

ФГБОУ ВПО  
Московский физико-технический институт  
(государственный университет)

---

На правах рукописи

ШВАРЦБЕРГ АЛЕКСАНДР ВЛАДИМИРОВИЧ

Спектр возбуждений и фазовые переходы в низкоразмерном  
сильно фрустрированном магнетике

Специальность 01.04.02 — Теоретическая физика

Диссертация на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
доктор физико-математических наук  
А.В. Михеенков

МОСКВА - 2014

---

## Оглавление

---

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. Фрустрированные спиновые системы</b>	<b>13</b>
§ 1.1 Квантовая спиновая жидкость . . . . .	15
§ 1.2 Фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решётке . . . . .	15
1.2.1 Спиновый дальний порядок в модели Гейзенберга . . . . .	16
1.2.2 Фрустрированная модель Гейзенберга . . . . .	17
1.2.3 J1-J2-J3 модель Гейзенберга . . . . .	19
§ 1.3 Теоретические методы исследования . . . . .	20
§ 1.4 Материалы . . . . .	24
<b>Глава 2. Сферически симметричный самосогласованный подход</b>	<b>25</b>
§ 2.1 Приближение среднего поля . . . . .	25
<b>Глава 3. Фрустрированная J1-J2 модель Гейзенберга</b>	<b>36</b>
§ 3.1 Основное состояние J1-J2 модели Гейзенберга . . . . .	37
§ 3.2 Термодинамические свойства J1-J2 модели при $T > 0$ . . . . .	46
§ 3.3 Обсуждение . . . . .	47
3.3.1 Антиферромагнитный порядок . . . . .	50
3.3.2 Спиновая жидкость . . . . .	50
3.3.3 Страйп-порядок . . . . .	51
3.3.4 Ферромагнитный порядок . . . . .	52
3.3.5 Теплоемкость . . . . .	53
3.3.6 Возможность введения «настроечных» параметров . . . . .	55
<b>Глава 4. Учёт затухания спиновых возбуждений</b>	<b>56</b>
§ 4.1 Выход за приближение среднего поля и простейший учет затухания . . . . .	56
§ 4.2 Роль затухания в формировании дальнего порядка и спиновой щели . . . . .	59

<b>Глава 5. Фрустрированная J1-J2-J3 модель Гейзенберга</b>	<b>66</b>
§ 5.1 Спектр спиновых возбуждений для J1-J2-J3 модели . . . . .	66
§ 5.2 Фазовая диаграмма J1-J2-J3 модели . . . . .	67
§ 5.3 Области с дальним порядком . . . . .	76
§ 5.4 Область ферромагнитного J1 . . . . .	82
<b>Заключение</b>	<b>86</b>
<b>Литература</b>	<b>89</b>

---

## Введение

---

**Актуальность темы диссертации.** Теория низкоразмерных квантовых магнетиков в последние годы привлекает значительное внимание (см. обзор в [1] и [2, 3]). 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 (см., например, [4–9]).

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 [10–13]

Этот класс систем недавно был пополнен магнитными материалами с ферромагнитным первым обменом ( $J_1 < 0$ ) и фрустрированным антиферромагнитным взаимодействием между вторыми ближайшими соседями ( $J_2 > 0$ ), например,  $\text{Pb}_2\text{VO}(\text{PO}_4)_2$  [14–17],  $(\text{CuCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$  [18],  $\text{SrZnVO}(\text{PO}_4)_2$  [17, 19, 20], и  $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$  [16, 19, 21]. Считается, что в этих материалах фрустрированный  $J_2$  достаточно велик чтобы выводить материалы из ферромагнитной фазы. Существуют также материалы, такие как  $\text{K}_2\text{CuF}_4$ ,  $\text{Cs}_2\text{CuF}_4$ ,  $\text{Cs}_2\text{AgF}_4$ ,  $\text{La}_2\text{BaCuO}_5$ , and  $\text{Rb}_2\text{CrCl}_4$  [22–25], в которых взаимодействие между вторыми ближайшими соседями оказывается недостаточным для изменения структуры спинового порядка.

Общая картина приведена на Рис. **3.1** в главе 3, где эта модель рассмотрена подробнее. Здесь на фазовой диаграмме двумерной  $J_1$ - $J_2$  модели в классическом пределе  $S \rightarrow \infty$  приведены положения некоторых экспериментальных систем.

Интенсивное теоретическое исследование модели в первом квадранте  $J_1 > 0$ ,  $J_2 > 0$  было вызвано прорывом в области высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и привело к большому количеству публикаций (см., например, [26, 27] и ссылки оттуда). Коротко основные результаты можно сформулировать следующим образом: при  $T = 0$  система испыты-

вает два последовательных фазовых перехода — от антиферромагнетика (АФМ) к неупорядоченной фазе и затем в страйп-фазу (см., например, работу [28] и ссылки оттуда). При этом природа квантового фазового перехода и детальная структура упорядоченных состояний остаётся предметом дискуссии.

Также широко исследован случай нефрустрированного ферромагнетика ( $J_1 > 0, J_2 = 0$ ), например, в рамках модифицированной спин-волновой теории [29, 30], ренормгрупповых подходов [31, 32], квантового метода Монте-Карло [33–35], а также в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода (СССП), [36–40].

Недавние эксперименты с ванадатами и подобными им соединениями побудили теоретическое исследование  $J_1$ - $J_2$  модели с  $J_1 < 0$  и фрустрирующим  $J_2 > 0$  [41–52]. Было обнаружено, что во втором квадранте также существует неупорядоченная фаза между ферромагнитной и страйп-фазами. Приблизительное положение точки перехода в обоих квадрантах соответствует  $J_2 \approx \pm 0.4J_1$  (АФМ  $\rightarrow$  неупорядоченная фаза, ФМ  $\rightarrow$  неупорядоченная фаза) и  $J_2 \approx \pm 0.7J_1$  (неупорядоченные фазы  $\rightarrow$  страйп).

Таким образом имеется несколько экспериментальных точек, расположенных в верхней половине  $J_1$ - $J_2$ -круга 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 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  $G(\mathbf{q}, \omega)$  [9].

Несомненный теоретический интерес также представляет расшире-

ние 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 [53]. Кроме того, расчёты электронной структуры некоторых соединений на основе железа показывают, что в них обмен  $J_3$  может быть значительным [54, 55].

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 рассматриваются следующие локальные задачи:

1. Для 2D фрустрированных магнетиков с первым  $J_1$  и вторым  $J_2$  обменными взаимодействиями строится при  $T = 0$  фазовая диаграмма по параметрам  $J_1$  и  $J_2$  и выясняются возможные фазовые переходы.
2. Для упомянутых выше магнетиков при отличных от нуля температурах исследуются 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  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$  изучаются особенности возможных фазовых переходов системы.
4. Для упомянутых выше магнетиков исследуется влияние затухания спиновых возбуждений на их спектр и на спин-спиновые корреляционные функции.

## 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 спин-жидкостных 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.

## 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 и практическая ценность** Результаты, представленные в диссертации, имеют высокую ценность 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. Ряд результатов получено впервые.

### **Личный вклад автора**

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

### **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.

**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.

**Глава 2** посвящена описанию сферически симметричного самосогласованного подхода. Выведена система самосогласованных уравнений для вычисления спин-спиновой функции Грина. Описано поведение спектра спиновых возбуждений при наличии и отсутствии спинового дальнего порядка.

В **Главе 3** исследуется основное состояние и термодинамические свойства фрустрированной  $J_1$ - $J_2$  модели Гейзенберга на квадратное решётке при произвольных знаках обменных констант.

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

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

В **заключении** сформулированы основные выводы и приведен **список литературы**.

### Апробация работы.

По результатам работы над диссертацией опубликованы следующие статьи:

1. 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

2. 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
3. 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
4. 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

Также результаты работы представлялись на конференциях:

1. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, Н.А. Козлов, А.В. Шварцберг «Основное состояние антиферромагнетика – роль размерности и фрустрации» // Первая международная научная школа «Прикладные математика и физика: от фундаментальных исследований к инновациям (Июль, 2010г, МФТИ, Долгопрудный)
2. А.Ф.Барабанов, А.В. Михеенков, Н.А.Козлов, А.В.Шварцберг «Разрушение дальнего порядка во фрустрированном низкоразмерном гейзенберговском антиферромагнетике» // Первая международная научная школа «Прикладные математика и физика: от фундаментальных исследований к инновациям (Июль, 2010г, МФТИ, Долгопрудный)
3. А.В. Михеенков, А.В.Шварцберг «Фазовая диаграмма фрустрированного двумерного гейзенберговского антиферромагнетика» // 53 научная конференция МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (Ноябрь, 2010г, МФТИ, Долгопрудный)
4. А.Ф.Барабанов, А.В.Михеенков, Н.А.Козлов, А.В.Шварцберг «Основное состояние антиферромагнетика – роль размерности и фрустрации» // Конференция «Перспективы развития фундаментальных наук», (МФТИ, 1-11 июля 2011 года)

5. А.Ф.Барабанов, А.В.Михеенков, Н.А.Козлов, А.В.Шварцберг «Разрушение дальнего порядка во фрустрированном низкоразмерном гейзенберговском антиферромагнетике» // Конференция «Перспективы развития фундаментальных наук», (МФТИ, 1-11 июля 2011 года)
6. А.Ф.Барабанов, А.В.Михеенков, А.В.Шварцберг «Спиновый дальний порядок в квантовом двумерном J1-J2-J3 антиферромагнетике» // 54 научная конференция МФТИ (МФТИ, 10-30 ноября 2011 года)
7. А.В.Михеенков, А.Ф.Барабанов, Н.А.Козлов, А.В.Шварцберг «Спиновое упорядочение в 2D фрустрированном антиферромагнетике вблизи точки квантового фазового перехода» // 4-я Международная конференция «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» (ФПС'11) (Звенигород, 3-7 октября 2011 года)
8. А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов, А.В. Шварцберг «Спиновая жидкость и состояние с двумя дальними порядками в J1-J2-J3 модели Гейзенберга» // конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (Троицк, 9 июня 2011 года)
9. А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов, Н.А. Козлов, А.В. Шварцберг, «Спиновое упорядочение в двумерном фрустрированном антиферромагнетике вблизи точки квантового фазового перехода» // XXXIV международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-2012» (Новоуральск, 26 февраля – 3 марта 2012 года)
10. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг «Синглетное описание 2D гейзенберговского магнетика в случаях сильной фрустрации и большого спина» // X Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (ИФВД, Троицк, Моск. обл., 15 июня 2012 года)
11. А.В. Шварцберг, А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов «Фрустрированная двумерная модель Гейзенберга с произвольными знаками обменных констант» // 55-я Научная конференция МФТИ (19-25 ноября 2012 года, Долгопрудный)

12. Шварцберг А.В., Михеенков А.В., Барабанов А.Ф. «О фазовой диаграмме J1-J2-J3 модели Гейзенберга» // XIV Школа молодых учёных «Актуальные проблемы физики» (Звенигород, 11-15 ноября 2012 г.)
13. A.V.Mikheyenkov, A.F.Varabanov, A.V.Shvartsberg «Singlet description of the 2D frustrates Heisenberg model with arbitrary signs of nearest and next-nearest exchanges» // Международная конференция «Strong nonlinear vibronic and electronic interaction in solids» (Тарту, 1-3 мая 2013 года).
14. А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг «Фазовые переходы в двумерной J1-J2 модели Гейзенберга и двумерной модели Кугеля-Хомского», // XI Конференция "Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления (Троицк(Москва), 6 июня 2013 года).
15. А.В. Шварцберг, А.В. Михеенков, А.Ф. Барабанов «Фрустрированная J1-J2-J3 модель Гейзенберга с ферромагнитным первым обменом» // XII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» (ИФВД, Троицк, Моск. обл., 19 июня 2014 года)

---

# ГЛАВА 1

## Фрустрированные спиновые системы

---

Фрустрированными магнетиками называются материалы, в которых парные взаимодействия между локализованными магнитными моментами, или спинами, имеют такую конфигурацию, при которой невозможна одновременная минимизация энергии каждой связи. Это обстоятельство приводит к высокой степени вырождения основного состояния магнитной системы, благодаря чему, в свою очередь, может возникнуть так называемое состояние спиновой жидкости, когда локализованные спины сильно коррелируют между собой, но из-за классических или квантовых флуктуаций не образуют упорядоченной спиновой структуры даже при абсолютном нуле температур. [1, 2]

Простейшей фрустрированной системой является треугольник с антиферромагнитным попарным взаимодействием. При антиферромагнитном взаимодействии минимальной энергии соответствует антипараллельное упорядочивание соседних спинов. В треугольнике этому условию может удовлетворять не более двух связей из трёх. В случае изинговских спинов основное состояние такой системы будет шестикратно вырождено.

Если мы имеем дело с бесконечной решёткой, в которой ближайшие соседи взаимодействуют антиферромагнитно, а элементарная ячейка содержит треугольники из спинов или иные элементы, вызывающие фрустрацию, то многократное вырождение основного состояния такой системы может привести к тому, что при нулевой температуре система будет либо неупорядочена, либо спиновый дальний порядок будет присутствовать, но отличаться от классического антиферромагнитного.

Треугольная решётка с антиферромагнитным взаимодействием ближайших соседей — это пример так называемой геометрической фрустрации. В этом случае фрустрация вызвана специфической геометрией, из-за которой система не может быть описана двудольным графом (то есть не может быть разбита на две подрешетки так, чтобы каждый узел одной из подрешеток взаимодействовал только узлами другой подрешетки).

К другому типу фрустрированных систем можно отнести, например,

квадратную решётку классических спинов с антиферромагнитным взаимодействием как по рёбрам решётки, так и по диагоналям (между первыми и вторыми ближайшими соседями). Такая система также не может быть описана двудольным графом, однако в случае нулевого диагонального обмена основное состояние решётки описывается шахматным спиновым упорядочением, при этом минимизируется энергия каждой связи в системе. При увеличении второго обмена в некоторый момент он начинает превалировать над первым, так что система переходит в состояние, при котором шахматный порядок реализуется для двух подрешёток, ребра которых совпадают с диагоналями исходной решётки. Образуется так называемое страйп-состояние — чередующиеся полосы положительных и отрицательных спинов, направленные вдоль одной из осей координат. При некотором значении второго обмена оба состояния имеют одинаковую энергию. При меньшем значении второго обмена реализуется шахматный дальний порядок, при большем — страйп. Эта точка на фазовой диаграмме называется точкой наибольшей фрустрации.

Спиновые флуктуации могут быть как классическими, так и квантовыми. Классические флуктуации, в отличие от квантовых, вызваны температурными эффектами и не имеют места в основном состоянии. Классические флуктуации преобладают в системах с большим спином и при высоких температурах. При этом по мере уменьшения температуры до абсолютного нуля классические флуктуации исчезают, а система переходит в либо упорядоченное состояние, либо в неупорядоченное состояние с “замороженными” спинами.

При малых величинах спинов (а тем более в ультраквантовом пределе  $S = 1/2$ ) становятся значительными квантовые эффекты, так что флуктуации существенны даже при  $T = 0$ . Если они достаточно сильны, то может реализоваться состояние квантовой спиновой жидкости, являющееся суперпозицией различных состояний с разнонаправленными спинами, не нарушающей симметрии решётки. В квантовой спиновой жидкости отсутствует спиновый дальний порядок, то есть спин-спиновая корреляционная функция на бесконечности равна нулю, однако корреляционная длина может существенно превышать постоянную решетки.

### § 1.1. Квантовая спиновая жидкость

Возможность перехода спиновых систем в состояние квантовой спиновой жидкости было теоретически предсказано Андерсоном в 1973 году [56]. Структурным элементом такого состояния является валентная связь — два спина в связанном синглетном состоянии с нулевым общим спином. Для случая  $S = 1/2$  валентная связь, образованная из двух спинов  $i$  и  $j$ , имеет вид

$$\frac{\sqrt{2}}{2} (|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle)$$

Такое состояние отвечает минимальной энергии при антиферромагнитном взаимодействии между образующими валентную связь спинами. Если все спины в системе являются частью одной из валентных связей, то система имеет нулевой спин. Такую структуру в англоязычной литературе называют “Valence Bond Solid” (VBS, см., например [57, 58]). Сами валентные связи при этом могут располагаться хаотически или организовывать некоторую упорядоченную структуру. Однако такие состояния нарушают симметрию решётки и, следовательно, не могут являться истинным спинжидкостным состоянием. В то же время суперпозиция большого числа VBS-состояний с различными разбиениями системы на пары валентных связей может быть построена таким образом, чтобы не нарушать симметрию решётки. Валентные связи совсем не обязательно должны быть ограничены только соседними спинами, при этом дальность спин-спиновых корреляций ограничена расстоянием между узлами, включёнными в одну такую связь. Состояния, построенные как суперпозиция VBS-состояний, и не нарушающие симметрию решётки, называются состояниями резонансных валентных связей (RVB, от английского Resonating Valence Bond). RVB-состояния представляют большой теоретический интерес с тех пор, как в 1987 году Андерсон предположил, что они могут лежать в основе физики купратных высокотемпературных сверхпроводников [59, 60].

### § 1.2. Фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решётке

Система локализованных спинов с обменным взаимодействием между ними описывается моделью Гейзенберга:

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j$$

Суммирование ведётся по парам узлов  $i, j$ ;  $J_{ij}$  — обменное взаимодействие между узлами, которое, вообще говоря, может быть различным для различных пар  $\langle i, j \rangle$ . В кристаллических решётках функция  $J_{ij}$  обладает трансляционной симметрией и зависит только от взаимного расположения узлов. В случае учёта взаимодействия только между ближайшими соседями на двудольной решётке мы получаем гамильтониан нефрустрированной модели Гейзенберга:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}$$

где суммирование ведётся по радиус-вектору  $\mathbf{i}$  узлов решётки и по векторам ближайших соседей  $\mathbf{g}$ .

### 1.2.1. Спиновый дальний порядок в модели Гейзенберга

Отрицательное значение обменного взаимодействия  $J_{ij}$  ведёт к тому, что энергетически выгодным становится параллельное (ферромагнитное) упорядочивание спинов, положительное значение  $J_{ij}$  ведёт к антипараллельному (антиферромагнитному) упорядочиванию. Хорошо известно среднеполевое решение этой модели, согласно которому при  $T > T_c$  (точки Кюри для ферромагнетика и точки Нееля для антиферромагнетика) система является парамагнетиком, а при  $T < T_c$  наблюдается, соответственно, ферромагнитное или антиферромагнитное упорядочивание. При этом в случае антиферромагнетика решётка должна быть двудольной, то есть не должно наблюдаться геометрической фрустрации, как нет ее в случае квадратной или кубической решёток. Среднеполевое решение тем точнее, чем больше координационное число  $z$  и точнее описывает системы большой размерности.

Кроме среднеполевого решения, для модели Гейзенберга известно несколько точных результатов, в том числе:

Для одномерной модели Гейзенберга со спином  $S = 1/2$  и антиферромагнитным взаимодействием точное решение было получено Бете в 1931 году [61]. Основное состояние в этом случае является синглетным.



Согласно теореме Мермина-Вагнера [62] в системах с размерностью  $D = 1, 2$  невозможно спонтанное нарушение симметрии при  $T > 0$ .

Теорема Маршалла [63] гласит, что для нефрустрированных систем любой размерности в случае антиферромагнитного взаимодействия основное состояние является синглетным.

Детальное описание двумерной антиферромагнитной нефрустрированной модели Гейзенберга со спином  $S = 1/2$  может быть найдено в обзоре [64]. В этом обзоре приведены также некоторые другие точные утверждения, касающиеся, однако, частных случаев, которые в данной работе не рассматриваются.

### 1.2.2. Фрустрированная модель Гейзенберга

Простейшая фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решётке задаётся гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}$$

где, помимо векторов ближайших соседей  $\mathbf{g}$ , введены диагональные вектора  $\mathbf{d}$ . С теоретической точки зрения эта модель интересна тем, что в ней наблюдается квантовый фазовый переход с «настроечным» параметром  $J_2/J_1$ .

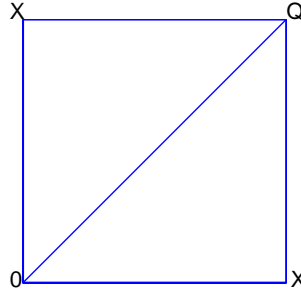
В классическом варианте этой модели, когда локализованные спины представляют собой произвольно направленные вектора постоянной длины (это соответствует пределу  $S \rightarrow \infty$ ), основное состояние системы может быть представлено в виде плоской спирали [65]:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_x \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}) + \mathbf{e}_y \sin(\mathbf{q}\mathbf{r})$$

где  $\mathbf{q}$  — некоторая точка в зоне Бриллюэна, минимизирующая фурье-образ энергии связи  $E(\mathbf{q})$ :

$$E(\mathbf{q}) = J_1 (\cos q_x + \cos q_y) + J_2 (\cos(q_x + q_y) + \sin(q_x - q_y))$$

В зависимости от того, в какой точке  $\mathbf{q}_0$  наблюдается минимум функции  $E(\mathbf{q})$ , система будет иметь различный спиновый дальний порядок. Точка  $\mathbf{q}_0$  называется управляющей точкой, её положение определяется отношением обменных констант. См. Рис. 1.1 для иллюстрации возможных положений точки  $\mathbf{q}_0$ .

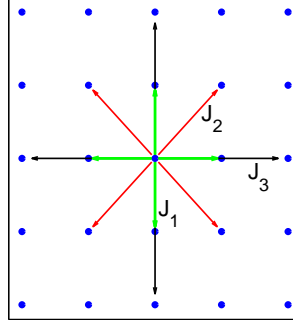


*Рис. 1.1.* Первая четверть зоны Бриллюэна с отмеченными симметричными точками  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Q}$ . Возможные положения управляющей точки  $\mathbf{q}_0$  соответствуют сплошной линии.

При ферромагнитном первом обмене,  $J_1 < 0$ , дальний порядок в системе, в зависимости от величины  $J_2$ , имеет следующий вид: при  $J_2 < 0.5|J_1|$  функция  $E(\mathbf{q})$  имеет один минимум в точке  $\mathbf{O} = (0, 0)$ , что соответствует параллельному упорядочиванию спинов. При  $J_2 > 0.5|J_1|$  функция  $E(\mathbf{q})$  имеет минимумы в точках  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$ , при этом спины в основном состоянии образуют чередующиеся полосы, направленные горизонтально или вертикально, так что внутри полос спины параллельны, в то время как в соседних полосах спины антипараллельны, это соответствует спиновому упорядочиванию страйп-типа.

Аналогичная картина наблюдается при антиферромагнитном первом обмене,  $J_1 > 0$ , однако при  $J_2 < 0.5J_1$  система минимизируется в антиферромагнитной точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , что приводит к шахматному дальнему порядку. В случае  $J_2 > 0.5J_1$  наблюдается страйп-упорядочивание, так же как и в случае ферромагнитного  $J_1$ .

Точки  $J_2 = 0.5|J_1|$  являются точками наибольшей фрустрации. В них функция  $E(\mathbf{q})$  имеет минимальное значение на линиях  $\mathbf{O}-\mathbf{X}$  в случае  $J_1 < 0$  и  $\mathbf{Q}-\mathbf{X}$  в случае  $J_1 > 0$ , при этом основное состояние является сильно вырожденным. Логично предположить, что при включении квантовых флуктуаций (уменьшении спина  $S$ ) спиновое упорядочивание вблизи этих точек разрушается, и система переходит в спин-жидкостное состояние.



*Рис. 1.2.* Иллюстрация к обменным взаимодействиям

### 1.2.3. J1-J2-J3 модель Гейзенберга

Расширением фрустрированной модели на квадратной решётке является  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модель Гейзенберга:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}J_1 \sum_{\mathbf{i},\mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{1}{2}J_2 \sum_{\mathbf{i},\mathbf{d}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}} + \frac{1}{2}J_3 \sum_{\mathbf{i},\mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+2\mathbf{g}}$$

В этой модели обменный параметр  $J_3$  отвечает за взаимодействие спинов на расстоянии двух постоянных решётки друг от друга (см. Рис. 1.2).

С теоретической точки зрения введение дополнительного обмена позволяет исследовать точку наибольшей фрустрации, добавив в модель новый настроечный параметр  $J_3/J_1$ .

Классические фазы, соответствующие основному состоянию  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели, могут быть получены так же, как и в случае учёта только двух первых обменов. Границы классических фаз этой модели отмечены на Рис. 5.7 и Рис. 5.12 пунктирными линиями.

По сравнению с  $J_1$ - $J_2$  моделью здесь впервые появляются несоизмеримые фазы, в которых управляющая точка  $\mathbf{q}_0$  расположена не в одной из симметричных точек зоны Бриллюэна (то есть не в точках  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{Q}$  или  $\mathbf{X}$ ). В такой фазе период спиновой решетки несоизмерим с периодом исходной узельной решетки. Возможным геликоидальным фазам соответствуют управляющие точки на одной из симметричных линий зоны Бриллюэна:

$$\mathbf{q}_{h1} = (q, q); \quad \mathbf{q}_{h2} = (q, 0), (0, q); \quad \mathbf{q}_{h3} = (q, \pi), (\pi, q)$$

С экспериментальной точки зрения эта модель описывает магнитные подсистемы некоторых недавно исследованных материалов.

### § 1.3. Теоретические методы исследования

После того, как в 1987 году Андерсоном было высказано предположение о решающей роли RVB-состояний в физике высокотемпературных сверхпроводников, интерес к фрустрированной  $J_1$ - $J_2$  модели Гейзенберга резко возрос, появилось множество теоретических и экспериментальных работ с исследованиями фрустрированных магнетиков.

Среди теоретических методов изучения модели можно выделить два основных класса — вычислительные методы и полуаналитические методы.

Подробное изложение вычислительных методов изучения квантовых спиновых систем, включая фрустрированные спиновые системы, может быть найдено в лекциях Сандвика [58]. Среди них наибольшее распространение имеет метод точной диагонализации, в котором исследуется некоторая конечная, не очень большая, система спинов, для которой строится матричная форма уравнения Шрёдингера

$$\sum_m H_{nm} c_m = E c_n$$

где  $H_{nm} = \langle \varphi_n | \hat{H} | \varphi_m \rangle$ ,  $|\varphi_n\rangle$  — базисные функции,  $c_n$  — коэффициенты в разложении собственных функций гамильтониана по базисным функциям  $|\varphi_n\rangle$ .

Точная диагонализация гамильтониана позволяет получить полную информацию об исследуемой спиновой системе. Может быть вычислена любая термодинамическая величина, а также может быть извлечена информация об основном состоянии системы и низколежащих возбуждениях.

Основная проблема при применении методов точной диагонализации связана с экспоненциальным ростом размера базиса. Так, для системы из  $N$  спинов  $S = 1/2$  размер базиса равен  $2^N$ . Фактически это ограничивает применение метода системами из 10—15 спинов.

Одним из способов увеличения верхнего предела размера системы является уменьшение рассматриваемого базиса. Во-первых, можно рассмотреть операторы, коммутирующие с гамильтонианом, такие как полная проекция спина системы  $S_{tot}^z$ . Матрицу гамильтониана можно представить в блочно-диагональном виде, так что каждому блоку будет соответствовать своё значение  $S_{tot}^z$ . Каждый такой блок может рассматриваться отдельно, что даёт значительное уменьшение размера базиса. Во-вторых, базис может быть уменьшен искусственно, с учётом того, какие именно состояния

представляют интерес. Например, если интерес представляет только основное состояние системы, то можно ограничиться синглетным базисом, который состоит из различных RVB-состояний. Сами RVB-состояния могут быть выбраны таким образом, что валентные связи берутся только по ближайшим соседям.

Для изучения основного состояния спиновой системы и низколежащих возбуждений часто применяют алгоритм Ланцоша [7, 66–70], в котором используются базисные вектора пространства Крылова. Они могут быть сконструированы на ходу, поэтому нет необходимости держать в памяти всю матрицу гамильтониана  $2^N \times 2^N$ . Такой подход позволяет вдвое увеличить размер рассматриваемой системы.

В настоящий момент работы по исследованию фрустрированных систем со спином  $S = 1/2$  методом точной диагонализации ограничены системами размером  $N = 40$  узлов.

Для модели  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  точная диагонализация проводилась в работах [47, 71, 72]. В работе [71] исследовалось основное состояние системы из 32 узлов при антиферромагнитных обменных константах. Также проведено сравнение результатов точной диагонализации в полном изинговском базисе и в базисе из RVB-состояний, в которых валентные связи ограничены соседними узлами. Вычисленные значения энергии для различных значений  $J_2/J_1$  и  $J_3/J_1$  позволяет верифицировать результаты, полученные другими методами. Здесь же изучены возможные корреляции между валентными связями в системе из 40 узлов. В работах [47, 72] исследовались фазовые диаграммы системы из 32 узлов при ферромагнитном и антиферромагнитном первых обменах. Стоит заметить, что идентификация спинового упорядочивания по результатам вычислений для конечных систем может быть неточной из-за эффектов малого размера. Особенно это касается неупорядоченных фаз и фаз с несоизмеримым дальним порядком.

Различные реализации квантового алгоритма Монте-Карло широко применялись для изучения антиферромагнитной  $J_1$ - $J_2$  модели в области низких фрустраций (малые значения  $J_2/J_1$ ), что дало достаточно точное описание шахматной фазы [73]. Однако при большой фрустрации использование метода ограничено из-за так называемой проблемы знака. Насколько известно автору этой работы, на данный момент не было успешных применений метода квантового Монте-Карло к  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели на квадратной решётке.

Другим представителем группы вычислительных подходов является разложение в ряд по некоторому параметру  $\lambda$ . К примеру, можно представить гамильтониан фрустрированной модели в следующем виде:

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left( \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + \lambda \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) \right)$$

При  $\lambda = 0$  гамильтониан соответствует модели Изинга. Основное состояние модели Изинга может быть получено без трудоёмких вычислений. Среднее значение произвольного оператора  $\hat{A}$  в основном состоянии  $|\lambda\rangle$  может быть разложено в ряд по степеням  $\lambda$  согласно теории возмущений:

$$\frac{\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle}{\langle \lambda | \lambda \rangle} = \sum_n a_n \lambda^n$$

После вычисления коэффициентов  $a_n$  вычисляется среднее значение оператора при  $\lambda = 1$ .

Метод был применён для антиферромагнитной  $J_1$ - $J_2$  модели в работе [74]. Было получено отсутствие шахматного дальнего порядка в области высокой фрустрации  $0.4 \leq J_2/J_1 \leq 0.6$ . Исчезновение дальнего порядка определяется занулением подрешёточной “шахматной” намагниченности. Такой метод позволяет определить границы неупорядоченной фазы, но не дает информации о её структуре.

Для того, чтобы исследовать систему вблизи точки наибольшей фрустрации  $J_2 \approx 0.5J_1$ , применяют разложение в ряд около точно димеризуемых моделей (исходный гамильтониан  $\hat{H}(\lambda = 0)$  имеет основное состояние, являющееся произведением валентных связей) [75, 76]. К  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели метод применялся в [77]. Вблизи области максимальной фрустрации были получены различные виды дальнего и ближнего порядка, нарушающие трансляционную симметрию решётки. Однако для более точного определения характера фаз в этой области необходимо разложение в ряд до следующих порядков малости.

Для исследования фазовой диаграммы фрустрированной модели могут быть использованы методы спиновых волн и бозонов Швингера.

Хорошо известно спин-волновое решение нефрустрированной модели Гейзенберга. В зависимости от того, рассматривается ферромагнитное или антиферромагнитное взаимодействие, магنونный спектр имеет вид

$$\omega^{FM}(\mathbf{q}) \sim 1 - \gamma(\mathbf{q}), \quad \omega^{AFM}(\mathbf{q}) \sim \sqrt{1 - \gamma^2(\mathbf{q})}$$

Решёточная функция  $\gamma(\mathbf{q})$  имеет вид

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{g}}$$

где  $z$  — число ближайших соседей для произвольного узла.

Спин-волновое рассмотрение модели  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  проводилось в работах [78, 79]. Метод основан на выражении спиновых операторов через операторы рождения и уничтожения магнонов, при этом переход к новым операторам будет отличаться для разных видов спинового упорядочивания. Стартуя от конкретного вида дальнего порядка, продиктованного минимизацией энергии системы в классической модели, можно определить приблизительные границы фаз с дальним порядком в случае  $S = 1/2$ , а также характер спектра спиновых возбуждений в зависимости от обменных параметров. Однако из-за того, что по умолчанию предполагается, что в системе присутствует спиновый дальний порядок, метод неприменим для исследования неупорядоченных фаз и области наибольшей фрустрации.

В работе [80] проведено среднеполевое рассмотрение для бозонов Швингера в  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели с ферромагнитным первым обменом. Такое рассмотрение не позволяет идентифицировать спин-жидкостную фазу, однако может быть использовано для изучения системы в областях фазовой диаграммы, где заведомо присутствует упорядочивание.

Широкий обзор методов изучения фрустрированной модели Гейзенберга приведён в книге [1].

Особняком стоят «синглетные» подходы, включая использованный и развитый в данной работе сферически симметричный самосогласованный подход (СССП) [9, 36, 37, 81, 82]. Он основан на решении системы самосогласованных уравнений для двухвременной температурной функции Грина  $\langle S_{-\mathbf{q}}^z | S_{\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$ . В отличие от спин-волновых методов, в СССП рассматриваются только синглетные основные состояния, для них сохраняются спиновая  $SU(2)$  и трансляционная симметрии решётки. Используя такой подход, можно определить спектр спиновых возбуждений, явный вид спиновой восприимчивости, ширину щели в спектре и другие величины. Подробнее об СССП рассказано в соответствующей главе.

## § 1.4. Материалы

Изучение двумерного фрустрированного  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  квантового  $S = 1/2$  антиферромагнетика (АФМ) является актуальным как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения. С экспериментальной точки зрения модель описывает слоистые квазидвумерные соединения — купраты (см., например, [27]) и ванадаты [10, 11, 19, 21], при этом могут реализовываться как чисто АФМ случаи ( $J_1, J_2, J_3 > 0$ ), так и случаи, когда одна из констант связи является ферромагнитной (ФМ).

Эксперименты в ВТСП купратах, в первую очередь ARPES и нейтронные измерения, демонстрируют множество аномальных свойств двумерного допированного антиферромагнетика (2D АФМ), как электронных (арочная поверхность Ферми с "горячими" и "холодными" точками, возникновение и исчезновение псевдощели с изменением величины допирования  $x$ , и другие), так и спиновых (скейлинг спиновой восприимчивости  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  по  $\omega/T$ , сильная зависимость спиновой щели от степени допирования  $x$ , резонансный пик при  $\omega \sim 30 \div 40 \text{ meV}$ , возникновение несоизмеримых пиков при изменении  $x$  и  $T$ ). Хорошо известно [13, 83], что поведение  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  является одним из ключевых вопросов для выяснения этих аномалий.

В связи с тем, что для купратных сверхпроводников обменные константы  $J_1$  и  $J_2$  являются положительными, причём второй обмен, как правило, значительно меньше первого, исследование фрустрированной модели Гейзенберга было в основном сосредоточено именно на области  $J_1 > 0, J_2 > 0$ . Однако ситуация изменилась после того, как были открыты слоистые соединения на основе ванадия, для которых обмен  $J_1$  может быть как положительным, так и отрицательным. Приведём здесь величины обменных констант лишь для некоторых соединений: для соединения  $BaCdVO(PO_4)_2$  обменные взаимодействия имеют величины  $J_1 \approx -3.6 \text{ K}$ ,  $J_2 \approx 3.2 \text{ K}$  [21];  $Li_2VOSiO_4$ :  $J_1 = 0.75 \text{ K}$ ,  $J_2 = 8.8$  [12, 84];  $Li_2VOGeO_4$ :  $J_1 = 1.7 \text{ K}$ ,  $J_2 = 8.1$  [12];  $VOMoO_4$ :  $J_2/J_1 \approx 0.2$  [85]. Открытие этих соединений делает актуальным также изучение области параметров  $J_1 < 0$ .

Кроме того, расчёты электронной структуры некоторых соединений на основе железа показывают, что в них может присутствовать значительный обмен  $J_3$  между третьими ближайшими соседями [54, 55].



---

## ГЛАВА 2

### Сферически симметричный самосогласованный подход

---

Как уже говорилось в Главе 1, ВТСП купраты демонстрируют множество аномальных свойств спиновой подсистемы. При их рассмотрении в последнее время активно используются различные варианты сферически симметричной теории Кондо-Ямадзи-Шимахары-Такады [36, 37, 86], которая имеет ряд преимуществ относительно других подходов при описании  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  (в частности, с самого начала позволяет учесть отсутствие двух подрешеток, связанное с возникновением спиновой щели  $\Delta$  при любой малой  $T$ ). Известно, что с увеличением допирования в 2D АФМ спиновая корреляционная длина падает. К аналогичному поведению приводит введение фрустрации в сферически симметричной теории в рамках модели Гейзенберга. Очевидно, что прямое соответствие между допированием и фрустрацией отсутствует. Тем не менее, качественно, увеличение фрустрации можно трактовать как рост  $x$ . Более того, считается, что характерные для купратов плоскости  $CuO_2$  отвечают ненулевой фрустрации даже и при нулевом допировании [87].

#### § 2.1. Приближение среднего поля

Гамильтониан фрустрированной  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$   $S = 1/2$  модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в стандартных обозначениях имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+2\mathbf{g}}$$

здесь  $\mathbf{g}$ ,  $\mathbf{d}$  и  $2\mathbf{g}$  – вектора, соответственно, первых, вторых и третьих ближайших соседей, обменные константы могут быть как антиферромагнитными, так и ферромагнитными, однако в этой главе примеры использования подхода приведены для случая, когда все обменные константы антиферромагнитные.

Ниже при рассмотрении случая  $J_3 = 0$  при антиферромагнитных

первых двух обменах ( $J_1 > 0$ ,  $J_2 > 0$ ) используется общепринятая переменная  $p$  ("параметр фрустрации")  $p = J_2/J$ ,  $J_1 = (1-p)J$ ,  $J_2 = pJ$ ,  $J = J_1 + J_2$ , и в этом случае все энергетические величины измеряются в единицах  $J$ ,  $J$  положено равным 1.

Вычисления проводятся в рамках сферически-симметричного самоогласованного метода [9, 37, 81, 82]. Записываем уравнение движения для функции Грина  $G_{\mathbf{nm}} = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [S_{\mathbf{n}}^z(t), S_{\mathbf{m}}^z] \rangle$ . Из-за сферической симметрии не равны нулю только диагональные по индексу  $\alpha = x, y, z$  функции Грина и имеются три вырожденные по  $\alpha$  ветви спиновых возбуждений.

$$\omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [S_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle \quad (2.1)$$

Учитывая  $\langle [S_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle = 0$  и  $[S_{\mathbf{n}}^\alpha; S_{\mathbf{m}}^\beta] = i\delta_{\mathbf{nm}}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{\mathbf{n}}^\gamma$ , приходим к

$$\begin{aligned} \omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle &= \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = i \sum_{\mathbf{b}=\mathbf{g},\mathbf{d},2\mathbf{g}} J_{\mathbf{b}} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^\alpha S_{\mathbf{n}}^\beta | S_{\mathbf{m}}^z \rangle \\ &= i \sum_{\mathbf{b}=\mathbf{g},\mathbf{d},2\mathbf{g}} J_{\mathbf{b}} \langle (S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^x S_{\mathbf{n}}^y - S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^y S_{\mathbf{n}}^x) | S_{\mathbf{m}}^z \rangle, \end{aligned}$$

Второй шаг дифференцирования:

$$\omega \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega} = \langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega} \quad (2.2)$$

Легко видеть, что коммутаторный член преобразуется как

$$\langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], S_{\mathbf{m}}^z] \rangle = 2 \sum_{\mathbf{b}=\mathbf{g},\mathbf{d},2\mathbf{g}} J_{\mathbf{b}} C_{\mathbf{b}} (\delta_{\mathbf{n}+\mathbf{b},\mathbf{m}} - \delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}) \quad (2.3)$$

здесь и ниже  $C_{\mathbf{b}} = \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^z S_{\mathbf{n}}^z \rangle$  — спин-спиновый коррелятор;  $J_{\mathbf{g}} = J_1$ ,  $J_{\mathbf{d}} = J_2$ ,  $J_{2\mathbf{g}} = J_3$ . Второе слагаемое в (2.2) имеет вид

$$\begin{aligned} &\langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega} = \\ &= - \sum_{\substack{\mathbf{b},\mathbf{b}'=\mathbf{g},\mathbf{d},2\mathbf{g} \\ \alpha \neq z; \mathbf{b}+\mathbf{b}' \neq 0}} J_{\mathbf{b}} J_{\mathbf{b}'} [S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^\alpha S_{\mathbf{n}-\mathbf{b}'}^\alpha S_{\mathbf{n}}^\alpha - S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^\alpha S_{\mathbf{n}-\mathbf{b}'}^\alpha S_{\mathbf{n}}^z + \\ &\quad + S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}'}^\alpha S_{\mathbf{n}}^\alpha - S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^\alpha S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}'}^z S_{\mathbf{n}}^\alpha] - \\ &\quad - 2 \sum_{\mathbf{b}=\mathbf{g},\mathbf{d},2\mathbf{g}} J_{\mathbf{b}}^2 C_0 (S_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^z - S_{\mathbf{n}}^z) \end{aligned}$$

В среднеполевом подходе процедура сводится к замыканию цепочки уравнений движения на втором шаге с помощью расщепления трехузельных членов, которое имеет следующий характерный вид:

$$\begin{aligned}
S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l S_{\mathbf{n}}^\gamma &\approx \alpha_{\mathbf{g}} (\delta_{jl} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l \rangle S_{\mathbf{n}}^\gamma + \\
&+ \delta_{l\gamma} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l S_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j) + \\
&+ \alpha_{\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2} \delta_{j\gamma} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l
\end{aligned} \tag{2.4}$$

где  $\alpha_{\mathbf{g}}$ ,  $\alpha_{\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}$  — вершинные поправки. Подчеркнем, что в нашем  $S = 1/2$  случае процедура расщепления для каждого члена однозначна благодаря  $\alpha \neq z$ , то есть приводит к одному члену (в среднем выносятся два спина с  $\alpha \neq z$ ).

После перехода в Фурье  $S_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^z$  решение для двух уравнений приводит к ответу для среднеполевой функции Грина  $G_{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = -\chi_{mf}(\mathbf{q}, \omega)$

$$G_{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \tag{2.5}$$

Выпишем  $F_{\mathbf{q}}$  и  $\omega_{\mathbf{q}}^2$  для случая  $J_3 = 0$  (полные выражения при  $J_3 \neq 0$  приведены в Приложении)

$$F_{\mathbf{q}} = -2 [J_1 C_g z_g (1 - \beta_g) + J_2 C_d z_d (1 - \beta_d)] \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned}
\omega_{\mathbf{q}}^2 = 2 [(\beta_1 K_1 + \beta_2 K_2) - (\beta_3 K_3 + \beta_4 K_4) - \\
(\beta_5 K_5 + \beta_6 K_6)]
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Входящие в выражение для спектра величины  $K_1 \div K_6$  равны

$$\begin{aligned}
K_1 &= J_1 J_2 K_{gd} + J_1^2 \tilde{C}_g z_g (z_g - 1) + \frac{z_g}{4} + K_{gg} \\
K_2 &= J_1 J_2 K_{gd} + J_2^2 \tilde{C}_d z_d (z_d - 1) + \frac{z_d}{4} + K_{dd} \\
K_3 &= J_1^2 \tilde{C}_g z_g^2; \quad K_4 = J_2^2 \tilde{C}_d z_d^2; \\
K_5 &= J_1 J_2 \tilde{C}_g z_g z_d; \quad K_6 = J_1 J_2 \tilde{C}_d z_g z_d \\
K_{gg} &= \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2 \\ \mathbf{g}_1 \neq -\mathbf{g}_2}} \tilde{C}_r; \quad K_{dd} = \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{d}_1+\mathbf{d}_2 \\ \mathbf{d}_1 \neq -\mathbf{d}_2}} \tilde{C}_r; \quad K_{gd} = \sum_{\mathbf{r}=\mathbf{g}+\mathbf{d}} \tilde{C}_r
\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= 1 - \beta_g; \quad \beta_2 = 1 - \beta_d; \quad \beta_3 = 1 - \beta_g^2; \\
\beta_4 &= 1 - \beta_d^2; \quad \beta_5 = (1 - \beta_g) \beta_d; \quad \beta_6 = (1 - \beta_d) \beta_g;
\end{aligned}$$

$$\beta_g(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_g} \sum_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{g}}; \quad \beta_d(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_d} \sum_{\mathbf{d}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{d}};$$

здесь:  $\tilde{C}_r$  отвечают корреляторам  $C_r$ , которые перенормированы упомянутыми вершинными поправками  $\alpha_r$ ;  $z_g = z_d = 4$  для квадратной решетки.

В функцию Грина  $G(\mathbf{q}, \omega)$  входят корреляторы  $C_r$  для первых пяти координационных сфер, которые должны вычисляться самосогласованно через  $G(\mathbf{q}, \omega)$ . Кроме того, для  $G(\mathbf{q}, \omega)$  должно выполняться условие спинового констрейнта  $C_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} = \langle S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{i}}^z \rangle = 1/4$  (правило сумм). Эти условия имеют вид

$$C_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}; \quad (\mathbf{r} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, 2\mathbf{d}, \mathbf{g} + \mathbf{d}); \quad (2.9)$$

$$C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega (2m(\omega) + 1) G''(\mathbf{q}, \omega); \quad (2.10)$$

$$C_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} = 1/4 = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int_0^{\infty} d\omega (2m(\omega) + 1) G''(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.11)$$

где  $G'' = \text{Im}G$ . Система самосогласованных уравнений затем решается численно.

В частном среднеполевом случае мнимая часть спиновой динамической восприимчивости  $\chi(\mathbf{q}, \omega) = -G(\mathbf{q}, \omega)$  имеет вид

$$\chi''_{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} [\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}})] \quad (2.12)$$

В общем случае при  $T > 0$  в спектре спиновых возбуждений всегда есть щель. При малых  $T$  функция  $C_{\mathbf{q}}$  всегда имеет пик около точек  $\mathbf{q}_0$  (устоявшиеся обозначения для симметричных точек см. на Рис. 1.1), где минимальна спиновая щель (кроме тривиальной нулевой точки, для которой  $F_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} = 0$ ).

При  $T \rightarrow 0$  могут быть две ситуации. Одна ситуация — система остается в SRO состоянии спиновой жидкости (SRO — Short Range Order, ближний порядок), щель не зануляется, и вклад от бозевской функции  $m(\omega)$  в  $C_{\mathbf{q}}$  (2.10) становится равным нулю при  $T \rightarrow 0$  (случай фрустрации, близкой к  $p = 0.3$  для  $J_1 - J_2$  модели).

Другая ситуация — при понижении температуры система переходит в LRO состояние (Long Range Order, состояние со спиновым дальним порядком), и щель зануляется в точке  $\mathbf{q}_0$ , которая для  $J_1 - J_2$  модели может

соответствовать либо неелевской (NLRO) фазе  $\mathbf{q}_0^N = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  (малая фрустрация), либо страйп-фазе (StLRO) — в точках  $\mathbf{q}_0^S = \mathbf{X} = (\pi, 0); (0, \pi)$  (большая фрустрация). При этом при  $T \rightarrow 0$  часть интенсивности пика  $C_{\mathbf{q}}$  ( $T \neq 0$ ) переходит в  $\delta$ -образную интенсивность, которая определяет конденсат  $c_0$ . Вклада от члена без бозевской функции не хватает, чтобы обеспечить условие констрейнта. В этом случае спектральная плотность  $I_{\mathbf{q}}(\omega)$  имеет вид

$$I_{\mathbf{q}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\theta(\omega)G_{\mathbf{q}}''(\omega) + c_0\frac{1}{\nu} \sum_{i=1 \div \nu} \delta(\omega)\Delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}_i^{\nu}} \quad (2.13)$$

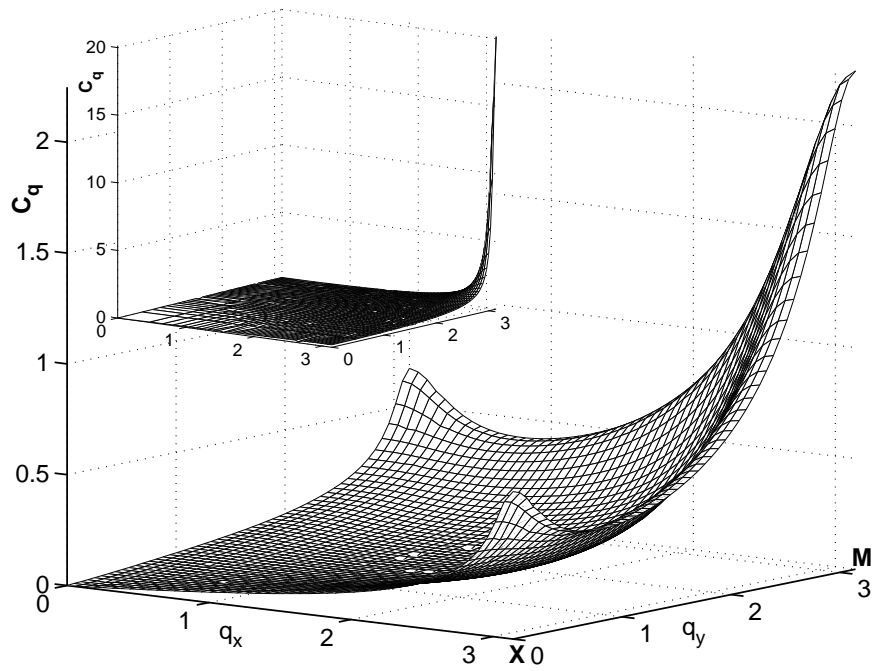
где  $c_0$  — величина конденсата, а  $\nu$  есть число неэквивалентных точек  $\mathbf{q}_0^{\nu}$  в которых зануляется спектр спиновых флуктуаций: при малых  $p$  это одна точка  $\mathbf{Q}$ , при  $p$  близком к 1, в страйпе фазе, это две точки  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$ . Причем в сферически-симметричном подходе страйп-фаза представляет собой не классическую структуру из чередующихся полос спинов вверх и спинов вниз, а когерентную квантовую суперпозицию горизонтальных и вертикальных полос [9, 81, 82]. В обоих пределах существует дальний порядок, и спиновые корреляторы на больших расстояниях имеют вид

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{0}}^{\alpha} \rangle_{r \rightarrow \infty}^N &= c_0^N (-1)^{n_x + n_y}; \\ \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{0}}^{\alpha} \rangle_{r \rightarrow \infty}^S &= \frac{c_0^S}{2} [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}]; \quad \mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y \end{aligned}$$

При конечной температуре щель открывается, дальний порядок исчезает,  $C_{\mathbf{r}}$  переходит в зануляющуюся на бесконечности убывающую функцию, структурный фактор размывается на величину порядка обратной корреляционной длины  $\xi^{-1}$ .

В области же промежуточных фрустраций, во-первых, при  $T = 0$  дальний порядок отсутствует, во-вторых, «мотивы» неелевской и страйп фаз присутствуют с сопоставимыми весами. Поэтому структурный фактор  $C_{\mathbf{q}}$  представляет собой суперпозицию размытых пиков вокруг  $\mathbf{Q}$  и  $\mathbf{X}$  с переходными участками между ними. Характерный вид такой ситуации для поведения  $C_{\mathbf{q}}(p)$  представлен на Рис.2.1 для  $p = 0.28, T = 0.025$  и  $p = 0.1, T = 0.1$  (низкие температуры).

Как отмечалось, в приведенных выше выражениях (2.7), (2.8)  $\tilde{C}_r = \alpha_r C_r$  — корреляторы с учетом вершинных поправок. Вершинные поправки могут быть различными для каждой из координационных сфер. В первоначальной работе [37] в модели без фрустрации принималась схема, когда



*Рис. 2.1.* Структурный фактор  $C_{\mathbf{q}}$  при промежуточной фрустрации  $p = 0.28$ . (проявляются одновременно мотивы NLRO и StLRO). На вставке — узкий пик  $C_{\mathbf{q}}$  при малой фрустрации  $p = 0.1$  (только мотив NLRO).

для ближайших соседей  $\alpha_{r=g} = \alpha_1$  а на дальних – второй и третьей координационных сферах ( $r > g$ )  $\alpha_r = \alpha_2$ . В модели с фрустрацией,  $J_1, J_2 > 0$ ,  $J_3 = 0$ , разумно использовать следующую схему для вершинных поправок [81, 82]: для ближайших соседей  $\alpha_{r=g} = \alpha_1$ ; на дальних – третьей, четвертой и пятой – координационных сферах  $\alpha_{r>d} = \alpha_2$ ; в промежуточном случае вторых соседей ( $r = d$ ) принимается  $\alpha_{r=d} = \alpha_3$ . То есть возникают три различных вершинных поправки, введение которых обеспечивает выполнение трех дополнительных условий.

Первое условие – спиновый констрейнт  $C_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} = \langle S_{\mathbf{n}}^{\alpha} S_{\mathbf{n}}^{\alpha} \rangle = 1/4$ . В качестве второго используется соотношение  $\alpha_3 = (1 - p)\alpha_2 + p\alpha_1$ , которое обеспечивает корректный предел  $p \rightarrow 1$ , где решетка (после перехода в страйп-фазу) распадается на две не взаимодействующие АФМ подрешетки. В частности, выполняются следующие соответствия между корреляторами  $C_{\mathbf{r}}^{p=0}$  и корреляторами  $C_{\mathbf{r}}^{p=1}$ :  $C_d^{p=1} = C_g^{p=0}$ ,  $C_{2g}^{p=1} = C_d^{p=0}$ ,  $C_g^{p=1} = 0$ . И, наконец, третье условие:

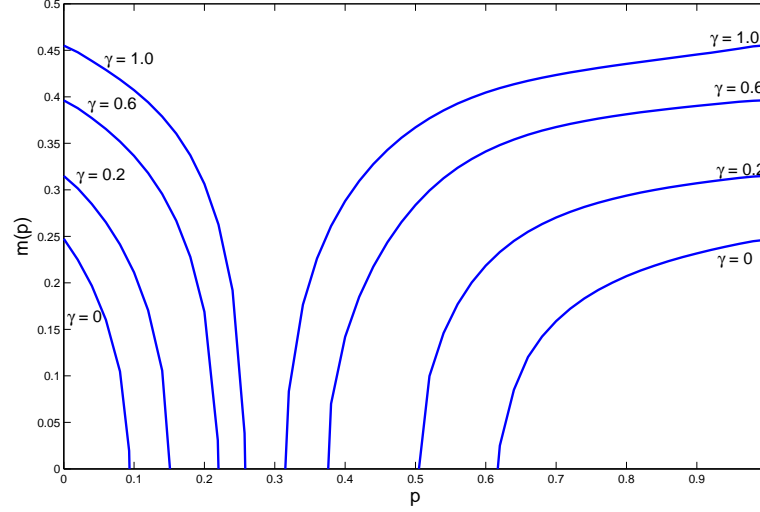
$$r_{\alpha} = \frac{\alpha_1 - 1}{\alpha_2 - 1} = \text{const} \quad (2.14)$$

где параметр  $r_{\alpha}$  считается не зависящим от температуры. Функциональный вид (2.14) приводит к тому, что все вершинные поправки  $\alpha_r$  при высокой температуре стремятся к единице [37]. Величина  $r_{\alpha}$  обычно выбирается так, чтобы обеспечить сшивку с пределом нулевой температуры и нулевой фрустрации, который хорошо изучен несколькими альтернативными методами [64].

При выборе  $r_{\alpha} = 1$ , очевидно,  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$ . Характерные значения  $r_{\alpha}$  обычно выбираются в интервале  $r_{\alpha} = 0.8 \div 1.0$ , при этом характерные значения  $\alpha_1 = 1.5 \div 1.9$ .

В пределе нулевой фрустрации, то есть в случае  $J_1$ -модели, существуют результаты нескольких альтернативных подходов [64], в том числе расчетов методом Монте-Карло. Последние дают для спин-спинового коррелятора на ближайших соседях оценку  $C_{\mathbf{g}} = -0.1115 \pm 0.0015$  и для определяемой конденсатом эффективной намагниченности  $m^N = \sqrt{3c_0} = 0.304 \pm 0.004$  (использована нормировка из [37, 64]).

При  $p = 0$  сферически симметричный подход в приближении среднего поля не вполне согласуется с этими данными. Подбор параметра  $r_{\alpha}$  позволяет воспроизвести либо одну, либо другую из указанных величин, но не обе их одновременно (при  $r_{\alpha} = 0.852$   $-C_{\mathbf{g}} = -0.1117$ , но  $m^N = 0.253$ ,



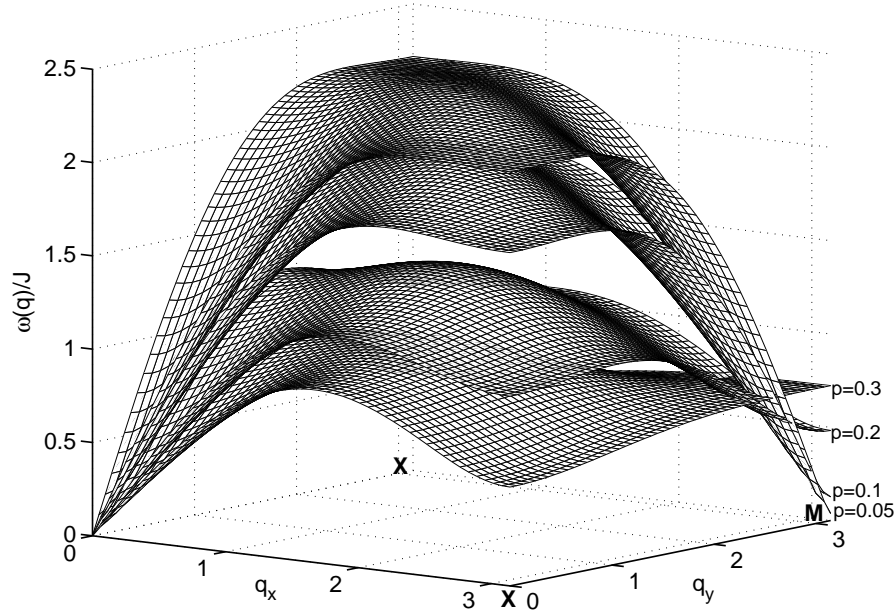
**Рис. 2.2.** Зависимость эффективной намагниченности  $m = \sqrt{3c_0^{N,S}}$  от параметра фрустрации  $p$  при  $T = 0$  для  $J_1 - J_2$  модели при значениях параметра затухания  $\gamma = 0; 0.2; 0.6; 1.0$  ( $r_\alpha = 0.863$ ).

при  $r_\alpha = 0.826 - m^N = 0.300$ , но  $C_g = -0.1169$  [37]). Для примеров, приведённых в данной главе, принят параметр  $r_\alpha = 0.863$ . Этот выбор приводит к значению энергии на узел, равной  $6C_g = 0.66$  при  $T = 0$ ,  $p = 0$ .

В принципе, при замыкании двух уравнений в цепочке функций Грина можно было бы использовать не расщепление, а более последовательный подход, основанный на проекционном методе. Однако в рамках последнего подхода с необходимостью возникают спин-спиновые четырехузельные корреляционные функции, которые не считаются через две функции Грина, на которых цепочка замыкается. Для упомянутых корреляторов можно было бы использовать ряд приближений, но при этом все равно разрушилась бы приведенная выше схема. В каком-то смысле такие приближения все равно остались бы эквивалентными вершинным поправкам, которые вводятся при расщеплении. Тем не менее, представляется, что этот подход подлежит исследованию.

На Рис.2.2 приведена, в частности, среднеполевая (случай нулевого параметра затухания  $\gamma$ , о введении затухания спиновых возбуждений в модель см. Гл. 4) зависимость эффективной намагниченности  $m = \sqrt{3c_0^{N,S}}$  от параметра фрустрации  $p$  для  $J_1 - J_2$  модели. В этом случае, как видно из Рис.2.2, границы перехода по параметру  $p$  из LRO-состояний в состоя-





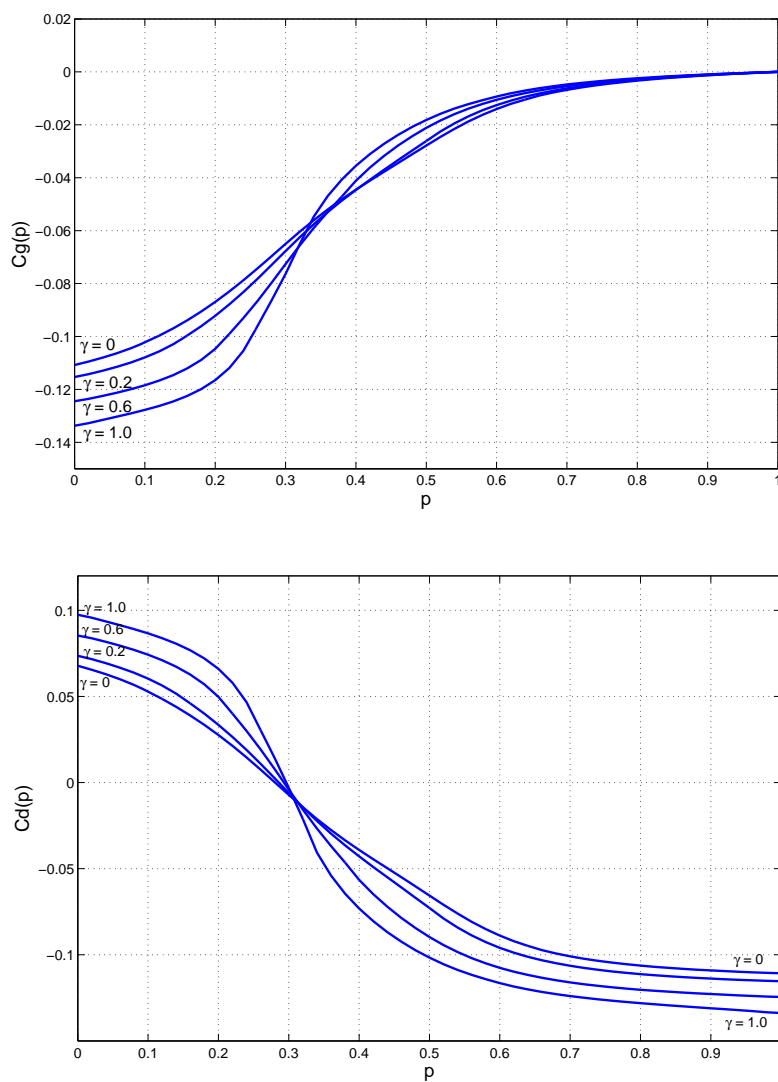
**Рис. 2.3.** Эволюция спектра спиновых возбуждений  $\omega(\mathbf{q})$  в среднеполевом приближении с ростом фрустрации. Температура  $T/J = 0.1$ . Показана четверть полной зоны Бриллюэна,  $\mathbf{M} \equiv \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ,  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$ .

ние спиновой жидкости для NLRO (дальний порядок неелевского типа) и для состояния StLRO (дальний порядок страйп-типа) равны соответственно  $p_0^N \approx 0.1$  и  $p_0^S \approx 0.62$ .

На Рис.2.3 представлена характерная эволюция среднеполевого спектра  $\omega_{\mathbf{q}}$  в среднеполевом приближении с ростом фрустрации от  $p = 0.05$  до  $p = 0.3$  при  $T/J = 0.1$ . Явно видно, что при росте  $p$  щель в точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  увеличивается, а в точках  $\mathbf{X}$ , отвечающих StLRO, щель уменьшается. Можно считать, что качественно среднеполевое приближение схватывает основные черты изменения спиновой подсистемы по фрустрации  $p$ .

Зависимости двух корреляционных функций  $C_g$  и  $C_d$  в среднеполевом приближении от  $p$  представлены на Рис.2.4 а, б кривыми, отвечающими обозначениям  $\gamma = 0$ . Как видно, корреляторы меняются плавно при переходе из одной фазы в другую, могут менять знак, и можно убедиться, что выполняются характерные условия разделения решетки на две подрешетки при  $p = 1$ :  $C_d^{p=1} = C_g^{p=0}$ ,  $C_{2g}^{p=1} = C_d^{p=0}$ ,  $C_g^{p=1} = 0$ .

Однако, как будет видно в Гл. 4, для корректного описания модели выход за среднеполевое приближение является обязательным. В частности, это касается положения точки перехода  $p_0^N \approx 0.1$ , которая может меняться



**Рис. 2.4.** Зависимости корреляционных функций  $C_g$  (а) и  $C_d$  (б) от  $p$  для  $J_1 - J_2$  модели при значениях параметра затухания  $\gamma = 0; 0.2; 0.6; 1.0$  при  $T = 0$  ( $r_\alpha = 0.863$ ).

более чем в два раза при учете затухания. Будет видно, что учет затухания может уменьшать щели в спиновом спектре в несколько раз. Кроме того, в рамках среднего поля оказывается невозможным описать так называемое скейлинговое поведение восприимчивости и возникновение несоизмеримых пиков в ВТСП. Как показано в [88], при рассмотрении рассеяния дырок на спиновой подсистеме приближение  $\chi_{mf}$  является абсолютно неудовлетворительным при рассмотрении аномального поведения температурной зависимости электросопротивления и эффекта Холла в допированном АФМ, и только учет затухания позволяет получить согласие с экспериментальными результатами.

---

## ГЛАВА 3

### Фрустрированная $J_1$ - $J_2$ модель Гейзенберга

---

Изучение двумерной фрустрированной модели Гейзенберга является актуальным для понимания свойств магнитных подсистем многих слоистых соединений. Магнитные свойства  $CuO_2$  плоскостей в купратных сверхпроводниках (ВТСП) описываются  $J_1$ - $J_2$  моделью Гейзенберга на квадратной решётке со спином  $S = 1/2$  и антиферромагнитными знаками обоих обменов. Интенсивно изучаемые сейчас слоистые соединения на основе ванадия описываются той же моделью, но уже не только с АФМ обменами.

В классическом пределе  $S \gg 1$  система при  $T = 0$  может иметь один из трёх типов дальнего порядка: ферромагнитный (ФМ, FMLRO), неелевский антиферромагнитный (АФМ, NLRO) и «полосатый» (страйп, StLRO). В точках  $J_2/|J_1| = 0.5$  наблюдаются фазовые переходы первого рода от шахматного порядка к страйпу при  $J_1 > 0$  и от страйп-порядка к ферромагнитному при  $J_1 < 0$ , в точке  $J_1 = 0$ ,  $J_2 = -1$  – переход от АФМ к ФМ порядку. На Рис.3.1 представлено положение наиболее изученных ванадатов на классической фазовой диаграмме  $J_1$ - $J_2$  модели (данные из [21], [20]).

При  $T \neq 0$  дальний порядок в 2D в силу теоремы Мермина-Вагнера невозможен для любой величины спина, при  $T = 0$  для больших  $S$  дальний порядок существует всегда. Общепринято, однако, что в случае  $S = 1/2$  вблизи точек фазового перехода даже при  $T = 0$  спиновые флуктуации переводят систему в одно из синглетных состояний без дальнего порядка с ненулевой спиновой щелью. Вопрос о структуре неупорядоченных фаз остаётся дискуссионным. Обычно рассматриваются: спиновая жидкость, сохраняющая трансляционную и  $SU(2)$  симметрии гамильтониана; плакетное покрытие решётки, нарушающее трансляционную симметрию, но сохраняющее  $SU(2)$ ; а также состояния, нарушающие как трансляционную, так и  $SU(2)$  симметрию.

### § 3.1. Основное состояние J1-J2 модели Гейзенберга

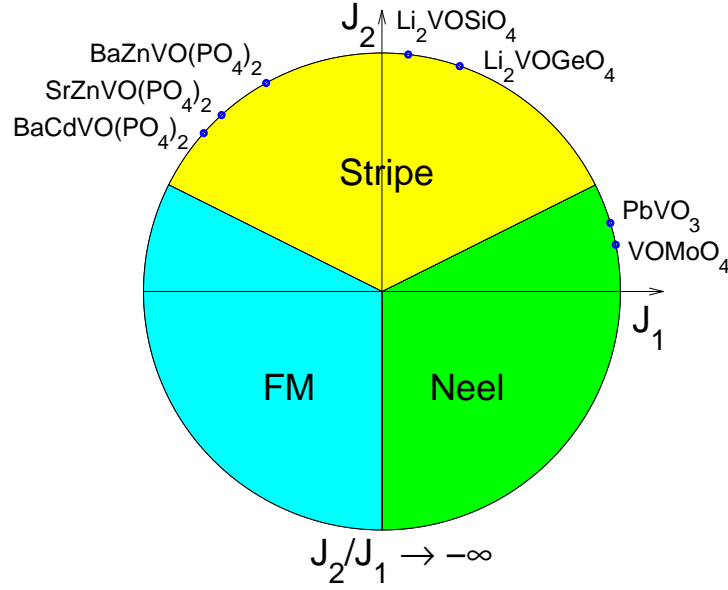
В настоящем разделе изучаются основное состояние и термодинамические свойства двумерной  $J_1 - J_2$  модели Гейзенберга в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода для двухвременных запаздывающих спиновых функций Грина, развитого в предыдущей главе. Такой подход автоматически сохраняет  $SU(2)$  симметрию гамильтониана, трансляционную симметрию и спиновый констрейнт на узле. В отличие от предыдущих рассмотрений  $S = 1/2$  модели, исследуется фазовая диаграмма при произвольных значениях  $J_1$  и  $J_2$ , включая случаи  $J_1 < 0$ ,  $J_2 > 0$  и  $J_1 < 0$ ,  $J_2 < 0$ .

Далее в этом разделе в качестве основного параметра, регулирующего фрустрацию, выбран угол  $\varphi$ , определяющий положение точки на круговой фазовой диаграмме (Рис. 3.1). Этот параметр однозначно определяет отношение обменных констант:  $J_1 = J \cos \varphi$ ,  $J_2 = J \sin \varphi$ ,  $J = \sqrt{J_1^2 + J_2^2}$ . Чтобы связать угол  $\varphi$  с параметром фрустрации  $p$ , общепринятым для антиферромагнитной модели, приведём их значения для нескольких точек: Нефрустрированной антиферромагнитной модели соответствуют  $\varphi = 0$  и  $p = 0$ ; случаю  $J_1 = J_2$  соответствуют  $p = 0.5$ ,  $\varphi = \pi/4$ ; в пределе  $J_1 = 0$   $p = 1$ ,  $\varphi = \pi/2$ ; наконец, точке наибольшей фрустрации  $J_2 = 0.5J_1$  отвечают параметры  $\varphi = \arctg(1/2) \approx 0.46$ ,  $p = 1/3$ .

Ранее в квантовом пределе  $S = 1/2$  наиболее подробно исследовался первый квадрант диаграммы  $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ , (см., например, ссылки в [9, 89, 90]). В этом случае между АФМ и страйп фазами с дальним порядком возникает неупорядоченное состояние (спиновая жидкость). Переходы АФМ фаза — спиновая жидкость — страйп-фаза в рамках СССП являются непрерывными.

Область диаграммы  $J_1 < 0$ ,  $J_2 > 0$  для  $S = 1/2$  исследовалась в рамках СССП в работах [50, 91], где, в частности, утверждалось наличие фазового перехода первого рода между ферромагнитной (ФМ) фазой с дальним порядком и спин-жидкостной фазой при увеличении значения  $J_2/|J_1|$ . Как будет видно, в отличие от [50, 91], рассмотрение в текущей работе указывает на существование непрерывного перехода между указанными фазами, причем вблизи перехода свойства ФМ фазы существенно модифицированы.

Прежде чем обсуждать фазовую диаграмму во всем интервале угла  $\varphi$ , снова приведем вид гамильтониана  $H$  и спин-спиновой функции Грина



**Рис. 3.1.** Фазовая диаграмма  $J_1$ - $J_2$  модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в классическом пределе. Точки отвечают соотношению обменов  $J_1$  и  $J_2$  для наиболее изученных ванадатов (данные из [21], [20])

$G^{zz}(\omega, \mathbf{q})$ , которую можно получить в рамках СССП [37, 50] (в СССП  $G^{zz} = G^{xx} = G^{yy}$ ;  $\langle S_i^\alpha \rangle = 0$ ,  $\alpha = x, y, z$ ).

$$H = \frac{J_1}{2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}} \quad (3.1)$$

$$G^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_\omega = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \quad (3.2)$$

$$F_{\mathbf{q}} = -8[J_1(1 - \gamma_g)c_g + J_2(1 - \gamma_d)c_d] \quad (3.3)$$

$$\gamma_g(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_g} \sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{g}} = \frac{1}{2}(\cos(q_x) + \cos(q_y)) \quad (3.4)$$

$$\gamma_d(\mathbf{q}) = \frac{1}{z_d} \sum_{\mathbf{d}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{d}} = \cos(q_x) \cos(q_y) \quad (3.5)$$

где  $\mathbf{g}, \mathbf{d}$  — вектора первых и вторых ближайших соседей,  $c_{\mathbf{R}} = \langle S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{R}}^z \rangle$  — спин-спиновые корреляционные функции на соответствующих координационных сферах,  $z_g = z_d = 4$  — число узлов на первой и второй координационных сферах. Ниже в этой главе все энергетические величины приводятся в единицах  $J = \sqrt{J_1^2 + J_2^2}$ .

Спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}^2$  ([9, 81, 82]) для дальнейшего анализа ФМ, АФМ и страйп пределов удобно представить в следующих трех видах

$$\begin{aligned}\omega_{\mathbf{q}}^2 &= 2A(\mathbf{q})(1 - \gamma_g)(1 - \gamma_g + \delta_{FM}(\mathbf{q})) = \\ &= -2A(\mathbf{q})(1 - \gamma_g)(1 + \gamma_g + \delta_{AFM}(\mathbf{q})) = \\ &= -2A(\mathbf{q})(1 - \gamma_g)(1 + \gamma_d + \delta_{Stripe}(\mathbf{q}))\end{aligned}\quad (3.6)$$

В качестве примера приведём одну из щелевых частей в приведённых выражениях для спектра. Величина  $A\delta_{AFM}$  выражается через обменные параметры и корреляционные функции как

$$\begin{aligned}A\delta_{FM} &= 8J_1J_2(\tilde{c}_{dg} - \tilde{c}_g) + \\ &+ J_1^2(1 - 20\tilde{c}_g + 8\tilde{c}_d + 4\tilde{c}_{2g}) + \\ &+ \frac{1 - \gamma_d}{1 - \gamma_g}[8J_2J_1(\tilde{c}_{dg} - \tilde{c}_g) \\ &+ J_2^2(1 - 20\tilde{c}_d + 8\tilde{c}_{2g} + 4\tilde{c}_{2d})]\end{aligned}\quad (3.7)$$

В (3.7) корреляторы  $\tilde{c}_r = \alpha c_r$  в рамках приближения одной вершинной поправки  $\alpha$  ([9, 91]). Пять корреляторов  $c_r$  ( $r = g, d, 2g, r_{gd} = |\mathbf{g} + \mathbf{d}|, 2d$ ) и вершинная поправка  $\alpha$  находятся самосогласованно через функцию Грина  $G^{zz}$ . При этом накладывается дополнительное условие точного выполнения правила сумм  $\langle \hat{\mathbf{S}}_i^2 \rangle = 3/4$ .

Введенные выше параметры  $\delta_{FM}(\mathbf{q})$ ,  $\delta_{AFM}(\mathbf{q})$  и  $\delta_{Stripe}(\mathbf{q})$  имеют ясный физический смысл и определяют основные черты спектра спиновых возбуждений. Во всех фазах – трех упорядоченных (АФМ, страйп, ФМ) и спиновой жидкости – щель в спектре спиновых возбуждений закрыта в нулевой точке  $\mathbf{O} = (0, 0)$ . В ФМ фазе спектр вблизи  $\mathbf{O}$  квадратичен по  $q$ , в остальных фазах – линейен. При подходе к ФМ со стороны соседних фаз спектр вблизи  $\mathbf{O}$  имеет вид  $\omega_q \sim q\sqrt{\delta_{FM} + \frac{q^2}{4}}$ . То есть  $\delta_{FM}$  диктует переход от ФМ спектра  $\omega_q \sim q^2$  к  $\omega_q \sim q$ . В АФМ фазе спиновая щель закрыта не только в  $\mathbf{O}$ , но и в АФМ точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Спектр вблизи  $\mathbf{Q}$  при подходе к АФМ фазе со стороны соседних  $\omega_q \sim \sqrt{\delta_{AFM} + \varkappa^2}$ ,  $\varkappa = |\mathbf{Q} - \mathbf{q}|$ , то есть  $\delta_{AFM}$  прямо определяет щель  $\Delta_{AFM}$  в спектре. В стайп-фазе и ее окрестностях, с соответствующими заменами (роль управляющей точки переходит к страйп-точкам  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$ ), ситуация аналогична АФМ.

Таким образом, зануление каждого из трех параметров  $\delta_{FM}$ ,  $\delta_{AFM}$ ,  $\delta_{Stripe}$  определяет переход в соответствующую упорядоченную фазу и одновременно изменение вида спектра вблизи соответствующей управляющей точки (переход от линейного к квадратичному для ФМ и зануление спиновой щели в спектре дираковского вида для двух остальных). В спиновой жидкости щель в спектре открыта во всей зоне Бриллюэна, кроме точки **O**.

Остановимся подробнее на описании спинового дальнего порядка. Структурный фактор имеет вид

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{q}} &= \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega \text{Im} G^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \\ &= \frac{F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} (2n(\omega_{\mathbf{q}}) + 1), \end{aligned} \quad (3.8)$$

где  $n(\omega_{\mathbf{q}})$  — бозе-функция. Корреляционные функции выражаются через структурный фактор как

$$\begin{aligned} c_R &= \langle S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{R}}^z \rangle = \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} = \\ &= c_{cond} \sum_{\mathbf{q}_0} e^{i\mathbf{q}_0\mathbf{R}} + \frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} \end{aligned} \quad (3.9)$$

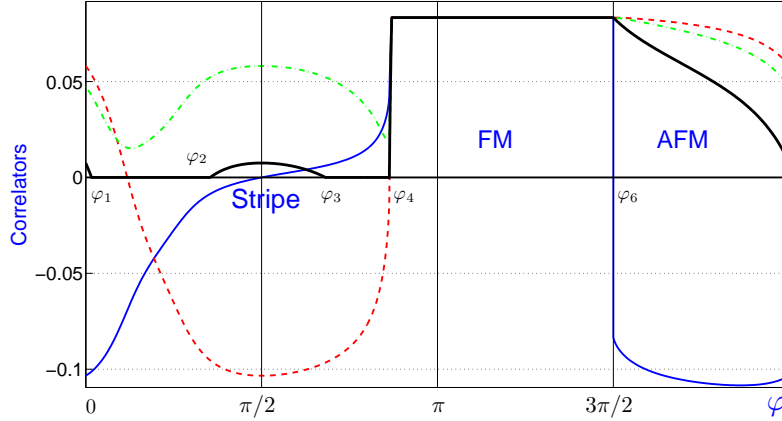
где конденсатная часть

$$c_{cond} = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{q} n(\omega_{\mathbf{q}}) \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \quad (3.10)$$

При  $T \rightarrow 0$  в структурном факторе в точках  $\mathbf{q}_0$  зоны Бриллюэна (где  $\omega_{\mathbf{q}}$  обращается в ноль) могут возникать дельтаобразные пики, связанные с бозевской функцией  $n(\omega_{\mathbf{q}})$ . Тогда в корреляционных функциях  $c_R$  появляется конденсатное слагаемое  $c_{cond}$ . Это соответствует наличию в системе спинового дальнего порядка ( $c_{cond}$  определяет спин-спиновый коррелятор на бесконечности). Слагаемое без  $n(\omega_{\mathbf{q}})$  в правой части (3.9) спадает при  $R \rightarrow \infty$ .

Для АФМ и страйп дальних порядков конденсатная часть возникает при занулении спектра  $\omega_{\mathbf{q}}$  соответственно в точках **Q** и **X**. Как уже упомянуто, вблизи этих точек спектр в соответствующей фазе ведёт себя как  $\omega_{\mathbf{q}} \sim \varkappa$ , где  $\varkappa = |\mathbf{q} - \mathbf{Q}|$  или  $|\mathbf{q} - \mathbf{X}|$ . Числитель  $F_{\mathbf{q}}$  функции Грина в





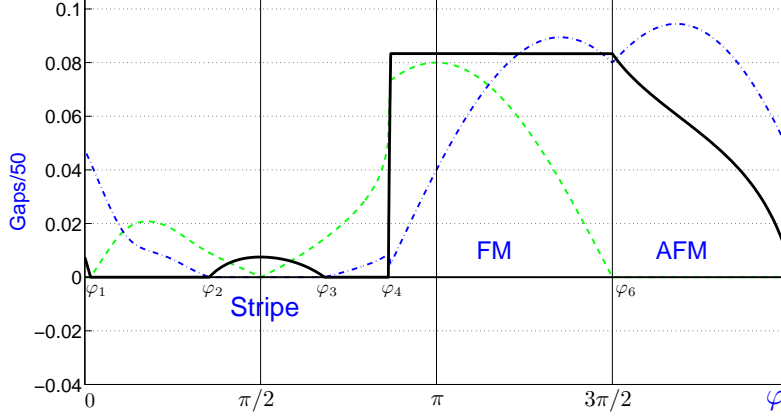
**Рис. 3.2.** Зависимость конденсата  $c_{cond}$  (модуля спин-спинового коррелятора на бесконечности) и спин-спиновых корреляторов на первых трёх координационных сферах  $c_g$ ,  $c_d$ ,  $c_{2g}$  от  $\varphi$  ( $J_1 = \cos \varphi$ ,  $J_2 = \sin \varphi$ ). Жирная сплошная линия —  $c_{cond}$ , тонкая сплошная —  $c_g$ , пунктир —  $c_d$ , штрихпунктир —  $c_{2g}$ . На оси абсцисс помечены точки фазовых переходов:  $\varphi_1$  — переход АФМ  $\rightarrow$  спиновая жидкость СЖ<sup>1</sup>,  $\varphi_2$  — СЖ<sup>1</sup>  $\rightarrow$  страйп,  $\varphi_3$  — страйп  $\rightarrow$  СЖ<sup>2</sup>,  $\varphi_4$  — СЖ<sup>2</sup>  $\rightarrow$  ферромагнетик ФМ<sup>1</sup> (окрестность точки  $\varphi_4$  см. Рис.3.4),  $\varphi_6$   $\rightarrow$  переход ФМ<sup>2</sup> — АФМ. Подробности см. в тексте

этих точках не зануляется. Линейность спектра и ненулевое значение  $F_{\mathbf{q}}$  являются условием образования конденсата [37].

При ФМ дальнем порядке конденсат возникает в точке  $\mathbf{O}$ . Так как вблизи нее числитель функции Грина  $F_{\mathbf{q}} \sim q^2$ , то для образования конденсата необходимо, чтобы спектр также вел себя как  $\omega_{\mathbf{q}} \sim q^2$ .

Отметим, что при добавлении к исходной модели третьего обмена  $J_3$  дополнительно могут реализовываться несколько случаев геликоидального дальнего порядка. Отвечающая конденсатному пику в структурном факторе точка может тогда быть расположенной не только в  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{Q}$  или  $\mathbf{X}$ , но и занимать произвольное несоизмеримое положение на боковой стороне или диагонали зоны Бриллюэна [9].

На Рис.3.2 приведена фазовая диаграмма при  $T \rightarrow 0$ , на которой представлены конденсаты и корреляторы, соответствующие первым трем координационным сферам. На Рис.3.3 показаны спиновые щели в симметричных точках. При  $0 \leq \varphi \leq \varphi_1 = 0.051$  реализуется АФМ дальний порядок: щель в АФМ точке  $\mathbf{Q}$  равняется нулю,  $\Delta_{\mathbf{Q}} = 0$ , спектр вблизи  $\mathbf{Q}$

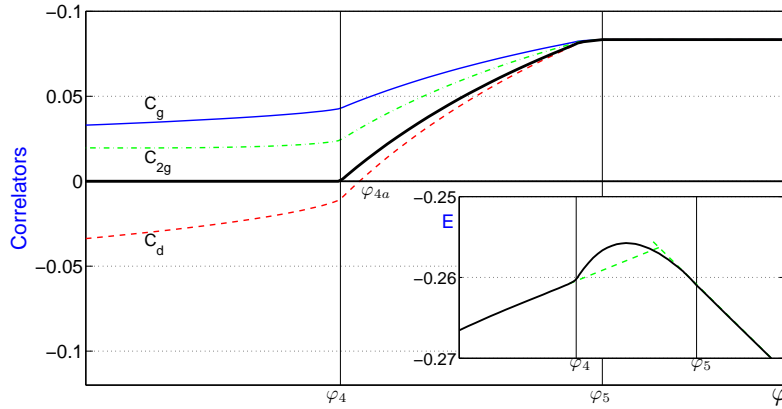


**Рис. 3.3.** Зависимость спиновых щелей  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  и  $\Delta_{\mathbf{X}}$  (показаны  $\Delta_{\mathbf{Q}}/50$  и  $\Delta_{\mathbf{X}}/50$ ) в точках  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  (пунктир) и  $\mathbf{X} = (\pi, 0), (0, \pi)$  (штрих-пунктир) зоны Бриллюэна от  $\varphi$  ( $J_1 = \cos \varphi$ ,  $J_2 = \sin \varphi$ ). Сплошной линией показан конденсат  $c_{cond}$ . Отмеченные точки  $\varphi_1 - \varphi_6$  те же, что на Рис.3.2

линеен по  $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}|$ , имеется конечный АФМ конденсат  $c_{cond}^{AFM}$ .

При  $\varphi = \varphi_1$  конденсат  $c_{cond}^{AFM}$  обращается в ноль, АФМ щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  открывается, и спектр становится бесщелевым во всей зоне Бриллюэна, исключая тривиальную нулевую точку  $\mathbf{O}$ , где он остается линейным. Система переходит в состояние спиновой жидкости (обозначим его СЖ<sup>1</sup>), которое реализуется в интервале  $\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_2 = 1.111$ . Дальний порядок при этом отсутствует, а ближний с увеличением  $\varphi$  перестраивается с характерного для АФМ фазы ( $c_g < 0$ ,  $|c_g| > c_d > c_{2g} > 0$ ) на характерный для страйп-фазы ( $c_d < 0$ ,  $c_{2g} > 0$ ,  $|c_d| > c_{2g} > |c_g|$ ). Щель в АФМ точке  $\mathbf{Q}$  проходит через максимум, а щель в страйп-точках  $\mathbf{X}$  монотонно убывает (Рис.3.3).

При  $\varphi = \varphi_2$  страйп-щель  $\Delta_{\mathbf{X}}$  зануляется, спектр в страйп-точках  $\mathbf{X}$  становится линейным, а конденсат  $c_{cond}^{Stripe}$  – ненулевым, система переходит в страйп-фазу с дальним порядком, который реализуется в интервале  $\varphi_2 \leq \varphi \leq \varphi_3 = 2.141$ . Интересным является значение угла  $\varphi = \pi/2$ , где  $J_1 = 0$ ,  $J_2 = 1$ . При этих обменных константах система распадается на две невзаимодействующие АФМ подрешетки и, как очевидно должно быть,  $c_d(\pi/2) = c_g(0)$ ,  $c_{2g}(\pi/2) = c_d(0)$  (см. Рис.3.2). Отметим, что при  $\varphi = \pi/2$ , как и в АФМ фазе,  $\Delta_{\mathbf{Q}} = 0$  (см. Рис.3.3), что, однако, не приводит к возникновению дальнего АФМ порядка, так как  $F(\mathbf{Q}, \varphi = \pi/2)$  также обращается в ноль, в результате  $c_{cond}^{AFM}(\varphi = \pi/2) = 0$ .



**Рис. 3.4.** Изменение конденсата  $c_{cond}$  и спин-спиновых корреляторов  $c_g$ ,  $c_d$ ,  $c_{2g}$  при эволюции системы от спиновой жидкости СЖ<sup>2</sup> к ферромагнетику ФМ<sup>2</sup>. Жирная сплошная линия —  $c_{cond}$ , тонкая сплошная —  $c_g$ , пунктир —  $c_d$ , штрих-пунктир —  $c_{2g}$ .  $\varphi_4$  — переход спиновая жидкость СЖ<sup>2</sup> → ферромагнетик ФМ<sup>1</sup>, в области  $\varphi_4$ – $\varphi_{4a}$  отсутствует ближний ФМ-порядок при наличии дальнего ФМ-порядка (см. текст),  $\varphi_5$  соответствует границе между ферромагнитными областями ФМ<sup>1</sup> и ФМ<sup>2</sup> (см. текст) На вставке: сплошная линия — энергия на один узел  $\varepsilon_0$ , пунктирные линии — экстраполяция энергии для решений СЖ<sup>1</sup> и ФМ<sup>2</sup> из [91]. Их пересечение соответствует декларируемому в [91] переходу первого рода между спиновой жидкостью и ферромагнетиком

При  $\varphi = \varphi_3$  страйп-щель  $\Delta_{\mathbf{x}}$  открывается, и система снова переходит в состояние спиновой жидкости (СЖ<sup>2</sup>), которое реализуется в диапазоне  $\varphi_3 < \varphi < \varphi_4 = 2.712$  (однако с иной, чем при  $\varphi_1 \leq \varphi \leq \varphi_2$ , структурой ближнего порядка). Интересно, что коррелятор  $c_d$  между вторыми ближайшими соседями во всей области существования этой фазы остается отрицательным. То есть не происходит перестройки ближнего порядка на характерный для ферромагнетика, в котором  $c_g, c_d, c_{2g} > 0$ . По модулю  $c_d$  почти везде, кроме узкой области вблизи  $\varphi_4$ , больше, чем коррелятор  $c_g$  между ближайшими соседями.

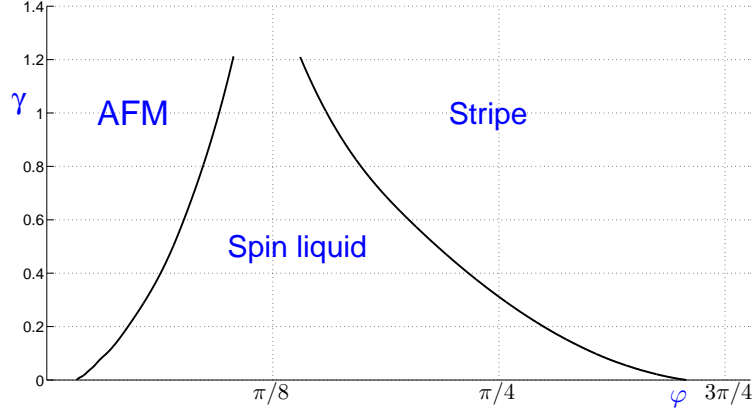
Подчеркнем ещё раз, что во всех упомянутых выше фазах спектр вблизи точки  $\mathbf{O} = (0, 0)$  остаётся линейным по  $q$ .

При  $\varphi = \varphi_4$  вновь возникает фаза с дальним (ферромагнитным) порядком и ненулевым соответствующим конденсатом  $c_{cond}^{FM}$ . Спектр вблизи точки  $\mathbf{O}$  становится квадратичным по  $q$  (а щель  $\Delta_{\mathbf{O}}(\varphi_4) = 0$ ). Рис.3.2 и Рис.3.3 демонстрируют, что в этой фазе различимы две области – ФМ<sup>1</sup> и ФМ<sup>2</sup>. Область ФМ<sup>1</sup> отвечает узкий интервал  $\varphi_4 < \varphi < \varphi_5 = 2.733$ . В этом интервале с увеличением  $\varphi$  конденсат  $c_{cond}^{FM}$  быстро растёт от  $c_{cond}^{FM} = 0$  до максимально возможного значения  $c_{cond}^{FM} = 1/12$ . Интересно, что вблизи  $\varphi_4$  реализуется ФМ дальний порядок при отсутствии ФМ ближнего порядка,  $c_d < 0$  (такая ситуация отвечает интервалу  $\varphi_4 < \varphi < \varphi_{4a} = 2.713$ ). При  $\varphi \geq \varphi_5$  (область ФМ<sup>2</sup>) все корреляторы и конденсат равны  $1/12$ ,  $\alpha = 3/2$  ([37, 91]).

Область ФМ<sup>1</sup> отсутствовала при рассмотрении модели в [91]. На Рис.3.4 представлено поведение энергии при переходах СЖ<sup>2</sup>  $\rightarrow$  ФМ<sup>1</sup>  $\rightarrow$  ФМ<sup>2</sup>. Пунктиром представлена экстраполяция энергии фазы СЖ<sup>2</sup> до пересечения с энергией фазы ФМ<sup>2</sup> из [91]. На основании этой экстраполяции в работе [91] сделано заключение о переходе первого рода в обсуждаемой области  $\varphi$ . Наше рассмотрение показывает (см. Рис.3.4), что для энергии отсутствует скачок производной при эволюции системы от СЖ<sup>2</sup> до ФМ<sup>1</sup>.

Отметим, что стандартное ферромагнитное решение [37, 91] (решение ФМ<sup>2</sup>) существует и при углах  $\varphi < \varphi_5$ , вплоть до  $\varphi = \pi - \arctan(1/2)$ , однако в этой области оно является метастабильным по отношению к ФМ<sup>1</sup> и СЖ<sup>2</sup>.

При  $\varphi \geq \varphi_5$  решение ФМ<sup>2</sup> реализуется вплоть до  $\varphi_6 = 3\pi/2$ . Это значение угла выделено на фазовой диаграмме. В  $\varphi_6$  решетка распадает-



**Рис. 3.5.** Зависимость положения границ спиновой жидкости СЖ<sup>1</sup> от параметра затухания  $\gamma$  (см. текст)

ся на две невзаимодействующие подрешетки. При  $\varphi \rightarrow \varphi_6 - 0$  в системе нет фрустрации относительно ФМ порядка, при  $\varphi \rightarrow \varphi_6 + 0$  отсутствует фрустрация относительно АФМ порядка. Поэтому физически очевидно, что и в квантовом пределе между двумя фазами с дальним порядком не возникает области спиновой жидкости, переход происходит первым родом, что и подтверждают наши вычисления. Отметим также, что, как видно из Рис.3.2, при  $\varphi \rightarrow \varphi_6 + 0$  ( $J_1 = +0$ ,  $J_2 = -1$ ) АФМ конденсат, то есть модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности, на порядок больше, чем в "стандартном" антиферромагнетике ( $\varphi = 0$ ,  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 0$ ), и равен ФМ конденсату при  $\varphi \rightarrow \varphi_6 - 0$ . То есть ФМ обмен вторых ближайших соседей при нулевом первом обмене приводит к более "жесткому" АФМ порядку, чем АФМ обмен первых соседей при нулевом втором обмене.

Отметим, что вблизи переходов спиновая жидкость — фаза с дальним порядком можно ожидать, что существенным будет учёт затухания спиновых возбуждений. Учёт затухания может заметно сдвигать границу соответствующего перехода. Для демонстрации приведём (см. Рис.3.5) зависимость области существования фазы СЖ<sup>1</sup> от параметра затухания  $\gamma$  при простейшем феноменологическом учете последнего в рамках функции Грина  $G_\gamma^{zz}$ , который сохраняет правильные аналитические свойства (детали см. в [9]):

$$G_\gamma^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma} \quad (3.11)$$

Из Рис.3.5 видно, что границы спин-жидкостной фазы чувствительны к величине затухания. Однако, как показывают наши оценки, при любых разумных значениях затухания никаких топологических изменений на полученной фазовой диаграмме не произойдёт.

Таким образом, в настоящем разделе в едином подходе исследована фазовая диаграмма двумерной  $J_1$ - $J_2$   $S = 1/2$  модели Гейзенберга во всем диапазоне обменных параметров. Показано, что переходы между всеми упорядоченными и неупорядоченными фазами непрерывны, кроме перехода ФМ-АФМ при  $J_1 = 0$ ,  $J_2 = -1$ .

### § 3.2. Термодинамические свойства $J_1$ - $J_2$ модели при $T > 0$

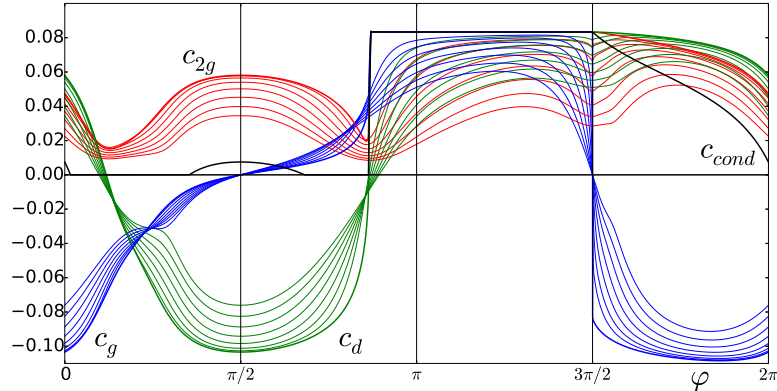
Перейдём к рассмотрению случая конечных температур. Интерес представляют в том числе термодинамические свойства системы. Так, СС-СП позволяет вычислить температурную зависимость спин-спиновых корреляционных функций, щелей в спектре спиновых возбуждений, теплоёмкость, а также спиновые корреляционные длины.

Как следует из теоремы Мермина-Вагнера, в случае ненулевой температуры может реализовываться только состояние без спин-спинового дальнего порядка.

Полученные в результате самосогласованных вычислений значения спин-спиновых корреляционных функций на первых, вторых, и третьих координационных сферах ( $c_g$ ,  $c_d$  и  $c_{2g}$  соответственно) при различных температурах ( $0 \leq T \leq 0.8$ ) приведены на Рис. 3.6.

Как видно из рисунка, при ненулевых температурах ближний спиновый порядок обладает мотивами дальнего порядка, соответствующего основному состоянию, при заданном значении параметра  $\varphi$ . Область над антиферромагнитной фазой характеризуется антиферромагнитными ближними корреляторами  $c_g < 0$ ,  $|c_g| > c_d > c_{2g} > 0$ , область над страйп-фазой – страйп-корреляторами  $c_d < 0$ ,  $c_{2g} > 0$ ,  $|c_d| > c_{2g} > |c_g|$ , а область над ферромагнитной фазой – ферромагнитными корреляторами  $c_g > c_d > c_{2g} > 0$ . В промежуточных областях над спин-жидкостной фазой ближний порядок плавно переходит от одного предела к другому.

Естественно ожидать уменьшения абсолютных значений корреляционных функций при росте температуры. Это правило в целом выполняется, однако имеется два важных исключения с обратной температурной зави-



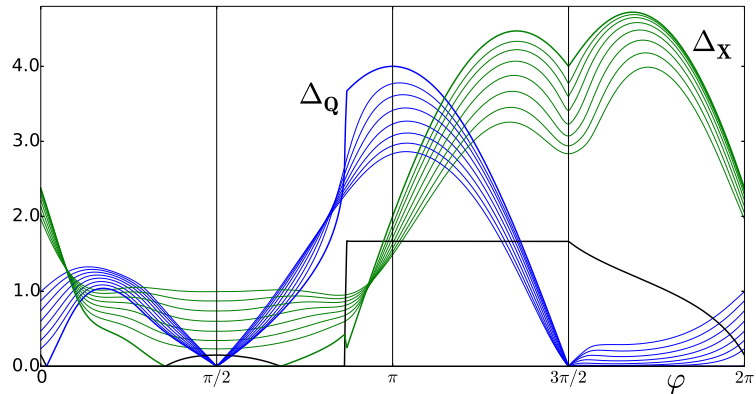
**Рис. 3.6.** Зависимость от параметра  $\varphi$  конденсатной функции при  $T = 0$  (чёрная сплошная линия) и трёх первых корреляторов  $c_g$  (синий цвет),  $c_d$  (зелёный цвет) и  $c_{2g}$  (красный цвет) при температурах  $T = 0$  (жирные линии) и  $T = 0.3 \dots 0.8$  (тонкие линии)

симостью. Во-первых, ближний коррелятор  $c_g$  в области малых  $J_1$  – над страйп-областью, областью спиновой жидкости СЖ<sup>1</sup> и целиком в СЖ<sup>2</sup>-области; во-вторых, диагональный коррелятор  $c_d$  – посреди СЖ<sup>1</sup> и около перехода СЖ<sup>2</sup> → ФМ (см. Sec. § 3.3 для пояснений).

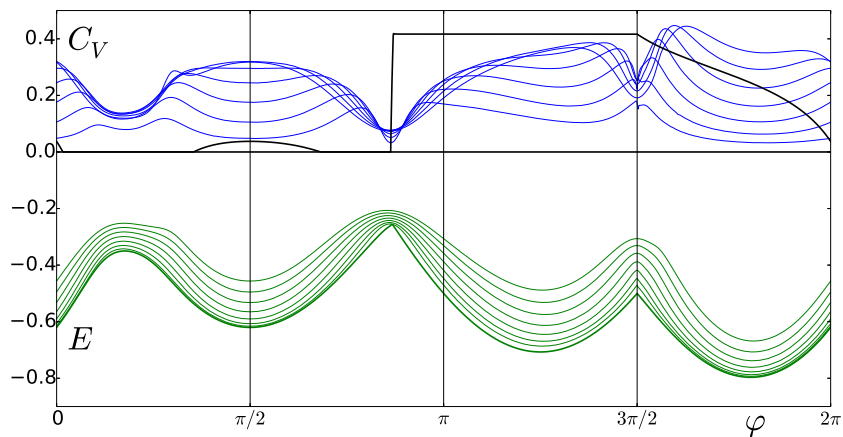
На Рис. 3.8 изображены вычисленные значения теплоёмкости  $C_V(\varphi)$  при различных температурах. На двух следующих рисунках — Рис. 3.9 и Рис. 3.10 — изображены детальные температурные зависимости теплоёмкости для различных значений  $\varphi$ , отмеченных на Рис. 3.8 вертикальными линиями (в тех диапазонах температур, где используемая вычислительная схема приводит к удовлетворительной скорости сходимости. На этих рисунках видно, в частности, что температурная кривая теплоёмкости имеет пик для произвольного значения  $\varphi$ .

### § 3.3. Обсуждение

В этом параграфе обсуждаются наиболее интересные свойства полученной фазовой диаграммы. Как уже было сказано, при  $T \neq 0$  спиновый дальний порядок в системе отсутствует и весь круг  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  соответствует спиновой жидкости. Тем не менее, области фазовой диаграммы будут классифицированы в терминах соответствующих им областей с дальним порядком при  $T = 0$ .

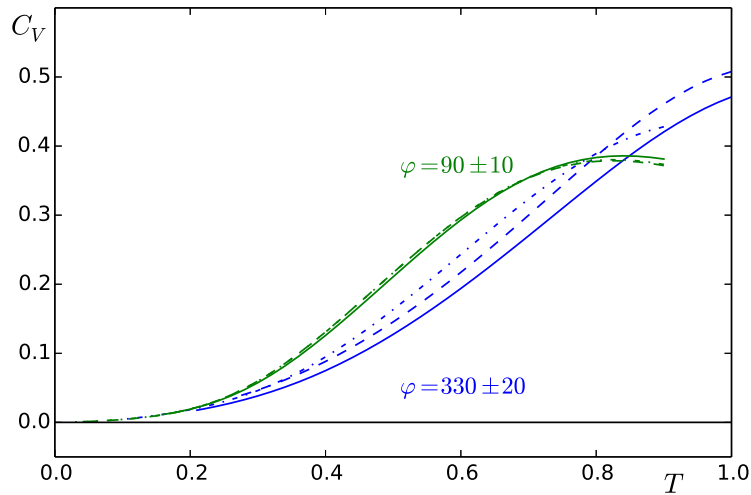


**Рис. 3.7.** Зависимость от параметра  $\varphi$  щелей  $\Delta_Q$  (синий цвет) и  $\Delta_X$  (зелёный цвет) в спектре спиновых возбуждений при различных температурах, жирные линии соответствуют случаю  $T = 0$ , тонкие — случаю  $T = 0.3 \dots 0.9$

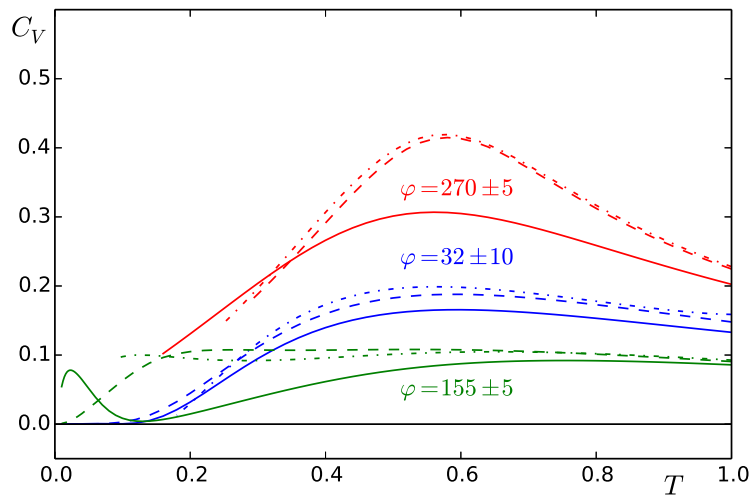


**Рис. 3.8.** Теплоёмкость  $C_V$  (синий цвет) и энергия  $E$  (зелёный цвет) системы в расчёте на один узел в зависимости от параметра  $\varphi$  при температурах  $T = 0.3 \dots 0.9$ , а также энергия основного состояния (жирная зелёная линия). Чёрным цветом обозначена конденсатная функция при  $T = 0$  в изменённом масштабе.





**Рис. 3.9.** Теплоёмкость системы  $C_V(T)$  для параметров  $\varphi$ , соответствующих точкам над страйп-фазой ( $\varphi = 90 \pm 10$ ) и неелевской фазой ( $\varphi = 330 \pm 20$ ). Сплошные линии соответствуют центральным линиям, пунктирная и штрихпунктирная — боковым



**Рис. 3.10.** Теплоёмкость системы  $C_V(T)$  для параметров  $\varphi$ , соответствующих минимумам теплоёмкости в антиферромагнитной спиновой жидкости ( $\varphi = 32 \pm 10$ ), на границе ферромагнитной спиновой жидкости и ферромагнитной коллинеарной фазы ( $\varphi = 155 \pm 5$ ) и на границе ферромагнитной и антиферромагнитной фаз ( $\varphi = 270 \pm 5$ ). Сплошные линии соответствуют центральным линиям, пунктирная и штрихпунктирная — боковым

### 3.3.1. Антиферромагнитный порядок

Стоит отметить значительную разницу в «силе» дальнего порядка при  $T = 0$  (значение спин-спиновых корреляционных функций на бесконечности) в точках  $\varphi = 0$  ( $J_1 = 1, J_2 = 0$ ) и  $\varphi = 3\pi/2 + 0$  ( $J_1 = +0, J_2 = -1$ ).

Бесконечно малый антиферромагнитный обмен между ближайшими узлами и конечный ферромагнитный обмен между узлами на второй координационной сфере (диагональный обмен) приводит к гораздо более сильному дальнему порядку, чем в стандартном случае конечного антиферромагнитного ближайшего обмена. При этом разница в ближнем порядке между этими двумя случаями не такая большая.

В интервале между  $\varphi = 3\pi/2 + 0$  и  $\varphi \sim 330^\circ$  (Рис. 3.7) АФМ спиновая щель мала ( $\Delta_{\mathbf{Q}} \ll T$ ) вплоть до достаточно высоких температур ( $T \lesssim 0.5$ ). В общепринятой антиферромагнитной точке  $\varphi = 0$  щель становится экспоненциально малой при гораздо меньших температурах ( $T \ll 0.5$ ). Когда  $\Delta_{\mathbf{Q}} \ll T$  щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  определяет антиферромагнитную корреляционную длину  $\xi_{AFM} \sim \Delta_{\mathbf{Q}}^{-1}$ . Таким образом корреляционная длина значительно увеличивается при движении от точки  $\varphi = 0$  к интервалу  $3\pi/2 \leq \varphi \lesssim 330^\circ$  (что согласуется с упомянутой эволюцией дальнего порядка).

Можно показать, что в точке  $\varphi = 0$  экспоненциально малая щель при высоких температурах  $T \sim 0.5$  реализуется также для спинов  $S \geq 1$ .

### 3.3.2. Спиновая жидкость

Отметим различие между поведением спиновой жидкости (при увеличивающемся параметре  $\varphi$ ) в двух областях, соответствующих нулевой температуре — области СЖ<sup>1</sup> и СЖ<sup>2</sup>. Область СЖ<sup>1</sup> при  $T = 0$  существует в диапазоне углов  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$  между антиферромагнитной и страйп-фазой. Ближний порядок в СЖ<sup>1</sup> непрерывно переходит от антиферромагнитного слева ( $c_g < 0, |c_g| > c_d > c_{2g} > 0$ ) к ближнему порядку страйп-типа справа ( $c_d < 0, c_{2g} > 0, |c_d| > c_{2g} > |c_g|$ ). Наоборот, в случае СЖ<sup>2</sup> жидкости ( $\varphi = \varphi_3 - \varphi_4$  при  $T = 0$ , область между страйп и ферромагнитной фазами). Почти во всей области СЖ<sup>2</sup> наблюдается ближний порядок страйп-типа, в частности, коррелятор  $c_d$  остается отрицательным. Абсолютное значение  $c_d$  почти везде, кроме узкой области около  $\varphi_4$ , значительно больше, чем коррелятор между ближайшими соседями  $c_g$ . И только вблизи границы

ферромагнитной фазы происходит значительная перестройка корреляционных функций. При  $T \neq 0$ , как это уже было многократно отмечено, спиновый дальний порядок отсутствует, однако все приведённые утверждения относительно ближнего порядка остаются верными.

Как было отмечено ранее, на фазовой диаграмме имеются области с аномальным температурным поведением корреляционных функций при фиксированных значениях  $\varphi$  (абсолютное значение коррелятора растёт при увеличении температуры или ведёт себя немонотонно).

Например, такое аномальное поведение реализуется для коррелятора  $c_g$  от середины спин-жидкостной фазы СЖ<sup>1</sup> и вплоть до переходной ферромагнитной области, включая всю страйп-фазу и спиновую жидкость СЖ<sup>1</sup>. Аномальному поведению корреляционной функции  $c_d$  соответствуют узкие области вблизи середины спиновой жидкости СЖ<sup>1</sup> и перехода СЖ<sup>2</sup>  $\rightarrow$  ФМ. Причина аномального поведения  $c_d$  заключается в следующем. При различных температурах  $c_d(\varphi)$  меняет знак в различных точках  $\varphi$ . Нормальное температурное поведение корреляторов до пересечения оси  $\varphi$  может перейти в нормальное же их поведение только в случае попадания узла функций  $c_d$  строго на этой оси (то есть  $c_d(\varphi_0, T) = 0$  при любом значении  $T$ ). Однако в общем случае такое утверждение не является физически обоснованным.

### 3.3.3. Страйп-порядок

Наиболее интересной точкой в области страйп-порядка является точка  $\varphi = \pi/2$  ( $J_1 = 0$ ,  $J_2 = 1$ ). В этой точке решётка распадается на два невзаимодействующие подрешетки. Из Рис. 3.6 видно, что, как это и должно быть, при любой температуре  $c_d(\pi/2) = c_g(0)$ ,  $c_{2g}(\pi/2) = c_d(0)$ . Разделение решётки означает, что коррелятор  $c_g(\pi/2, T)$  строго равен нулю. Поэтому в этой точке находится узел корреляционных функций  $c_g$ , а аномальное температурное поведение коррелятора остается аномальным после пересечения оси  $\varphi$ .

В той же точке антиферромагнитная щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}(\varphi = \pi/2) = 0$  при любой температуре (см. Рис. 2.4), хотя в этой точке антиферромагнитный дальний порядок отсутствует при любой температуре, в том числе при  $T = 0$ .

Формально это следует из аналитических выражений для антиферро-

магнитной щели  $\Delta_{\mathbf{Q}}(\varphi = \pi/2) \sim J_1$ . Качественно это явление можно объяснить тем, что система становится вырожденной относительно взаимного вращения подрешеток, так что передача спиновых возбуждений соседней подрешетке может происходить без затрат энергии.

То же самое верно для точки  $\varphi = 3\pi/2$  ( $J_1 = 0$ ,  $J_2 = -1$ ). Хотя в этом случае в системе наблюдается антиферромагнитный дальний порядок при  $\varphi = 3\pi/2 + 0$  и  $T = 0$  (и ферромагнитный дальний порядок при  $\varphi = 3\pi/2 - 0$ ,  $T = 0$ ).

### 3.3.4. Ферромагнитный порядок

#### Переход СЖ<sup>2</sup> → ФМ

Как было отмечено ранее, переход СЖ<sup>2</sup> → ФМ при  $T = 0$  является непрерывным. При  $T \neq 0$ , как это видно из Рис. 3.6, в окрестности этого перехода температурная зависимость коррелятора  $c_{2g}$  является немонотонной, а температурные зависимости остальных корреляторов и спиновых щелей являются обратными. Теплоемкость (как функция  $\varphi$ ) при любой температуре имеет резкий минимум около этого перехода (Рис. 3.8

#### Переход ФМ → АФМ

Этот переход происходит при  $\varphi = 3\pi/2$ . В этой точке решётка разделяется на две невзаимодействующие подрешетки. При  $\varphi \rightarrow 3\pi/2 - 0$  отсутствует фрустрация по отношению к ферромагнитному дальнему порядку, при  $\varphi \rightarrow 3\pi/2 + 0$  — нет фрустрации по отношению к антиферромагнитному порядку. Таким образом физически очевидно, что в квантовом пределе при  $T = 0$  переход между двумя фазами является переходом первого рода, при этом не образуется спин-жидкостной фазы между областями с ферромагнитным и антиферромагнитным дальними порядками. При ненулевой температуре переход очевидно является непрерывным. Но, как можно видеть из Рис. 3.6, корреляционные функции  $c_g(\varphi)$  быстро меняют знак. Остальные корреляторы и спиновые щели демонстрируют немонотонную зависимость от  $\varphi$ , а теплоёмкость имеет острый минимум.

Заметим, что около  $\varphi = 270 + 0$  антиферромагнитная щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  экспоненциально мала вплоть до  $T \sim 0.5$ .  $\Delta_{\mathbf{Q}} \sim 10^{-4} - 10^{-5}$  for  $\Delta\varphi \sim 5^\circ$ . Из-за этого вычисления методом СССП не могут воспроизвести детального поведения корреляционных функций и теплоемкости при  $\varphi = 270 + 0$  при низких температурах.

### 3.3.5. Теплоемкость

Как можно увидеть из Рис. 3.8–Рис. 3.10 теплоёмкость стремится к нулю при любых значениях  $\varphi$  в пределе  $T \rightarrow 0$ . Это связано со стабилизацией всех корреляционных функций (и энергии) при низких температурах. При любых фиксированных значениях  $\varphi$  температурная зависимость теплоемкости, как это и должно быть, имеет максимум, высота и положение которого может варьироваться (см. Рис. 3.9, Рис. 3.10).

Также из Рис. 3.8 видно, что у функции  $C_V(\varphi)$  всегда имеется локальный минимум внутри областей с дальним порядком (АФМ, страйп и ФМ), для не очень больших значений  $T$ . Это связано с тем, что корреляторы, а следовательно и энергия системы, в этих областях слабо зависят от  $\varphi$ . Эти минимумы соответствуют локальным минимумам энергии  $E(\varphi)$ .

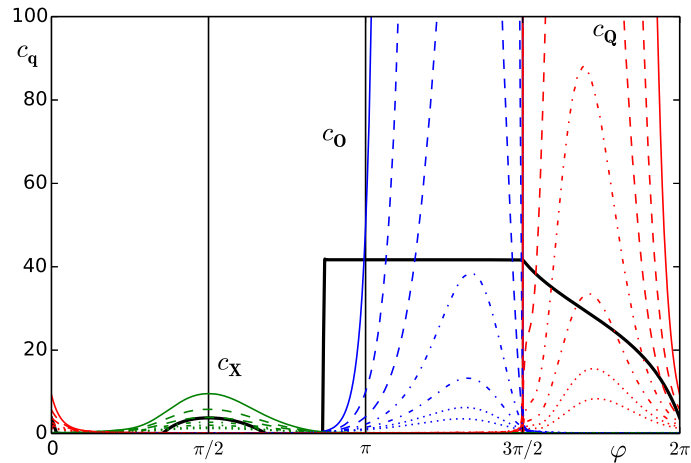
У функции  $C_V(\varphi)$  есть три локальных минимума, которые соответствуют локальным максимумам энергии  $E(\varphi)$ . Эти минимумы расположены в областях значительной конкуренции ближних порядков, где корреляторы быстро перестраиваются. Зависимости теплоёмкости системы от температуры в этих точках и симметрично расположенных соседних точках показаны на Рис. 3.9, Рис. 3.10.

На Рис. 3.9 приведены температурные зависимости теплоемкости для  $\varphi$  внутри упорядоченных (при  $T = 0$ ) фаз — страйп, ФМ, и АФМ.

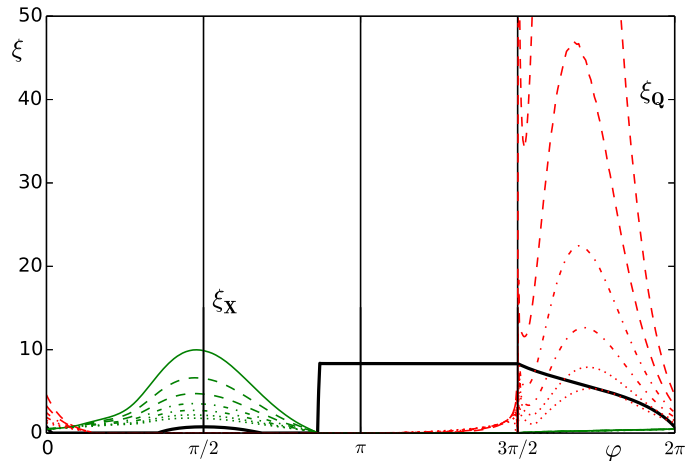
На Рис. 3.10 приведены температурные зависимости теплоемкости для  $\varphi$  в областях сильной фрустрации, где наблюдается сильная конкуренция ближних порядков.

На Рис. 3.11 приведены зависимости пиков в структурном факторе  $c_{\mathbf{q}}$  в симметричных точках  $\mathbf{O}$ ,  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Q}$  от параметра  $\varphi$  при различных значениях температуры. Отметим, что наличие пиков в структурном факторе при ненулевой температуре отвечает существованию соответствующего мотива в ближнем порядке.

Формально по характеру пика  $c_{\mathbf{q}}$  может быть вычислена корреляционная длина  $\xi$ , соответствующая конкретному виду дальнего порядка. На Рис. 3.12 приведены формально посчитанные корреляционные длины для наиболее интересных случаев: спинового порядка типа страйп ( $\xi_{\mathbf{X}}$ ) и неелевского ( $\xi_{\mathbf{Q}}$ ). Отметим, что пик функций  $\xi_{\mathbf{Q}}$  около точки  $\varphi = 3\pi/2$  связан с формальным приближением соответствующего пика в структурном факторе лоренцианом. В действительности неелевский ближний порядок



**Рис. 3.11.** Зависимости от параметра  $\varphi$  для пиков структурного фактора  $c_q$  в симметричных точках **O** (синим цветом), **X** (зелёным цветом) и **Q** (красным цветом). Сплошные линии соответствуют температуре  $T = 0.3$ ; штрихованные —  $T = 0.4, 0.5$ ; штрих-пунктирные —  $T = 0.6, 0.7$ ; пунктирные —  $T = 0.8, 0.9$ . Жирная сплошная линия отвечает конденсатной функции при  $T = 0$ , приведённой для удобства в изменённом масштабе.



**Рис. 3.12.** Зависимости от параметра  $\varphi$  для корреляционных длин  $\xi_X$  (зелёным цветом) и  $\xi_Q$  (красным цветом). Сплошные линии соответствуют температуре  $T = 0.3$ ; штрихованные —  $T = 0.4, 0.5$ ; штрих-пунктирные —  $T = 0.6, 0.7$ ; пунктирные —  $T = 0.8, 0.9$ . Жирная сплошная линия отвечает конденсатной функции при  $T = 0$ , приведённой для удобства в изменённом масштабе.

около этой точки очень слаб, на что указывает зануление в этой точке структурного фактора в антиферромагнитной точке  $c_{\mathbf{Q}}$  и равенство нулю корреляционной функции  $c_g$ . Аналогичный пик наблюдается и около точки  $\varphi = \pi/2$ , однако он удалён, чтобы не загромождать рисунок.

### 3.3.6. Возможность введения «настроечных» параметров

В данной главе все вычисления приведены в приближении среднего поля, без каких-либо настроечных параметров. Настройка СССП обычно проводится путём манипуляций с вершинными поправками или учёт сложной структуры функций Грина, то есть рассмотрение поляризационного оператора (в частности, учёт затухания спиновых возбуждений).

Такие усложнения метода конечно же повлияют на результаты, в первую очередь при низких температурах. При этом результаты будут сильно отличаться количественно.

Из Рис. 3.5 можно увидеть, что даже простой учёт затухания в рамках функции Грина

$$G_{\gamma}^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma} \quad (3.12)$$

( $\gamma$  — параметр затухания) значительно смещает границы спин-жидкостной фазы между АФМ и страйп фазами.

Тем не менее, приведённые оценки и сравнение доступных результатов подтверждают, что разумная степень подстройки метода не приводит к топологическим изменениям фазовой диаграммы.

---

## ГЛАВА 4

### Учёт затухания спиновых возбуждений

---

#### § 4.1. Выход за приближение среднего поля и простейший учет затухания

В рамках метода СССП, следуя [37, 81, 82, 92], можно с помощью метода неприводимых функций Грина [93, 94] (или метода функций памяти [95–97]) вывести формально точное выражение для функции Грина  $\langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$ . Оно имеет вид

$$\begin{aligned} G(\mathbf{q}, \omega) &= -\chi(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - M(\mathbf{q}, \omega)} = \\ &= \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma(\mathbf{q}, \omega)} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Здесь:  $\omega_{\mathbf{q}}$  (спектр спиновых возбуждений) и  $F_{\mathbf{q}}$  имеют тот же вид, что и в приближении среднего поля (2.7), (2.8), а  $M(\mathbf{q}, \omega) = M' + iM''$  — Фурье-образ новой сложной функции Грина, аналитические свойства которой такие же, как у  $G(\mathbf{q}, \omega)$ .

$M(\mathbf{q}, \omega)$  — фурье-компонента некоторой новой комплексной функции, имеющей такие же аналитические свойства, как и восприимчивость. Функция  $M(\mathbf{q}, \omega)$  отвечает трехузельной неприводимой запаздывающей функции Грина и описывает распад спиновой волны на три спиновые волны (или эффективный распад спинового возбуждения на электронное и дырочное возбуждения в случае  $t - J$  модели). Последнее выражение для  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  в (4.1) более удобно для анализа, поскольку явно учитывает, что  $M''(\mathbf{q}, \omega) = -\omega\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  является нечетной функцией  $\omega$  и легко позволяет для приближенного  $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  добиться выполнения правила сумм. Параметр  $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 - M'_{\mathbf{q}}$  дает эффективный спектр спиновых волн, перенормированный функцией  $M'(\mathbf{q}, \omega)$ . Здесь мы пренебрегаем зависимостью  $M'(\mathbf{q}, \omega)$  от  $\omega$ . Преимущество второй формы для восприимчивости в том, что она легко позволяет для приближенного  $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  добиться выполнения правила сумм.

Числитель  $F_{\mathbf{q}}$  и спектр спин-волновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  выражаются



через параметр фрустрации  $p$  и конечное число спин-спиновых корреляционных функций, которые должны вычисляться самосогласованно.

Функции  $F_{\mathbf{q}}$  и  $\omega_{\mathbf{q}}$  обращаются в ноль при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ . В случае  $J_1$ - $J_2$  модели в области малых фрустраций в пределе  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$  числитель  $F_{\mathbf{q}}$  стремится к некоторой положительной константе  $F_{\mathbf{Q}}$ , а спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}^2 \approx \Delta^2 + c^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2$  содержит щель  $\Delta \equiv \omega_{\mathbf{Q}}$ . Если мы учитываем  $M'(\mathbf{q}, \omega)$ , мы должны использовать перенормированную щель  $\tilde{\Delta}$ . В области  $\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}$  спиновая восприимчивость  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  имеет вид

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{\chi_{\mathbf{Q}}}{1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - \omega^2 \xi^2 / c^2 - i\omega / \omega_{sf}},$$

$$\chi_{\mathbf{Q}} = \frac{F_{\mathbf{Q}}}{c^2} \xi^2, \quad (4.2)$$

где мы ввели корреляционную длину  $\xi = c / \tilde{\Delta}$  и параметр  $\omega_{sf} = \tilde{\Delta}^2 / \gamma(\mathbf{Q}, \tilde{\Delta})$ , который представляет собой характерный масштаб энергий для АФМ флуктуаций. Аналогичная форма феноменологической спиновой восприимчивости используется в теории почти антиферромагнитной ферми-жидкости [98, 99]. Вблизи страйп-фазы соответствующие разложения должны проводиться около точки  $\mathbf{X}$ .

В случае  $J_1$ -модели  $M(\mathbf{q}, \omega)$  определяется трехузельной неприводимой функцией Грина  $\langle \delta b_{\mathbf{q}}^z | \delta b_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$ , с оператором  $\delta b_{\mathbf{q}}^z$  вида [92]

$$\delta b_{\mathbf{q}}^z = N^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{r}, \alpha, \mathbf{g}, \mathbf{g}' \\ \mathbf{g}' \neq \mathbf{g}, \alpha \neq z}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} [-(S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\alpha})^{irr} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}'}^z +$$

$$+ (S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}'}^{\alpha})^{irr} S_{\mathbf{r}}^z - (S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}-\mathbf{g}'}^{\alpha})^{irr} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^z +$$

$$+ (S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\alpha})^{irr} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}-\mathbf{g}'}^z]$$

где для неприводимой части приняты обозначения  $(S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}'}^{\alpha})^{irr} = S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}'}^{\alpha} - \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}'}^{\alpha} \rangle$ . Мнимая часть  $M(\mathbf{q}, \omega)$  выражается как

$$M''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\pi}{F_{\mathbf{q}} N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \int d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \delta(\omega - \sum_{i=1}^3 \omega_i) \times$$

$$m(\omega_1) m(\omega_2) m(\omega_3) (1 - e^{\beta\omega}) \Theta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3}^2 \times$$

$$G''(\mathbf{k}_1, \omega_1) G''(\mathbf{k}_2, \omega_2) G''(\mathbf{k}_3, \omega_3)$$

$$\begin{aligned} \Theta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} &= 16N^{-1} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} \times \\ & [(-\beta_g(\mathbf{k}_2)\beta_g(\mathbf{k}_3) + \beta_g(\mathbf{k}_1)\beta_g(\mathbf{k}_2) - \\ & - \beta_g(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)\beta_g(\mathbf{k}_2) + \beta_g(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)\beta_g(\mathbf{k}_3)) - \\ & - 4^{-1} (\beta_g(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - \beta_g(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) - \beta_g(\mathbf{k}_3) + \beta_g(\mathbf{k}_2))] \end{aligned}$$

Выражение для  $M''(q, \omega)$  в случае фрустрированной модели должно быть более громоздким, и, насколько нам известно, явный вид его пока не получен. Сложности прямого вычисления поляризационного оператора также заключаются в том, что входящая в него функция Грина должна вычисляться самосогласованным образом.

В альтернативных подходах вычисление мнимой части поляризационного оператора также затруднительно, известны только некоторые асимптотики для нефрустрированной модели при  $T \rightarrow 0$  в рамках двухподрешеточного формализма Дайсона-Малеева [100].

Таким образом, последовательное вычисление  $M(\mathbf{q}, \omega)$  наталкивается на существенные математические трудности [92]. Поэтому приходится прибегать к полуфеноменологическому рассмотрению.

Остановимся также на широко используемом феноменологическом виде спиновой восприимчивости  $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$  [101–103], так называемую восприимчивость для сильно затухающих (предемпфирванных) магнонов

$$\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-F_{\mathbf{q}}/\gamma(\mathbf{q}, \omega)}{i\omega - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2/\gamma(\mathbf{q}, \omega)} \equiv \frac{B(\mathbf{q}, \omega)}{i\omega - \Omega(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.3)$$

Эта форма восприимчивости возникает из (4.1), если пренебречь  $\omega^2$  в знаменателе. Мнимые части восприимчивостей (4.1) и (4.3) разные. Они близки, если справедливо неравенство

$$\omega^2 |\omega^2 - 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2| \ll \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^4 + \omega^2 \gamma^2(\mathbf{q}, \omega) \quad (4.4)$$

Неравенство (4.4) заведомо выполняется в области частот  $\omega^2 \approx 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2$ . Однако, в той области значений  $\omega$ , где неравенство (4.4) не выполняется, форма (4.3) дает  $\chi''_{so}(\mathbf{q}, \omega) < \chi''(\mathbf{q}, \omega)$  (при  $\omega^2 < 2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2$ ). Это приводит к тому, что при рассмотрении кинетики носителей в допированном АФМ матрица рассеяния  $C_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$  может существенно отличаться для восприимчивостей  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  и  $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$  [88]. Тогда значения сопротивления  $\rho_{so}$ , вычисленное с использованием  $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$ , может оказаться значительно меньше  $\rho$ , найденного с использованием  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ .

Используя  $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$  при рассмотрении почти АФМ ферми-жидкости, вводят довольно большое число предположений и феноменологических параметров. Предполагают, что величина  $B = F_{\mathbf{q}}/\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  является константой и  $\Omega_{\mathbf{q}} = \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2/\gamma(\mathbf{q}, \omega)$  не зависит от  $\omega$  [101, 102]. Функцию  $\Omega_{\mathbf{q}}(T)$  параметризуют в виде  $\Omega_{\mathbf{q}} = T^* + \alpha T + \omega_D \psi_{\mathbf{q}}$  с фиксированными параметрами  $T^*$ ,  $\alpha$ ,  $\omega_D$ . Функцию  $\psi_{\mathbf{q}}$  представляют как  $\psi_{\mathbf{q}} = 2 + \cos(q_x a) + \cos(q_y a)$  или  $\psi_{\mathbf{q}} = (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2/2$ . Значения параметров  $T^*$ ,  $\alpha$  и  $\omega_D$  обычно выбираются из условия близости температурной зависимости сопротивления  $\rho_{so}(T)$  к экспериментальному. Отметим, что даже в предположении постоянного значения затухания  $\gamma$  функция  $\Omega_{\mathbf{q}}$  нетривиально связана со спектром  $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}} = \sqrt{\gamma \Omega_{\mathbf{q}}}$ . Это не позволяет отождествлять  $\Omega_{\mathbf{q}}$  со спектром спиновых флуктуаций.

Другим недостатком  $\chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$  (4.3) (с параметрами  $B$  и  $\Omega_{\mathbf{q}}$  не зависящими от частоты  $\omega$ ) является то, что оно не удовлетворяет правилу сумм (2.11), т.к. для  $\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{so}(\mathbf{q}, \omega)$  интеграл по  $\omega$  в (2.11) расходится на верхнем пределе.

Ниже используется приближение, в котором учитывается только мнимая часть  $M(\mathbf{q}, \omega)$  в рамках выражения  $M''(\mathbf{q}, \omega) = -\omega\gamma$ , то есть  $\gamma$  не зависит от  $\mathbf{q}$  и  $\omega$ :

$$\begin{aligned} G(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma}, \\ G''(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{F_{\mathbf{q}}\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + \omega^2\gamma^2}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

при этом, как и в случае среднего поля, проводится полное самосогласование при каждом значении фрустрации и температуры.

## § 4.2. Роль затухания в формировании дальнего порядка и спиновой щели

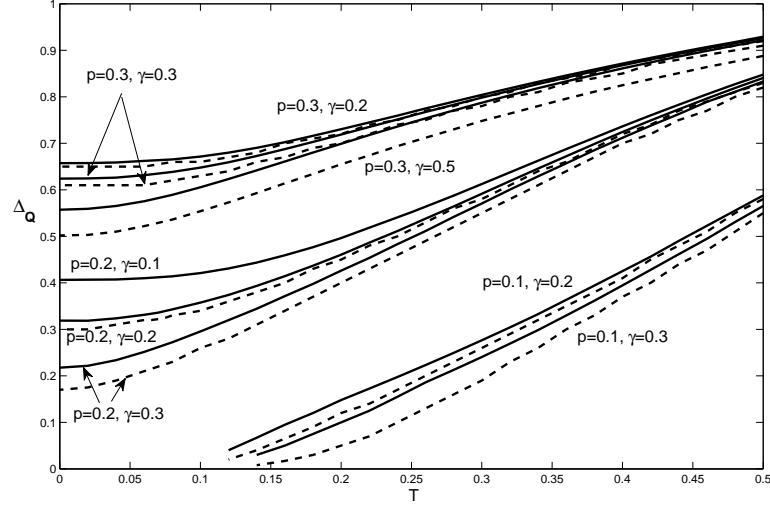
Обсудим сразу значения параметра затухания  $\gamma$  (4.5), принимаемые как в предыдущих рассмотрениях, так и в настоящей работе. Некоторые указания на порядок величины  $\gamma$  во фрустрированной спиновой модели можно получить, анализируя доступные результаты рассмотрения  $t - J$  модели [104, 105]. При этом предполагается, что качественно увеличение допирования в модели с носителями соответствует увеличению фрустрации в чисто спиновой модели. Мы рассматриваем систему в спин-жидкостном

состоянии. Поэтому следует сравнивать затухание с данными  $t - J$  модели при таком допировании, когда дальний порядок отсутствует. В работе [105] соответствующее допирование  $\delta = 0.15$  приводит к минимальному значению  $\gamma \sim 0.7J$ , близкому к значениям, принимаемым нами ниже. Отметим, что к значениям  $\gamma > 0.7J$  приводит экстраполяция к нулю температурного поведения  $\gamma(T)$  из данных кластерной диагонализации [104]. Детальный анализ других доступных данных приводит к диапазону оценок для  $\gamma$  в моделях с допированием  $\gamma \sim 0.4\text{--}1.0$ . Рассмотрение спиновых свойств плоскости  $\text{CuO}_2$  на основе (4.5) приводит к хорошему согласию с данными по нейтронным экспериментам и поведением кинетических коэффициентов в ВТСП, при этом даёт аналогичный диапазон  $\gamma$  [88, 106–108], и приводят также к диапазону  $\gamma \lesssim J$ . Случаю больших  $\gamma \simeq 1.0J$  может отвечать экспериментальная ситуация при большом рассеянии спиновых флуктуаций на примесях.

Зависимость эффективной намагниченности  $m = \sqrt{3c_0^{N,S}}$  от параметра фрустрации  $p$ , представленная на Рис.2.2, показывает, что с возрастанием  $\gamma$  область спин-жидкостной фазы SRO сужается. Существенно, что относительно среднеполевого поведения с  $p_0^N(\gamma = 0) \approx 0.1$ , точка перехода из NLRO в SRO может сдвигаться до значения  $p_0^N(\gamma = 1.0) \approx 0.25$ , что хорошо совпадает с кластерными расчетами [109]. Это позволяет считать, что при подходе к точке фазового перехода  $\gamma$  увеличивается с увеличением фрустрации, имеется в виду, что при нулевой фрустрации  $\gamma$  мало или равно нулю.

Вообще говоря, считается, что при  $T = 0$  в модели  $J_1$  затухание при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  отсутствует. Однако если учесть, что при вычислении  $M(\mathbf{q}, \omega)$  в соответствующие неприводимые одномагнотные функции Грина следует подставлять самосогласованное решение, то это утверждение является неочевидным. В предположении, что при  $T = 0$ ,  $p = 0$  существует малое, но конечное затухание, можно в рамках  $G(\mathbf{q}, \omega)$  (4.5) одновременно удовлетворить условиям, что  $c_0^N$  и средняя энергия одновременно с высокой точностью совпадают с данными, полученными методом Монте-Карло (см., например, обсуждения в [37]).

Зависимость корреляционных функций  $C_g$  и  $C_d$  от  $p$  (см. Рис.2.4) показывает на возможность сильного (вплоть до 30%) изменения величин корреляторов от фрустрации. Однако наиболее разительным яв-



**Рис. 4.1.** Зависимость спиновой щели  $\Delta_{\mathbf{Q}} = \omega_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}$  ( $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ) от температуры при различных значениях  $\gamma$  и  $p = 0.1, 0.2, 0.3$  — сплошные линии. Пунктирные линии — то же для щели  $\tilde{\Delta}_{\mathbf{Q}}$ , определенной по положению максимума  $\chi''(\mathbf{Q}, \omega)$ .

ляется изменение зависимости спиновой щели при включении затухания. На Рис.4.1 представлена зависимость спиновой щели от  $T$  в АФМ точке  $\mathbf{Q}$  для различных значений  $\gamma$  и  $p$ . Отметим прежде всего, что величину щели корректно определять не по значению самосогласованного спектра  $\Delta_{\mathbf{Q}} = \omega_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}$ , а по положению максимума пика  $\chi''(\mathbf{Q}, \omega)$  по  $\omega$ , т.е.  $\tilde{\Delta}_{\mathbf{Q}} = \max \chi''(\mathbf{Q}, \omega)$ . Вид  $G''(\mathbf{q}, \omega)$  (4.5) приводит к тому, что всегда  $\omega_{\mathbf{q}} > \tilde{\omega}_{\mathbf{q}} = \max \chi''(\mathbf{q}, \omega)$ .

Проведенные рассуждения показывают, что рост величины затухания приводит к уменьшению спиновой щели в области SRO фазы и к увеличению конденсата в LRO фазах, что является нетривиальным, с нашей точки зрения. То есть рост  $\gamma$  способствует усилению дальнего порядка. Продемонстрируем на примере LRO фазы при  $T = 0$ , что это обстоятельство является следствием существования правила сумм для  $G(\mathbf{q}, \omega)$ , т.е. констрейнта,  $\langle S_{\mathbf{n}}^{\alpha} S_{\mathbf{n}}^{\alpha} \rangle = 1/4$ . Для функции Грина  $G(\mathbf{q}, \omega)$  (4.5) констрейнт имеет вид

$$\langle S_{\mathbf{n}}^{\alpha} S_{\mathbf{n}}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{4} = I(\gamma) + c_0(\gamma);$$

$$I(\gamma) = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{+\infty} d\omega \iint d\mathbf{q} \frac{F_{\mathbf{q}}(\gamma)\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2(\gamma))^2 + \omega^2\gamma^2} \quad (4.6)$$

Покажем, что  $\frac{dc_0(\gamma)}{d\gamma} = -\frac{dI(\gamma)}{d\gamma} > 0$ . Для этого представим  $\frac{dI(\gamma)}{d\gamma}$  в виде

$$I'_{\gamma} = \frac{dI(\gamma)}{d\gamma} = I'_1 + I'_2;$$

$$I'_1 = \left. \frac{dI(\gamma_1; \gamma)}{d\gamma_1} \right|_{\gamma_1=\gamma}; \quad I'_2 = \left. \frac{dI(\gamma; \gamma_2)}{d\gamma_2} \right|_{\gamma_2=\gamma}$$

$$I(\gamma_1; \gamma_2) = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{+\infty} d\omega \int_{\mathbf{q}} \frac{F_{\mathbf{q}}(\gamma_2)\omega\gamma_1}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2(\gamma_2))^2 + \omega^2\gamma_1^2} d\mathbf{q}; \quad (4.7)$$

Здесь, в (4.7),  $F_{\mathbf{q}}(\gamma_2)$  и  $\omega_{\mathbf{q}}(\gamma_2)$  отвечают самосогласованным величинам, вычисленным при затухании  $\gamma_2$ . Производная  $I'_1(\gamma)$  соответствует дифференцированию по явной зависимости  $I(\gamma)$ , а  $I'_2(\gamma)$  — дифференцированию по неявной зависимости  $I(\gamma)$  от  $\gamma$  через  $\omega_{\mathbf{q}}(\gamma)$  и  $F_{\mathbf{q}}(\gamma)$ . Прямые расчеты показывают, что в LRO фазах  $\left| \frac{I'_2}{I'_1} \right| \lesssim 0.2$ . Это означает, что для нахождения  $I'$  достаточно ограничиться первым членом  $I'_1$

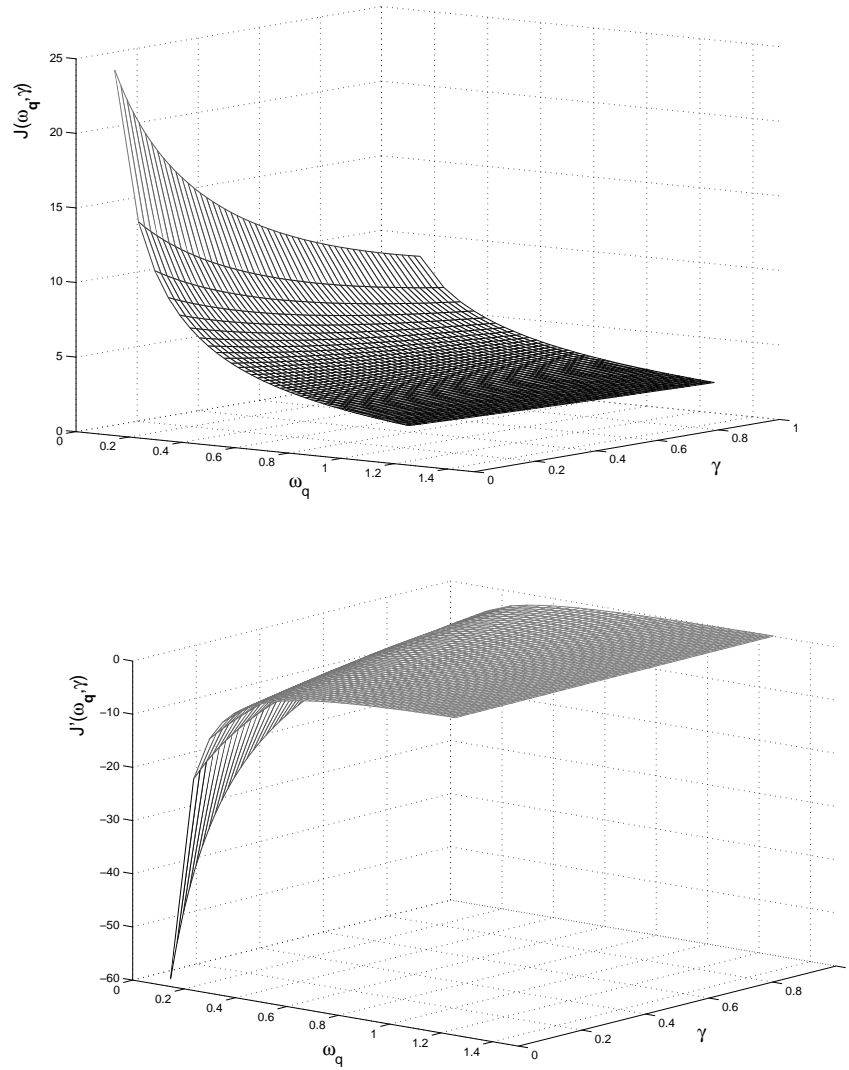
$$I'_1 = \frac{1}{4\pi^3} \int_0^{+\infty} d\omega \int_{\mathbf{q}} d\mathbf{q} F_{\mathbf{q}} \omega \frac{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 - \omega^2\gamma^2}{[(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + \omega^2\gamma^2]^2}$$

Для того, чтобы убедиться, что  $I' < 0$  при любых значениях  $\gamma$ , достаточно рассмотреть выражение для подинтегральной функции  $J(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma)$  в (4.6) и ее производной при фиксированном значении  $\mathbf{q}$ .

$$\begin{aligned}
J(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma) &= \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + \omega^2\gamma^2}; \\
J'_\gamma(\omega_{\mathbf{q}}; \gamma) &= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dx \frac{[(x - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 - x\gamma^2]}{[(x - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + x\gamma^2]^2}; \\
J(2\omega_{\mathbf{q}} < \gamma) &= -\frac{1}{2\sqrt{\gamma^2 - 4\omega_{\mathbf{q}}^2}} \ln \left| \frac{\gamma^2 - 2\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma\sqrt{\gamma^2 - 4\omega_{\mathbf{q}}^2}}{\gamma^2 - 2\omega_{\mathbf{q}}^2 + \gamma\sqrt{\gamma^2 - 4\omega_{\mathbf{q}}^2}} \right| \\
J(2\omega_{\mathbf{q}} > \gamma) &= \frac{1}{\sqrt{4\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2}} \left( \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\gamma^2 - 2\omega_{\mathbf{q}}^2}{\gamma\sqrt{4\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2}} \right)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Анализ  $J(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma)$  и  $J'_\gamma(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma)$  — поведение этих величин представлено на Рис.4.2 — показывает, что при любых  $\omega_{\mathbf{q}}$  и  $\gamma$  выполняется  $J'_\gamma(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma) < 0$ , а, следовательно,  $\frac{dc_0(\gamma)}{d\gamma} > 0$ . Качественно это можно понять, если учесть, что при возрастании  $\gamma$  вклад (4.6) от интегрирования по  $d\omega$  обрезается нижним пределом. Если бы, например, под интегралом стоял лоренциан  $\frac{\Gamma}{(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + \Gamma^2}$  и интегрировался бы по  $\omega$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ , то ответ не зависел бы от  $\Gamma$ ; при интегрировании от нуля до бесконечности очевидно, что интеграл уменьшается с ростом  $\Gamma$ . Конечно, в нашем случае подинтегральное выражение в  $J(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma)$  отличается от лоренциана, однако качественно результат остается тем же: рост  $\gamma$  уменьшает величину  $J(\omega_{\mathbf{q}}, \gamma)$ .

Увеличение конденсата в LRO фазе при росте  $\gamma$  в случае  $T = 0$  качественно соответствует уменьшению спиновой щели при  $T > 0$ . На Рис.4.1 приведена зависимость спиновой щели  $\Delta_{\mathbf{Q}} = \omega_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}$  ( $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ) от температуры при различных значениях  $\gamma$  и  $p$ . Как видно, при фиксированном значении фрустрации щель монотонно убывает с ростом  $\gamma$  в широкой области температур. Там же приведено рассчитанное поведение спиновой щели  $\tilde{\Delta}_{\mathbf{Q}}$ , определенное по максимуму функции  $\chi''(\mathbf{Q}, \omega)$ , которую измеряют в нейтронных экспериментах. Отметим, что благодаря отличию  $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$  от лоренциана, всегда  $\tilde{\Delta}_{\mathbf{Q}} < \Delta_{\mathbf{Q}}$ . Как видно из Рис.4.1,  $\tilde{\Delta}_{\mathbf{Q}}$  также уменьшается при увеличении  $\gamma$ , что отвечает усилению дальнего порядка, то есть увеличению корреляционной длины. Это обстоятельство связано с констрейнтом и существенно отличает систему спиновых флуктуаций от чисто бозевской системы, например, фононов. Для фононной подсистемы условие подобное



*Рис. 4.2.* Поведение интегралов  $J(\omega_q, \gamma)$  и  $J'_\gamma(\omega_q, \gamma)$  (4.8), отражающее увеличение конденсатной части с увеличением  $\gamma$  (см. текст).



спиновому констрейнту, соответствовало бы требованию, чтобы среднее от квадрата смещения узла оставалось постоянным и не зависило бы от температуры. Такого условия у фононной подсистемы нет, а правило сумм для фононной функции Грина не имеет ничего общего с правилом сумм для спиновых возбуждений. Что касается зануления спектра в некоторой отличной от нуля точке зоны Бриллюэна, то такая ситуация для фононной системы может реализовываться вблизи структурного фазового перехода.

---

## ГЛАВА 5

### Фрустрированная J1-J2-J3 модель Гейзенберга

---

#### § 5.1. Спектр спиновых возбуждений для J1-J2-J3 модели

Приведем выражения для  $F_{\mathbf{q}}$  и  $\omega_{\mathbf{q}}^2$  в случае полной  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели, введя следующие гармоники:

$$\begin{aligned}
 2\beta_g &= \cos(q_x) + \cos(q_y), \\
 2\beta_d &= \cos(q_x + q_y) + \cos(q_x - q_y), \\
 2\beta_{ng} &= \cos(nq_x) + \cos(nq_y), \\
 2\beta_{nd} &= \cos(nq_x + nq_y) + \cos(nq_x - nq_y), \\
 4\beta_{gd} &= \cos(q_x + 2q_y) + \cos(q_x - 2q_y) + \\
 &\quad + \cos(2q_x + q_y) + \cos(2q_x - q_y), \\
 4\beta_{ggd} &= \cos(q_x + 3q_y) + \cos(q_x - 3q_y) + \\
 &\quad + \cos(3q_x + q_y) + \cos(3q_x - q_y).
 \end{aligned}$$

Тогда для  $F_{\mathbf{q}}$  и  $\omega_{\mathbf{q}}^2$  можно получить

$$F_{\mathbf{q}} = 8 \sum_{b=g,d,2g} J_b(\beta_b - 1)C_b, \quad J_g = J_1, \quad J_d = J_2, \quad J_{2g} = J_3$$

$$\begin{aligned}
\omega_q^2 = & -8\{J_1^2[\tilde{C}_g(3\beta_g - \beta_{2g} - 2\beta_d) - \\
& - (\tilde{C}_{2g} + 2\tilde{C}_d + 1/4)(1 - \beta_g)] + \\
& + J_2^2[\tilde{C}_d(3\beta_d - \beta_{2d} - 2\beta_{2g}) - (\tilde{C}_{2d} + 2\tilde{C}_{2g} + 1/4)(1 - \beta_d)] + \\
& + J_3^2[\tilde{C}_{2g}(3\beta_{2g} - \beta_{4g} - 2\beta_{2d}) - \\
& - (\tilde{C}_{4g} + 2\tilde{C}_{2d} + 1/4)(1 - \beta_{2g})] + \\
& + J_1J_2[\tilde{C}_g(4\beta_d - 2\beta_g - 2\beta_{gd}) - (2\tilde{C}_g + 2\tilde{C}_{gd})(1 - \beta_g) + \\
& + \tilde{C}_d(2\beta_g - 2\beta_{gd}) - (2\tilde{C}_g + 2\tilde{C}_{gd})(1 - \beta_d)] + \\
& + J_1J_3[\tilde{C}_g(4\beta_{2g} - \beta_g - 2\beta_{gd} - \beta_{3g}) - \\
& - (\tilde{C}_g + 2\tilde{C}_{gd} + \tilde{C}_{3g})(1 - \beta_g) + \\
& + \tilde{C}_{2g}(3\beta_g - 2\beta_{gd} - \beta_{3g}) - (\tilde{C}_g + 2\tilde{C}_{gd} + \tilde{C}_{3g})(1 - \beta_{2g})] + \\
& + J_2J_3[\tilde{C}_d(4\beta_{2g} - 2\beta_d - 2\beta_{ggd}) - (2\tilde{C}_d + 2\tilde{C}_{ggd})(1 - \beta_d) + \\
& + \tilde{C}_{2g}(2\beta_d - 2\beta_{ggd}) - (2\tilde{C}_d + 2\tilde{C}_{ggd})(1 - \beta_{2g})] \}
\end{aligned}$$

## § 5.2. Фазовая диаграмма J1-J2-J3 модели

Как отмечено выше, включение третьего обмена, то есть рассмотрение  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели, представляет большой интерес, как теоретический, так и экспериментальный. В такой модели уже в классическом пределе реализуются четыре фазы, в том числе две несоизмеримые. В квантовом же пределе возле границ этих фаз должна возникать область спиновой жидкости, состояния без дальнего порядка.

Разнообразие фаз с дальним порядком и различных состояний спинжидкостной фазы делает удобным пользоваться устоявшейся в численных работах терминологией [71, 72, 109].

В этой терминологии фазы с дальним порядком неелевского и страйп-типа обозначаются, соответственно, как LRO C( $\pi$ ,  $\pi$ ) и LRO C( $\pi$ , 0; 0,  $\pi$ ), а ферромагнитному дальнему порядку соответствует обозначение LRO C(0, 0). Символ C происходит от коллинеарных классических аналогов, координаты в скобках указывают положение точек, диктующих структуры дальнего порядка.

В  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели, кроме LRO C( $\pi$ ,  $\pi$ ) и LRO C( $\pi$ , 0; 0,  $\pi$ ), обсуждаются еще два состояния с дальним порядком LRO S( $k$ ,  $k$ ) и LRO S( $k$ ,  $\pi$ ;  $\pi$ ,  $k$ ) с двумя типами геликоидального (S — spiral) несоизмеримого спинового по-

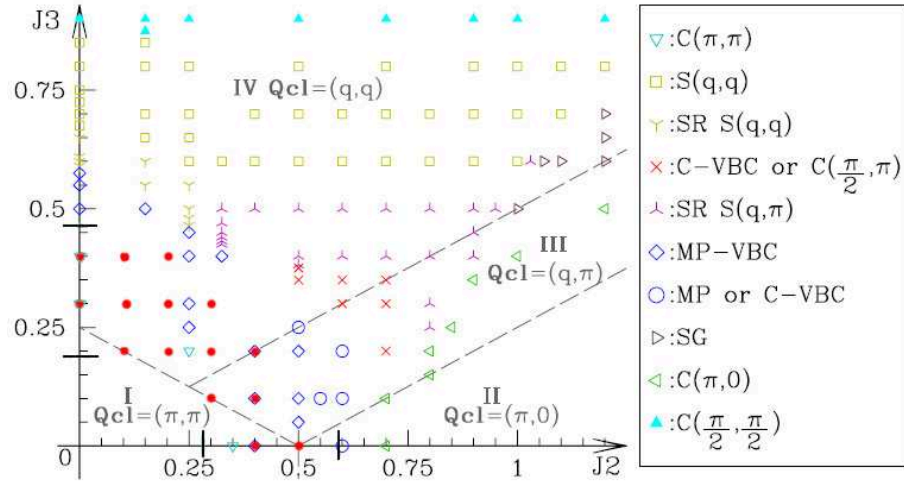
рядка. В случае ферромагнитного обмена  $J_1$  появляется ещё одна геликоидальная фаза — с дальним порядком типа LRO  $S(k, 0; 0, k)$ . Все LRO состояния являются отдельными фазами и обладают качественно различными типами дальнего порядка, который диктуется точкой  $\mathbf{q}_0$  зануления спиновой щели ( $\mathbf{q}_0 = (\pi, \pi)$ ,  $(\pi, 0; 0, \pi)$ ,  $(k, k)$ ,  $(k, \pi; \pi, k)$ ), а также  $\mathbf{q}_0 = (0, 0)$ ,  $(k, 0; 0, k)$ ). Кроме того, между состояниями с дальним порядком возникает область спиновой жидкости, для которой спин-спиновые корреляторы на бесконечности равны нулю. В соответствии с доминированием для спиновых корреляторов того или иного типа ближнего порядка (SRO), условно различают состояния SRO  $C(\pi, \pi)$ , SRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$ , SRO  $S(k, k)$  и SRO  $S(k, \pi; \pi, k)$ . В СССР все эти SRO состояния отвечают одной и той же спин-жидкостной фазе. Для спин-жидкостной фазы при приближении к границе существования какой-либо LRO фазы спиновая щель в соответствующей точке  $\mathbf{q}_0$  зоны Бриллюэна стремится к нулю (а корреляционная длина — к бесконечности).

Стандартные спин-волновые вычисления (СВВ) позволяют вести рассмотрение только в областях, где существует дальний порядок [68, 110]. В противоположность этому, в настоящей главе система рассматривается со стороны областей, где дальний порядок и конденсат  $s_0$  отсутствуют, а состояния с дальним порядком диагностируются только на фазовых границах.

Алгоритм нахождения функции Грина аналогичен обсуждавшемуся выше, выражение для  $\omega_{\mathbf{q}}^2$ , которое содержит спин-спиновые корреляторы на первых восьми координационных сферах, приведено выше.

Результаты приводятся для значения  $\gamma = 0.6$ . Далее в этом параграфе параметр затухания  $\gamma$  приводится в единицах  $J_1 + J_2 + J_3$  (которые при  $J_3 = 0$  переходят в  $J$  для усеченной  $J_1$ - $J_2$ -модели при использовании параметра фрустрации  $p = J_2/(J_1 + J_2)$  для антиферромагнитных обменов). Отметим, что стандарт для нормировки затухания  $\gamma$  пока не устоялся). Приведенное значение  $\gamma$  дает разумное согласие с кластерными расчетами как для положения границ фаз, так и для значений энергии. Все другие энергетические параметры приводятся в единицах  $J_1$ ,  $J_1 = 1$ , как это принято в кластерных работах.

На Рис.5.1 вместе с границами классических фаз  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$ -модели (пунктирные линии) приведены результаты кластерных расчетов из работы [72] (см. рис.2 из [72]). Разные символы отвечают различным спиновым



**Рис. 5.1.** Фазовая диаграмма основного состояния для  $J_1 = 1$ . Символы справа отвечают рис.2 работы [72] и соответствуют основным состояниям, найденным точной диагонализацией кластера с 32-мя узлами. Обозначения  $C(\pi, \pi)$ ,  $C(\pi, 0)$ ,  $S(q, q)$  отвечают в настоящей работе фазам с дальним порядком LRO  $C(\pi, \pi)$ , LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  и LRO  $S(k, k)$ . Символы  $SR S(q, q)$  и  $SR S(q, \pi)$  отвечают в настоящей работе состояниям спин-жидкостной фазы SRO  $S(k, k)$  и SRO  $S(k, \pi; \pi, k)$ . Состояния с дальним порядком, обозначенные в [72]  $C(\pi/2, \pi)$  и  $C(\pi/2, \pi/2)$  в настоящей работе не рассматривались. В соответствии с [72], состояния, обозначенные остальными символами, могут носить спин-жидкостной характер с нарушением трансляционной симметрии. Пунктирные линии — классические границы фаз с дальним порядком. Дополнительно к результатам [72] жирными кружками отмечены точки, которые отвечают спин-жидкостной фазе работы [71] и для которых аналогичные состояния найдены в настоящей работе. На осях  $J_2$  и  $J_3$  длинными засечками отмечены найденные нами границы спин-жидкостной фазы

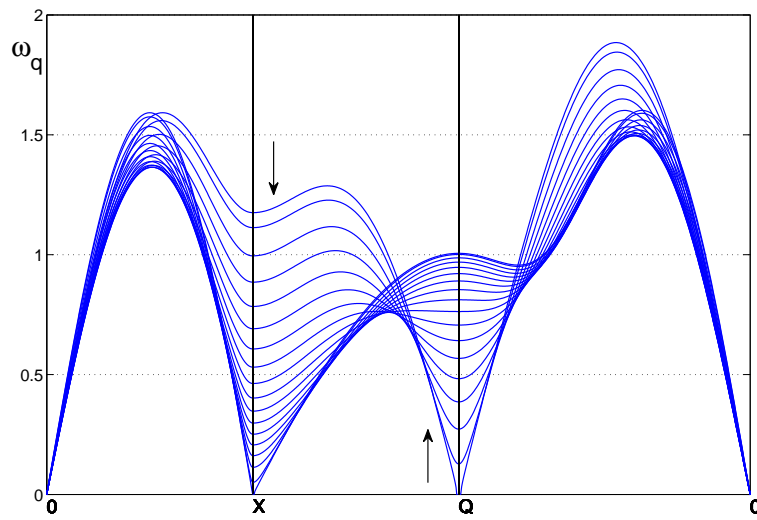
структурам в рамках принятой в [72] классификации. На том же рисунке жирными кружками показаны точки, для которых в рамках кластерного расчета работы [71] (точная диагонализация кластера из 32 узлов) известна энергия. В этих же точках в работе [71] предполагается отсутствие дальнего порядка. В настоящей работе в области этих точек находились функция Грина, спектр  $\omega_{\mathbf{q}}$  и энергия. Результаты рассмотрения в рамках СССП показывают, что в этой области система действительно находится в спин-жидкостной фазе. В частности, на Рис.5.1 на осях  $J_2$  и  $J_3$  засечками обозначены полученные в настоящей работе границы спин-жидкостной фазы.

Полученные энергии хорошо согласуются с данными кластерных расчетов [71]: расхождение в большинстве точек не превышает 10%, и только вблизи точки фазового перехода  $J_3 = 0$ ,  $J_2 = 0.5$  достигает 14%. Последнее связано с тем, что, по-видимому, эффективное затухание в этой области должно возрасти (с ростом  $\gamma$  от  $\gamma = 0.6$  до  $\gamma = 1.0$  и в этих точках расхождение не превышает 10%). Тем не менее, сравнение результатов СССП с кластерными расчетами указывают, что приближение постоянного эффективного затухания  $\gamma = 0.6$  правильно отражает поведение системы в рассматриваемой области параметров.

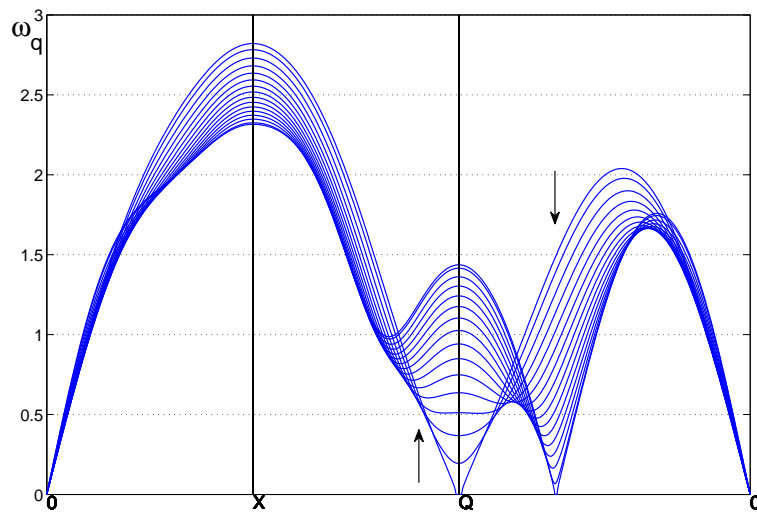
Как отмечалось, в отличие от кластерных расчетов, метод СССП позволяет определить парные корреляторы, спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  и проследить величину и положение спиновой щели в зависимости от параметров обмена. На Рис.5.2 и Рис.5.3 представлена эволюция  $\omega_{\mathbf{q}}$  вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна при изменении  $J_2$  ( $J_3 = 0$ ) — Рис.5.2, и при изменении  $J_3$  ( $J_2 = 0$ ) — Рис.5.3.

Как видно из Рис.5.2, при увеличении  $J_2$  от 0.28 до 0.60 (см. границы спин-жидкостной фазы при  $J_3 = 0$  на Рис.5.1), открывается и растет щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  в точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , это означает переход из "шахматной" фазы LRO  $C(\pi, \pi)$  в спин-жидкостное состояние SRO  $C(\pi, \pi)$ . При этом с ростом  $J_2$  уменьшается щель  $\Delta_{\mathbf{X}}$  в точках  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$ . Закрытие щели в точке  $\mathbf{X}$  означает переход из спин-жидкостного состояния SRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  в страйп-фазу LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$ .

В области малой щели  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  спин-спиновая корреляционная функция на больших расстояниях имеет основной мотив  $\langle S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{0}}^z \rangle \sim (-1)^{n_x + n_y}$  ( $\mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y$ ;  $\mathbf{g}_x = (1, 0)$ ,  $\mathbf{g}_y = (0, 1)$  — вектора ближайших соседей). В квантовой страйп-фазе LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  спин-спиновая корреляционная



**Рис. 5.2.** Эволюция спектра спиновых возбуждений вдоль симметричных направлений в рамках СССП в области спин-жидкостной фазы при движении по  $J_2$  ( $J_3 = 0$ ) от границы фазы LRO  $C(\pi, \pi)$  до границы фазы LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  ( $J_2 = 0.281 \div 0.598$ ). Стрелки указывают направление эволюции соответствующих участков спектра с ростом  $J_2$ . Параметр затухания  $\gamma = 0.6$



**Рис. 5.3.** Эволюция спектра спиновых возбуждений вдоль симметричных направлений в рамках СССП в области спин-жидкостной фазы при движении по  $J_3$  ( $J_2 = 0$ ) от границы фазы LRO  $C(\pi, \pi)$  до границы геликоидальной фазы LRO  $S(k, k)$  ( $J_3 = 0.187 \div 0.467$ ). Стрелки указывают направление эволюции соответствующих участков спектра с ростом  $J_3$ . Параметр  $\gamma = 0.6$



функция на больших расстояниях ведет себя как  $\langle S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{0}}^z \rangle \sim (-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}$ , в отличие от спин-волнового подхода, когда либо  $\langle S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{0}}^z \rangle \sim (-1)^{n_x}$ , либо  $\langle S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{0}}^z \rangle \sim (-1)^{n_y}$ .

Аналогично, как видно из Рис.5.3, при увеличении  $J_3$  от 0.19 до 0.47 ( $J_2 = 0$ ), открывается и растет щель  $\Delta_{\mathbf{Q}}$  в антиферромагнитной точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , то есть происходит переход из "шахматной" фазы LRO C( $\pi, \pi$ ) в спин-жидкостное состояние SRO C( $\pi, \pi$ ). При этом с ростом  $J_3$  уменьшается щель в несоизмеримой точке  $\mathbf{q}_0 = (k, k)$  на диагонали зоны Бриллюэна. Закрытие этой щели означает переход в геликоидальную фазу с несоизмеримым спиновым порядком LRO S( $k, k$ ).

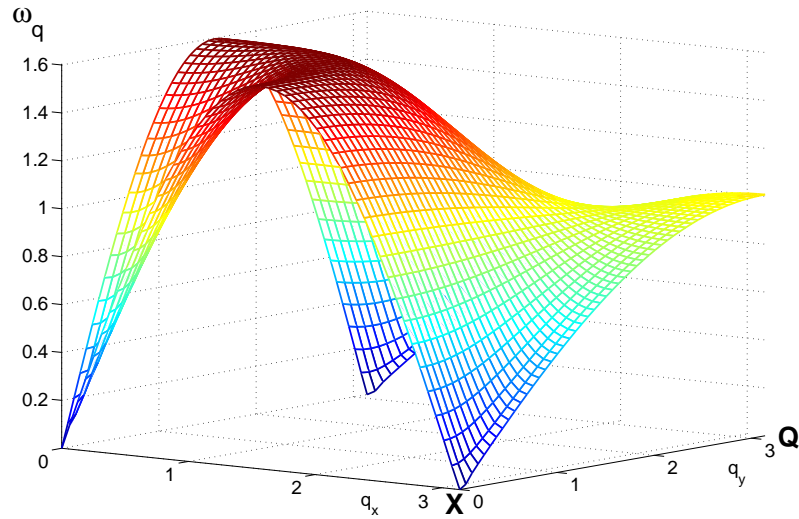
Отметим, что в точке перехода в геликоидальную фазу с дальним порядком LRO S( $k, k$ ) ( $J_3 = 0.47, J_2 = 0$ ) значение вектора  $\mathbf{q}_0$ , который задает структуру геликоида, отличается от значения  $\tilde{\mathbf{q}}_0$ , даваемого классическим пределом [68], при этом  $q_0 < \tilde{q}_0$ . Последнее неравенство сохраняется и при ненулевых  $J_2$  вдоль границы жидкость — геликоид ( $k, k$ ) (см. также [110]).

Итак, как видно из представленных рисунков, в настоящей работе при анализе спин-жидкостного состояния и его границ получены следующие фазы:

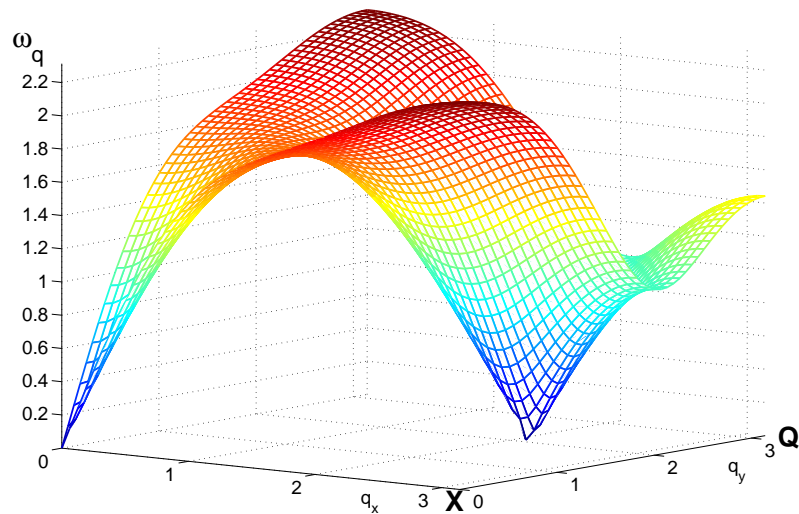
фазы с дальним порядком LRO C( $\pi, \pi$ ), LRO C( $\pi, 0; 0, \pi$ ); LRO S( $k, k$ ); в этих фазах, кроме тривиальной точки  $q = 0$ , щель в спектре спиновых возбуждений закрыта в соответствующей точке  $\mathbf{q}_0$  зоны Бриллюэна, спин-спиновый коррелятор на бесконечности отличен от нуля, а его характер определяется положением точки  $\mathbf{q}_0$ . Отметим, что все эти фазы диагностированы на их границах со спиновой жидкостью.

спин-жидкостная фаза, в которой различаются области с доминированием различного типа ближнего порядка: SRO C( $\pi, \pi$ ), SRO C( $\pi, 0; 0, \pi$ ), SRO S( $k, k$ ) и SRO S( $k, \pi; \pi, k$ ), который диктуется положением наименьшей щели в спиновом спектре.

Подчеркнем еще раз — на примере Рис.5.2, — что различие между состояниями в фазе спиновой жидкости носит условный характер. А именно, при малых отклонениях  $J_2$  от точки потери дальнего шахматного порядка щель в точке  $\mathbf{Q}$  мала и спин-спиновые корреляторы носят "шахматный" характер. При увеличении  $J_2$  щели в точках  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Q}$  сравнимы, коррелятор носит смешанный шахматный и страйп-характер. При дальнейшем увеличении  $J_2$  спиновая щель в точке  $\mathbf{X}$  мала, а в точке  $\mathbf{Q}$  — большая, и корреляторы приобретают страйп-характер.



*Рис. 5.4.* Типичный спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  на границе страйп-фазы LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  ( $J_2 = 0.6$ ,  $J_3 = 0$ ,  $\gamma = 0.6$ ). Щель закрыта в точках  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$



*Рис. 5.5.* Типичный спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  на границе геликоидальной фазы LRO  $S(k, k)$  ( $J_2 = 0$ ,  $J_3 = 0.47$ ,  $\gamma = 0.6$ ). Щель закрыта в несоизмеримой точке  $(k, k)$

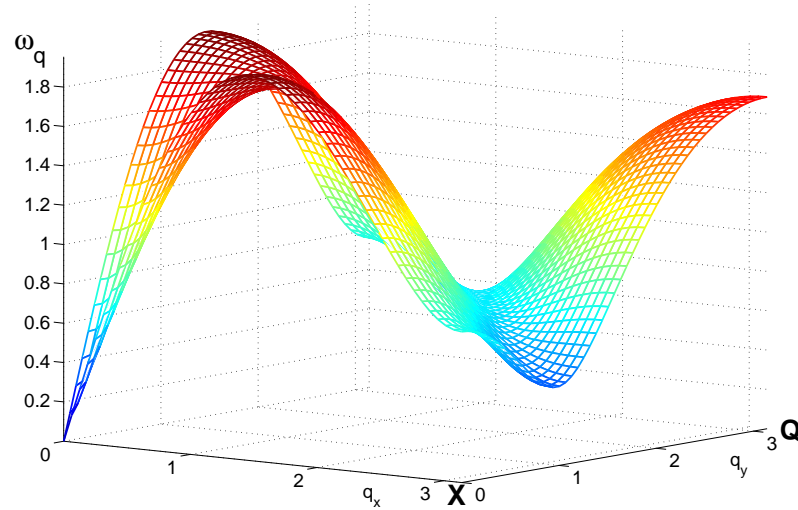
Отметим, что состояния SRO  $C(\pi, \pi)$  и SRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  в [72] не диагностированы. Напомним также, что принятый в настоящей работе метод СССР не позволяет рассматривать состояния, нарушающие трансляционную симметрию, в частности box- и columnar-состояния.

На Рис.5.4–5.5 представлены полученные в настоящей работе типичные спектры спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  на границах фаз с дальним порядком (Рис.5.4 — страйп-фаза LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$ , Рис.5.5 — геликоид LRO  $S(k, k)$ , типичный спектр в фазе LRO  $C(\pi, \pi)$  неоднократно приводился выше). Из рисунков видно, что щель в спиновом спектре закрыта в соответствующих точках зоны Бриллюэна: в точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  в LRO  $C(\pi, \pi)$ , в точках  $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$  в LRO  $C(\pi, 0; 0, \pi)$  и в несоизмеримой точке  $(k, k)$  на диагонали зоны Бриллюэна в LRO  $S(k, k)$ .

Представленные рисунки отвечают граничной ситуации, когда щель в соответствующей точке уже закрыта, а конденсат  $c_0$  еще равен нулю. Для вычисления спектров и энергий в состоянии с дальним порядком при переходе границы спиновой жидкости к уравнениям самосогласования добавляется конденсат, щель в соответствующей точке остается нулевой (и условие констрейнта  $C_0 = \langle S_0^\alpha S_0^\alpha \rangle = 1/4$  обеспечивается теперь не конечной щелью, а конечным конденсатом  $c_0$ ).

Сравнение спектров показывает, что  $\omega(\mathbf{q})$  имеет качественно различный вид в случае «шахматной», страйп и геликоидальной фаз. В частности, для геликоидальной и страйп-фазы возникают дополнительные ванхововские особенности, отвечающие почти бездисперсионному или квазиодномерному характеру спектра. В случае страйп-фазы (см. Рис.5.4) — почти бездисперсионная область находится вблизи точки  $\mathbf{Q}$ . В случае геликоидальной фазы (Рис.5.5) имеется линия, параллельная  $\mathbf{X}-\mathbf{X}$ , вдоль которой спектр бездисперсионен. Приведенные рисунки спектров дают представление о нетривиальной эволюции спектра  $\omega_{\mathbf{q}}$  в области фазовой диаграммы, отмеченной жирными кружками на Рис.5.1.

Что же касается существующей в классическом пределе четвертой фазы с дальним порядком, LRO  $S(k, \pi; \pi, k)$ , то в области  $J_2 < 2, J_3 < 2$  и при затухании  $\gamma = 0.6$  мы обнаружили только указание на ее возможное существование. В этой области СССР дает геликоид без дальнего порядка, то есть состояние с минимальной щелью в точке  $(k, \pi)$ . Характерный спектр для такого состояния приведен на Рис.5.6 ( $J_2 = 1, J_3 = 0.35, \gamma = 0.6$ ). Отметим, что в кластерных расчетах [72] геликоид  $(k, \pi)$  с дальним порядком



**Рис. 5.6.** Характерный спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  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  $(k, \pi)$

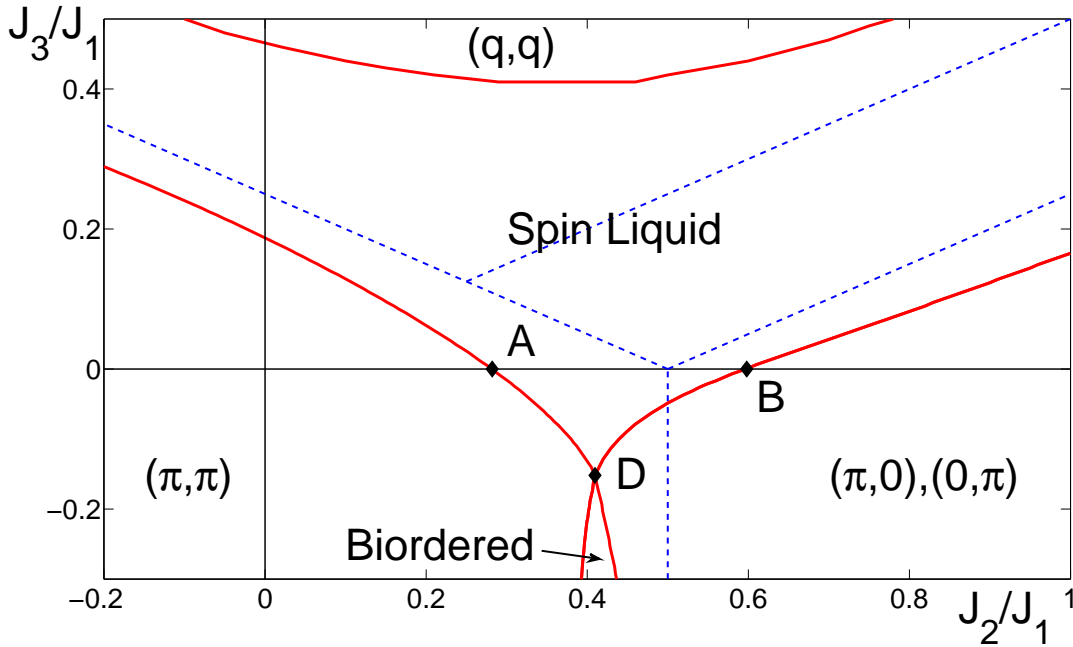
также не обнаружен. С ростом затухания в предложенном подходе геликоид  $(k, \pi)$  появляется при  $\gamma \sim 0.9$ . Например, для  $J_2 = 0.7$ ,  $J_3 = 0.24$ ,  $\gamma = 0.86$  щель в несоизмеримой точке  $(k, \pi)$  закрыта. Однако вопрос о восстановлении величины затухания в области существования геликоидальной фазы  $(k, \pi)$  в настоящее время представляется открытым.

Таким образом, уже простейший учет затухания  $\gamma$  позволяет реалистично описать многофазную ситуацию  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели.

В случае рассмотрения фазовой диаграммы  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели представляется также интересным выйти за область фрустраций, рассмотренных в работе, в первую очередь, рассмотреть область с отрицательными значениями констант обмена и учесть зависимость  $\gamma$  от фрустрации. Здесь можно ожидать реализации необычных фаз, когда в состоянии присутствуют одновременно два конденсата, отвечающих различным дальним порядкам.

### § 5.3. Области с дальним порядком

В предыдущем параграфе была детально изучена спин-жидкостная область фазовой диаграммы  $J_1$ - $J_2$ - $J_3$  модели и области её границ с фазами с дальним порядком. Было показано, что в случае квантового предела при



**Рис. 5.7.** 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  $(\pi, \pi)$ ,  $(q, q)$  и  $(\pi, 0)$ ,  $(0, \pi)$  задают положение спинового конденсата в различных фазах с дальним порядком (отметим, что квантовый геликоид  $(q, \pi)$  обнаружен не был). Нижняя часть фазовой диаграммы  $J_3 < 0$  включает двуупорядоченную фазу, в которой сосуществуют конденсаты  $(\pi, \pi)$  и  $(\pi, 0)$ ,  $(0, \pi)$ . О точках А, В и D см. текст.

$T = 0$  границы квазиклассических упорядоченных фаз размываются и переходят в спин-жидкостное состояние без дальнего порядка. В настоящем параграфе будет рассмотрена возможность прямого перехода между двумя фазами с дальним порядком без промежуточной спин-жидкостной фазы.

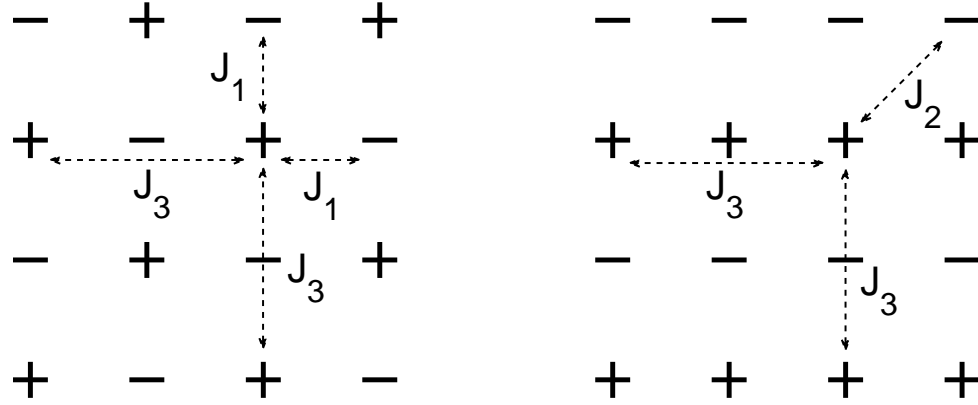
В любом состоянии с дальним порядком (например шахматном антиферромагнитном или страйп) щели в спектрах спиновых возбуждений равны нулю в соответствующих точках зоны Бриллюэна  $\mathbf{Q}_i$ . При переходе в спин-жидкостную фазу конденсатная функция исчезает, а щель открывается. Далее будет показано, что при некоторых значениях обменных констант возможно состояние с двумя ненулевыми конденсатными функциями в различных точках  $\mathbf{Q}_i$  (и нулевыми щелями в тех же точках). Заметим, что такое состояние не может быть описано в рамках спин-волновых подходов.

Для того, чтобы найти подходящую область параметров  $J_2/J_1$ ,  $J_3/J_1$  обратимся к качественной полуклассической картине (см. рисунок 5.8). Антиферромагнитный первый обмен  $J_1 > 0$  ведёт к "шахматному" неелевскому порядку, Антиферромагнитный второй обмен  $J_2 > 0$  ведёт к порядку типа страйп. При  $J_3 = 0$  их конкуренция приводит к неупорядоченному состоянию около точки  $J_2/J_1 = 0.5$ . Теперь рассмотрим ненулевой ферромагнитный третий обмен  $J_3 < 0$ . Из геометрических соображений очевидно, что отрицательный  $J_3$  усиливает как шахматный порядок, так и страйп.

Исходя из этих соображений можно предположить, что при отношении первых двух обменов в диапазоне  $A < J_2/J_1 < B$ , при достаточно большом ферромагнитном значении  $J_3$  может быть обнаружена область, в которой оба порядка сосуществуют (см. 5.7). Как это будет видно дальше, вычисления методом СССП подтверждают это предположение.

При рассмотрении точки на фазовой диаграмме, в которой присутствует спиновый дальний порядок, в исходной системе самосогласованных уравнений учитывается возможность появления периодического конденсатного слагаемого в спин-спиновых корреляционных функциях.

В этом случае спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  зануляется в некоторых точках зоны Бриллюэна, которые характеризует структуру спинового дальнего порядка. Конкретному типу дальнего порядка отвечают конкретные точки  $\mathbf{Q}$ .  $\mathbf{Q}^N = (\pi, \pi)$  соответствует Неелевскому дальнему порядку,  $\mathbf{Q}^S = (\pi, 0), (0, \pi)$  – страйп-порядку. А низкосимметричные точки  $\mathbf{Q}$  отвечают несоизмеримому геликоидальному порядку.



**Рис. 5.8.** Полуклассическая картина "шахматного" и страйп-порядков. Видно, что антиферромагнитный обмен  $J_1 > 0$  приводит к "шахматному" порядку, а антиферромагнитный обмен  $J_2 > 0$  приводит к порядку страйп-типа. Оба дальних порядка усиливаются ферримагнитным третьим обменом ( $J_3 < 0$ ), который и в том и в другом случае соединяет узлы с сонаправленными спинами.

Выражение для спин-спиновой корреляционной функции  $C_{|\mathbf{r}|} = \langle S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^z \rangle$  содержит два слагаемых:

$$C_{|\mathbf{r}|} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + C_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \quad (5.1)$$

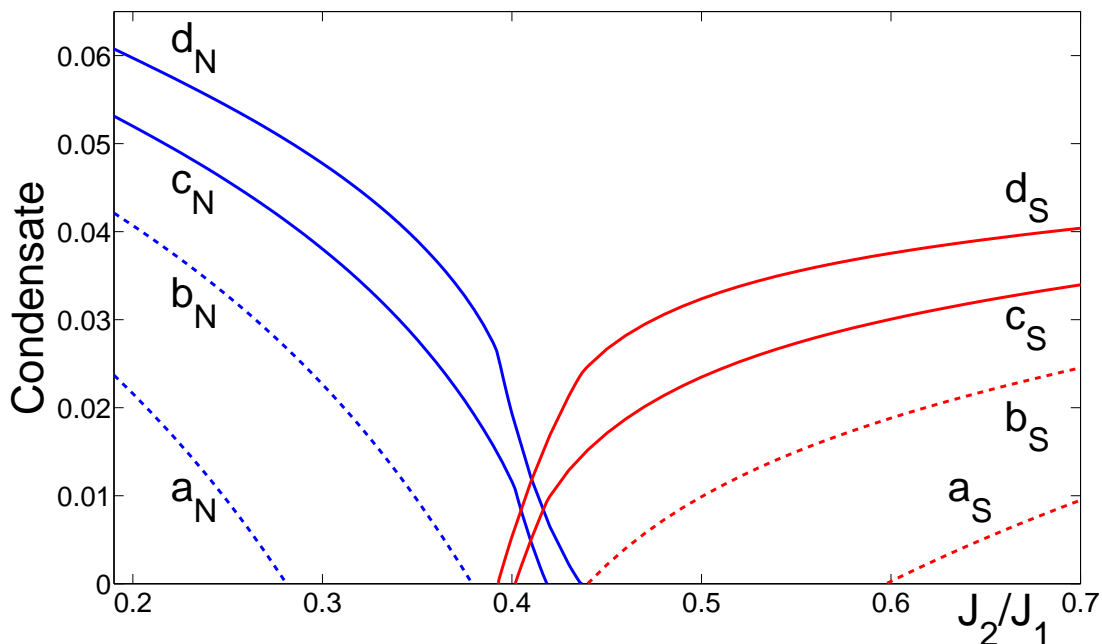
где гладкая часть структурного фактора  $C_{\mathbf{q}} = F_{\mathbf{q}}/(2\omega_{\mathbf{q}})$  определяет ближние корреляции, а  $C_{\mathbf{Q}}$  отвечает дальнему порядку и приводит к ненулевому значению спин-спиновых корреляционных функций на бесконечности, например для Неелевского ( $N$ ) и страйп ( $S$ ) фаз:

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{0}}^{\alpha} \rangle_{r \rightarrow \infty}^N &= C_N (-1)^{n_x + n_y}; \\ \langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{0}}^{\alpha} \rangle_{r \rightarrow \infty}^S &= \frac{C_S}{2} [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}]; \end{aligned} \quad (5.2)$$

здесь  $n_x$  и  $n_y$  задают координаты узла на квадратной решётке  $\mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y$ .

В случае отхода от нулевой температуры дальний порядок пропадает (если он существовал при  $T = 0$ ), в полном соответствии с теоремой Мермина-Вагнера.

Итак, при отрицательных значениях параметра  $J_3$  на фазовой диаграмме появляется область, соответствующая двуупорядоченной фазе. При

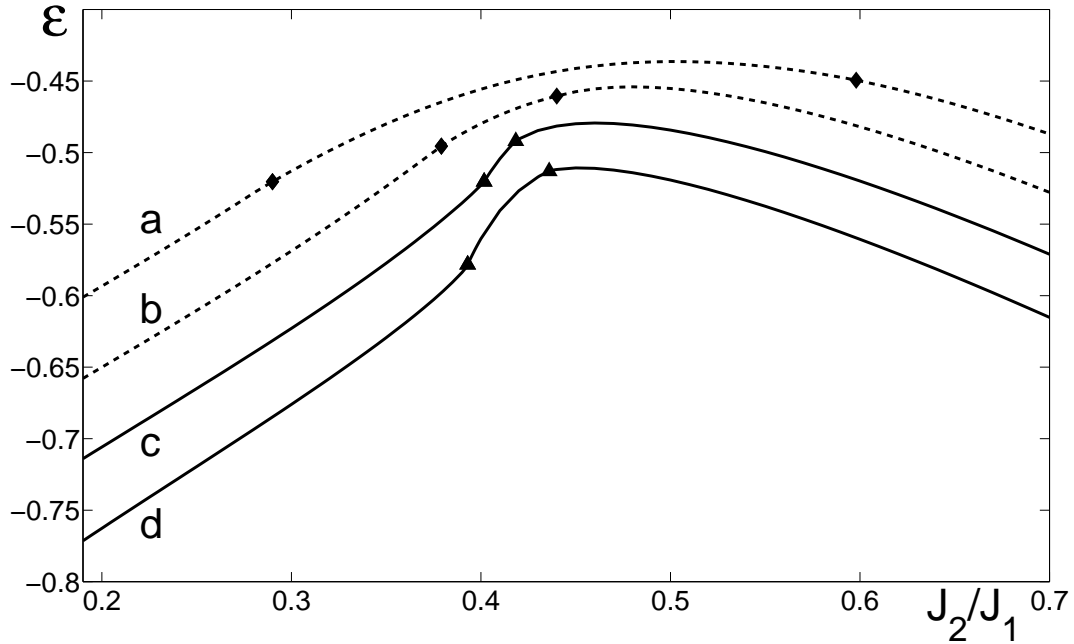


**Рис. 5.9.** Зависимость спинового конденсата от  $J_2/J_1$  для различных значений  $J_3 \leq 0$ : а)  $J_3/J_1 = 0$ , б)  $J_3/J_1 = -0.1$ , в)  $J_3/J_1 = -0.2$ , д)  $J_3/J_1 = -0.3$ . Индекс N означает "шахматный" конденсат, S – страйп-конденсат. Пунктирные линии соответствуют области параметров, в которой переход между "шахматной" и страйп фазами происходит через спиновую жидкость, сплошные линии – переходу через двуупорядоченное состояние.

увеличении  $|J_3|$  ( $J_3 < 0$ ) спин-жидкостная область ( $AB$  при  $J_3 = 0$ ) сужается (см. Рис.5.7) и исчезает в точке  $D$  ( $J_2/J_1 \approx 0.40$ ,  $J_3/J_1 = (J_3/J_1)^D \approx -0.15$ ).  $D$  является точкой сосуществования четырёх различных фаз – спин-жидкостной, Неелевской, страйп и двуупорядоченной фазы. При дальнейшем увеличении  $|J_3|$  область двуупорядоченной фазы постепенно расширяется, при фиксированном значении  $J_2/J_1$  оба конденсата увеличиваются. С другой стороны, как это можно видеть из Рис.5.9, при фиксированном  $J_3/J_1$  Неелевский конденсат в двуупорядоченной фазе постепенно уменьшается с увеличением  $J_2/J_1$ , а страйп-конденсат увеличивается.

Как показано на Рис.5.10, энергия основного состояния демонстрирует непрерывный переход между неелевской и страйп фазами через спиновую жидкость ( $J_3/J_1 > (J_3/J_1)^D$ ), а также через двуупорядоченную фазу ( $J_3/J_1 < (J_3/J_1)^D$ ).

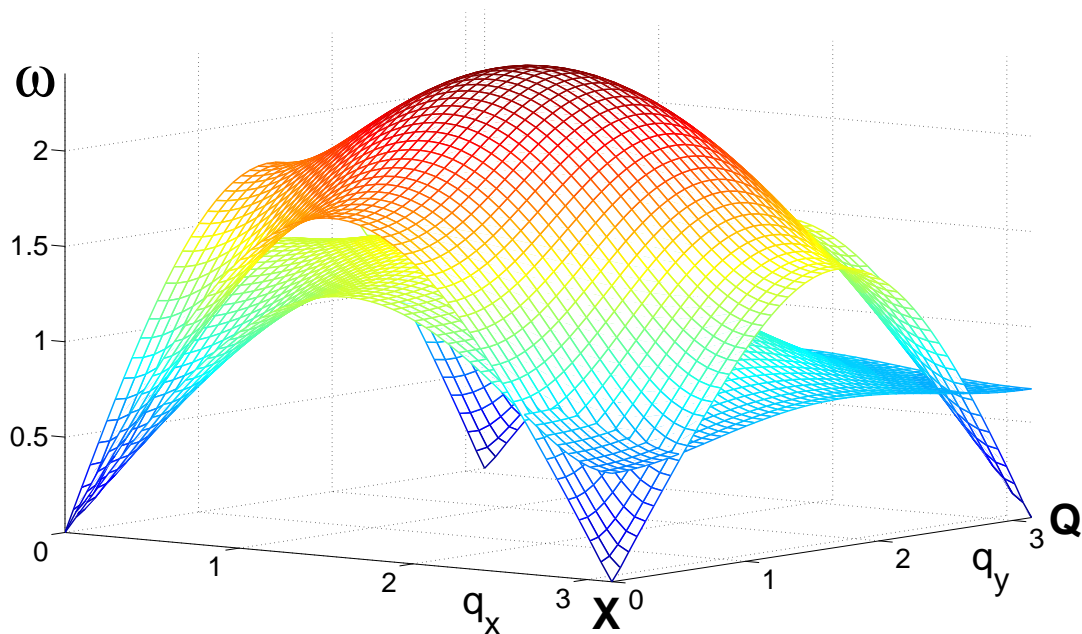




**Рис. 5.10.** Одноузельная энергия основного состояния в зависимости от  $J_2/J_1$  для различных значений  $J_3 \leq 0$ : а)  $J_3/J_1 = 0$ , б)  $J_3/J_1 = -0.1$ , в)  $J_3/J_1 = -0.2$ , г)  $J_3/J_1 = -0.3$ . Пунктирные линии соответствуют области параметров, в которой переход между "шахматной" и страйп фазами происходит через спиновую жидкость, сплошные линии – переходу через двуупорядоченное состояние. (треугольниками отмечены границы двуупорядоченной фазы, ромбами – границы спин-жидкостной фазы).

Типичный спектр спиновых возбуждений для спин-жидкостного состояния приведён на Рис.5.11 (для  $J_2/J_1 = 0.4$ ,  $J_3/J_1 = 0 > (J_3/J_1)^D$ ). Спектр имеет щели во всех симметричных точках зоны Бриллюэна, кроме тривиальной точки  $\mathbf{q} = (0, 0)$ . Типичный спектр в двуупорядоченном состоянии также показан на Рис.5.11 (для  $J_2/J_1 = 0.4$ ,  $J_3/J_1 = -0.25 < (J_3/J_1)^D$ ). Как видно из рисунка, в спектре имеются нулевые щели в точках **Q** и **X**.

Таким образом, в отличие от предыдущих рассмотрений  $J_1 - J_2 - J_3$  модели Гейзенберга, в которых дальний порядок либо отсутствовал, либо являлся уникальным, СССП показывает возможность существования состояния, в котором сосуществует несколько типов дальних порядков. Стоит подчеркнуть, что наличие или отсутствие двуупорядоченной фазы на фазовой диаграмме не зависит от параметра затухания. Вычисления в рамках

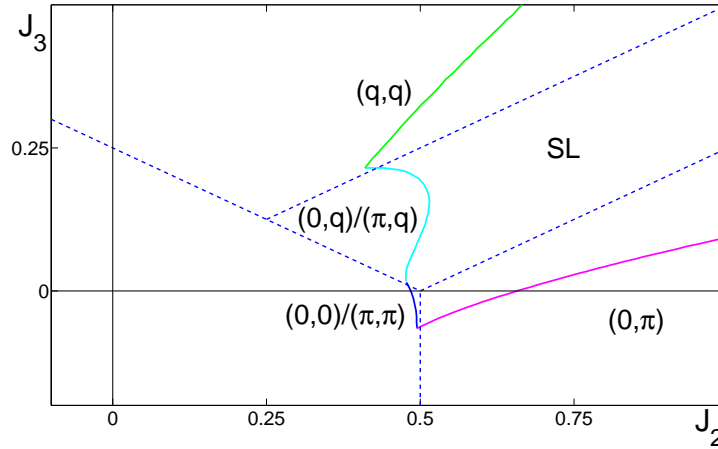


*Рис. 5.11.* Спектр спиновых возбуждений в точке  $J_2/J_1 = 0.40$  для двух различных значений  $J_3/J_1$ . При  $J_3/J_1 = 0$  в спектре есть щель во всех симметричных точках, кроме тривиальной точки  $Q = 0$ . Для  $J_3/J_1 = -0.25$  спектр является безщелевым как в точках  $Q$ , так и в точках  $X$ .

СССП показывают, что двуупорядоченная область может быть обнаружена даже при нулевом затухании. При этом значение параметра затухания влияет на положение двуупорядоченной фазы на фазовой диаграмме.

#### § 5.4. Область ферромагнитного J1

При рассмотрении спин-жидкостной фазы в случае ферромагнитного первого обмена система самосогласованных уравнений не отличается от случая  $J_1 > 0$ . Границы спин-жидкостной фазы также находятся из зануления щели в спектре в некоторой нетривиальной точке  $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ . Фазовая диаграммы системы для этого случая представлена на Рис.5.12. В системе, помимо спин-жидкостной фазы, наблюдается 4 различных фазы с дальним порядком — страйп-фаза, коллинеарная фаза, и две фазы с несоизмеримым геликоидальным дальним порядком. В отличие от антиферромагнитного случая, геликоидальная фаза типа  $(q, 0; 0, q)$  в случае ферромагнетика наблюдается даже при малых значениях параметра затухания.



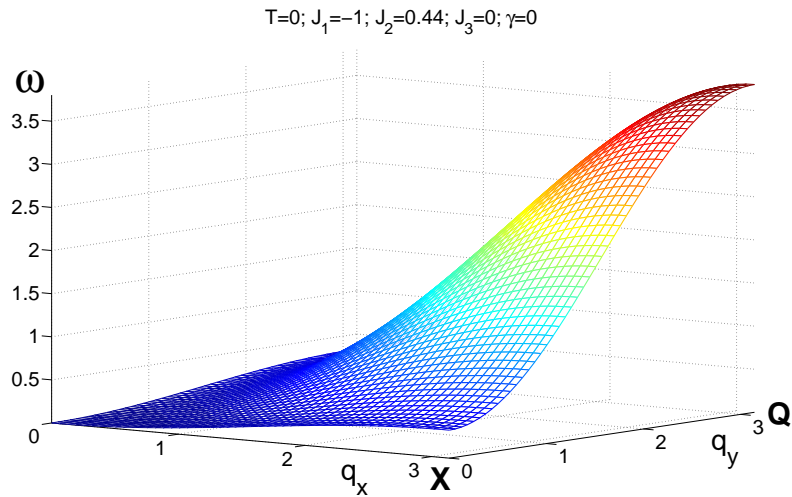
**Рис. 5.12.** Фазовая диаграмма  $J_1 - J_2 - J_3$  модели ( $T = 0$ ) в области отрицательных  $J_1$ . Пунктирные линии — фазовые границы в классическом пределе: слева внизу — "шахматный" порядок, справа внизу — порядок страйп-типа, две верхних фазы соответствуют несоизмеримым геликоидальным порядкам. 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.

Характерные спектры в граничных точках приведены на Рис.5.13 — 5.14. Спектры в тройных точках на фазовой диаграмме обладают характерными чертами фаз с дальним порядком, к которым они примыкают. Например, на рис.5.14 показан спектр в точке, соответствующей тройной точке спиновая жидкость — геликоид  $(q, q)$  — геликоид  $(q, \pi)$ . В этом спектре щели закрыты как на главной диагонали зоны Бриллюэна, так и на её границах, что приводит к нетривиальному виду  $\omega_{\mathbf{q}}$  с исчезающим спектром по целой дуге.

Подход к коллинеарной ферромагнитной фазе соответствует переходу от линейного вида  $\omega_{\mathbf{q}}$  по  $q$  к квадратичному. При этом вокруг точки  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  образуется значительная бездисперсионная область.

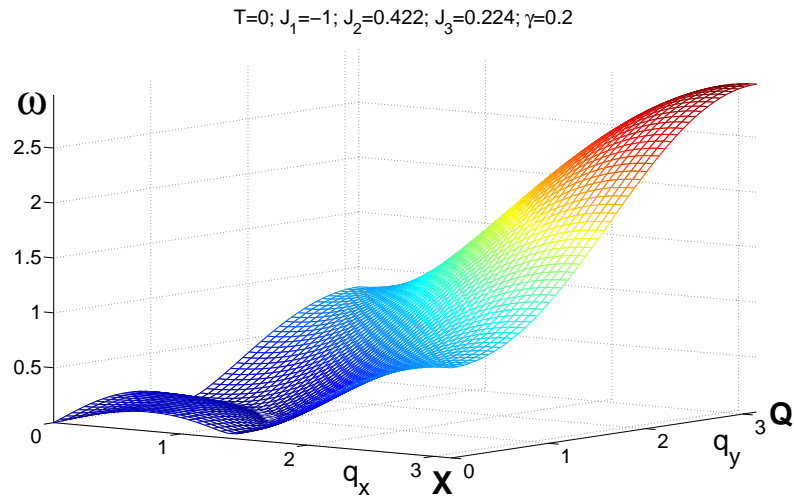
На Рис.5.15 приведена эволюция спектра при переходе из страйп-области к коллинеарной фазе через спиновую жидкость. При этом область, близкая к страйп-фазе, характеризуется малым значением щели  $\Delta_{\mathbf{x}}$ , а подход к коллинеарной фазе — занулением первой производной в спектре  $\omega_{\mathbf{q}}$  по квазиимпульсу.

Полученную фазовую диаграмму можно сравнить с результатами

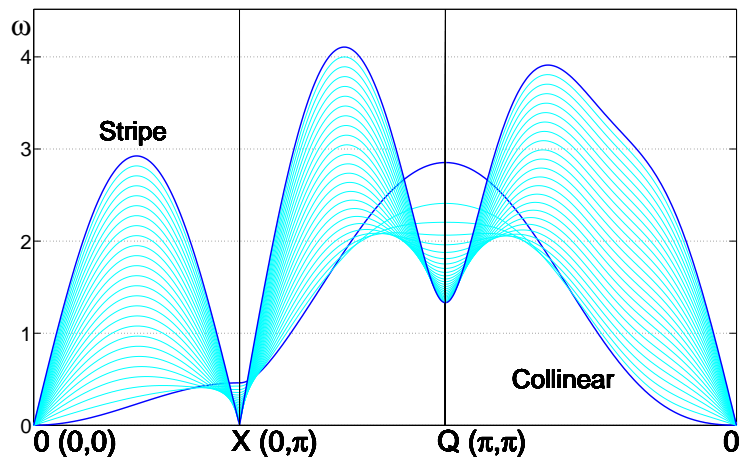


**Рис. 5.13.** Характерный спектр спиновых возбуждений на границе ферромагнитной фазы

кластерной точной диагонализации [47]. Как видно из рисунка, границы упорядоченных фаз в этой работе разумно совпадают с границами, полученных в рамках СССП. Стоит отметить, что в [47] получены также упорядочивания, нарушающие трансляционную симметрию решётки. Такие фазы не могут быть получены в рамках СССП.



*Рис. 5.14.* Спектр спиновых возбуждений в точке сосуществования двух геликоидальных фаз и ферромагнитной спин-жидкостной фазы



*Рис. 5.15.* Эволюция спектра спиновых возбуждений вдоль симметричных направлений в области ферромагнитной спин-жидкостной фазы при движении по  $J_2$  ( $J_3 = 0$ ) от границы ферромагнитной фазы до границы страйп-фазы

---

## Заключение

---

По результатам проведенных исследований и на основании представленных в диссертационной работе теоретических результатов, сформулируем основные выводы:

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  $\omega_{\mathbf{q}}$ , 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 которой 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.

В заключение хочу поблагодарить своего научного руководителя д.ф.-м.н. Андрея Витальевича Михеенкова за руководство диссертационной работой, бесценные обсуждения полученных результатов и моральную поддержку при подготовке к защите. Также хочу поблагодарить д.ф.-м.н., профессора Александра Фёдоровича Барабанова за полезные советы и идеи, и сотрудников кафедры теоретической физики МФТИ за поддержку и благоприятные условия для выполнения этой работы.



---

## Литература

---

1. *Diep H. T.* Frustrated spin systems. — World Scientific, 2004.
2. *Balents L.* Spin liquids in frustrated magnets // *Nature*. — 2010. — Vol. 464, no. 7286. — Pp. 199–208.
3. *Lacroix C., Mendels P., Mila F.* Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory. — Springer, 2011. — Vol. 164.
4. *Chandra P., Doucot B.* Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice // *Phys. Rev. B*. — 1988. — Vol. 38, no. 13. — Pp. 9335–9338.
5. *Schulz H. J., Ziman T. A. L.* Finite-size scaling for the two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet // *Europhys. Lett.* — 1992. — Vol. 18, no. 4. — Pp. 355–360.
6. *Trumper A. E., Manuel L. O., Gazza C. J., Ceccatto H. A.* Schwinger-boson approach to quantum spin systems: Gaussian fluctuations in the 'Natural' gauge // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78, no. 11. — Pp. 2216–2219.
7. *Capriotti L., Becca F., Parola A., Sorella S.* Resonating valence bond wave functions for strongly frustrated spin systems // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 87, no. 9. — P. 097201.
8. *Singh R. R. P., Zheng W., Oitmaa J., Sushkov O. P., Hamer C. J.* Symmetry breaking in the collinear phase of the  $J_1 - J_2$  Heisenberg model // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 1. — P. 017201.
9. *Barabanov A. F., Mikheyenkov A. V., Shvartsberg A. V.* Frustrated quantum two-dimensional  $J_1 - J_2 - J_3$  antiferromagnet in a spherically symmetric self-consistent approach // *Theor. Math. Phys.* — 2011. — Vol. 168, no. 3. — Pp. 1192–1215.

10. *Melzi R., Carretta P., Lascialfari A., Mambrini M., Troyer M., Millet P., Mila F.*  $Li_2VO(Si, Ge)O_4$ , a prototype of a two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85, no. 6. — Pp. 1318–1321.
11. *Melzi R., Aldrovandi S., Tedoldi F., Carretta P., Millet P., Mila F.* Magnetic and thermodynamic properties of  $Li_2VOSiO_4$ : A two-dimensional  $S = 1/2$  frustrated antiferromagnet on a square lattice // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64, no. 2. — P. 024409.
12. *Rosner H., Singh R. R. P., Zheng W. H., Oitmaa J., Pickett W. E.* High-temperature expansions for the  $J_1 - J_2$  heisenberg models: Applications to ab initio calculated models for  $Li_2VO(Si, Ge)O_4$  and  $Li_2VOGeO_4$  // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 014416.
13. *Tranquada J. M.* Neutron scattering studies of antiferromagnetic correlations in cuprates // *Handbook of High-Temperature Superconductivity* / edited by J. R. Schrieffer, J. S. Brooks. — Springer New York, 2007. — Pp. 257–298.
14. *Kaul E. E., Rosner H., Shannon N., Shpanchenko R. V., Geibel C.* Evidence for a frustrated square lattice with ferromagnetic nearest-neighbor interaction in the new compound  $Pb_2VO(PO_4)_2$  // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2004. — Vol. 272–276, Part 2. — Pp. 922–923.
15. *Skoulatos M., Goff J., Shannon N., Kaul E., Geibel C., Murani A., Enderle M., Wildes A.* Spin correlations in the frustrated square lattice  $Pb_2VO(PO_4)_2$  // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2007. — Vol. 310, no. 2, Part 2. — Pp. 1257–1259.
16. *Carretta P., Filibian M., Nath R., Geibel C., King P. J. C.* Fluctuations and correlations in a frustrated  $S = 1/2$  square lattice with competing ferromagnetic and antiferromagnetic interactions studied by muon-spin relaxation // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79, no. 22. — P. 224432.
17. Spin correlations and exchange in square-lattice frustrated ferromagnets / M. Skoulatos, J. P. Goff, C. Geibel, E. E. Kaul, R. Nath, N. Shannon, B. Schmidt, A. P. Murani, P. P. Deen et al. // *Europhys. Lett.* — 2009. — Vol. 88, no. 5. — P. 57005.

18. Spin-singlet ground state in two-dimensional  $s=1/2$  frustrated square lattice: (cucl)lanb2o7 / H. Kageyama, T. Kitano, N. Oba, M. Nishi, S. Nagai, K. Hirota, L. Viciu, J. B. Wiley, J. Yasuda et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 2005. — Vol. 74, no. 6. — Pp. 1702–1705.
19. *Tsirlin A. A., Rosner H.* Extension of the spin-1/2 frustrated square lattice model: The case of layered vanadium phosphates // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79, no. 21. — P. 214417.
20. *Tsirlin A. A., Schmidt B., Skourski Y., Nath R., Geibel C., Rosner H.* Exploring the spin-1/2 frustrated square lattice model with high-field magnetization studies // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 80, no. 13. — P. 132407.
21. *Nath R., Tsirlin A. A., Rosner H., Geibel C.* Magnetic properties of  $\text{BaCu}_2\text{V}_2\text{O}_8$ : A strongly frustrated spin-1/2 square lattice close to the quantum critical regime // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 78, no. 6. — P. 064422.
22. *Feldkemper S., Weber W., Schulenburg J., Richter J.* Ferromagnetic coupling in nonmetallic  $\text{Cu}^{2+}$  compounds // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52, no. 1. — Pp. 313–323.
23. *Feldkemper S., Weber W.* Generalized calculation of magnetic coupling constants for Mott-Hubbard insulators: Application to ferromagnetic Cr compounds // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 57, no. 13. — Pp. 7755–7766.
24. *Manaka H., Koide T., Shidara T., Yamada I.* Observation of polarization-dependent x-ray absorption spectra arising from  $\text{Cu}3d - \text{F}2p$  hybridization in the two-dimensional ferromagnets  $\text{A}_2\text{CuF}_4$  ( $\text{A} = \text{K}, \text{Cs}$ ) // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 18. — P. 184412.
25. *Kasinathan D., Kyker A. B., Singh D. J.* Origin of ferromagnetism in  $\text{Cs}_2\text{AgF}_4$ : The importance of  $\text{Ag} - \text{F}$  covalency // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73, no. 21. — P. 214420.
26. *Richter J., Schulenburg J., Honecker A.* Quantum magnetism in two dimensions: From semi-classical Neel order to magnetic disorder // *Quantum Magnetism* / edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop. — Springer Berlin Heidelberg, 2004. — Lecture Notes in Physics no. 645. — Pp. 85–153.

27. *Plakida N.* High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications. — Berlin: Springer, 2010. — P. 570.
28. *Ren Y.-Z., Tong N.-H., Xie X.-C.* Cluster mean-field theory study of  $J_1 - J_2$  Heisenberg model on a square lattice // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2014. — Vol. 26, no. 11. — P. 115601.
29. *Takahashi M.* Quantum Heisenberg ferromagnets in one and two dimensions at low temperature // *Progr. Theor. Phys. Suppl.* — 1986. — Vol. 87. — Pp. 233–246.
30. *Takahashi M.* Few-dimensional Heisenberg ferromagnets at low temperature // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58, no. 2. — Pp. 168–170.
31. *Kopietz P., Chakravarty S.* Low-temperature behavior of the correlation length and the susceptibility of a quantum Heisenberg ferromagnet in two dimensions // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40, no. 7. — Pp. 4858–4870.
32. *Karchev N.* Renormalization-group approach to spin-wave theory of quantum Heisenberg ferromagnets // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55, no. 10. — Pp. 6372–6376.
33. *Manousakis E., Salvador R.* Monte carlo study of the two-dimensional spin-1/2 quantum Heisenberg model: Spin correlations in  $La_2CuO_4$  // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 39, no. 1. — Pp. 575–585.
34. *Chen Y. C., Chen H. H., Lee F.* Quantum Monte Carlo study of the spin-1/2 Heisenberg model // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 43, no. 13. — Pp. 11082–11087.
35. *Henelius P., Sandvik A. W., Timm C., Girvin S. M.* Monte Carlo study of a two-dimensional quantum ferromagnet // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61, no. 1. — Pp. 364–374.
36. *Kondo J., Yamaji K.* Green's-function formalism of the one-dimensional heisenberg spin system // *Prog. Theor. Phys.* — 1972. — Vol. 47, no. 3. — Pp. 807–818.
37. *Shimahara H., Takada S.* Green's function theory of the two-dimensional heisenberg model-spin wave in short range order // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1991. — Vol. 60, no. 7. — Pp. 2394–2405.

38. *Suzuki F., Shimata N., Ishii C.* Thermodynamics of low-dimensional Heisenberg ferromagnets by the Green's function method // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1994. — Vol. 63, no. 4. — Pp. 1539–1547.
39. *Junger I., Ihle D., Richter J., Klümper A.* Green-function theory of the Heisenberg ferromagnet in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70, no. 10. — P. 104419.
40. *Antsygina T. N., Poltavskaya M. I., Poltavsky I. I., Chishko K. A.* Thermodynamics of low-dimensional spin-1/2 Heisenberg ferromagnets in an external magnetic field within a Green function formalism // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77, no. 2. — P. 024407.
41. *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.
42. *Shannon N., Momoi T., Sindzingre P.* Nematic order in square lattice frustrated ferromagnets // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96, no. 2. — P. 027213.
43. *Sindzingre P., Shannon N., Momoi T.* Nematic order in square lattice frustrated ferromagnets // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2007. — Vol. 310, no. 2, Part 2. — Pp. 1340–1342.
44. *Schmidt B., Shannon N., Thalmeier P.* The frustrated  $J_1 - J_2$  model in high magnetic fields // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2007. — Vol. 19, no. 14. — P. 145211.
45. *Schmidt B., Shannon N., Thalmeier P.* Thermodynamic properties of the model at finite magnetic fields // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2007. — Vol. 310, no. 2, Part 2. — Pp. 1231–1233.
46. *Viana J. R., de Sousa J. R.* Anisotropy effects in frustrated Heisenberg antiferromagnets on a square lattice // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75, no. 5. — P. 052403.
47. *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.

48. *Shindou R., Momoi T.* SU(2) slave-boson formulation of spin nematic states in  $S = 1/2$  frustrated ferromagnets // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 80, no. 6. — P. 064410.
49. *Härtel M., Richter J., Ihle D., Drechsler S.-L.* Thermodynamics of a two-dimensional frustrated spin-1/2 Heisenberg ferromagnet // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81, no. 17. — P. 174421.
50. *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.
51. *Dmitriev D. V., Krivnov V. Y., Ovchinnikov A. A.* Two-dimensional frustrated Heisenberg model: Variational study // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55, no. 6. — Pp. 3620–3626.
52. *Richter J., Lohmann A., Schmidt H.-J., Johnston D. C.* Magnetic susceptibility of frustrated spin- $s$   $J_1 - J_2$  quantum heisenberg magnets: High-temperature expansion and exact diagonalization data // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2014. — Vol. 529, no. 1. — P. 012023.
53. *Wan X., Maier T. A., Savrasov S. Y.* Calculated magnetic exchange interactions in high-temperature superconductors // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 155114.
54. *Ma F., Ji W., Hu J., Lu Z.-Y., Xiang T.* First-principles calculations of the electronic structure of tetragonal  $\alpha$ -FeTe and  $\alpha$ -FeSe crystals: Evidence for a bicollinear antiferromagnetic order // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 177003.
55. *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.
56. *Anderson P.* Resonating valence bonds: A new kind of insulator? // *Materials Research Bulletin.* — 1973. — Vol. 8, no. 2. — Pp. 153 – 160.
57. *Read N., Sachdev S.* Spin-peierls, valence-bond solid, and néel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 42. — Pp. 4568–4589.

58. *Sandvik A. W.* Computational studies of quantum spin systems // AIP Conference Proceedings. — Vol. 1297. — American Institute of Physics, 2010. — Pp. 135–338.
59. *Anderson P. W.* The resonating valence bond state in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and superconductivity // *Science*. — 1987. — Vol. 235, no. 4793. — Pp. 1196–1198.
60. *Anderson P. W., Baskaran G., Zou Z., Hsu T.* Resonating valence-bond theory of phase transitions and superconductivity in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ -based compounds // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — Pp. 2790–2793.
61. *Bethe H.* Zur theorie der metalle // *Zeitschrift fur Physik*. — 1931. — Vol. 71, no. 3-4. — Pp. 205–226.
62. *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models // *Phys. Rev. Lett.* — 1966. — Vol. 17. — Pp. 1133–1136.
63. *Marshall W.* Antiferromagnetism // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. — 1955. — Vol. 232, no. 1188. — Pp. 48–68.
64. *Manousakis E.* The spin-1/2 heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides // *Rev. Mod. Phys.* — 1991. — Vol. 63. — Pp. 1–62.
65. *Luttinger J. M., Tisza L.* Theory of dipole interaction in crystals // *Phys. Rev.* — 1946. — Vol. 70. — Pp. 954–964.
66. *Dagotto E., Moreo A.* Phase diagram of the frustrated spin-1/2 heisenberg antiferromagnet in 2 dimensions // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 63. — Pp. 2148–2151.
67. *Dagotto E.* Numerical studies of strongly correlated electronic models // *International Journal of Modern Physics B*. — 1991. — Vol. 05, no. 01n02. — Pp. 77–111.
68. *Moreo A., Dagotto E., Jolicoeur T., Riera J.* Incommensurate correlations in the t-j and frustrated spin-1/2 heisenberg models // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 42. — Pp. 6283–6293.

69. *Richter J., Darradi R., Schulenburg J., Farnell D. J. J., Rosner H.* Frustrated spin-1/2 j1-j2 heisenberg ferromagnet on the square lattice studied via exact diagonalization and coupled-cluster method // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 174429.
70. *Richter J., Schulenburg J.* The spin-1/2 j1-j2 heisenberg antiferromagnet on the square lattice: Exact diagonalization for n=40 spins // *The European Physical Journal B.* — 2010. — Vol. 73, no. 1. — Pp. 117–124.
71. *Mambrini M., Läuchli A., Poilblanc D., Mila F.* Plaquette valence-bond crystal in the frustrated heisenberg quantum antiferromagnet on the square lattice // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 144422.
72. *Sindzingre P., Shannon N., Momoi T.* Phase diagram of the spin-1/2 j1-j2-j3 heisenberg model on the square lattice // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2010. — Vol. 200, no. 2. — P. 022058.
73. *Sandvik A. W.* Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional heisenberg model // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 56. — Pp. 11678–11690.
74. *Oitmaa J., Weihong Z.* Series expansion for the j1-j2 heisenberg antiferromagnet on a square lattice // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54. — Pp. 3022–3025.
75. *Gelfand M. P., Singh R. R. P., Huse D. A.* Zero-temperature ordering in two-dimensional frustrated quantum heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40. — Pp. 10801–10809.
76. *Singh R. R. P., Weihong Z., Hamer C. J., Oitmaa J.* Dimer order with striped correlations in the  $J_1$ – $J_2$  heisenberg model // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — Pp. 7278–7283.
77. *Arlego M., Brenig W.* Plaquette order in the j1-j2-j3 model: Series expansion analysis // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 78. — P. 224415.
78. *Chubukov A. V.* On the quantum effects in helimagnets // *Journal of Physics C: Solid State Physics.* — 1984. — Vol. 17, no. 36. — P. L991.
79. *Rastelli E., Reatto L., Tassi A.* Quantum fluctuations and phase diagram of heisenberg models with competing interactions // *Journal of Physics C: Solid State Physics.* — 1986. — Vol. 19, no. 33. — P. 6623.



80. *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.
81. *Barabanov A. F., Berezovskii V. M.* Second-order phase transitions in a frustrated two-dimensional Heisenberg antiferromagnet // *J. Exp. Theor. Phys.* — 1994. — Vol. 79, no. 4. — Pp. 627–633.
82. *Barabanov A. F., Beresovsky V. M.* On the theory of the two-dimensional Heisenberg antiferromagnet with frustration on a square lattice // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1994. — Vol. 63, no. 11. — Pp. 3974–3982.
83. *Eschrig M.* The effect of collective spin-1 excitations on electronic spectra in high- $T_c$  superconductors // *Advances in Physics.* — 2006. — Vol. 55, no. 1-2. — Pp. 47–183.
84. *Rosner H., Singh R. R. P., Zheng W. H., Oitmaa J., Drechsler S.-L., Pickett W. E.* Realization of a large  $J_2$  quasi-2d spin-half heisenberg system:  $\text{Li}_2\text{VOsIO}_4$  // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 88. — P. 186405.
85. *Bombardi A., Chapon L. C., Margiolaki I., Mazzoli C., Gonthier S., Duc F., Radaelli P. G.* Magnetic order and lattice anomalies in the  $J_1$ - $J_2$  model system  $\text{VO}_2$  // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 220406.
86. *Barabanov A., Starykh O.* Spherical symmetric spin wave theory of heisenberg model // *Journal of the Physical Society of Japan.* — 1992. — Vol. 61, no. 2. — Pp. 704–708.
87. *Annett J. F., Martin R. M., McMahan A. K., Satpathy S.* Electronic hamiltonian and antiferromagnetic interactions in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Aug. — Vol. 40. — Pp. 2620–2623.
88. *Belemuk A., Barabanov A., Maksimov L.* Effect of renormalization of magnetic fluctuations on the kinetic coefficients of high- $T_c$  superconductors // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* — 2006. — Vol. 102, no. 3. — Pp. 431–443.
89. *Mikheyenkov A. V., Shvartsberg A. V., Kozlov N. A., Barabanov A. F.* Phase diagram of a frustrated two-dimensional  $J_1 - J_2 - J_3$  quantum antiferromagnet: An approach based on spherically symmetric Green's functions // *JETP Lett.* — 2011. — Vol. 93, no. 7. — Pp. 377–383.

90. *Mikheyenkov A. V., Barabanov A. F., Shvartsberg A. V.* On the coexistence of different types of long-range order in the strongly frustrated two-dimensional Heisenberg model // *Solid State Commun.* — 2012. — Vol. 152, no. 10. — Pp. 831 – 834.
91. *Härtel M., Richter J., Ihle D., Schnack J., Drechsler S.-L.* Thermodynamics of the one-dimensional frustrated Heisenberg ferromagnet with arbitrary spin // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84, no. 10. — P. 104411.
92. *Barabanov A., Maksimov L.* Damping of magnons in a two-dimensional  $s = 1/2$  heisenberg antiferromagnet // *Physics Letters A.* — 1995. — Vol. 207, no. 6. — Pp. 390 – 396.
93. *Tserkovnikov Y.* Decoupling of chains of equations for two-time green's functions // *Theoretical and Mathematical Physics.* — 1971. — Vol. 7, no. 2. — Pp. 511–519.
94. *Plakida N.* Dyson equation for heisenberg ferromagnet // *Physics Letters A.* — 1973. — Vol. 43, no. 6. — Pp. 481 – 482.
95. *Mori H.* Transport, collective motion, and brownian motion // *Progress of Theoretical Physics.* — 1965. — Vol. 33, no. 3. — Pp. 423–455.
96. *Mori H.* A continued-fraction representation of the time-correlation functions // *Progress of Theoretical Physics.* — 1965. — Vol. 34, no. 3. — Pp. 399–416.
97. *Sega I., Prelovšek P., Bonča J.* Magnetic fluctuations and resonant peak in cuprates: Towards a microscopic theory // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 054524.
98. *Millis A. J., Monien H., Pines D.* Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Jul. — Vol. 42. — Pp. 167–178.
99. *Chubukov A. V., Morr D. K.* Electronic structure of underdoped cuprates // *Physics Reports.* — 1997. — Vol. 288, no. 1BТ“6. — Pp. 355 – 387.
100. *Ty S., Halperin B. I.* Damping of spin waves in a two-dimensional heisenberg antiferromagnet at low temperatures // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Aug. — Vol. 42. — Pp. 2096–2115.

101. *Stojkovic B. P., Pines D.* Theory of the longitudinal and hall conductivities of the cuprate superconductors // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. 8576–8595.
102. *Hlubina R., Rice T. M.* Resistivity as a function of temperature for models with hot spots on the fermi surface // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51. — Pp. 9253–9260.
103. *Sadovskii M., Strigina N.* Optical conductivity in a 2d model of the pseudogap state // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* — 2002. — Vol. 95, no. 3. — Pp. 526–537.
104. *Prelovšek P., Sega I., Bonča J.* Scaling of the magnetic response in doped antiferromagnets // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 027002.
105. *Vladimirov A. A., Ihle D., Plakida N. M.* Dynamic spin susceptibility in the  $t$ - $j$  model // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 80. — P. 104425.
106. *Barabanov A., Maksimov L.* Phenomenological approach to the non-spin-wave behavior of cuprate magnetic susceptibility in the superconducting state // *JETP Letters.* — 2008. — Vol. 87, no. 7. — Pp. 371–375.
107. *Mikheenkov A., Barabanov A.* Spin susceptibility of cuprates in the model of a 2d frustrated antiferromagnet: Role of renormalization of spin fluctuations in describing neutron experiments // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* — 2007. — Vol. 105, no. 2. — Pp. 347–359.
108. *Mikheyenkov A., Barabanov A., Kozlov N.* Self-consistent spin susceptibility in 2d frustrated antiferromagnet // *Physics Letters A.* — 2006. — Vol. 354, no. 4. — Pp. 320 – 324.
109. *Richter J., Härtel M., Ihle D., Drechsler S.-L.* Thermodynamics of the frustrated ferromagnetic spin-1/2 Heisenberg chain // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2009. — Vol. 145, no. 1. — P. 012064.
110. *Rastelli E., Tassi A.* Nonlinear effects in the spin-liquid phase // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Nov. — Vol. 46. — Pp. 10793–10799.