

О.М. КРУПНІЦЬКА

Інститут фізики конденсованих систем НАН України  
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011; e-mail: krupnitska@ictp.lviv.ua)

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

УДК 538.955

*Розглядається спин- $\frac{1}{2}$  антиферромагнітна ХХZ модель Гейзенберга 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 Гейзенберга з параметром анізотропії  $\Delta > 1$ , досліджено процес намагнічення фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка. Теорія застосована до пояснення експериментальних даних для природного мінералу азуриту.  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ .*

*Ключові слова:* квантовий антиферромагнетик Гейзенберга, фрустрований ромбічний ланцюжок, азурит.

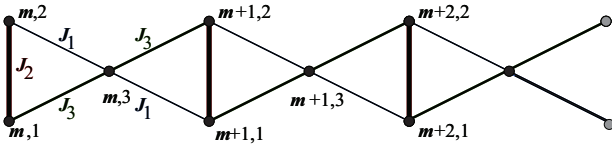
### 1. Вступ

В останні роки багато уваги звертається на теоретичне і експериментальне вивчення властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гейзенберга [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 Гейзенберга, які можуть бути досліджені детально спеціальними методами. Це так звані фрустровані квантові антиферромагнетики Гейзенберга з бездисперсійними (плоскими) магнонными станами з найменшою енергією. Дослідження властивостей таких спіно-

вих 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 роботах [2–5], стосується так званої ідеальної геометрії, коли одномагнонні стани строго локалізовані (одномагнонна зона строго бездисперсійна). Ця теорія також передбачає ізотропію обмінних взаємодій Гейзенберга (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 Гейзенберга можуть бути анізотропними ( $\Delta \neq 1$ ). Постає важливе питання: які є наслідки для спостережуваних властивостей через відхилення від ідеальної геометрії чи через довільність напрямку прикладен-

© О.М. КРУПНІЦЬКА, 2015



**Рис. 1.** Фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок. Зручно нумерувати вузли ґратки парою індексів, де перший індекс нумерує комірки ґратки  $m = 1, \dots, \mathcal{N}$ ,  $\mathcal{N} = \frac{N}{2}$ ,  $N$  – число вузлів у ґратці, а другий – позначає положення вузла в комірни

ного магнітного поля, якщо взаємодія Гейзенберга не є ізотропною? Іншими словами, як виглядатиме теорія таких фрустрованих квантових антиферомагнетиків поблизу парадигми локалізованих магнонів?

Випадок відхилення від ідеальної геометрії досліджено у роботах [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 [8]. У статті [9] було запропоновано евристичний анзац для статистичної суми деформованого ромбічного спінового ланцюжка. Ці дослідження стосувалися випадку ізотропної взаємодії Гейзенберга ( $\Delta = 1$ ).

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 Гейзенберга [10–13]. Модель азуриту відповідає набору параметрів поблизу ідеальної геометрії, яка передбачає існування локалізованих магнонів [14]. У роботі [11] приведені результати експериментальних досліджень магнітних властивостей азуриту при температурі  $T < 4,2$  К та магнітному полі  $H = 0-50$  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 Гейзенберга у азуриті (див. [12]).

Питання про намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка з  $XXZ$  взаємодією Гейзенберга у довільно орієнтованому полі поставлено у роботі [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 Гейзенберга

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 застосовний метод ферміонізації Йордана-Вігнера [16].

У теперішній роботі розглядатимемо фрустрований ромбічний  $XXZ$  ланцюжок Гейзенберга у магнітному полі, орієнтованому вздовж осі  $x$  чи  $z$ , але тепер вважатимемо, що параметр анізотропії обмінної взаємодії Гейзенберга  $\Delta > 1$ . 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 роботах [10–12].

## 2. Ефективна теорія

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

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

$\alpha = x, z,$

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 антиферомагнітною 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 за 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 (1) з

$\alpha = z$ . Для випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $x$ , зробимо унітарне перетворення вихідного гамільтоніана (1) і прийдемо до гамільтоніана з анізотропною взаємодією в магнітному полі, спрямованому вздовж осі  $z$ :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + (\Delta - 1) s_i^x s_j^x] - h \sum_i s_i^z. \quad (2)$$

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  $H$  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  $\mathcal{N} = \frac{N}{3}$  – число комірок у ланцюжку. Введемо оператор проєктування  $P$  на модельний простір, утворений  $2^{\mathcal{N}}$ -кратно виродженим основним станом:

$$P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} [(|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|) \otimes |\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3|]_m. \quad (3)$$

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]:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots \quad (4)$$

Для початку розглянемо випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $z$ . В сильних магнітних полях ми маємо справу з такими 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:  $T^z = \frac{1}{2} (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)$ ,  $T^+ = |u\rangle\langle d|$ ,  $T^- = |d\rangle\langle u|$ .

Перший доданок у правій стороні рівняння (4) на мові (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$  операторів має вигляд

$$PHP = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[ -\frac{J_2}{4} - h + \Delta \frac{J}{2} - (h - h_1) T_m^z \right], \quad (5)$$

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 доданка у правій стороні формули (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

$$PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = -\frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2(\Delta + 1)} \times \sum_m [1 - 2T_m^z - 2(T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)]. \quad (6)$$

Тому для ефективного гамільтоніана  $H_{\text{eff}}$  (4) в наближенні сильного зв'язку отримаємо такий вираз:

$$H_{\text{eff}} = \sum_m [C - h T_m^z + J (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)], \quad (7)$$

$$C = -h - \frac{J_2}{4} + \Delta \frac{J}{2} - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4(1 + \Delta)J_2}, \quad J = \frac{J_3 + J_1}{2},$$

$$h = h - h_1 - \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad h_1 = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J,$$

$$J = \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}.$$

В границі ізотропної взаємодії Гейзенберга  $\Delta = 1$  отриманий ефективний гамільтоніан (7) збігається з результатами робіт [7, 8]. 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 (7) зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі.

Розглянемо далі випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі  $x$ . Виходитимемо з гамільтоніана (2). У сильному магнітному полі маємо справу з наступними двома станами  $|u\rangle$  та  $|d\rangle$  на кожному вертикальному зв'язку:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow_1\uparrow_2\rangle + \beta |\downarrow_1\downarrow_2\rangle, \quad (8)$$

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{1}{C} \frac{\Delta - 1}{4} J_2, \\ \beta &= \frac{1}{C} \left[ h - \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 + h^2} \right], \\ C &= \sqrt{2} \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 - h \sqrt{\frac{(\Delta - 1)^2}{16} J_2^2 + h^2} + h^2}\end{aligned}$$

та

$$|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) \quad (9)$$

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 доданка в правій стороні формули (4) отримаємо

$$\begin{aligned}PHP &= \sum_m \left[ -\frac{h}{2} - \frac{2 + \Delta}{4} J_2 - \right. \\ &\left. - (h - h_0 - J)(\alpha^2 - \beta^2) \left( \frac{1}{2} + T_m^z \right) \right], \quad (10)\end{aligned}$$

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 (8). Існує два класи збуджених станів, які дають ненульовий внесок у другий доданок у правій стороні рівняння (4). Перший з них складається з  $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$  станів, які містять один перевернутий спін на третьому вузлі, що з'єднує дві сусідні комірки, див. рис. 1. Тому

$$\begin{aligned}PV \sum_{\alpha_1 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_1}\rangle \langle \varphi_{\alpha_1}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_1}} VP &= \\ &= \sum_m (C_1 - h_1 T_m^z + J^x T_m^x T_{m+1}^x + J^y T_m^y T_{m+1}^y), \quad (11) \\ C_1 &= -\frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2], \\ h_1 &= -\frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta, \\ J^x &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \\ J^y &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2.\end{aligned}$$

Другий клас збуджених станів складається з  $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}-1}$  станів. Стан димеру 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 (8). Енергія цих збуджених

станів  $\varepsilon_{\alpha_2} = \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(3 + \Delta)J_2$ . Легко переконатися, що

$$\begin{aligned}PV \sum_{\alpha_2 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_2}\rangle \langle \varphi_{\alpha_2}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_2}} VP &= \\ &= -\sum_m \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2 \left( \frac{1}{2} + T_m^z \right).\end{aligned} \quad (12)$$

Об'єднуючи формули (10), (11), (12), знаходимо  $H_{\text{eff}}$ . Ефективний гамільтоніан для фрустрованого ромбічного спінового  $XXZ$  ланцюжка Гейзенберга ( $\Delta \geq 1$ ) в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ , має вигляд

$$H_{\text{eff}} = \sum_m (C - hT_m^z + J^x T_m^x T_{m+1}^x + J^y T_m^y T_{m+1}^y), \quad (13)$$

де

$$\begin{aligned}C &= -\frac{h}{2} - \frac{2 + \Delta}{4} J_2 - \frac{1}{2} (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) - \\ &- \frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2] - \\ &- \frac{4(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\ h &= (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) - \\ &- \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta + \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\ J^x &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \\ J^y &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2.\end{aligned}$$

В границі  $\Delta \rightarrow 1$  отримані ефективні гамільтоніани (7) і (13) збігаються і відповідають (нефрустрованому) спін- $\frac{1}{2}$  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 (13) зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі:  $J^x = 0$ ,  $J^y = 0$ .

Формально вирази для ефективних гамільтоніанів (7) і (13) такі самі, як отримані раніше у роботі [15] для  $0 \leq \Delta < 1$ , але вони описують якісно інший випадок, коли параметр анізотропії обмінних взаємодій Гейзенберга  $\Delta > 1$ . При цьому, у випадку  $\Delta > 1$ , вирази для констант  $\alpha$  і  $\beta$  є іншими, ніж у [15] (порівняймо формулу (8) та вирази для констант  $a$  і  $b$  у формулі (5) з [15]). Отримані моделі (7) і (13) є точно розв'язними методами ферміонізації Йордана-Вігнера [16].

### 3. Порівняння вихідних та ефективних моделей

Для дослідження отриманих ефективних моделей (7) і (13) порівняймо їх передбачення з даними для вихідних моделей. Для прикладу розглядаємо 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 Гейзенберга  $\Delta = 1$ , 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

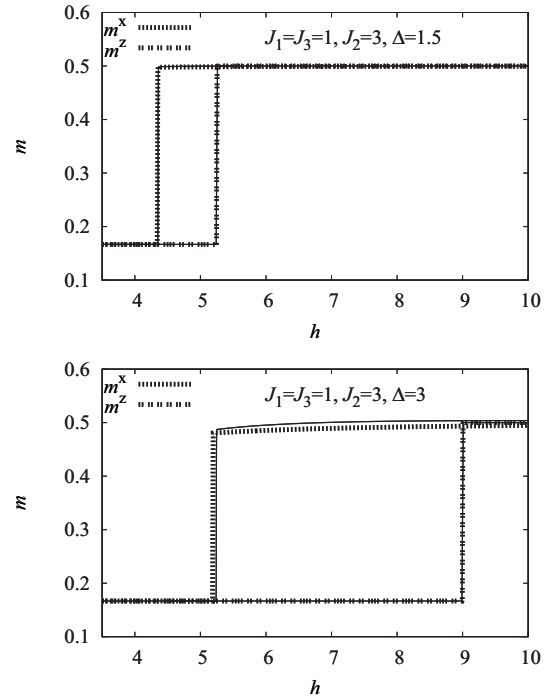
$$h_*^z = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}. \quad (14)$$

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

$$h_*^x \approx \sqrt{\frac{1 + \Delta}{2} J_2 + J} + \frac{(J_3 - J_1)^2}{4\sqrt{\frac{1 + \Delta}{2} J_2}} \Delta. \quad (15)$$

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

На рис. 4 наведена залежність величини стрибка кривої намагніченості  $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) -$



**Рис. 2.** Криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гейзенберга 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

$- m^x(h_*^x - 0)$  від параметра  $\Delta$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$ , для  $J_2 = 3$ ,  $J_1 = J_3 = 1$  та  $J_1 = J_3 = 0$ . Розглянемо 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 вузлів у сильному полі маємо

$$\begin{aligned} & (\alpha \langle \uparrow \uparrow | + \beta \langle \downarrow \downarrow | \rangle) (s_1^z + s_2^z) (\alpha | \uparrow \uparrow \rangle + \beta | \downarrow \downarrow \rangle) + \frac{1}{2} = \\ & = (\alpha \langle \uparrow \uparrow | + \beta \langle \downarrow \downarrow | \rangle) (\alpha | \uparrow \uparrow \rangle - \beta | \downarrow \downarrow \rangle) + \frac{1}{2} = \\ & = \alpha^2 - \beta^2 + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (16)$$

Тому для намагніченості в розрахунку на один вузол отримуємо  $m^x(h_0 + 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} + \frac{1}{6}$ . Далі,  $m^x(h_0 - 0) = \frac{1}{6}$ , так що  $\Delta m^x \equiv m^x(h_0 + 0) -$

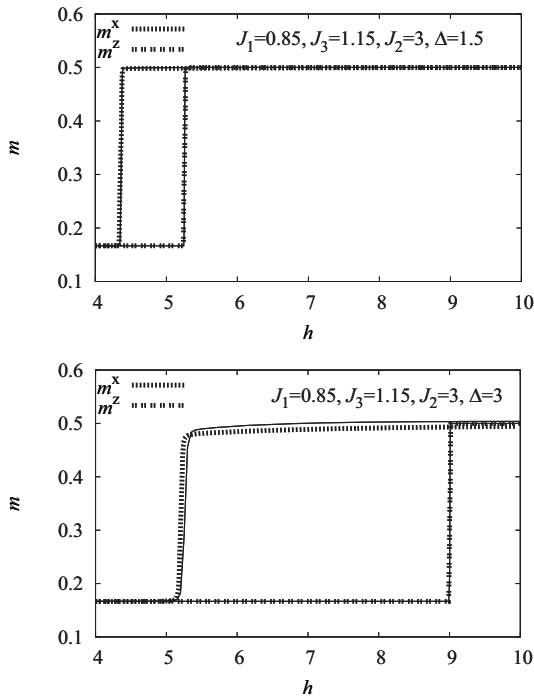


Рис. 3. Те саме, що на рис. 2, але з  $J_1 = 0,85$ ,  $J_2 = 3$ ,  $J_3 = 1,15$

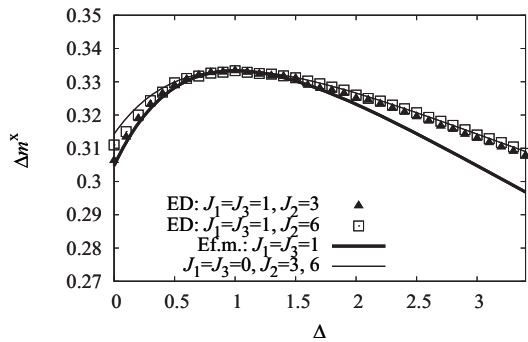


Рис. 4. Залежність величини стрибка намагніченості  $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) - m^x(h_*^x - 0)$  фрустрованого ромбічного  $XXZ$  ланцюжка Гейзенберга від параметра  $\Delta$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$

$-m^x(h_0 - 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} \neq 0$  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 (13) (товста лінія на

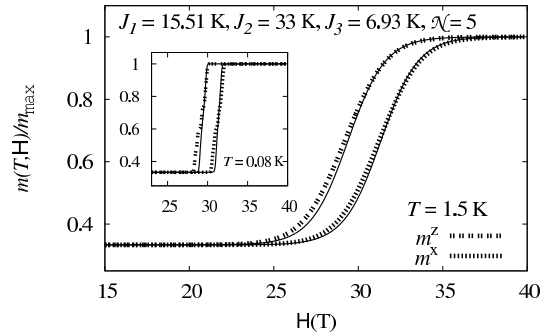


Рис. 5. Низькотемпературні криві намагніченості для фрустрованого ромбічного ланцюжка з параметрами для азуриту  $J_1 = 15,51$  К,  $J_2 = 33$  К,  $J_3 = 6,93$  К ( $J_m = 0$ ) і гіромагнітним співвідношенням  $g = 2,06$  в магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $z$  і вздовж осі  $x$  (пунктирні криві). Тонкі чорні криві – результати на основі ефективної теорії з використанням ферміонізації Йордана–Вігнера

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 (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 роботі [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 пла-

то 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.

За допомогою формул (14) та (15) 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, за якого відбувається стрибок у кривій намагніченості  $H^{\parallel} \approx 29$  Т, а також параметри для азуриту, за допомогою формули (14) 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 (15) отримуємо, що параметр анізотропії обмінних взаємодій для азуриту  $\Delta \approx 0,84$ . Таким чином, теоретичне передбачення для параметра анізотропії обмінних взаємодій у азуриті є  $\Delta \approx 0,84-0,85$ .

Криві намагнічення для параметрів для азуриту при двох температурах  $T = 0,08$  К і  $T = 1,5$  К наведені на рис. 5. Відзначимо, що 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

У даній роботі досліджено вплив анізотропії обмінної взаємодії Гейзенберга на низькотемпературні властивості майже плоскостовного ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі, прикладеному вздовж осі  $x$  або вздовж осі  $z$ . Аналіз стосується випадку, коли параметр анізотропії Гейзенберга  $\Delta > 1$ ; 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'яз-

ку. 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 Гейзенберга  $\Delta \geq 0$ . 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 Гейзенберга  $\Delta$  для азуриту:  $\Delta \approx 0,84-0,85$ .

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  $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$  [20].

*Автор висловлює подяку О. Дерзхко, Т. Крохмальському, Й. Ріхтеру, а також О. Менчшишину за обговорення результатів цього дослідження та корисні поради.*

1. G. Misguich and C. Lhuillier, in *Frustrated Spin Systems*, edited by H.T. Diep (World Scientific, Singapore, 2005), p. 229; J. Richter, J. Schulenburg, and A. Honecker, in *Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics*, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D.J.J. Farnell, and R.F. Bishop (Springer, Berlin, 2004), Vol. 645, p. 85.
2. J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167207 (2002).
3. M.E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. B* **70**, 100403(R) (2004).
4. O. Derzhko and J. Richter, *Eur. Phys. J. B* **52**, 23 (2006).
5. O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, and H.-J. Schmidt, *Fiz. Nizk. Temp.* **33**, 982 (2007).
6. O. Derzhko, J. Richter, and M. Maksymenko, *Int. J. Mod. Phys. B* **29**, 1530007 (2015).
7. A. Honecker, S. Hu, R. Peters, and J. Richter, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 164211 (2011).
8. O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhnalskii, *Phys. Rev. B* **88**, 094426 (2013); *Fiz. Nizk. Temp.* **40**, 662 (2014).

9. O. Derzhko, J. Richter, and O. Krupnitska, *Cond. Matter Phys.* **15**, 43702 (2012).
10. 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).
11. 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. Bertheir, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 1 (2005).
12. 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).
13. N. Ananikian, H. Lazaryan, and M. Nalbandyan, *Eur. Phys. J. B* **85**, 223 (2012).
14. 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).
15. J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhumalskii, and O. Derzhko, *J. Magn. Magn. Mater.* **379**, 39 (2015).
16. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961).
17. A. Honecker and A. Läuchli, *Phys. Rev. B* **63**, 174407 (2001).
18. P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids* (Springer-Verlag, Berlin, 1993).
19. A. F. Albuquerque *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1187 (2007); B. Bauer *et al.*, *J. Stat. Mech.* P05001 (2011).
20. 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).

Одержано 27.03.15

О.М. Крупницька

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ОБМЕННОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ПРОЦЕСС  
НАМАГНИЧИВАНИЯ ФРУСТРИРОВАННОЙ  
РОМБИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКИ В СИЛЬНОМ  
МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Р е з ю м е

Мы рассматриваем спин- $\frac{1}{2}$  антиферромагнитную  $XXZ$  модель Гейзенберга на фрустрированной ромбической цепочке во внешнем магнитном поле, которое направлено вдоль оси  $x$  или вдоль оси  $z$ . Используя эффективные модели, полученные в приближении сильной связи для случая параметра анизотропии взаимодействия Гейзенберга  $\Delta > 1$ , мы исследовали процесс намагничивания фрустрированной ромбической спиновой цепочки. Теория применяется для объяснения экспериментальных данных для естественного минерала азурита  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ .

О.М. Krupnitska

INFLUENCE OF THE HEISENBERG  
EXCHANGE INTERACTION ANISOTROPY  
ON THE MAGNETIZATION PROCESS  
OF A FRUSTRATED DIAMOND CHAIN  
IN A STRONG MAGNETIC FIELD

S u m m a r y

A frustrated diamond spin chain in a  $z$ - or  $x$ -aligned external magnetic field has been considered in the framework of the spin- $\frac{1}{2}$  antiferromagnetic  $XXZ$  Heisenberg model. The magnetization process of the frustrated diamond spin chain is analyzed, by using the effective models found in the strong-coupling approximation in the case where the Heisenberg interaction anisotropy parameter  $\Delta > 1$ . The theory is applied to explain experimental data for natural mineral azurite,  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ .