $[D_\alpha(E)]^{-1} = [E + (\alpha E) + 4K(\alpha \Gamma)(N \Gamma)]$ , а круглыми скобками обозначено скалярное произведение.  $E, N$  – вектора столбцы, компоненты которых суть собственные значения нулевого гамильтониана и средние числа заполнения уровней соответственно. При этом  $b(\alpha)$  и  $N_n$  определяются выражениями:

$$b(\alpha) = \sum_{n=0}^3 \alpha_n \langle x^{nn} \rangle, \quad N_n = \langle x^{nn} \rangle. \quad (8)$$

В импульсном пространстве уравнение примет более простой вид и может быть разрешено относительно гриновских функций одного импульса.

$$[D_\alpha(E)]^{-1} \langle \langle x_p^\alpha | x_p^{-\beta} \rangle \rangle_E = \delta_{\alpha\beta} b(\alpha) + b(\alpha) \sum_{\gamma} (C(-\alpha) \hat{V} C(\gamma)) 2 \cos pa \langle \langle x_p^\gamma | x_p^{-\beta} \rangle \rangle_E, \quad (9)$$

где использовано Фурье преобразование:

$$\langle \langle x_f^\alpha | x_g^{-\beta} \rangle \rangle_E = \frac{1}{N} \sum_p e^{ip(f-g)} \langle \langle x_p^\alpha | x_p^{-\beta} \rangle \rangle_E, \quad (9.1)$$

Используя расщепленность матрицы  $V$ , систему (9) можно привести к виду  $Aw=b$ . Решение системы уравнений (9) имеет вид:

$$\langle \langle x_p^\alpha | x_p^{-\beta} \rangle \rangle_E = \delta_{\alpha\beta} b(\alpha) D_\alpha(E) + 2 \cos pa b(\alpha) D_\alpha(E) b(\beta) D_\beta(E) (C(-\alpha) \hat{V} C(\beta)) \quad (10)$$

Полюса функции Грина определяются уравнением  $\det(A) = 0$ . Равенство нулю этого определителя дает дисперсионные соотношения.

По спектральной теореме вычисляются средние:

$$\langle x_i^{np} x_i^{pn} \rangle = N_n, \quad n = 0, 1, 2, 3;$$

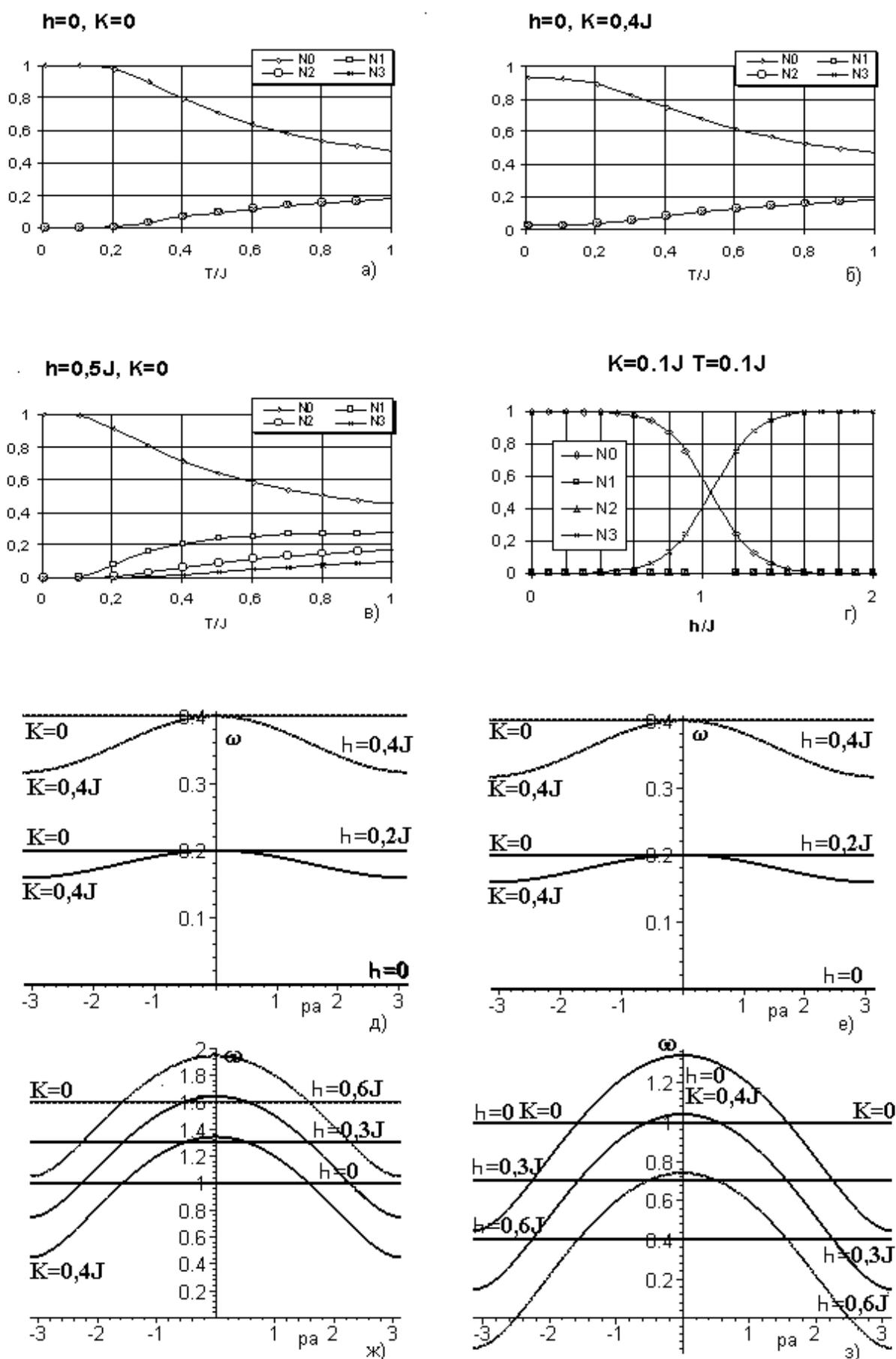


Рис. 2 Числа заполнения и дисперсионные характеристики системы

Полученные уравнения – уравнения самосогласования, которые решаются численно, при помощи ЭВМ. Дисперсионные зависимости даются следующими соотношениями:

$$\Omega(p) = \sqrt{\frac{1}{4} (\omega_{13} \text{Cos}(p))^2 + J^2 + JK(2N_0 - N_1 - N_3) \text{Cos}(p)}$$

$$\omega(p) = \sqrt{J^2 + 2JK(N_0 - N_2) \text{Cos}(p)}$$

(11)

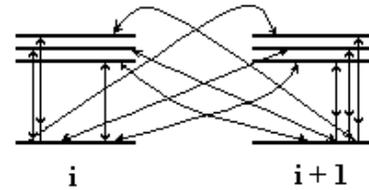


Рис.3. Схема перескоков в узле и между узлами

На рис.2 приводится температурная зависимость чисел заполнения. Рис. 2а, б представляют зависимости без внешнего магнитного поля при различных значениях параметра **К**. Как и следовало ожидать, без магнитного поля все триплетные состояния обладают одинаковой энергией, следовательно, заселены одинаково. Видно, что величина параметра **К** влияет на числа заполнения, т.е. на энергию системы в целом. При температурах того же порядка, что и **К** наблюдается рост чисел заполнения триплетных уровней с увеличением параметра **К**. Это говорит о сближении синглетного и триплетных состояний по шкале энергии.

При сопоставлении рис. 2а и 2в видно, что при погружении системы во внешнее магнитное поле происходит расщепление триплетных энергетических уровней. При этом энергия уровня с направлением спиновых моментов по полю понижается (увеличение заселенности первого энергетического уровня). Заселенность третьего энергетического уровня, напротив, уменьшается.

При дальнейшем увеличении магнитного поля происходит сближение нулевого и первого энергетических уровней, а при определенном значении магнитного поля (порядка **Ж**) – выравнивание энергий этих уровней и смена основного состояния. Это отчетливо видно на рис.2 г.

На рис. 2 видно, что с увеличением параметра **К** происходит уменьшение заселенности нулевого (синглетного) и увеличение заселенности первого энергетических уровней. Это происходит из-за увеличения обменного взаимодействия (перескоков) между основным и возбужденными состояниями между различными узлами. (рис.3)

Используя рис 2г, можно графически определить точку кроссовера. Важно отметить, что в рамках используемого подхода, при численном расчете, нельзя вычислить точку кроссовера, т.к. появляются расходимости в интегралах, входящих в выражение для заселенностей энергетических уровней.

После решения уравнений самосогласования можно переходить к рассмотрению дисперсионных соотношений, которые получаются из соотношения  $\det(A)=0$ . Это уравнение имеет семь корней:

$$\omega = \sqrt{J^2 + 2JK(N_0 - N_2) \text{Cos}(p)}$$

$$\omega = \pm [\omega_{13} (1 - \text{Cos}(p)) - h]$$

$$\omega = \pm \left[ h - \omega_{13} \left( 1 - \frac{1}{2} \text{Cos}(p) \right) \pm \Omega(p) \right]$$

(12)

Рассмотрим подробнее каждую из этих зависимостей.

Первая

$$\omega = \sqrt{J^2 + 2JK(N_0 - N_2) \text{Cos}(p)}$$

(13.1)

положительно определена и задает область значений константы взаимодействия **К** относительно **Ж**. Эта зависимость изображена на рис.2д.

Зависимость

$$\omega = \omega_{13} (1 - \text{Cos}(p)) - h$$

всегда отрицательно определена, а значит, не может описывать возбуждения. А

$$\omega = h - \omega_{13} (1 - \text{Cos}(p))$$

(13.2)

напротив, определена только положительно (рис.2 е).

Особое внимание необходимо уделить четырем соотношениям:

$$\omega = \pm \left[ h - \omega_{13} \left( 1 - \frac{1}{2} \text{Cos}(p) \right) \pm \Omega(p) \right].$$

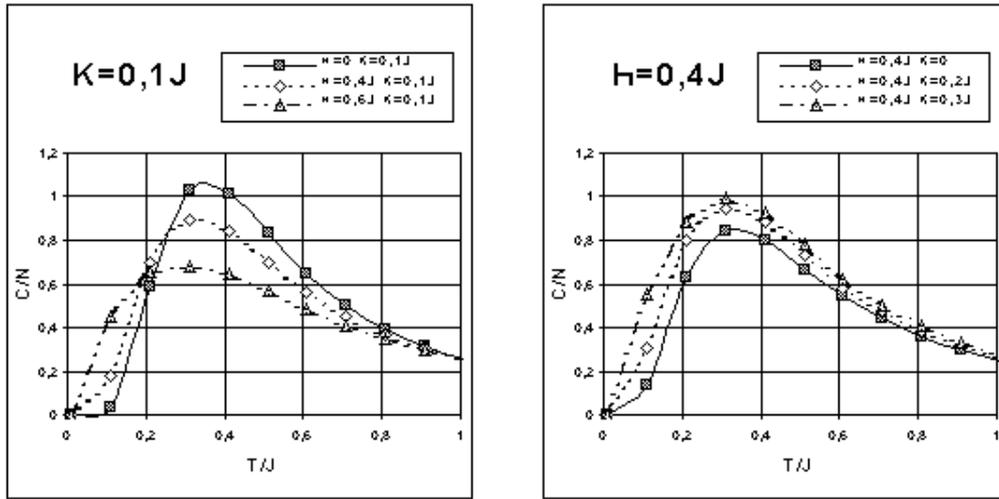


Рис.4. Зависимость теплоемкости от температуры

Как видно из решений уравнений самосогласования, при определенном значении магнитного поля происходит смена основного состояния системы. Это значение поля зависит от многих параметров, но самый весомый вклад дает параметр антиферромагнитного взаимодействия  $J$ . При  $h \sim J$  система переходит в магнитное состояние. Основываясь на этом, из рассматриваемых дисперсионных соотношений выделяем две пары, относящиеся к каждой из фаз. При  $h < J$  положительно определены формы (рис.3 ж и з)

$$\omega = \Omega(p) \pm \left[ h - \omega_{13} \left( 1 - \frac{1}{2} \text{Cos}(p) \right) \right] \quad (13.3)$$

При  $h > J$  положительно определенными считаются формы:

$$\omega = -\Omega(p) \pm \left[ h - \omega_{13} \left( 1 - \frac{1}{2} \text{Cos}(p) \right) \right], \quad (13.4)$$

что соответствует такой фазе системы, при которой основным является состояние  $|1\rangle$ , с направлением спиновых моментов по полю при  $T=0$ .

Как видно из рис. 2ж и з, при  $K=0$  энергетический спектр не зависит от квазиимпульса, что соответствует ансамблю невзаимодействующих бозонов. Увеличение параметра системы  $K$  приводит к изменению дисперсионных характеристик системы и сужению энергетической щели.

При сопоставлении рис. 2д и е видно, что законы дисперсии (13.1) и (13.2) совпадают. Этот результат был проверен численно, с точностью  $10^{-4}$ .

Энергетическая щель  $\Delta = \omega(\pi)$ . Из приведенных графиков видно, что с увеличением параметра системы  $K$  происходит снижение энергии триплетных состояний.

Энергия системы равна среднему значению гамильтониана. Гамильтониан удобно взять в виде (5). Среднее от операторов Хаббарда – числа заполнения, а среднее от произведения вычисляется по спектральной теореме. После всех преобразований для среднего значения гамильтониана получается относительно простое выражение, пригодное для численного счета.

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^3 E_n \langle x_i^{nn} \rangle + (N_0 - N_2) J \frac{1}{N} \sum_p \frac{\text{Ch} \frac{1}{2} \beta \omega(p)}{\omega(p)} + \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{n=0}^3 \Gamma_n \langle x_i^{nn} \rangle \right]^2 + \\ & + \frac{(2J + K(2N_0 - N_1 - N_3))(2N_0 - N_1 - N_3)}{2} \frac{1}{N} \sum_p \frac{\text{Sh} \beta \Omega(p)}{\left[ \text{Ch} \beta \Omega(p) - \text{Ch} \beta \omega(p) \left( 1 - \frac{1}{2} \text{Cos}(p) \right) \right] \Omega(p)} \quad (14) \end{aligned}$$

Производная по температуре от этого выражения и определит теплоемкость лестничной системы. Вычисление энергии и теплоемкости производится численно, с учетом уравнений на числа заполнения. Результаты расчетов приведены на рис. 4.

Автор выносит благодарность своему научному руководителю Валькову Валерию Владимировичу за наставления и помощь в выполнении работы.

#### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Motoyama N., Eisaki H., Uchida S., *Magnetic Susceptibility of Ideal Spin 1/2 Heisenberg Antiferromagnetic Chain System, Sr<sub>2</sub>CuO<sub>3</sub> and SrCuO<sub>2</sub>*, Phys. Rev. Lett., 1996, v.76, n.17, p.3212-3215.
2. Chaboussant G., Fadot-Revurat Y., Julien M.-H, et. al., *Nuclear Magnetic Resonance Study of the S=1/2 Heisenberg Ladder Cu<sub>2</sub>(C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>)Cl<sub>4</sub>: Quantum Phase Transition and Critical Dynamics*, Phys. Rev. Lett., 1998, v.80, n.12, p.2713-2716.
3. Matsuda M., *Ordering of oxygen moments in ferromagnetic edge-sharing CuO<sub>4</sub> chains in La<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Cu<sub>24</sub>O<sub>41</sub>*, Phys. Rev. B, 1998, v.57, n.18, p.11467-11471.
4. Тябликов С.В. *Методы квантовой теории магнетизма*. М.: Наука, 1975.