

Исследование магнитных свойств цепочки с чередующимися ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями в модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$

© С.С. Аплеснин, Г.А. Петраковский

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия

(Поступила в Редакцию 8 декабря 1998 г.)

Квантовым методом Монте-Карло вычислены восприимчивость, парные спин-спиновые корреляционные функции цепочки с чередующимися ферро (K)- и антиферромагнитными (J) обменными взаимодействиями в модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$. Из восприимчивости определена энергетическая щель между основным и возбужденным триплетным состояниями для произвольного отношения K/J , величина которой совпадает с холдейновской щелью для спина $S = 1$ при $K/J > 1.25$.

Магнитные свойства одномерной антиферромагнитной цепочки представляют интерес как с экспериментальной [1,2], так и с теоретической точки зрения [3]. Одним из фундаментальных вопросов является гипотеза Холдейна [4] о качественном отличии основного состояния антиферромагнетиков с целым и полуцелым значениями спина. Так, для полуцелого спина существуют бесщелевые магнитные возбуждения [4], а для целых спинов существует щель в спектре возбуждений [5,6], обнаруженная позднее экспериментально [7]. Для спина $S = 1$ разными методами: аналитическими с использованием теории возмущений [8], методами Монте-Карло [9] и точной диагонализацией на малых цепочках [10] определена величина щели $g = 0.41049$ и корреляционный радиус $\xi = 6.2$.

Если рассматривать антиферромагнитную цепочку в виде связанных димеров, то можно получить щель Холдейна чередуя ферро- и антиферромагнитные взаимодействия на цепочке спинов с $S = 1/2$. В пределе сильных FM связей ($K \rightarrow \infty$) димер находится в нижнем триплетном состоянии и цепочку спинов с $S = 1/2$ можно свести к эффективной антиферромагнитной цепочке со спинами $S = 1$. В другом предельном случае ($K \rightarrow 0$) реализуется газ антиферромагнитных димеров, в которых также имеется энергетическая щель между синглетным и триплетным состоянием, равная величине AFM обмена.

Вопрос о магнитном поведении цепочки и величине щели для произвольных соотношений величина обменов K/J остается открытым. В данной работе указанная задача решается квантовым методом Монте-Карло (МС) в модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$. Гамильтониан имеет вид

$$H = -2J \sum_{i=1}^{N/2} S_{2i-1} S_{2i} - 2K \sum_{i=1}^{N/2} S_{2i} S_{2i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i,$$

где $J < 0$, $K > 0$ — соответственно ферро- и антиферромагнитные взаимодействия, N — число спинов в цепочке, h — внешнее магнитное поле.

Детальное описание квантового метода Монте-Карло, использующего формулу Троттера, и соответствующие выражения для вычисления восприимчивости, теплоемкости, парных спин-спиновых корреляционных функций приведено в предыдущей работе [11]. В МС-вычислениях используются периодические граничные условия по троттеровскому направлению (m) и вдоль цепочки. Число спинов в цепочке $L = 200$ и $m = 16, 32$ и 64 . Количество МС-шагов на один спин изменялось от $M = 6000$ до $20\,000$. Один шаг определяется поворотом всех спинов на решетке размером $L \times 2m$. Среднеквадратичная погрешность для энергии и восприимчивости соответственно составляет ~ 1 и $\sim 6\%$. Систематическая ошибка образуется за счет конечного числа Троттера, учитывающе-

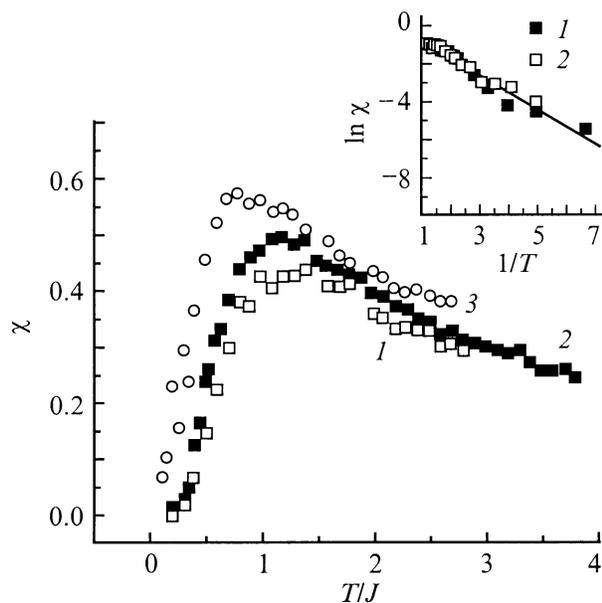


Рис. 1. Температурная зависимость магнитной восприимчивости цепочки с чередующимися ферро-антиферромагнитными обменами для $K/J = -0.25$ (1), 1 (2), 3 (3). На вставке — логарифм восприимчивости от $1/T$ для $K/J = 1$, $m = 64$ (1), 32 (2).

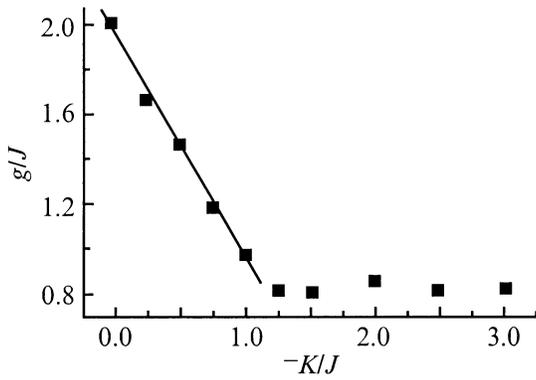


Рис. 2. Зависимость энергетической щели между основным и возбужденным триплетным состояниями от отношения обменов K/J .

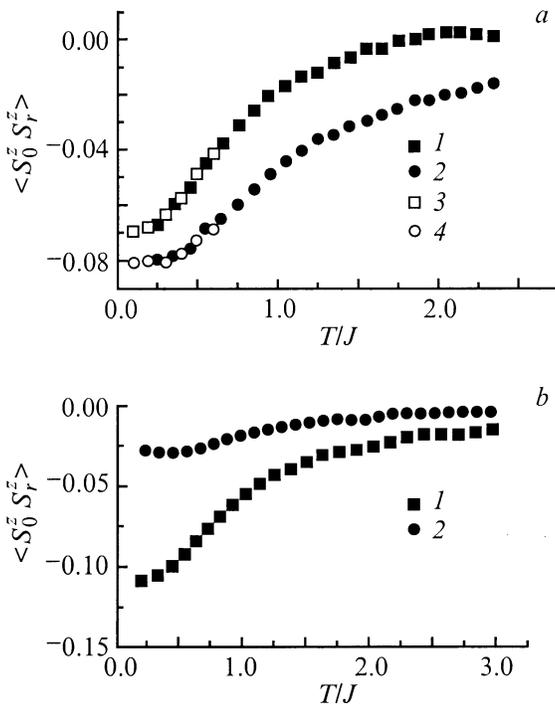


Рис. 3. Температурная зависимость спин-спиновой корреляционной функции для $K/J = -2$ (a), -0.5 (b) на расстоянии $r/a = 1$ (1, 3), $r/a = 2$ (2, 4), $m = 32$ (1, 2), $m = 64$ (3, 4).

го некоммутативность операторов, и пропорциональна $\sim 1/(mT)^2$.

Теплоемкость, восприимчивость, спиновые корреляционные функции для изотропной антиферромагнитной цепочки хорошо согласуются с известными точными

расчетами и приведены в работе [11]. Магнитная восприимчивость цепочки с чередующимися обменами равна нулю при $T \rightarrow 0$. На рис. 1 приведены температурные зависимости восприимчивости для некоторых параметров отношений обменов K/J . С ростом величины FM связи максимум восприимчивости растет и в области низких температур $T/J < 1$ хорошо описывается соотношением $\chi(T) = A \exp(-g/T)$, где g — величина щели между основным и возбужденным триплетным состояниями. На вставке к рис. 1 изображена восприимчивость в логарифмическом масштабе от обратной величины температуры для разных значений m . Как видно из рисунка, квантовые эффекты корректно учтены при данных числах Троттера и в пределах указанной погрешности для восприимчивости хорошо описываются линейной зависимостью.

Величина энергетической щели уменьшается с ростом ферромагнитного обмена и при $K/J > 1.25$ от величины K практически не зависит (рис. 2). По видимому, вычисленное значение K ферромагнитной связи является критическим. Так, спин-спиновые корреляционные функции между ближайшими и следующими за ближайшими соседями отрицательны на всем температурном интервале для $K/J < 1.25$, а для $K/J > 1.25$ при некоторой температуре происходит смена знака $\langle S^z(0)S^z(r = 1) \rangle$ с отрицательного на положительный, как изображено на рис. 3. Возможно, этот эффект вызван снятием вырождения между мультиплетами FM димера с $S^z = \pm 1$ и 0 из-за антиферромагнитного взаимодействия между ними. С ростом J/K расщепление между мультиплетами увеличивается.

Итак, одномерная цепочка с чередующимися ферро-антиферромагнитными обменами имеет щель в энергии спиновых триплетных возбуждений, значение которой не зависит от величины ферромагнитного обмена при $K/J > 1.25$ и равно величине щели Холдейна для $S = 1$.

Список литературы

- [1] Manaka Hirotaka, Yamada Isao. J. Phys. Soc. Jap. **66**, 1908 (1997).
- [2] N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida. Phys. Rev. Lett. **76**, 17, 3212 (1996).
- [3] J.C. Bonner, M.E. Fisher. Phys. Rev. **135**, 640 (1964).
- [4] F.D.M. Haldane. Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [5] S. Yamamoto, S. Miyashita. Phys. Rev. **B48**, 13, 9528 (1993).
- [6] U. Schollwock, T. Jolicoeur. Europhys. Lett. **30**, 493 (1995).
- [7] J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault. J. Appl. Phys. **63**, 3538 (1988).
- [8] Д.В. Хвещенко, А.В. Чубуков. ЖЭТФ **66**, 1088 (1987).
- [9] M.P. Nightingale, H.W.J. Blote. Phys. Rev. **B33**, 659 (1986).
- [10] O. Golinelli, T. Jolicoeur, R. Lacore. Phys. Rev. **B50**, 5, 3037 (1994).
- [11] С.С. Аплеснин, ФТТ **38**, 1868 (1996).