

Влияние анизотропии обменного взаимодействия на магнитные квантовые фазовые переходы в димеризованных антиферромагнетиках

Т.И. Ляшенко¹, В.М. Калита^{1,2}, В.М. Локтев^{1,3}

¹Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского»,
пр. Победы, 37, г. Киев, 03056, Украина

E-mail: vmkalita@ukr.net

²Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев, 03680, Украина

³Институт теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова НАН Украины,
ул. Метрологическая, 14 б, г. Киев, 03143, Украина

Статья поступила в редакцию 16 февраля 2017 г., после переработки 4 апреля 2017 г.,
опубликована онлайн 26 июня 2017 г.

Проведено теоретическое описание индуцированного внешним магнитным полем квантового фазового перехода в димеризованном антиферромагнетике. Показано, что описание такого фазового перехода можно провести, определив минимум функции Лагранжа, зависящей от параметров точной волновой функции основного состояния кристалла. Получено, что переход в кристалле из синглетного состояния димеров в состояние с неколлинеарной ориентацией спинов в димере происходит подобно фазовому переходу порядок–порядок. Показано, что в случае одноосного характера обменной анизотропии на положение критической точки рассматриваемого квантового перехода влияют также спин-спиновые взаимодействия внутри димера. При этом анизотропные одноосного типа спин-спиновые взаимодействия между димерами, как и в классических неелевских антиферромагнетиках, сдвигают только точку спин-флип перехода из неколлинеарной антиферромагнитной фазы в ферромагнитную фазу.

Проведено теоретичний опис індукованого зовнішнім магнітним полем квантового фазового переходу в димеризованому антиферомагнетику. Показано, що опис такого фазового переходу можна провести, визначивши мінімум функції Лагранжа, залежної від параметрів точної хвильової функції основного стану кристалла. Отримано, що перехід в кристалі з синглетного стану димерів в стан з неколінеарною орієнтацією спінів в димері відбувається подібно фазовому переходу порядок–порядок. Показано, що у випадку одновісного характеру обмінної анізотропії на положення критичної точки квантового фазового переходу, що розглядається, впливають також спин–спінові взаємодії в середині димера. При цьому анізотропні одновісного типу спин–спінові взаємодії між димерами, як і в класичних неєлівських антиферомагнетиках, зміщують тільки точку спин–фліп переходу з неколінеарної антиферомагнітної фази в феромагнітну фазу.

PACS: 75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовые фрустрации;
75.30.Kz Магнитные фазовые границы;
75.30.Gw Магнитная анизотропия;
75.40.Cx Статические свойства (параметр порядка, статическая восприимчивость, теплоемкость, критические экспоненты и т.д.);
75.45.+j Макроскопические квантовые явления в магнитном поле;
75.50.Ee Антиферромагнетики.

Ключевые слова: магнитные димеры, магнитные квантовые фазовые переходы, магнитная анизотропия, антиферромагнетики.

1. Введение

Магнитооптика, физика спиновых волн, магнитные фазовые переходы (ФП), поглощение и рассеяние света

в магнетиках, магнитоупругость и сверхпроводимость, рентгеноструктурный анализ и многие другие области экспериментальной физики твердого тела и низких

температур — вот те направления, в развитие которых внес признанный вклад один из крупнейших украинских физиков-экспериментаторов В.В. Еременко. Открытие и исследование промежуточного состояния в антиферромагнетиках [1–3], магнитного давидовского расщепления (см. [4]), ряда ориентационных магнитных ФП [5–7], наконец, проявления эффектов магнитоупругости в сверхпроводниках [8] — это лишь немного из того, что сделано юбиларом и вошло в золотой фонд отечественной и мировой физики. Поскольку ниже будет идти речь о магнитных ФП, следует отметить, что В.В. Еременко и его сотрудниками изучались такие ФП, в которых модуль намагниченности не менялся, а сама она рассматривалась как (квази)классическая величина. В то же время во многих магнитных системах разной природы это не так, и тогда подходы, где такой модуль не меняется, становятся неприменимыми и требуются квантово-механические расчеты. При этом соответствующие ФП получили название квантовых. Именно с такими переходами связано ниже следующее рассмотрение так называемых димеризованных магнетиков, которое мы посвящаем памяти Виктора Валентиновича Еременко.

В этой связи в настоящей работе ставится задача описания влияния анизотропного обмена на критические поля и намагничивание димеризованных антиферромагнетиков (АФМ) [9–11]. Для этого выбрана модель, в которой обменное взаимодействие (ОВ) не только анизотропно, но вследствие структуры кристалла для некоторых пар наиболее близко расположенных ионов существенно превышает ОВ для других (также трансляционно инвариантных) пар соседей [12,13]. Тогда система может быть смоделирована димеризованной структурой, когда исходным состоянием пары спинов димера является ненамагниченное синглетное состояние с полным спином, равным нулю [10]. При дальнейшем рассмотрении не предполагается каких-либо малостей того или иного параметра, кроме той, которая определяет возможность отнесения магнетика к димеризованному АФМ.

Согласно физике задачи, внешнее магнитное поле, начиная с некоторого критического, способно поляризовать спины димера [10]. Преобладающее АФМ взаимодействие внутри димера создает в нем условия, подобные неелевским АФМ. Однако намагничивание димеров, индуцируемое магнитным полем при $T = 0$, происходит путем магнитного квантового ФП (КФП) [14,15]. При возрастании величины поля в неколлинеарном АФМ состоянии возникает и увеличивается средняя намагниченность ионов в димерах, как в магнетиках с одноионной анизотропией, и спины все больше «скашиваются» к магнитному полю. В достаточно сильном поле в димерах происходит схлопывание спинов неколлинеарной АФМ фазы, которое также носит критический характер, как, например, спин-флип ФП в неелевских АФМ [10].

Подобные магнитные КФП между исходным синглетным и многоподрешеточным АФМ состояниями происходят и в ван-флековских АФМ с сильной одноионной анизотропией [16–19]. Однако в них магнитный КФП отвечает замене одной спиновой проекции на другую внутри заданного мультиплета [20], или, что то же самое, перестройке последовательности спиновых уровней последнего. В отличие от ван-флековских АФМ, магнитный КФП в димеризованных АФМ происходит иначе — с изменением мультиплетности: от состояния с исходным полным спином $S = 0$ в состояние с полным спином $S = 1$ [14,15], что делает такую задачу существенно отличной от рассматривавшихся ранее.

Необходимо заметить, что магнитные КФП, индуцированные магнитным полем при $T = 0$, в ван-флековских АФМ в [16–19], а также в димеризованных АФМ в работах [9–11] изучаются и, что особенно трудно оправдать, интерпретируются как бозе-энштейновская конденсация (БЭК) магнонов. Если формально математически в таком необычном подходе удастся получить некоторые значения критических полей, то из этого никак не следует, что физически в той или иной подобной системе действительно имеет место явление БЭК. По сути, для последнего необходимо наличие коллектива возбужденных (квази)частиц, которые не могут быть обусловлены стационарным магнитным полем. Кроме того, при магнитном КФП для случая $T = 0$ происходит (критическое) изменение только основного состояния системы. Так называемые элементарные возбуждения (магноны) «появляются» в описании лишь для некоторых специальных выбранных возбужденных состояний системы, или при выборе направления внешнего поля, не совпадающего с осью квантования. Тогда «старые» квазичастицы становятся несобственными для АФМ в поле. Тем самым конденсируются виртуальные, а не реальные магноны. Именно в этом смысле в подобных явлениях можно считать весьма условным сценарий БЭК перестройки исключительно основного состояния системы. Поэтому в работах [14,15] для описания магнитного КФП предложен альтернативный БЭК подход, который будет использоваться ниже, однако с некоторым методическим отличием. Описание проведено в более традиционном стиле — с помощью функции Лагранжа [21]. И хотя димеризованным АФМ посвящен ряд работ (например, [22–24]), применяемые в них подходы не позволяют рассматривать значения внешнего поля, далекие от критических.

Обычно для исследования магнитного КФП в димеризованных АФМ достаточно учесть только изотропные спин-спиновые взаимодействия как внутри димеров, так и между ними [14,15]. Однако димерная спиновая структура имеет выделенное направление, возникающее из особенностей атомной структуры димеризованных АФМ. Как отмечалось, каждый димер представляет собой пару близко расположенных друг к другу спинов,

которые относительно удалены от спинов других таких же димеров. Учитывая это обстоятельство и исходя из требований симметрии, описание таких АФМ должно для полноты учитывать и анизотропные обменные взаимодействия как внутри димера, так и между спинами соседних димеров.

Как известно [25], в теории ФП Ландау определение границ устойчивости фаз, критических полей ФП между ними, возможно благодаря тому, что эта теория дает как устойчивые, так и неустойчивые решения. В квантовой теории одной из проблем описания магнитных КФП является то, что решения, получаемые из уравнения Шредингера, всегда устойчивы. По этой причине для поиска критических полей и получения фазовых диаграмм при анализе магнитных ФП, происходящих при $T = 0$, часто используют спектры спиновых возбуждений [26,27], для расчета которых, как правило, применяется метод среднего поля.

Отметим, что, в отличие от классических неелевских АФМ, в индуцируемой полем АФМ фазе димеризованного АФМ изменение основного состояния ионов димера даже в низкотемпературной области при $T \rightarrow 0$ оказывается значительным: в области полей существования АФМ фазы параметры порядка — модули среднего спина ионов в димерах — изменяются от нуля до его максимальной величины. Это важно не только для описания АФМ фазы во всем интервале полей ее существования, но также следует учитывать при расчете энергий спиновых возбуждений. В работе [22,23] при описании основного состояния его энергия бралась приближенно — в качестве малого отклонения от некоторого значения и лишь вблизи точек критических полей. В работе [24] при описании КФП димеризованного АФМ использовались волновые функции, которые в представлении векторов полного спина димера отвечают более высокой симметрии, чем описываемая с их помощью индуцируемая магнитным полем АФМ фаза, что также вызывает возражения.

Подчеркнем, что мы поступаем иначе, и ниже для описания магнитных свойств димеризованного АФМ и магнитных КФП в нем расчет основного состояния будет опираться на функционал в виде функции Лагранжа. Этот функционал будет строиться как зависящий от коэффициентов волновой функции основного состояния, выбор которой осуществляется с учетом симметричных требований возникающей в магнитном поле спиновой конфигурации димеров.

В ван-флековских магнетиках проблема описания КФП, индуцированного магнитным полем, решалась путем перехода в собственную систему координат, направленную вдоль вектора средней намагниченности подрешетки, с дальнейшим обязательным использованием процедуры самосогласования [26], которая замыкала систему уравнений. Позже было показано [28,29], что задача такого согласования тождественна задаче

минимизации энергии основного состояния, что фактически приводит описание магнитных КФП к подобному в теории ФП Ландау. Заметим, что описание магнитных КФП путем минимизации энергии по коэффициентам волновой функции получило дальнейшее развитие и уже применено, например, в работе [30] для негеизенберговских магнетиков с биквадратичным и более высоким по степеням изотропными ОВ.

В работе [31] сделано некоторое обобщение: показано, что задача поиска основного состояния путем минимизации энергии сводится к теории Ландау, если при записи исходной волновой функции руководствоваться только требованиями симметрии. Однако оказалось, что имеется одно существенное обстоятельство, на которое не обращали внимание ни в этой, ни в упомянутых работах [28,29], — необходимость учета нормировки волновой функции. Как известно, в теории Ландау параметр(ы) порядка, по предположению, мал(ы). Если же вариационными являются коэффициенты волновой функции, то учет ее нормировки приводит к тому, что параметры порядка далеко не всегда малы, причем их модули могут изменяться от нуля до единицы, достигая предельных величин. Если, скажем, в одной критической точке происходит малое (но с особенностью) изменение какого-либо коэффициента волновой функции, то в следующей точке его величина может быть конечной. Таким же, критическим, образом будут изменяться другие коэффициенты или их комбинации.

Хорошо известно, что одним из путей поиска минимума функций при наложенных на их переменные условиях является метод неопределенных множителей Лагранжа. В нашем случае анализируется энергия системы с дополнительным слагаемым, превращающим ее в функцию Лагранжа. Такой подход по своей сути есть ни что иное, как метод Ритца, в котором в качестве пробных будут использоваться волновые функции, удовлетворяющие симметрии состояний системы [14]. Этот подход уже применялся для описания магнитных КФП первого рода [21]. В настоящей работе мы его применим для описания КФП второго рода в димеризованных АФМ, что составляет одну из целей работы.

Следует также заметить, что при описании магнитных КФП в димеризованном АФМ его основное состояние будет определяться из минимума функции Лагранжа по коэффициентам волновой функции, причем для всего интервала полей существования АФМ фазы. Несмотря на конечные и немалые величины средних, будет показано, что такой подход естественным образом сводится к теории ФП Ландау. Так, на ее основе удастся проанализировать особенности КФП, в том числе изучить поведение АФМ фазы во всей области полей ее существования.

Отметим еще одну особенность димеризованных АФМ, связанную с их симметрией и выбором волновой функции основного состояния. Для получения

средних величин спинов ионов в димере используются векторы состояний в спиновом представлении, а для описания вклада в энергию от взаимодействия спинов в димере удобно использовать векторы состояний, записанные через полный спин димера. В первом случае симметрия волновой функции определяется направлениями векторов средних спинов магнитных ионов димера, а во втором этого нет, поскольку у димера есть только один вектор его полного спина. Поэтому понижение симметрии в АФМ состоянии с неколлинеарными векторами средних спинов ионов димера в представлении полного спина димера, как будет показано, характеризуется так называемыми компонентами среднего квадрупольного момента, используемыми в теории ван-флековских магнетиков и магнетиках с сильной одноионной анизотропией [26].

2. Модель

Рассмотрим систему, приведенную на рис. 1, в которой каждый из ионов (атомов), составляющих димер, обладает спином, причем взаимодействие между этими спинами носит АФМ характер [9–11]. При этом ионы соседних димеров также взаимодействуют антиферромагнитно, но соответствующее ОВ слабее внутреннего обмена [12,13]. Это означает, что для системы димеров на рис. 1 реализуется многоподрешеточная спиновая структура, включающая четыре спина двух соседних димеров [9]. Гамильтониан такой структуры может быть записан в виде

$$H = J_{\text{dim}} \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_{\mathbf{n},1} \mathbf{S}_{\mathbf{n},2} + I_{\text{dim}}^{\parallel} \sum_{n_{\alpha}} S_{\mathbf{n},1}^Z S_{\mathbf{n},2}^Z +$$

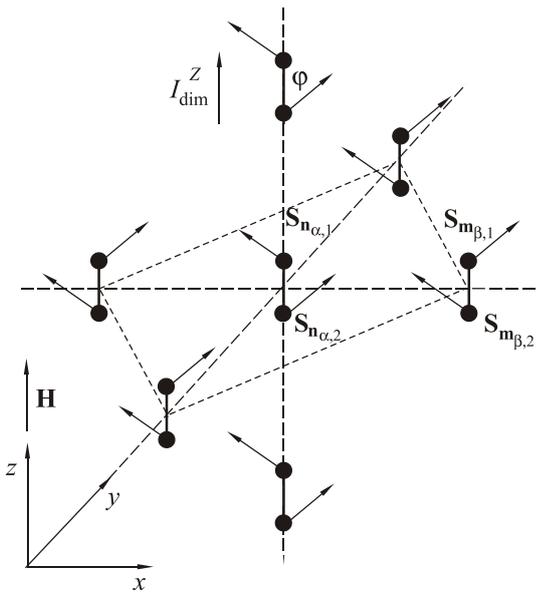


Рис. 1. Спиновая конфигурация димеров в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel Z$. Угол скоса спинов к оси Z обозначен φ .

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} [J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} (\mathbf{S}_{\mathbf{n},1} \mathbf{S}_{\mathbf{m},1} + \mathbf{S}_{\mathbf{n},2} \mathbf{S}_{\mathbf{m},2}) + J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} \mathbf{S}_{\mathbf{n},1} \mathbf{S}_{\mathbf{m},2}] +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} [i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} (S_{\mathbf{n},1}^Z S_{\mathbf{m},1}^Z + S_{\mathbf{n},2}^Z S_{\mathbf{m},2}^Z) + i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} S_{\mathbf{n},1}^Z S_{\mathbf{m},2}^Z], \quad (1)$$

где \mathbf{n} и \mathbf{m} — векторы позиций димеров, индексы 1, 2 — номера их спинов, величина которых $S = 1/2$, $J_{\text{dim}} > 0$ — константа изотропного АФМ ОВ между спинами внутри димера, $I_{\text{dim}}^{\parallel}$ — константа анизотропного ОВ между спинами в димере, которая отвечает симметрии димера легкоосного типа при его повороте вокруг оси Z , $J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} = J_{\mathbf{n},2;\mathbf{m},2}^{\perp} > 0$, $J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} = J_{\mathbf{n},2;\mathbf{m},1}^{\parallel} > 0$ — константы изотропных обменных взаимодействий между спинами соседних димеров в плоскости XY и в направлении оси Z соответственно, $i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} = i_{\mathbf{n},2;\mathbf{m},2}^{\perp}$, $i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} = i_{\mathbf{n},2;\mathbf{m},1}^{\parallel}$ — константы анизотропии ОВ между соседними спинами из разных димеров в плоскости XY и в направлении оси Z соответственно. Предполагается, что константа J_{dim} превосходит все остальные константы, так что в исходном состоянии в отсутствие магнитного поля димер оказывается немагнитным и средние величины проекций спинов ионов димера равны нулю [9–11].

В магнитном поле $\mathbf{H} \parallel Z$ значения средних проекций спинов соседних в плоскости XY димеров удовлетворяют равенствам [14,15]

$$s_{\mathbf{n},1}^Z = s_{\mathbf{n},2}^Z = s_{\mathbf{m},1}^Z = s_{\mathbf{m},2}^Z = s^Z,$$

$$-s_{\mathbf{n},1}^X = s_{\mathbf{n},2}^X = s_{\mathbf{m},1}^X = -s_{\mathbf{m},2}^X = s^X. \quad (2)$$

Для конфигурации спинов (2) одночастичный гамильтониан включает только два спина димера и может быть сведен к форме

$$H_{\text{dim}} = J_{\text{dim}} \mathbf{S}_{\mathbf{n},1} \mathbf{S}_{\mathbf{n},2} + I_{\text{dim}}^{\parallel} S_{\mathbf{n},1}^Z S_{\mathbf{n},2}^Z +$$

$$+ h^{\perp} (S_{\mathbf{n},1}^X - S_{\mathbf{n},2}^X) - (H + h^{\parallel}) (S_{\mathbf{n},1}^Z + S_{\mathbf{n},2}^Z), \quad (3)$$

где h^{\perp} — проекция обменного поля на плоскость XY , величина которой пропорциональна проекции на плоскость XY среднего спина иона димера $h^{\perp} = J s^X$ с коэффициентом пропорциональности $J = J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} z_{\perp} + J_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} z_{\parallel}$, где z_{\perp} , z_{\parallel} — числа ближайших соседей в плоскости XY и вдоль оси Z соответственно; h^{\parallel} — проекция обменного поля на ось Z , причем $h^{\parallel} = -(J + I^{\parallel}) s^Z$, константа в котором включает параметр анизотропного ОВ $I^{\parallel} = i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},1}^{\perp} z_{\perp} + i_{\mathbf{n},1;\mathbf{m},2}^{\parallel} z_{\parallel}$.

Собственные функции оператора двух спинов определяются полным спиновым моментом S , а также величинами его проекций M_S и могут быть представлены в виде $\Psi_{SM_S} = |S, M_S\rangle$, или явно:

$$\Psi_{11} = |1,1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \Psi_{10} = |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right),$$

$$\Psi_{1\bar{1}} = |1,-1\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (4)$$

для триплетного и

$$\Psi_{00} = |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (5)$$

для синглетного состояний.

Используя выражения (4) и (5), можно рассчитать матричные элементы оператора (3). Проведя необходимые расчеты [7], легко получить, что функция основного состояния оператора (3) может быть записана суммой

$$\Psi_{gr} = \sum_{S, M_S} C_{SM_S} \Psi_{SM_S} = C_{11} \Psi_{11} + C_{1\bar{1}} \Psi_{1\bar{1}} + C_{00} \Psi_{00} \quad (6)$$

($\bar{1} \equiv -1$)

с $C_{10} = 0$. При этом входящие в (6) коэффициенты должны удовлетворять очевидному условию нормировки:

$$|C_{11}|^2 + |C_{1\bar{1}}|^2 + |C_{00}|^2 = 1. \quad (7)$$

Используя выражение (6), рассчитаем средние значения проекций спинов димера, величины которых преобразуют вид

$$s^Z = \frac{1}{2} (|C_{11}|^2 - |C_{1\bar{1}}|^2), \quad s^X = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{00} (C_{1\bar{1}} - C_{11}), \quad (8)$$

где учтено, что для конфигурации, показанной на рис. 1, величины средних проекций спина ионов димера равны $s^Y = 0$ и коэффициенты C_{SM_S} в (6) вещественны. Таким образом, задача нахождения основного состояния содержит только три (а не шесть, как в [22,23]) параметра, связанных между собой условием (7).

Выпишем теперь величины для среднего полного спина димера, а также моментов второго порядка:

$$M^Z = |C_{11}|^2 - |C_{1\bar{1}}|^2, \quad M^X = M^Y = 0,$$

$$M_Z^2 = |C_{11}|^2 + |C_{1\bar{1}}|^2, \quad M_X^2 - M_Y^2 = 2C_{11}C_{1\bar{1}}. \quad (9)$$

Из выражений (8) следует, что если $C_{1\bar{1}} = 0$, то величины средних проекций s^X спинов ионов в димере могут быть не равны нулю. Однако видно (см. (9)), что при $C_{1\bar{1}} = 0$ в представлении полного спина димера разность $M_X^2 - M_Y^2 = 0$ и тем самым волновая функция димера имеет такую же симметрию, как и у предельно намагниченного (ферромагнитного (ФМ)) состояния, когда $|C_{11}| = 1$. Это свидетельствует, что используемое в

работе [24] выражение для волновой функции димера, в котором положено $C_{1\bar{1}} = 0$, строго говоря, не удовлетворяет симметрии скошенной АФМ фазы.

С помощью соотношений (6) и (8) можно получить выражение для энергии основного состояния системы димеров как функции коэффициентов C_{SM_S} .

3. Энергия и основное состояние димеров

Для рассматриваемой конфигурации (см. рис. 1) энергия основного состояния системы в приближении самосогласованного поля в расчете на один димер может быть записана как

$$E_{gr} = J_{dim} \langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle + I_{dim}^{\parallel} \langle S_1^Z S_2^Z \rangle + Js^2 + I^{\parallel} (s^Z)^2 - 2Hs^Z, \quad (10)$$

где $\langle \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \rangle$, $\langle S_1^Z S_2^Z \rangle$ — средние от скалярного произведения спинов димера и произведения Z -проекции операторов спинов димера, рассчитанные по волновым функциям (6). По виду энергия (10) подобна энергии основного состояния ван-Флекковских АФМ, в которой первыми двумя «одночастичными» вкладками в правой части (10) являются средние величины энергии одноионной анизотропии [28,29].

Используя представление (6) для волновых функций и выражения (8) для средних величин проекций спинов димера, найдем, что энергия основного состояния будет функционалом от коэффициентов C_{SM_S} . Напомним, что спиновая конфигурация основного состояния отвечает минимуму энергии (10) по величинам C_{SM_S} с учетом условия (7). Таким образом, для определения явного вида собственной функции этого состояния требуется рассмотреть выражение

$$L = C_{11}^2 \left(\frac{1}{4} J_{dim} + \frac{1}{4} I_{dim}^{\parallel} - H \right) + C_{1\bar{1}}^2 \left(\frac{1}{4} J_{dim} + \frac{1}{4} I_{dim}^{\parallel} + H \right) + C_{00}^2 \left(-\frac{3}{4} J_{dim} - \frac{1}{4} I_{dim}^{\parallel} \right) + \frac{1}{2} (J + I^{\parallel}) (C_{11}^2 - C_{1\bar{1}}^2)^2 - J C_{00}^2 (C_{1\bar{1}} - C_{11})^2 + \lambda (C_{11}^2 + C_{1\bar{1}}^2 + C_{00}^2 - 1), \quad (11)$$

в котором параметр λ — множитель Лагранжа.

Спиновые конфигурации находятся из системы уравнений $\partial L / \partial C_{11} = 0$, $\partial L / \partial C_{1\bar{1}} = 0$, $\partial L / \partial C_{00} = 0$, а критические поля устойчивости — из гессиана для L . Тогда выражение для критического поля устойчивости синглетной фазы, в которой $C_{00} = 1$, имеет вид

$$H_{cr}^{(1)} = \left(J_{dim} + \frac{I_{dim}^{\parallel}}{2} \right) \sqrt{1 - \frac{2J}{J_{dim} + \frac{I_{dim}^{\parallel}}{2}}}. \quad (12)$$

В этом выражении учтено, что константа изотропного ОВ внутри димера превосходит все остальные константы и выполняется условие $J_{dim} + I_{dim}^{\parallel} / 2 > 2J$, т.е. корень всегда вещественный. Величина критического поля (12)

при ФП второго рода совпадает с полученной в [22], что неудивительно, так как определение величин критических полей для такого типа ФП не требует учета более высокой нелинейности в минимизируемом потенциале.

Как видно из (11), анизотропия ОВ внутри димера легкоосного типа ($I_{\text{dim}}^{\parallel} > 0$) должна, казалось бы, способствовать возникновению АФМ, но на самом деле только увеличивает величину поля перехода из немагнитного (синглетного) состояния димера с функцией ψ_{00} в состояние с неколлинеарной АФМ структурой, как на рис. 1.

Если в (6) параметр $|C_{11}| = 1$, то система находится в ФМ состоянии с предельным спином димера. Используя (10), можно показать, что величина критического поля появления ФМ фазы равна

$$H_{\text{cr}}^{(2)} = J_{\text{dim}} + 2J + \frac{1}{2}J_{\text{dim}}^{\parallel} + I^{\parallel}. \quad (13)$$

Поле $H_{\text{cr}}^{(2)}$ соответствует спин-флип переходу из неколлинеарной АФМ структуры (см. рис. 1) в ФМ состояние. Как видно из (13), анизотропный обмен между спинами разных димеров оказывает влияние на критическое поле формирования коллинеарной фазы, увеличивая его при легкоосевом типе анизотропных ОВ между спинами из разных димеров, что согласуется с поведением классических неелевских АФМ. В связи с этим в этой критической точке, как следует из выражений (8), следует ожидать критического поведения параметра C_{00} . Отметим, что в [22,23] рассматривалась анизотропия только внутри димеров, а в [24] — только изотропные ОВ.

Анализируя поведение энергии основного состояния, можно убедиться, что критические поля устойчивости неколлинеарной фазы также равны $H_{\text{cr}}^{(1)}$ и $H_{\text{cr}}^{(2)}$. Другими словами, между синглетной и неколлинеарной фазами и между неколлинеарной и ФМ фазами происходят ФП второго рода, индуцируемые внешним магнитным полем.

Представляется интересным показать положение минимумов энергии основного состояния в пространстве параметров волновой функции (6) при изменении магнитного поля. На рис. 2 приведен профиль энергии основного состояния системы $E_{\text{gr}}(C_{11}, C_{1\bar{1}})$, полученный для разных величин магнитного поля. Положение минимума энергии $E_{\text{gr}}(C_{11}, C_{1\bar{1}})$ на рис. 2 показано точкой. Когда поле $H < H_{\text{cr}}^{(1)}$, минимум находится в центре и ему отвечает синглетное состояние димера с $C_{11} = C_{1\bar{1}} = 0$ и $|C_{00}| = 1$ (рис. 2(a)). Когда поле лежит в интервале $H_{\text{cr}}^{(1)} < H < H_{\text{cr}}^{(2)}$, точка минимума $E_{\text{gr}}(C_{11}, C_{1\bar{1}})$ движется непрерывно по кривой (рис. 2(б)) от центра к точке $C_{00} = C_{1\bar{1}} = 0$ и $C_{11} = 1$ (или $C_{11} = -1$), которую достигает в поле $H = H_{\text{cr}}^{(2)}$ (рис. 2(в)). При $H > H_{\text{cr}}^{(2)}$ минимум остается в точке $C_{00} = C_{1\bar{1}} = 0$ и $|C_{11}| = 1$. Такое представление КФП подобно теории Ландау для ФП второго рода.

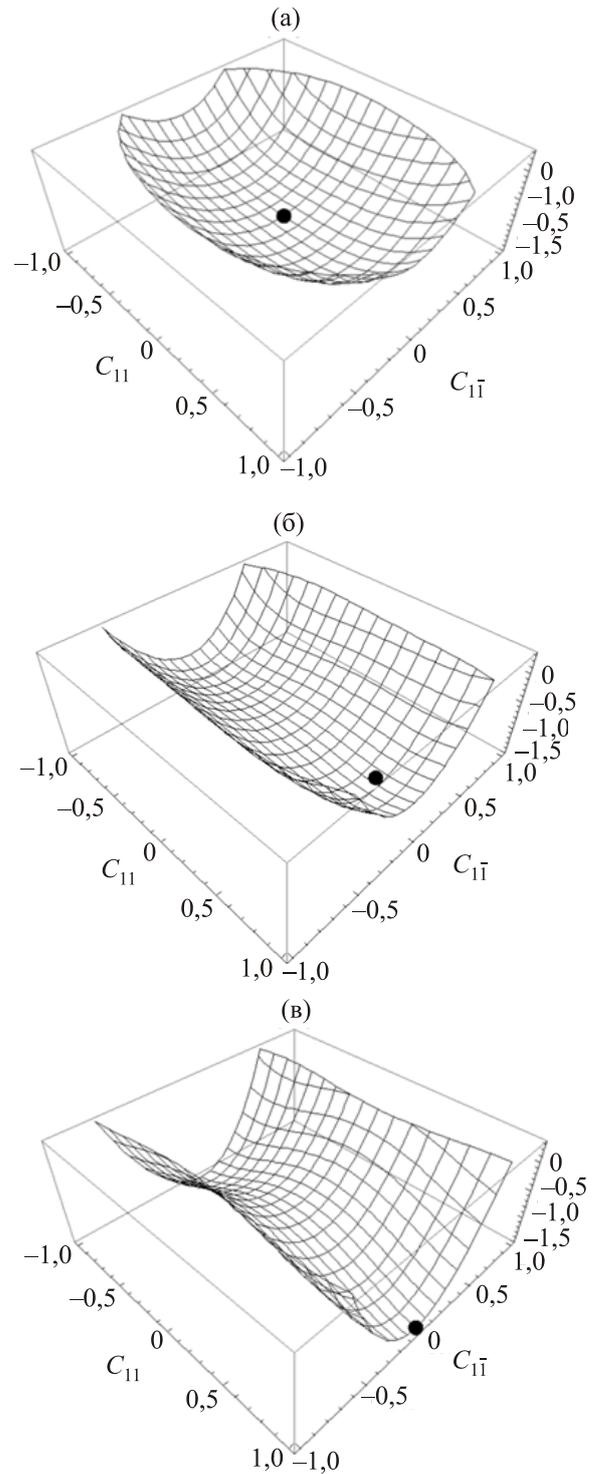


Рис. 2. Профили энергии $E_{\text{gr}}(C_{11}, C_{1\bar{1}})$, рассчитанные для набора параметров $J/J_{\text{dim}} = 0,3$; $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,1$; $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,2$ при разных значениях поля H/J_{dim} : 0,6 (а), 1,3 (б), 2,0 (с). Критические поля $H_{\text{cr}}^{(1)} = 0,742J_{\text{dim}}$, $H_{\text{cr}}^{(2)} = 1,8J_{\text{dim}}$.

4. Намагничивание димеров

Намагничивание димеров и изменение спиновой конфигурации в основном состоянии при изменении магнитного поля связано с изменением величин параметров волновой функции в (6). На рис. 3 показаны

полевые зависимости коэффициентов C_{11} , $C_{1\bar{1}}$, C_{00} , рассчитанные для параметров модели $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,1$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,2$. Как видно, все коэффициенты C_{11} , $C_{1\bar{1}}$, C_{00} изменяются непрерывно, испытывая изменения в критических полях: при $H = H_{\text{cr}}^{(1)}$ такое изменение испытывает коэффициент C_{11} , а в точке $H = H_{\text{cr}}^{(2)}$ — коэффициент $C_{00} = 0$. Величина же $C_{1\bar{1}}$ оказывается малой и не равна нулю только в области существования скошенной АФМ фазы.

Имея полевые зависимости коэффициентов C_{11} , $C_{1\bar{1}}$, C_{00} , с помощью выражений (8) можно рассчитать и средние величины проекций магнитного иона димера. На рис. 4 показан ход полевых зависимостей $s^Z(H)$ и $s^X(H)$, полученных при тех же величинах параметров модели, как и на рис. 3. Видно, что критическим образом в точке $H_{\text{cr}}^{(1)}$ ведет себя поперечная к полю составляющая средней намагниченности магнитного момента иона димера. На этом же рисунке показан ход производной $\chi^Z = ds^Z/dH$, которая, как видно, в синглетной фазе равна нулю, а в неколлинеарной фазе изменяется незначительно и ведет себя подобно магнитной восприимчивости неелевских АФМ. Слабая нелинейность $\chi^Z(H)$ вызвана «примешиванием» к исходному синглетному состоянию Ψ_{00} состояния, которое описывается волновой функцией $\Psi_{1\bar{1}}$.

Графики для средних проекций спинов $s^Z(H)$ и $s^X(H)$ ионов димера на рис. 4 качественно совпадают с приведенными в [24] (заметим, что величина s^X определена с точностью до знака). Однако следует иметь в виду, что в [24] положено $C_{1\bar{1}} = 0$. Выше решена точная задача и при получении кривых рис. 4 учитывалось, что в неколлинеарной фазе $C_{1\bar{1}} \neq 0$. И хотя величина $C_{1\bar{1}}$ может быть мала, этим коэффициентом при записи волновой функции пренебрегать нельзя. Как уже отмечалось, его игнорирование делает симметрию волновой функции (в представлении векторов состоя-

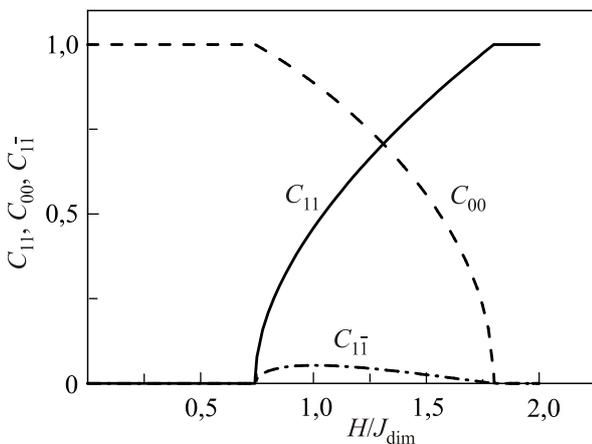


Рис. 3. Полевые зависимости коэффициентов C_{11} , $C_{1\bar{1}}$, C_{00} волновой функции основного состояния, рассчитанные для отношений $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,1$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,2$.

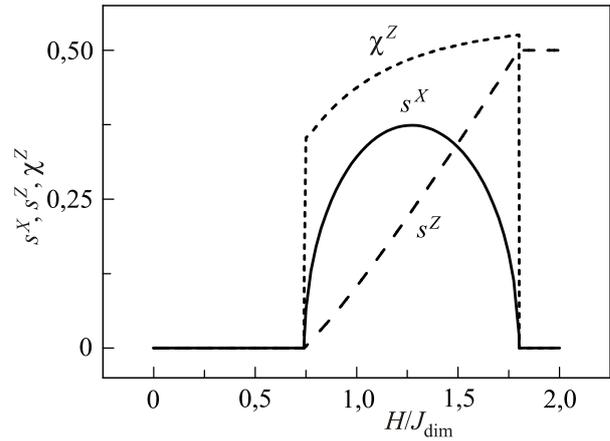


Рис. 4. Полевые зависимости величин проекций $s^Z(H)$ и $s^X(H)$ среднего спина магнитного иона димера и восприимчивости $\chi^Z = ds^Z/dH$, рассчитанные при $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,1$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,2$.

ний полного спина димера) АФМ состояния более высокой, как у ФМ состояния в магнитном поле.

Чтобы проиллюстрировать влияние величин констант анизотропии на намагничивание димеров, на рис. 5 показан ход полевой зависимости модуля среднего спина $s = \sqrt{(s^X)^2 + (s^Z)^2}$ иона одного димера при разных соотношениях констант модели. Кривой 2 обозначена зависимость $s(H)$, когда анизотропные слагаемые отсутствуют, а кривым 1 и 3 отвечают случаи для разных знаков констант анизотропии. Изменение модуля среднего спина ионов в димерах во всей области существования АФМ фазы подобно наблюдаемому в ван-Флековских магнетиках [26,28,29].

Положительная константа анизотропии ОВ внутри димеров увеличивает критическое поле $H_{\text{cr}}^{(1)}$, и кривая с

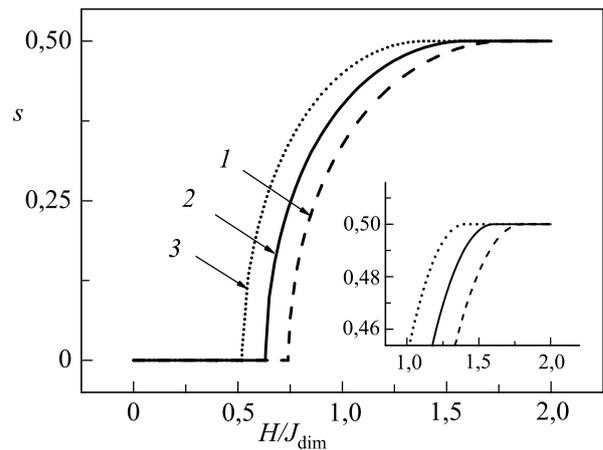


Рис. 5. Полевые зависимости модуля $s(H)$ спина иона димера для разных величин параметров: кривая 1 построена для $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,1$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0,2$; кривая 2 — $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = 0$; кривая 3 — $J/J_{\text{dim}} = 0,3$, $I^{\parallel}/J_{\text{dim}} = -0,1$, $I_{\text{dim}}^{\parallel}/J_{\text{dim}} = -0,2$. На вставке показано поведение $s(H)$ вблизи точки $H_{\text{cr}}^{(1)}$.

положительными значениями параметров анизотропно-го ОВ на рис. 5 лежит правее кривой, полученной для изотропного случая. Кривая с отрицательными величинами анизотропных ОВ лежит левее кривой 2 для изотропного димеризованного АФМ. Отрицательные величины констант анизотропии означают изменение характера межспинового взаимодействия. При отрицательных величинах констант анизотропии их следует рассматривать как легкоосные ФМ типа добавки в гамма-ионит (1). В результате приходим к заключению, что ФМ анизотропное ОВ внутри димера уменьшает величину критического поля $H_{cr}^{(1)}$.

Как видно на рис. 5, модуль среднего спина иона димера в неколлинеарной фазе изменяется от нуля до его максимального значения $1/2$ при переходе в ФМ состояние в точке $H_{cr}^{(2)}$. Поведение неколлинеарной фазы с почти предельной величиной модулей спинов вблизи поля $H_{cr}^{(2)}$ похоже на спин-флип переход в неелевских АФМ, поэтому этот переход естественно отнести к ориентационному ФП.

На вставке на рис. 5 показана полевая зависимость модуля среднего спина иона димера вблизи $H_{cr}^{(2)}$. Видно, что производная $(ds/dH)_{H_{cr}^{(1)}}$ этой зависимости в критической точке магнитного КФП испытывает особенность, подобную особенностям величины параметра порядка при фазовых переходах второго рода порядок–порядок в теории Ландау.

Заключение

С помощью функции Лагранжа описано намагничивание димеризованного АФМ с учетом анизотропии ОВ как внутри димеров, так и между ними. Оказалось, что, подобно ван-флековским АФМ, симметрия состояний в димеризованных АФМ при использовании волновых функций в представлении полного спина димера определяется вектором среднего спина димера и компонентами его квадрупольного момента. Показано, что в точке перехода к АФМ состоянию и в точке перехода к ФМ состоянию критическое поведение АФМ фазы связано с критическим поведением разных коэффициентов волновой функции.

В результате проведенных расчетов также было выяснено, что критическое поведение димеров с АФМ ОВ между их спинами зависит от величин и изотропного, и анизотропного ОВ. При этом величина критического поля в случае магнитной анизотропии осевого типа зависит только от констант ОВ внутри димера. Если анизотропный обмен внутри димера является легкоосным и имеет АФМ характер, то величина критического поля ФП в неколлинеарную АФМ фазу возрастает. В случае легкоосевой анизотропии для ОВ внутри димера ФМ типа величина этого критического поля уменьшается. Анизотропные ОВ между разными димерами, которые не учитывались в [22,23], для ука-

занных типов осевой анизотропии проявляют себя только при ФП спин-флип типа, как и у неелевских АФМ. При этом сведение расчета к исследованию функции Лагранжа позволяет рассмотрение даже квантовых явлений, включая КФП, осуществлять в рамках стандартного подхода, аналогичного теории ФП Ландау, несмотря на то, что параметры магнитного порядка (средние величины спинов ионов) изменяются от нуля до их максимальных значений. Таким образом, экспериментальное изучение димеризованных магнетиков может проводиться с использованием привычных методик.

Хотели бы выразить признательность А.С. Ковалеву за обсуждение работы и полезные замечания. Работа В.М.Л. частично поддержана Целевой программой фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии НАН Украины.

1. К.Л. Дудко, В.В. Еременко, В.М. Фридман, *ЖЭТФ* **61**, 678 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **34**, 362 (1972)].
2. К.Л. Дудко, В.В. Еременко, В.М. Фридман, *ЖЭТФ* **61**, 1553 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **34**, 828 (1972)].
3. А.А. Мильнер, Ю.А. Попков, В.В. Еременко, *Письма в ЖЭТФ* **18**, 39 (1973) [*JETP Lett.* **18**, 20 (1973)].
4. В.В. Еременко, *Введение в оптическую спектроскопию магнетиков*, Наукова думка, Киев (1975).
5. K.L. Dudko, V.V. Eremenko, and L.M. Semenenko, *Phys. Lett. A* **30**, 459 (1969).
6. К.Л. Дудко, В.В. Еременко, В.М. Фридман, *ЖЭТФ* **68**, 2315 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **41**, 1157 (1975)].
7. V.V. Eremenko, V.V. Shapiro, I.S. Kochur, and V.G. Piryatinskaya, *Phase Trans.* **38**, 33 (1992).
8. I.O. Troyanchuk, V.A. Khomchenko, G.M. Chobot, A.I. Kurbanov, A.N. Vasil'ev, V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, M.Yu. Shvedun, H. Shimchak, and R. Shimchak, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 8865 (2003).
9. K. Kodama, M. Takigawa, M. Horvatic, C. Berthier, H. Kageyama, Y. Ueda, S. Miyahara, F. Becca, and F. Mila, *Science* **298**, 395 (2002).
10. T. Giamarchi, C. Rüegg, and O. Tchernyshyov, *Nature Phys.* **4**, 198 (2008).
11. A. Oosawa, M. Ishii, and H. Tanaka, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 265 (1999).
12. B. Leuenberger, A. Stebler, and H.U. Gudel, *Phys. Rev. B* **30**, 6300 (1984).
13. Tetsuya Kato, Ken-ichi Takatsu, Hidekazu Tanaka, Wakako Shiramura, Masahiro Mori, Kenji Nakajima, and Kazuhisa Kakurai, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 752 (1998).
14. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *JETP Lett.* **91**, 183 (2010).
15. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФHT* **36**, 838 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 665 (2010)].
16. S.A. Zvyagin, J. Wosnitzer, C.D. Batista, M. Tsukamoto, N. Kawashima, J. Krzystek, V.S. Zapf, M. Jaime, Jr., N.F. Oliveira, and A. Paduan-Filho, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 047205 (2007).

17. V. Zapf, M. Jaime, and C.D. Batista, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 563 (2014).
18. X.F. Sun, W. Tao, X.M. Wang, and C. Fan, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 167202 (2009).
19. A.V. Sizanov and A.V. Syromyatnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 146002 (2011).
20. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *JETP Lett.* **93**, 592 (2011).
21. G.Yu. Lavanov, V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, *J. Magn. Magn. Mater.* **416**, 466 (2016).
22. A. Zheludev, S.M. Shapiro, Z. Honda, K. Katsumata, B. Grenier, E. Ressouche, L.-P. Regnault, Y. Chen, P. Vorderwisch, H.-J. Mikeska, and A.K. Kolezhuk, *Phys. Rev. B* **69**, 054414 (2004).
23. A.K. Kolezhuk, V.N. Glazkov, H. Tanaka, and A. Oosawa, *Phys. Rev. B* **70**, 020403(R) (2004).
24. M. Matsumoto, B. Normand, T.M. Rice, and M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2002).
25. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Часть 1, Наука, Москва (1976).
26. В.М. Локтев, В.С. Островский, *ФHT* **20**, 983 (1994) [*Low Temp. Phys.* **20**, 775 (1994)].
27. Е.Г. Галкина, Б.А. Иванов, О.А. Космачев, Ю.А. Фридман, *ФHT* **41**, 490 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 382 (2015)].
28. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *J. Exp. Theor. Phys.* **98**, 1006 (2004).
29. V.M. Kalita, I.Ivanova, and V.M. Loktev, *Phys. Rev. B* **78**, 104415 (2004).
30. О.А. Космачев, Ю.А. Фридман, Б.А. Иванов, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 444 (2017).
31. V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, *Theor. Math. Phys.* **173**, 1620 (2012).

Effect of the exchange interaction anisotropy on the magnetic quantum phase transitions in dimerized antiferromagnets

T.I. Lyashenko, V.M. Kalita, and V.M. Loktev

A theoretical description of the induced by magnetic field the quantum phase transition in a dimerized antiferromagnet is carried out. It is shown such a description can be done by the founding of the Lagrange function minimum, which depends on the parameters of the ground-state wave function of the crystal. It was found that the transition from the initial dimer singlet state in the state with non-collinear spin orientations in a crystal takes place and is like to a phase transition of the order-order type. It is also shown that in the case of uniaxial anisotropy the position of the quantum transition critical point is affected by the dimer internal spin-spin interactions. Wherein anisotropic spin-spin interactions between the dimers, as in the case of classic Néel antiferromagnets, shift only the spin-flip transition point from the non-collinear antiferromagnetic phase to the ferromagnetic one.

PACS: 75.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration;
 75.30.Kz Magnetic phase boundaries;
 75.30.Gw Magnetic anisotropy;
 75.40.Cx Static properties (order parameter, static susceptibility, heat capacities, critical exponents, etc.);
 75.45.+j Macroscopic quantum phenomena in magnetic systems;
 75.50.Ee Antiferromagnetics.

Keywords: magnetic dimers, magnetic quantum phase transition, magnetic anisotropy, antiferromagnetics.