

На правах рукописи

Шварцберг Александр Владимирович

**Спектр возбуждений и фазовые переходы
в низкоразмерном сильно фрустрированном
магнетике**

Специальность 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2014

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Московского физико-технического института

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук
Михеенков Андрей Витальевич,
Институт физики высоких давлений
Российской академии наук, руководитель
отдела теоретической физики

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук, профессор
Шавров Владимир Григорьевич,
Институт радиотехники и электроники
Российской академии наук, руководитель
лаборатории магнитных явлений
в микроэлектронике

доктор физ.-мат. наук
Маслова Наталья Сергеевна,
физический факультет Московского
государственного университета, доцент
кафедры квантовой электроники

Ведущая организация: Национальный исследовательский
технологический университет
«Московский институт стали и сплавов»

Защита состоится 16 февраля 2015 г. в 12 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 002.023.02 при Физическом институте имени П. Н. Лебедева (ФИАН) Российской академии наук по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИАН и на сайте www.lebedev.ru.

Автореферат разослан «__» _____ 20__ года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук, профессор

Истомин Я. Н.

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Теория низкоразмерных квантовых магнетиков в настоящее время привлекает значительное внимание [1]. В частности, интерес представляют фрустрированные двумерные и квазидвумерные магнетики, в которых эффект квантовых флуктуаций становится значительным. Двумерная J_1 - J_2 квантовая модель Гейзенберга со спином $S = 1/2$ является общепринятым инструментом в изучении фрустрации и квантовых фазовых переходов. Купратам и многочисленным другим квазидвумерным соединениям с антиферромагнитными первым и вторым ближайшими обменными параметрами $J_1 > 0, J_2 > 0$ посвящено значительное количество экспериментальных работ. В этой области параметров модель хорошо изучена [2]. Общепринятыми являются следующие результаты: при $T = 0$ система испытывает два последовательных фазовых перехода — от антиферромагнетика (АФМ) к неупорядоченной фазе и затем в страйп-фазу. При этом природа квантового фазового перехода и детальная структура упорядоченных состояний остаётся предметом дискуссии.

Этот класс систем недавно был пополнен магнитными материалами с ферромагнитным первым обменом ($J_1 < 0$) и фрустрированным антиферромагнитным взаимодействием между вторыми ближайшими соседями ($J_2 > 0$), при этом обменное взаимодействие J_2 в этих материалах может быть достаточно велико, чтобы выводить материалы из ферромагнитной фазы. Это побудило теоретическое исследование J_1 - J_2 модели с $J_1 < 0$ и фрустрирующим $J_2 > 0$ [3, 4, 5]. Было обнаружено, что в этой области параметров также существует неупорядоченная фаза между ферромагнитной и страйп-фазами. Приблизительное положение точки перехода в обоих случаях соответствует $J_2 \approx \pm 0.4J_1$ (АФМ — неупорядоченная фаза, ФМ — неупорядоченная фаза) и $J_2 \approx \pm 0.7J_1$ (неупорядоченные фазы — страйп).

Таким образом имеется несколько экспериментальных точек, соответствующих области $J_1 > 0$ и множество теоретических методов, каждый из которых настроен на конкретную область параметров. В такой ситуации был бы крайне полезен единый подход, позволяющий описать картину целиком, вместе с основным состоянием и термодинамикой модели. Также было бы интересно исследовать нижнюю часть круга ($J_2 < 0$), которая, однако, до сих пор является экспериментально недостижимой.

Таким подходом является сферически симметричный самосогласованный подход (СССП). Он сохраняет спиновую $SU(2)$ и трансляционную симметрии гамильтониана и позволяет, во-первых, автоматически выполнить

условия теорем Маршалла и Мермина-Вагнера, во-вторых, в рамках единого подхода описать при $T = 0$ (где возможен спиновый дальний порядок) состояния бесконечной системы как с дальним порядком, так и без него, и в-третьих, определить микроскопические характеристики, такие как спектр спиновых возбуждений $\omega(\mathbf{q})$, температурную зависимость спиновых щелей и явный вид динамической восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega, T)$, а также выйти за пределы среднеполевого приближения введением затухания в выражение для спиновой функции Грина $G(\mathbf{q}, \omega)$ [A2].

Несомненный теоретический интерес также представляет расширение фрустрированной модели Гейзенберга на случай ненулевого третьего обмена J_3 . В этом случае впервые во фрустрированной модели появляются состояния с несоизмеримыми геликоидальными дальними порядками. Параметр J_3 при этом может играть роль «настроечного» параметра при изучении квантового фазового перехода. С экспериментальной точки зрения оказывается, что во многих купратных соединениях, магнитные подсистемы которых стандартно описываются J_1 - J_2 моделью Гейзенберга, присутствует небольшой, но отличный от нуля, третий обмен [6]. Кроме того, расчёты электронной структуры некоторых соединений на основе железа показывают, что в них обмен J_3 может быть значительным [7, 8].

Резюмируя сказанное выше можно сделать вывод о том, что тематика диссертации соответствует актуальным проблемам физики низкоразмерных магнетиков.

Целью диссертационной работы является теоретическое изучение особенностей фазовых диаграмм квазидвумерных фрустрированных магнетиков, а также спектральных и термодинамических свойств этих магнетиков в широком интервале по параметрам фрустрации J_1 , J_2 и J_3 (то есть обменными взаимодействиями между первыми, вторыми и третьими ближайшими соседями).

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Для 2D фрустрированных магнетиков с первым J_1 и вторым J_2 обменными взаимодействиями построить при $T = 0$ фазовую диаграмму по параметрам J_1 и J_2 и выяснить возможные фазовые переходы.
2. Для упомянутых выше магнетиков при отличных от нуля температурах исследовать особенности термодинамических свойств при произвольных знаках обменных констант.
3. Для двумерных фрустрированных магнетиков с первым J_1 , вторым J_2 и третьим J_3 обменными взаимодействиями при $T = 0$ и произвольных

знаках J_1, J_2, J_3 изучить особенности возможных фазовых переходов системы.

4. Для упомянутых выше магнетиков исследовать влияние затухания спиновых возбуждений на их спектр и на спин-спиновые корреляционные функции.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Для двумерной J_1 - J_2 модели Гейзенберга в ультраквантовом случае $S = 1/2$ развит сферически симметричный самосогласованный подход с точным учётом спинового констрейнта и для произвольных знаков обменных констант. Полученная система уравнений при $T = 0$ позволяет исследовать все возможные фазовые переходы системы по параметрам J_1, J_2 .
2. Впервые показано, что в области $J_1 < 0, J_2 > 0$ фазовый переход между ферромагнитной фазой с дальним порядком и одной из фаз спиновой жидкости имеет непрерывный характер.
3. Впервые показано, что в области $J_1 \approx 0, J_2 \approx -1$ фазовый переход между «сверхферромагнетиком» и «сверхантиферромагнетиком» происходит скачкообразно.
4. Сделанные выводы подтверждаются рассмотрением системы при конечных температурах. При $T > 0$ исследованы особенности спиновой теплоёмкости и такие микроскопические свойства, как щели в спиновом спектре и спин-спиновые корреляционные функции.
5. Исследовано влияние затухания спиновых возбуждений на спектр возбуждений и границы фазовых переходов.
6. Построена система самосогласованных уравнений для J_1 - J_2 - J_3 $S = 1/2$ модели Гейзенберга на квадратной решётке в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода при $T = 0$. Решение системы приводит к описанию целого ряда экзотических фаз при различных значениях J_1, J_2, J_3 . Положение границ фаз качественно согласуется с доступными результатами компьютерного моделирования для конечных спиновых систем.
7. Впервые указано на возможность существования нетривиального состояния с двумя различными сосуществующими конденсатами.

Научная новизна:

Для изучения 2D фрустрированных магнетиков впервые предложена и развита методика, позволяющая единое рассмотрение различных фаз (ферромагнитной и антиферромагнитной фаз, страйп-фазы и различных спинжидкостных фаз) при произвольных значениях обменных констант в обобщённой модели Гейзенберга.

Отличительным свойством исследования является одновременное рассмотрение фазовых переходов при нулевой температуре и термодинамических свойств системы при переходе к конечным температурам.

Другим отличительным свойством исследования является учёт влияния затухания спиновых возбуждений на спиновое упорядочивание и на границы фазовых переходов.

Практическая значимость. Результаты, представленные в диссертации, важны для анализа современных экспериментальных данных в области магнитных свойств квазидвумерных соединений, которые в последнее время активно синтезируются. Результаты работы также имеют общетеоретическую ценность для таких научных областей, как квантовые фазовые переходы и низкоразмерные квантовые магнетики.

Достоверность полученных результатов обеспечивается их сравнением с результатами численного моделирования и проверкой согласования с известными предельными случаями. Результаты работы неоднократно обсуждались на семинарах и докладывались на специализированных конференциях по проблемам, связанным с тематикой диссертационной работы. Большая часть результатов опубликована в международных и российских научных журналах. Это позволяет считать полученные результаты обоснованными и достоверными, а также полностью отвечающими современному мировому уровню исследований.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: Первой международной научной школе «Прикладные математика и физика: от фундаментальных исследований к инновациям», (Долгопрудный, июль 2010); 53 научной конференции МФТИ (Долгопрудный, ноябрь 2010); конференции «Перспективы развития фундаментальных наук», (Долгопрудный, июль 2011); 54 научной конференции МФТИ (Долгопрудный, ноябрь 2011); 4-й Международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» (ФПС'11) (Звенигород, октябрь 2011); конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Троицк, июнь 2011); XXXIV международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка-2012» (Новоуральск, февраль 2012); X Конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые

критические явления» (Троицк, июнь 2012); 55-й Научной конференции МФТИ (Долгопрудный, ноябрь 2012); XIV Школе молодых учёных «Актуальные проблемы физики» (Звенигород, ноябрь 2012); Международной конференции «Strong nonlinear vibronic and electronic interaction in solids» (Тарту, май 2013); XI Конференции "Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления (Троицк, июнь 2013); XII Конференции «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Троицк, июнь 2014).

Личный вклад. Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано 4 статьи в российских и иностранных реферируемых научных журналах [A1-A4], а также 15 тезисов докладов на российских и международных конференциях.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет **99** страниц, включая **34** рисунка. Список литературы содержит **110** наименований.

Содержание работы

Во введении дана общая характеристика диссертации: обоснована актуальность темы; сформулированы цели работы, научная новизна и практическая ценность полученных результатов; перечислены основные положения, выносимые на защиту; приведены сведения об апробации результатов, основных публикациях, объеме и структуре работы.

В **главе 1** приведён обзор литературы по фрустрированным спиновым системам и, в частности, по фрустрированной модели Гейзенберга. Коротко описаны основные теоретические подходы, применяемые для изучения модели. В **разделе 1.1** введены понятия квантовой спиновой жидкости и резонансной валентной связи. В **разделе 1.2** описывается двумерная $S = 1/2$ фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решётке с двумя и тремя обменными взаимодействиями, а также рассматривается структура спинового дальнего порядка в классическом пределе $S \rightarrow \infty$. **Раздел 1.3** посвящён применяемым теоретическим методам исследования модели, включая чисто вычислительные методы [9], а также полуаналитические методы [10, 11]. Наконец, **раздел 1.4** посвящён материалам с фрустрированной магнитной подсистемой.

Глава 2 посвящена описанию сферически симметричного самосогла-сованного подхода в приближении среднего поля. Выведена система само-согласованных уравнений для вычисления спин-спиновой функции Грина. Описано поведение спектра спиновых возбуждений при наличии и отсутствии спинового дальнего порядка. Выражение для спин-спиновой функции Грина имеет вид:

$$G_{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = -\chi_{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}$$

Где числитель $F_{\mathbf{q}}$ зависит от значений обменных констант и спин-спиновых корреляционных функций на первых трёх координационных сфе-рах. Спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ выражается через обменные констан-ты, корреляционные функции и вершинные поправки.

Система самосогласованных уравнений для вычисления спин-спиновых корреляционных функций имеет вид:

$$C_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}; \quad (\mathbf{r} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, 2\mathbf{d}, \mathbf{g} + \mathbf{d}); \quad (1)$$

$$C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega (2m(\omega) + 1) \text{Im} G(\mathbf{q}, \omega + i\delta); \quad (2)$$

$$C_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} = 1/4 = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int_0^{\infty} d\omega (2m(\omega) + 1) \text{Im} G(\mathbf{q}, \omega + i\delta) \quad (3)$$

В дальнейшем эта система решается численно для каждого исследуе-мого соотношения обменных параметров.

В пределе $T \rightarrow 0$ в выражении для структурного фактора

$$C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle$$

может появиться дельтообразный пик, который соответствует периодическо-му поведению спин-спиновых корреляционных функций на больших рассто-яниях, то есть появлению в них так называемого конденсатного слагаемо-го. Положение этого пика диктует структуру спинового дальнего порядка. Внутри спиновой жидкости, вблизи границ фаз с дальним порядком, а так-же при отходе от нулевой температуры, соответствующие мотивы в струк-турном факторе тоже могут присутствовать. Например, на Рис.1 приведён структурный фактор при параметре фрустрации $p = J_2/(J_1 + J_2) = 0.28$, соответствующем спиновой жидкости между страйп-фазой и шахматной фа-зой.

В точке, соответствующей дельтообразному пику в структурном фак-торе, зануляется щель в спектре спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$. При этом в фазе

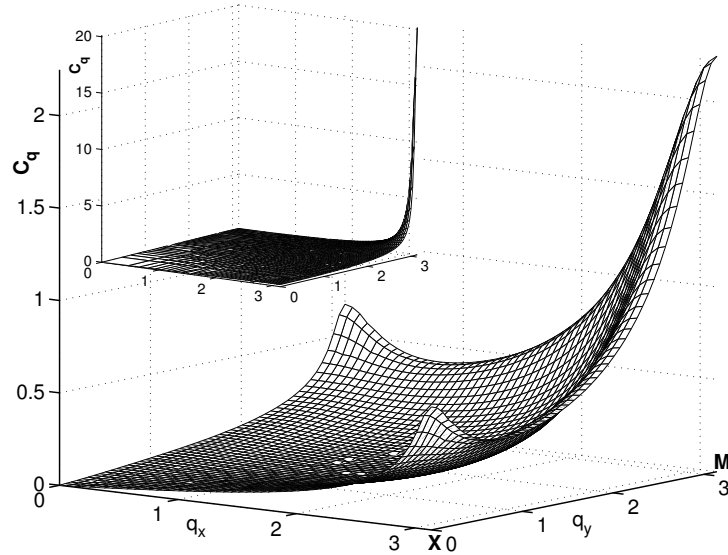


Рис. 1: Иллюстрация пиков в структурном факторе. Структурный фактор C_q при промежуточной фрустрации $p = 0.28$. (проявляются одновременно мотивы шахматной фазы и страйп-фазы). На вставке — узкий пик C_q при малой фрустрации $p = 0.1$ (только мотив шахматной фазы).

спиновой жидкости, когда при нулевой температуре в системе отсутствует дальний порядок, соответствующие щели открыты. В этом случае при отходе от значений обменных параметров, соответствующих фазе с дальним порядком, щель увеличивается даже при ненулевой температуре. На Рис.2 представлена эволюция спектра спиновых возбуждений при изменении параметра фрустрации для конечной температуры.

В **главе 3** развитый в предыдущей метод используется для исследования основного состояния и термодинамических свойств фрустрированной J_1 - J_2 модели Гейзенберга на квадратное решётке при произвольных знаках обменных констант.

Раздел 3.1 посвящён основному состоянию модели. Получены зависимости микроскопических величин, определяющих структуру спинового дальнего порядка и характер спиновых возбуждений, такие как корреляционные функции на первых трёх координационных сферах, конденсатные функции и щели в спектре спиновых возбуждений (см. Рис.3–4).

При нулевой температуре система может обладать следующими типами спинового порядка: неелевский («шахматный») дальний порядок, страйп дальний порядок, ферромагнитный коллинеарный дальний порядок, а также система может находиться в состоянии спиновой жидкости, которое характеризуется отсутствием дальнего порядка, но наличием ближнего. При этом тип спиновой жидкости задаётся структурой ближнего порядка. Показано,

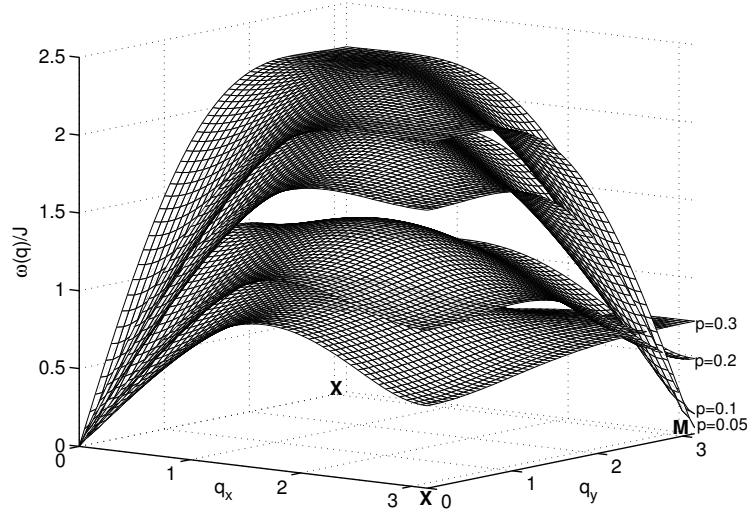


Рис. 2: Эволюция спектра спиновых возбуждений $\omega(\mathbf{q})$ в среднеполевом приближении с ростом фрустрации. Температура $T/J = 0.1$. Показана четверть полной зоны Бриллюэна, $\mathbf{M} \equiv \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$.

что при $T = 0$ переход между коллинеарной фазой и спиновой жидкостью происходит непрерывно и характеризуется наличием узкой области с дальним порядком, в котором конденсатная функция быстро растёт от $c_0 = 0$ на границе спин-жидкостной фазы до $c_0 = 1/12$ внутри коллинеарной фазы.

Раздел 3.2 посвящён термодинамическим свойствам модели. Получены значения корреляционных функций при различных температурах и различных значениях обменных констант, щели в спектре спиновых возбуждений, энергия основного состояния и теплоёмкость системы, а также корреляционные длины, соответствующие различным дальним порядкам. При $J_1 = 0$ при любой температуре зануляется щель $\Delta_{\mathbf{Q}}$ в спектре спиновых возбуждений. Это соответствует фактическому разделению спиновой решётки на две независимые подрешётки. При этом зануляется также корреляционная функция c_g , соответствующая первой координационной сфере. Переход между антиферромагнитной и ферромагнитной фазами является переходом первого рода, при этом скачком меняются спин-спиновые корреляционные функции. В отличие от квазиклассических случаев, соответствующих переходам антиферромагнетик–страйп и страйп–ферромагнетик, при переходе к ультраквантовому пределу $S = 1/2$ в области перехода ФМ–АФМ не образуется фазы спиновой жидкости. При отходе от точки перехода в область $J_1 > 0$ экспоненциально медленно по температуре возрастает щель $\Delta_{\mathbf{Q}}$ (Рис.4).

В **разделе 3.3** обсуждаются результаты, полученные в этой главе.

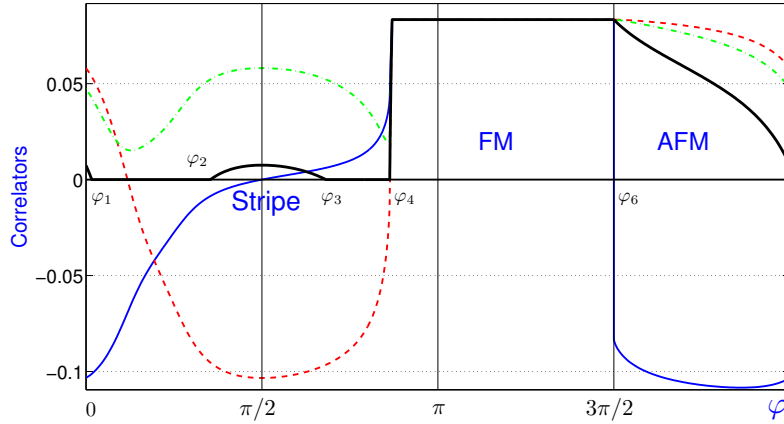


Рис. 3: Зависимость конденсата c_{cond} (модуля спин-спинового коррелятора на бесконечности) и спин-спиновых корреляторов на первых трёх координационных сферах c_g , c_d , c_{2g} от φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$). Жирная сплошная линия — c_{cond} , тонкая сплошная — c_g , пунктир — c_d , штрих-пунктир — c_{2g} . На оси абсцисс помечены точки фазовых переходов: φ_1 — переход АФМ \rightarrow спиновая жидкость СЖ¹, φ_2 — СЖ¹ \rightarrow страйп, φ_3 — страйп \rightarrow СЖ², φ_4 — СЖ² \rightarrow ферромагнетик ФМ¹, φ_6 \rightarrow переход ФМ² — АФМ.

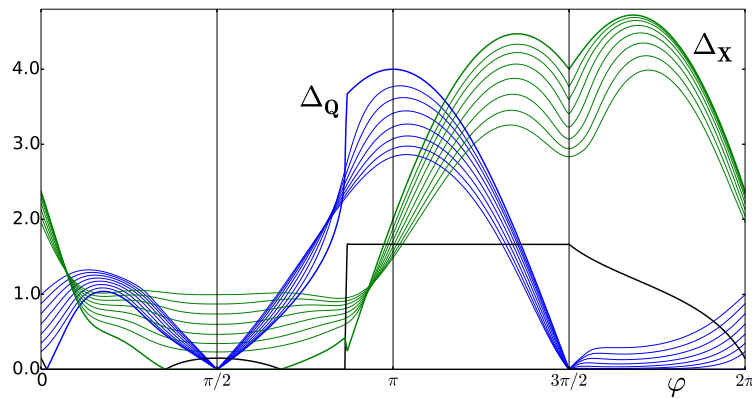


Рис. 4: Зависимость от параметра φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$) щелей $\Delta_{\mathbf{Q}}$ (синий цвет) и $\Delta_{\mathbf{x}}$ (зелёный цвет) в спектре спиновых возбуждений при различных температурах, жирные линии соответствуют случаю $T = 0$, тонкие — случаю $T = 0.3 \dots 0.9$

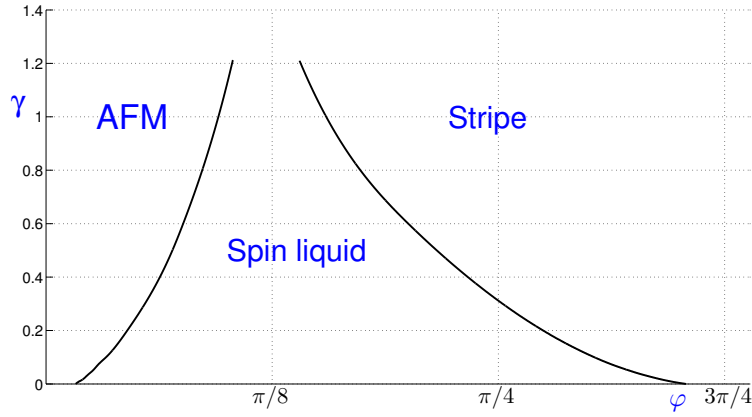


Рис. 5: Зависимость положения границ спиновой жидкости от параметра затухания γ

В **главе 4** производится учёт затухания спиновых возбуждений и исследуется его влияние на спектр и структуру спинового упорядочивания.

При простейшем учёте затухания спиновых возбуждений выражение для функции Грина приобретает вид:

$$G(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma}$$

Показано, что увеличение параметра затухания γ приводит к увеличению конденсатной функции и может привести к её появлению в случае спин-жидкостной фазы, то есть фактически его введение усиливает спиновый дальний порядок в системе. На Рис.5 приведена зависимость границ спин-жидкостной фазы в области положительных обменных параметров от величины параметра затухания.

Глава 5 посвящена исследованию основного состояния J_1 - J_2 - J_3 модели Гейзенберга с антиферромагнитным и ферромагнитным первым обменом.

В **разделе 5.1** приведён вид спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ и числителя $F_{\mathbf{q}}$ для случая J_1 - J_2 - J_3 модели.

Раздел 5.2 посвящён свойствам спинового порядка и спектра спиновых возбуждений в модели. Области с дальним порядком модели при антиферромагнитном J_1 детально исследованы в **разделе 5.3**. Наконец, в **разделе 5.4** рассматривается фазовая диаграмма системы в случае отрицательного первого обмена.

При включении третьего обменного параметра возможен переход системы в состояния, которые были невозможны при учёте только первых двух обменов. Во-первых, как в антиферромагнитном, так и в ферромагнитном случаях появляются фазы с несоизмеримым геликоидальным дальним порядком, в которых управляющая точка, характеризующая дальний порядок,

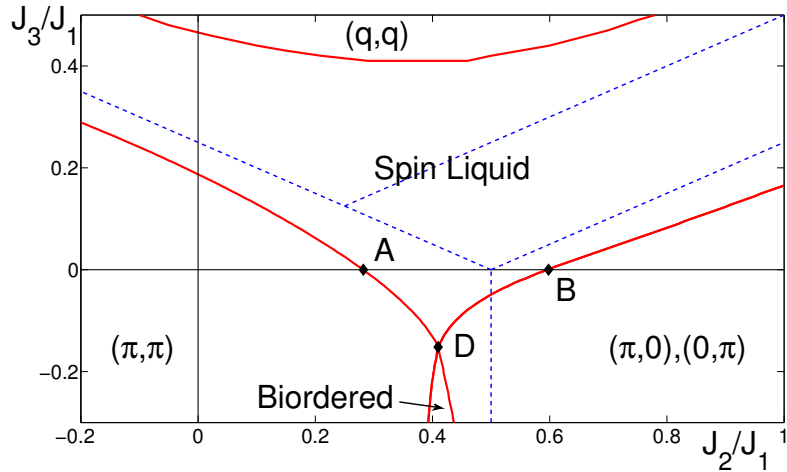


Рис. 6: Фазовая диаграмма $J_1 - J_2 - J_3$ модели ($T = 0$). Пунктирные линии – фазовые границы в классическом пределе: слева внизу – "шахматный" порядок, справа внизу – порядок страйп-типа, две верхних фазы соответствуют несоизмеримым геликоидальным порядкам. Сплошные линии отвечают границам квантовых фаз. Символы (π, π) , (q, q) и $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ задают положение спинового конденсата в различных фазах с дальним порядком (отметим, что квантовый геликоид (q, π) обнаружен не был). Нижняя часть фазовой диаграммы $J_3 < 0$ включает двуупорядоченную (Biordered) фазу, в которой сосуществуют конденсаты (π, π) и $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$.

и в которой зануляется щель в спектре спиновых возбуждений, находится на главной диагонали зоны Бриллюэна. Во-вторых, в этом случае даже при нулевом значении параметра затухания γ возможны фазы с взаимопроникающими дальними порядками различных типов. Детально исследована фаза, соответствующая сосуществованию шахматного и страйп дальних порядков в случае антиферромагнитного первого обмена. Фазовые диаграммы, соответствующие случаям $J_1 > 0$ и $J_1 < 0$, приведены на Рис.6–7. Для полученных фазовых диаграмм проведено сравнение с результатами кластерных расчётов.

В случае антиферромагнитного обмена не обнаружена фаза с дальним порядком геликоидального типа (q, π) , что согласуется с результатами кластерных расчётов. Отметим, что аналогичная фаза с управляющей точкой $(q, 0)$ существует в случае ферромагнитного первого обмена.

На Рис.8 приведены типичные спектры спиновых возбуждений на границах спиновой жидкости и фаз с дальним порядком страйп-типа и геликоидального типа (q, q) . Несмотря на то, что не была обнаружена геликоидальная фаза типа (q, π) , была обнаружена область в спиновой жидкости, в которой спектр имеет мотивы этой фазы. Соответствующий спектр спиновых возбуждений также приведён на Рис.8.

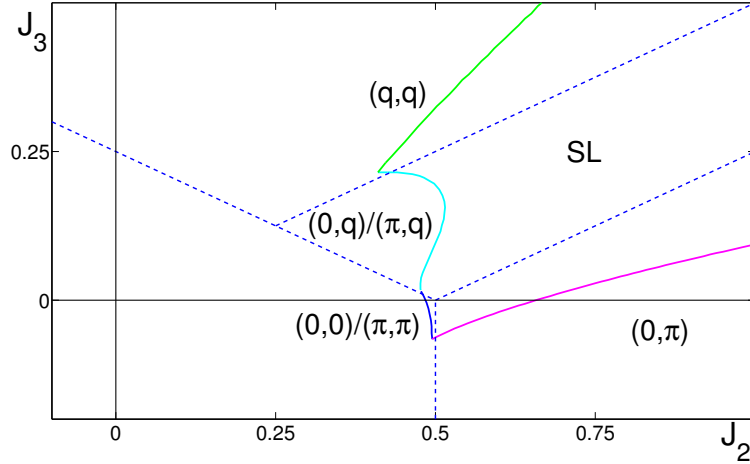


Рис. 7: Фазовая диаграмма $J_1 - J_2 - J_3$ модели ($T = 0$) в области отрицательных J_1 . Пунктирные линии — фазовые границы в классическом пределе: слева внизу — "шахматный" порядок, справа внизу — порядок страйп-типа, две верхних фазы соответствуют несоизмеримым геликоидальным порядкам. Сплошные линии отвечают границам квантовой спин-жидкостной фазы. Символы $(0, 0)$, (q, q) и $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ задают положение спинового конденсата в различных фазах с дальним порядком.

Спектр спиновых возбуждений в двуупорядоченной фазе приведён на Рис.9 слева, щели закрыты как в антиферромагнитной точке \mathbf{Q} , так и в страйп-точках \mathbf{X} , здесь же приведено изменение спектра при отходе от двуупорядоченной фазы при увеличении значения J_3 . Там же на рисунке справа приведён спектр в тройной точке, граничащей со спиновой жидкостью, а также двумя различными типами геликоидальных фаз в области $J_1 < 0$. Здесь щель в спектре закрывается по целой дуге.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Построена система самосогласованных уравнений для J_1 - J_2 - J_3 $S = 1/2$ модели Гейзенберга на квадратной решётке в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода. Основное состояние системы описывается как при наличии дальнего порядка (с ненулевой конденсатной функцией и дельтаобразным пиком в структурном факторе), так и при отсутствии дальнего порядка (спин-жидкостная фаза).
2. На основе полученной системы самосогласованных уравнений в рамках единого подхода проведено описание фрустрированной модели Гейзенберга во всей области обменных параметров. Получены микроскопические характеристики системы, такие как спектр спиновых возбуждений

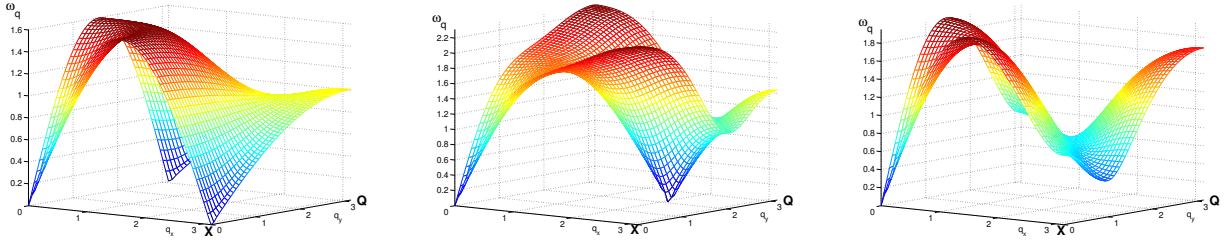


Рис. 8: Характерные спектры спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$. Слева направо: на границе страйп-фазы LRO $C(\pi, 0; 0, \pi)$ ($J_2 = 0.6$, $J_3 = 0$, $\gamma = 0.6$), щель закрыта в точках $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$; на границе геликоидальной фазы LRO $S(k, k)$ ($J_2 = 0$, $J_3 = 0.47$, $\gamma = 0.6$), щель закрыта в несоизмеримой точке (k, k) ; в спин-жидкостном состоянии SRO $S(k, \pi; \pi, k)$; без дальнего порядка ($J_2 = 1$, $J_3 = 0.35$, $\gamma = 0.6$). Щель минимальна в несоизмеримой точке (k, π)

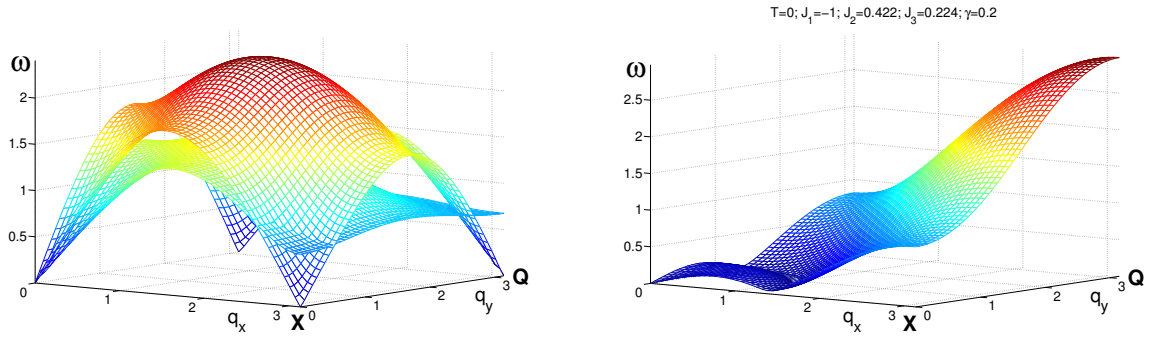


Рис. 9: Слева: спектр спиновых возбуждений в точке $J_2/J_1 = 0.40$ для двух различных значений J_3/J_1 . При $J_3/J_1 = 0$ в спектре есть щель во всех симметричных точках, кроме тривиальной точки $q = 0$. Для $J_3/J_1 = -0.25$ спектр является безщелевым как в точках \mathbf{Q} , так и в точках \mathbf{X} . Справа: спектр спиновых возбуждений в точке сосуществования двух геликоидальных фаз и ферромагнитной спин-жидкостной фазы

$\omega_{\mathbf{q}}$, спин-спиновые корреляционные функции. Проведено исследование термодинамических свойств системы при $T > 0$.

3. При $T = 0$ исследована фазовая диаграмма системы, проведено детальное рассмотрение характеристик дальнего порядка и фазовых переходов.
4. Показано, что при $T = 0$ переход между коллинеарной фазой и спиновой жидкостью происходит непрерывно и характеризуется наличием узкой области с дальним порядком, в котором конденсатная функция быстро растёт от $c_0 = 0$ на границе спин-жидкостной фазы до $c_0 = 1/12$ внутри коллинеарной фазы.

5. Показано, что затухание спиновых возбуждений приводит к усилению дальнего порядка и уменьшению области, отвечающей спин-жидкостной фазе.
6. На основе полученной системы самосогласованных уравнений проведено исследование основного состояния J_1 - J_2 - J_3 $S = 1/2$ в случаях $J_1 > 0$ и $J_1 < 0$. Для обоих случаев построены фазовые диаграммы системы и исследовано поведение спектра спиновых возбуждений.
7. Показано, что в случае антиферромагнитного первого обмена при $J_3 < 0$ возможно состояние, характеризующееся двумя взаимопроникающими дальними порядками. При этом корреляционные функции на бесконечности имеют два основных мотива — шахматный и страйп.

Список литературы

- [1] *Lacroix C., Mendels P., Mila F.* Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory. — Springer, 2011. — Vol. 164.
- [2] *Plakida N.* High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications. — Berlin: Springer, 2010. — P. 570.
- [3] *Shannon N., Schmidt B., Penc K., Thalmeier P.* Finite temperature properties and frustrated ferromagnetism in a square lattice Heisenberg model // *Eur. Phys. J. B.* — 2004. — Vol. 38, no. 4. — Pp. 599–616.
- [4] *Sindzingre P., Seabra L., Shannon N., Momoi T.* Phase diagram of the spin-1/2 $J_1 - J_2 - J_3$ Heisenberg model on the square lattice with ferromagnetic J_1 // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2009. — Vol. 145, no. 1. — P. 012048.
- [5] *Härtel M., Richter J., Götze O., Ihle D., Drechsler S.-L.* Thermodynamics of the two-dimensional frustrated $J_1 - J_2$ Heisenberg ferromagnet in the collinear stripe regime: Susceptibility and correlation length // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87, no. 5. — P. 054412.
- [6] *Wan X., Maier T. A., Savrasov S. Y.* Calculated magnetic exchange interactions in high-temperature superconductors // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 155114.
- [7] *Ma F., Ji W., Hu J., Lu Z.-Y., Xiang T.* First-principles calculations of the electronic structure of tetragonal α -FeTe and α -FeSe crystals: Evidence for a bicollinear antiferromagnetic order // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 177003.
- [8] *Yan X.-W., Gao M., Lu Z.-Y., Xiang T.* Electronic and magnetic structures of the ternary iron selenides $A\text{Fe}_2\text{Se}_2$ ($A = \text{Cs}, \text{Rb}, \text{K}, \text{or Tl}$) // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 054502.
- [9] *Sandvik A. W.* Computational studies of quantum spin systems // AIP Conference Proceedings. — Vol. 1297. — American Institute of Physics, 2010. — Pp. 135–338.
- [10] *Chubukov A. V.* On the quantum effects in helimagnets // *Journal of Physics C: Solid State Physics.* — 1984. — Vol. 17, no. 36. — P. L991.
- [11] *Feldner H., Cabra D. C., Rossini G. L.* Ferromagnetic frustrated spin systems on the square lattice: Schwinger boson study // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 214406.

Публикации автора по теме диссертации

- [A1] А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг, Н.А. Козлов, А.Ф. Барабанов, «Фазовая диаграмма фрустрированного J_1 - J_2 - J_3 квантового двумерного антиферромагнетика в рамках сферически симметричных функций Грина» // Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 2011, т. 93, с. 419-425
- [A2] А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг, «Фрустрированный J_1 - J_2 - J_3 квантовый двумерный антиферромагнетик в сферически-симметричном самосогласованном подходе» // Теоретическая и Математическая Физика, 2011, т. 168, 389-416
- [A3] A.V. Mikheyenkov, A.F. Barabanov, A.V.Shvartsberg, "On the coexistence of different types of long-range order in the strongly frustrated two-dimensional Heisenberg model"// Solid State Communications, 2012, Vol. 152, pp. 831-834
- [A4] А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг, А.Ф. Барабанов, «Фазовые переходы в двумерной J_1 - J_2 -модели Гейзенберга при произвольных знаках обменных взаимодействий», Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 2013, т. 98, с. 178-182