

СПІН-1/2 АСИМЕТРИЧНИЙ РОМБІЧНИЙ ЛАНЦЮЖОК ІЗИНГА–ГАЙЗЕНБЕРГА

Б.М. ЛІСНИЙ

УДК 538.953, 538.955
©2011

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

Розглянуто основний стан і термодинаміку спін-1/2 асиметричного ромбічного ланцюжка Ізинга–Гайзенберга. Для XYZ анізотропної взаємодії Гайзенберга методом декораційно-ітераційного перетворення точно розраховано вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченість і магнітну сприйнятливість. У випадку антиферромагнітних взаємодій – Ізинга і XXZ анізотропної Гайзенберга – досліджено основний стан, процес намагнічування, температурну залежність намагніченості, магнітної сприйнятливості і теплоємності. Вивчено вплив геометричної фрустрації та квантових флуктуацій на ці характеристики.

У даній роботі розглянуто спін-1/2 асиметричний ромбічний ланцюжок Ізинга–Гайзенберга з XYZ анізотропною взаємодією Гайзенберга між декораційними спінами. Він має таку ж ромбічну структуру, як у роботі [9], і таку ж асиметрію взаємодії Ізинга на зв'язках вздовж сторін ромба, як у роботі [14]. Методом декораційно-ітераційного перетворення [1, 2] точно розраховано термодинамічні характеристики цього ланцюжка. Для антиферромагнітної взаємодії Ізинга і антиферромагнітної XXZ взаємодії Гайзенберга, коли система є геометрично фрустрована, досліджено основний стан, процес намагнічування, температурну залежність намагніченості, магнітної сприйнятливості та теплоємності. Вивчено вплив взаємодій Ізинга і Гайзенберга на ці характеристики.

1. Вступ

У статистичній фізиці зацікавлення викликають точно розв'язувані декоровані ланцюжки, структура яких утворюється декоруванням примітивної комірки спін-1/2 ланцюжка Ізинга. Точний розв'язок цих декорованих ланцюжків отримується методом декораційно-ітераційного перетворення [1, 2]. До них відносяться, зокрема, такі одновимірні моделі: спін- $(1/2, S > 1/2)$ [3], феромагнітний-феромагнітний-антиферомагнітний [4] і ромбічний [5] ланцюжки Ізинга, простий [6–8], ромбічний [9, 10], тетраедричний [11] і пілоподібний [12] ланцюжки Ізинга–Гайзенберга, ланцюжок Ізинга–Гайзенберга з трикутними плакетками Гайзенберга [13] і асиметричний ромбічний ланцюжок Ізинга–Габбарда [14, 15]. Декоровані ланцюжки є зручними об'єктами для вивчення появи проміжних плато в кривій намагнічування, появи додаткових максимумів у температурній залежності теплоємності, взаємовпливу геометричної фрустрації і квантових флуктуацій. Все це відбувається в реальних системах [7, 16, 17].

2. Точний розв'язок моделі

Розглянемо спін-1/2 асиметричний ромбічний ланцюжок Ізинга–Гайзенберга в магнітному полі. Примітивну комірку цього ланцюжка визначено вузлами k і $k+1$ (рис. 1). Їх займають так звані спіни Ізинга ($\hat{\mu}_k^z$), які взаємодіють з сусідами взаємодією Ізинга. Дві міжвузлові позиції $(k, 1)$ і $(k, 2)$ у примітивній комірці (рис. 1) займають так звані спіни Гайзенберга ($\hat{S}_{k,1}$ і $\hat{S}_{k,2}$), між якими діє взаємодія Гайзенберга. Гамільтоніан ланцюжка $\hat{\mathcal{H}}$ запишемо як суму коміркових гамільтоніанів $\hat{\mathcal{H}}_k$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k=1}^N \hat{\mathcal{H}}_k,$$

$$\hat{\mathcal{H}}_k = J_1 \hat{S}_{k,1}^x \hat{S}_{k,2}^x + J_2 \hat{S}_{k,1}^y \hat{S}_{k,2}^y + J_3 \hat{S}_{k,1}^z \hat{S}_{k,2}^z +$$

$$+ \hat{\mu}_k^z (I_1 \hat{S}_{k,1}^z + I_2 \hat{S}_{k,2}^z) + \hat{\mu}_{k+1}^z (I_2 \hat{S}_{k,1}^z + I_1 \hat{S}_{k,2}^z) - \frac{h_I}{2} (\hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z) - h_H (\hat{S}_{k,1}^z + \hat{S}_{k,2}^z), \quad (1)$$

де N – число примітивних комірок; $\hat{\mu}_k^z$, $\hat{S}_{k,i}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$; $i = 1, 2$) – компоненти спін-1/2 операторів; J_1, J_2, J_3 – параметри взаємодії Гайзенберга; I_1, I_2 – параметри взаємодії Ізинга на зв'язках вздовж сторін ромба (рис. 1); h_I і h_H – магнітні поля, які діють на спіни Ізинга і Гайзенберга відповідно. Відзначимо, що гамільтоніан (1) відповідає також простому ланцюжку Ізинга-Гайзенберга, в якому спін Ізинга взаємодіє з першими (I_1) і другими (I_2) сусідами. У часткових випадках $I_1 = I_2$ і $I_2 = 0$ (або $I_1 = 0$) гамільтоніан (1) відповідає розглянутим раніше ланцюжкам Ізинга-Гайзенберга: ромбічному [9] і простому [6, 8].

Знайдемо статистичну суму системи $\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}$, де $\beta = 1/k_B T$, k_B – стала Больцмана, T – абсолютна температура. Гамільтоніани $\hat{\mathcal{H}}_k$ комутують між собою, тому \mathcal{Z} частково факторизується:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{\hat{\mu}^z\}} \prod_{k=1}^N \text{Tr}_{\hat{S}_{k,1}, \hat{S}_{k,2}} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_k), \quad (2)$$

де $\text{Tr}_{\{\hat{\mu}^z\}}$ означає слід по станах всіх спінів Ізинга, а $\text{Tr}_{\hat{S}_{k,1}, \hat{S}_{k,2}}$ означає слід по станах двох спінів Гайзенберга з комірки k . Розрахуємо фактор

$$\mathcal{Z}_k(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z) = \text{Tr}_{\hat{S}_{k,1}, \hat{S}_{k,2}} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_k).$$

Для цього переходимо до матричного представлення гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}_k$ у базисі, який утворюють власні стани оператора $\hat{S}_{k,1}^z \hat{S}_{k,2}^z$:

$$|\uparrow(\downarrow), \uparrow(\downarrow)\rangle_{k,1;k,2} = |\uparrow(\downarrow)\rangle_{k,1} |\uparrow(\downarrow)\rangle_{k,2},$$

де $|\uparrow\rangle_{k,i}$ і $|\downarrow\rangle_{k,i}$ означають власні стани $\hat{S}_{k,i}^z$. Знаходимо власні значення матриці $\hat{\mathcal{H}}_k$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{1,2}(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z) &= \frac{J_3}{4} - \frac{h_I}{2} (\hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z) \pm \\ &\pm \sqrt{\frac{(J_1 - J_2)^2}{16} + \left(\frac{I_1 + I_2}{2} (\hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z) - h_H \right)^2}, \\ \mathcal{E}_{3,4}(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z) &= -\frac{J_3}{4} - \frac{h_I}{2} (\hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z) \pm \\ &\pm \sqrt{\frac{(J_1 + J_2)^2}{16} + \frac{(I_1 - I_2)^2}{4} (\hat{\mu}_k^z - \hat{\mu}_{k+1}^z)^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

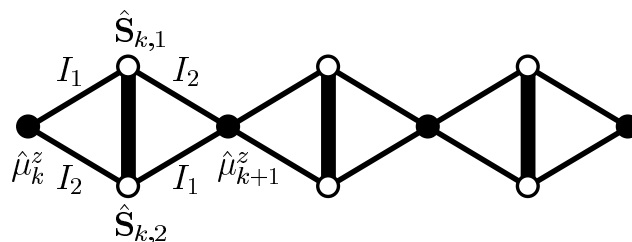


Рис. 1. Схематичне зображення фрагмента асиметричного ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга. Для примітивної комірки k вказано спіни $\hat{\mu}_k^z$ і $\hat{\mu}_{k+1}^z$ у вузлах і спіни $\hat{S}_{k,1}$ і $\hat{S}_{k,2}$ у міжвузлових позиціях. Також вказано параметри взаємодії Ізинга на зв'язках вздовж сторін ромба (I_1 і I_2), яка на різноорієнтованих зв'язках є різною

Отримуємо $\mathcal{Z}_k(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z) = \sum_{i=1}^4 e^{-\beta \mathcal{E}_i(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z)}$. Далі робимо декораційно-ітераційне перетворення [1, 2]:

$$\mathcal{Z}_k(\hat{\mu}_k^z, \hat{\mu}_{k+1}^z) = A \exp(\beta R \hat{\mu}_k^z \hat{\mu}_{k+1}^z + \beta h_0 (\hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z)/2),$$

де A , R і h_0 – параметри перетворення. Вони визначаються такими співвідношеннями:

$$A = (\mathcal{Z}_k(+, +) \mathcal{Z}_k(-, -) \mathcal{Z}_k^2(+, -))^{1/4},$$

$$\beta R = \ln \frac{\mathcal{Z}_k(+, +) \mathcal{Z}_k(-, -)}{\mathcal{Z}_k^2(+, -)}, \quad \beta h_0 = \ln \frac{\mathcal{Z}_k(+, +)}{\mathcal{Z}_k(-, -)},$$

в яких аргумент « \pm » означає $\pm 1/2$. За допомогою цього перетворення обчислення статистичної суми ланцюжка Ізинга-Гайзенберга (2) зводиться до обчислення статистичної суми спін-1/2 ланцюжка Ізинга з взаємодією R і полем h_0 . Використавши для неї відомий результат [18], отримуємо статистичну суму (2):

$$\mathcal{Z} = A^N (\lambda_1^N + \lambda_2^N),$$

де

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta R/4} \left(\text{ch}(\beta h_0/2) \pm \sqrt{\text{sh}^2(\beta h_0/2) + e^{-\beta R}} \right).$$

Далі знаходимо вільну енергію комірки в термодинамічній границі:

$$f = -\frac{1}{\beta} (\ln A + \ln \lambda_1).$$

З неї розраховуємо ентропію s і теплоємність c :

$$s = k_B \beta^2 \frac{\partial f}{\partial \beta}, \quad c = -\beta \frac{\partial s}{\partial \beta}.$$

Намагніченість спінів Ізинга $m_I = \langle \hat{\mu}_k^z + \hat{\mu}_{k+1}^z \rangle / 2$ і їхня кореляційна функція $q_{II}(n) = \langle \hat{\mu}_k^z \hat{\mu}_{k+n}^z \rangle$ є такі самі, як для спін-1/2 ланцюжка Ізинга з взаємодією R та полем h_0 [6, 8, 9]. Тому для них використовуємо відомі результати [18]. Намагніченість спінів Гайзенберга $m_H = \langle \hat{S}_{k,1}^z + \hat{S}_{k,2}^z \rangle / 2$ знаходимо диференціюванням статистичної суми (2) після застосування декораційно-ітераційного перетворення [8]:

$$m_H = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial h_H} + q_{II}(1) \frac{\partial(\beta R)}{\partial h_H} + m_I \frac{\partial(\beta h_0)}{\partial h_H} \right).$$

Маючи m_I і m_H , визначаємо сумарну намагніченість $m = (m_I + 2m_H)/3$.

Далі розраховуємо сприйнятливість на дію магнітного поля $h = h_I = h_H/r_g$, де r_g – це відношення g -фактора спіну Гайзенберга до g -фактора спіну Ізинга:

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{3} \left(\frac{\partial m_I}{\partial h_I} + \frac{\partial m_I}{\partial h_H} r_g \right) + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial m_H}{\partial h_I} + \frac{\partial m_H}{\partial h_H} r_g \right).$$

Отримані результати в часткових випадках $I_1 = I_2$ і $I_2 = 0$ (або $I_1 = 0$) узгоджуються з наявними результатами, відповідно, для ромбічного [9] і простого [6, 8] ланцюжків Ізинга–Гайзенберга.

3. Числові результати та їх обговорення

Розглянемо властивості системи з антиферромагнітною взаємодією Ізинга ($I_1, I_2 > 0$) і антиферромагнітною XXZ взаємодією Гайзенберга: $J_1 = J_2 = J\Delta$, $J_3 = J$, де Δ – параметр анізотропії взаємодії, $J > 0$. У цьому випадку система є геометрично фрустрована. Магнітні поля h_I і h_H виберемо однаковими: $h = h_I = h_H$, тобто беремо $r_g = 1$. Без втрати загальності приймаємо $I_1 \geq I_2$ і вводимо різницю параметрів взаємодії Ізинга $\Delta I = I_1 - I_2$ [14]. Переходимо до безрозмірних параметрів

$$\tilde{J} = \frac{J}{I_1}, \quad \Delta \tilde{I} = \frac{\Delta I}{I_1}, \quad \tilde{h} = \frac{h}{I_1}.$$

Параметр $\Delta \tilde{I}$ має фізичний зміст на проміжку $[0, 1]$ і характеризує ступінь асиметрії взаємодії Ізинга на зв'язках вздовж сторін ромба.

Спочатку розглянемо властивості основного стану системи. Він відповідає найменшій енергії $\tilde{\mathcal{E}}_i = \mathcal{E}_i/I_1$ спектра (3) для можливих конфігурацій $\hat{\mu}_k^z$ і $\hat{\mu}_{k+1}^z$. Залежно від параметрів \tilde{J} , Δ , $\Delta \tilde{I}$, \tilde{h} система може мати чотири основних стани: насичений парамагнітний

стан (SPA), феримагнітний стан (FRI), ненасичений парамагнітний стан (UPA) і вузловий антиферромагнітний стан (NAF). Енергії цих станів для вихідної комірки такі:

$$\tilde{\mathcal{E}}_{SPA} = \frac{\tilde{J}}{4} + 1 - \frac{\Delta \tilde{I}}{2} - \frac{3\tilde{h}}{2},$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{FRI} = \frac{\tilde{J}}{4} - 1 + \frac{\Delta \tilde{I}}{2} - \frac{\tilde{h}}{2},$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{UPA} = -\frac{\tilde{J}}{4} - \frac{\tilde{J}\Delta}{2} - \frac{\tilde{h}}{2},$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{NAF} = -\frac{\tilde{J}}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\tilde{J}^2 \Delta^2 + \Delta \tilde{I}^2}.$$

Хвильові функції цих станів такі:

$$|\text{SPA}\rangle = \prod_{k=1}^N |+\rangle_k | \uparrow, \uparrow \rangle_{k,1;k,2},$$

$$|\text{FRI}\rangle = \prod_{k=1}^N |-\rangle_k | \uparrow, \uparrow \rangle_{k,1;k,2},$$

$$|\text{UPA}\rangle = \begin{cases} \prod_{k=1}^N |+\rangle_k \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow, \downarrow \rangle - | \downarrow, \uparrow \rangle) \right]_{k,1;k,2} & \text{для } \Delta \neq 0, \\ \prod_{k=1}^N |+\rangle_k \left| \begin{smallmatrix} \uparrow, \downarrow \\ \downarrow, \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{k,1;k,2} & \text{для } \Delta = 0, \end{cases}$$

$$|\text{NAF}\rangle = \prod_{k=1}^N \left| (-)^{n=\{k}_{k+1}} \right\rangle_k \times \\ \times \left[A^{(-)^n} | \uparrow, \downarrow \rangle - A^{(-)^{n+1}} | \downarrow, \uparrow \rangle \right]_{k,1;k,2},$$

де вектори $|\pm\rangle_k$ описують стан спінів $\hat{\mu}_k^z$: $|+\rangle_k = | \uparrow \rangle_k$, $|-\rangle_k = | \downarrow \rangle_k$. Хвильові функції двічі виродженого стану NAF записано за допомогою виразу $(-)^n \in \{-, +\}$, який означає знак числа $(-1)^n$. Коефіцієнти A^\pm такі:

$$A^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \mp \frac{\Delta \tilde{I}}{\sqrt{\tilde{J}^2 \Delta^2 + \Delta \tilde{I}^2}}}.$$

У стані UPA при $\Delta = 0$ пара спінів $\hat{\mathbf{S}}_{k,1}$ і $\hat{\mathbf{S}}_{k,2}$ перебуває в одному з двох рівномірних станів $| \uparrow, \downarrow \rangle_{k,1;k,2}$

і $|\downarrow, \uparrow\rangle_{k,1;k,2}$. Тому цей стан макроскопічно вироджений і має залишкову ентропію $s_{\text{res}} = k_B \ln 2$.

Фазова діаграма основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ залежно від $\tilde{J}(1+\Delta)$ може мати топологію трьох типів (рис. 2). Фазова діаграма з топологією першого типу (рис. 2, *a*) містить стани FRI, NAF і SPA. Вона реалізується при $\tilde{J}(1+\Delta) \leq 1$. У нульовому полі стани FRI і NAF розділяє критична точка

$$\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}} = \frac{2 - \tilde{J}}{2} - \frac{\tilde{J}^2 \Delta^2}{2(2 - \tilde{J})}.$$

Зауважимо, що у стані FRI на зв'язку Гайзенберга проявляється ефект геометричної фрустрації: пара спінів Гайзенберга знаходиться у феромагнітному стані $|\uparrow, \uparrow\rangle_{k,1;k,2}$, який не відповідає мінімуму енергії $J\hat{S}_{k,1}^z \hat{S}_{k,2}^z$, а в стані NAF на цьому зв'язку проявляється ефект квантових флуктуацій: пара спінів Гайзенберга знаходиться у сплутаних станах $[A^\mp |\uparrow, \downarrow\rangle - A^\pm |\downarrow, \uparrow\rangle]_{k,1;k,2}$, в яких енергія $J\hat{S}_{k,1}^z \hat{S}_{k,2}^z$ – мінімальна. Фазова діаграма з топологією другого типу (рис. 2, *b*) містить всі основні стани й реалізується при $1 < \tilde{J}(1+\Delta) < 2$. Стани FRI і UPA розділяє лінія $\Delta\tilde{I} = \Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}$, де $\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}} = 2 - \tilde{J}(1+\Delta)$. Фазова діаграма з топологією третього типу (рис. 2, *c*) містить стани NAF, UPA і SPA. Вона реалізується при $2 \leq \tilde{J}(1+\Delta)$. Лінія переходу між станами NAF та UPA починається у точці $(0, 0)$. На рис. 2 видно, що інтервал $(0, \Delta\tilde{I}_{\text{F,N}})$, в якому на зв'язку Гайзенберга проявляється ефект геометричної фрустрації, зменшується до нуля внаслідок посилення квантових флуктуацій.

Стани SPA і FRI ідентичні, а стани UPA (крім випадку $\Delta = 0$) та NAF ізоморфні до відповідних станів асиметричного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда [14, 15]. Типові топології фазової діаграми основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ також такі самі, як для цього ланцюжка [14, 15]. Тому описані в роботі [15] особливості основного стану в критичних точках фазових діаграм $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ наявні у відповідних точках на рис. 2 при $\Delta \neq 0$. А при $\Delta = 0$ характеристики основного стану в тих критичних точках, де реалізується стан UPA, можуть мати інші значення, ніж при $\Delta \neq 0$. Зокрема, при $\Delta = 0$ в критичній точці $(0, 0)$ на рис. 2, *c* залишкова ентропія більша, ніж при $\Delta \neq 0$, а саме така: $s_{\text{res}} = k_B \ln 5$ для $\tilde{J} = 2$ і $s_{\text{res}} = k_B \ln 4$ для $\tilde{J} > 2$, коли основний стан фрустрований [15]. Крім цього, основний стан нашої системи має цікаві властивості при $\tilde{J} = 1$ і $\Delta = 0$ у критичній точці $(1, 1)$ на рис. 2, *a*. Тільки в цій критичній точці співіснують всі основні стани SPA, FRI, NAF і UPA. У ній також реалізується

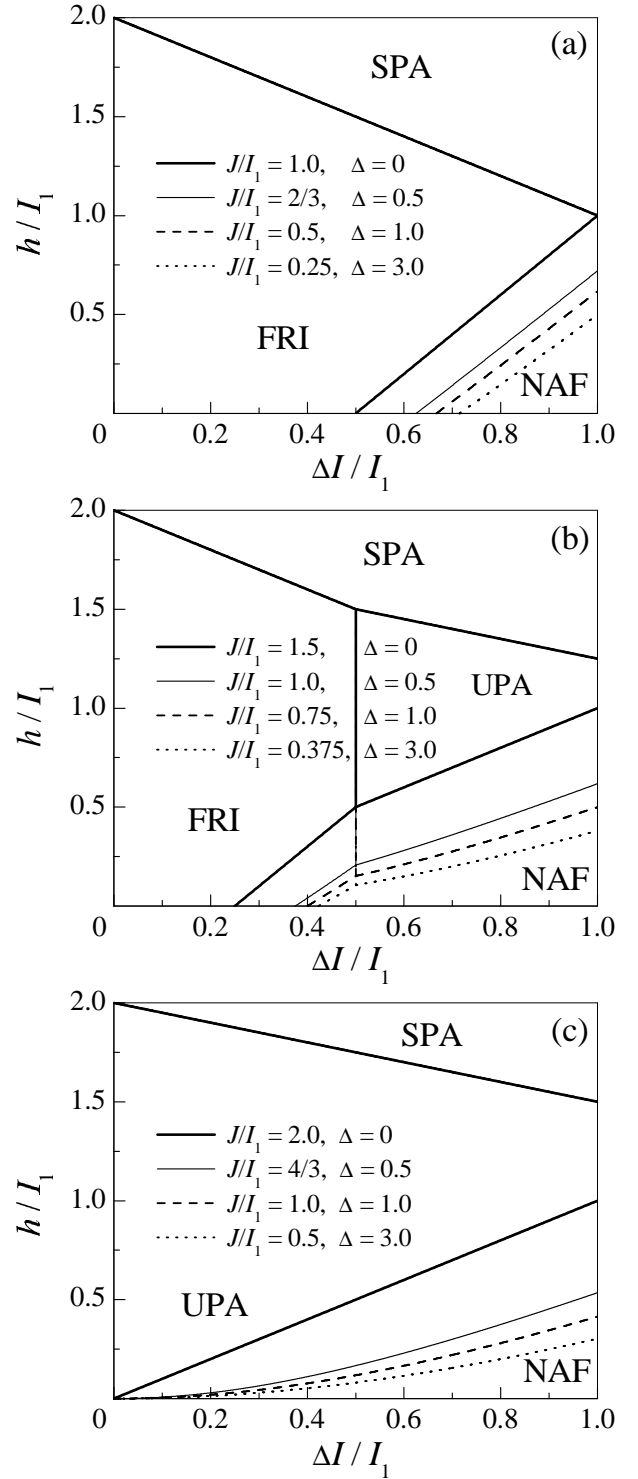


Рис. 2. Фазова діаграма основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ залежно від \tilde{J} і Δ . Наведено три характерні топології: *a*, *b*, *c*. У кожному випадку зображено лінії переходу для кількох наборів значень \tilde{J} і Δ

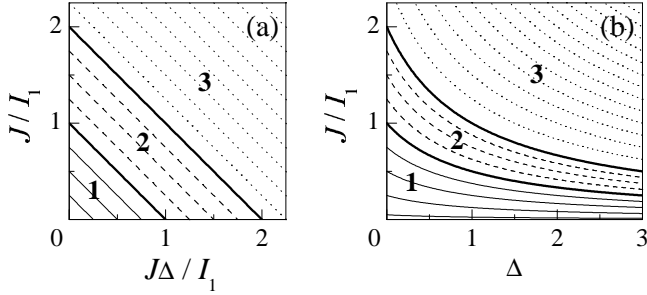


Рис. 3. Топологічні діаграми $(\tilde{J}\Delta, \tilde{J})$ (a) і (Δ, \tilde{J}) (b) фазової діаграми основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Вони вкриті “еквітопологічними” лініями (4). Товсті лінії задають границю між областями трьох типових топологій, які позначені відповідними цифрами

вузловий антиферромагнітний стан NAF_+ з енергією $\mathcal{E}_{\text{NAF}_+} = \tilde{J}/4 - \tilde{h}$ і хвильовою функцією

$$|\text{NAF}_+\rangle = \prod_{k=1}^N \left| (-)^n = \begin{cases} k \\ k+1 \end{cases} \right\rangle_k \left| \uparrow, \uparrow \right\rangle_{k,1;k,2}.$$

Підсистема Ізинга має такі характеристики:

$$\beta R = \ln \frac{3}{4}, \quad \beta h_0 = \ln 3, \quad m_I = \frac{m_s}{\sqrt{5}}, \quad q_{\text{II}}(n) = \frac{1 + 4(4\sqrt{5} - 9)^n}{20},$$

де $m_s = 1/2$ – намагніченість насичення. У цьому основному стані $R = h_0 = 0$, але спіни Ізинга не є ефективно вільними, оскільки температурна залежність R і h_0 має лінійну складову [15]. Цей основний стан має $s_{\text{res}} = k_B \ln(2 + \sqrt{5})$.

З фазових діаграм основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ на рис. 2 бачимо такі закономірності. Ромбічний ланцюжок Ізинга–Гайзенберга може мати основний стан NAF , коли в ланцюжку $\Delta\tilde{I} \neq 0$. Простий ланцюжок Ізинга–Гайзенберга може мати основний стан FRI в нульовому полі, коли в ланцюжку є достатньо сильна взаємодія спіну Ізинга з другими сусідами $(\Delta\tilde{I} < 1)$.

Тепер розглянемо вплив взаємодії Гайзенберга на фазову діаграму основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Зміна \tilde{J} і Δ за умови незмінності енергії \mathcal{E}_{UPA} відносно енергії \mathcal{E}_{FRI} (тоді вона буде також незмінною відносно енергії \mathcal{E}_{SPA}) викликає суттєво простішу перебудову фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$, ніж їхня незалежна зміна. Визначимо константу цієї умови у точці $(\tilde{J} = \tilde{J}^*, \Delta = 0)$, в якій взаємодія Гайзенберга перетворюється у взаємодію Ізинга \tilde{J}^* . У результаті цього зв'язок між \tilde{J} і Δ отримаємо в такому вигляді:

$$\tilde{J} + \tilde{J}\Delta = \tilde{J}^*. \quad (4)$$

Згідно з описаною вище залежністю топології фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ від взаємодії Гайзенберга в ре-

жимі (4) отримуємо топологічно еквівалентні фазові діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Зміну фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ в режимі (4) показано на рис. 2, де в кожному випадку a, b і c набори значень \tilde{J} та Δ відповідають певному \tilde{J}^* . Бачимо, що ця зміна полягає у зміщенні ліній переходів $\text{NAF} \leftrightarrow \text{FRI}$ і $\text{NAF} \leftrightarrow \text{UPA}$. На основі вищесказаного можна побудувати діаграму, яка відображає вплив взаємодії Гайзенберга на топологію фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Таку топологічну діаграму наведено на рис. 3, в двох площинах: $(\tilde{J}\Delta, \tilde{J})$ і (Δ, \tilde{J}) . На топологічній діаграмі $(\tilde{J}\Delta, \tilde{J})$ проілюстровано те, що топологія фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ залежить від ZZ - і XY -складової взаємодії Гайзенберга однаково.

Розглянемо процес намагнічування і термодинамічні характеристики залежно від температури та вплив на них асиметрії взаємодії Ізинга і параметрів взаємодії Гайзенберга в режимі (4). Для цього беремо набори значень \tilde{J} і Δ , для яких фазову діаграму основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ зображено на рис. 2, b . Сумарну намагніченість залежно від поля для різних температур і від температури для різних полів подано у двох характерних випадках: на рис. 4, коли FRI – основний стан в нульовому полі, і на рис. 5, коли NAF – основний стан в нульовому полі. Польова залежність сумарної намагніченості в нулі температури на рис. 4, a має проміжне плато $m/m_s = 1/3$, що відповідає основному стану FRI , а на рис. 5, a – два проміжних плато: $m/m_s = 0$, що відповідає основному стану NAF , і $m/m_s = 1/3$, що відповідає основному стану UPA . Намагніченість m/m_s на рис. 4, b в критичному полі переходу $\text{FRI} \leftrightarrow \text{SPA}$, з наближенням температури до нуля прямує до $2/3$. На рис. 5, b m/m_s у нижньому та верхньому критичних полях, які відповідають переходам $\text{NAF} \leftrightarrow \text{UPA}$ та $\text{UPA} \leftrightarrow \text{SPA}$, з наближенням температури до нуля прямує відповідно до $1/(3\sqrt{5})$ та $2/3$. Взаємодія Гайзенберга суттєво впливає на польову залежність m при низьких температурах у польовому проміжку, який належить області основного стану NAF і певній частині сусідньої області (рис. 5, a). Відповідно до цього її вплив також відчуває низькотемпературна залежність m для полів з цього проміжку (рис. 5, b). Внаслідок посилення квантових флуктуацій температура крива m зміщується вгору в області середніх і високих температур (рис. 4, b і 5, b). Цей приріст m є результатом зменшення m_I , внаслідок зменшення ефективного поля h_0 , і збільшення m_{II} , внаслідок відносного зростання енергій \mathcal{H}_k (3), які відповідають станам з нульовою намагніченістю спінів Гайзенберга.

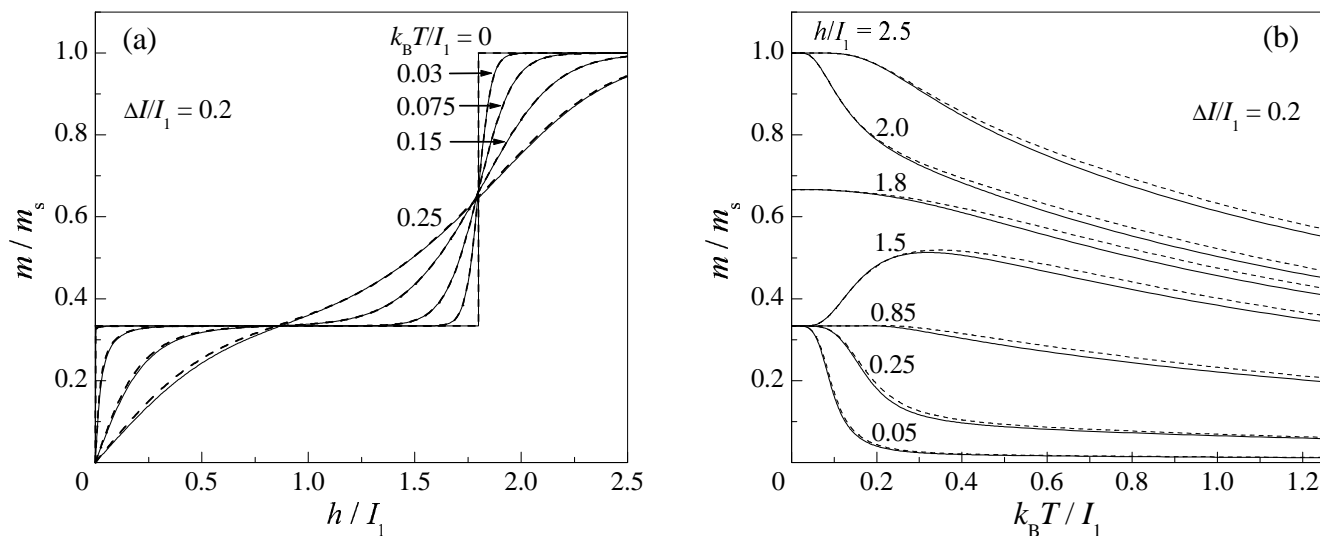


Рис. 4. Сумарна намагніченість залежно від поля для різних температур (a) і від температури для різних полів (b), коли FRI – основний стан у нульовому полі. Суцільними лініями зображено результати для $\tilde{J} = 1,0$ і $\Delta = 0,5$, штриховими лініями – результати для $\tilde{J} = 0,375$ і $\Delta = 3$

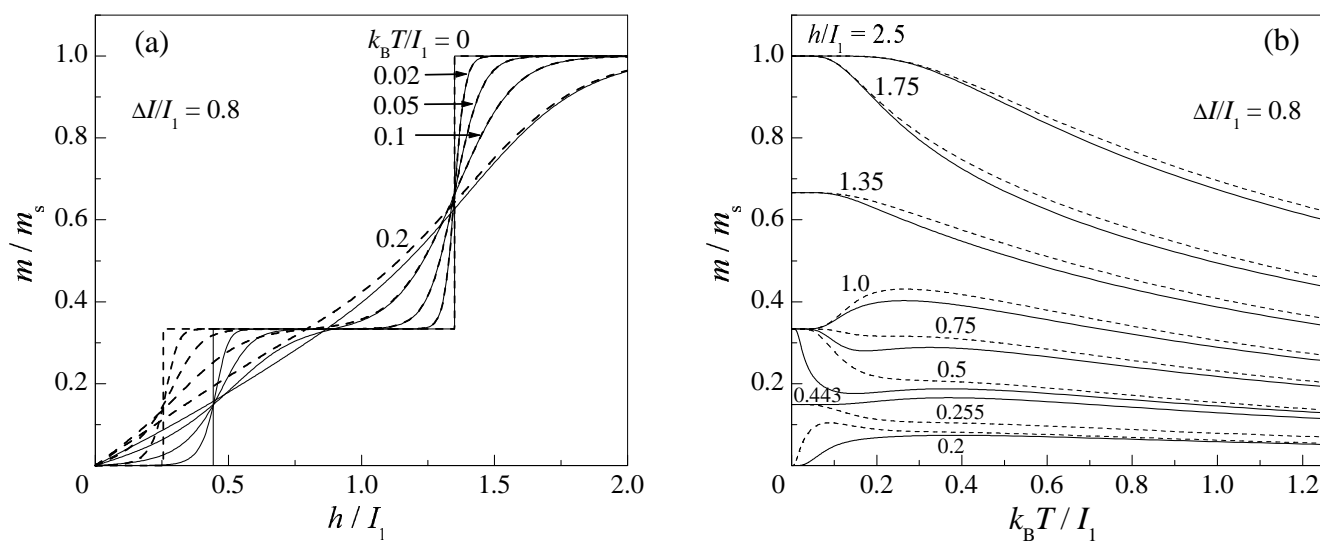


Рис. 5. Сумарна намагніченість в залежності від поля для різних температур (a) і від температури для різних полів (b), коли NAF – основний стан у нульовому полі. Суцільними лініями зображено результати для $\tilde{J} = 1,0$ і $\Delta = 0,5$, штриховими лініями – результати для $\tilde{J} = 0,375$ і $\Delta = 3$

Помножену на температуру магнітну сприйнятливості ($\chi k_B T$) залежно від температури при нульовому полі наведено на рис. 6. Коли FRI – основний стан у нульовому полі, ця залежність виглядає як для квантових феримагнетиків [19], коли NAF – основний стан у нульовому полі, вона має антиферромагнітний характер. Величина $\chi k_B T$ з наближенням температу-

ри до нуля або експоненційно розбігається, коли $\tilde{\Delta I}$ відповідає основному стану FRI, або експоненційно прямує до нуля, коли $\tilde{\Delta I}$ відповідає основному стану NAF, або виходить на $1/12$, коли $\tilde{\Delta I}$ знаходиться точно в критичній точці $\tilde{\Delta I}_{F,N}$. Низькотемпературна залежність $\chi k_B T$ сильно реагує на зміну інтенсивності квантових флуктуацій, коли $\tilde{\Delta I}$ знаходиться в

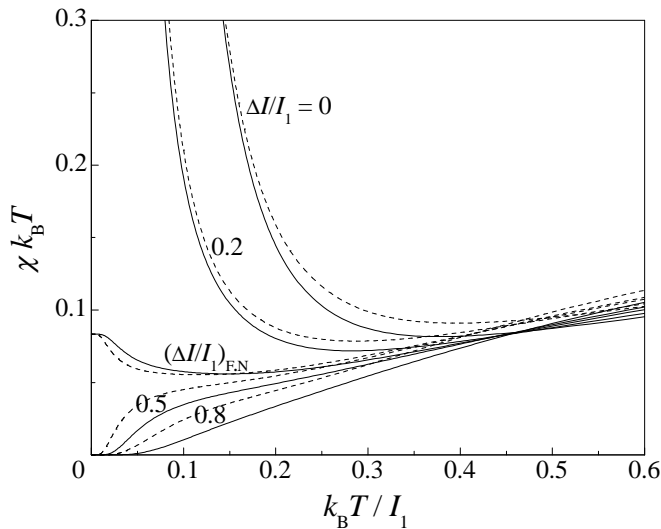


Рис. 6. Помножена на температуру магнітна сприйнятливості залежно від температури при нульовому полі. Суцільними лініями зображено результати для $\tilde{J} = 1, 0$ і $\Delta = 0, 5$, штриховими лініями – результати для $\tilde{J} = 0, 375$ і $\Delta = 3$

певному околі критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ або вище від неї (рис. 6). Високотемпературна залежність $\chi k_B T$ з посиленням квантових флуктуацій зміщується до вищої сприйнятливості.

Температурна залежність теплоємності в нульовому полі для певного проміжку $\Delta\tilde{I}$, який розширюється з посиленням квантових флуктуацій, має два максимуми: головний і низькотемпературний (рис. 7). Зокрема, при $\Delta = 0$ вона має два максимуми для $\Delta\tilde{I} \in (0, 16; 0, 31)$, а поза цим інтервалом – один високий низькотемпературний максимум, який суттєво змінюється з появою слабких квантових флуктуацій (рис. 7). Посилення слабких квантових флуктуацій веде до значного збільшення висоти головного максимуму і зниження його температури, але подальше їх посилення – навпаки, веде до зменшення висоти головного максимуму і підвищення його температури (рис. 7). У результаті зростання $\Delta\tilde{I}$ на інтервалі $(0, \Delta\tilde{I}_{F,N})$ зменшується висота головного максимуму і зростає його температура, а на інтервалі $(\Delta\tilde{I}_{F,N}, 1)$ все відбувається навпаки. Низькотемпературний максимум зумовлюють в основному теплові збудження, які відповідають за переходи між трьома станами FRI, NAF і UPA. Його висота і температура значно змінюються внаслідок зміни сили квантових флуктуацій, коли $\Delta\tilde{I}$ лежить у певному околі критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ або вище неї (рис. 7). При зростанні $\Delta\tilde{I}$ його температура відчутно спадає для $\Delta\tilde{I} < \Delta\tilde{I}_{F,N}$ і зростає для $\Delta\tilde{I} > \Delta\tilde{I}_{F,N}$. Коли

$\Delta\tilde{I}$ попадає в достатньо малий окіл критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$, теплове збудження, що відповідає енергії переходу FRI \leftrightarrow NAF, зумовлює утворення додаткового низькотемпературного максимуму біля нуля температури. Утворення і еволюція цього максимуму залежно від $\Delta\tilde{I}$ відбувається аналогічно, як в теплоємності асиметричного ромбічного ланцюжка Ізинга–Габбарда [15].

4. Висновки

У цій статті досліджено основний стан і термодинаміку спінів-1/2 асиметричного ромбічного ланцюжка Ізинга–Гайзенберга. Для XYZ анізотропної взаємодії Гайзенберга методом декораційно-ітераційного перетворення точно розраховано вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченості спінів Ізинга і спінів Гайзенберга, магнітну сприйнятливості. У випадку антиферромагнітної взаємодії Ізинга і антиферромагнітної XXZ взаємодії Гайзенберга, коли система геометрично фрустрована, досліджено основний стан, польову і температурну залежності намагніченості, температурну залежність в нульовому полі магнітної сприйнятливості та теплоємності. Вивчено вплив параметра асиметрії взаємодії Ізинга ($\Delta\tilde{I}$) і параметрів взаємодії Гайзенберга (\tilde{J} і Δ) в режимі $\tilde{J} + \tilde{J}\Delta = \text{const}$ (4) на ці характеристики.

Досліджена геометрично фрустрована система має чотири основних стани: SPA, FRI, UPA, NAF. Її фазова діаграма основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ має три типові топології. Це аналогічно для асиметричного ромбічного ланцюжка Ізинга–Габбарда [14, 15]. Зміна параметрів взаємодії Гайзенберга у режимі (4) не змінює топологію фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$, а лише зміщує на ній межі області основного стану NAF. Залежність топології фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ від взаємодії Гайзенберга зображено топологічними діаграмами $(\tilde{J}\Delta, \tilde{J})$ і (Δ, \tilde{J}) . Показано, що в нулі температури на зв'язку Гайзенберга достатньо сильні квантові флуктуації усувають ефект геометричної фрустрації.

Посилення квантових флуктуацій веде до збільшення сумарної намагніченості та намагніченості спінів Гайзенберга і до зменшення намагніченості спінів Ізинга в області середніх та високих температур. При цьому зростає магнітна сприйнятливості в нульовому полі. Температурна залежність теплоємності у нульовому полі для певного проміжку $\Delta\tilde{I}$, що розширюється з посиленням квантових флуктуацій, має головний і низькотемпературний максимуми. Їхня висота й температура можуть сильно змінюватись залежно

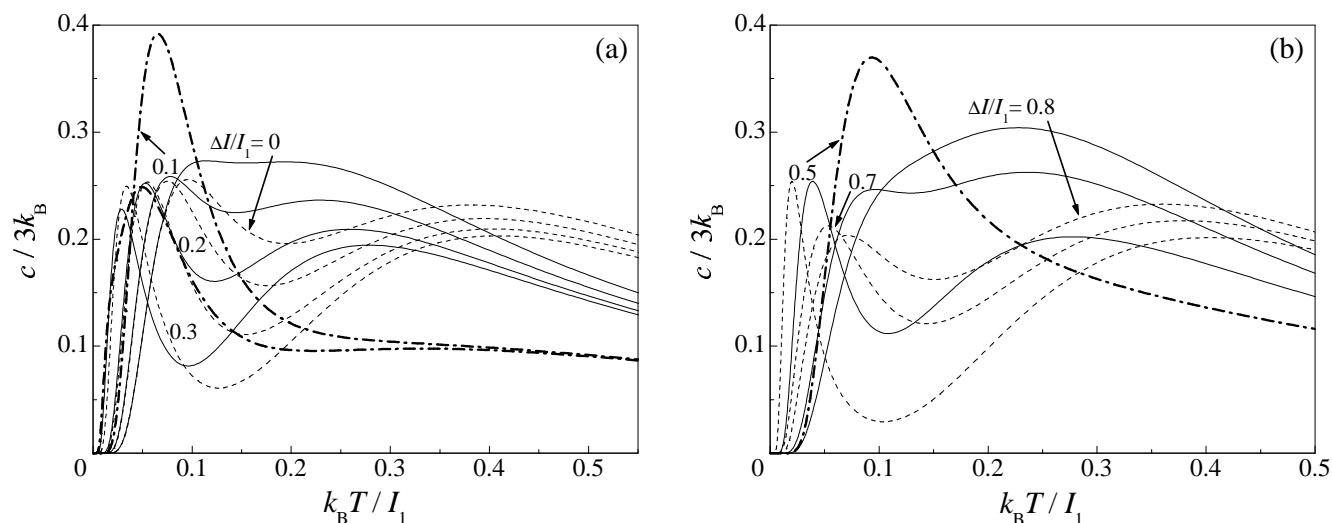


Рис. 7. Температурна залежність теплоємності в нульовому полі: *a* – відповідає $\Delta\tilde{I} < \Delta\tilde{I}_{F,N}$, *b* – $\Delta\tilde{I} > \Delta\tilde{I}_{F,N}$. Штрих пунктирними лініями зображено результати для $\tilde{J} = 1, 5$ і $\Delta = 0$, суцільними лініями – результати для $\tilde{J} = 1, 0$ і $\Delta = 0, 5$, штриховими лініями – результати для $\tilde{J} = 0, 375$ і $\Delta = 3$

від сили квантових флуктуацій, а також відчутно змінюватись залежно від $\Delta\tilde{I}$. Коли $\Delta\tilde{I}$ знаходиться в достатньо малому околі критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$, теплоємність має другий низькотемпературний максимум, який зумовлений переходом між станами FRI і NAF.

Отримані результати стосуються також простого ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, в якому спіні Ізинга взаємодіє з першими і другими сусідами. Ці результати в граничних випадках $I_1 = I_2$ ($\Delta\tilde{I} = 0$) і $I_2 = 0$ ($\Delta\tilde{I} = 1$) відповідають розглянутим раніше ромбічному [9] і простому [6, 8] ланцюжкам Ізинга-Гайзенберга.

Автор вдячний доктору фізико-математичних наук О.В. Держку і кандидату фізико-математичних наук Т.М. Верхоляку за обговорення та корисні зауваження.

1. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. **6**, 341 (1951).
2. M. Fisher, Phys. Rev. **113**, 969 (1959).
3. T. Kaneyoshi, Prog. Theor. Phys. **97**, 407 (1997).
4. V.R. Ohanyan and N.S. Ananikian, Phys. Lett. A **307**, 76 (2003).
5. J.S. Valverde, Onofre Rojas, and S.M. de Souza, Physica A **387**, 1947 (2008).
6. J. Strečka and M. Jaščur, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 4519 (2003).
7. J. Strečka, M. Jaščur, M. Hagiwara, K. Minami, Y. Narumi, and K. Kindo, Phys. Rev. B **72**, 024459 (2005).

8. Б.М. Лісний, УФЖ **53**, 712 (2008); В.М. Lisnii, Ukr. J. Phys. **53**, 708 (2008).
9. L. Čanová, J. Strečka, and M. Jaščur, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 4967 (2006).
10. L. Čanová, J. Strečka, and T. Lučivjanský, Condens. Matter Phys. **12**, 353 (2009).
11. J.S. Valverde, Onofre Rojas, and S.M. de Souza, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 345208 (2008).
12. V. Ohanyan, Condens. Matter Phys. **12**, 343 (2009).
13. D. Antonosyan, S. Bellucci, and V. Ohanyan, Phys. Rev. B **79**, 014432 (2009).
14. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra, Phys. Rev. B **77**, 024402 (2008).
15. Б.М. Лісний, ФНТ **37**, 380 (2011); В.М. Lisnii, Low Temp. Phys. **37**, 296 (2011).
16. 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).
17. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, Prog. Theor. Phys. Suppl. **159**, 1 (2005).
18. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике (Мир, Москва, 1985); R.J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics (Academic Press, London, 1982).

19. S. Yamamoto, Phys. Rev. B **59**, 1024 (1999).

Одержано 12.04.11

СПИН-1/2 АСИММЕТРИЧНАЯ РОМБИЧЕСКАЯ
ЦЕПОЧКА ИЗИНГА–ГАЙЗЕНБЕРГА

В.М. Лисний

Р е з ю м е

Рассмотрено основное состояние и термодинамику спин-1/2 асимметричной ромбической цепочки Изинга–Гайзенберга. Для XYZ анизотропного взаимодействия Гайзенберга методом декорационно-итерационного преобразования точно рассчитана свободная энергия, энтропия, теплоемкость, намагниченность и магнитная восприимчивость. В случае антиферромагнитных взаимодействий – Изинга и XXZ анизотропного Гайзенберга – исследованы основное состояние, процесс намагничивания, температурная зависимость намагниченности, магнитной восприимчивости и теплоемкости. Изучено влияние геометрической фрустрации и квантовых флуктуаций на эти характеристики.

SPIN-1/2 ASYMMETRIC DIAMOND ISING–HEISENBERG
CHAIN

B.M. Lisniı

Institute for Condensed Matter Physics,
Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(1, Svetsits'kyi Str., Lviv 79011, Ukraine;
e-mail: lisnyj@icmp.lviv.ua)

S u m m a r y

The ground state and the thermodynamics of a spin-1/2 asymmetric diamond Ising–Heisenberg chain are considered. For the XYZ anisotropic Heisenberg interaction, the exact calculations of the free energy, entropy, heat capacity, magnetization, and magnetic susceptibility are performed using the method of decoration-iteration transformation. In the case of antiferromagnetic interactions (Ising and XXZ anisotropic Heisenberg ones), the ground state, magnetization process, temperature dependence of the magnetization, magnetic susceptibility, and heat capacity are investigated. The influence of geometric frustration and quantum fluctuations on these characteristics is studied.