

К теории квантовых фазовых переходов в димеризованных антиферромагнетиках

В.М. Калита

Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев, 03028, Украина
E-mail: vmkalita@ukr.net

В.М. Локтев

Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03680, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 23 октября 2009 г., после переработки 10 ноября 2009 г.

Рассмотрен индуцированный внешним магнитным полем квантовый фазовый переход в димеризованном спиновом кристалле из его синглетного основного состояния в антиферромагнитно упорядоченное в предположении, что обменное взаимодействие как внутри димеров, так и между ними носит антиферромагнитный характер. Показано, что в процессе такого превращения критически возникает магнитная поляризация ионов в димере, а следовательно, и димеров в целом. Ориентации векторов спинов и величины их проекций в магнитоупорядоченной фазе зависят от приложенного магнитного поля, а магнитная восприимчивость этой — по существу, квантовой — фазы остается (аналогично случаю классического неэлевского антиферромагнетика) постоянной в ходе разворота спинов магнитных подрешеток.

Розглянуто індукований зовнішнім магнітним полем квантовий фазовий перехід у димеризованому спіновому кристалі з його синглетного основного стану в антиферромагнітно впорядкований у припущенні, що обмінна взаємодія як всередині димерів, так і між ними носить антиферромагнітний характер. Показано, що в процесі такого перетворення критичним чином виникає магнітна поляризація іонів в димері, а отже, і димерів взагалі. Орієнтації векторів спінів та величини їх проекцій у магнітовпорядкованій фазі залежать від прикладеного магнітного поля, а магнітна сприйнятливості цієї — по суті, квантової — фази залишається (аналогічно випадку класичного неелівського антиферромагнетика) постійною в процесі розвороту спінів магнітних підґраток.

PACS: 75.45.+j Макроскопические квантовые явления в магнитных системах;
75.40.Cx Статические свойства.

Ключевые слова: димер, квантовый фазовый переход, параметр порядка.

1. Введение

Как правило, наиболее распространенным управляющим параметром большинства наблюдаемых фазовых переходов является температура, а параметр порядка спонтанным образом возникает в критической точке из термодинамически равновесного и изотропного хаотического состояния. С другой стороны, внешнее магнитное поле также может индуцировать фазовые переходы, связанные с изменением ориентации параметра порядка. Большой вклад в развитие теории спин-переориентационных фазовых переходов, которые могут происходить как в классических, так и квантовых системах под влиянием изменения то ли поля, то ли

температуры, был внесен В.Г. Барьяхтаром и его школой [1–4].

В то же время имеются физические ситуации, когда в процессе фазового превращения происходит изменение (квантовое «сокращение») модуля проекции спина (и/или его величины как характеристики — квантового числа — состояния), причем такие переходы могут осуществляться при нулевой температуре, а роль управляющих параметров играет какое-либо поле — электрическое, магнитное, упругое. Исследование таких — квантовых — фазовых переходов (КФП) вызывает в настоящее время большой интерес. Для КФП, в частности, не выполняется часто используемое в феноменологической теории спин-переориентационных

фазовых переходов приближение неизменности модуля спина подрешетки. Как отмечается в работах [5–9], КФП далеко не всегда получают объяснение, адекватное возникающей физической ситуации. Так, для них часто неочевидным является определение энергии основного состояния системы и вариационного параметра, минимизирующего эту энергию.

Эти и некоторые другие сложности приводят к тому, что в ряде случаев магнитные КФП интерпретируются (или описываются) с привлечением физических явлений, не имеющих прямого отношения к рассматриваемой задаче. Например, в ван-флековском антиферромагнетике со спинами ионов $S = 1$, так называемом DTN (химическая формула которого $\text{NiCl}_2\text{--}4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$), КФП из синглетной (парамагнитной ван-флековской фазы) в антиферромагнитную многоподрешеточную фазу рассматривается как бозе-эйнштейновская конденсация магнонов [10–12]. Однако процесс намагничивания DTN не может сопровождаться бозе-эйнштейновской конденсацией возбуждений, поскольку речь идет исключительно о перестройке основного состояния системы (вакуума), которая лишь формально может быть описана с привлечением виртуальных спиновых возбуждений. А как известно, процесс бозе-конденсации должен происходить и происходит в подсистеме реальных спиновых возбуждений (см., например, [13]).

В работах [14–16] нами показано, что в ван-флековских антиферромагнетиках со спинами ионов $S = 1$ КФП не требует представлений о процессах бозе-эйнштейновской конденсации и является прямым следствием спонтанной поляризации основного квантового состояния ионов. При этом такая поляризация служит параметром порядка, а расчет характеристик этого КФП осуществлялся путем анализа энергии основного состояния, которая, как это всегда бывает, должна быть минимальной. Как вариационный параметр использовалась величина, задававшая степень смешивания базисных векторов волновой функции основного состояния. Иными словами (с точки зрения формальной процедуры расчетов), в этих работах КФП в ван-флековских антиферромагнетиках рассматривался аналогично тому, как это делается в теории Ландау.

Недавно появились экспериментальные данные (см., в частности, обзор [17]) об индуцируемых внешним магнитным полем КФП. Речь идет о совершенно другом классе магнитных веществ — димеризованных синглетных магнетиках с общей формулой XCuCl_3 , где $X = \text{K}, \text{Cs}, \text{Tl}, \text{NH}_4$, и спином $S = 1/2$ на узле. В одном из соединений этого семейства, TlCuCl_3 , которое для конкретности рассматривается ниже, структура такова, что в ней присутствуют пары (димеры) антиферромагнитно связанных спинов с $S = 1/2$ для ионов меди Cu^{2+} [18]. Причем это обменное взаимодействие между ними заметно превосходит взаимодействие между спинами, относящимися к разным димерам, которое также

имеет антиферромагнитный характер. При таком соотношении обменных констант в этом магнетике при $T = 0$ реализуется не магнитоупорядоченное (скажем, неелевское) состояние, а квантово-разупорядоченное, когда средние значения проекций спина на каждом из ионов равны нулю, т.е. какой-либо магнитный порядок в целом в образце отсутствует. Нужно, однако, заметить, что при $T = 0$ синглетное (ненамагниченное даже в не слишком больших полях) состояние димеров, каждый из которых описывается единой для обоих ионов димера волновой функцией, является пространственно упорядоченным с идеальным трансляционным порядком. При этом следует отметить, что такое синглетное состояние отличается от ван-флековского, где немагнитному состоянию отвечает равенство нулю не полного спина, а лишь его проекции, что является следствием действия одноионной анизотропии. В изучаемом же кристалле синглетному состоянию соответствует отсутствие спина как такового, а само состояние может реализоваться и в системах с изотропными обменными взаимодействиями.

Эксперименты показали [17,19], что во внешнем магнитном поле, большем 23 Тл, образцы TlCuCl_3 переходят в магнитоупорядоченное состояние, причем спиновая поляризация ионов Cu^{2+} возникает спонтанно, формируя индуцированную полем антиферромагнитную структуру со скошенными подрешетками. Оказывается также, что ионы меди из одного димера формируют разные подрешетки, что является очевидным результатом антиферромагнитного взаимодействия между такими ионами. Что касается попыток теоретического рассмотрения димеризованных магнетиков, то, как и в случае ван-флековских систем, оно в настоящее время базируется на привлечении идей бозе-эйнштейновской конденсации магнонов. В работах [18–21] (подробнее см. [17]) магнитоиндуцированный фазовый переход между квантовым синглетным и квазиклассическим антиферромагнитным состояниями описывают с помощью бозе-эйнштейновской конденсации возбуждений нижней магнонной моды. Дело в том, что появление в конечных магнитных полях поперечных (относительно направления внешнего поля) проекций намагниченности можно действительно связать с появлением в системе большого числа неравновесных виртуальных магнитных возбуждений, релаксирующих к нижайшему состоянию и тем самым приводящих к появлению наблюдаемой намагниченности. Однако возможность такого описания обусловлена лишь неудачным выбором оси квантования (вдоль поля) спинов, направленных поперек поля, поэтому никакой истинной конденсации квазичастиц не происходит.

Как будет видно, КФП в магнитных димеризованных системах может быть описан иначе, а именно самосогласованно, как такой, где изменяется последовательность одноионных квантовых (спиновых) уровней.

При этом в том или ином поле (либо той или иной фазе) следует определять основное состояние. Коллективизация уровней, или образование спин-волновых зон, важна лишь для возбужденных состояний. В частности, в настоящей работе будет продемонстрировано, как в димеризованных системах с антиферромагнитной обменной связью между соседними спинами происходит КФП, обусловленный исключительно спонтанной поляризацией основного одноионного состояния. Будет также показано, что КФП, индуцированный в таких системах магнитным полем, последовательно описывается в рамках стандартного подхода путем минимизации энергии их основного квантового состояния, что одновременно позволяет найти соответствующие им возможные спиновые конфигурации. Понятно также, что спонтанное изменение основного состояния магнитных ионов неизбежно изменяет и магнитный спектр.

Как правило, квазиклассическое описание многоподрешеточных магнитных структур проводят в предположении о неелевском характере упорядоченных состояний с использованием эффективных полей, действующих на спины магнитных ионов подрешеток. В этом случае получить синглетное состояние не удастся, а следовательно, искомым КФП не происходит. Ниже учет обменного взаимодействия между спинами внутри димера осуществляется точно, а между димерами — в приближении самосогласованного поля, что позволяет частично отойти от неелевского случая с исходно сформированными магнитными подрешетками. Последние возникают лишь в результате разрушения синглетного квантового состояния внешним магнитным полем, вызывающим перестройку структуры спектра парамагнитных ионов и, что одно и то же, намагничивание системы.

Основная цель работы — развитие теории спонтанного возникновения спиновой поляризации в системе немагнитных, но обменно взаимодействующих димеров в том случае, когда они находятся во внешнем магнитном поле.

2. Модель

Структура димеризованных соединений типа TiCuCl_3 показана на рис. 1. На рисунке видно, что будь в них магнитное состояние неелевского типа, то в предположении об антиферромагнитном характере обменного взаимодействия между спинами, как в каждом димере, так и между ближайшими спинами из разных димеров, система разбилась бы на четыре магнитные подрешетки (что, собственно, и изображено на рис. 1). Поэтому с учетом этого обстоятельства, а именно наличия двух димеров в одной ячейке, гамильтониан кристалла удобно записать в виде

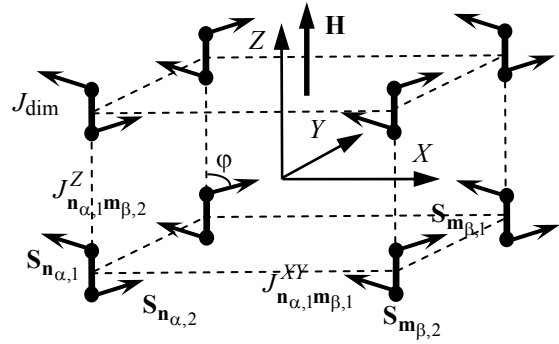


Рис. 1. Ориентация спинов димеров в магнитном поле.

$$\hat{H} = J_{\text{dim}} \sum_{\mathbf{n}_{\alpha}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_{\alpha}, \mathbf{m}_{\beta}} [J_{\mathbf{n}_{\alpha,1} \mathbf{m}_{\beta,1}}^{XY} (\mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} \mathbf{S}_{\mathbf{m}_{\beta,1}} + \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}} \mathbf{S}_{\mathbf{m}_{\beta,2}}) + J_{\mathbf{n}_{\alpha,1} \mathbf{m}_{\beta,2}}^Z \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} \mathbf{S}_{\mathbf{m}_{\beta,2}}] - H \sum_{\mathbf{n}_{\alpha}} (S_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}^Z + S_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}^Z), \quad (1)$$

где пары 1 и 2 обменно связанных спинов $\mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}, \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}$ принадлежат одному димеру, положение которого задано вектором \mathbf{n} , а спины $\mathbf{S}_{\mathbf{m}_{\beta,1}}$ и $\mathbf{S}_{\mathbf{m}_{\beta,2}}$ принадлежат соседнему димеру, положение которого задает вектор \mathbf{m} ; \mathbf{H} — напряженность магнитного поля, которая параллельна оси $\mathbf{H} \parallel Z$; $J_{\text{dim}} > 0$ — параметр межспинового взаимодействия внутри димера; $J_{\mathbf{n}_{\alpha,1} \mathbf{m}_{\beta,1}}^{XY} > 0$ — параметр межспинового взаимодействия для ближайших спинов соседних димеров в плоскости XY , а $J_{\mathbf{n}_{\alpha,1} \mathbf{m}_{\beta,2}}^Z > 0$ — параметр межспинового взаимодействия для ближайших спинов соседних димеров вдоль оси Z (обратим внимание, что все эти параметры есть ни что иное, как константы изотропного обменного взаимодействия). Ниже будем полагать, как это имеет место для ионов меди в TiCuCl_3 , величину спинов в (1) $S = 1/2$, а напряженность магнитного поля и параметры обмена заданы в энергетических единицах.

Как правило, при описании многоподрешеточных структур в приближении самосогласованного поля вводят обменные поля, создаваемые спинами подрешеток. Если применить такое приближение к системе (1), то будет «потеряна» спиновая димеризация: спины в димере окажутся расцепленными. Чтобы сохранить димер как пару связанных спинов, ограничимся среднеполевым приближением только для взаимодействий между соседними димерами. В этом случае энергия (гамильтониан для пары спинов димера) будет иметь вид

$$\hat{H}_{\text{dim}} = J_{\text{dim}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}} - \mathbf{h}_{\alpha,1} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} - \mathbf{h}_{\alpha,2} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}} - H (S_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}^Z + S_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}^Z), \quad (2)$$

где \mathbf{h}_α — обменные поля, действующие на каждый из спинов со стороны соседей. Вектор обменного поля

$$\mathbf{h}_\alpha = -J\mathbf{s}_\beta, \quad (3)$$

где J — параметр межспинового взаимодействия, просуммированный по числу ближайших соседей: $J = 4J_{\mathbf{n}_{\alpha,1}\mathbf{m}_{\beta,1}}^{XY} + 2J_{\mathbf{n}_{\alpha,1}\mathbf{m}_{\beta,2}}^Z$. При этом считается, что

основное состояние однородно, поэтому векторы средних спинов подрешеток, оставаясь зависимыми от номера подрешетки, теряют зависимость от узла. Заметим также, что ось X направлена перпендикулярно оси Z и лежит в плоскости, образованной векторами $\mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}$, $\mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}$, как на рис. 1.

Из записи (2) действительно видно, что, согласно выбранному подходу, приближенно (хотя и самосогласованно) учитывается только междимерное обменное взаимодействие, а обмен внутри пары входит точно. Другими словами, для спиновой пары в димере понятие об обменном взаимодействии как обменном поле не используется и тем самым процедура самосогласования не применяется.

Далее (см. рис. 1) будем предполагать, что подрешетки симметричны и спины подрешеток одинаковым образом скашиваются к магнитному полю. Запишем очевидные для такой конфигурации соотношения между проекциями средних спинов подрешеток:

$$\begin{aligned} s_{\alpha,1}^Z &= s_{\alpha,2}^Z = s_{\beta,1}^Z = s_{\beta,2}^Z = s^Z, \\ -s_{\alpha,1}^X &= s_{\beta,1}^X = s_{\alpha,2}^X = -s_{\beta,2}^X = s^X. \end{aligned} \quad (4)$$

С учетом этих равенств обменные поля также переписываются:

$$h_{\alpha,1}^Z = h_{\alpha,2}^Z = h^Z, \quad -h_{\alpha,1}^X = h_{\alpha,2}^X = h^X, \quad (5)$$

и выражение (2) для гамильтониана димера принимает достаточно простую форму:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{dim}} &= J_{\text{dim}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,1}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_{\alpha,2}} + h^X S_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}^X - h^X S_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}^X - \\ &- (H + h^Z)(S_{\mathbf{n}_{\alpha,1}}^Z + S_{\mathbf{n}_{\alpha,2}}^Z). \end{aligned} \quad (6)$$

Собственные функции оператора скалярного произведения двух спинов $\mathbf{S}_{\mathbf{n}_1} \mathbf{S}_{\mathbf{n}_2}$ определяются, как хоро-

шо известно, полным спиновым моментом пары и его проекцией. Для пары спинов с $S = 1/2$ полный спиновый момент может быть равным $S_{\text{dim}} = 1$ или $S_{\text{dim}} = 0$. Собственные волновые функции оператора скалярного произведения такой пары спинов имеют вид [17,19,22] $\Psi_{SM_S} = |S, M_S\rangle$, где

$$\begin{aligned} \Psi_{11} &= |1, 1\rangle, & \Psi_{10} &= |1, 0\rangle, \\ \Psi_{1\bar{1}} &= |1, \bar{1}\rangle \equiv |1, -1\rangle, & \Psi_{00} &= |0, 0\rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

первое число отвечает полному спиновому моменту S пары, а второе — его проекции M_S .

Из физических соображений ясно (и нетрудно проверить), что для спинов димера при $J_{\text{dim}} > 0$ основным состоянием будет синглет Ψ_{00} с полным спином, равным нулю. При значительном преобладании J_{dim} над J этот синглет сохранится как одноионное состояние димера и для полного гамильтониана (1). Очевидно, однако, что в сравнительно большом магнитном поле намагниченное состояние с максимальными значениями спина и его проекции, описываемое функцией Ψ_{11} , станет энергетически более предпочтительным, а его появление как основного и будет соответствовать исследуемому (и искомому) КФП.

Основной задачей как раз и является описание этого, происходящего в магнитном поле, КФП из исходного синглетного состояния в максимально намагниченное (через образования антиферромагнитной неелевской фазы) и определение критических полей такого перехода.

Исходные волновые функции (7) можно легко переписать в явном виде через проекции векторов спинов ионов пары:

$$\begin{aligned} \Psi_{11} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, & \Psi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right), \\ \Psi_{1\bar{1}} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, & \Psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Используя волновые функции (8), для которых оператор $\hat{H}_{\text{dim}} = J_{\text{dim}} \mathbf{S} \mathbf{S}$ диагональный, легко записать матричные элементы гамильтониана (6):

$$\left\langle \Psi_j \left| \hat{H}_{\text{dim}} \right| \Psi_k \right\rangle = \begin{array}{c} \Psi_{11} \\ \Psi_{10} \\ \Psi_{1\bar{1}} \\ \Psi_{00} \end{array} \begin{array}{c} \Psi_{11} \\ \Psi_{10} \\ \Psi_{1\bar{1}} \\ \Psi_{00} \end{array} \begin{array}{c} \frac{1}{4} J_{\text{dim}} - h^Z - H \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} h^X \end{array} \begin{array}{c} 0 \\ \frac{1}{4} J_{\text{dim}} \\ \frac{1}{4} J_{\text{dim}} + h^Z + H \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} h^X \\ \frac{1}{\sqrt{2}} h^X \end{array} \begin{array}{c} -\frac{1}{\sqrt{2}} h^X \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} h^X \\ -\frac{3}{4} J_{\text{dim}} \end{array}. \quad (9)$$

Исходя из вида матрицы (9) видим, что основное состояние описывается смешанной функцией

$$\Psi_{gr} = \sum_{S, M_S} C_{SM_S} \Psi_{SM_S} = \sum_{1M_S} C_{1M_S} \Psi_{1M_S} + C_{00} \Psi_{00}, \quad (10)$$

причем $C_{10} = 0$, а остальные коэффициенты должны удовлетворять условию нормировки $|C_{11}|^2 + |C_{1\bar{1}}|^2 + |C_{00}|^2 = 1$. Эта функция записана, как функция общего вида для оператора (9) с произвольными относительными значениями параметров C_{SM_S} . Такая произвольность устраняется проведением процедуры самосогласования, которое задает их величину для функции, отвечающей минимуму энергии системы — основного ее состояния.

3. Энергия основного состояния

Определим основное состояние системы путем расчета ее энергии с помощью функции (10). Действительно, с помощью этой функции просто найти выражения для средних величин проекций спинов каждого димера (см. (4)):

$$s^Z = \frac{1}{2}(|C_{11}|^2 - |C_{1\bar{1}}|^2), \quad (11)$$

$$s^X = \frac{1}{2\sqrt{2}}[C_{11}C_{00}^* + C_{11}^*C_{00} - (C_{1\bar{1}}C_{00}^* + C_{1\bar{1}}^*C_{00})].$$

Легко убедиться, что отсутствие Y -компонент средних значений проекций спинов (см. спиновую конфигурацию на рис. 1) приводит к тому, что коэффициенты C_{SM_S} — действительные числа.

С помощью функции (10) и средних (11), которые пропорциональны проекциям полей самосогласования (6), запишем выражение для энергии основного состояния системы (1):

$$E_{gr} = J_{dim}(C_{11}^2 + C_{1\bar{1}}^2 - \frac{3}{4}) + J \left[\frac{1}{2}(C_{11}^2 - C_{1\bar{1}}^2)^2 - (C_{11} - C_{1\bar{1}})^2 + (C_{11}^2 + C_{1\bar{1}}^2)(C_{11} - C_{1\bar{1}})^2 \right] - H(C_{11}^2 - C_{1\bar{1}}^2), \quad (12)$$

где уже учтены нормировка и действительность коэффициентов C_{SM_S} (энергия (12) записана в расчете на один димер).

Минимизируя (12), приходим к системе уравнений

$$\frac{\partial E_{gr}}{\partial C_{11}} = 2[J_{dim}C_{11} + J(C_{11} - C_{1\bar{1}})(3C_{11}^2 + C_{1\bar{1}}^2 - 1) - HC_{11}] = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial E_{gr}}{\partial C_{1\bar{1}}} =$$

$$= 2[J_{dim}C_{1\bar{1}} + J(C_{1\bar{1}} - C_{11})(3C_{1\bar{1}}^2 + C_{11}^2 - 1) + HC_{1\bar{1}}] = 0. \quad (14)$$

Заметим, что выписанные уравнения (13) и (14) при изменении знака поля ($H \rightarrow -H$) не изменяют своего вида, если $C_{11} \rightarrow C_{1\bar{1}}$, а $C_{1\bar{1}} \rightarrow C_{11}$.

Как видно из уравнений (13), (14), решением может быть функция с $C_{11} = 0$ и $C_{1\bar{1}} = 0$ и, следовательно, с $C_{00} = 1$, когда основным состоянием является синглет, описываемый функцией $\Psi_{gr} = \Psi_{00}$. Энергия этого синглетного состояния равна $E_{gr}^{(sing)} = -\frac{3}{4}J_{dim} < 0$.

Появление состояний $\Psi_{1\bar{1}}$ в состоянии (10) энергетически невыгодно. Из уравнения (14) также следует, что при $C_{1\bar{1}} = 0$ коэффициент C_{11} строго принимает значение $C_{11} = 1$, когда основным является чистое состояние $\Psi_{gr} = \Psi_{11}$. Это условие отвечает предельно намагниченному состоянию с максимальной намагниченностью, которое реализуется в больших полях.

Для определения границ устойчивости этих состояний выпишем вторые производные от энергии основного состояния:

$$\frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{11}^2} = 2\{J_{dim} + J[(3C_{11} - C_{1\bar{1}})^2 - 1] - H\}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{1\bar{1}}^2} = 2\{J_{dim} + J[(3C_{1\bar{1}} - C_{11})^2 - 1] + H\}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{11} \partial C_{1\bar{1}}} = 2J[-3C_{11}^2 + 2C_{1\bar{1}}C_{11} - 3C_{1\bar{1}}^2 + 1]. \quad (17)$$

При этом необходимо иметь в виду, что параметры C_{SM_S} могут достигать своих предельных значений.

В синглетной фазе $C_{11} = 0$, $C_{1\bar{1}} = 0$ и $C_{00} = 1$, т. е., как было видно, она описывается функцией $\Psi_{gr} = \Psi_{00}$. Соответственно для этих значений параметров находим

$$\left. \frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{11}^2} \right|_{\substack{C_{11}=0 \\ C_{1\bar{1}}=0}} = 2(J_{dim} - J - H), \quad (18)$$

$$\left. \frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{11}^2} \right|_{\substack{C_{11}=0 \\ C_{1\bar{1}}=0}} \left. \frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{1\bar{1}}^2} \right|_{\substack{C_{11}=0 \\ C_{1\bar{1}}=0}} - \left(\left. \frac{\partial^2 E_{gr}}{\partial C_{11} \partial C_{1\bar{1}}} \right|_{\substack{C_{11}=0 \\ C_{1\bar{1}}=0}} \right)^2 = 4[J_{dim}(J_{dim} - 2J) - H^2]. \quad (19)$$

Отсюда следует, что устойчивость синглетной фазы ограничена полем

$$H_{cr}^{(1)} = J_{dim} \sqrt{1 - \frac{2J}{J_{dim}}}, \quad (20)$$

которое при $J/J_{dim} \ll 1$ приобретает вид

$$H_{cr}^{(1)} = J_{dim} - J. \quad (21)$$

Используя (15)–(17), определим границу устойчивости фазы с предельно возможной намагниченностью, когда все спины димеров ориентированы вдоль поля (парамагнитная фаза) и $C_{1\bar{1}} = 0$, $C_{11} = 1$ и $\psi_{gr} = \psi_{11}$. Величину критического поля перехода в такое максимально намагниченное состояние можно, вообще говоря, получить и в приближении Нееля, когда спины считаются квазиклассическими. Величина этого критического поля определяется выражением

$$H_{cr}^{(2)} = J_{dim} + 2J. \quad (22)$$

Для $H > H_{cr}^{(2)}$ в системе реализуется однородная парамагнитная (ферромагнитная) фаза.

При этом полю $H = H_{cr}^{(2)}$ отвечает «классический» магнитный ориентационный фазовый переход схлопывания подрешеток.

4. Особенности квантового фазового перехода в системе димеров

Проведем анализ поведения системы в критической области КФП из синглетной фазы в многоподрешеточную, т.е. в области полей $(H - H_{cr}^{(1)})/H_{cr}^{(1)} \ll 1$ и при $H > H_{cr}^{(1)}$.

Покажем, что в критической области коэффициенты C_{11} и $C_{1\bar{1}}$ пропорциональны $\sqrt{H - H_{cr}^{(1)}}$. Для этого учтем, что подмешивание функции $\psi_{1\bar{1}}$ к функции основного состояния энергетически менее выгодно, чем функции ψ_{11} . Отсюда приходим к выводу, что в области, близкой к критической, может выполняться неравенство $C_{11} \gg C_{1\bar{1}}$ (в больших полях его выполнение очевидно). В этом случае из системы (13), (14) приходим к уравнениям

$$[J_{dim} + J(3C_{11}^2 - 1) - H]C_{11} = 0, \quad (23)$$

$$J_{dim}C_{1\bar{1}} + J(C_{11} - C_{1\bar{1}}) + HC_{1\bar{1}} = 0. \quad (24)$$

Используя (23), находим, что параметр C_{11} после достижения критического поля зависит от величины H корневым образом:

$$C_{11} = \frac{1}{\sqrt{3J}} \sqrt{H - J_{dim} + J} = \frac{\sqrt{H - H_{cr}^{(1)}}}{\sqrt{H_{cr}^{(2)} - H_{cr}^{(1)}}}. \quad (25)$$

Величина коэффициента $C_{1\bar{1}}$ при этом определяется выражением (см. (24))

$$C_{1\bar{1}} = -\frac{J}{J_{dim} - J + H} C_{11} \approx -\frac{J}{2H_{cr}^{(1)}} \frac{\sqrt{H - H_{cr}^{(1)}}}{\sqrt{H_{cr}^{(2)} - H_{cr}^{(1)}}}. \quad (26)$$

В итоге из (25) и (26) легко видим, что в критической области КФП величина полной спиновой проекции димера будет линейно зависеть от величины поля:

$$s_{dim}^Z = \left[1 - \left(\frac{J}{2H_{cr}^{(1)}} \right)^2 \right] \frac{H - H_{cr}^{(1)}}{H_{cr}^{(2)} - H_{cr}^{(1)}} \approx \frac{H - H_{cr}^{(1)}}{H_{cr}^{(2)} - H_{cr}^{(1)}}. \quad (27)$$

Очевидно, что применимость выражения (см. (27)) ограничена соотношением $J/(2H_{cr}^{(1)}) \ll 1$, которое физически допустимо при $J/J_{dim} \ll 1$, и именно такое соотношение для величин этих констант предполагалось при записи (2). Отметим, что полученная линейная зависимость (27) для полной средней спиновой проекции димера хорошо согласуется с данными экспериментов [16].

Интересно, что магнитная восприимчивость в процессе рассматриваемого КФП из синглетной фазы в многоподрешеточную антиферромагнитную будет постоянной, что фактически совпадает с квазиклассической картиной, в которой схлопывание спиновых подрешеток происходит при неизменных величинах модулей спинов. Кроме этого, выражение (27) иллюстрирует процесс осуществления этого фазового перехода, который сопровождается спонтанным возникновением спиновой поляризации у ионов димера.

Критическое поведение поперечных относительно поля X -проекции спинов димера отличается от полевой зависимости их продольных проекций. Действительно,

$$s^X = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{00} [C_{11} - C_{1\bar{1}}] \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{H - H_{cr}^{(1)}}}{\sqrt{H_{cr}^{(2)} - H_{cr}^{(1)}}}, \quad (28)$$

т.е. зависимость, которая прямо свидетельствует, что поперечные проекции спинов ионов в димере зависят от поля корневым, или критическим, с точки зрения теории Ландау, образом. Отсюда легко понять, что производные X -проекции по полю в точке фазового перехода будут испытывать особенность. Надо полагать, что именно спонтанное возникновение поперечных проекций (28) у ионов димера и является основным качественным отличием магнитного КФП из спиново-неупорядоченной синглетной фазы в спиново-упорядоченную.

На рис. 2 в качестве примера приведены полевые зависимости полной Z -проекции спина димера, а также X -проекции спина одного из ионов димера в случае $H_{cr}^{(2)}/H_{cr}^{(1)} = 3$. Такое соотношение критических полей

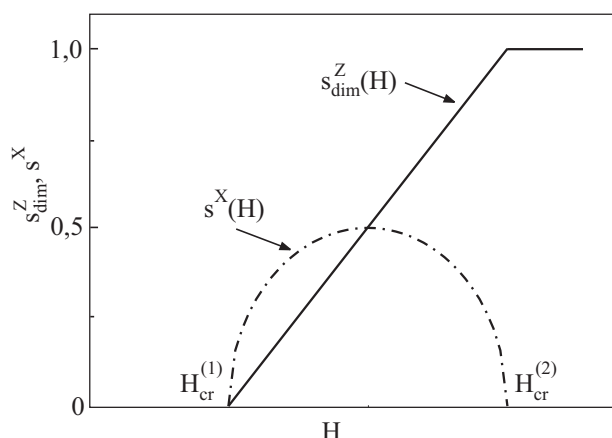


Рис. 2. Полевые зависимости для проекций s_{dim}^Z , s^X , рассчитанные для $H_{\text{cr}}^{(2)}/H_{\text{cr}}^{(1)} = 3$.

близко к данным эксперимента, приведенным в работе [16], а полученные полевые зависимости хорошо согласуются с ее результатами качественно и удовлетворительно количественно.

Заключение

В работе показано, что синглетное состояние в димеризованных магнетиках является прямым следствием преобладающего антиферромагнитного взаимодействия между магнитными ионами димера по сравнению с обменами между димерами. Наличие меньшего (но также антиферромагнитного типа) межспинового взаимодействия между ионами из разных димеров обеспечивает эффект возникновения спонтанной спиновой поляризации магнитных ионов димеров в магнитном поле. При этом оказывается, что величина спиновой поляризации ионов зависит от величины магнитного поля. Ориентации же средних проекций магнитных ионов димера скошены друг к другу и скошены к магнитному полю. Такая, индуцированная магнитным полем, антиферромагнитная фаза не является классической неелевской фазой с предельными величинами спинов подрешеток. В димере под действием магнитного поля одновременно происходит и возрастание модуля средних спинов, и их скос к магнитному полю. И лишь в области больших полей, когда проекции спинов димера достигают насыщения, наблюдается квазиклассический ориентационный магнитный фазовый переход в состояние с предельной (насыщенной) намагниченностью, отвечающий схлопыванию подрешеток. По существу, можно говорить, что для КФП практически полностью сохраняется физика обычных магнитных фазовых переходов, теория которых развита в работах [1–4], однако возможность и особенности использования для КФП подхода Ландау требуют отдельного рассмотрения и не содержат

никакой необходимости для привлечения представлений о бозе-энштейновской конденсации.

Работа выполнена в рамках Целевой программы фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии НАН Украины.

1. В.Г. Барьяхтар, А.Е. Боровик, В.А. Попов, *Письма в ЖЭТФ* **9**, 634 (1968).
2. В.Г. Барьяхтар, А.А. Галкин, В.Т. Телепа, *Письма в ЖЭТФ* **22**, 552 (1972).
3. В.Г. Барьяхтар, И.М. Витебский, Д.А. Яблонский, *ФТТ* **19**, 2135 (1977).
4. В.Г. Барьяхтар, И.М. Витебский, А.А. Галкин, В.П. Дьяконов, И.М. Фита, Г.А. Цинцинадзе, *ЖЭТФ* **84**, 1083 (1983).
5. В.Ф. Гантмахер, В.Т. Долгополов, *УФН* **178**, 3 (2008).
6. С.М. Стишов, *УФН* **174**, 853 (2004).
7. T. Vojta, *arXiv:cond-mat/0010285*.
8. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge: Cambridge Univ. Press (1999).
9. Masashige Matsumoto, B. Normand, and T.M. Rice, *Phys. Rev.* **B69**, 054423 (2004).
10. V.S. Zapf, V.F. Corea, P. Sengupta, C.D. Batista, M. Tsukamoto, N. Kawashima, P. Egan, C. Pantea, A. Migliori, J.B. Bets, M. Jaime, and A. Paduan-Filho, *Phys. Rev.* **B77**, 092413 (2008).
11. S.A. Zvyagin, J. Wosnitzer, C.D. Batista, M. Tsukamoto, N. Kawashima, J. Krzystek, V.S. Zapf, M. Jaime, N.F. Oliveira, Jr., and A. Paduan-Filho, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 047205 (2007).
12. V.S. Zapf, D. Zocco, B.R. Hansen, M. Jaime, N. Harrison, C.D. Batista, M. Kenzelmann, C. Niedermayer, A. Lacerda, and A. Paduan-Filho, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 077204 (2006).
13. S.O. Demokritov, V.E. Demidov, O. Dzyapko, G.A. Melkov, A.A. Serga, B. Hillebrands, and A.N. Slavin, *Nature* **443**, 430 (2006).
14. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ЖЭТФ* **125**, 1149 (2004).
15. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФНТ* **32**, 158 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 114 (2006)].
16. V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, *Phys. Rev.* **B78**, 104415 (2008).
17. T. Giamarchi, C. Rüegg, and O. Tchernyshyov, *Nature Phys.* **4**, 198 (2008).
18. M. Matsumoto, B. Normand, T.M. Rice, and M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2003).
19. M. Matsumoto, B. Normand, and T.M. Rice, *Phys. Rev.* **B69**, 054423 (2004).
20. E.Ya. Sherman, P. Lemmens, B. Busse, A. Oosawa, and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 057201 (2003).
21. T. Radu, H. Wilhelm, V. Yushanhai, D. Kovrizhin, R. Goldea, Z. Tylczynski, T. Luhmann, and F. Steglich, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 1272002 (2005).
22. E.C. Samulon, Y.-J. Jo, P. Sengupta, C.D. Batista, M. Jaime, L. Balicas, and I.R. Fisher, *Phys. Rev.* **B77**, 214441 (2008).

On the theory of quantum phase transition in dimerized antiferromagnets

V.M. Kalita and V.M. Loktev

The field-induced quantum magnetic phase transition in a dimerized spin crystal from its singlet ground state in the antiferromagnetic one is considered on the assumption that the exchange interaction both on dimers and between them is of antiferromagnetic character. It is shown that because of this transition there occurs a magnetic polarization of the dimer ions and dimers as a whole. Spin orientations and spin

projections in the magneto-ordered phase depend on the applied magnetic field, and magnetic susceptibility of this (in fact, quantum) state proves to be constant (as in classical Neel antiferromagnet) with changing orientations of sublattice spins.

PACS: **75.45.+j** Macroscopic quantum phenomena in magnetic systems;
75.40.Cx Static properties.

Keywords: dimer, quantum phase transition, order parameter.