# МЕТАМАГНИТНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ФРУСТРИРОВАННЫХ ЛЕСТНИЧНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ

Д. В. Дмитриев, В. Я. Кривнов<sup>\*</sup>, А. А. Овчинников

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук 117977, Москва, Россия

> Max-Planck Institute of Complex System Physics 01187, Dresden, Germany

Поступила в редакцию 25 июля 2000 г.

Проведены вариационные расчеты кривой намагниченности при нулевой температуре для двух моделей фрустрированных спиновых лестничных систем с ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями. В зависимости от параметров моделей их основное состояние является либо ферромагнитным, либо антиферромагнитным. Характер перехода из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное отличается от соответствующего перехода в *XXZ*-модели появлением связанных многомагнонных состояний. Показано, что наличие этих состояний приводит к скачкам намагниченности при определенных значениях внешнего поля. Найдена область фазовой диаграммы, где такие скачки происходят, и определены величины соответствующих критических полей.

PACS: 75.10.Jm

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Спиновые лестничные системы (spin-ladders) в последние годы вызывают большой интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Эти системы, состоящие из взаимодействующих спиновых цепочек и являющиеся промежуточными объектами между одно- и двумерными системами, обладают рядом необычных свойств [1]. Так, например, в некоторых допированных лестничных системах обнаружена сверхпроводимость под давлением [2]. Ожидается, что синтез новых лестничных систем приведет к созданию ВТСП на их основе.

Особый интерес представляет исследование свойств лестничных систем в магнитном поле. Например, оказалось, что при определенных условиях возможно появление плато на кривой намагниченности лестничных систем [3,4]. В последнее время также обсуждается возможность другого аномального явления — наличия скачка намагниченности при некотором критическом значении магнитного поля [5]. Такое явление иногда называют метамагнитным переходом. Исследование процессов намагниченности представляет сложную задачу даже для сравнительно простых спиновых моделей, поскольку требует знания зависимости энергии от полного спина. Одной из немногих моделей, для которой такая зависимость может быть найдена точно, является одномерная XXZ-модель [6]. Для этой модели кривая намагниченности m(H) (m — среднее значение спина на центр) является гладкой, т. е. m(H) непрерывным образом меняется от нуля до насыщающей величины. Однако включение взаимодействий неближайших соседей может существенно изменить ситуацию и привести к появлению скачков намагниченности [5].

В настоящее время достаточно хорошо изучены магнитные свойства антиферромагнитных лестничных систем. Значительно меньше исследованы более сложные модели фрустрированных систем, где наряду с антиферромагнитными имеются и взаимодействия ферромагнитного типа. Наличие такого рода взаимодействий имеет место и в реальных лестничных системах. Отметим, что метамагнитный переход при низких температурах был обнаружен в соединении CsCuCl<sub>3</sub> [7], топология которого близка

<sup>\*</sup>E-mail: krivnov@deom.chph.ras.ru

к лестничной и в котором имеются взаимодействия ферро- и антиферромагнитного типов.

В настоящей работе будут рассмотрены две модели лестничных систем, состоящих из двух цепочек спинов s = 1/2 с конкурирующими взаимодействиями ферро- и антиферромагнитного типов. Фазовая диаграмма этих моделей состоит из ферромагнитной (F) и антиферромагнитной (AF) фаз. Одна из рассматриваемых моделей, представляющая ферромагнитную лестничную систему с антиферромагнитными диагоналями, является бесщелевой в AF-фазе, тогда как другая, относящаяся к классу зигзагообразных лестничных систем, имеет щель в спектре возбуждений.

В общем случае кривая намагниченности при нулевой температуре, m(H), характеризуется наличием двух критических полей, H<sub>c1</sub> и H<sub>c2</sub>. Намагниченность m = 0 при  $0 < H \leq H_{c1}$  и m = 1/2 при  $H \geq H_{c1}$ . Естественно ожидать, что  $H_{c1} = 0$  для бесщелевой модели и  $H_{c1} = \Delta$  в модели со щелью ( $\Delta$  синглет-триплетная щель). Что касается верхнего критического поля  $H_{c2}$ , то оно обычно равно энергии  $\epsilon_1$  одномагнонных возбуждений, т.е. энергии, связанной с переворотом одного спина в F-состоянии. Такое поведение зависимость m(H) имеет тогда, когда энергия  $\varepsilon(m)$  основного состояния при фиксированном значении намагниченности является монотонно возрастающей и выпуклой функцией. Именно такой является зависимость  $\varepsilon(m)$  в XXZ-модели, если параметр анизотропии  $-1 < \gamma < 1$  [6]. Если же  $\partial^2 \varepsilon / \partial m^2 \leq 0$  при некоторых значениях m, то кривая намагниченности m(H) имеет скачки и критические поля  $H_{c1}$  и  $H_{c2}$ , вообще говоря, не определяются величинами  $\Delta$  и  $\epsilon_1$ . Такое аномальное поведение m(H)имеет при определенных значениях параметров в рассмотренных нами моделях. Как будет обсуждено ниже, это обусловлено наличием связанных многомагнонных состояний и возникающим вследствие этого разделением фаз.

Точное вычисление зависимости  $\varepsilon(m)$  для лестничных систем не представляется возможным. Поэтому для ее расчета используются различные приближения: метод среднего поля [8], теория возмущений [9], бозонизация спиновых моделей [10], а также численная диагонализация конечных систем. В данной работе мы использовали вариационный подход, основанный на использовалии вариационной функции типа matrix-product (MP). Эта функция широко используется в расчетах одномерных и квазиодномерных спиновых и электронных систем [11, 12] и дает результаты, сравнимые по точности с известным методом DMRG (density matrix renormalization group) [13]. Преимуществом МР-приближения является возможность рассматривать системы с числом спинов большим 10<sup>6</sup> и, следовательно, фактически переходить к термодинамическому пределу. Следует также отметить, что для ряда специальных моделей лестничных систем функция МР-типа является точной волновой функцией основного состояния [14–16]. Наряду с вариационными расчетами мы использо-

вали результаты точной диагонализации конечных систем. В определенном предельном случае возможно сведение зигзагообразных лестничных систем к точно решаемой XXZ-модели.

Статья построена следующим образом. Во втором и третьем разделах будут представлены результаты расчета кривой намагниченности для двух моделей лестничных систем вместе с деталями используемых приближений. В Заключении будет дано краткое обсуждение полученных результатов.

## 2. ЛЕСТНИЧНАЯ МОДЕЛЬ С ДВУМЯ ТИПАМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Рассмотрим лестничную систему с ферромагнитным взаимодействием ближайших соседей и антиферромагнитным диагональным взаимодействием (рис. 1). Гамильтониан этой модели в однородном магнитном поле имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - H \sum_{i=1}^{2} \sum_{n=1}^{N} S_{in}^z, \tag{1}$$

где

$$\mathcal{H}_{0} = J_{F} \left[ \sum_{i=1}^{2} \sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{in+1} - \frac{1}{4} \right) + \sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{1n} \cdot \mathbf{S}_{2n} - \frac{1}{4} \right) \right] + J_{AF} \sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{1n} \cdot \mathbf{S}_{2n+1} + \mathbf{S}_{2n} \cdot \mathbf{S}_{1n+1} - \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

 $\mathbf{S}_{1(2)n}$  — операторы спина s=1/2, относящиеся к нижней (верхней) цепочке, N — число попереч-



Рис.1. Ферромагнитная лестница с антиферромагнитными диагоналями

ных связей («перекладин» лестницы). В дальнейшем будем полагать обменные интегралы  $J_F = -1$ ,  $J_{AF} = J > 0$ .

При малых значениях J основное состояние гамильтониана  $\mathcal{H}_0$  является ферромагнитным. Точное значение  $J_c$ , при котором происходит переход из основного ферромагнитного состояния в синглетное (F–AF-переход при нулевой температуре), неизвестно. Определим, например,  $J_c$  как значение, при котором основное F-состояние становится неустойчивым относительно рождения одного магнона. Поскольку энергия одномагнонного состояния  $\epsilon_1(J) = E_{min}(S_{max} - 1)$  равна

$$\epsilon_1 = (-2J+1), \quad J \ge 1/2,$$
  
 $\epsilon_1 \approx N^{-2}, \quad J < 1/2,$ 

а  $E_F = E(S_{max}) = 0$ , то  $J_c = 1/2$ .

Такое же значение  $J_c$  дает и использование классического приближения. Однако по отношению к рождению двух магнонов основное ферромагнитное состояние нестабильно уже при J = 0.442. Более того, как показывают расчеты конечных систем,  $J_{c}(n+1) < J_{c}(n)$ , где  $J_{c}(n)$  — значение J, при котором возникает неустойчивость F-состояния относительно рождения *п* магнонов. В этом смысле рассматриваемая модель имеет те же черты, что и двумерная ферромагнитная модель с антиферромагнитными диагональными взаимодействиями [17]. С другой стороны, характер перехода в рассматриваемой модели отличается от F-AF-перехода в одномерной XXZ-модели, когда параметр анизотропии  $\gamma \rightarrow -1$ и все *п*-магнонные энергии одновременно обращаются в нуль ( $E_F = 0$ ) в точке перехода.

Как следует из сказанного выше, истинное значение  $J_c$  в модели (2) соответствует неустойчивости F-состояния относительно переворота половины всех спинов, т. е.  $J_c = J_c(N)$ , и при  $J = J_c$  происходит непосредственный переход из ферромагнитного в синглетное состояние.

Тот факт, что  $\epsilon_n < 0$  при  $J > J_c(n)$ , а все  $\epsilon_i \propto N^{-2}$  (i < n) при  $J_c(n) < J < J_c(n-1)$ , означает, что n магнонов образуют связанное состояние по крайней мере для значений J, лежащих в этом интервале (в действительности оно может быть связанным и при  $J > J_c(n-1)$ ), и энергия связи этого состояния обращается в нуль при  $J = J_c(n)$ . Таким образом, при  $J \to J_c$  «выживает» лишь связанное состояние из N магнонов. Поскольку общее число спинов в этом состоянии равно 2N, оно является синглетным (m = 0). Ясно также, что при  $J \to J_c$ 

m является двухфазным, состоящим из ферромагнитного и синглетного (связанного) состояний. Поскольку энергия связанного состояния макроскопического числа магнонов пропорциональна их числу, то при  $J \to J_c$  энергия  $\varepsilon(m) = E_0(m)/N$ , приходящаяся на одну перекладину (m = S/2N), является линейной функцией m:

$$\varepsilon(m) = \varepsilon(0)(1 - 2m). \tag{3}$$

При включении магнитного поля и при  $J \to J_c$ намагниченность испытывает скачок от m = 0 к насыщающей величине m = 1/2 при  $H = H_c = |\varepsilon(0)|$ . (Отметим, что спектр модели (2) бесщелевой и  $H_{c1} = 0$ . Поэтому в этом разделе мы используем обозначение  $H_c$  вместо  $H_{c2}$ .)

При  $J > J_c$  ситуация становится более сложной, поскольку предельное число магнонов  $n_c$  в связанном состоянии может оказаться меньше N, а намагниченность этого состояния  $m_c = 1/2 - n_c/2N$ . Зависимость  $\varepsilon(m)$  при этом будет линейной при  $m_c < m < 1/2$ . В этой области основное состояние является двухфазным, состоящим из ферромагнитной фазы и фазы с намагниченностью  $m_c$ . В этом случае при  $H = H_c$  происходит скачок намагниченности от  $m = m_c$  к насыщающему значению m = 1/2, а величина критического поля  $H_c = (2J - 1) + |\epsilon_b|$ , где  $\epsilon_b$  — энергия связи, приходящаяся на один магнон.

Необходимо, однако, отметить, что связанные состояния магнонов существуют не при всех значениях J. Как показывают расчеты конечных систем (до N = 18), с увеличением J происходит постепенное уменьшение предельно возможного числа магнонов в связанном состоянии до n = 2. Точное решение двухмагнонной задачи дает величину  $J = J_2 = 2.054$ , при которой энергия связи обращается в нуль. При  $J > J_2$  связанные состояния не существуют и функция  $\varepsilon(m)$  является выпуклой, так что скачка намагниченности не происходит. При этом критическое поле  $H_c = |\epsilon_1(J)| = 2J - 1$ .

### 2.1. Вариационная функция МР-типа

Приведенные выше рассуждения носят, конечно, эвристический характер, и для их подтверждения необходимо провести конкретные расчеты зависимости m(H). Для нахождения этой зависимости была использована вариационная функция MP-типа, которая для рассматриваемой модели имеет следующий вид:

$$\Psi = \operatorname{Tr} \prod_{n=1}^{N} (A + B_{-1}S_{1n}^{+} + B_1S_{2n}^{+} + CS_{1n}^{+}S_{2n}^{+})|0\rangle, \quad (4)$$

где индекс n относится к n-й перекладине лестницы,  $|0\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle, A, B_{\lambda}$  и C — матрицы размером  $l \times l$ .

Энергия в расчете на одну перекладину равна

$$\varepsilon = \frac{E}{N} = -\frac{1}{2} \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(G_{\lambda}Q_{\lambda}T^{N-2})}{\operatorname{Tr}T^{N}} + \\ + \frac{J}{2} \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(G_{\lambda}Q_{-\lambda}T^{N-2})}{\operatorname{Tr}T^{N}} - \\ - \frac{1}{4} \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(Z_{\lambda}Z_{\lambda}T^{N-2})}{\operatorname{Tr}T^{N}} + \\ + \frac{J}{4} \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(Z_{\lambda}Z_{-\lambda}T^{N-2})}{\operatorname{Tr}T^{N}} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(B_{\lambda} \otimes B_{-\lambda}T^{N-1})}{\operatorname{Tr}T^{N}} - \\ - \frac{1}{4} \operatorname{Tr}T^{N} \operatorname{Tr}\left(A \otimes A + C \otimes C - \\ - \sum_{\lambda=-1}^{1} B_{\lambda} \otimes B_{-\lambda}T^{N-1}\right) + \frac{3}{4} - \frac{J}{2}, \quad (5)$$

где

$$G_{\lambda} = A \otimes B_{\lambda} + B_{-\lambda} \otimes C,$$
$$Q_{\lambda} = B_{\lambda} \otimes A + C \otimes B_{-\lambda},$$
$$Z_{1(-1)} = C \otimes C - A \otimes A \pm \sum_{\lambda = -1}^{1} \lambda B_{\lambda} \otimes B_{-\lambda},$$
$$T = A \otimes A + C \otimes C + \sum_{\lambda = -1}^{1} B_{\lambda} \otimes B_{\lambda},$$

символ  $\otimes$  означает прямое произведение матриц. Намагниченность на центр при  $N \gg 1$  равна

$$m = \frac{1}{2N}\sqrt{\langle S^z \rangle^2 + \langle S^+ \rangle \langle S^- \rangle},\tag{6}$$

где

$$\langle S^z \rangle = \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(Z_{\lambda}T^{N-1})}{\operatorname{Tr}T^N},$$
$$\langle S^+ \rangle = \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(G_{\lambda}T^{N-1})}{\operatorname{Tr}T^N},$$



Метамагнитные переходы . . .

Рис.2. Кривая намагниченности модели (2) при J=0.5

$$\langle S^- \rangle = \sum_{\lambda=-1}^{1} \frac{\operatorname{Tr}(Q_{\lambda}T^{N-1})}{\operatorname{Tr}T^N}$$

Уравнения (5) и (6) определяют зависимость  $\varepsilon(m)$ . Матричные элементы матриц A,  $B_{\lambda}$  и C являются вариационными параметрами. Формально имеются  $4l^2$  вариационных параметра, по которым необходимо провести варьирование. В действительности, под знаком Tr одна из матриц может быть выбрана диагональной и один из элементов можно зафиксировать, так что остается  $3l^2 + l - 1$  вариационных параметров. Естественно, точность вычислений с функцией (4) зависит от размера используемых матриц. Отметим, что аналитические вычисления возможны лишь при l = 1, когда матрицы являются числами. Для l > 1 необходимо использовать процедуру численной минимизации.

#### 2.2. Кривая намагниченности

Критическое значение  $J_c$  находится из условия  $\varepsilon(m) = 0$ . Если l = 1, то  $J_c = (\sqrt{7} - 1)/4 \approx 0.411$ . При l = 2 имеем  $J_c = 0.409$ . Использование матриц с l = 4 и l = 6 дает для  $J_c$  значения соответственно 0.403 и 0.4029. В общем случае различие в результатах для l = 4 и l = 6 оказывается весьма незначительным (меньше 0.1%), так что в расчетах использовались матрицы размером  $4 \times 4$ .

Согласно нашим расчетам, энергия основного синглетного состояния при  $J \gtrsim J_c$  является линейной функцией  $J - J_c$ . Это свидетельствует о том, что F-AF-переход в рассматриваемой модели является переходом первого рода.

Для нахождения кривой намагниченности m(H)минимизировалась энергия  $\varepsilon - 2mH$  при фиксированном значении магнитного поля. В качестве примера на рис. 2 показана зависимость m(H) для



Рис. 3. Зависимости критического поля  $H_c$  (кривая 1) и критической намагниченности  $m_c$  (кривая 2) от J в модели (2). Кривая 3 — оценка  $H_c(J)$  с использованием величины  $\epsilon_{2b}$ 

J = 0.5. Отметим, что при  $H \to 0$  функция m(H)является линейной, поскольку для модели с бесщелевым спектром  $\varepsilon(m) - \varepsilon(0) \propto m^2$  при  $m \ll 1$  [18]. Зависимости критического поля  $H_c$  и критической намагниченности  $m_c$  от J показаны на рис. 3. Как видно из рис. 3,  $H_c \propto J - J_c$ , по крайней мере для малых значений  $J - J_c$ . Такая зависимость следует из (3), поскольку при  $J \to J_c$  имеем  $H_c \approx |\varepsilon(0)| \propto J - J_c$ .

Как следует из наших расчетов, критическое поле  $H_c$  при 1/2 < J < 2 больше величины  $|\epsilon_1|$ . Как уже отмечалось выше, верхнее критическое поле совпадает с этой величиной в моделях, где функция  $\varepsilon(m)$  всюду выпуклая. В рассматриваемой модели из-за наличия связанных многомагнонных состояний условие выпуклости функции  $\varepsilon(m)$  нарушается и  $H_c = (2J - 1) + |\epsilon_b|$ . Энергия  $\epsilon_b$  не может быть найдена точно, и для ее оценки мы использовали величину  $\epsilon_{2b}$ , равную половине энергии связи двухмагнонного состояния. Энергия  $|\epsilon_b(J)|$ , очевидно, больше  $|\epsilon_{2b}(J)|$ , так что полученное таким образом значение  $H_c(J)$  представляет нижнюю оценку критического поля. Как видно из рис. 3, эта оценка весьма близка к величине критического поля, найденного в вариационных расчетах. Таким образом, отличие  $\epsilon_b$ от  $\epsilon_{2b}$  очень мало, по крайней мере при J > 1/2.

Как следует из рис. 3, скачок намагниченности пропадает при  $J \rightarrow 2$ , т. е при величине близкой к  $J_2$ , при которой исчезают связанные состояния.

#### 3. ЗИГЗАГ-МОДЕЛЬ

Рассмотрим теперь лестничную модель другого типа — с ферромагнитным взаимодействием —  $\alpha$ вдоль цепочек и антиферромагнитным взаимодей-



Рис.4. Зигзаг-модель



Рис.5. Фазовая диаграмма зигзаг-модели. Сплошная кривая — линия F-AF-переходов, штриховые — границы существования связанных двухмагнонных состояний. Заштрихована область, соответствующая скачкам намагниченности

ствием *J* внутри перекладины. Кроме того, имеется ферромагнитное взаимодействие вдоль одной из диагоналей лестницы, которое принимается равным -1 (рис. 4). Гамильтониан этой модели, которую называют также моделью зигзагообразной лестничной системы, или зигзаг-моделью, имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{0} - H \sum_{i=1}^{2} \sum_{n=1}^{N} S_{in}^{z},$$

$$\mathcal{H}_{0} = -\alpha \sum_{i=1}^{2} \sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{in} \cdot \mathbf{S}_{in+1} - \frac{1}{4} \right) -$$

$$\sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{2n} \cdot \mathbf{S}_{1n+1} - \frac{1}{4} \right) + J \sum_{n=1}^{N} \left( \mathbf{S}_{1n} \cdot \mathbf{S}_{2n} - \frac{1}{4} \right),$$

$$\alpha, J \ge 0$$
(7)

Эта модель эквивалентна одномерной спиновой цепочке с альтернирующими ферро- и антиферромагнитными взаимодействиями ближайших спинов и ферромагнитным взаимодействием спинов, следующих за ближайшими.

В отличие от рассмотренной ранее модели, для модели (7) критическое значение  $J_c(\alpha)$  F–AF-перехода известно точно [16, 19] и  $J_c(\alpha) = 2\alpha/(2\alpha + 1)$ . Соответствующая фазовая диаграмма (при нулевой температуре) показана на рис. 5. В AF-фазе имеется щель в спектре возбуждений [19]. Другое отличие



Рис. 6. Поведение m(H) для зигзаг-модели (схематически) в области, где не существует связанных состояний магнонов (a), в областях II и III (б) и в области I (6)

от рассмотренной в предыдущем разделе модели состоит в том, что все *n*-магнонные энергии  $\epsilon_n$  одновременно обращаются в нуль при  $J = J_c(\alpha)$  [19]. В частности, при  $J \to J_c(\alpha)$  и фиксированном значении  $\alpha$ 

$$\epsilon_1(J) = -\frac{(J - J_c)^2}{4(1 - J_c)J_c^2},$$

а энергия основного состояния  $\varepsilon(0) = \varepsilon_N = -(J - J_c)/2J_c$ .

Однако, в отличие от одномерной ХХZ-модели с  $\gamma \gtrsim -1,$  в данной модели n магнонов образуют связанные состояния, причем энергии связи обращаются в нуль при  $J = J_c(\alpha)$ . Как отмечено в предыдущем разделе, наличие связанных состояний приводит к появлению линейных участков на зависимости  $\varepsilon(m)$  и скачкам намагниченности (метамагнитным переходам). Связанные магнонные состояния в AF-фазе существуют, вообще говоря, не при всех значениях J и  $\alpha$ . Результаты точной диагонализации конечных систем свидетельствуют о том, что если двухмагнонные состояния не являются связанными, то не существует связанных состояний и большего числа магнонов. Поэтому граница области на фазовой диаграмме, в которой следует ожидать появления скачков намагниченности, определяется из условия обращения в нуль энергии связи двухмагнонных состояний. Точное решение этой задачи определяет соответствующую границу, показанную на рис. 5. Справа от этой границы (т.е. в AF-фазе вне областей I, II, III) связанных состояний не существует.

Как и для рассмотренной в предыдущем разделе модели, зависимости  $\varepsilon(m)$  и m(H) находились с использованием вариационной функции МР-типа с матрицами размером 4 × 4. Соответствующие расчеты показывают, что в области, где не существует связанных состояний, функция m(H) имеет вид, типичный для антиферромагнетика со щелью в спектре (рис. 6a), т.е. является монотонно возраста-



Рис.7. Критические поля и критические намагниченности в зигзаг-модели при  $\alpha = 2$  ( $J_c = 0.8$ ). Сплошная кривая —  $H_{c2}$ , штрихпунктирная —  $H_{c1}$ , штриховая —  $m_c$ 

ющей и характеризуется наличием двух критических полей: верхним  $H_{c2}$  и нижним  $H_{c1}$ . При этом  $H_{c1} = \Delta$ , где  $\Delta$  — величина синглет-триплетной щели, а  $H_{c2} = |\epsilon_1|$ . В области, где связанные состояния существуют, имеются два различных типа зависимости m(H). В областях II и III зависимость m(H) имеет вид, схематически изображенный на рис. 66. При этом критическое поле  $H_{c2} > |\epsilon_1|$ . На границе этих областей, где энергия связи двухмагнонных состояний обращается в нуль, имеем  $m_c = 1/2$ , а  $H_{c2} = |\epsilon_1|$ , где

$$\epsilon_1 = \begin{cases} 1 - J, & \alpha > 1/2, \\ 2\alpha - J, & \alpha < 1/2. \end{cases}$$

В качестве иллюстрации на рис. 7 показаны зависимости  $H_{c1}, H_{c2}$  и  $m_c$  от J при фиксированном значении  $\alpha = 2$ .

Особый интерес представляет область I фазовой диаграммы при  $1/6 < \alpha < 3/2$ . В этой области m(H) является ступенчатой функцией (рис. 66) и  $h_{c1} = h_{c2} = |\varepsilon(0)|$ . Такое поведение m(H) обусловлено тем обстоятельством, что  $\Delta > |\varepsilon(0)|$  в области I, и при превышении критического поля, которое оказывается меньшим, чем требуется для рождения триплетного возбуждения, происходит переход из синглетного в ферромагнитное состояние, минуя состояния с промежуточными спинами. Таким образом, в области I реализуется идеальный метамагнитный переход.

Эти заключения относительно поведения кривой намагниченности в зигзаг-модели следуют из вариационных расчетов. Вместе с тем при  $J \gg \max(1, \alpha)$ зигзаг-модель может быть сведена к эффективному точно решаемому XXZ-гамильтониану. Это сведение осуществляется с помощью бозе-представления пары спинов s = 1/2 перекладины лестницы [20]. Согласно [20], спиновые операторы  $S_{1n}$  и  $S_{2n}$  могут быть выражены через четыре бозе-оператора  $s_n^+, u_n^+, d_n^+$  и  $t_n^+$ . Действие этих операторов на вакуумное состояние  $|0\rangle$  определяет четыре возможных спиновых состояния перекладины:

$$s_{n}^{+}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad u_{n}^{+}|0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,$$
  
$$d_{n}^{+}|0\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad t_{n}^{+}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle).$$
(8)

В конфигурации  $|\alpha\beta\rangle$  обозначение  $\alpha$  относится к нижней цепочке,  $\beta$  — к верхней.

Бозе-операторы в (8) удовлетворяют условию связи:

$$s_n^+ s_n + u_n^+ u_n + d_n^+ d_n + t_n^+ t_n = 1.$$
(9)

Операторы  $S_{1n}$  и  $S_{2n}$  выражаются через введенные бозе-операторы следующим образом [20]:

$$S_{1(2)n}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm s_n^{+} d_n \mp u_n^{+} s_n + t_n^{+} d_n + u_n^{+} t_n),$$
  

$$S_{1(2)n}^{-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm d_n^{+} s_n \mp s_n^{+} u_n + d_n^{+} t_n + t_n^{+} u_n), \quad (10)$$
  

$$S_{1(2)n}^{z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm s_n^{+} t_n \pm t_n^{+} s_n - d_n^{+} d_n + u_n^{+} u_n).$$

Для  $J \gg \max(1, \alpha)$  величина синглет-триплетной щели и нижнее критическое поле пропорциональны J. Поэтому при  $J \gg \max(1, \alpha)$  можно пренебречь триплетными состояниями  $t_n^+|0\rangle$  и  $d_n^+|0\rangle$  и сохранить только синглетное состояние  $s_n^+|0\rangle$  и состояние  $u_n^+|0\rangle$ с максимальной проекцией спина по направлению поля. Эти два последних состояния соответствуют псевдоспину  $\tilde{s} = 1/2$ . С учетом соотношения (9) операторы  $S_{1n}$  и  $S_{2n}$  выражаются через операторы псевдоспина  $\tilde{S}_n$  в виде

$$S_{1(2)n}^{+} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \widetilde{S}_{n}^{+}, \quad S_{1(2)n}^{-} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \widetilde{S}_{n}^{-},$$
  

$$S_{1(2)n}^{z} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + \widetilde{S}_{n}^{z} \right),$$
(11)

где

$$\widetilde{S}_{n}^{+} = u_{n}^{+}s_{n}, \quad \widetilde{S}_{n}^{-} = s_{n}^{+}u_{n},$$
  
 $\widetilde{S}_{n}^{z} = \frac{1}{2}(u_{n}^{+}u_{n} - s_{n}^{+}s_{n}).$ 

Представление (11) соответствует разложению в ряд теории возмущений до первого порядка по 1/J [21,22].

Используя (11), запишем гамильтониан зигзаг-модели при  $J \gg \max(1, \alpha)$  в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{eff} &= J_{xy} \sum_{n} (\widetilde{S}_{n}^{x} \widetilde{S}_{n+1}^{z} + \widetilde{S}_{n}^{y} \widetilde{S}_{n+1}^{y}) + \\ &+ J_{z} \sum_{n} \widetilde{S}_{n}^{z} \widetilde{S}_{n+1}^{z} - \widetilde{h} \sum_{n} \widetilde{S}_{n}^{z} + \\ &+ \frac{3}{8} N \mu - \frac{1}{2} N J - \frac{1}{2} N h, \end{aligned}$$
(12)

где

$$J_{xy} = -\lambda, \quad J_z = -\mu/2, \quad h = h + \mu/2 - J, \lambda = \alpha - 1/2, \quad \mu = \alpha + 1/2.$$
(13)

Проекции полного спина исходной модели и модели (12) связаны соотношением

$$S^{z} = \widetilde{S}^{z} + \frac{N}{2}, \quad S^{z} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{n} S_{in}^{z}, \quad \widetilde{S}^{z} = \sum_{n} \widetilde{S}_{n}^{z}.$$
(14)

Таким образом, в пределе  $J \gg \max(1, \alpha)$  зигзаг-модель сводится к XXZ-модели с обменными интегралами, определяемыми соотношениями (13). Поскольку  $J_z < 0$ , zz-взаимодействие в (12) является ферромагнитным.

Свойства XXZ-модели хорошо изучены, и соответствующие точные результаты могут быть использованы для анализа поведения зигзаг-модели в магнитном поле при  $J \gg \max(1, \alpha)$ .

Очевидно, что основное состояние гамильтониана  $\tilde{\mathcal{H}}_{eff}$  при H = 0 соответствует  $\tilde{S}^z = -N/2$ , а для зигзаг-модели  $S^z = 0$ . Энергия основного состояния  $\varepsilon(0) = -J + \mu/2$ . Щель в спектре возбуждений  $\tilde{\mathcal{H}}_{eff}$ , соответствующая перевороту одного спина (синглет-триплетная щель в исходной модели), равна  $\Delta = J - |\lambda|$ .

Если

$$|J_z/J_{xy}| > 1 \quad (1/6 < \alpha < 3/2),$$

то низшими возбужденными состояниями  $H_{eff}$  при H = 0 являются связанные состояния n перевернутых спинов, и их энергии равны [23, 24]:

$$E_n = \left(-J + \frac{\mu}{2}\right)(N-n).$$

Это означает, что энергия основного состояния зигзаг-модели при фиксированном значении намагниченности является линейной функцией *m*:

$$\varepsilon(m) = -J + \frac{\mu}{2} + 2\left(J - \frac{\mu}{2} - H\right)m. \quad (15)$$

Согласно (15), при  $H = |\varepsilon(0)|$  происходит скачок намагниченности от m = 0 до m = 1/2 и  $H_{c1} = H_{c2} = |\varepsilon(0)|$ . Таким образом, подтверждается сделанный на основании вариационных расчетов вывод о существовании метамагнитного перехода в области I.

При  $|J_z/J_{xy}| < 1$ , т. е. при  $0 < \alpha < 1/6$  и  $\alpha > 3/2$ , функция  $\varepsilon(m)$  является выпуклой [6]. Согласно результатам работы [6], m(H) возрастает от m = 0 при  $H = H_{c1} = \Delta$  до m = 1/2 при  $H = H_{c2} = |\epsilon_1|$ . Поведение m(H) при  $H \approx H_{c1}$  и  $H \approx H_{c2}$  имеет корневую особенность:

$$m = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2}{|\lambda|}} (H - H_{c1}),$$

$$\frac{1}{2} - m = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2}{|\lambda|} (H_{c2} - H)}.$$
(16)

Таким образом, вне полосы  $1/6 < \alpha < 3/2$  зависимость m(H) имеет вид, типичный для антиферромагнетика со щелью в спектре. В то же время область фазовой диаграммы на рис. 5, где m(H) имеет скачки, простирается и вне указанной полосы, захватывая области II и III. Однако при  $J \gg 1$  эти области имеют размеры порядка 1/J.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассмотрели две модели фрустрированных лестничных спиновых систем с ферро- и антиферромагнитным взаимодействиями. Одна из них является бесщелевой в AF-фазе, тогда как другая имеет щель в спектре возбуждений. Кривая намагниченности этих моделей при определенных значениях параметров имеет скачок, соответствующий метамагнитному переходу. Такие скачки обусловлены наличием многомагнонных связанных состояний и появлением линейных участков на зависимости  $\varepsilon(m)$ . Эти линейные участки соответствуют двухфазному состоянию системы. На основании результатов численной диагонализации конечных систем сделан вывод о том, что границы областей фазовой диаграммы, где происходят скачки, определяются из условия исчезновения двухмагнонных связанных состояний. Этот вывод подтвержден вариационными расчетами кривой намагниченности.

Есть основания ожидать, что подобного рода переходы могут иметь место в двумерном ферромагнетике с антиферромагнитным взаимодействием несоседних спинов.

В заключение авторы выражают благодарность Институту Макса Планка физики сложных систем (г. Дрезден) за гостеприимство и финансовую поддержку. Работа была также поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 00-03-32981 и 00-15-97334).

# ЛИТЕРАТУРА

- 1. E. Dagotto, Rep. Progr. Phys. 62, 1525 (1999).
- M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu et al., J. Phys. Soc. Jap. 65, 2764 (1996).
- D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, Phys. Rev. Lett. 79, 5126 (1997).
- 4. K. Totsuka, Phys. Rev. B 57, 3454 (1998).
- C. Gerhardt, K. H. Muller, and H. Kroger, Phys. Rev. B 57, 11504 (1998).
- C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. 150, 321, 327 (1966); 151, 258 (1966).
- H. Nojiri, Y. Tokunaga, and M. Motokawa, J. de Phys. 49, Suppl. C8, 1459 (1988).
- S. Copolan, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. B 49, 8901 (1994).
- Zheng Weihong, V. N. Kotov, and J. Oitmaa, Phys. Rev. B 57, 11439 (1998).
- R. Chitra and T. Giamarchi, Phys. Rev. B 55, 5816 (1997).
- A. K. Kolezhuk and H.-J. Mikeska, Int. J. Mod. Phys. B 12, 2325 (1998).
- V. Ya. Krivnov and A. A. Ovchinnikov, Phys. Lett. A 248, 453 (1998).
- 13. S. R. White, Phys. Rev. B 48, 10345 (1993).
- 14. A. Klumper, A. Schadschneider, and J. Zittartz, Z. Phys. B 87, 281 (1992); Europhys. Lett. 24, 293 (1993).

- A. K. Kolezhuk and H.-J. Mikeska, Phys. Rev. B 48, 11380 (1997).
- 16. D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, and A. A. Ovchinnikov, Phys. Rev. B 56, 5985 (1997).
- 17. D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, and A. A. Ovchinnikov, Phys. Rev. B 55, 3620 (1997).
- **18**. М. Годен, Волновая функция Бете, Мир, Москва (1987), с. 65.
- 19. D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, and A. A. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B 14, 91 (2000).

- 20. S. Sachdev and R. N. Bhatt, Phys. Rev. B 41, 9323 (1990).
- 21. F. Mila, Eur. Phys. J. B 6, 201 (1998).
- 22. H.-T. Wang, H. Q. Lin, and J.-L. Shen, Phys. Rev. B 61, 4019 (2000).
- 23. А. А. Овчинников, Письма в ЖЭТФ 5, 48 (1967).
- 24. И. Г. Гочев, ЖЭТФ 34, 892 (1972).