Институт Физики им. Киренского

СО РАН

г. Красноярск

«Подавление магнитным полем spin-gap фазы плакетно-деформированного двумерного квантового магнетика»

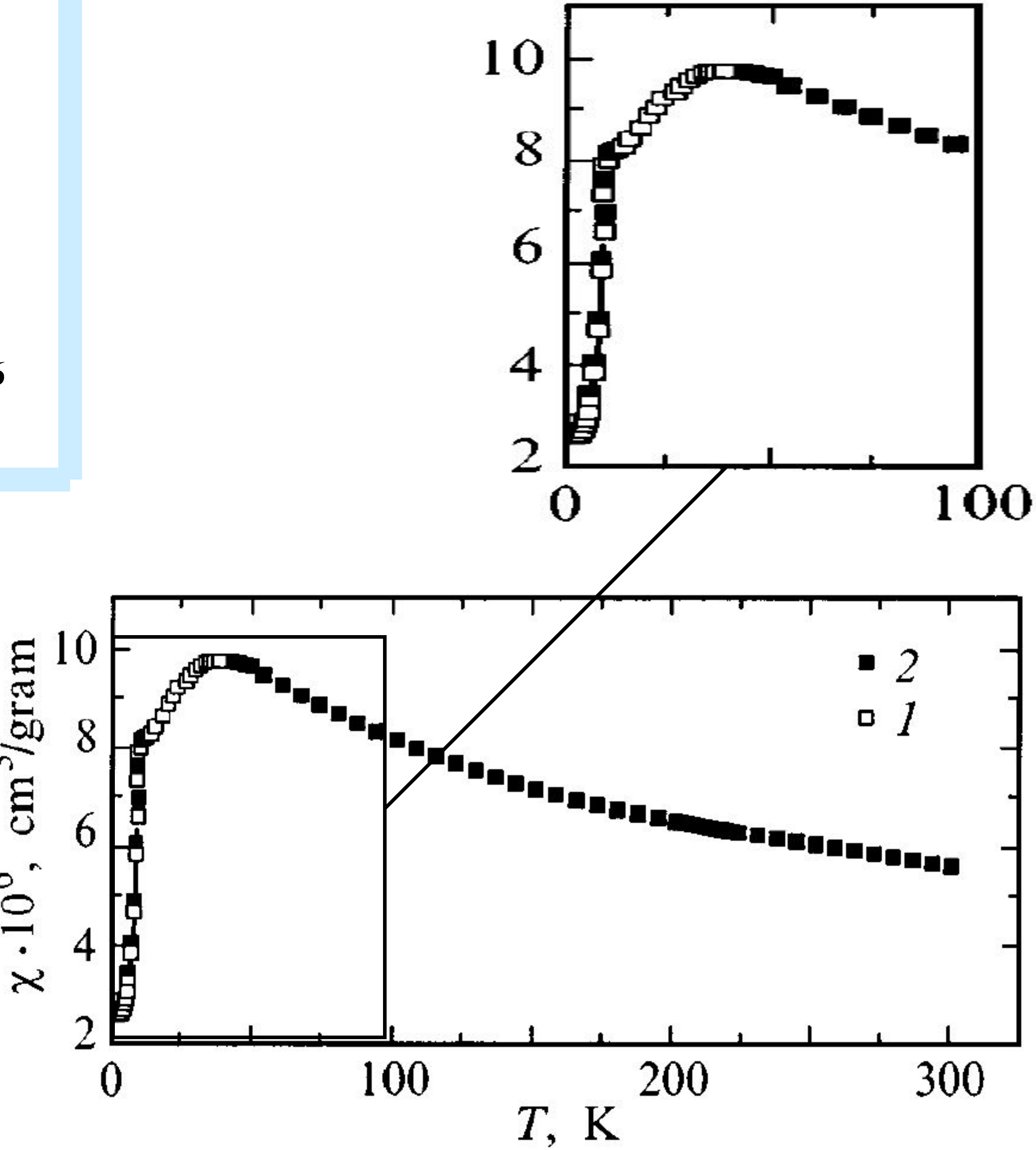
Мицкан В.А.

$Cu_3B_2O_6$

CaV_4O_9

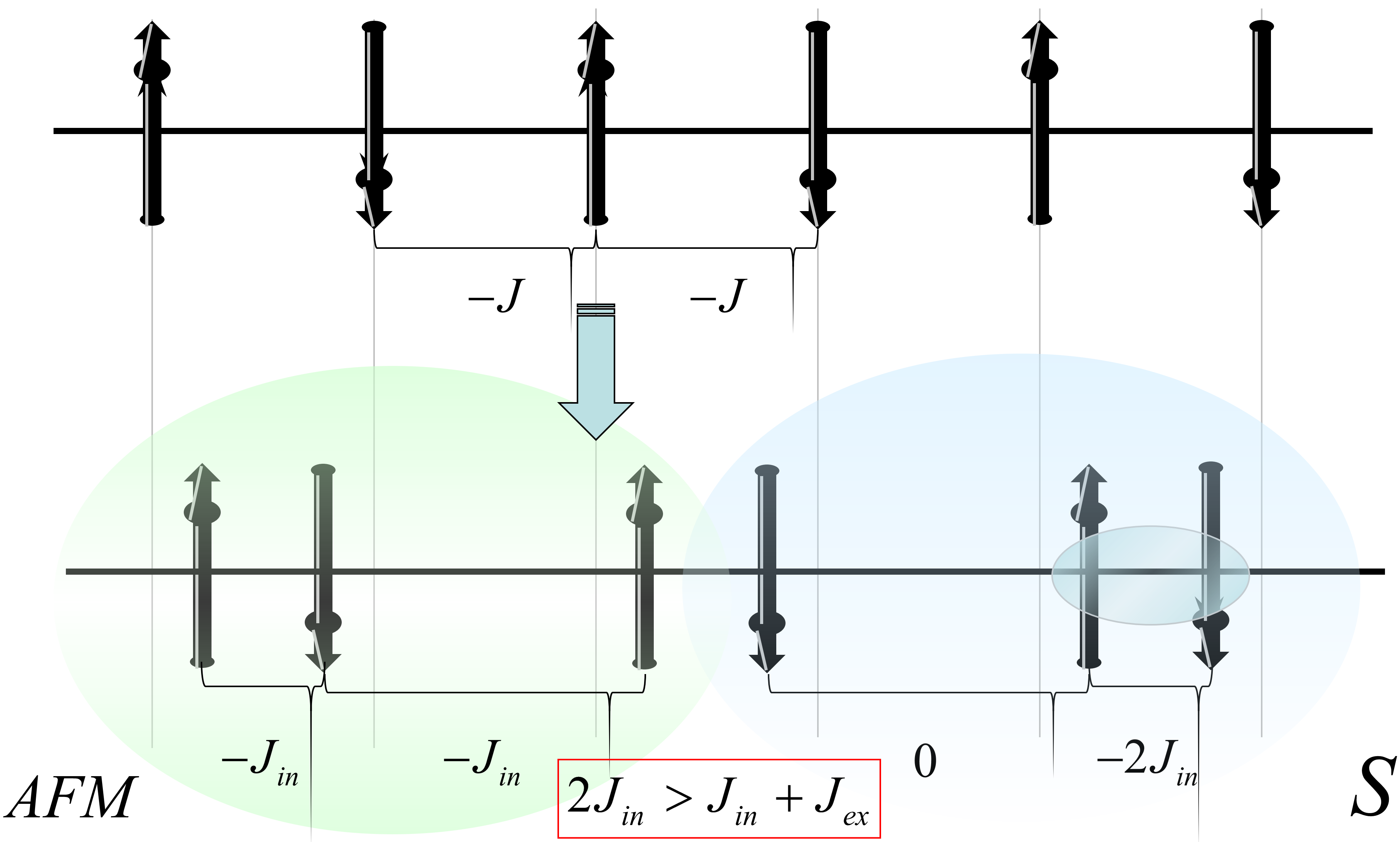
$SrCu_2(BO_3)_2$

$(C_4H_{12}N_2)Cu_2Cl_6$



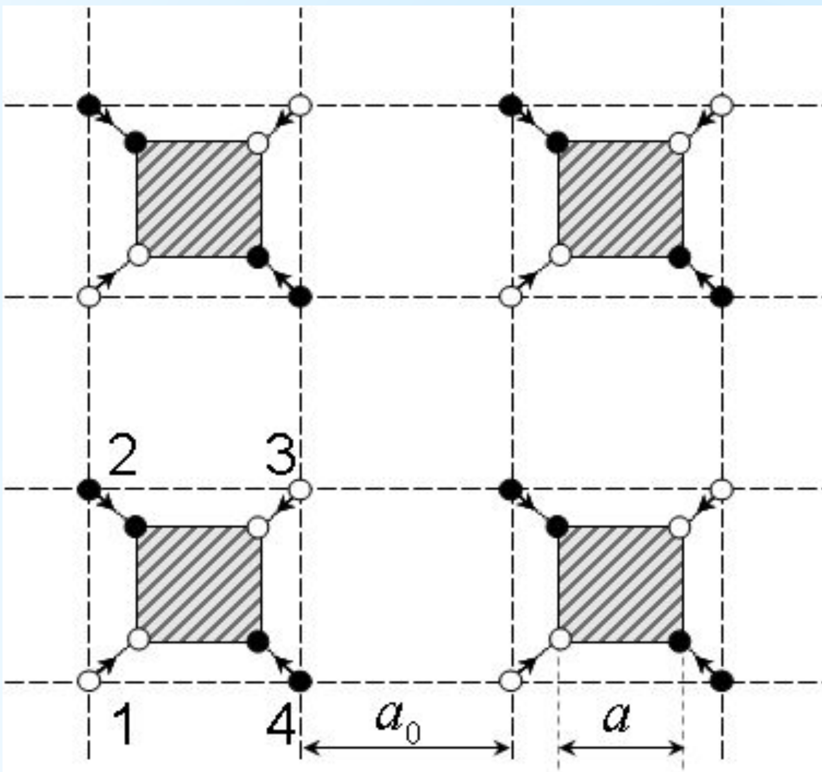
Г.А. Петраковский, К.А. Саблина, А.М. Воротынов и др., Физ.Тв.Тела **41,** 4, 677 (1998)

Спин-Пайерлсовский переход



$$\boxed{2J_{in} > J_{in} + J_{ex}}$$

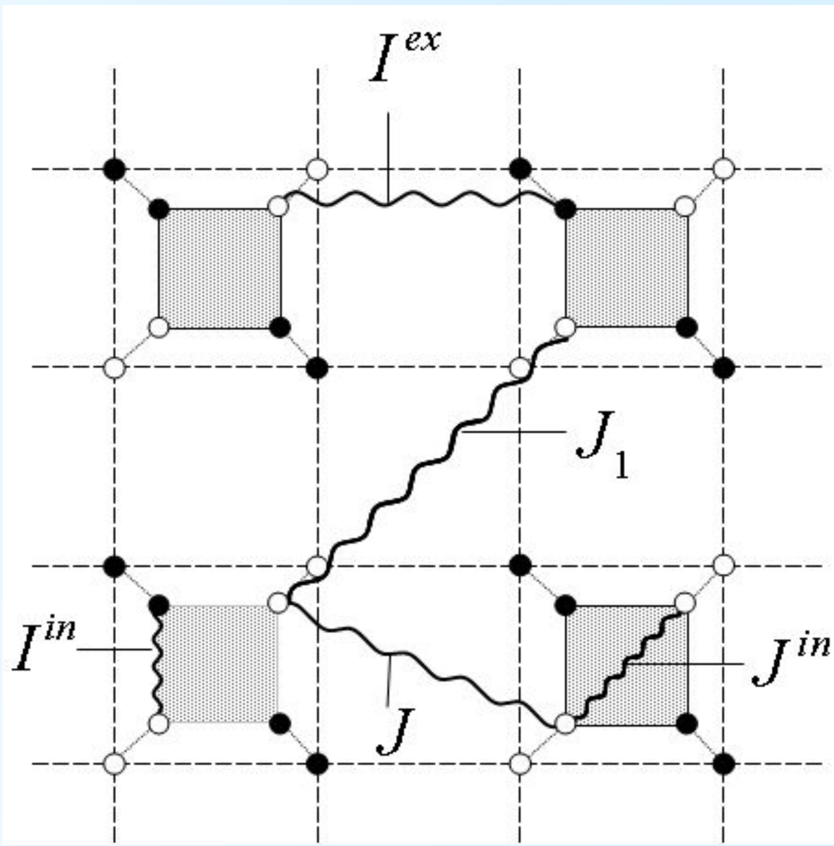
$$H = \frac{1}{2}\sum_{f}\sum_{\delta_1} I(\delta_1)\left(\vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_1}\right) + \frac{1}{2}\sum_{f}\sum_{\delta_2} J(\delta_2)\left(\vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_2}\right)$$



$$a = a_0\left(1 - \delta\right)$$

В.В. Вальков, В.А. Мицкан, Г.А. Петраковский, ЖЭТФ, **129**, 234 (2006)

$$H = \frac{1}{2}\sum_{f}\sum_{\delta_1} I(\delta_1)\left(\vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_1}\right) + \frac{1}{2}\sum_{f}\sum_{\delta_2} J(\delta_2)\left(\vec{S}_f \vec{S}_{f+\delta_2}\right)$$



$$I^{in} = I\left(1 + k_1\delta\right),$$

$$J^{in} = J\left(1 + k_2\delta\right)$$

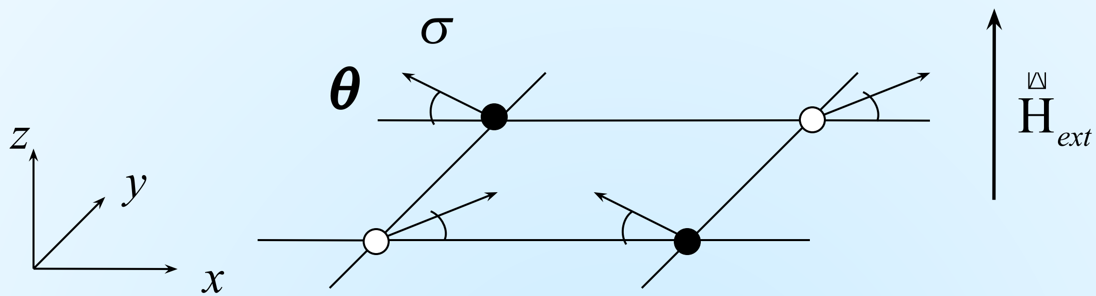
$$k_1 = -\frac{a_0}{I}\left(\frac{\partial I}{\partial r}\right)_{r=a}$$

$$k_2 = -\frac{a_0}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial r}\right)_{r=\sqrt{2}a}$$

$$I^{ex} = I\left(1 - k_1\delta\right)$$

$$J_1 = J\left(1 - 2k_2\delta\right)$$

Гамильтониан системы при наличии внешнего магнитного поля



$$H_0 = -(4I^{ex} - 2(2J + J^{ex}))\sigma_z^2 + (2I^{ex} - (2J + J^{ex}))\sigma_z \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{z}} +$$

$$+ (4I^{ex} - (4J + 2J^{ex}))\sigma_x^2 - (2I^{ex} - (2J + J^{ex}))\sigma_x \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{x}} +$$

$$+ I^{in}\left(\vec{S}_1\vec{S}_2 + \vec{S}_2\vec{S}_3 + \vec{S}_3\vec{S}_4 + \vec{S}_4\vec{S}_1\right) + J^{in}\left(\vec{S}_1\vec{S}_3 + \vec{S}_2\vec{S}_4\right) - \mu g \vec{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{z}};$$

$$\hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{z}} = S_1^z + S_2^z + S_3^z + S_4^z \qquad \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{x}} = S_1^x - S_2^x + S_3^x - S_4^x$$

$$\sigma_x = \frac{1}{4}\left\langle \psi_0(\sigma) \middle| \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{x}} \middle| \psi_0(\sigma) \right\rangle \qquad \sigma_z = \frac{1}{4}\left\langle \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) \middle| \hat{\mathbf{D}}_{\mathbf{z}} \middle| \psi_0(\sigma_x, \sigma_z) \right\rangle$$

$$\sigma = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_z^2}$$

$$H = H_0 + H_{int}$$

$$H_0 = \sum_f \sum_p E_p X_f^{pp}. \qquad H_{int} = \sum_{f\,\Delta_i} \sum_{\alpha\,\beta} \hat{\mathbf{V}}_{\alpha\beta}\left(\Delta_i\right) X_f^{\alpha} X_{f+\Delta_i}^{\beta}.$$

$$\Delta_x = \left(b,0\right),\ \Delta_y = \left(0,b\right),\ b = 2a;\ \Delta_{x+y} = \left(b,b\right),\ \Delta_{x-y} = \left(b,-b\right); \qquad b = 2a$$

при $T = 0$ перейдем к бозонному представлению

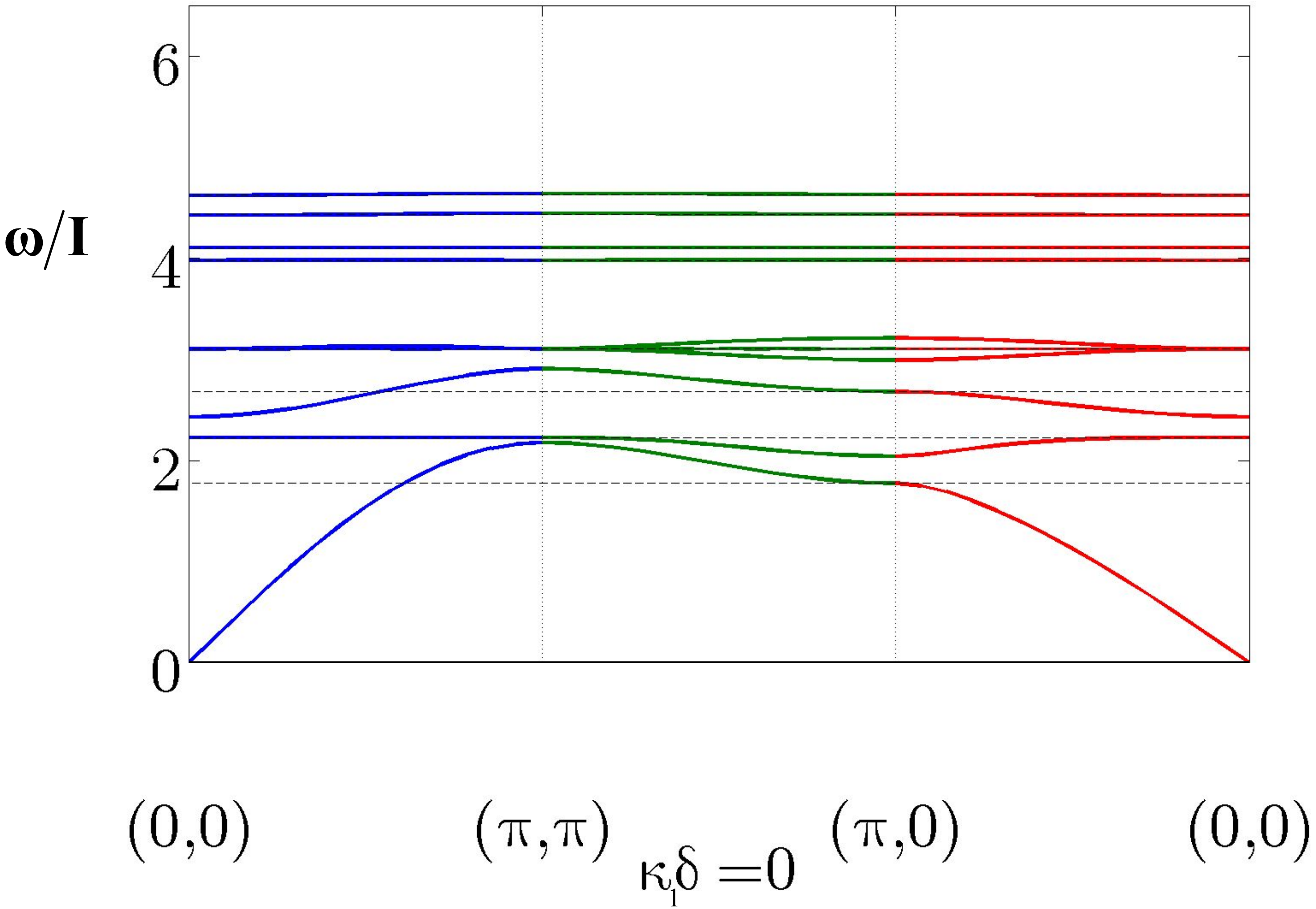
$$X_R^{1n} \to b_R^{(n)},\quad X_R^{n1} \to b^{+}{}_R^{(n)}; \qquad X_f^{nm} \to b_n^{+}\left(f\right) b_m\left(f\right)$$

$$H_0 = \sum_k \sum_n E_n\, b_{\vec{k}}^{+(n)} b_{\vec{k}}^{(n)}$$

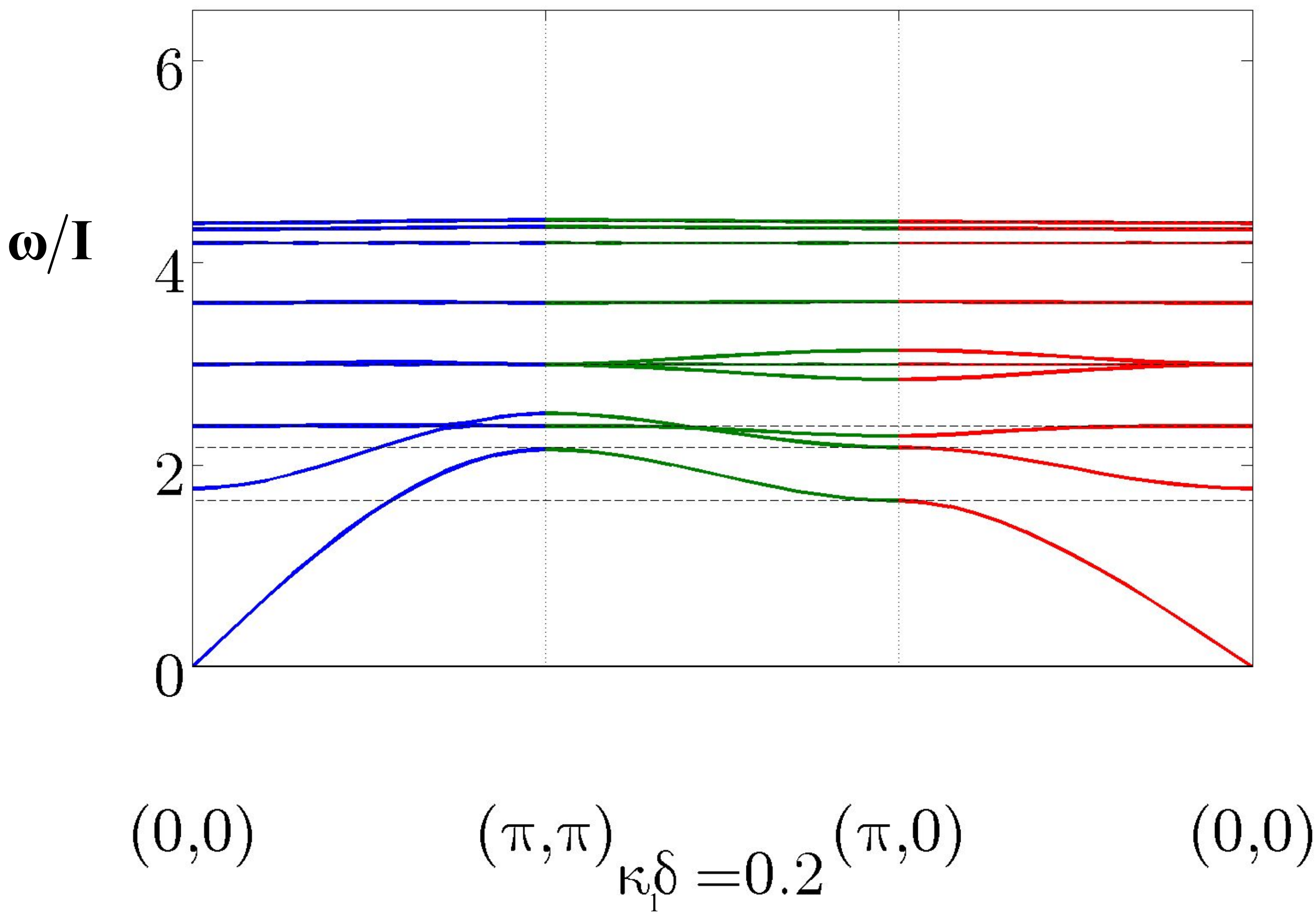
$$H_{int}^{\perp} = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{n,m\neq 1} \hat{\mathbf{R}}_{nm}\left(\vec{k}\right) b_n^{+}(\vec{k}) b_m^{+}(\vec{k}) +$$

$$+ \sum_k \sum_{n,m\neq 1} \hat{\mathbf{So}}_{nm}\left(\vec{k}\right) b_n^{+}(\vec{k}) b_m(\vec{k}) + \frac{1}{2} \sum_k \sum_{n,m\neq 1} \hat{\mathbf{R}}_{nm}^{*}\left(\vec{k}\right) b_n(\vec{k}) b_m(\vec{k});$$

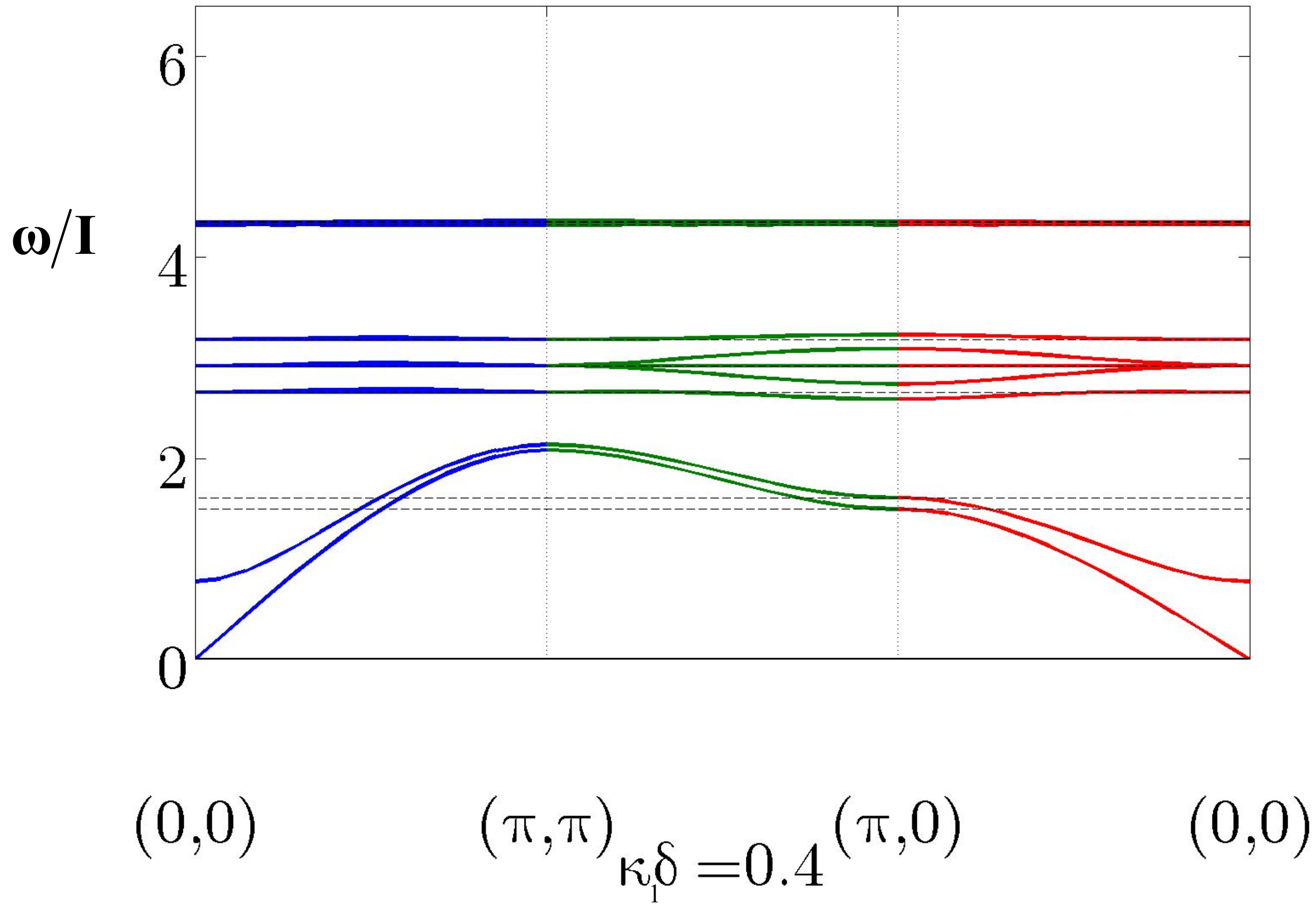
Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



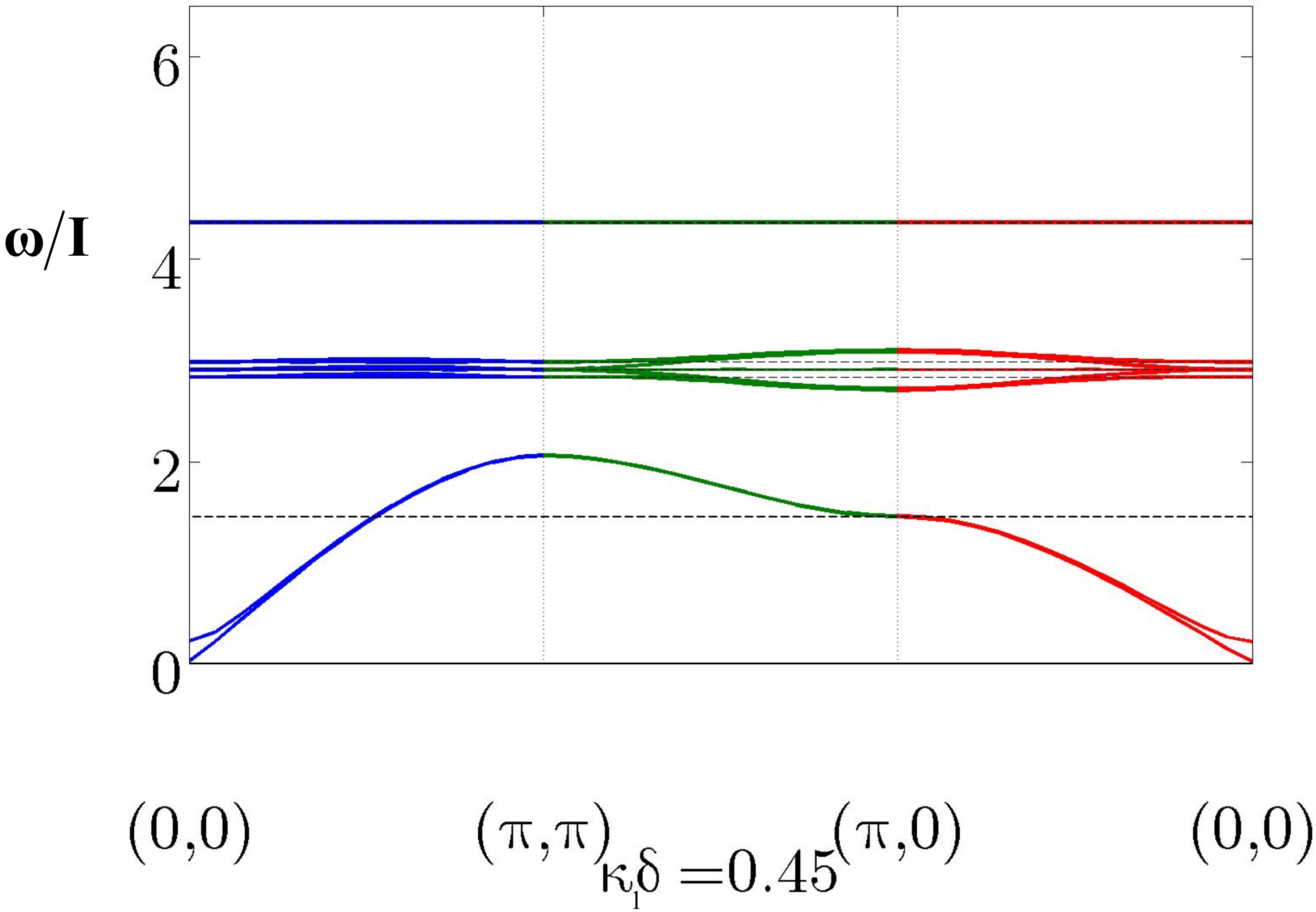
Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



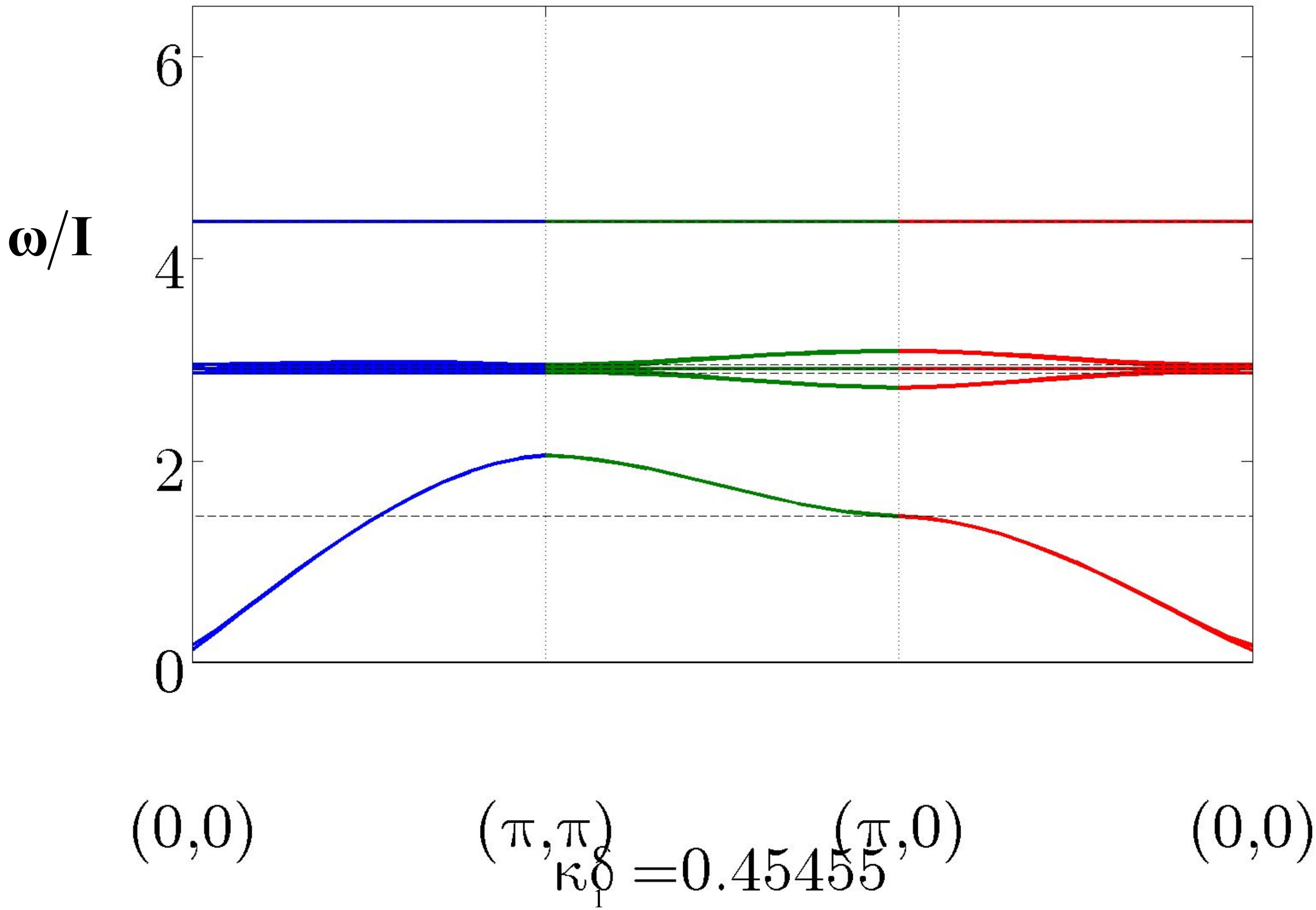
Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



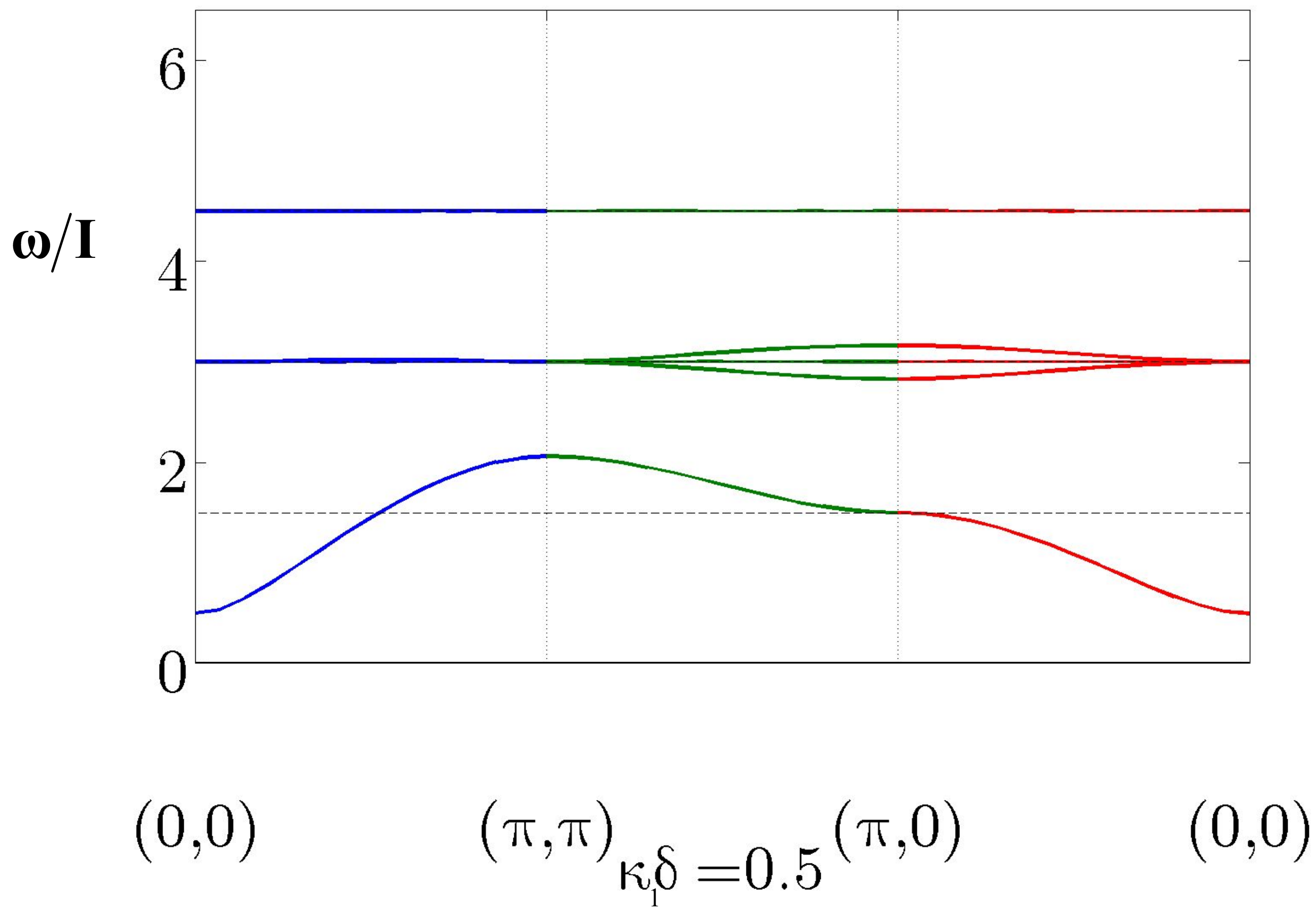
Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



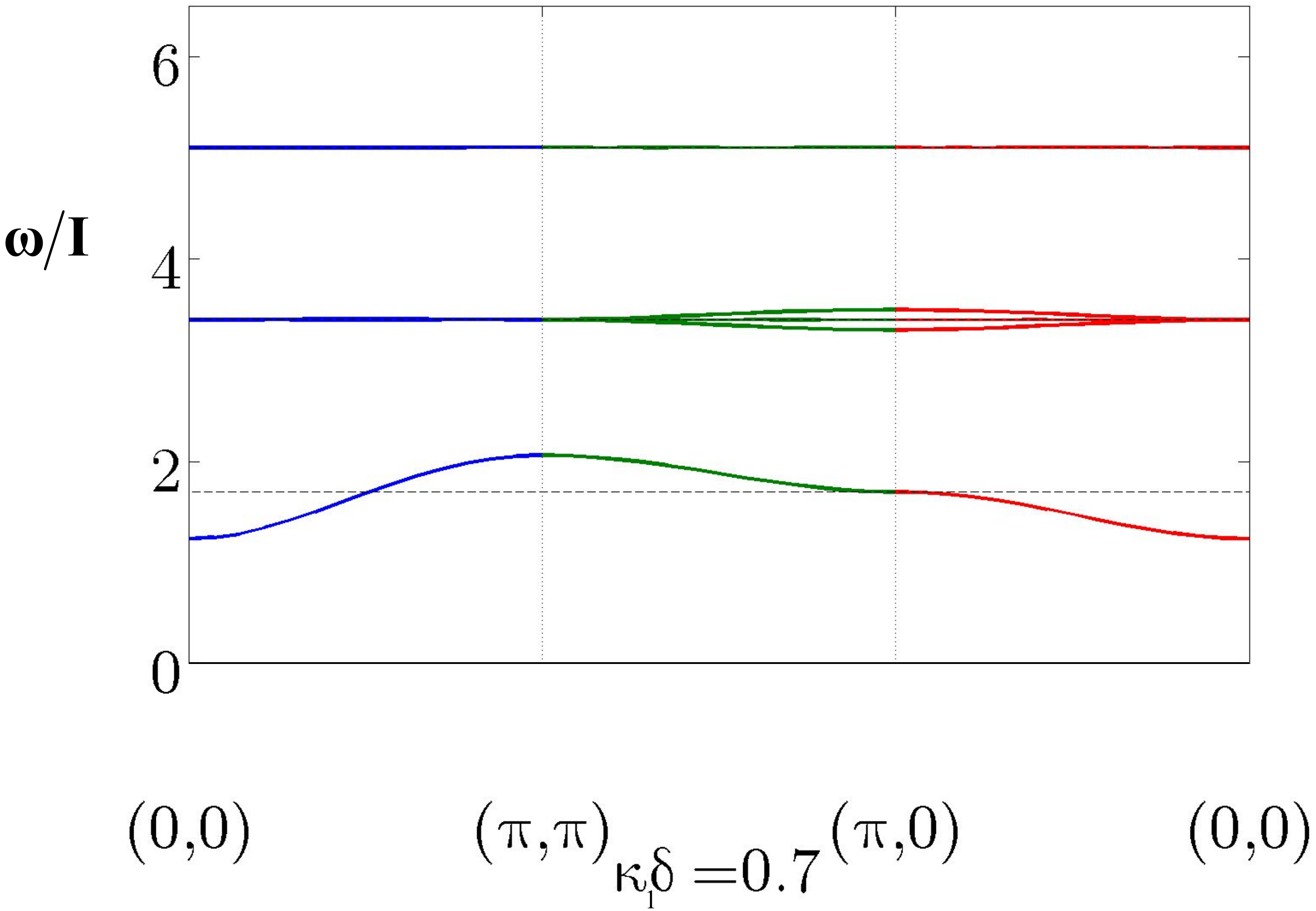
Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля

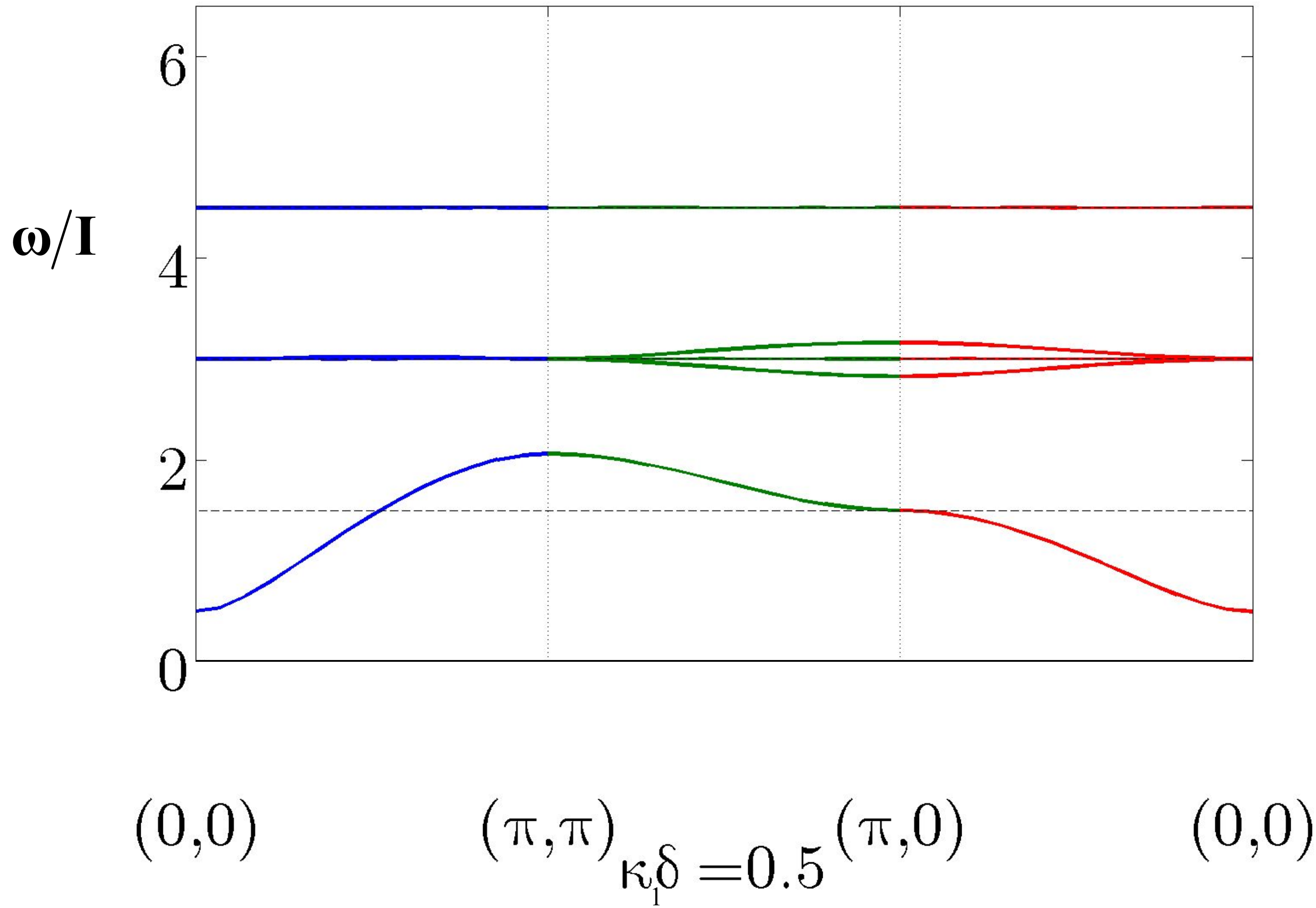


Спектр нефрустрированного антиферромагнетика без магнитного поля



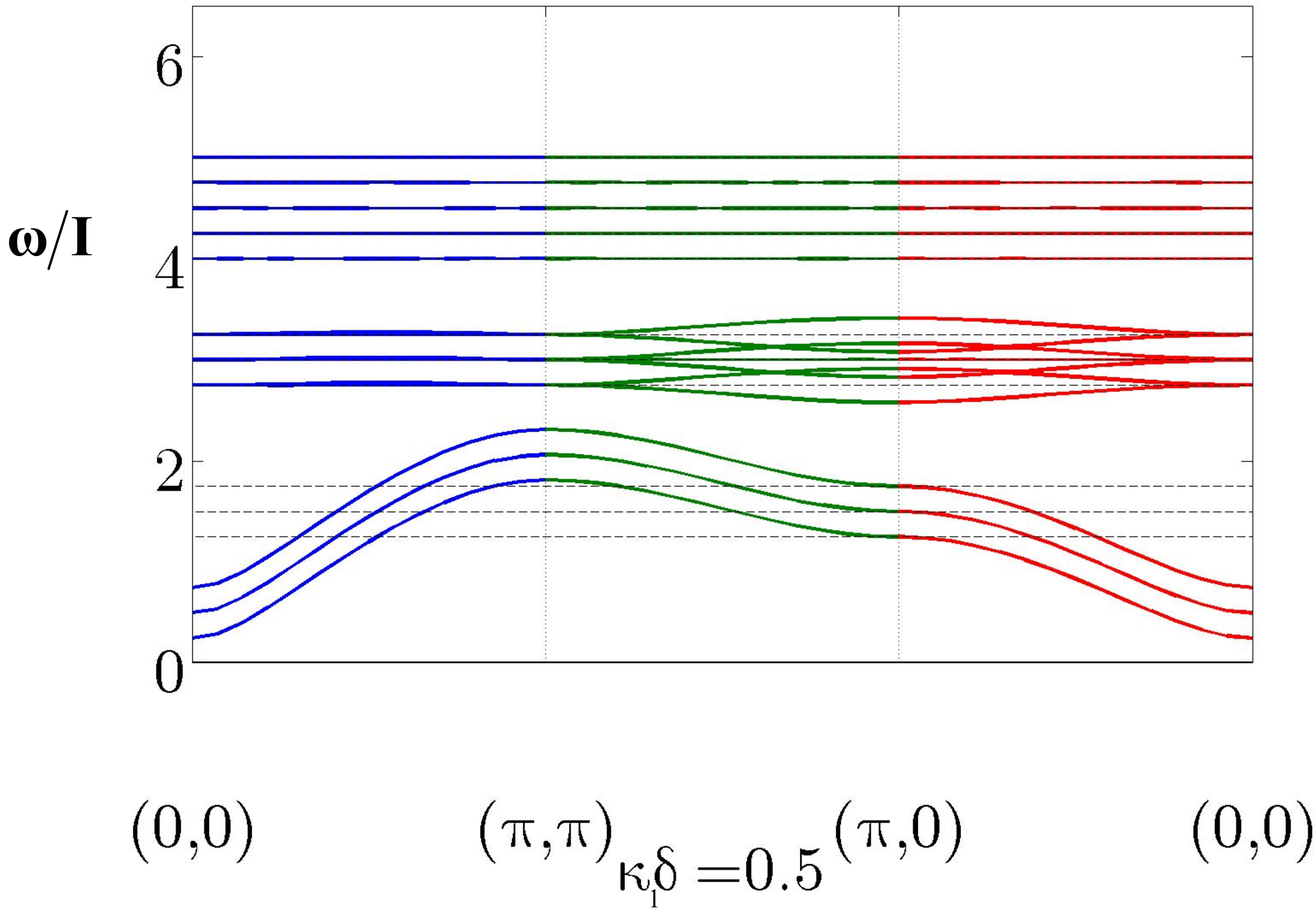
Эволюция спектра при изменении магнитного поля (старт из синглетного состояния)

J/I=0   k2/k1=1 $\mu g \mathbf{H} / I = 0$



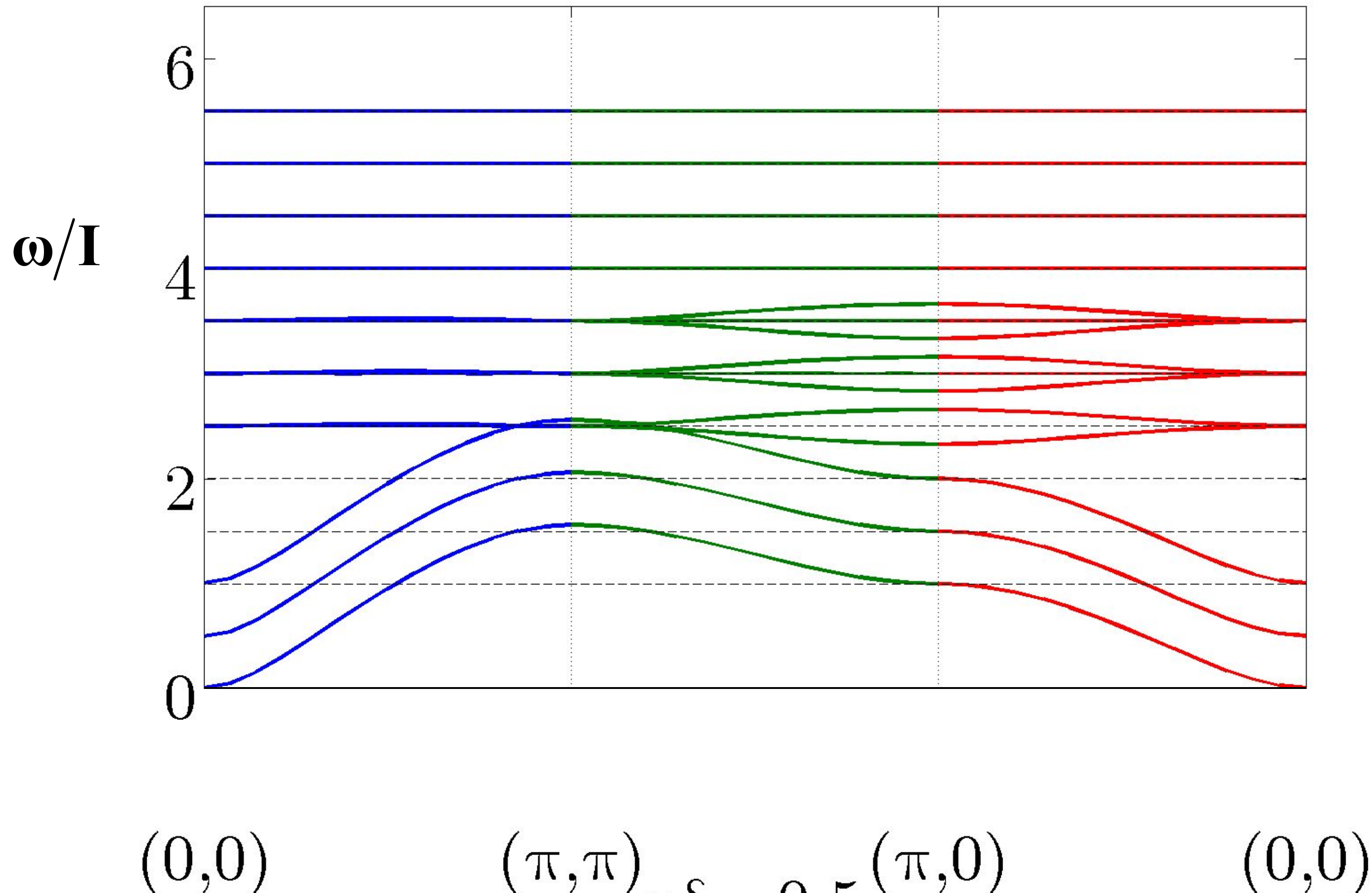
(старт из синглетного состояния)

J/I=0   k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I$ = 0.25



(старт из синглетного состояния)

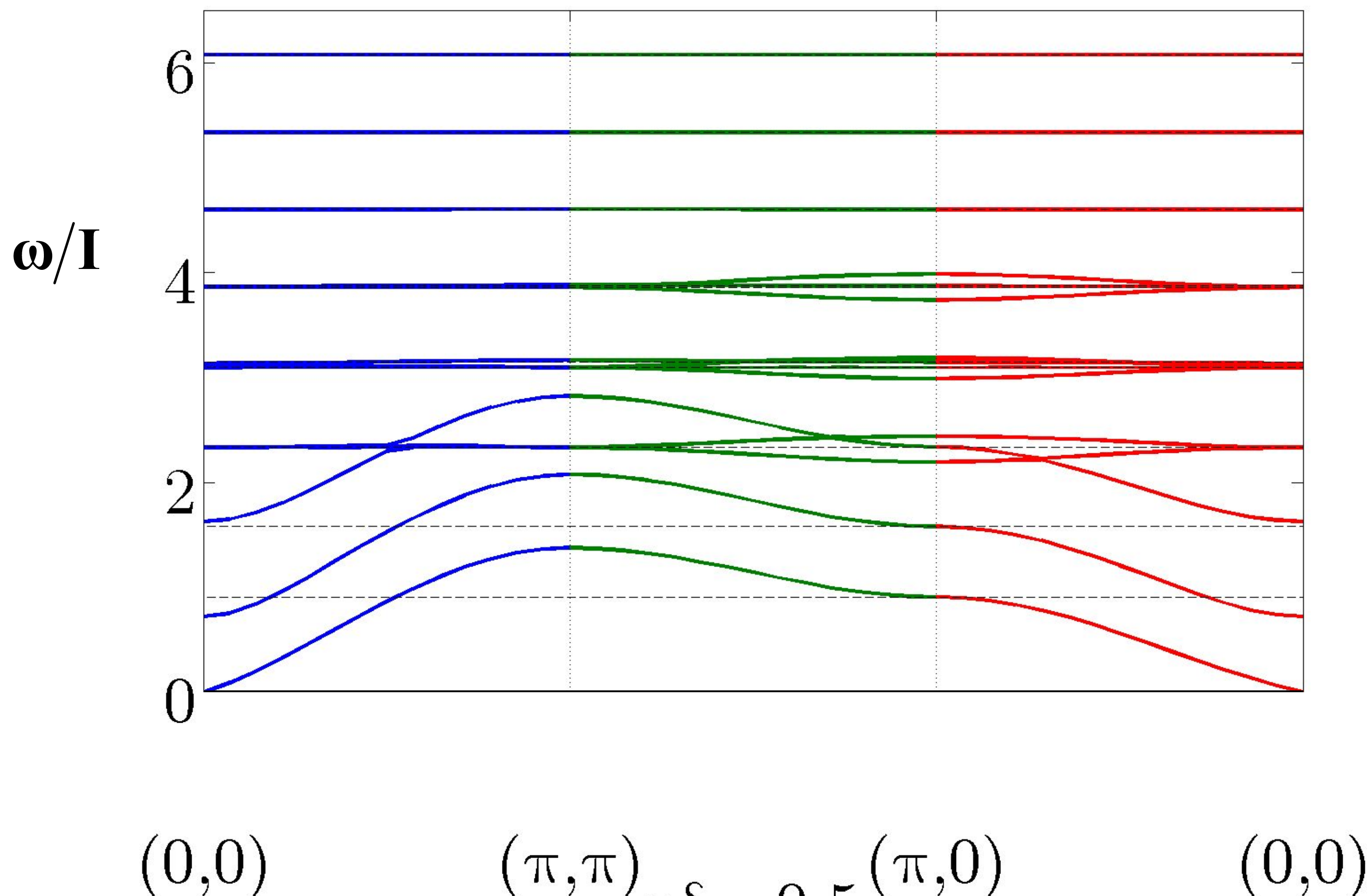
J/I=0 k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I$ = 0.5



$\kappa_1\delta = 0.5$

(старт из синглетного состояния)

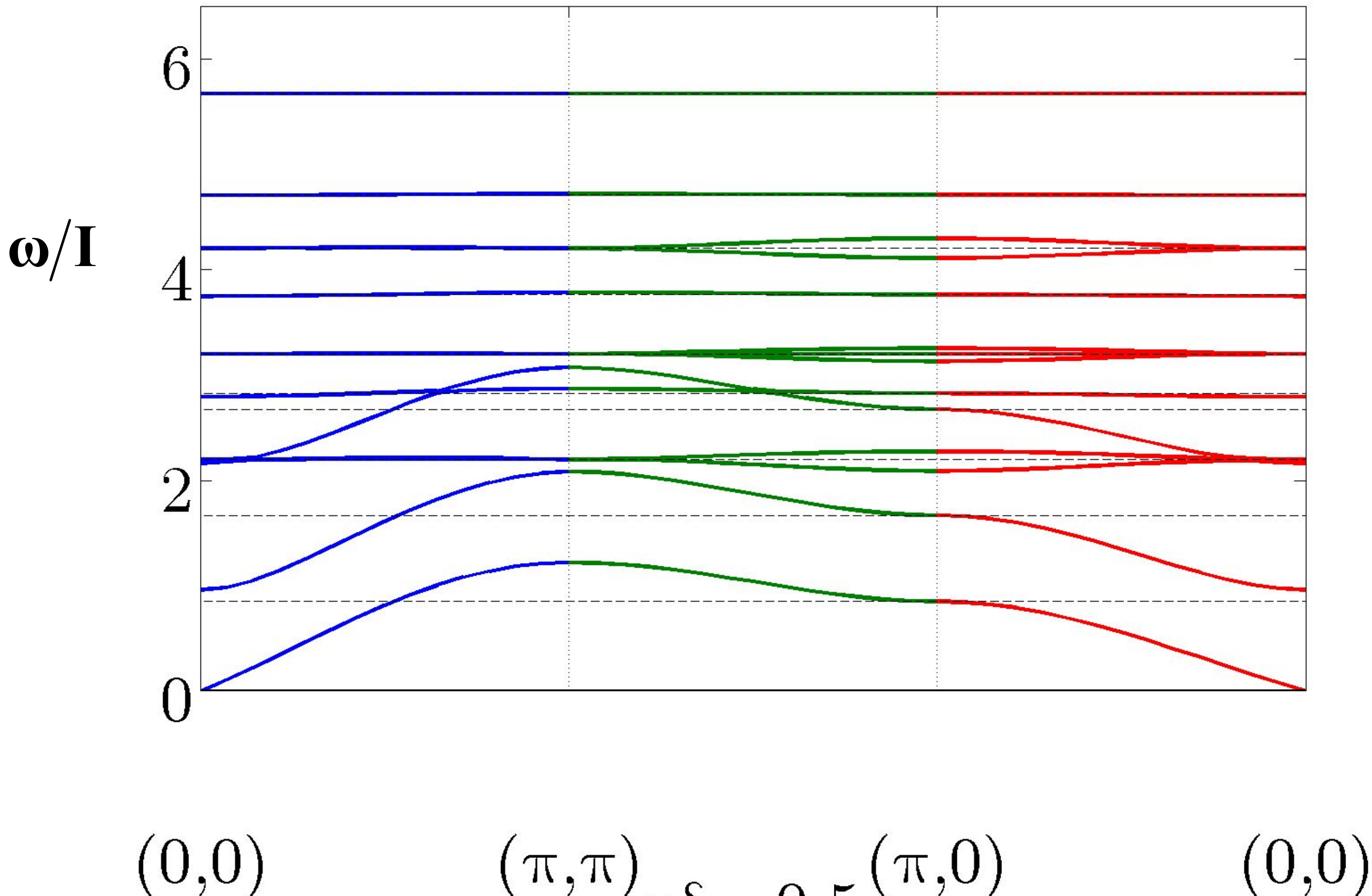
J/I=0   k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I = 0.75$



$\kappa_1\delta = 0.5$

(старт из синглетного состояния)

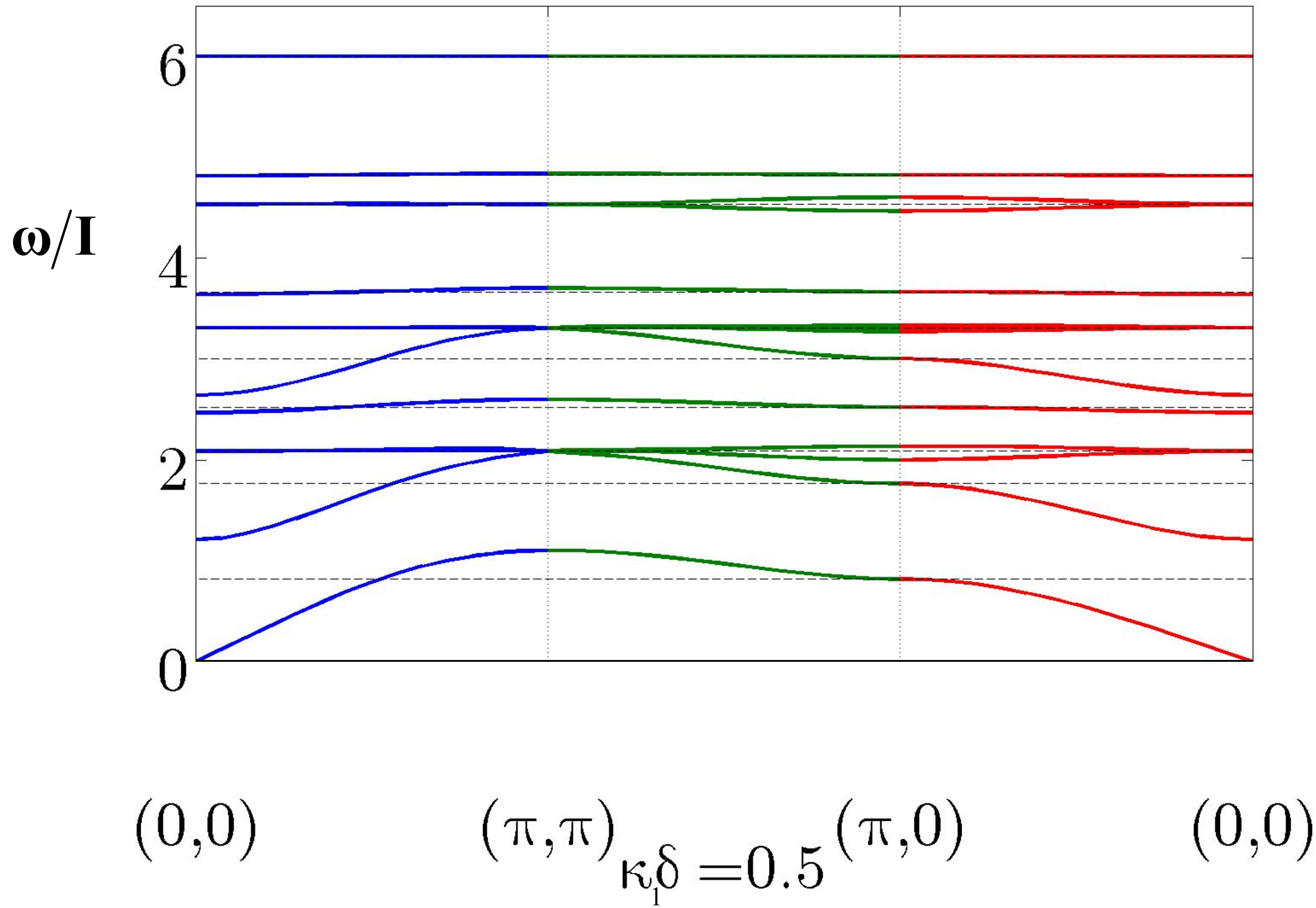
J/I=0   k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I$ = 1



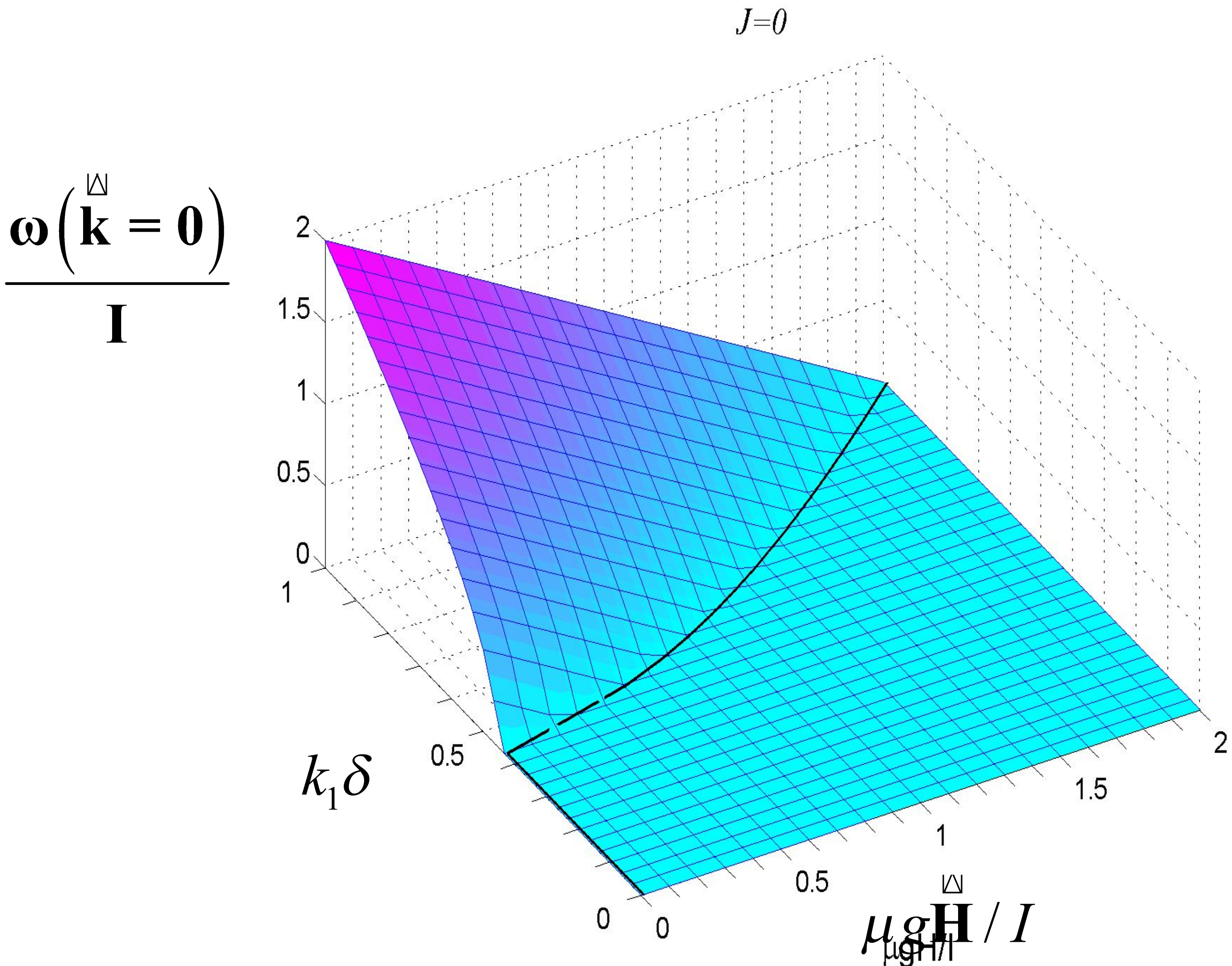
$\kappa_1\delta = 0.5$

(старт из синглетного состояния)

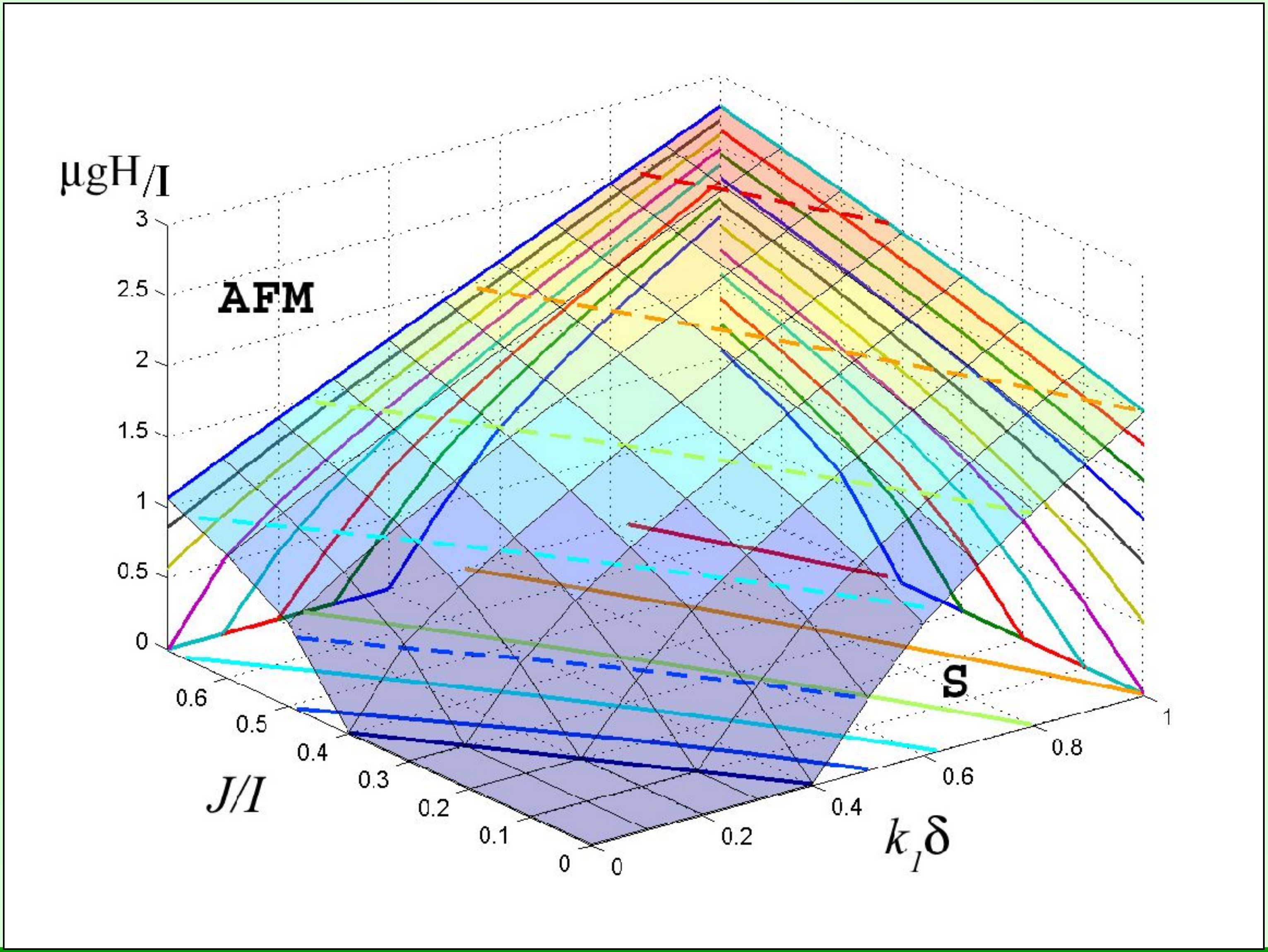
J/I=0 k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I$ = 1.25



$$\omega_0 = I\sqrt{\frac{11}{3}\left(k_1\delta\right)^2 + 2\,k_1\delta - \frac{5}{3} + 4\,\frac{J}{I}\left(1 + k_1\delta - \frac{1}{3}k_2\delta\left(1 + k_1\delta\right)\right)} - \mu g\mathbf{H}$$



$$\mu g\mathbf{H} \Big/ I = \sqrt{\frac{11}{3}\left(k_1\delta\right)^2 + 2k_1\delta - \frac{5}{3} + 4\frac{J}{I}\left(1 + k_1\delta - \frac{1}{3}k_2\delta\left(1 + k_1\delta\right)\right)}$$

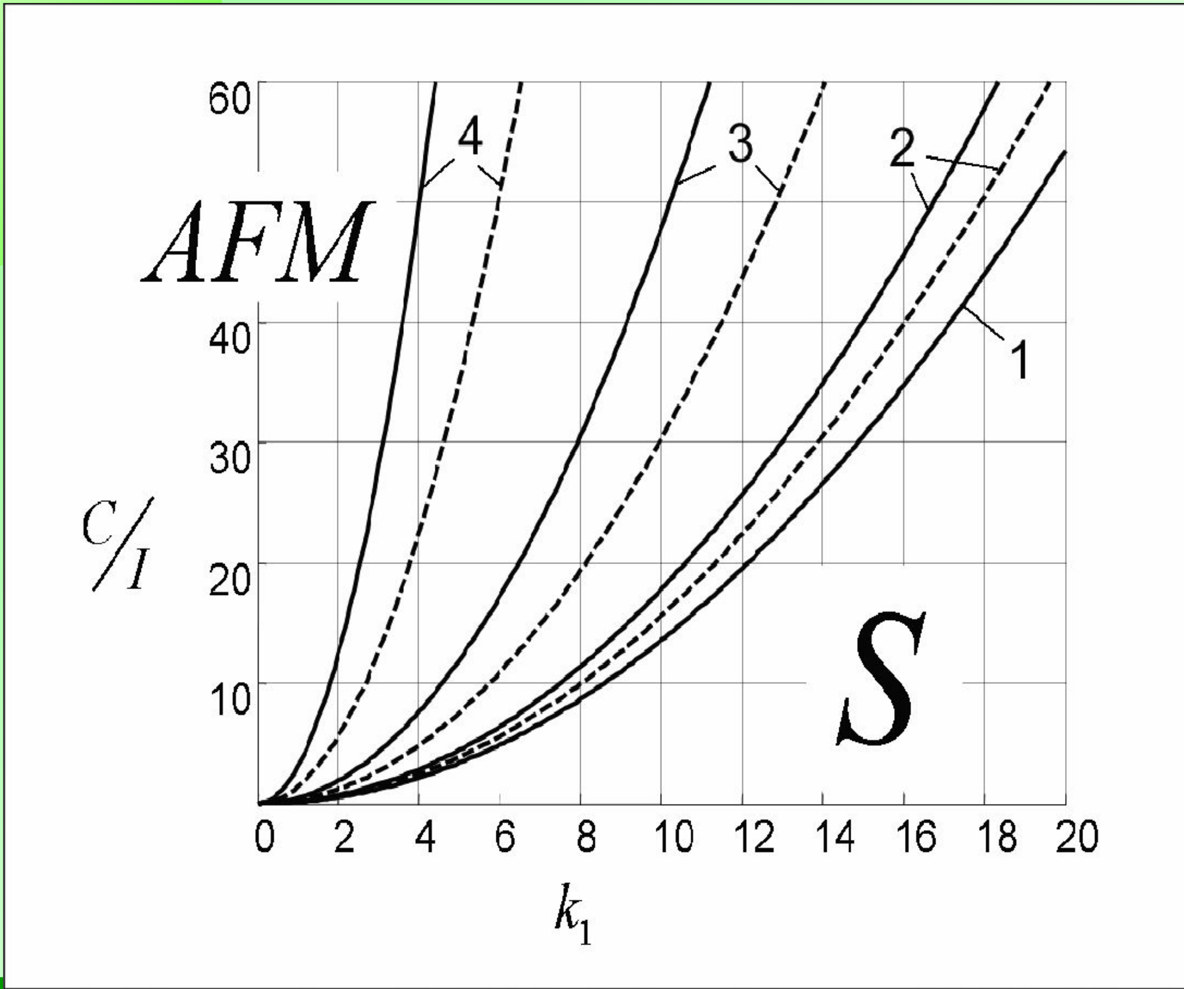


Учет упругой энергии

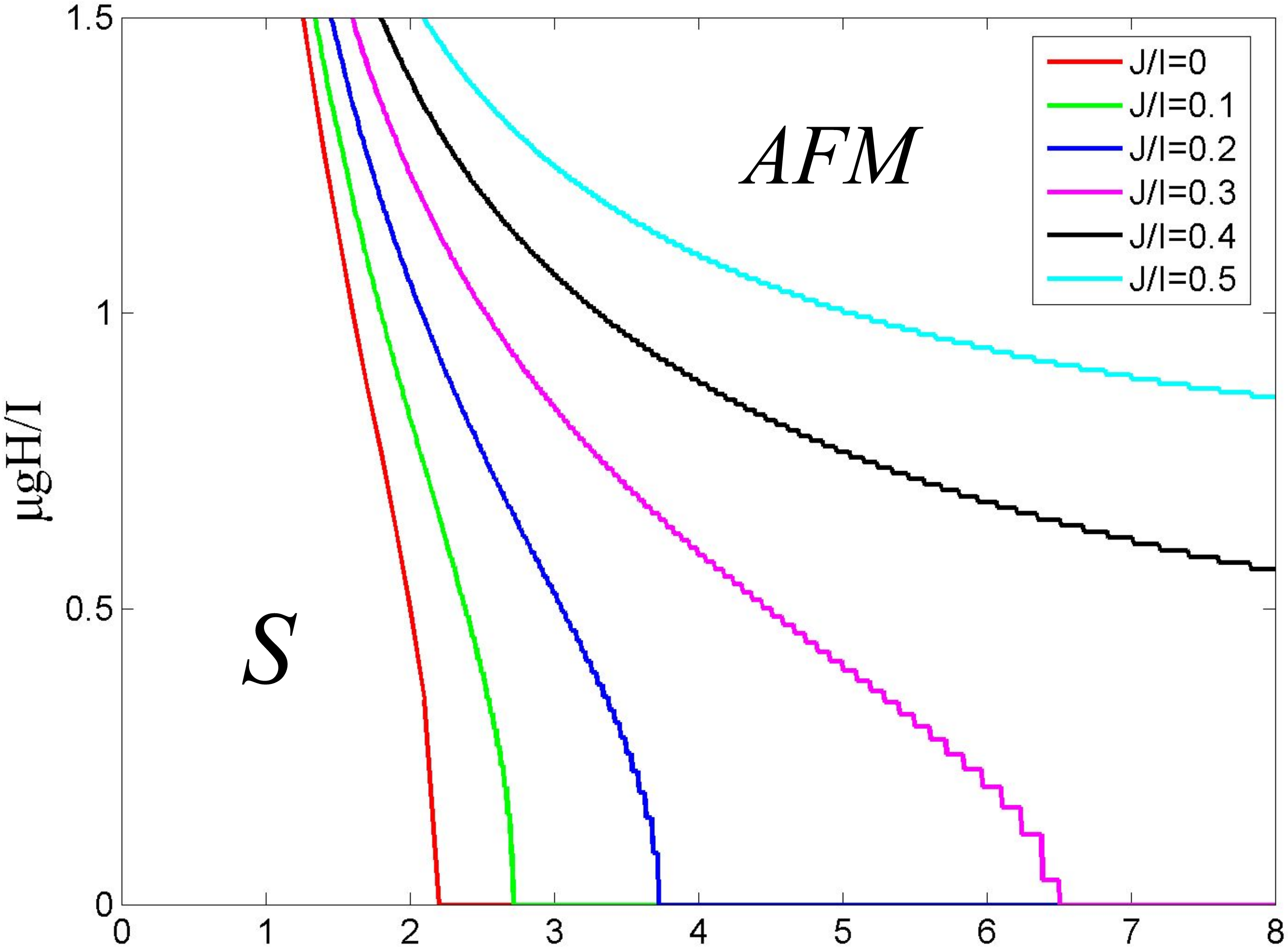
$$\tilde{C}d^2 \equiv C\delta^2 = \frac{C}{k_1^2}\left(k_1\delta\right)^2$$

$$E = E_{magn}\left(k_1\delta, \frac{k_2}{k_1}, \frac{J}{I}, \mathbf{H}\right) + \tilde{C}d^2;$$

$$\frac{C}{I} = \mu\left(\frac{J}{I}, \frac{k_2}{k_1}, \mathbf{H}\right)k_1^2$$

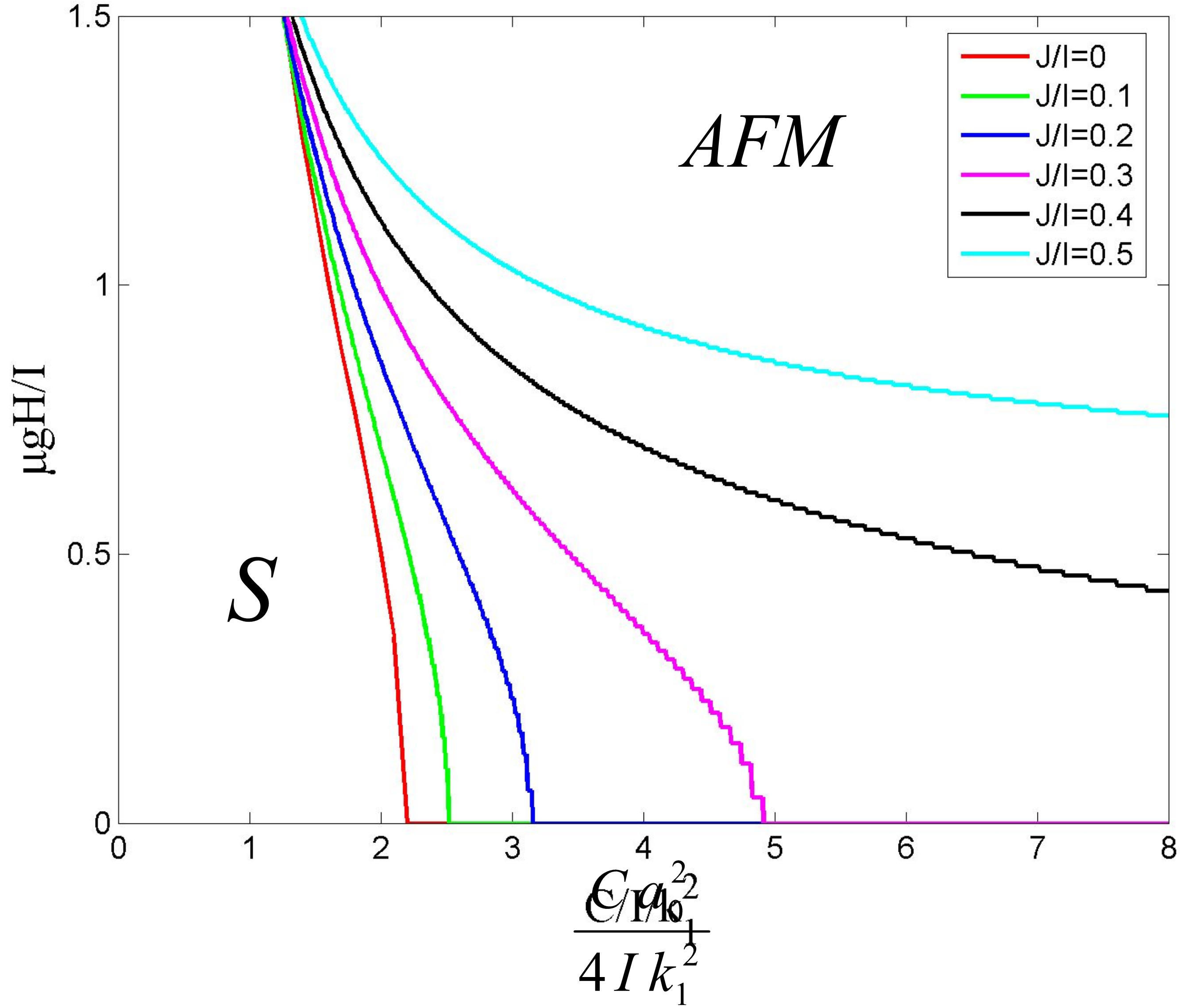


$$k_2 = k_1$$



$$\frac{C\,a_0^2}{4\,I\,k_1^2}$$

$k_2 = 3k_1$



J/I=0
J/I=0.1
J/I=0.2
J/I=0.3
J/I=0.4
J/I=0.5
AFM
S
μgH/I
0
0.5
1
1.5
0
1
2
3
4
5
6
7
8
C/Ik1
$\frac{C a_0^2}{4 I k_1^2}$

The End

Энергетическая структура отдельного плакета

Квинтет	$\lvert\psi_{11-15}\rangle$	$E = I + \frac{J}{2} + (0, \pm 1, \pm 2)\mathbf{H}$
2 Триплета	$\lvert\psi_{5-7}\rangle$, $\lvert\psi_{8-10}\rangle$	$E = -\frac{1}{2}J + (0, \pm 1)\mathbf{H}$
Второй синглет	$\lvert\psi_{4}\rangle$	$E = -\frac{3}{2}J$
Триплет	$\lvert\psi_{1-3}\rangle$	$E = -I + \frac{J}{2} + (0, \pm 1)\mathbf{H}$
Основной синглет	$\lvert\psi_{0}\rangle$	$E = -2I + \frac{J}{2}$

Barabanov A.F. et all // J.Phys.: Conden. Matter, **2**, 8925 (1990)

$$H_0 = \sum_f \sum_p E_p X_f^{pp}.$$

$$H_{int}^{\perp} = \frac{1}{2} \sum_{f\,\Delta_i} \sum_{\alpha\,\beta} \hat{\mathbf{V}}_{\alpha\beta}^{\perp}\left(\Delta_i\right) X_f^{\alpha} X_{f+\Delta_i}^{\beta},$$

$$H_{int}^{\perp} = \frac{1}{2} \sum_{f\,\Delta_i} \sum_{\alpha\,\beta} \hat{\mathbf{V}}_{\alpha\beta}^{\perp}\left(\Delta_i\right) X_f^{\alpha} X_{f+\Delta_i}^{\beta},$$

$$\mathbf{C}^{\perp}(\alpha) = \left[\gamma_1^{\perp}(\alpha), \gamma_2^{\perp}(\alpha), \gamma_3^{\perp}(\alpha), \gamma_4^{\perp}(\alpha), \gamma_1^{\perp}(-\alpha), \gamma_2^{\perp}(-\alpha), \gamma_3^{\perp}(-\alpha), \gamma_4^{\perp}(-\alpha)\right]$$

$$\mathbf{C}^{\parallel}(\alpha) = \left[\gamma_1^{\parallel}(\alpha), \gamma_2^{\parallel}(\alpha), \gamma_3^{\parallel}(\alpha), \gamma_4^{\parallel}(\alpha)\right].$$

$$\hat{\mathbf{V}}_{\alpha\beta}^{\perp}\left(\Delta_i\right) = \left\{\mathbf{C}^{\perp}(\alpha), \hat{\mathbf{V}}\left(\Delta_i\right)\tilde{\mathbf{C}}^{\perp}(-\beta)\right\},$$

$$\hat{\mathbf{V}}\left(\Delta_i\right) = \hat{\mathbf{v}}\left(\Delta_i\right) \oplus \hat{\mathbf{v}}\left(\Delta_i\right).$$

$$\hat{\mathbf{V}}_{\alpha\beta}^{\parallel}\left(\Delta_i\right) = \left\{\mathbf{C}^{\parallel}(\alpha), \hat{\mathbf{v}}\left(\Delta_i\right)\tilde{\mathbf{C}}^{\parallel}(-\beta)\right\}$$

$$v\left(\Delta_x\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ J & I_{ex} & 0 & 0 \\ I_{ex} & J & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad v\left(\Delta_y\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ I_{ex} & 0 & 0 & J \\ J & 0 & 0 & I_{ex} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$v\left(\Delta_{x+y}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad v\left(\Delta_{x-y}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\boxed{\begin{aligned} H_{int} = \sum_f \Big\{ I^{ex} \Big[& \vec{S}_4(f)\vec{S}_1(f+\Delta_x) + \vec{S}_3(f)\vec{S}_2(f+\Delta_x) + \vec{S}_2(f)\vec{S}_1(f+\Delta_y) + \vec{S}_3(f)\vec{S}_4(f+\Delta_y) \Big] + \\ & + J_1 \Big[\vec{S}_3(f)\vec{S}_1(f+\Delta_x) + \vec{S}_3(f)\vec{S}_1(f+\Delta_y) + \vec{S}_3(f)\vec{S}_1(f+\Delta_{x+y}) \Big] + \\ & + J \Big[\vec{S}_4(f)\vec{S}_2(f+\Delta_x) + \vec{S}_2(f)\vec{S}_4(f+\Delta_y) + \vec{S}_4(f)\vec{S}_2(f+\Delta_{x-y}) \Big] \Big\} \end{aligned}}$$

$$\Delta_x = (b,0),\ \Delta_y = (0,b),\ b = 2a;\ \Delta_{x+y} = (b,b),\ \Delta_{x-y} = (b,-b); \qquad b = 2a$$

Формализм операторов Хаббрада

$$\boxed{X_f^{nm} = \left|\psi_n(f)\right\rangle\left\langle\psi_m(f)\right|}$$

$$X_f^{pq} \to X_f^{\alpha(p,q)} \equiv X_f^{\alpha}$$

$$\alpha \equiv \alpha(p,q)$$

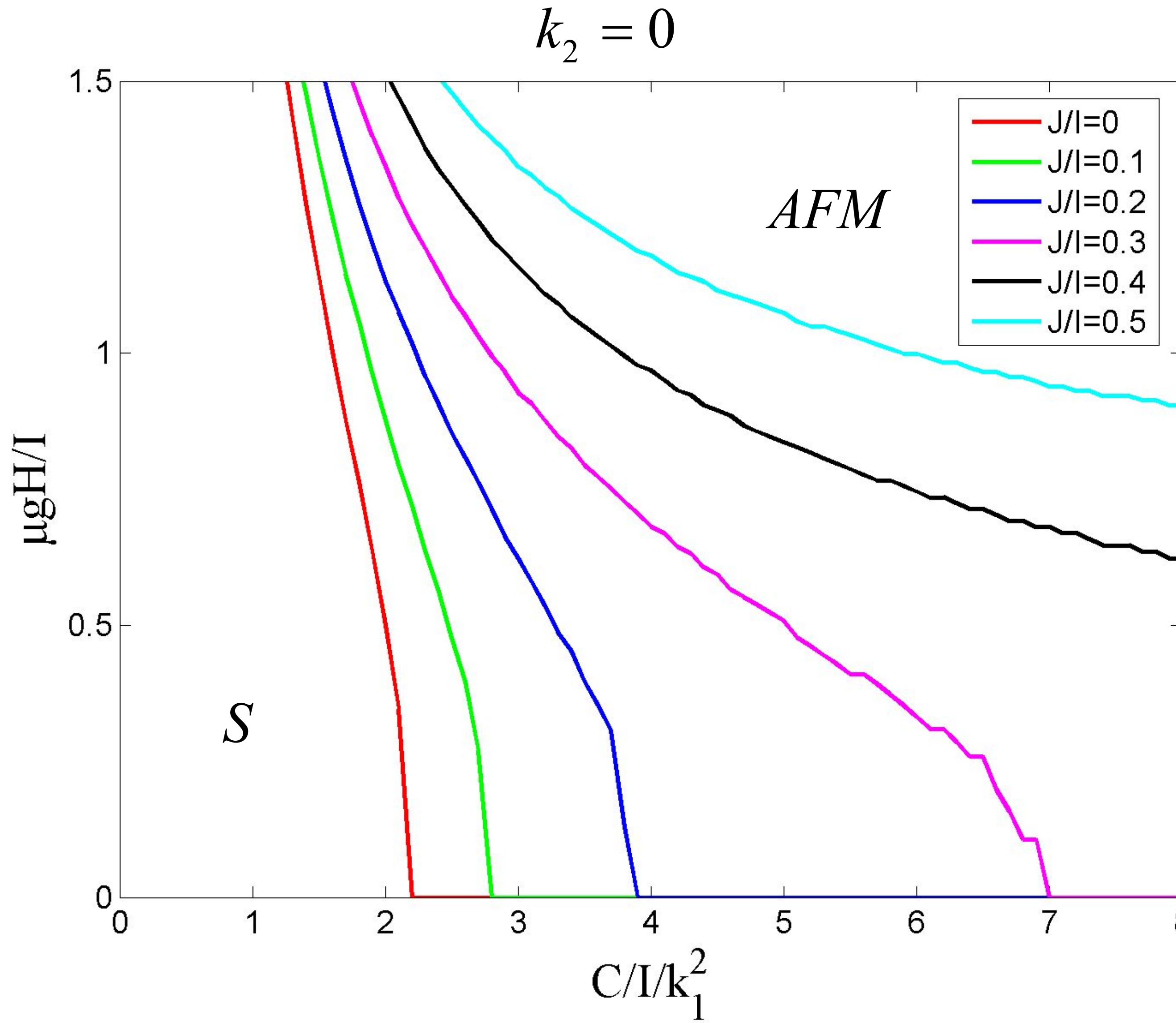
$$\boxed{\begin{aligned} S_i^{\pm}(f) &= \sum_\alpha \gamma_i^{\perp}(\pm\alpha) X_f^{\alpha}; \\ S_i^{z}(f) &= \sum_\alpha \gamma_i^{\parallel}(\alpha) X_f^{\alpha} \end{aligned}}$$

$$i = 1,2,3,4$$

$$\gamma_i^{\perp}(\alpha) = \left\langle \psi_p(f) \middle| S_i^{+}(f) \middle| \psi_q(f) \right\rangle,$$

$$\gamma_i^{\perp}(-\alpha) = \left\langle \psi_p(f) \middle| S_i^{-}(f) \middle| \psi_q(f) \right\rangle,$$

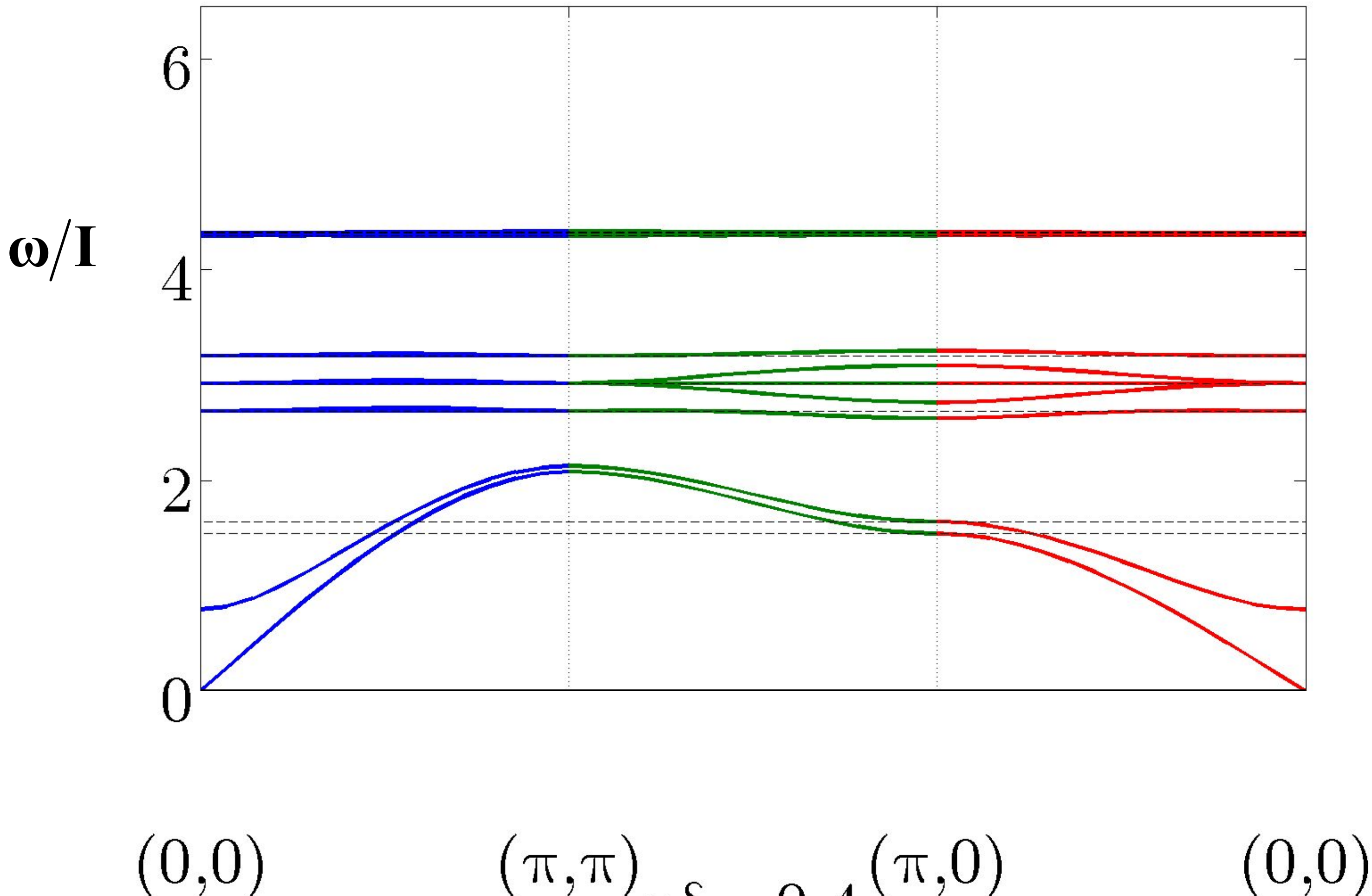
$$\gamma_i^{\parallel}(\alpha) = \left\langle \psi_p(f) \middle| S_i^{z}(f) \middle| \psi_q(f) \right\rangle.$$



$k_2 = 0$
J/I=0
J/I=0.1
J/I=0.2
J/I=0.3
J/I=0.4
J/I=0.5
AFM
S
μgH/I
C/I/k_1^2
1.5
1
0.5
0
0
1
2
3
4
5
6
7
8

Эволюция спектра при изменении магнитного поля
(старт из магнитного состояния)

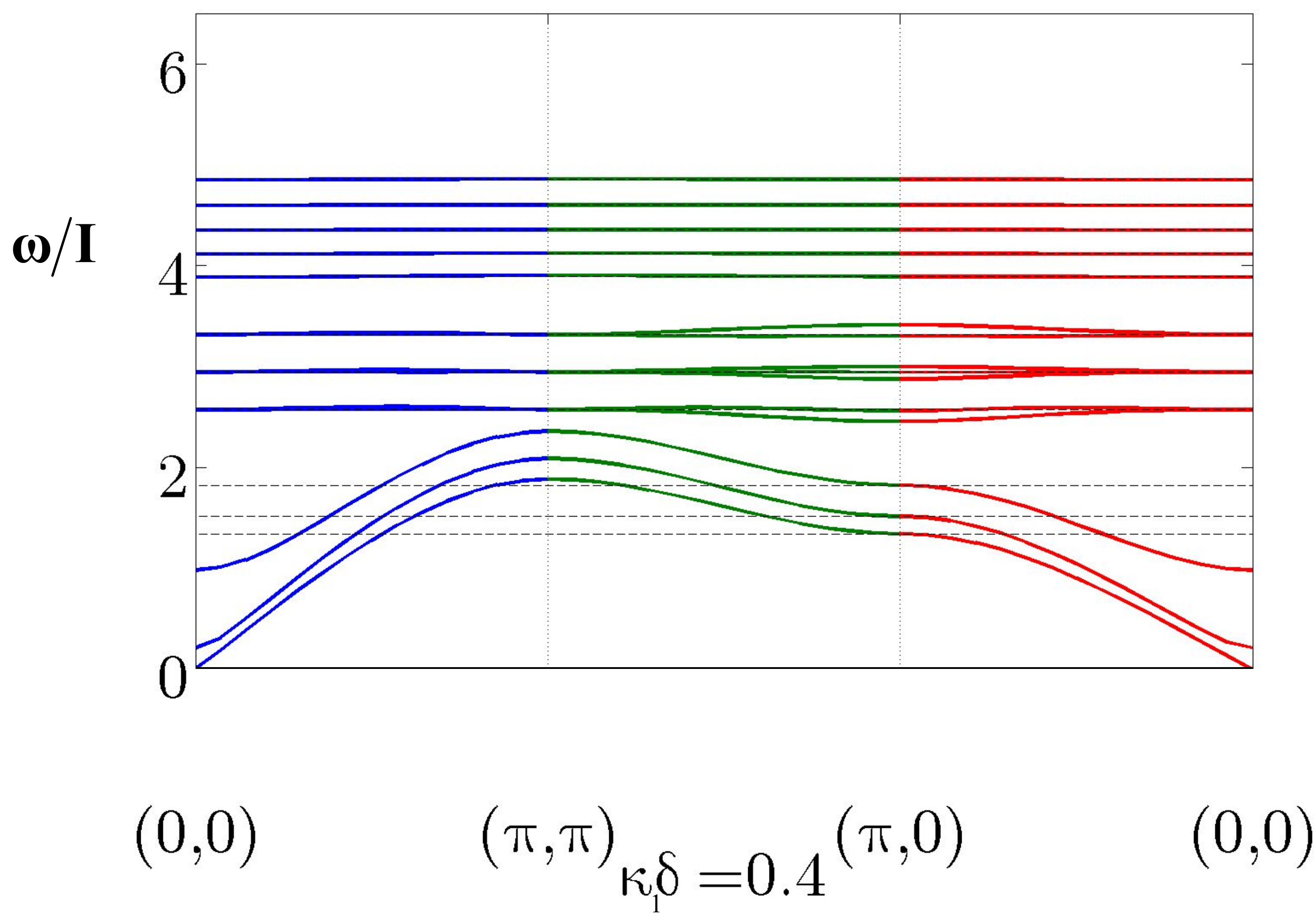
J/I=0 k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I = 0$



$\kappa_1\delta = 0.4$

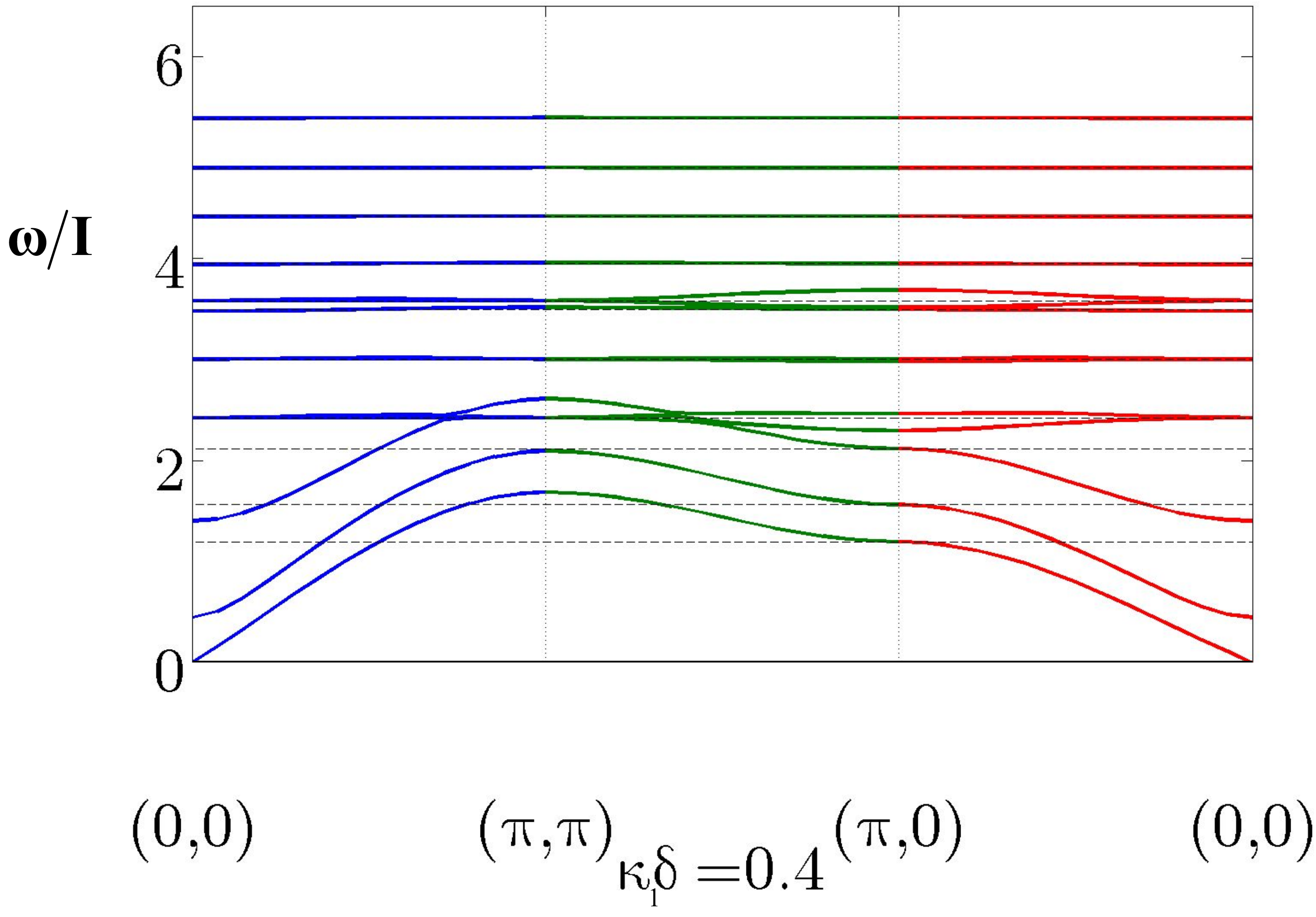
(старт из магнитного состояния)

J/I=0   k2/k1=1 $\mu g \mathbf{H} / I$ = 0.25



(старт из магнитного состояния)

J/I=0 k2/k1=1 $\mu g\mathbf{H}/I$ = 0.5



(старт из магнитного состояния)

J/I=0   k2/k1=1 $\mu g \mathbf{H} / I$ = 0.75