УДК 538.1

О НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ДИНАМИКЕ ТРЕХМЕРНОГО КВАНТОВОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

И. В. Колоколов

Изучается низкотемпературная динамика продольных спиновых флуктуаций в квантовом гайзенберговском антиферромагнетике. Вычислены асимптотики на больших временах соответствующих спиновых корреляторов.

1. В настоящей работе изучаются разновременные корреляции продольных спиновых флуктуаций в трехмерном квантовом антиферромагнетике. Она является в значительной степени продолжением статьи [1], однако используемый метод менее общий и более простой.

2. Теория одно- и двумерных квантовых антиферромагнетиков нетривиальна уже на уровне основного состояния (см. недавний обзор [2]). В трехмерном случае возникает малый параметр $1/z$ — обратное число ближайших соседей.

Легко показать [3], что минимальное собственное значение E_0 гамильтониана

$$H=\frac{1}{2}\sum_{i,j}\mathcal{J}_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j \tag{1}$$

(где $\mathcal{J}_{ij}$ — положительно определенная обменная матрица, S_i — оператор спина на узле $\mathbf{r}_i$) заключено в пределах

$$E_{\text{кл}}(1+1/SZ)<E_0<E_{\text{кл}}. \tag{2}$$

Здесь $E_{\text{кл}}<0$ — среднее значение H по классическому вакууму (чередование положительно и отрицательно ориентированных вдоль оси z спинов), S — максимальная проекция спина ($S=1/2$ в данной работе). Значит, флуктуации над классическим вакуумом при низких температурах малы либо по параметру $1/Z$, либо по температуре и, изучая их, можно пользоваться теорией возмущений.

В этой работе мы, как и в [1], ограничимся рассмотрением медленно релаксирующей части связного разновременно́го продольного спинового коррелятора $\langle S_i^z(0)\,S_j^z\,(t)\rangle$. Вместо параметра $1/Z$ более удобен его эрзац — обратный радиус взаимодействия $1/R$, впервые для магнетиков использованный в работах [4]. Именно: мы считаем обменную функцию $\mathcal{J}\,(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$ отличной от нуля только между подрешетками с разной ориентацией спинов и для ее Фурье-образа $\mathcal{J}_\mathbf{k}$ предполагаем поведение

$$\mathcal{J}_\mathbf{k}=\begin{cases}\mathcal{J}_0, & ka<a/R,\\ B, & ka>a/R,\end{cases}\qquad |B|\approx\mathcal{J}_0\left(\frac{a}{R}\right)^{3/2}\ll\mathcal{J}_0, \tag{3}$$

a — шаг решетки.

3. Мы не будем выписывать, как в [1], точного функционального представления для производящего функционала $G\,(h)$

$$G(h) = \mathrm{Tr}\, T \exp\left[-\beta H + \int_0^\beta dt \mathbf{h}_i(t)\, \mathbf{S}_i \right] \tag{4}$$

(здесь и ниже подразумевается суммирование по повторяющимся индексам) из-за его громоздкости, связанной с наличием двух подрешеток. Вместо этого, используя малость поперечных флуктуаций, мы получим для $G(\mathbf{h})$ приближенное представление и затем выражение для $G(h_z)$, содержащее в первом неисчезающем порядке интересующие нас эффекты ($G(h_z) = G(\mathbf{h} = (0,\ 0,\ h_z))$).

Функционал $G(\mathbf{h})$ можно записать в виде [5, 6] (см. также [1])

$$G(\mathbf{h}) = \int D\varphi(t) \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^\beta dt \varphi_k \varphi_j \mathcal{J}_{kj}^{-1} + \int_0^\beta dt \mathbf{h}_k \mathcal{J}_{kj}^{-1} \varphi_j \right) \times$$

$$\times \prod_l \mathrm{Tr}\, T \exp\left(i \int_0^\beta dt \varphi_l(t)\, \mathbf{S}_l \right). \tag{5}$$

Далее мы будем приближенно вычислять след упорядоченной экспоненты как функционал от $\varphi(t)$ (индекс узла временно опустим)

$$\mathrm{Tr}\, T \exp\left(i \int_0^\beta dt \varphi(t)\, \mathbf{S} \right) = \sum_{\sigma = \pm 1} \langle \sigma | T \exp\left(i \int_0^\beta dt \varphi(t)\, \mathbf{S} \right) | \sigma \rangle =$$

$$= \sum_{\sigma = \pm 1} \exp\left(\frac{i}{2} \sigma \int_0^\beta \rho^\sigma(t)\, dt \right). \tag{6}$$

Здесь

$$S^z | \sigma \rangle = \frac{1}{2} \sigma | \sigma \rangle, \quad \rho^\sigma(t) = \varphi^z(t) + 2\sigma \psi^+(t)\, \psi^-(t), \tag{7}$$

где функции $\psi^\pm(t)$ определяются из следующих уравнений (см. [1]):

для $\sigma = +1$

$$\psi^- = \varphi^-, \quad -i\dot{\psi}^+ + \varphi^z \psi^+ + \psi^- (\psi^+)^2 = \varphi^+, \quad \psi^+(0) = 0, \tag{8}$$

для $\sigma = -1$

$$\psi^+ = \varphi^+, \quad -i\dot{\psi}^- - \varphi^z \psi^- + \psi^+ (\psi^-)^2 = \varphi^-, \quad \psi^-(0) = 0, \quad \varphi^\pm = {}^1/_2 (\varphi^x \pm i\varphi^y). \tag{9}$$

Считая $\varphi^+\varphi^- \ll (\varphi^z)^2$, уравнения (8), (9) можно решать итерациями. В первом неисчезающем порядке получим

$$\frac{i}{2} \sigma \int_0^\beta \rho^\sigma(t)\, dt = \frac{i}{2} \sigma \int_0^\beta \varphi^z(t)\, dt - \int_0^\beta dt \int_0^\beta dt' \Theta(\sigma(t - t')) \times$$

$$\times \varphi^-(t)\, \varphi^+(t') \exp\left(-i \int_{t'}^t d\tau \varphi^z(\tau) \right). \tag{10}$$

Пусть σ_k — функция узла r_k, принимающая значение $+1$ на положительной подрешетке и -1 на отрицательной. При низких температурах перевальная конфигурация φ_j^z соответствует классическому вакууму

$$(\varphi_j^z)_0 = \frac{i}{2} \mathcal{J}_{jl} \sigma_l = -\frac{i}{2} \mathcal{J}_0 \sigma_j. \tag{11}$$

Затравочное квадратичное действие для поперечных мод

$$S_{\mathrm{tr}}^{(2)} = -2\int\limits_0^\beta dt\varphi_j^+(t)\mathcal{J}_{jl}^{-1}\varphi_l^-(t) - \frac{1}{2}\sum_l\int\limits_0^\beta dt\int\limits_0^\beta dt'\Theta(\sigma_l(t-t'))\varphi_l^-(t)\varphi_l^+(t')\times$$
$$\times\exp\left(-\frac{1}{2}\sigma_l\mathcal{J}_0(t-t')\right) \qquad (12)$$

описывает обычные магнонные возбуждения под классическим вакуумом. Диагонализация (12) по пространственным индексам достигается введением внутриподрешеточных Фурье-компонент $\varphi_b^\pm(\mathbf{k})$; $b=1$, 2, так что на подрешетке b: $\sigma_l=(-1)^{b+1}\equiv\sigma^b$ и

$$\varphi_b^\pm(\mathbf{r}_j) = a^3\int\limits_w \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\varphi_b^\pm(\mathbf{k})e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \qquad (13)$$

где ω — зона Бриллюэна, соответствующая удвоенному периоду исходной решетки. Вычисление пропагаторов полей $\varphi_b^\pm(\mathbf{k})$ сводится к решению системы двух дифференциальных по времени уравнений первого порядка. Нам достаточно знать ответ при $\beta\to\infty$, $|\mathbf{k}|>1/R$

$$\langle\varphi_b^-(t_1,\mathbf{k})\varphi_b^+(t_2,\mathbf{k})\rangle = -\frac{1}{2}|B|^2\Theta(\sigma^b(t_1-t_2))\exp[-\sigma^b\Omega(t_1-t_2)] +$$
$$+\frac{1}{8}\left(\frac{|B|^2}{\mathcal{J}_0}\right)^2\Theta(\sigma^b(t_2-t_1))\exp[\sigma^b\Omega(t_1-t_2)],$$
$$\Omega = \frac{1}{2}\mathcal{J}_0\left(1-\frac{|B|^2}{2\mathcal{J}_0^2}\right). \qquad (14)$$

4. Следующий шаг — вычисление в эффективном действии W для флуктуаций $\eta_j^b(t)$ продольной компоненты

$$\varphi_b^z(\mathbf{r}_j,t) = -\frac{t}{2}\mathcal{J}_0\sigma^b + \eta_j^b(t) \qquad (15)$$

квадратичных членов первого порядка по $1/R$, доминантных на низких частотах. Отбор начинается просто: чем больше интегрирований по времени содержит данное слагаемое, тем более оно может оказаться существенным в определении инфракрасного поведения. Из двух слагаемых в $W(\eta)$

$$\frac{1}{2}\left(1+e^{-\beta\mathcal{J}_0}\right)\sum_{j,b}\int\limits_0^\beta dt\int\limits_0^\beta dt'\Theta(\sigma^b(t-t'))\langle\varphi_b^-(t,\mathbf{r}_j)\varphi_b^+(t',\mathbf{r}_j)\rangle e^{-\frac{1}{2}\mathcal{J}_0\sigma^b(t-t')}\left(\int\limits_{t'}^t\eta_j^b d\tau\right)^2 +$$
$$+\frac{1}{2}e^{-\beta\mathcal{J}_0}\sum_{j,b}\int\limits_0^\beta dt\int\limits_0^\beta dt'\Theta(\sigma^b(t'-t))\langle\varphi_b^-(t,\mathbf{r}_j)\varphi_b^+(t',\mathbf{r}_j)\rangle\times$$
$$\times e^{-\frac{1}{2}\mathcal{J}_0\sigma^b(t-t')}\left(\int\limits_{t'}^t\eta_j^b d\tau\right)^2 \qquad (16)$$

первое, не обращающееся в нуль и при $\beta\to\infty$, оказывается «нерезонансным». Действительно, в пропагаторе (14) знаки аргументов ступенчатых Θ-функций и показателей экспонент взаимно противоположны и первое слагаемое в (16), имеющее, таким образом, структуру типа

$$\sim\int\limits_0^\beta dt\int\limits_0^t dt' e^{-\mathcal{J}_0(t-t')}\left(\int\limits_{t'}^t\eta^b d\tau\right)^2,$$

дает вклад в $\eta-\eta$ коррелятор, быстро релаксирующий за время $\sim 1/\mathcal{J}_0$. Можно проверить, что это утверждение не изменится, если учесть в пропагаторе (14) конечно-температурные поправки (в удерживаемом порядке по $1/R$). Второй же член в (16) вместе со вторым слагаемым в (14) приводит к появлению в эффективном действии для поля η инфракрасно-сингулярной части, а именно

$$e^{-\beta\mathcal{J}_0}\left(\frac{|B|^2}{4\mathcal{J}_0}\right)^2\sum_{j,b}\int_0^\beta dt\int_0^t dt'\exp\left[\frac{|B|^2}{4\mathcal{J}_0}(t-t')\right]\left(\int_{t'}^t \eta_j^b d\tau\right)^2. \qquad (17)$$

В частотно-импульсном представлении при больших β и с точностью до первого неисчезающего порядка по $B/\mathcal{J}_0$ слагаемое (17) имеет вид

$$e^{-\beta\mathcal{J}_0}\frac{|B|^2}{2\mathcal{J}_0}\sum_{\mathbf{k},b}\int\frac{d\omega}{2\pi\omega^2}|\eta_{\mathbf{k}}^b(\omega)|^2. \qquad (18)$$

Вспоминая также затравочную часть действия для η

$$\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\int\frac{d\omega}{2\pi}\left(\frac{1}{\mathcal{J}_{\mathbf{k}}}\eta_{\mathbf{k}}^1(\omega)\,\eta_{\mathbf{k}}^{2*}(\omega)+\text{к. с.}\right), \qquad (19)$$

мы можем вычислить низкочастотную асимптотику $\langle\eta_{\mathbf{k}}^b(\omega)\,\eta_{\mathbf{k}}^{b*}(\omega)\rangle$. Приведем сразу результат продолжения в реальное время и взятия обратного Фурье-образа

$$ka > a/R, \quad t > 0,$$

$$\langle S_{b=1}^z(t,\mathbf{k})\,S_{b=1}^z(0,-\mathbf{k})\rangle=\langle S_{b=2}^z(t,\mathbf{k})\,S_{b=2}^z(0,-\mathbf{k})\rangle=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{|B|}{2\mathcal{J}_0}}\,e^{-\frac{1}{2}\beta\mathcal{J}_0}e^{-mt},$$

$$m^2=e^{-\beta\mathcal{J}_0}|B|^2/2\mathcal{J}_0,$$

$$\langle S_{b=1}^z(t,\mathbf{k})\,S_{b=2}^z(0,-\mathbf{k})\rangle=-\frac{1}{4}\frac{B}{|B|}\sqrt{\frac{|B|}{2\mathcal{J}_0}}\,e^{-\frac{1}{2}\beta\mathcal{J}_0}e^{-mt}. \qquad (20)$$

При переходе в t-представление линия интегрирования по частотам проходила на $+0$ выше вещественной прямой, что соответствует адиабатическому выключению взаимодействия при $t\to+\infty$.

5. Появление инфракрасно-сингулярных членов при описании продольной динамики имеет простое объяснение — перевернувшийся в результате флуктуации «изинговского типа» (вес $\sim e^{-\beta\mathcal{J}_0}$) спин попадает в резонанс с магнонами, имеющими частоту, близкую к величине среднего поля $^1/_2\mathcal{J}_0$. При $a/R\to 0$ магноны с частотой $\Omega={}^1/_2\mathcal{J}_0-0\,(\mathcal{J}_0/R)$ занимают большую часть зоны Бриллюэна. (Важную роль таких магнонов отмечали также авторы работы [7]). При взаимодействии ближайших соседей легко проверить, что средняя по углам частота магнонов в конечной части зоны Бриллюэна $\omega={}^1/_2\mathcal{J}_0-0\,(\mathcal{J}_0/Z)$, где Z — число этих соседей, и, например, при $Z=8$ наши формулы могут претендовать на полуколичественное описание продольной динамики в реальных кристаллах.

В заключение я хотел бы поблагодарить О. П. Сушкова за многочисленные обсуждения и полезные советы и В. И. Белиничера за стимулирующую критику.

Список литературы

[1] Колоколов И. В., Подивилов Е. В. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 1. С. 211—222.
[2] Affleck I. Univ. of Brit. Columbia Prep. Vancouver, 1988.
[3] Марч Н., Паринелло М. Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях. М.: Мир, 1986. 319 с.
[4] Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 1. С. 281—299 и № 4. С. 1089—1106.
[5] Leibler S., Orland H. // Ann. Phys. (N. Y.). 1981. V. 132. N 1. P. 277—298.
[6] Hubbard J. // Phys. Lett. 1959. V. 3. N 2. P. 77—81.
[7] Белиничер В. И., Львов В. С. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 4. С. 967—980.

Институт ядерной физики СО АН СССР
Новосибирск

Поступило в Редакцию
21 июня 1989 г.