

PACS: 75.10.Jm, 75.30.Gw, 75.40.Mg

А.В. Журавлев, И.М. Крыгин

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ЛИНЕЙНЫХ СПИНОВЫХ ЦЕПОЧЕК С МАГНИТОДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

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

Статья поступила в редакцию 12 марта 2010 года

*Исследовано влияние магнитного диполь-дипольного взаимодействия (МДДВ) на эволюцию системы энергетических уровней, имеющую общие особенности для всех основных типов анизотропии обменных взаимодействий: изотропной, планарной и предельно анизотропной (изинговской) линейных цепочек спинов  $S = 1/2$ . В планарном случае обнаружена высокая чувствительность к взаимодействиям следующих за ближайшими и более отдаленных соседей, в отличие от изотропной и изинговской систем. Получены критические значения коэффициента магнитодипольного взаимодействия, при которых происходит переход из состояния с нулевым в состояние с максимальным усредненным значением спинового момента (переход низкий спин–высокий спин) для каждого из исследованных типов анизотропии. Показано, что величина расщепления уровней линейно связана с напряженностью магнитного поля и не зависит ни от диполь-дипольного взаимодействия, ни от типа анизотропии спиновой цепочки.*

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

### 1. Введение

Одномерные системы, которые исследуются более 70 лет [1], до сих пор позволяют обнаруживать новые фундаментальные свойства и эффекты. Радикальное отличие свойств цепочек с цело- и нецелочисленным спином установил Ф.Д.М. Халдейн [2,3]. Щель, разделяющая основное и возбужденные состояния (щель Халдейна), конечна для однородных бесконечных цепочек с целочисленным спином и отсутствует в случае нецелочисленного. Для последних реализуется специфическое состояние, когда в отсутствие дальнего порядка в бесконечной однородной одномерной  $S = 1/2$  системе магнитная корреляционная длина оказывается бесконечной. Температура абсолютного нуля является изолированной критической точкой такой системы [4,5]. Для однородной цепи спинов  $S = 1$  щель при основном состоянии пропорциональна константе обменного взаимодействия, а длина спин-спиновой корреляции оказывается око-

ло семи межспиновых расстояний. Халдейновская щель наблюдалась экспериментально в ряде металлоорганических и оксидных соединений с  $S = 1$  [4,6–10]. Цепочки с целочисленным спином устойчивы к возмущениям (внешним воздействиям [11], примесям [4,12] и нарушениям однородности расположения магнитных ионов [13,14]), с нецелочисленным – неустойчивы.

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие в теоретических исследованиях чаще всего не учитывается либо учитывается в виде поправок в обменном приближении. Тем не менее МДДВ в системах, находящихся вблизи индуцированного давлением перехода между состояниями с ферро- и антиферромагнитными порядками, может не только быть соизмеримым с обменным взаимодействием, но и превышать его [15,16]. Учет магнитодипольного взаимодействия актуален также для магнитных систем переменного состава [17,18], в которых наблюдается изменение знака обменного интеграла.

Точные численные методы исследования основного состояния и спектра возбуждений ограниченных спиновых цепочек до настоящего времени используются для подтверждения точности или надежности теоретических моделей [6,19–21]. Исследования с применением точной (прямой) диагонализации обладают универсальностью по отношению к виду учитываемых взаимодействий и соотношению их констант.

В предыдущей работе [22] показано, что под воздействием МДДВ энергетический спектр цепочки  $N$  ионов трансформируется для всех рассмотренных типов линейной спиновой цепочки (для изотропного, изинговского и двух промежуточных случаев). При этом полный интервал энергий спектра растет, а энергия уровня с максимальной усредненной проекцией спина на ось  $OZ$  уменьшается быстрее, чем для прочих уровней. При значениях соотношения констант обменного и диполь-дипольного взаимодействий, превышающих некоторую критическую величину, основное состояние цепочки реализуется на уровне с максимальной средней проекцией спина, т.е. происходит переход низкий спин–высокий спин. В узкой окрестности критического значения МДДВ наблюдаются чрезвычайно резкие изменения температурных зависимостей усредненной проекции спина цепочки: от двухэтапного падения выше критической точки до формирования максимума с резким ростом и плавным падением ниже нее [22].

Целью данной работы является исследование изменений энергетических спектров цепочки  $S = 1/2$  под воздействием диполь-дипольного взаимодействия и магнитного поля. Изучены цепочки с четным числом ионов от 4 до 12 трех типов обменных спин-спиновых взаимодействий (ОССВ): изинговского, изотропного и планарного. Исследование проведено в рамках точной диагонализации спинового гамильтониана.

## 2. Энергетический спектр линейной цепочки с МДДВ

Возмущение, действующее на ионы цепочки с эффективным спином  $1/2$ , описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_i^{N-r} \left( \sum_r^{r_{\text{fin}}} \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \mathbf{J}^{(r)} \hat{\mathbf{S}}^{(i+r)} + \hat{\mathbf{H}}_{\text{MDDI}}^{(i)} + g\mu_B H \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \right), \quad (1)$$

где первый член описывает обменное взаимодействие, второй – МДДВ, третий – взаимодействие с магнитным полем;  $N$  – число спинов (четное);  $\hat{\mathbf{S}}$  – спиновый оператор;  $\mathbf{J}$  – тензор обменного взаимодействия,  $J_{xx} = J_{yy} = J_{\perp}$ ,  $J_{zz} = J_{\parallel}$ ;  $J_{jk} = 0$  для  $j \neq k$ ;  $g$  – фактор спектроскопического расщепления;  $\mu_B$  – магнетон Бора;  $H$  – магнитное поле, направленное вдоль оси  $OZ$ . Суммирование проводится по ионам  $i$  цепи и по связям  $r$  данного иона  $i$ . Обменное взаимодействие  $\mathbf{J}^{(r)}$  обрывается на ионе  $r_{\text{fin}}$  (в работе  $r_{\text{fin}} = 1, 2$ ). Введем обозначение  $J = J_{\parallel}$  для ОССВ ближайших соседей изотропной и изинговской систем и  $J = J_{\perp}$  – для планарной. Гамильтониан магнитодипольного взаимодействия

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{MDDI}}^{(i)} = D \sum_l^{N-1} \frac{1}{l^3} \left( \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \hat{\mathbf{S}}^{(i+l)} - 3 \left( \mathbf{e}_i \hat{\mathbf{S}}^{(i)} \right) \left( \mathbf{e}_{i+l} \hat{\mathbf{S}}^{(i+l)} \right) \right), \quad (2)$$

где  $\mathbf{e}_i$ ,  $\mathbf{e}_{i+l}$  – единичные векторы направления диполь-дипольной связи;  $r_0$  – расстояние между ближайшими ионами; суммирование по связям  $l$  иона  $i$ . Суммирование в (2) проводится по всем связям в цепочке. В линейной цепочке тензор магнитного диполь-дипольного взаимодействия сводится к скалярной постоянной. Константа МДДВ и приведенное магнитное поле

$$D = \frac{g^2 \mu_B^2}{r_0^3}, \quad h = g\mu_B H \quad (3)$$

рассматриваются в работе как параметры.

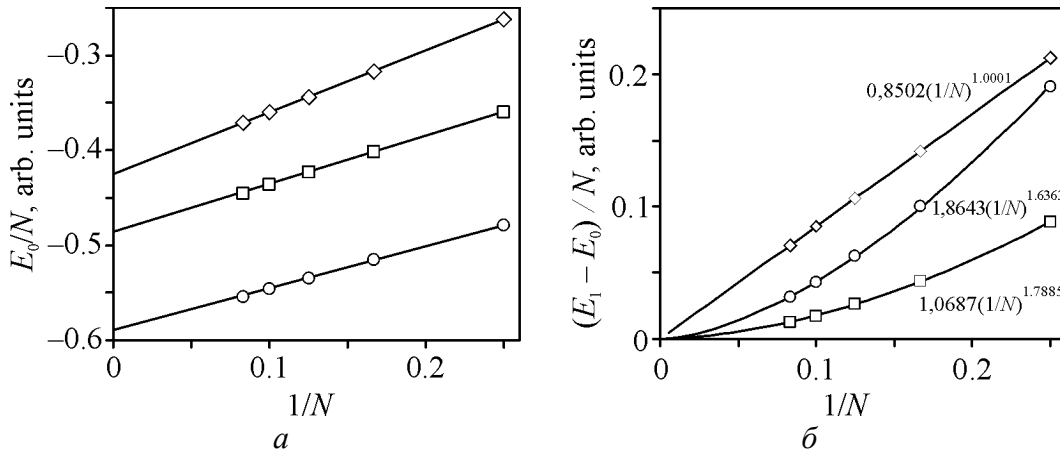
Исследуемое изменение соотношения констант обменного и диполь-дипольного взаимодействий подразумевает магнитную систему, находящуюся под воздействием гидростатического давления или изменяющейся концентрации примеси. С учетом более сильного изменения обменного интеграла следовало бы в качестве единицы масштабирования выбрать коэффициент МДДВ. При этом случай пренебрежимо малых диполь-дипольных взаимодействий соответствовал бы бесконечно большому отношению  $J/D$ , что неудобно для графического представления данных. Так, в работе все результаты приведены в виде, нормированном на константу ОССВ ближайших соседей  $J$ .

Расчет  $2^N$  собственных значений матрицы возмущения  $E_{\gamma}$  (энергетический спектр) [22] и  $2^N \times 2^N$  набора собственных векторов с компонентами  $p_{\gamma k}$ , квадраты которых  $P_{\gamma k}$  описывают вероятность заполнения данного уровня  $\gamma$  спиновой конфигурацией  $k$ , проведен при учете ОССВ ближайших, следующих за ними (вторых) и третьих соседей. МДДВ учитывается по всей цепочке. По соотношению констант спин-спинового взаимодействия  $J_{\perp} : J_{\parallel}$  изучены случаи 1:1 (изотропная система); 0:1 (предельно анизотропный, изинговский случай); 1:0 (планарная система). Константы обменного взаимодействия для первой, второй и третьей координационных сфер:

$J_{ii}^{(1)} : J_{ii}^{(2)} : J_{ii}^{(3)} = 1 : (-0.5) : 0.25$  ( $i = x, y, z$ ). Знаки обменных интегралов  $J_{ii}^{(2)}$  и  $J_{ii}^{(3)}$  выбраны таким образом, чтобы усилить антиферромагнитный характер спин-спинового взаимодействия. Взаимодействие 2-й и 3-й координационных сфер выбрано заведомо большим, чтобы подчеркнуть эффекты влияния дальних соседей при их наличии. Плавное изменение характеристик одномерной магнитной системы при вариации коэффициентов всех взаимодействий позволяет получить полное представление о характере эволюции даже при грубых изменениях варьируемых констант. Диполь-дипольное взаимодействие магнитных моментов, расположенных вдоль одной линии, имеет ферромагнитный характер, из-за чего изучаемый в работе объект является системой с конкурирующими взаимодействиями, как, например, альтернированные цепочки с параметром альтернирования более единицы [23].

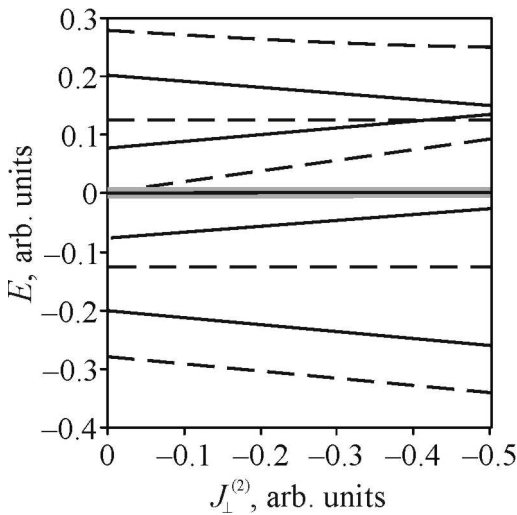
Смешанные волновые функции линейной цепочки являются в общем случае комбинацией некоторых из  $2^N$  «чистых» волновых функций, соответствующих спиновым конфигурациям. Единственным исключением является состояние с максимальным значением модуля проекции спинового момента цепочки на ось  $OZ$   $\langle S_z \rangle$ . Данному состоянию соответствуют 2 совпадающих собственных значения, каждому из которых соответствуют «чистые» волновые функции для последовательностей однонаправленных спинов ( $\langle S_z \rangle = \pm N/2$  и максимально). В противоположность этому уровни с  $0 \leq |\langle S_z \rangle| < N/2$  могут быть заполнены «чистыми» волновыми функциями только в изинговском случае. При появлении ОССВ в базисной плоскости каждая смешанная волновая функция является линейной комбинацией более чем двух «чистых». Так, для  $N = 4$  и  $\langle S_z \rangle = 0$  уровни заполняются 6 последовательностями спинов «+ - + -», «+ + - -», «+ - - +» и противоположного знака, с различным удельным их весом  $P_{\gamma k}$  на разных уровнях. Состояние с максимальными коэффициентами вхождения «антиферромагнитных» конфигураций имеет минимальную энергию и соответствует основному состоянию системы. Уровни, на которых со значительным удельным весом  $P_{\gamma k}$  представлены спиновые конфигурации типа «ферромагнитных доменов» (например, «+ + + - -»,  $N = 6$ ), обладают большей энергией, чем те, на которых преобладают «антиферромагнитные» последовательности. При учете ОССВ не только ближайших ( $l = 1$ ), но и следующих соседей ( $l = 2$ ), и далее верхний уровень с  $\langle S_z \rangle = 0$  оказывается даже выше уровня с максимальным спином.

При изменении длины спиновой цепочки от 4 до 12 ионов без МДДВ происходит плавная эволюция ряда уровней энергии: нижнего с  $\langle S_z \rangle = 0$  ( $E_0$ ), первого возбужденного с  $|\langle S_z \rangle| = 1$  ( $E_1$ ), с максимальным  $|\langle S_z \rangle|$  и других (рис. 1). Экстраполяция энергии нижнего и первого возбужденного уровней к  $N \rightarrow \infty$  дает хорошо известный результат [3,24] – нулевую щель спектра для всех исследованных в работе типов обменной анизотропии. При увеличении числа



**Рис. 1.** Энергия нижнего уровня  $E_0$  с  $\langle S_z \rangle = 0$  (а) и величина энергетической щели между первым возбужденным  $E_1$  и основным  $E_0$  уровнями (б):  $\diamond$  – предельно анизотропная ( $J_{\perp} = 0$ ),  $\circ$  – изотропная ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ ) и  $\square$  – планарная ( $J_{\parallel} = 0$ ) системы 4–12 спинов при учете взаимодействия вплоть до третьих соседей ( $l = 3$ )

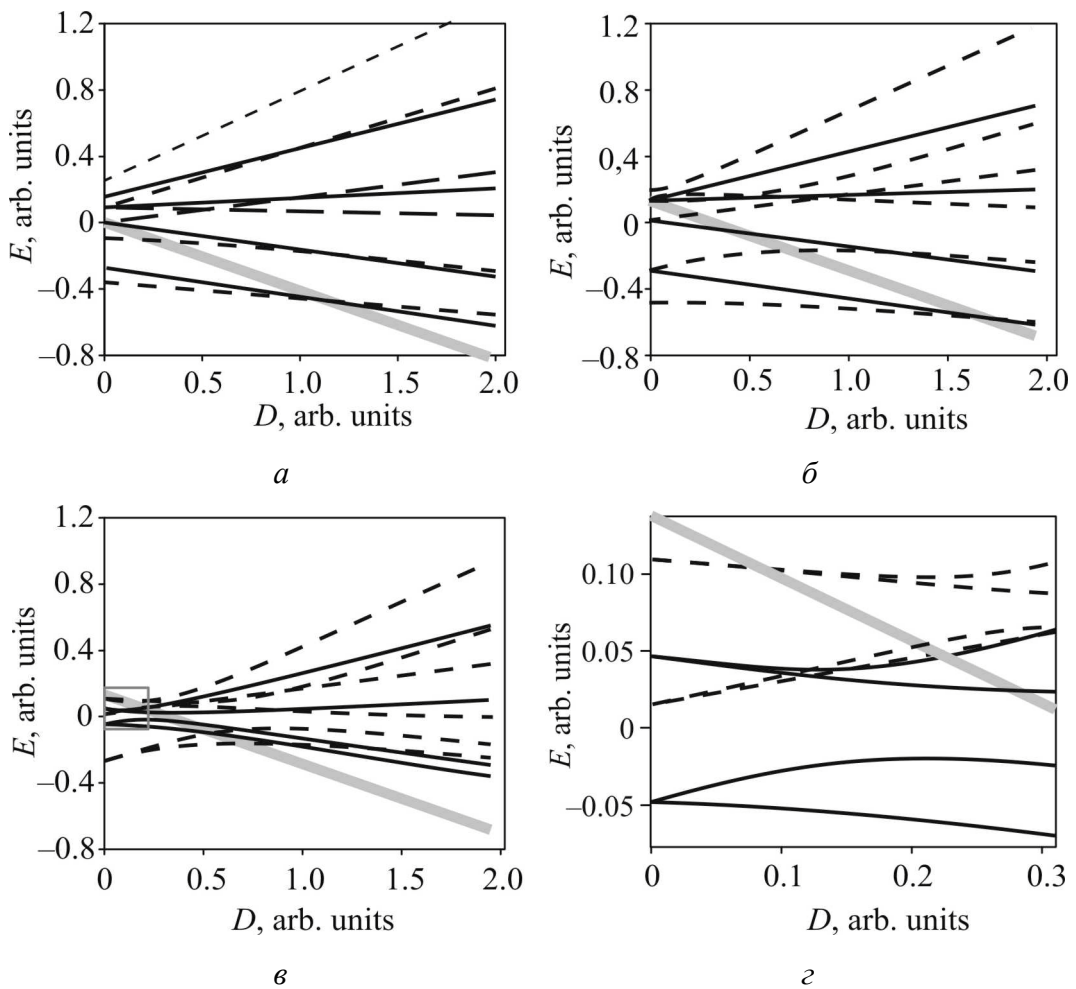
ионов в цепи с изотропным ОССВ энергия уровней описывается в основном зависимостью  $1/N$  с небольшой составляющей  $\sim 1/N^2$  (см. работу [24] и цитируемую в ней литературу) (рис. 1). Зависимости рис. 1,а в реальном масштабе выглядят прямыми, однако точная подгонка показывает полиномиальную зависимость с быстрым падением коэффициентов ряда.



**Рис. 2.** Изменение энергетического спектра цепочки с планарным ОССВ при увеличении взаимодействия вторых соседей  $J_{\perp}^{(2)}$  с  $J_{\perp}^{(1)} = 1$ ,  $J_{\parallel} = 0$ ,  $l = 2$ ,  $N = 4$ . Широкая серая линия соответствует уровню с  $\langle S_z \rangle = 2$ , тонкие сплошные – уровню с  $\langle S_z \rangle = 1$ , штриховые – с  $\langle S_z \rangle = 0$

Изменения энергетических спектров в одномерных системах с изотропным ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ ) и предельно анизотропным ( $J_{\perp} = 0$ ) ОССВ при учете не только ближайших, но и следующих ( $l = 2$ ), и следующих за ними соседей ( $l = 3$ ) незначительны. Напротив, в спиновой цепи с планарным ОССВ ( $J_{\parallel} = 0$ ) учет второй и третьей координационных сфер ( $l = 2$ ,  $l = 3$ ) приводит к заметному и притом качественному изменению спектра. При взаимодействии только ближайших соседей уровни планарной системы расположены строго симметрично относительно  $E = 0$  (рис. 2,  $J_{\perp}^{(2)} = 0$ ). Влияние вторых соседей приводит к нарастанию асимметрии: с увеличением  $J_{\perp}^{(2)}$  большая часть уровней с  $\langle S_z \rangle = 0$  опускается вниз по шкале энергий (рис. 2).

МДДВ, имеющее ферромагнитный характер, понижает энергию уровня с  $\langle S_z \rangle = \pm N/2$  быстрее, чем каких-либо других уровней (серые прямые на рис. 3, *a–z*). Энергия части уровней с нулевой средней проекцией спина может возрастать с увеличением коэффициента  $D$ , а части – убывать, из-за чего полный интервал значений энергетического спектра расширяется. Энергия уровней, на которых со значительным удельным весом  $P_{\gamma k}$  представлены спиновые конфигурации типа «ферромагнитных доменов», с ростом МДДВ уменьшается. Подобным же образом эволюционируют и уровни с промежуточными ненулевыми проекциями спинов ( $0 \leq |\langle S_z \rangle| < N/2$ ).

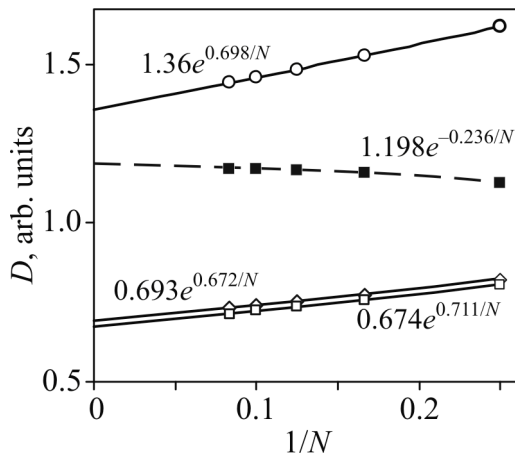


**Рис. 3.** Изменение энергетических спектров при увеличении отношения констант МДДВ и обменного взаимодействия для планарной ( $J_{\parallel} = 0$ ) (*a*), изотропной ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ ) (*b*) и изинговской ( $J_{\perp} = 0$ ) (*v*, *z* – в подробном масштабе) цепочек с  $N = 4$ ,  $l = 3$ . Широкая серая линия соответствует уровню энергии с максимальной проекцией усредненного спина, сплошные черные линии –  $|\langle S_z \rangle| = 1$  и штриховые –  $\langle S_z \rangle = 0$

В области энергий  $0-0.3J$  в изинговской цепочке (рис. 3,з) наблюдается сложная картина пересечения и «расталкивания» уровней. «Расталкивание» наблюдается для уровней с одной и той же величиной  $|\langle S_z \rangle|$  и сопровождается переносом удельного веса  $P_{\gamma k}$  высокоэнергетических конфигураций на нижние соседние уровни.

Полученные в результате точных расчетов энергетические спектры при изменении знака энергии уровней  $E_\gamma$  точно совпадают со спектром системы с противоположными константами ОССВ ( $J_{ii}^{(1)} : J_{ii}^{(2)} : J_{ii}^{(3)} = (-1):0.5:(-0.25)$ ) при нулевом МДДВ (магнитодипольное взаимодействие в линейной цепочке – ферромагнитное). Для такой магнитной системы уровень, занятый ферромагнитными состояниями, находится вблизи дна энергетического спектра. Следует отметить, что и в этом случае при  $D = 0$  конечная линейная цепочка с параллельными ориентациями спинов соответствует основному состоянию системы при учете только ближайших соседей ( $l = 1$ ).

Под воздействием МДДВ энергия дублета с максимальной проекцией усредненного спина быстро уменьшается [22]. При некоторой критической величине  $D = D_{cr}$  он достигает дна энергетического спектра и совпадает с нижним уровнем с  $\langle S_z \rangle = 0$  (рис. 3). При дальнейшем увеличении магнитодипольного взаимодействия основное состояние системы реализуется на конфигурациях с  $|\langle S_z \rangle| = N/2$ . Таким образом, при  $D = D_{cr}$  происходит изменение основного состояния системы: синглетное низкоспиновое (немагнитное) состояние переходит в высокоспиновое (магнитное), т.е.  $D_{cr}$  является критической точкой линейной спиновой цепочки с МДДВ.



**Рис. 4.** Зависимость критических значений константы МДДВ от обратной длины цепочки:  $\diamond$  – изинговской ( $J_{\perp} = 0$ );  $\circ$  – изотропной ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ );  $\square$ ,  $\blacksquare$  – планарной ( $J_{\parallel} = 0$ ). Незачерненные значки – приближение ОССВ ближайших соседей,  $l = 1$ ; зачерненные – планарное ОССВ,  $l = 3$

Зависимость  $D_{cr}$  от обратной длины цепочки для рассмотренных в работе типов анизотропии, при учете обмена только ближайших соседей, является монотонно возрастающей функцией (рис. 4). Аналогичные зависимости для изотропного, предельно анизотропного и двух промежуточных случаев соотношений  $J_{\perp}$  и  $J_{\parallel}$  с  $l = 3$  получены нами ранее в работе [22].

Значения  $D_{cr}$  падают с ростом обменной анизотропии при ее изменении от изотропного ОССВ в сторону как изинговской, так и планарной систем. Учитывая, что воздействие на реальный магнитный объект гид-

ростатического сжатия порядка 1 GPa обычно приводит к весьма небольшому изменению спин-спиновых взаимодействий, влияние длины цепочки следует признать определяющим фактором.

Учет отдаленных ( $l > 1$ ) соседей незначительно изменяет положение критических точек для изотропной [22] и предельно анизотропной систем. В цепочке с планарным ОССВ ( $J_{\parallel} = 0$ ) учет соседей второй и третьей координационных сфер приводит к качественному изменению зависимости  $D_{cr}$  от длины цепочки из-за возникающей под воздействием ОССВ вторых и третьих соседей асимметрии спектра (рис. 4, штриховая линия).

### 3. Спиновая цепочка с МДДВ в магнитном поле

В отсутствие МДДВ магнитное поле расщепляет на синглеты вырожденные при  $h = 0$  уровни спиновой цепочки  $S = 1/2$  с одним и тем же модулем  $\langle S_z \rangle$ .

Смещение синглетов относительно положения при  $h = 0$

$$\Delta E = g\mu_B H \langle S_z \rangle / 2 = h \langle S_z \rangle / 2 \quad (4)$$

линейно (рис. 5). Расщепленные уровни с  $\langle S_z \rangle < 0$  и  $\langle S_z \rangle > 0$  в поле смещаются симметрично (синглеты с  $\langle S_z \rangle > 0$  на рис. 5 не показаны, чтобы не загромождать его). Линейные полевые зависимости рис. 5 свидетельствуют об отсутствии изменений соотношения между различными «чистыми» волновыми функциями уровней – так называемого «расталкивания» или «взаимодействия» уровней.

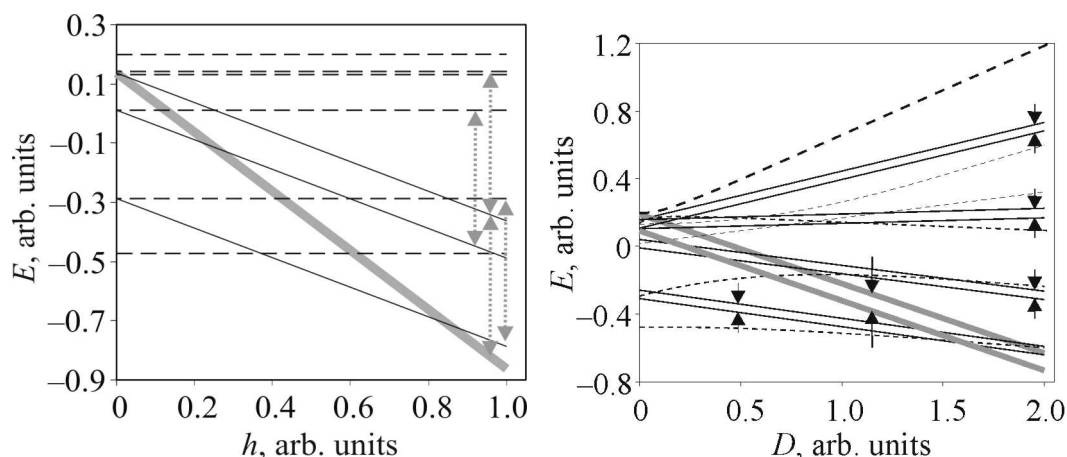
Воздействие МДДВ на изотропную линейную цепочку не изменяет величину расщепления (4), т.е. синглеты с  $\langle S_z \rangle \neq 0$  смещаются одинаково (равноотстоящие линии на рис. 6, отмеченные стрелками). Причиной является отсутствие влияния магнитного поля на целочисленные значения  $\langle S_z \rangle$  состояний системы. Так как линейный сдвиг уровней в магнитном поле имеет место для любых вариантов соотношения констант взаимодействий (4), нет необходимости в подробных исследованиях влияния анизотропии и величины диполь-дипольного взаимодействия на полевые зависимости энергетических спектров.

### 4. Выводы

Диполь-дипольное взаимодействие трансформирует систему уровней ограниченной линейной цепочки: часть уровней расщепляется, полный интервал энергий расширяется, а уровни с максимальной усредненной проекцией спинового момента  $\langle S_z \rangle$  становятся энергетически более выгодными ввиду ферромагнитного характера МДДВ.

Вследствие конкуренции обменного и диполь-дипольного взаимодействий в некоторой критической точке наблюдается переход из немагнитного





**Рис. 5.** Расщепление уровней спиновой цепочки с изотропным ОССВ в магнитном поле и разрешенные переходы между уровнями (серые стрелки),  $D = 0$ ,  $N = 4$ ,  $l = 3$ . Обозначение уровней соответствует рис. 2. (Уровни с положительными величинами средних проекций спина цепочки не показаны)

**Рис. 6.** Изменение энергетического спектра изотропной цепочки ( $N = 4$ ,  $l = 3$ ) с увеличением отношения констант МДДВ и обменного взаимодействия, приведенное магнитное поле  $h = 0.05$ . Величина расщепления показана стрелками. Обозначение уровней соответствует рис. 2

спин-щелевого состояния в магнитное с максимальным спиновым моментом (переход низкий спин–высокий спин). Значения константы МДДВ в критических точках растут с уменьшением обменной анизотропии, а также с уменьшением длины цепочки. Учет отдаленных соседей в цепи несколько повышает значения  $D_{cr}$ , а в планарной системе, чувствительной к взаимодействию отдаленных соседей, даже изменяет характер зависимости критических значений от длины цепочки.

Магнитное поле линейно расщепляет уровни одномерной спиновой системы с МДДВ (4). Анизотропия  $g$ -фактора, не учитываемая в данной работе, но практически всегда имеющая место в экспериментальных исследованиях, также вызывает линейное смещение уровней цепочки (4). Столь простой характер изменения энергетических спектров в магнитном поле свидетельствует о возможности теоретического анализа проявлений электронного спинового резонанса в линейных спиновых цепочках с МДДВ.

Исследования ЭПР в магниторазбавленных системах традиционно ограничиваются парными и, иногда, тройными взаимодействиями. Поэтому исследования электронного спинового резонанса в одномерных спиновых системах ограниченной длины могут представлять большой интерес для теоретиков и экспериментаторов, изучающих сложные магнитные комплексы. Собственно вопрос о спектрах спинового резонанса в линейных цепочках достаточно обширен и требует изложения в рамках отдельной работы.

1. *H. Bethe*, *Z. Physik*, **B71**, 205 (1931).
2. *F.D.M. Haldane*, *Phys. Lett.* **A93**, 464 (1983).
3. *J. Cloizeaux and J.J. Pearson*, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
4. *А.И. Смирнов, В.Н. Глазков*, *ЖЭТФ* **132**, 984 (2007).
5. *J.C. Bonner and M.E. Fisher*, *Phys. Rev.* **A135**, 640 (1964).
6. *K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A Yamagishi, and J.P. Renard*, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 86 (1989).
7. *J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault, W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W.G. Stirling, and C. Vettier*, *J. Appl. Phys.* **63**, 3538 (1988).
8. *A. Zheludev, S.E. Nagler, S.M. Shapiro, L.K. Chou, D.R. Talham, and M.W. Meisel*, *Phys. Rev.* **B53**, 15004 (1996).
9. *J. Darriet and L.P. Regnault*, *Solid State Commun.* **86**, 409 (1993).
10. *A. Zheludev, T. Masuda, I. Tsukada, Y. Uchiyama, K. Uchinokura, P. Böni, and S.-H. Lee*, *Phys. Rev.* **B62**, 8921 (2000).
11. *A. Oosawa, M. Ishi, and H. Tanaka*, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 265 (1999).
12. *S. Miyashita and S. Yamamoto*, *Phys. Rev.* **B48**, 913 (1993).
13. *Л.Н. Булаевский*, *ЖЭТФ* **44**, 1008 (1963).
14. *J.C. Bonner and H.W.J. Blöte*, *Phys. Rev.* **B25**, 6959 (1982).
15. *А.Г. Андерс, В.С. Бондаренко, С.Б. Бордовский, А. Фегер, А. Орендачева*, *ФНТ* **23**, 1195 (1997).
16. *H.P. Kunkel, X.Z. Zhou, P.A. Stampe, J.A. Cowen, and G. Williams*, *Phys. Rev.* **B53**, 15099 (1996).
17. *В.Т. Довгий, А.И. Линник, В.И. Каменев, В.К. Прокопенко, В.И. Михайлов, В.А. Хохлов, А.М. Кадомцева, Т.А. Линник, Н.В. Давидейко, Г.Г. Левченко*, *Письма в ЖТФ* **29**, 8 (2003).
18. *В.И. Вальков, Д.А. Варюхин, А.В. Головчан, И.Ф. Грибанов, А.П. Сиваченко, В.И. Каменев, Б.М. Тодрис*, *ФНТ* **34**, 927 (2008).
19. *T. Sakai, M. Takahashi*, *Physica* **B246–247**, 375 (1998).
20. *О.А. Жикол, В.О. Черановский*, *ФНТ* **22**, 793 (1996).
21. *T. Toneyawa, T. Nishida, M. Kaburagi*, *Physica* **B246–247**, 368 (1998).
22. *А.В. Журавлев, И.М. Крыгин*, *ФНТ* **36**, 272 (2010).
23. *A.W. Garrett, S.E. Nagler, D.A. Tennant, B.C. Sales, and T. Barnes*, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 745 (1997).
24. *Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин*, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).

*О.В. Журавльов, І.М. Кригін*

## ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ ЛІНІЙНИХ СПІНОВИХ ЛАНЦЮЖКІВ З МАГНІТОДИПОЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

Досліджено вплив магнітної диполь-дипольної взаємодії (МДДВ) та магнітного поля на еволюцію системи енергетичних рівнів, що має загальні особливості для всіх основних типів анізотропії обмінних взаємодій: ізотропного, планарного і гранично анізотропного (ізінговського) лінійних ланцюжків спинів  $S = 1/2$ . У планарному випадку виявлена висока чутливість до взаємодій наступних за найближчими і більш

віддалених сусідів, на відміну від ізотропної і ізінговської систем. Отримано критичні значення коефіцієнта магнітодипольної взаємодії, при яких відбувається перехід із стану з нульовим у стан з максимальним усередненим значенням спінового моменту (перехід низький спін–високий спін) для кожного з досліджених типів анізотропії. Показано, що величина розщеплення рівнів лінійно зв'язана з напруженістю магнітного поля і не залежить ані від диполь-дипольної взаємодії, ні від типу анізотропії спінового ланцюжка.

**Ключові слова:**  $S = 1/2$  спіновий ланцюжок, основний стан, анізотропія, точна діагоналізація

*A.V. Zhuravlev, I.M. Krygin*

## ENERGY SPECTRA OF A LINEAR SPIN CHAINS WITH DIPOLE-DIPOLE INTERACTION

The influence of magnetic dipole–dipole interaction (MDDI) on evolution of the energy levels system with similar features for Heisenberg, Ising and planar  $S = 1/2$  linear spin chains has been investigated. The XX0 chain is highly sensitive to n.n.n. and n.n.n.n. exchange interactions, in contrast to isotropic and Ising systems. Critical values of magnetodipole interaction coefficient have been determined with which the spin system undergoes a transition from zero-spin to the maximal-spin state (low-spin to high-spin transition) for every anisotropy type under study. The value of energy-level splitting is shown to be in linear dependence with magnetic field strength, no dependence on dipole-dipole interaction and anisotropy type is noted.

**Keywords:**  $S = 1/2$  spin chain, ground state, anisotropy, exact diagonalization

**Fig. 1.** Low-lying level energy  $E_0$  with  $\langle S_z \rangle = 0$  (a) and value of energy gap between the first excited  $E_1$  and ground  $E_0$  levels (b):  $\diamond$  – Ising ( $J_{\perp} = 0$ ),  $\circ$  – isotropic ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ ) and  $\square$  – planar ( $J_{\parallel} = 0$ ) systems of 4–12 spins in view of interaction up to third neighbors ( $l = 3$ )

**Fig. 2.** Changes in the energy spectrum of the planar exchange spin-spin interaction (ESSI) chain for stronger next-nearest neighbor interaction  $J_{\perp}^{(2)}$  with  $J_{\perp}^{(1)} = 1$ ,  $J_{\parallel} = 0$ ,  $l = 2$ ,  $N = 4$ . Broad grey line corresponds to the level with  $|\langle S_z \rangle| = 2$ , thin solid lines – to the level with  $|\langle S_z \rangle| = 1$ , dashes – with  $|\langle S_z \rangle| = 0$

**Fig. 3.** Changes in energy spectra for increasing ratio of MDDI and exchange interaction for planar ( $J_{\parallel} = 0$ ) (a), isotropic ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ ) (b) and Ising ( $J_{\perp} = 0$ ) (c, d – in detailed scale) chains with  $N = 4$ ,  $l = 3$ . Broad grey line corresponds to energy level with the maximum projection of averaged spin, solid black lines –  $|\langle S_z \rangle| = 1$  and dashed –  $\langle S_z \rangle = 0$

**Fig. 4.** Dependence of MDDI constant critical values on inverse length of the chain:  $\diamond$  – Ising ( $J_{\perp} = 0$ );  $\circ$  – isotropic ( $J_{\perp} = J_{\parallel}$ );  $\square$ ,  $\blacksquare$  – planar ( $J_{\parallel} = 0$ ). Open symbols – approximation of nearest neighbor ESSI,  $l = 1$ ; shaded – planar ESSI,  $l = 3$

**Fig. 5.** Splitting of isotropic ESSI spin chain in magnetic field and allowed transitions between levels (grey arrows),  $D = 0$ ,  $N = 4$ ,  $l = 3$ . Designation of levels correspond to Fig. 2. (Levels with positive values of average projections of chain spin are not shown)

**Fig. 6.** Changes in the energy spectrum of isotropic chain ( $N = 4$ ,  $l = 3$ ) with the increase of MDDI and exchange interaction constants ratio, reduced magnetic field  $h = 0.05$ . The field splitting value is shown by arrows. Designation of levels corresponds to Fig. 2