

УДК 538.931

ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ МЕЖУЗЕЛЬНОГО ОТТАЛКИВАНИЯ НА КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ И ТЕРМОДИНАМИКУ ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ С ОТОЖЖЕННЫМ МАГНИТНЫМ БЕСПОРЯДКОМ

© 2016 г. В. В. Вальков^{1, *}, М. С. Шустин^{1, 2, **}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт физики имени Л.В. Киренского” СО РАН, Красноярск

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
“Сибирский федеральный университет”, Красноярск

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

**E-mail: mshustin@yandex.ru

Используя технику трансфер-матрицы, получено точное решение для модели, описывающей равновесное поведение ансамбля изинговских цепочек с немагнитным межузельным отталкиванием между ближайшими соседями и равновесно распределенными немагнитными примесями. Показана возможность реализации в системе квантовых фазовых переходов по параметру межузельного отталкивания, близость к критическим точкам которых существенно сказывается на температурной зависимости магнитной восприимчивости системы.

DOI: 10.7868/S0367676516110338

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы стали активно синтезировать и исследовать низкоразмерные магнитные структуры [1], в частности органические сильно-анизотропные одноцепочечные магнетики (*single-chain magnet, SCM*) [2, 3]. При низких температурах данные соединения характеризуются медленной динамикой намагниченности и рассматриваются в качестве перспективных материалов для создания элементной базы устройств памяти. При их экспериментальном исследовании значительная информация о характере магнитных взаимодействий извлекается из измерений температурной зависимости статической магнитной восприимчивости. Эффективной низкоэнергетической моделью для описания магнитных свойств таких соединений является 1D-модель Изинга и ее обобщения. При этом недавно были синтезированы одноцепочечные магнетики, способные изменять свое магнитное состояние при приложении внешнего облучения [2, 3]. Предполагается, что в таких соединениях фотоиндуцированное изменение состояний магнитных центров связано с фотоиндуцированным изменением состояний электронной подсистемы. Поскольку характерные времена динамики магнитной подсистемы в *SCM* обычно сравнимы или значительно превышают характерные времена динамики электронной подсистемы, принято счи-

тать, что магнитные ионы, находящиеся в фотоиндуцированных состояниях, реализуют в системе “отожженный” тип магнитного беспорядка [4]. В этой связи представляется актуальным исследование влияния магнитного беспорядка и межузельных корреляций на температурную зависимость магнитной восприимчивости одноцепочечных магнетиков. В работе решение такой задачи осуществлено в рамках модели, описывающей равновесный ансамбль изинговских цепочек с отожженными магнитными вакансиями и межузельным отталкиванием между ближайшими магнитными узлами.

МОДЕЛЬ И ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим равновесный ансамбль магнитных цепочек со спином $S = 1/2$ и числом узлов N , в которых могут присутствовать немагнитные примеси. Будем принимать, что характерные времена динамики исходной магнитной и примесной подсистем являются соизмеримыми характеристиками. Вследствие этого можно включить переменные примесной подсистемы в область фазового пространства исходной подсистемы. В этом случае одноузельными состояниями цепочки будут три состояния: два состояния $|\sigma\rangle$, отвечающие магнитным состояниям узла с проекцией спина на ось квантования $\sigma \pm 1/2$, и состояние $|0\rangle$,

отвечающее нахождению на узле немагнитной примеси или вакансии. Будем также предполагать, что между ближайшими узлами, находящимися в магнитных состояниях, реализуется как обменное взаимодействие изинговского типа, так и немагнитное межузельное отталкивание кулоновского типа. С физической точки зрения, немагнитное межузельное отталкивание может реализовываться за счет электростатического или ван-дер-ваальсовского отталкивания между магнитными центрами цепочки или за счет повышения энергии системы вследствие отталкивания электронных пар валентных молекулярных орбиталей. В качестве вакансий могут выступать магнитные ионы в низкоспиновом ($S = 0$) состоянии. С учетом вышесказанного гамильтониан системы записывается в виде

$$H = J \sum_{f=1}^N S_f^z S_{f+1}^z + V \sum_{f=1}^N n_f n_{f+1} - h \sum_{f=1}^N S_f^z - \mu \sum_{f=1}^N n_f, \quad (1)$$

где $J > 0$ и $V > 0$ есть соответственно интенсивности обменного взаимодействия изинговского типа и межузельного отталкивания, h – внешнее магнитное поле, выраженное в энергетических единицах, μ – неопределенный множитель Лагранжа.

Операторы S_f^z и n_f – это соответственно псевдоспиновый оператор и оператор числа магнитных частиц на узле цепочки с номером f . В базисе одноузельных состояний цепочки данные операторы имеют вид $S^z = 0.5 \text{diag}(0, 1, -1)$; $n = \text{diag}(0, 1, 1)$.

Для исследования равновесных свойств рассматриваемой модели (1) воспользуемся методом трансфер-матрицы [5]. В отличие от других методов исследования магнитных систем с отождествленным беспорядком [4, 6] подход, основанный на технике трансфер-матрицы, позволяет простым образом точно вычислять как средние значения, так и парные корреляторы:

$$\begin{aligned} \langle A_f^{(v)} \rangle_N &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha=1}^N \langle u_\alpha | A^{(v)} | u_\alpha \rangle \lambda_\alpha^N; \\ \langle A_f^{(v_1)} A_{f+d}^{(v_2)} \rangle_N &= \frac{1}{\Xi} \sum_{\alpha_1, \alpha_2=1}^N A_{\alpha_1 \alpha_2}^{(v_1)} A_{\alpha_2 \alpha_1}^{(v_2)} \lambda_{\alpha_1}^{N-d} \lambda_{\alpha_2}^d, \end{aligned} \quad (3)$$

построенные на одноузельных наблюдаемых $A_f^{(v)}$, диагональных в пространстве одноузельных состояний системы. Индекс “ v ” обозначает тип одноузельного оператора, λ_α и $|u_\alpha\rangle$ есть собственные значения и собственные векторы трансфер-матрицы соответственно, причем $A_{\alpha\beta}^{(v)} = \langle u_\alpha | A^{(v)} | u_\beta \rangle$. В том случае когда интерес представляют свойства

модели при заданной концентрации вакансий (n) или частиц со спином $1 - \langle n \rangle$ (в дальнейшем обозначаемые как n_h и n_e), вычисление средних по формуле (3) необходимо проводить при предварительном решении уравнения на неопределенный множитель Лагранжа: $\langle n \rangle(\mu) = n_e$.

КВАНТОВЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД И МОДИФИКАЦИЯ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Проследим за влиянием межузельного отталкивания на магнитные свойства модели (1) при фиксированной концентрации магнитных центров n_e . Не теряя общности дальнейших результатов, рассмотрим для простоты случай половинного заполнения цепочки $n_e = 0.5$. В этом случае и при $h \ll J$ цепочка может находиться в двух основных состояниях: состояние с микроскопическим разделением на фазы из антиферромагнитно-упорядоченных спиновых подцепочек и подцепочек из вакансий, а также состояние с чередованием парамагнитных центров и вакансий. Энергии таких состояний есть $E_1 \approx N n_e (V - J/4)$ и $E_2 \approx -N n_h h/2$ соответственно. Отсюда видно, что при нулевой температуре и $V < V_c = J/4 - h/2$ реализуется фаза с антиферромагнитными подцепочками, а при $V > V_c$ – фаза с парамагнитными центрами. Переход между данными двумя фазами будем называть квантовым фазовым переходом (КФП), имея в виду, что рассматриваемая классическая модель Изинга (1) является предельным случаем квантовой анизотропной модели Гейзенберга [2]. Точку данного перехода V_c будем называть квантовой критической точкой (ККТ). Реализация КФП подтверждается расчетом зависимости корреляционных функций $K_S(d) = \langle S_f^z S_{f+d}^z \rangle$ и $K_n(d) = \langle n_f n_{f+d} \rangle$ от расстояния между узлами цепочки d . Оказалось, что при $T = 10^{-5} J$ и $V = V_c - \delta$ ($\delta \rightarrow 0$) коррелятор $K_S = 0.5 S^2$ ($K_n = 0.5$) при четных d и $K_S = -0.5 S^2$ ($K_n = 0.5$) при нечетных d . Если же $V = V_c + \delta$, тогда спиновый коррелятор K_S тождественно равен нулю, а K_n принимает значения 0.5 и 0 для четных и нечетных d соответственно. При конечных температурах граница КФП “размывается” и в окрестности ККТ реализуется промежуточная фаза. Особенности данной фазы отображены на рис. 1 посредством построения корреляторов $K_S(d)$ и $K_n(d)$. Видно, что такая фаза характеризуется наличием ближнего, но отсутствием дальнего магнитного порядка.

Наличие КФП по параметру межузельного отталкивания существенным образом сказывается на низкотемпературной области зависимо-

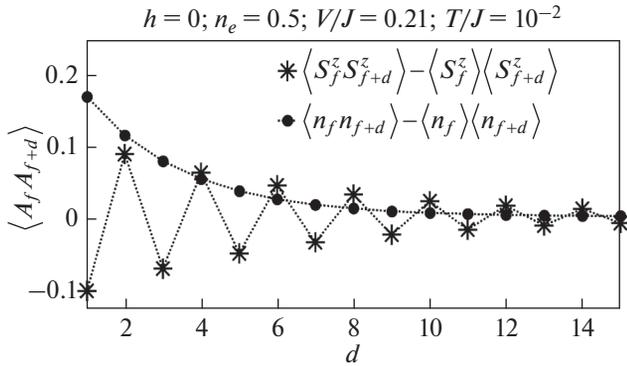


Рис. 1. Зависимости магнитных корреляторов $\langle S_f^z S_{f+d}^z \rangle$ и $\langle n_f n_{f+d} \rangle$ от расстояния между узлами цепочки, в окрестности квантовой критической точки $V \rightarrow V_c = J/4 - h/2$. Отвечают состоянию с наличием ближнего и отсутствием дальнего магнитного порядка.

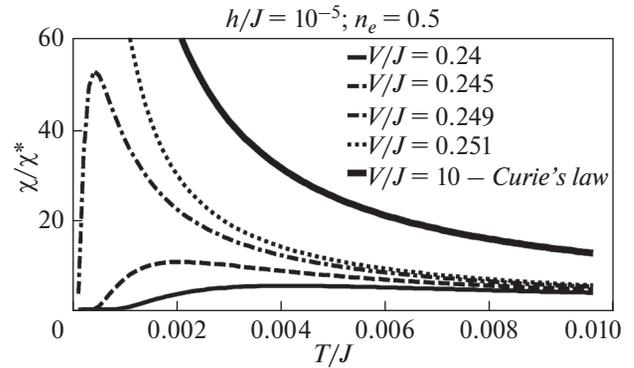


Рис. 2. Эволюция низкотемпературной зависимости магнитной восприимчивости при изменении параметра межузельного отталкивания V/J вблизи квантовой критической точки системы $V \rightarrow V_c = J/4 - h/2$. Реализуется кроссовер от активационного закона возрастания ($V < V_c$) к закону Кюри–Вейсса ($V > V_c$).

сти магнитной восприимчивости системы $\chi(T)$. Причина этого – качественно разное поведение $\chi(T)$ для описанных выше магнитных фаз: состояние при $V < V_c$ характеризуется активационным типом возрастания низкотемпературной зависимости восприимчивости $\chi(T) \sim e^{-\Delta/T}$, свойственной для ансамбля антиферромагнитных изинговских цепочек, тогда как состояние при $V > V_c$ представляет собой набор парамагнитных центров и температурная зависимость магнитной восприимчивости описывается законом Кюри–Вейсса $\chi(T) \sim C/T$ ($T_N = 0$). При изменении V происходит кроссовер между данными двумя зависимостями, который изображен на рис. 2. Отсюда видно, что малое изменения параметра V/J вблизи ККТ V_c может приводить к многократному изменению характерного пика зависимости $\chi(T)$.

ВЫВОДЫ

Сформулирована модель, описывающая равновесное поведение ансамбля изинговских цепочек с магнитными вакансиями и немагнитным межузельным отталкиванием между ближайшими магнитными центрами. Такая модель качественно описывает низкотемпературные магнитные свойства анизотропных органических одноцепочечных магнетиков, подверженных действию оптического облучения. На основе точного решения данной модели методом трансфер-матрицы показано, что в

таких системах может реализовываться КФП по параметру межузельного отталкивания. При прохождении через ККТ данного перехода низкотемпературная область зависимости магнитной восприимчивости системы существенно изменяется, претерпевая кроссовер от активационного закона возрастания $\chi(T) \sim e^{-\Delta/T}$ к закону типа Кюри–Вейсса $\chi(T) \sim C/T$. При этом в самой окрестности ККТ реализуется фаза с наличием ближнего, но с отсутствием дальнего магнитного порядка. Эта информация может оказаться полезной при интерпретации экспериментальных данных о низкотемпературном поведении одноцепочечных магнетиков при их оптическом облучении.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 13-02-00073, 14-02-31237, 15-42-04372).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Prosorova L.A., Sosin S.S., Svistov L.E. et al. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. P. 174410.
2. Zhang W.X., Ishikawa R., Breedlove B., Yamashita M. // RSC Advances. 2013. V. 3. P. 3772.
3. Liu T., Zheng H., Kang S. et al. // Nat. Commun. 2013. V. 4. P. 2826.
4. Аржеников А.К., Ведяев А.В. // ФНТ. 1982. Т. 8. С. 1186.
5. Bernot K., Luzon J., Caneschi A. et al. // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 134419.
6. Лушников А.А. // ЖЭТФ. 1968. Т. 56. С. 215.