Физика низких температур, 1995, т. 21, № 10, с. 1068–1074 УДК 537.6

Особенности поведения низкотемпературной намагниченности одномерной альтернированной спиновой цепочки с примесью

А. А. Звягин, Я. Ю. Сегал

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: zvyagin@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 24 мая 1995 г.

Теоретически исследованы свойства одномерной двухподрешеточной спиновой X–Y-цепочки с изолированной магнитной примесью замещения (немагнитной примесью внедрения). Показано, что наряду с двумя ветвями непрерывного спектра возбуждений в системе могут существовать два или четыре дискретных примесных уровня. Изучено поведение магнитного момента примесного атома и атомов матрицы в постоянном внешнем магнитном поле. Получены значения постоянного магнитного поля, при которых в основном состоянии системы могут иметь место скачки проекции магнитного момента примесного атома на выделенное направление.

Теоретично досліджено властивості одновимірного двохпідграткового спінового X–Y-ланцюжка з ізольованою магнітною домішкою заміщення (немагнітною домішкою проникнення). Показано, що поруч з двома вітками неперервного спектра збудження в системі можуть існувати два або чотири дискретних домішкових рівня. Вивчено поведінку магнітного момента домішкового атома і атомів матриці в постійному зовнішньому магнітному полі. Получено значення постійного магнітного поля, при яких в основному стані системи можуть мати місце стрибки проекції магнітного моменту домішкового атома на виділений напрям.

Как известно, существенная доля имеющейся информации о магнитных свойствах твердых тел получена при изучении растворенных в различных веществах магнитных ионов. Исследование влияния примесей на свойства магнитоупорядоченных кристаллов является в настоящее время одним из широко используемых методов изучения взаимодействий в спиновых системах.

Поведение примесных атомов в трехмерных магнитоупорядоченных кристаллах обычно исследуется с помощью приближенных методов, например в рамках теории молекулярного поля или в спин-волновом приближении [1,2]. Свойства магнитоупорядоченного кристалла с одной примесью изучены достаточно детально (так, исследовано влияние примеси замещения, внедрения, немагнитного примесного атома и вакансии; рассмотрено поведение атома примеси в кристалле с двумя подрешетками; изучено влияние внешнего магнитного поля). Результаты исследования однопримесной задачи можно обобщить на случай малых концентраций примесей. При возрастании концентрации примесных атомов задача усложняется и требует отдельного изучения [1].

Появление примесного атома в трехмерном кристалле с квазинепрерывным спектром элементарных возбуждений приводит либо к появлению дискретных уровней, лежащих за пределами полосы спектра идеального кристалла (такие состояния характеризуются пространственной локализацией волновой функции на атоме примеси), либо к перегруппировке уровней квазинепрерывного спектра и появлению резонансного уровня, лежащего в полосе энергетического спектра идеального кристалла (такие внутризонные состояния носят название квазилокальных, поскольку их волновая функция пространственно локализована вблизи примесного атома; в плотности состояний возникновение резонансного уровня проявляется в виде «горба», имеющего, как правило, форму Лоренца [2]).

В отличие от трехмерных магнитоупорядоченных кристаллов существует ряд одномерных спиновых моделей, для которых задачу о влиянии примесных атомов на поведение системы можно решить точно (необходимость рассмотрения точно решаемых моделей связана с тем обстоятельством, что в одномерных системах существенную роль играют квантовые флуктуации, поэтому приближенные методы могут давать качественно неверные результаты). К таким моделям относится, например, одномерная X–Y-модель, описывающая цепочку узельных спинов $S = 1/2$ с взаимодействием ближайших соседей, причем z-компоненты обменного взаимодействия равны нулю. Поскольку

© А. А. Звягин, Я. Ю. Сегал, 1995

ку эта модель с помощью ряда унитарных преобразований сводится к модели газа невзаимодействующих возбуждений, подчиняющихся статистике Ферми—Дирака, влияние на ее свойства атомов примеси удается изучить достаточно подробно.

Точное решение задачи об энергетическом спектре X–Y-цепочки с изолированной примесью показало, что наряду с зоной непрерывного спектра эта система может обладать одним или двумя дискретными энергетическими уровнями, лежащими вне зоны [3].

Рассмотрение многопримесной задачи с малой концентрацией примесных атомов продемонстрировало механизм размытия дискретных примесных уровней в примесные зоны [4].

Исследовалось влияние примесей на фазовые переходы, обусловленные изменением магнитного поля. Вследствие появления в спектре примесных уровней, соответствующих локализованным состояниям, в системе могут происходить «примесные» фазовые переходы, сопровождающиеся скачком намагниченности. В то же время особенность магнитной восприимчивости матрицы, соответствующая фазовому переходу по магнитному полю, при наличии примесей размывается [5].

Детально проанализировано поведение спиновой X–Y-цепочки с примесью во внешних магнитных полях [6–8]: точно решена задача о временной эволюции примесного магнитного атома при скачкообразном изменении магнитного поля [6]; найдены полевая и температурная зависимости магнитного момента примеси и матрицы при различных ориентациях постоянного магнитного поля [7]; изучены высокочастотные свойства примесного атома при продольной накачке [8].

С помощью анзаца Бете [9] строго теоретически исследован ряд моделей с гейзенберговским обменным взаимодействием матрицы с примесью замещения [10–12]. Примесь в этих системах также приводит к появлению дополнительных фазовых переходов по полю в основном состоянии. Однако гамильтониан взаимодействия примеси с матрицей этих моделей мало реален (вид взаимодействия определяется требованием точной разрешимости модели методом анзаца Бете).

Все эти точные результаты, однако, относятся к одноподрешеточным одномерным цепочкам спина 1/2. В последнее время появился ряд работ [13–16], в которых изучалось неорганическое соединение $CuGeO_3$, которое с магнитной точки зрения представляет собой квазиодномерный магнетик ($S = 1/2$), и в котором при низких температурах происходит спин-пайерлсовский фазовый переход с удвоением магнитного периода. Представляет интерес проанализировать на примере более простой модели (допускающей точное решение) поведение магнитной примеси замещения (и немагнитной примеси внедрения) в альтернированной спиновой цепочке $S = 1/2$ (или цепочке с двумя магнитными подрешетками).

В настоящей работе исследуются свойства бесконечной одномерной двухподрешеточной спиновой цепочки с магнитной примесью замещения (немагнитной примесью внедрения). Показано, что в зависимости от соотношения обменных констант и магнетонов примеси и матрицы могут существовать два или четыре локальных примесных уровня. В основном состоянии проекция магнитного момента примесного атома на направление внешнего магнитного поля может испытывать один или два скачка; получены значения магнитного поля, при которых эти скачки могут иметь место.

Исследуемая система описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = -J_1 \sum_{n\neq 0} \left(S^x_{n,1} S^x_{n,2} + S^y_{n,1} S^y_{n,2} \right) -$$

$$- J_2 \sum_{n\neq -1} \left(S^x_{n,2} S^x_{n+1,1} + S^y_{n,2} S^y_{n+1,1} \right) -$$

$$- \mu_1 H \sum_{n\neq 0} S^z_{n,1} - \mu_2 H \sum_n S^z_{n,2} - \mu'_1 H S^z_{0,1} -$$

$$- J'_1 \left(S^x_{0,1} S^x_{0,2} + S^y_{0,1} S^y_{0,2} \right) -$$

$$- J'_2 \left(S^x_{-1,2} S^x_{0,1} + S^y_{-1,2} S^y_{0,1} \right), \qquad (1)$$

где J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия внутри и между элементарными ячейками матрицы; J'_1 и J'_2 — соответствующие константы для примеси, находящейся в нулевом узле цепочки; μ_1 и μ_2 — магнетоны подрешеток матрицы; μ'_1 — магнетон примеси; H — внешнее магнитное поле (случай $\mu'_1 = \mu_1$ и $J'_2 = J_2$ соответствует немагнитной примеси внедрения, случай $J'_1 \neq J_1$ и $J'_2 \neq J_2$, $\mu'_1 \neq 0$ — магнитной примеси замещения).

Перейдем к представлению спиновых операторов фермиевскими с помощью двухподрешеточного преобразования Йордана—Вигнера [17]:

$$s^{\pm}_{n,j} = s^x_{n,j} \pm i s^y_{n,j}, \quad s^+_{n,1} = \prod_{m<n} \sigma_{m,1} \sigma_{m,2} a_{n,1},$$

$$s^+_{n,2} = \prod_{m<n} \sigma_{m,1} \sigma_{m,2} \sigma_{n,1} a_{n,2},$$

$$2 s^z_{n,j} = \sigma_{n,j} = 1 - 2 a^+_{n,j} a_{n,j}, \quad j = 1, 2. \qquad (2)$$

В представлении ферми-операторов $a^+_{n,j}$, $a_{n,j}$ гамильтониан (1) принимает следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{J_1}{2}\sum_{n\neq 0}\left(a^+_{n,1}a_{n,2} + a^+_{n,2}a_{n,1}\right) - \frac{J_2}{2}\sum_{n\neq -1}\left(a^+_{n+1,1}a_{n,2} + a^+_{n+1,2}a_{n,1}\right) - \frac{J_1'}{2}\left(a^+_{0,1}a_{0,2} + a^+_{0,2}a_{0,1}\right) -$$

$$- \frac{J_2'}{2}\left(a^+_{0,1}a_{-1,2} + a^+_{-1,2}a_{0,1}\right) + \mu_1 H\sum_{n\neq 0} a^+_{n,1}a_{n,1} + \mu_2 H\sum_n a^+_{n,2}a_{n,2} +$$

$$+ \mu_1' H a^+_{0,1}a_{0,1} - \left(\mu_1 + \mu_2\right)H(N-1)/2 - \left(\mu_1' + \mu_2\right)H\,. \qquad (3)$$

Для приведения гамильтониана (3) к диагональному виду производим преобразование:

$$a_{n,j} = \sum_k \left(u_n^{j1}(k)b_{k1} + u_n^{j2}(k)b_{k2}\right), \quad j = 1, 2\,, \qquad (4)$$

где b_{k1}, b_{k2} — фермиевские операторы, в представлении которых гамильтониан (3) диагонален.

Для нахождения коэффициентов $u_n^{ij}(k)$ составляем «уравнения движения» для операторов $a_{n,1}$ и $a_{n,2}$, учитывая при этом, что $i\hbar db_{kj}/dt = \varepsilon_{kj}\,b_{kj}$, $j = 1,2$, где ε_{kj} — спектр элементарных возбуждений цепочки. Получаем две независимые системы уравнений для пар коэффициентов $u^{1j}(k)$ и $u^{2j}(k)$, $j = 1,2$

$$u_n^{1j}(k)\left(\varepsilon_{kj} - \mu_1 H\right) + \frac{u_{n-1}^{2j}(k)J_2}{2} + \frac{u_n^{2j}(k)J_1}{2} = 0\,,$$

$$n \neq 0\,,$$

$$\frac{u_n^{1j}(k)J_1}{2} + \frac{u_{n+1}^{1j}(k)J_2}{2} + u_n^{2j}(k)\left(\varepsilon_{kj} - \mu_2 H\right) = 0\,,$$

$$n \neq -1, 0\,. \qquad (5)$$

«Уравнения движения» для фермиевских операторов примесного и соседних с ним атомов дают граничные условия для системы уравнений в конечных разностях (5):

$$u_0^{1j}(k)\left(\varepsilon_{kj} - \mu_1' H\right) + \frac{u_{-1}^{2j}(k)J_2'}{2} + \frac{u_0^{2j}(k)J_1'}{2} = 0\,,$$

$$\frac{u_{-1}^{1j}(k)J_1}{2} + \frac{u_0^{1j}(k)J_2'}{2} + u_{-1}^{2j}(k)\left(\varepsilon_{kj} - \mu_2 H\right) = 0\,,$$

$$\frac{u_0^{1j}(k)J_1'}{2} + \frac{u_1^{1j}(k)J_2}{2} + u_0^{2j}(k)\left(\varepsilon_{kj} - \mu_2 H\right) = 0\,,$$

$$j = 1, 2\,. \qquad (6)$$

Ищем частное решение системы (5) в виде

$$u_n^{ij}(k) = \alpha_{ij}(k)r^n\,, \quad i, j = 1, 2\,. \qquad (7)$$

Подстановка (7) в (5) позволяет получить выражение для энергетического спектра цепочки

$$2\varepsilon_{1,2} = \left(\mu_1 + \mu_2\right)H \pm$$

$$\pm\left[\left(\mu_1 - \mu_2\right)^2 H^2 + \left(J_1 + J_2 r\right)\left(J_1 + J_2 r^{-1}\right)\right]^{1/2}. \qquad (8)$$

Величина r может быть комплексной или вещественной.

1. Рассмотрим сначала случай, когда r — комплексная величина. Ищем решение системы (5) в виде $r = \exp(ik)$. Общее решение запишем в виде

$$u_n^{ij}(k) = A_{ij}(k)\,e^{ikn} + B_{ij}(k)\,e^{-ikn}. \qquad (9)$$

Подстановка (9) в (5) позволяет получить связь между коэффициентами

$$A_{2j} = \lambda_j A_{1j}\,; \quad B_{2j} = \lambda_j^* B_{1j}\,, \qquad (10)$$

где

$$\lambda_j = \frac{J_1 + J_2\,e^{ik}}{2(\mu_2 H - \varepsilon_{jk})}\,. \qquad (11)$$

Подставляя затем (9) в (6) и учитывая соотношения (10), получаем систему линейных уравнений для определения коэффициентов A_{1j}, B_{1j}, и u_0^{2j} через u_0^{1j} и энергетические параметры цепочки

$$\frac{u_0^{2j}J_1'}{2} + \frac{A_{1j}\lambda_j J_2' e^{-ik}}{2} + \frac{B_{1j}\lambda_j^* J_2' e^{ik}}{2} =$$

$$= u_0^{1j}\left(\mu_1' H - \varepsilon_{jk}\right)\,,$$

$$u_0^{2j}\left(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\right) + \frac{A_{1j}e^{ik}J_2}{2} + \frac{B_{1j}e^{ik}J_2}{2} = -\frac{u_0^{1j}J_1'}{2}\,,$$

$$A_{1j}e^{-ik}\left[\frac{J_1}{2} + \lambda_j\left(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\right)\right] +$$

$$+ B_{1j}e^{ik}\left[\frac{J_1}{2} + \lambda_j^*\left(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\right)\right] = u_0^{1j}J_2'\,. \qquad (12)$$

Решая систему (12), получаем следующие выражения:

$$A_{1j} = \alpha_{1j} u_0^{1j}; \quad B_{1j} = \alpha_{1j}^* u_0^{1j},$$

где

$$\alpha_{1j} = -i\Big[J_2 e^{-ik}\Big(\big|J_1 + J_2 e^{ik}\big|^2 - J_2'^2 - J_1'^2\Big) -$$

$$- J_2'\Big(J_1' J_2 + J_2' J_1\Big) + 2J_2\Big(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\Big)\Big(\mu_1' - \mu_1\Big) H\Big] \times$$

$$\times \Big[2J_2 \sin(k)\Big(J_1' J_2 + J_2' J_1\Big)\Big]^{-1}. \qquad (13)$$

Для нахождения величин $u_0^{1j}(k)$, $j = 1, 2$ воспользуемся коммутационными соотношениями

$$\Big\{b_{kj}^+, b_{k'j'}\Big\} = \delta(k - k')\delta_{jj'} =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(u_n^{1j*}(k) u_n^{1j'}(k') + u_n^{2j*}(k) u_n^{2j'}(k')\Big). \qquad (14)$$

Коэффициенты $u_0^{ij}(k)$ имеют следующий вид:

$$u_0^{1j}(k) = \frac{|\varepsilon_{jk} - \mu_2 H|^{1/2} e^{i\varphi_j(k)}}{(\varepsilon_{1k} - \varepsilon_{2k})|\alpha_{1j}|\sqrt{2}}; \qquad (15)$$

$$u_0^{2j}(k) = -u_0^{1j}(k)\Big[J_2\big|J_1 + J_2 e^{ik}\big|^2 +$$

$$+ 2J_2\Big(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\Big)\Big(\mu_1' - \mu_1\Big) H + J_2'\Big(J_1' J_2 + J_2' J_1\Big)\Big] \times$$

$$\times \Big[2\Big(\varepsilon_{jk} - \mu_2 H\Big)\Big(J_1' J_2 + J_2' J_1\Big)\Big]^{-1}, \quad j = 1, 2 \qquad (16)$$

Полученные решения относятся к непрерывному спектру цепочки

$$2\varepsilon_{1,2k} = \Big(\mu_1 + \mu_2\Big) H \pm$$

$$\pm\Big[\Big(\mu_1 - \mu_2\Big)^2 H^2 + \big|J_1 + J_2 e^{ik}\big|^2\Big]^{1/2}. \qquad (17)$$

2. Рассмотрим теперь случай, когда r — вещественная величина. Для определенности считаем, что $|r| < 1$. Ищем решение системы (5) в виде

$$u_{|n}^{ij} = A_{ij} r^{|n|}; \quad u_{-|n|}^{ij} = B_{ij} r^{|n|}. \qquad (18)$$

Такой вид решения связан с требованием ограниченности коэффициентов u_n^{ij} при $n \to \pm\infty$. Подставляя (18) в (5), получаем связь между коэффициентами A_{1j} и A_{2j}, B_{1j} и B_{2j}:

$$A_{2j} = \lambda_{1j} A_{1j}, \quad \text{где} \quad \lambda_{1j} = \frac{J_1 + J_2 r}{2(\mu_2 H - \varepsilon_j)}; \qquad (19)$$

$$B_{2j} = \lambda_{2j} B_{1j}, \quad \text{где} \quad \lambda_{2j} = \frac{J_1 + J_2 r^{-1}}{2(\mu_2 H - \varepsilon_j)} \qquad (20)$$

и ε_j — две ветви дискретного спектра цепочки, описываемые формулой (8). Подставляя теперь (18) в граничные условия (6) и учитывая связь между коэффициентами (19), (20), получаем уравнение для определения r:

$$2J_1 J_2\Big(\mu_1' - \mu_1\Big) H\Big[\Big(\mu_1 - \mu_2\Big) H \pm$$

$$\pm\Big((\mu_1 - \mu_2)^2 H^2 + J_1^2 + J_2^2 + J_1 J_2(r + r^{-1})\Big)^{1/2}\Big] r =$$

$$= r^2\Big(J_2^2 J_1^2 - J_1'^2 J_2^2 - J_2'^2 J_1^2\Big) +$$

$$+ rJ_1 J_2\Big(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2\Big) + J_1^2 J_2^2, \qquad (21)$$

а также выражаем коэффициенты A_{1j}, B_{1j} и u_0^{2j} через коэффициент u_0^{1j}:

$$A_{1j} = \alpha u_0^{1j}, \quad \alpha = J_1'/J_1;$$

$$B_{1j} = \beta u_0^{1j}, \quad \beta = J_2'/J_2; \qquad (22)$$

$$u_0^{2j} = \gamma_j u_0^{1j}, \quad \gamma_j = \alpha\lambda_{1j}.$$

Если $\mu_1' \neq \mu_1$, то (21) представляет собой уравнение четвертой степени по r, не сводящееся к биквадратному; если же $\mu_1' = \mu_1$, то выражение для r можно получить в явном виде:

$$r_{1,2} = J_1 J_2\Big[J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 \pm$$

$$\pm\Big(\Big(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2\Big)^2 +$$

$$+ 4\Big(J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2\Big)\Big)^{1/2}\Big] \times$$

$$\times\Big[2\Big(J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2\Big)\Big]^{-1}. \qquad (23)$$

Коэффициент u_0^{1j} получаем из условия нормировки

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big(\Big(u_n^{1j}\Big)^2 + \Big(u_n^{2j}\Big)^2\Big) = 1;$$

$$\Big(u_n^{1j}\Big)^2 =$$

$$= \frac{1 - r^2}{(1 + \gamma_j)^2(1 - r^2) + r^2\left[\alpha^2(1 + \lambda_{1j}^2) + \beta^2(1 + \lambda_{2j}^2)\right]}. \quad (24)$$

Полученные нами решения относятся к локальным уровням

$$2\varepsilon_{1,2}^{(j)} = \left(\mu_1 + \mu_2\right)H \pm$$

$$\pm \left[\left(\mu_1 - \mu_2\right)^2 H^2 + \left(J_1 + J_2 r_j\right)\left(J_1 + J_2 r_j^{-1}\right)\right]^{1/2},$$

$$j = 1, 2. \quad (25)$$

В принципе возможно существование четырех локальных примесных уровней. Уровни появляются (исчезают) при $|r_j| = 1$, $j = 1, 2$. Вычислим магнитный момент примесного атома

$$\langle m_0^z\rangle = \mu_1\left(\frac{1}{2} - \langle a_{0,1}^+ a_{0,1}\rangle\right) =$$

$$= \mu_1\left[\frac{1}{2} - \sum_{k,p}\left(u_0^{11*}(k)u_0^{11}(p)\,\langle b_{k1}^+ b_{p1}\rangle + \right.\right.$$

$$\left.\left. + u_0^{12*}(k)u_0^{12}(p)\langle b_{k2}^+ b_{p2}\rangle\right)\right] =$$

$$= \mu_1\left(\frac{1}{2} - \sum_k\left\{|u_0^{11}(k)|^2\langle b_{k1}^+ b_{k1}\rangle + |u_0^{12}(k)|^2\langle b_{k2}^+ b_{k2}\rangle\right\} - \right.$$

$$- |u_0^{11}(r_1)|^2\,\theta\left(1 - |r_1|\right)\langle b_1^{(1)+} b_1^{(1)}\rangle -$$

$$- |u_0^{12}(r_1)|^2\,\theta\left(1 - |r_1|\right)\langle b_2^{(1)+} b_2^{(1)}\rangle -$$

$$- |u_0^{11}(r_2)|^2\,\theta\left(1 - |r_2|\right)\langle b_1^{(2)+} b_1^{(2)}\rangle -$$

$$\left. - |u_0^{12}(r_2)|^2\,\theta\left(1 - |r_2|\right)\langle b_2^{(2)+} b_2^{(2)}\rangle\right), \quad (26)$$

где

$$\langle b_{kj}^+ b_{kj}\rangle = \left(1 + \exp\left(\beta\varepsilon_{kj}\right)\right)^{-1};\ j = 1, 2$$

$$\langle b_j^{(n)+} b_j^{(n)}\rangle = \left(1 + \exp\left(\beta\varepsilon_j^{(n)}\right)\right)^{-1};\ j, n = 1, 2 \quad (27)$$

— равновесные гиббсовские функции распределения возбуждений цепочки; β — обратная температура; $\theta(x)$ — тэта-функция Хевисайда.

Рассмотрим основное состояние системы ($T = 0$). Поскольку ε_{1k} и $\varepsilon_1^{(1,2)}$ всегда неотрицательны (см., (17) и (25)), то $\langle b_{k1}^+ b_{ki}\rangle = 0$ и $\langle b_1^{+(1,2)} b_1^{(1,2)}\rangle = 0$ в основном состоянии, и получаем следующую формулу для магнитного момента примесного атома:

$$\langle m_0^z\rangle_{T=0} = \mu_1\left(\frac{1}{2} - \sum_k |u_0^{12}(k)|^2\,\theta(-\varepsilon_{k2}) - \right.$$

$$- |u_0^{12}(r_1)|^2\,\theta\left(1 - |r_1|\right)\theta(-\varepsilon_2^{(1)}) -$$

$$\left. - |u_0^{12}(r_2)|^2\,\theta\left(1 - |r_2|\right)\theta(-\varepsilon_2^{(2)})\right). \quad (28)$$

Тэта-функции $\theta(-\varepsilon_2^{(j)})$ можно переписать в виде $\theta(H - H_{3,4})$, где

$$H_{3,4} = \frac{\sqrt{(J_1 + J_2 r_j)(J_1 + J_2 r_j^{-1})}}{2(\mu_1\mu_2)^{1/2}},\quad j = 1, 2.$$

Если величина r_j удовлетворяет неравенству $0 < r_j < 1$, то соответствующее критическое поле $H_{3,4}$ превосходит критические поля H_{1c} и H_{2c}, где $H_{1c} = |J_1 - J_2|/(4\mu_1\mu_2)^{1/2}$; $H_{2c} = (J_1 + J_2)/(4\mu_1\mu_2)^{1/2}$. Если же выполняется неравенство $-1 < r_j < 0$, то $H_{3,4} < H_{1c} < H_{2c}$. Легко видеть, что в зависимости от соотношения обменных констант возможны следующие три ситуации:

а) $J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 > 0$,

$J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 > 0$.

или $J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 < 0$, $J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 > 0$. В этом случае $r_1 > 0$, $r_2 < 0$, $H_3 > H_{2c}$, $H_4 < H_{1c}$.

б) $J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 > 0$,

$J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 < 0$.

В этом случае $r_1 < 0$, $r_2 < 0$, $H_3 < H_{1c}$, $H_4 < H_{1c}$.

в) $J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 < 0$,

$J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 < 0$.

В этом случае $r_1 > 0$, $r_2 > 0$, $H_3 > H_{2c}$, $H_4 > H_{2c}$.

Графики качественных зависимостей проекции магнитного момента примеси на выделенное направление от внешнего магнитного поля при нулевой температуре представлены на рис. 1 для всех трех случаев.

В случае а) уровни $\varepsilon_{1,2}^{(1)}$ возникают при выполнении условия

$$J_2^2 J_1^2 < J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 -$$

$$- J_1 J_2\left(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2\right),$$

уровни $\varepsilon_{1,2}^{(2)}$ — при выполнении условия

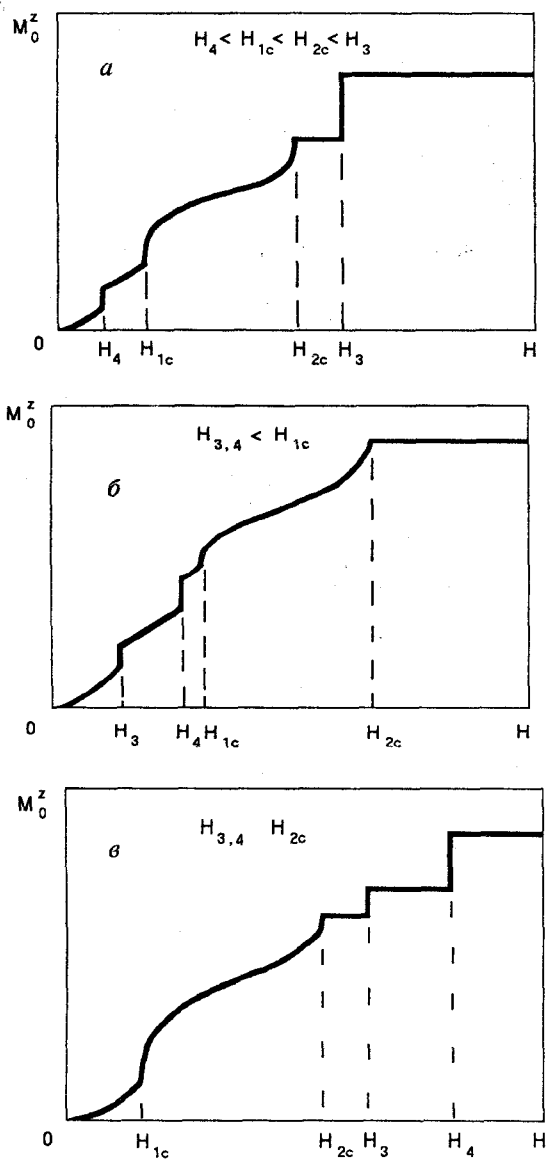

Рис. 1. Графики зависимостей проекции магнитного момента примесного атома в основном состоянии на выделенное направление от величины внешнего магнитного поля для различных случаев: $H_4 < H_{1c}$, $H_3 > H_{2c}$ (*а*); $H_3 < H_{1c}$, $H_4 < H_{1c}$ (*б*); $H_3 > H_{2c}$, $H_4 > H_{2c}$ (*в*).

$$J_2^2 J_1^2 < J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 + \\ + J_1 J_2 \left(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 \right) .$$

В случае б) уровни $\varepsilon_{1,2}^{(1)}$ и $\varepsilon_{1,2}^{(2)}$ возникают при выполнении условия

$$J_2^2 J_1^2 > J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 - \\ - J_1 J_2 \left(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 \right) .$$

В случае в) уровни $\varepsilon_{1,2}^{(1)}$ и $\varepsilon_{1,2}^{(2)}$ возникают при выполнении условия

$$J_2^2 J_1^2 > J_1'^2 J_2^2 + J_2'^2 J_1^2 - J_2^2 J_1^2 + \\ + J_1 J_2 \left(J_1^2 + J_2^2 - J_1'^2 - J_2'^2 \right) ,$$

Рассмотрим предельный случай $J_{1,2} = J(1 \pm \theta)$, $J'_{1,2} = J(1 \pm \varphi)$, что соответствует возможному спин-пайерлсовскому переходу. Формулы для r_1 и r_2 имеют в этом случае следующий вид:

$$r_{1,2} = \frac{(1-\theta)^2 [\theta^2 - \varphi^2 \pm (1 + 4\theta^2 \cdot 2\varphi^2 + \varphi^4 - 8\theta\varphi)^{1/2}]}{1 + 4\theta^2 + 2\varphi^2 + 2\theta^2\varphi^2 - \theta^4 - 8\theta\varphi}$$

При малых θ и φ ($\theta, \varphi \ll 1$) один из корней всегда положителен и меньше единицы (соответствующий локальный уровень расположен выше зоны непрерывного спектра цепочки), другой всегда отрицателен и по модулю меньше единицы при $\theta > \varphi$ (соответствующий локальный уровень расположен ниже зоны непрерывного спектра), больше единицы при $\theta < \varphi$ (при этом локальный уровень исчезает). Случай $\theta = \varphi$ соответствует отсутствию примеси. Проведенное рассмотрение показывает, что в системе возможен спин-пайерлсовский переход.

Магнитный момент атома матрицы имеет следующий вид:

$$\langle m_{n,j}^z \rangle = \mu_j \left(\frac{1}{2} - \sum_k \left(|u_n^{j1}(k)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_1(k)}\right)^{-1} + \right.\right. \\ \left. + |u_n^{j2}(k)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_2(k)}\right)^{-1} \right) - \\ - |u_n^{j1}(r_1)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_1^{(1)}}\right)^{-1} \theta\left(1 - |r_1|\right) - \\ - |u_n^{j1}(r_2)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_1^{(2)}}\right)^{-1} \theta\left(1 - |r_2|\right) - \\ - |u_n^{j2}(r_1)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_2^{(1)}}\right)^{-1} \theta\left(1 - |r_1|\right) - \\ \left. - |u_n^{j2}(r_2)|^2 \left(1 + e^{\beta\varepsilon_2^{(2)}}\right)^{-1} \theta\left(1 - |r_2|\right) \right) . \quad (29)$$

В основном состоянии магнитный момент атома матрицы выглядит следующим образом:

$$\langle m_{n,j}^z \rangle = \mu_j \left(\frac{1}{2} - \sum_k |u_n^{j2}(k)|^2 \theta(-\varepsilon_2(k)) - \right. \\ - |u_n^{j2}(r_1)|^2 \theta(-\varepsilon_2^{(1)}) \theta\left(1 - |r_1|\right) -$$

$$- |u_n^{f2}(r_2)|^2 \theta(-\varepsilon_2^{(2)}) \theta\left(1 - |r_2|\right) . \qquad (30)$$

Из выражений (29),(30) видно, что величина скачка проекции магнитного момента на выделенную ось убывает степенным образом с удалением иона матрицы от примесного.

Таким образом, в настоящей работе теоретически изучены свойства одномерной спиновой X–Y-модели с двумя подрешетками при наличии магнитной примеси замещения (и немагнитной примеси внедрения). Нами показано, что, поскольку удвоение магнитных подрешеток приводит к появлению второй ветви непрерывного спектра матрицы, в зависимости от соотношения обменных констант и магнетонов примеси и матрицы могут существовать два или четыре локальных примесных уровня (в отличие от одноподрешеточной X-Y-цепочки). В основном состоянии проекция магнитного момента примесного атома на направление внешнего магнитного поля может испытывать один или два скачка; получены значения магнитного поля, при которых эти скачки могут иметь место. Ненулевая температура, как обычно для одномерных систем, размывает скачки магнитного момента.

1. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
2. Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, Москва (1985).
3. И. А. Виниковецкий, А. М. Фришман, В. И. Хохлов, *УФЖ* **18**, 810 (1973).
4. Н. Ю. Трифонов, *ФММ* **48**, 464 (1979).
5. И. А. Виниковецкий, А. М. Фришман, В. М. Цукерник, *УФЖ* **19**, 1966 (1974).
6. О. Б. Заславский, В. М. Цукерник, *ФНТ* **6**, 1326 (1980).
7. В. З. Клейнер, В. М. Цукерник, *ФНТ* **6**, 332 (1980).
8. В. З. Клейнер, В. М. Цукерник, *ФММ* **39**, 947 (1975).
9. H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
10. N. Andrei and H. Johanneson, *Phys. Lett.* **A100**, 108 (1984).
11. P. Schlottmann, *J. Phys. Condensed Matter* **3**, 6617 (1991).
12. P. Schlottmann, *Phys. Rev.* **B49**, 9202 (1994).
13. M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993).
14. H. Hori, M. Furusawa, T. Takeuchi, S. Sugai, K. Kindo, and A. Yamagishi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 18 (1994).
15. M. Nishi, O. Fujita, and J. Akimitsu, *Phys. Rev.* **B50**, 6508 (1994).
16. H. Kuroe, T. Sekine, M. Hase, Y. Sasago, K. Uchinokura, H. Kojima, I. Tanaka, and Y. Shibuya, *Phys. Rev.* **B50**, 16468 (1994).
17. P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).

Low temperature magnetization behavior features of one-dimensional altertating spin chain with impurity

A. A. Zvyagin and Ya. Yu. Segal

The properties of an one-dimensional two-sublattice X–Y spin chain with an isolated magnetic substitutional impurity (non-magnetic interstitial impurity) are studied theoretically. It is shown that in addition to two branches of the continuous spectrum two or four discrete impurity levels can exist in the system. A study has been made of a behavior of impurity magnetic moment and magnetic moments of matrix atoms in the constant magnetic field applied. The values of the constant external magnetic field, are determined at which jumps of the projections of an impurity magnetic moment on the preferred direction can occur.