ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2015, том 79, № 6, с. 811–813

УДК 538.931

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА 1*D*-МАГНЕТИКА С ЧЕРЕДУЮЩИМИСЯ ВЗАИМНО ОРТОГОНАЛЬНЫМИ ПЛОСКОСТЯМИ ЛЕГКОГО НАМАГНИЧИВАНИЯ

© 2015 г. В. В. Вальков[1], М. С. Шустин[2]
E-mail: vvv@iph.krasn.ru, mshustin@yandex.ru

Методом диаграммной техники в атомном представлении вычислен спектр возбуждений четырехподрешеточной ферримагнитной цепочки Гейзенберга с чередующимися, взаимно ортогональными плоскостями легкого намагничивания. Показано, что при низких температурах спектр элементарных возбуждений системы близок к спектру магнетика с эффективной анизотропией типа "легкая ось", направленной вдоль линии пересечения плоскостей легкого намагничивания.

DOI: 10.7868/S036767651506037X

ВВЕДЕНИЕ

Недавно был синтезирован квазиодномерный магнетик *catena*-$[Fe^{II}(ClO_4)_2\{Fe^{III}(bpca)_2\}](ClO_4)$ (далее *SCM-catena*) с чередующимися низкоспиновыми ($S = 1/2$) и высокоспиновыми ($S = 2$) состояниями магнитоактивных ионов железа. Магнитные состояния высокоспиновых ионов формируются при участии сильной одноионной анизотропии типа "легкая плоскость" [1], ориентация которой меняется при переходе от одного высокоспинового иона железа к другому (рис. 1). При этом экспериментальные исследования [2] показывают, что данное соединение проявляет свойства, характерные для магнетиков с анизотропией типа "легкая ось". В этой связи представляется актуальным выяснение причины такого расхождения. В данной работе решение поставленной задачи осуществлено на основе микроскопического расчета спектра возбуждений анизотропного четырехподрешеточного *SCM-catena* и установления соответствия со спектром возбуждения легкоосного ферримагнетика.

ГАМИЛЬТОНИАН *SCM-catena*

Магнитные свойства одноцепочечного магнетика *SCM-catena*, магнитная структура которого изображена на рис. 1, будем описывать в рамках модели ферримагнитной гейзенберговской цепочки с одноионной анизотропией типа "легкая плоскость":

$$\begin{gathered} H_G = \\ = J\sum_f\left[\vec{S}_{f,A}\vec{S}_{f,B}+\vec{S}_{f,B}\vec{S}_{f,C}+\vec{S}_{f,C}\vec{S}_{f,D}+\vec{S}_{f,D}\vec{S}_{f+1,A}\right]+ \\ +2D\sum_f\left[\left(S^x_{f,A}\right)^2+\left(\left(S^y_{f,C}\right)^2\right)\right]- \\ -h\left(g_1\left(S^z_{f,A}+S^z_{f,C}\right)+g_2\left(S^z_{f,B}+S^z_{f,D}\right)\right), \end{gathered} \tag{1}$$

где $\vec{S}_{f,A}$ и $\vec{S}_{f,C}$ — векторные операторы спиновых моментов ионов железа в высокоспиновых (*HS*) состояниях со спином $S = 2$, принадлежащих маг-

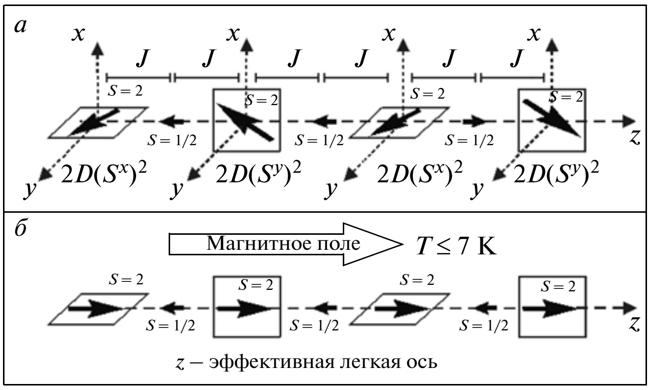

Рис. 1. *а* — Взаимная ориентация плоскостей легкого намагничивания *SCM-catena*; *б* — реализуемый в четырехподрешеточном ферримагнетике при $T \leq 7$ К ближний порядок. Принята следующая последовательность обозначений подрешеток в элементарной ячейке: *A–B–C–D*.

[1] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики имени Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск.
[2] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Сибирский федеральный университет", Россия.

нитной ячейке f (ячейка содержит четыре магнитных иона) и находящихся в позициях A и C. Эти ионы подвержены действию одноионной анизотропии типа “легкая плоскость”. Интенсивность анизотропии определяется параметром D. Существенно, что ориентация направления плоскостей легкого намагничивания изменяется при переходе от одного HS-иона железа к другому: для ионов железа в позициях A плоскостью легкого намагничивания является плоскость $Y0Z$, тогда как для ионов железа в позициях C – плоскость $X0Z$; $\vec{S}_{f,B}$ и $\vec{S}_{f,D}$ – векторные операторы спиновых моментов ионов железа в низкоспиновых (LS) состояниях со спином $S = 1/2$, принадлежащих магнитной ячейке f и находящихся в позициях B и D; h – внешнее магнитное поле в энергетических единицах, g_1 и g_2 – g-факторы для HS- и LS-ионов соответственно. J – интеграл обмена между ближайшими соседними ионами. Из экспериментальных данных известно, что $J \approx 20$ K, а $D \approx 7$ K [2].

При вычислении низкотемпературного спектра возбуждений учтем, что при $T \le 7$ K в соединении *SCM-catena* реализуется экспериментально наблюдаемый ближний ферримагнитный порядок (рис. 1*б*) [2]. Примем, что спонтанная намагниченность всех ионов ориентирована вдоль оси z. После включения эффектов самосогласованного поля, гамильтониан системы запишется в виде

$$H_G = \sum_{f\in A} H_{0,A}(f) + \sum_{g\in B} H_{0,B}(g) + \\ + \sum_{k\in C} H_{0,C}(k) + \sum_{l\in D} H_{0,D}(l) + H_{corr}, \tag{2}$$

где одноионные операторы для четырех введенных подрешеток имеют вид

$$H_{0,A}(f) = D\left(S_f^x\right)^2 - \bar{h}_1 g_1 S_f^z;\quad H_{0,B}(g) = -\bar{h}_2 g_2 S_g^z; \\ H_{0,C}(k) = D\left(S_k^y\right)^2 - \bar{h}_1 g_1 S_k^z;\quad H_{0,D}(l) = -\bar{h}_2 g_2 S_l^z; \\ \bar{h}_1 = h + 2J\sigma;\quad \bar{h}_2 = h - 2J\tilde{S}. \tag{3}$$

При записи (3) для магнитного упорядочения, показанного на рис. 1, были введены обозначения $\tilde{S} = \left\langle S_{f,A}^z \right\rangle = \left\langle S_{f,C}^z \right\rangle$ и $\sigma = -\left\langle S_{f,B}^z \right\rangle = -\left\langle S_{f,D}^z \right\rangle$.

Слагаемое H_{corr} в (2) при использовании циркулярных спиновых операторов и введении трехкомпонентного оператора $\vec{u} = \left\{S^z, S^+, S^-\right\}$ может быть записано в виде

$$H_{corr} = J\sum_{\langle fg\rangle}\left(\Delta\vec{u}_f, V\Delta\vec{u}_g\right) + J\sum_{\langle gk\rangle}\left(\Delta\vec{u}_g, V\Delta\vec{u}_k\right) + \\ + J\sum_{\langle kl\rangle}\left(\Delta\vec{u}_k, V\Delta\vec{u}_l\right) + J\sum_{\langle lf\rangle}\left(\Delta\vec{u}_l, V\Delta\vec{u}_f\right), \tag{4}$$

где $\Delta\vec{u} = \vec{u} - \langle\vec{u}\rangle$, $f \in A$, $g \in B$, $k \in C$, $l \in D$. Матрица V в случае изотропного обменного взаимодействия между ближайшими магнитными ионами имеет компоненты: $V = [1,\ 0,\ 0;\ 0,\ 0,\ 1/2;\ 0,\ 1/2,\ 0]$.

Для вычисления спектра возбуждений воспользуемся идеологией атомного представления, позволяющего корректно учитывать сильную одноионную анизотропию [3]. Ведение атомного представления предполагает диагонализацию гамильтониана $H_{0,A}(f)$. Решение такой задачи удобно осуществлять методом унитарных преобразований группы $U(N)$ [4]. При этом получаем систему уравнений самосогласования для нахождения параметров преобразования и эффективных полей:

$$\tilde{S}(\sigma) = 2\cos^2\beta\cos 2\alpha;\quad \sigma(\tilde{S}) = \frac{1}{2}\operatorname{th}\left(\frac{\bar{h}_2}{2T}\right). \tag{5}$$

$$2\bar{h}_1\sin 2\beta\cos\beta + \sqrt{6}D(\cos\alpha - \sin\alpha)\sin\beta = 0, \\ \left(2D + \bar{h}_1\cos 2\alpha\right)\sin 2\beta + \\ + \sqrt{6}D(\cos\alpha + \sin\alpha)\cos 2\beta = 0. \tag{6}$$

СПЕКТР ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Введем построенные на операторах Хаббарда $X_{fi}^{nm} = \left|\Psi_{fi}^n\right\rangle\left\langle\Psi_{fi}^m\right|$ функции Грина в атомном представлении $D_{nm;pq}(fi\tau; f'j\tau') = -\left\langle T_\tau \tilde{X}_{fi}^{nm}(\tau)\tilde{X}_{f'j}^{pq}(\tau')\right\rangle$. Здесь i и j – индексы подрешеток, а функции $\left|\Psi_{fi}^n\right\rangle$ определяются из решения уравнения Шрёдингера для одноионной задачи для каждого иона.

Вывод уравнения Ларкина, позволяющего получать дисперсионное уравнение для анизотропных магнетиков, подробно изложен в [3, 4]. В основе решения системы большого числа линейных уравнений лежит использование расщепленного по индексам корневых векторов характера матричных элементов в атомном представлении. Обобщая такой подход на случай четырех подрешеток, получим, что спектр элементарных возбуждений *SCM-catena* определяется уравнением

$$\Delta(q,\omega) = \det\left\|\left[\hat{U}(\omega),\ \hat{0},\ \hat{0};\ \hat{0},\ \hat{\Phi}(\omega),\ \hat{W}(\omega);\ \hat{0}, \hat{W}(\omega), \hat{\Phi}(-\omega)\right]\right\| = 0, \tag{7}$$

где $\hat{0}$ – трехмерная нулевая матрица. Матрицы $\hat{U}(\omega)$ и $\hat{W}(\omega)$ имеют вид

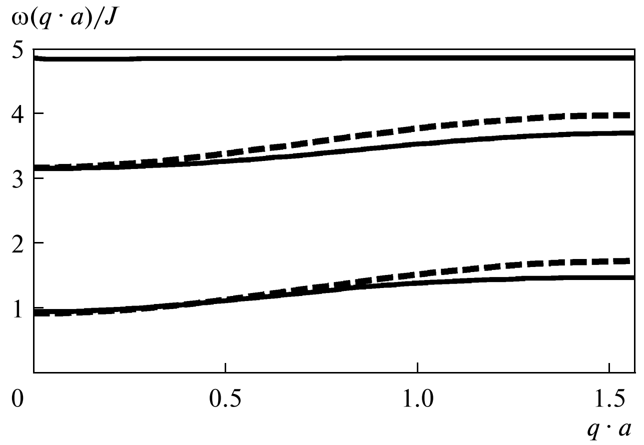

Рис. 2. Низкотемпературный спектр элементарных возбуждений четырехподрешеточного ферримагнетика *SCM-catena* при $D = J/3$ (сплошные линии). Пунктирными линиями показан спектр возбуждений, полученный для ферримагнетика, в котором анизотропия с чередующимися ориентациями плоскостей легкого намагничивания заменена на эффективную легкоосную анизотропию с $D_{ef} = -J/8$.

$$\hat{U}(\omega) = J\begin{pmatrix} -1 & u_A(\omega) & 0 & u_A(\omega)e^{-4iq} \\ u_B(\omega) & -1 & u_B(\omega) & 0 \\ 0 & u_A(\omega) & -1 & u_A(\omega) \\ u_B(\omega)e^{4iq} & 0 & u_B(\omega) & -1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{W}(\omega) = \frac{J}{2}\begin{pmatrix} 0 & w(\omega) & 0 & w(\omega)e^{-4iq} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -w(\omega) & 0 & -w(\omega) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$u_{A,B}(\omega) = \sum_{\alpha\in A,B} |\gamma_{\parallel}(\alpha)|^2 \left(\omega + \vec{\alpha}\vec{E}\right)^{-1} b(\vec{\alpha}),$$

$$z_{A,B}(\omega) = \sum_{\alpha\in A,B} |\gamma_{\perp}(\alpha)|^2 \left(\omega + \vec{\alpha}\vec{E}\right)^{-1} b(\vec{\alpha}); \quad (8)$$

$$w(\omega) = \sum_{\alpha\in A} \gamma_{\perp}(\alpha)\gamma_{\perp}(-\alpha)\left(\omega + \vec{\alpha}\vec{E}^{(HS)}\right)^{-1} b(\vec{\alpha}),$$

где $\gamma_{\parallel}(\alpha)$ и $\gamma_{\perp}(\alpha)$ – соответственно продольные и поперечные параметры представления спиновых операторов через операторы Хаббарда. Матрица $\hat{U}(\omega)$ определяет продольные ветви элементарных возбуждений рассматриваемого магнетика. Матрица $\hat{\Phi}(\omega)$, отвечающая, наряду с матрицей $\hat{\Phi}(-\omega)$, за поперечные ветви спектра элементарных возбуждений, может быть получена из матрицы $\hat{U}(\omega)$ путем замены: $J \to J/2$ и $u_{A,B}(\omega) \to z_{A,B}(\omega)$.

Результаты численного решения уравнения (7) при $T \ll J$ представлены на рис. 2. Сплошные линии отражают квазиимпульсные зависимости ветвей спектра возбуждений *SCM-catena*. Пунктирными линиями представлены квазиимпульсные зависимости ветвей спектра для эффективной модели ферримагнитной цепочки гейзенберга с одноионной анизотропией типа “легкая ось”. При этом принималось, что $D \to D_{ef} = -J/8$, а операторные выражения $D\left(S_f^x\right)^2$ и $D\left(S_k^y\right)^2$ заменяли на $D_{ef}\left(S_f^z\right)^2$ и $D_{ef}\left(S_k^z\right)^2$. Из сравнения этих зависимостей следует, что в области низких температур *SCM-catena* действительно проявляет свойства, характерные для легкоосного ферримагнетика.

ВЫВОДЫ

Представленные результаты показывают, что при низких температурах спектр возбуждений *SCM-catena* соответствует спектру 1*D*-ферримагнетика с эффективной осью легкого намагничивания, направленной вдоль оси цепочки. Для обеих моделей спектр возбуждений характеризуется наличием щели величиной $\Delta \sim J$ и небольшой относительно Δ дисперсией основных ветвей возбуждений. Это означает, что на качественном уровне энергетическая структура одномерного четырехподрешеточного ферримагнетика с чередующимися ориентациями плоскостей легкого намагничивания для высокоспиновых ионов железа воспроизводится одночастичным спектром возбуждений ферримагнитной изинговской цепочкой для которой $\Delta = 2JS_1S_2$, а дисперсия ветвей полностью отсутствует. Этот важный вывод позволяет перейти к исследованию термодинамических свойств *SCM-catena* во всем температурном интервале на основе точного вычисления статистической суммы для одномерной модели Изинга с несколькими подрешетками методом трансфер-матрицы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 13-02-00523, 13-02-98013, 14-02-31237).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kajiwara T., Nakano M., Kaneko Y., Takaishi S., Ito T., Yamashita M., Igashira-Kamiyama A., Nojiri H., Ono Y., Kojim N.* // J. Amer. Chem. Soc. 2005. V. 127. P. 10150.
2. *Kajiwara T., Tanaka H., Yamashita M.* // Pure Appl. Chem. 2008. V. 80. P. 2297 .
3. *Вальков В.В., Валькова Т.А., Овчинников С.Г.* // ЖЭТФ. 1985. V. 88. P. 550.
4. *Вальков В.В., Валькова Т.А.* // ТМФ. 1988. V. 76. P. 143.