

## Двумерная модель Гейзенберга со спином $s = 1/2$ и антиферромагнитным обменом как спиновая жидкость

© Е.В. Кузьмин

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

E-mail: evk@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 1 октября 2001 г.)

Спиновая система в модели Гейзенберга ( $s = 1/2$ ) на квадратной решетке с антиферромагнитным (AF) обменным взаимодействием между ближайшими соседями, в которой дальний магнитный порядок при любых  $T \neq 0$  отсутствует, рассмотрена как пространственно однородная и изотропная спиновая жидкость (SL). Описание проведено методом двухвременных температурных функций Грина в рамках теории второго порядка. Показано, что при  $T \rightarrow 0$  SL, не меняя симметрии, переходит в синглетное состояние с энергией (на связь)  $\varepsilon_0 = -0.352$ , причем корреляционная длина  $\xi \propto T^{-1} \exp(T_0/T)$  расходится. Пространственные спиновые корреляторы знакопеременны, как и в AF состоянии. Теория позволяет вычислить основные характеристики системы во всей температурной области.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 00-02-16110).

Предмет настоящей работы — обсуждение проблемы основного состояния и основных термодинамических свойств спиновой системы ( $s = 1/2$ ), описываемой изотропной моделью Гейзенберга с антиферромагнитным обменным взаимодействием между ближайшими соседями (здесь  $J > 0$ ) с гамильтонианом  $H$  и оператором полного спина  $S$ ,

$$H = \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{f}\mathbf{a}} s_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}, \quad S = \sum_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}} \quad (1)$$

на квадратной решетке. Для общности гамильтониан (1) будем рассматривать на альтернантной<sup>1</sup> решетке из  $N$  узлов с периодическими граничными условиями:  $\mathbf{f}$  — узлы решетки,  $D$  — ее размерность,  $z$  — число ближайших соседей (б.с.),  $\mathbf{a}$  — векторы, соединяющие б.с. Основное состояние (ОС) и термодинамические свойства системы существенно зависят от ее размерности  $D$ .

Проблема основного состояния ( $T = 0$ ) двумерной модели ( $D = 2, z = 4$ ) до сих пор остается открытой. Маршалл [1,2] высказал теоремное утверждение о том, что ОС гамильтониана (1) на альтернантных решетках является невырожденным синглетом с полным спином  $S = 0$  (оно строго доказано лишь для одномерной цепочки). С другой стороны, для  $D = 2, 3$  на альтернантных решетках возможно шахматное распределение спинов, которое описывается неелевской волновой функцией антиферромагнетика с двумя эквивалентными зеркальными подрешетками. При  $T = 0$  принято считать, что двухподрешеточное антиферромагнитное (AF) состояние с дальним порядком является наилучшим приближенным основным состоянием системы [3]. Тем не менее Андерсон в работе [4] допустил, что

<sup>1</sup> Альтернантными называются решетки, которые можно представить в виде двух эквивалентных подрешеток А и В, вставленных друг в друга так, что ближайшими соседями подрешетки А являются узлы подрешетки В и наоборот.

основное состояние гамильтониана (1) на квадратной решетке может быть разупорядоченным, и предложил для его описания волновую функцию с резонансными валентными связями (RVB). Позднее в [5] с использованием RVB волновых функций было численно показано (на решетках  $128 \times 128$  и  $256 \times 256$ ), что энергия разупорядоченного (синглетного) состояния с точностью до 0.1% совпадает с наилучшим результатом для энергии в упорядоченном AF состоянии и равна  $-0.3344$  на связь. Однако на малом кластере  $4 \times 4$  в результате точной диагонализации было получено значение энергии синглетного состояния  $-0.3509$  [6]. В обзоре [3] рассмотрены различные подходы к решению этой проблемы.

Столь же принципиальными являются термодинамические свойства системы. По теореме Мермина и Вагнера [7] при  $T \neq 0$  дальний магнитный порядок может существовать только в трехмерных (или квазидвумерных) решетках ( $D = 3$ ) вплоть до критической температуры  $T_c$ . Таким образом, AF состояние в квадратной решетке ( $D = 2$ ) является „выколотой“ температурной точкой, и возникает проблема описания системы при  $T \neq 0$ . Тем самым размерность  $D = 2$  в определенном смысле является критической или промежуточной между одномерной системой (в которой дальний магнитный порядок отсутствует в принципе) и трехмерными системами с дальним магнитным порядком при температурах ниже критической.

В работах Шимахара и Такада [8], Барабанова и Березовского [9–11] предложена теория термодинамических свойств этой системы с предположением (постулатом) о наличии дальнего AF порядка неелевского типа при  $T = 0$ .

В данной работе предполагается, что двумерная система находится в немагнитном состоянии с хорошо развитым ближним порядком антиферромагнитного типа. Это состояние названо спиновой жидкостью (SL). При

описании термодинамических свойств SL использована методика и ряд предположений из работ [8–11]. Однако при  $T \rightarrow 0$  SL состояние, не меняя симметрии, переходит в синглетное с энергией (на связь)  $\varepsilon_0$ . Заранее не ясно, является ли оно основным, ибо с ним может конкурировать AF состояние с энергией  $\varepsilon_{AF}$ , и только сравнение  $\varepsilon_0$  и  $\varepsilon_{AF}$  позволит сделать вывод о типе ОС.

## 1. Спиновая жидкость. Корреляционные функции и функции Грина

Определим спиновую жидкость как пространственно однородную систему без разрушения симметрии, в которой:

1) спиновые корреляционные функции изотропны

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^x s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^x \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^y s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^y \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^z \rangle \equiv \frac{1}{4} K_r \end{aligned} \quad (2)$$

и зависят только от модуля вектора  $r = |\mathbf{r}|$ ,  $K_0 = 1$  или  $\langle s_{\mathbf{f}}^2 \rangle = 3/4$  (здесь и далее символ  $\langle \dots \rangle$  означает термодинамическое среднее при  $T \neq 0$  и по волновой функции синглетного состояния  $|\Psi_0\rangle$  при  $T = 0$ );

2) равны нулю следующие средние:

$$\begin{aligned} \langle s_{\mathbf{f}}^\alpha \rangle &= 0, \quad \langle S^\alpha \rangle = 0 \quad (\text{a}); \\ \langle s_{\mathbf{f}}^\alpha s_{\mathbf{m}}^\beta s_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle &= 0, \quad \mathbf{f} \neq \mathbf{m} \neq \mathbf{n} \quad (\text{b}), \dots, \end{aligned} \quad (3)$$

т.е. для нечетного произведения операторов на разных узлах ( $\alpha = x, y, z$  или  $+, -, z$ ).

Свойства SL состояния определяются главным образом температурным поведением спиновых корреляционных функций. Энергия SL состояния на одну связь в единицах  $J$  равна

$$\varepsilon = \frac{\langle H \rangle}{(1/2)zNJ} = -\frac{3}{4} K_1, \quad (4)$$

где  $K_a = -K_1$  ( $K_1 > 0$ ) является корреляционной функцией для б.с. ( $a$  — параметр решетки). При  $T = 0$  соотношение (4) определяет энергию синглетного состояния  $\varepsilon_0$ .

Для описания SL состояния переходим к фурье-образам спиновых операторов и вводим фурье-образ корреляционной функции

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} K_r = 4 \langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q}) \rangle = 2 \langle s^+(\mathbf{q}) s^-(\mathbf{q}) \rangle, \\ K_r &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} K(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (5)$$

с очевидными свойствами  $K(\mathbf{q}) = K(-\mathbf{q})$ ,  $K_r = K_{-r}$ . По найденному фурье-образу  $K(\mathbf{q})$  можно вычислить

любые пространственные корреляторы  $K_r$ . Методически будем следовать работам [8,9–11], используя для вычисления  $K(\mathbf{q})$  двухвременные запаздывающие температурные функции Грина [12]. Далее будет вычисляться функция  $\langle \langle s^z(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q}) \rangle \rangle_\omega \equiv G(\mathbf{q}, \omega)$ ; очевидно, что из-за изотропности спиновых корреляторов  $\langle \langle s^+(\mathbf{q}) | s^-(\mathbf{q}) \rangle \rangle_\omega = 2G(\mathbf{q}, \omega)$ .

## 2. Уравнения движения

Удобно перейти к безразмерному гамильтониану  $h = H/zJ$  (при этом все энергетические параметры также обезразмерены на величину  $zJ$ ). Уравнения движения имеют следующий вид ( $\hbar = 1$ ):

$$\begin{aligned} i s_{\mathbf{f}}^+ &= \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{a}} (s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^z s_{\mathbf{f}}^+ - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^z s_{\mathbf{f}}^+), \\ i s_{\mathbf{f}}^z &= \frac{1}{2z} \sum_{\mathbf{a}} (s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^- - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}}^-), \end{aligned} \quad (6)$$

$$-\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z}{\partial t^2} = \frac{1}{2z^2} \sum_{\mathbf{a}} (s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^z) + R_{\mathbf{f}}, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} R_{\mathbf{f}} &= \frac{1}{z^2} \sum_{\mathbf{a} \neq \mathbf{a}'} \left[ s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^- + s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}-\mathbf{a}'}^z \frac{1}{2} (s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^- + s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}}^-) \right. \\ &\quad \left. - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^z \frac{1}{2} (s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}-\mathbf{a}'}^- + s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}-\mathbf{a}'}^+ s_{\mathbf{f}}^-) \right. \\ &\quad \left. - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^z \frac{1}{2} (s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^- + s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}}^-) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

В уравнении второго порядка точно учтены кинетические свойства спиновых операторов на одном узле, что является принципиальным.

Оборвем цепочку уравнений на втором шаге путем линеаризации оператора  $R_{\mathbf{f}}$  ( $\mathbf{a} \neq \mathbf{a}'$ ) по схеме [8–11]

$$\begin{aligned} s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^- &\approx \alpha_2 \langle s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^- \rangle s_{\mathbf{f}}^z = \frac{1}{2} \alpha_2 K_{\mathbf{a}-\mathbf{a}'} s_{\mathbf{f}}^z, \\ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^z s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^- &\approx \alpha_1 \langle s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^- \rangle s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^z = \frac{1}{2} \alpha_1 K_{\mathbf{a} s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}}, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\alpha_1$  — множитель, корректирующий расщепление для б.с. ( $K_a = -K_1$ ),  $\alpha_2$  — аналогичный параметр для корреляторов на расстояниях  $r = d = \sqrt{2}a$  (по диагонали) и  $r = 2a$  (далее параметр решетки  $a = 1$ ). Тогда

$$\begin{aligned} (R_{\mathbf{f}})_{\text{lin}} &= \frac{1}{2} \frac{1}{z^2} \sum_{\mathbf{a} \neq \mathbf{a}'} (\alpha_2 K_{\mathbf{a}-\mathbf{a}'} (s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^z) \\ &\quad + \alpha_1 K_1 (s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'-\mathbf{a}}^z)), \end{aligned} \quad (10)$$

причем

$$K_2 = \frac{1}{z^2} \sum_{\mathbf{a}, \mathbf{a}'} K_{\mathbf{a}-\mathbf{a}'} = \frac{1}{z} [1 + (z-2)K_d + K_{2a}]. \quad (11)$$

На основе уравнений (6) и линеаризованного уравнения (7) после фурье-преобразования стандартным методом получаем функцию Грина теории второго порядка

$$G(\mathbf{q}, \omega) = \frac{A(\mathbf{q})}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad A(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{2} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) \quad (12)$$

со спектром возбуждений

$$\Omega_{\mathbf{q}} = \lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta), \quad E_{\mathbf{q}}(\Delta) = \sqrt{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 + \gamma_{\mathbf{q}} + \Delta)},$$

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{D} \sum_j \cos q_j, \quad (13)$$

где  $\lambda$  — параметр жесткости спектра возбуждений

$$\lambda^2 = \alpha_1 K_1 / 2, \quad (14)$$

а параметр  $\Delta$  (псевдощель при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , когда  $\gamma_{\mathbf{Q}} = -1$ ) определяется соотношением

$$1 + \Delta = \frac{1}{2\lambda^2} \left( \frac{1 + 2\lambda^2}{z} + \alpha_2 \left( K_2 - \frac{1}{z} \right) \right). \quad (15)$$

Спектр  $\Omega_{\mathbf{q}} \geq 0$  описывает коллективные триплетные возбуждения по отношению к синглетному состоянию. Все параметры спектра зависят от температуры и должны быть вычислены самосогласованно.

### 3. Уравнения самосогласования

Мнимая часть функции Грина (12) равна

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{q}, \omega + i0)$$

$$= \frac{A(\mathbf{q})}{2\Omega_{\mathbf{q}}} [\delta(\omega - \Omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \Omega_{\mathbf{q}})] \equiv n(\mathbf{q}, \omega), \quad (16)$$

и тогда спектральная плотность для  $z$ -компонент принимает вид

$$J(\mathbf{q}, \omega; \tau) = \frac{e^{\omega/\tau}}{e^{\omega/\tau} - 1} n(\mathbf{q}, \omega), \quad (17)$$

где  $\tau = T/zJ$  — безразмерная температура. По спектральной теореме [12] для одновременного среднего получаем

$$\langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q}) \rangle \equiv \frac{1}{4} K(\mathbf{q}) = \frac{A(\mathbf{q})}{2\Omega_{\mathbf{q}}} \text{cth} \left( \frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right) \quad (18)$$

или

$$K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)} \text{cth} \left( \frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta)}{2\tau} \right). \quad (19)$$

Из определения пространственных корреляторов  $K_r$  (5) следуют уравнения

$$K_n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (-\gamma_{\mathbf{q}})^n K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_n(\Delta, \tau), \quad K_0 = 1, \quad (20)$$

где

$$I_n(\Delta, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(-\gamma_{\mathbf{q}})^n}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)} \text{cth} \left( \frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta)}{2\tau} \right),$$

$$n = 0, 1, 2. \quad (21)$$

Они должны быть решены самосогласованно совместно с уравнением на псевдощель (15) и соотношением (14).

Как и в [8–11], здесь возникает проблема нахождения пяти параметров ( $K_1, K_2, \alpha_1, \alpha_2, \Delta$ ) по четырем уравнениям (20) ( $n = 0, 1, 2$ ) и (15). В выборе пятого недостающего уравнения имеется известный произвол. В [8] предложено фиксировать значение параметра  $r_{\alpha} = (\alpha_1 - 1)/(\alpha_2 - 1) = \text{const}$  и находить его из условия существования АФ состояния при  $T = 0$  с подрешеточной намагниченностью  $m = 0.3$  (тем самым основное АФ состояние постулируется). Будем далее его называть условием Шимахары–Такада (ШТ).

В данной работе уравнение, необходимое для замыкания системы, предлагается выбрать на основе свойства (3b). Можно точно вычислить следующее среднее, используя правила умножения операторов на одном узле и свойство (3b),

$$\langle R_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}}^z \rangle = \frac{1}{4z^2} \sum_{\mathbf{a} \neq \mathbf{a}'} \langle s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{a}'}^- \rangle = \frac{1}{8} \tilde{K}_2,$$

$$\tilde{K}_2 = K_2 - 1/z, \quad (22)$$

и тогда

$$\left\langle \left( -\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z}{\partial t^2} \right) s_{\mathbf{f}}^z \right\rangle = \frac{1}{8} \left( K_2 + \frac{1}{z} K_1 \right). \quad (23)$$

В рамках рассматриваемой линейной теории имеем

$$\left\langle \left( -\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z}{\partial t^2} \right)_{\text{lin}} s_{\mathbf{f}}^z \right\rangle = \frac{1}{8} \left( \frac{1 + K_1}{z} \right.$$

$$\left. + [\alpha_2(1 + K_1) - \alpha_1 K_1] \tilde{K}_2 - \frac{z-1}{z} \alpha_1 K_1^2 \right). \quad (24)$$

Требую равенства точного соотношения (23) и приближенного (24), получаем пятое уравнение, необходимое для замыкания системы.

Соотношение (24) удобно представить в эквивалентном виде, выразив его через второй момент. На основании спектральной теоремы одноузельное среднее можно представить в виде

$$\langle s_{\mathbf{f}}^z(t) s_{\mathbf{f}}^z(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} J_0(\omega) d\omega,$$

$$J_0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}, \omega; \tau), \quad (25)$$

где  $J_0(\omega)$  — спектральная плотность одноузельной функции Грина  $G_{\mathbf{ff}}(\omega) \equiv G_0(\omega)$ .

Нулевой момент определим как среднее (25) при  $t = 0$

$$M_0 = \langle s_{\mathbf{f}}^z(0) s_{\mathbf{f}}^z(0) \rangle = \langle s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}}^z \rangle = \frac{1}{4} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} J_0(\omega) d\omega = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{A(\mathbf{q})}{2\Omega_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \left( \frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right). \quad (26)$$

Это соотношение является правилом сумм и воспроизводит уравнение для коррелятора  $K_0$ . Дифференцируя (25) по времени, получаем в пределе  $t = 0$  выражение для первого момента

$$M_1 = \left\langle \left( i \frac{\partial s_{\mathbf{f}}^z(t)}{\partial t} \right) s_{\mathbf{f}}^z(0) \right\rangle_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega J_0(\omega) d\omega. \quad (27)$$

Левая часть (27) точно вычисляется по уравнению (6) и дает результат  $K_1/4$ , а вычисление правой части, как легко убедиться, приводит к тождеству. Второй момент равен

$$M_2 = \left\langle \left( -\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z(t)}{\partial t^2} \right) s_{\mathbf{f}}^z(0) \right\rangle_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 J_0(\omega) d\omega. \quad (28)$$

Левая часть (28) определена точным выражением (23), а в результате вычисления правой части получаем

$$\frac{1}{8} (K_2 + K_1/z) = \frac{1}{4} \lambda K_1 P(\Delta, \tau),$$

$$P(\Delta, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) E_{\mathbf{q}}(\Delta) \operatorname{cth} \left( \frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right). \quad (29)$$

Соотношение (29) эквивалентно требованию  $\langle R_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}}^z \rangle = \langle (R_{\mathbf{f}})_{\text{in}} s_{\mathbf{f}}^z \rangle$ , равенству (23) и (24) и является новым условием самосогласования по сравнению с условием ШТ [8]. Таким образом, внутренне согласованная теория второго порядка может быть основана на требовании точного вычисления первых трех моментов:  $M_0$ ,  $M_1$  и  $M_2$ .

#### 4. Самосогласованное решение уравнений

Для аналитического и численного решения системы уравнений (20), (15) и (29) с определениями  $\Omega_{\mathbf{q}} = \lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta)$ ,  $\lambda^2 = \alpha_1 K_1/2$  запишем (21) в виде

$$I_n(\Delta, \tau) = I_n(\Delta) + B_n(\Delta, \tau), \\ I_n(\Delta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(-\gamma_{\mathbf{q}})^n}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)}, \quad (30)$$

$$B_n(\Delta, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(-\gamma_{\mathbf{q}})^n}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)} \frac{2}{\exp(\lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta)/\tau) - 1}. \quad (31)$$

Интегралы  $I_n(\Delta)$  соответствуют нулевой температуре  $\tau = 0$ , так что в них  $\Delta = \Delta(0)$ . Минимум энергии системы (4) реализуется при максимальной величине  $K_1$  и, как легко показать, при  $\Delta(0) = 0$ . Тогда интегралы принимают вид

$$I_n(0) \equiv I_n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{1 + \gamma_{\mathbf{q}}}} (-\gamma_{\mathbf{q}})^n \\ = \int_{-1}^1 D(\gamma) \sqrt{\frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}} (-\gamma)^n d\gamma. \quad (32)$$

Здесь  $D(\gamma)$  — плотность состояний в квадратной решетке для закона дисперсии  $\gamma_{\mathbf{q}} = 0.5(\cos q_x + \cos q_y)$ , которая выражается через полный эллиптический интеграл первого рода  $\mathbf{K}(x)$

$$D(\gamma) = \frac{2}{\pi^2} \mathbf{K}(\sqrt{1 - \gamma^2}) \approx \frac{1}{\pi} - \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right) \ln |\gamma|,$$

$$\int_{-1}^1 D(\gamma) d\gamma = 1. \quad (33)$$

Расчет дает следующие значения:  $I_0 = 1.396$ ,  $I_1 = I_2 = 0.555$ . Аналогично через плотность состояний выражаются интегралы  $B_n(\Delta, \tau)$ .

4.1. Низкотемпературный режим. Вычисление интегралов  $B_n$  при  $\tau \rightarrow 0$  проведем, следуя работам [8,13]. При  $\tau \rightarrow 0$  область в окрестности  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  оказывается наиболее важной из-за возможности существования аномального вклада (помимо степенного), не исчезающего при  $\tau \rightarrow 0$ . Результат вычислений следующий:

$$B_0(t) = C(t) + \frac{D(1)}{2} t^3, \\ B_1(t) = B_2(t) = C(t) - \frac{3}{2} D(1) t^3 \quad (34)$$

с точностью до  $O(t^5)$ , где  $D(1) = 1/\pi$  и

$$C(t) = \frac{2}{\pi} \ln \left( \frac{t^2}{2\Delta} \right), \quad t = \tau/\lambda(0). \quad (35)$$

Наиболее общий вид низкотемпературной зависимости целевого параметра

$$\Delta(t) = \Delta_0 t^{2\beta} \exp \left( -\frac{2t_0}{t} \right) \quad (36)$$

позволяет рассмотреть два сценария: если  $t_0 = 0$ , то имеем степенное поведение ( $\beta > 0$ ), а при  $t_0 \neq 0$  — экспоненциальное. Под конденсацией в окрестности  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , где  $\gamma_{\mathbf{Q}} = -1$ , будем подразумевать (как и в работах [8–11]) ненулевой предел ( $\tau \rightarrow 0$ ) функции (35)

$$C(0) = \lim_{t \rightarrow 0} C(t) = \frac{4t_0}{\pi} \equiv C, \quad (37)$$

который не зависит от предэкспоненциального множителя в (36).

4.2. Основное состояние системы на квадратной решетке. Система уравнений (20), (15) и (22) для самосогласованного нахождения параметров системы при  $\tau = 0$ ,  $\Delta = 0$ ,  $P(0, 0) = 0.84$  имеет решение

$$\lambda = 0.744, \quad K_1 = 0.469,$$

$$\alpha_1 = 2.236, \quad \alpha_2 = 2.65, \quad C = 0.189. \quad (38)$$

При этом энергия системы (в единицах  $J$  на одну связь)

$$\varepsilon_0 = -(3/4)K_1 = -0.352 \quad (39)$$

оказывается ниже энергии АФ состояния  $\varepsilon_{AF} = -0.335$  (наилучшего результата спин-волновой теории [3]). Численно очень близкое значение энергии  $\varepsilon_{AF} = -0.3508$  получено в [8] с использованием величины подрешеточной намагниченности  $m = 0.3$  и  $\varepsilon_{AF} = -0.345$  в [9,10]. Докажем, что полученное состояние является синглетным. В синглетном состоянии при  $\tau = 0$  должно выполняться соотношение  $\langle S^2 \rangle = 0$ . Рассмотрим функцию

$$\begin{aligned} S^2(\tau) &\equiv \frac{1}{N} \langle S^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{fm}} \langle S_{\mathbf{f}} S_{\mathbf{m}} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{fr}} \langle S_{\mathbf{f}} S_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} \rangle = \frac{3}{4} \sum_{\mathbf{r}} K_{\mathbf{r}} = \frac{3}{4} K(0). \end{aligned} \quad (40)$$

Из (19) следует, что

$$\begin{aligned} K(0) &= \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} K(\mathbf{q}) \\ &= \frac{K_1}{\lambda} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)} \operatorname{cth} \left( \frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right) = \frac{4\tau}{\alpha_1(2 + \Delta)}. \end{aligned} \quad (41)$$

Отсюда получаем  $K(0) = 0$ ,  $\langle S^2 \rangle = 0$  при  $\tau = 0$ . Таким образом, в рамках имеющихся приближенных аналитических теорий можно сделать вывод об основном синглетном состоянии спиновой системы на квадратной решетке. Этот вывод подтверждается результатом точной диагонализации кластера:  $\varepsilon_0 = -0.3509$  [6].

4.3. Уравнение для  $\Delta$ . Полученное решение ( $C \neq 0$ ) предполагает экспоненциальную зависимость  $\Delta(\tau)$  в соответствии с (36) и позволяет найти параметр  $\tau_0 = \lambda t_0 = (\pi\lambda/4)C = 0.11$ . При чисто степенной зависимости  $\Delta(\tau)$ , когда  $C = 0$ , система уравнений самосогласованных решений не имеет. Отметим, что в трехмерном случае из-за корневого поведения плотности состояний на границах спектра конденсат отсутствует ( $C = 0$ ).

Уравнение для щели  $\Delta$  (15) в низкотемпературной области имеет решение

$$2\Delta(\tau) \approx \left( \frac{\tau}{\lambda} \right)^2 \exp(-2\tau_0/\tau). \quad (42)$$

Тогда из (42) следует, что параметры  $\lambda$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  в этой области имеют чисто степенную зависимость (как и в

работе [8]) с главным вкладом  $\propto \tau^3$

$$\lambda(\tau) = \lambda - \frac{3}{2\pi} (\tau/\lambda)^3,$$

$$\alpha_1(\tau) = \alpha_1 - A_1 \tau^3, \quad \alpha_2(\tau) = \alpha_2 - A_2 \tau^3. \quad (43)$$

Поскольку в этом пределе  $K_1(\tau) = K_1 - \kappa \tau^3$ , энергия системы

$$\varepsilon(\tau) = -(3/4)K_1(\tau) = \varepsilon_0 + (3/4)\kappa \tau^3 \quad (44)$$

и теплоемкость  $c(\tau) \propto \tau^2$ .

4.4. Термодинамические свойства спиновой жидкости. Замена условия ШТ новым (29) не изменяет характера температурной зависимости параметров теории (имеется лишь незначительное различие численных коэффициентов). По этой причине здесь не приводятся детали самосогласованных расчетов термодинамических характеристик SL, а лишь перечисляются основные результаты.

Результат самосогласованных вычислений  $\lambda(\tau)$  — параметра жесткости спектра возбуждений и  $K_1(\tau)$  — модуля корреляционной функции для б.с. представлен на рис. 1. Асимптотически ( $\tau > 2$ ) они имеют степенную температурную зависимость:  $\lambda(\tau) \approx 0.18/\tau^{1/2}$ ,  $K_1(\tau) \approx 0.06/\tau$ .

Теплоемкость в безразмерных единицах есть  $c(\tau) = \partial \varepsilon(\tau)/\partial \tau$  и ее температурная зависимость представлена на рис. 2. При  $\tau \rightarrow 0$   $c(\tau) \propto \tau^2$  в соответствии с (44), максимум соответствует температуре  $\tau^* \approx 0.2 \approx 2\tau_0$  и асимптотически  $c(\tau) \propto 1/\tau^2$  (поскольку  $K_1(\tau) \propto 1/\tau$ ).

Динамическая восприимчивость спиновой системы в безразмерных единицах определяется соотношением [12]

$$\chi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle s^{\alpha}(\mathbf{q}) | s^{\beta}(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega}. \quad (45)$$

В SL состоянии из-за изотропности корреляционных функций  $\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = 2\chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$ . Статическая восприимчивость ( $\omega = 0$ ) в соответствии с (12) имеет вид

$$\begin{aligned} \chi^{zz}(\mathbf{q}, 0) &= \frac{K_1}{2} \frac{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\Omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{K_1}{2\lambda^2} \frac{1}{1 + \gamma_{\mathbf{q}} + \Delta} \\ &= \frac{1}{\alpha_1} \frac{1}{1 + \gamma_{\mathbf{q}} + \Delta}. \end{aligned} \quad (46)$$

Из (46) следует, что

$$\begin{aligned} \chi^{zz}(\mathbf{q} = 0, 0) &= 1/2\alpha_1 = 0.212, \quad \tau \rightarrow 0, \\ \chi^{zz}(\mathbf{q} = \mathbf{Q}, 0) &= \frac{1}{\alpha_1 \Delta} = \frac{2\lambda^2 \exp(2\tau_0/\tau)}{\alpha_1 \tau^2} \end{aligned} \quad (47)$$

с расходимостью при  $\tau \rightarrow 0$ , как и в АФ состоянии.

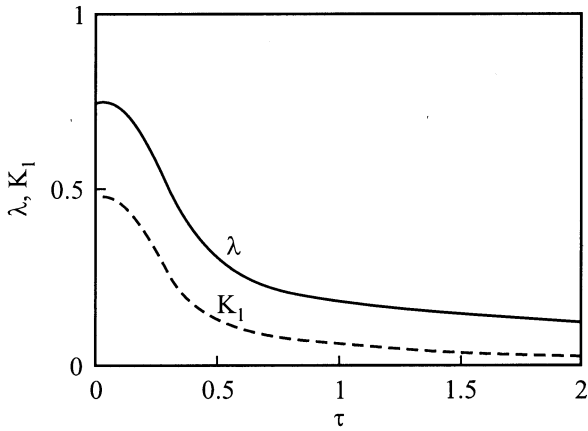
Термодинамическая продольная восприимчивость по определению равна [12]

$$\begin{aligned} \chi^{zz} &= \frac{1}{T} [\langle (S^z(0))^2 \rangle - \langle S^z(0) \rangle^2] \equiv \frac{1}{T} \tilde{\chi}_0, \\ \tilde{\chi}_0 &= \frac{1}{N} \langle (S^z)^2 \rangle = \frac{1}{3} S^2(\tau) = \frac{1}{4} K(0) \end{aligned} \quad (48)$$

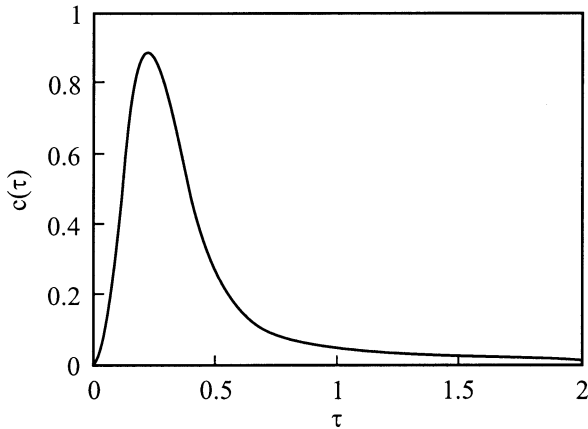
и совпадает с динамической при  $\omega \rightarrow 0$ ,  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ . В области низких температур  $\tilde{\chi}^{zz}(\tau) = \tilde{\chi}^{zz}(0) + a_1 \tau^3$

в соответствии с температурной зависимостью  $\alpha_1(\tau)$ ; величина  $\tilde{\chi}^{zz}(0) = 1/2\alpha_1 = 0.212$  совпадает с результатом работы [8], если учесть нормировку на  $z = 4$  ( $T/J = z\tau$ ,  $0.212/4 = 0.053$ , как и в [8]).  $\tilde{\chi}^{zz}(\tau)$  имеет максимум при  $\tau \approx 0.1 \approx \tau_0$  и далее — убывание с асимптотикой  $1/4\tau$ . Рис. 3 демонстрирует температурное поведение  $S^2(\tau)$  — среднего значения квадрата полного спина системы.

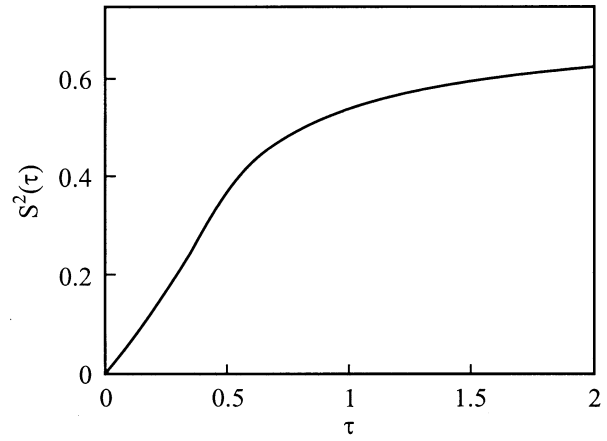
Коэффициенты в асимптотическом поведении функций ( $\tau \rightarrow \infty$ ), когда корреляции исчезают, можно получить аналитически, используя следующие условия: (1) спектр возбуждений ограничен  $\Omega_{\mathbf{q}} \rightarrow \lambda\sqrt{\Delta}\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{q}}}$ , т.е.  $\lambda\sqrt{\Delta} \rightarrow \text{const} \equiv \bar{c}$ ; (2)  $S^2(\tau) \rightarrow 3/4$ ; (3) параметры расщепления  $\alpha_1(\tau) \rightarrow 1$ ,  $\alpha_2(\tau) \rightarrow 1$  и  $K_2 \rightarrow 1/4$ . Условие (2) эквивалентно  $K(0) \rightarrow 1$ . Используя сильное неравенство  $\Delta \gg 2$ , получаем  $\Delta(\tau) \rightarrow 4\tau$ . Тогда из условия (1) находим  $\lambda(\tau) = \bar{c}/(2\sqrt{\tau})$ . Асимптотически  $I_0 \rightarrow 2\tau/\lambda\Delta$ ,  $I_2 \rightarrow (1/z)2\tau/\lambda\Delta$  и уравнение для щели (15) принимает вид  $\Delta = 1/8\lambda^2$ , из которого находим  $\bar{c}^2 = 1/2z = 1/8$ ,  $c = 0.354$ . Окончательно имеем следующее асимптотическое температурное поведение



**Рис. 1.** Зависимость параметра жесткости спектра возбуждений  $\lambda(\tau)$  (сплошная линия) и модуля коррелятора между б.с.  $K_1(\tau)$  (штриховая линия) от безразмерной температуры  $\tau = T/zJ$  для квадратной решетки ( $z = 4$ ).



**Рис. 2.** Теплоемкость  $c(\tau)$  (в безразмерных единицах) спиновой жидкости в квадратной решетке.



**Рис. 3.** Температурная зависимость среднего квадрата полного спина системы (на узел решетки)  $S^2 = N^{-1}\langle S^2 \rangle$ .

( $\tau \rightarrow \infty$ ) параметров системы

$$\Delta(\tau) = 4\tau, \quad \lambda(\tau) = \frac{0.177}{\sqrt{\tau}}, \quad K_1(\tau) = \frac{0.063}{\tau},$$

$$\bar{c} = \lambda(\tau)\sqrt{\Delta(\tau)} = 0.354, \quad \tilde{\chi}^{zz}(\tau) = \frac{1}{4\tau}. \quad (49)$$

Эти зависимости совпадают с численным расчетом с точностью менее одного процента.

## 5. Пространственные корреляции

Рассмотрим квадратную решетку ( $a = 1$ ), где  $\mathbf{r} = (x, y)$  — расстояние между двумя ее произвольными узлами. В соответствии с определениями (5), (19) пространственные корреляторы имеют вид

$$K_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{1-\gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\Delta)} \text{cth} \left( \frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\Delta)}{2\tau} \right),$$

$$e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} = (-1)^{x+y} \quad (50)$$

и являются знакопеременными, как и в AF состоянии. В соответствии с определением  $K(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) K_{\mathbf{r}}$  имеем при  $\mathbf{q} = 0$  и  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$

$$K(0) = \sum_{\mathbf{r}} K_{\mathbf{r}}, \quad K(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{r}} |K_{\mathbf{r}}|. \quad (51)$$

Поскольку  $\langle S^2 \rangle = N(3/4)K(0)$ , т.е.  $\langle S^2 \rangle = 0$  при  $\tau = 0$  (синглетность основного состояния), из структуры  $K(0)$  видно, что знакопеременные корреляции при  $\tau = 0$  взаимно компенсируются. Из общего выражения для  $K(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  следует

$$K(\mathbf{Q}) = \frac{K_1}{\lambda} \frac{2}{\sqrt{2\Delta}} \text{cth} \left( \frac{\lambda\sqrt{2\Delta}}{2\tau} \right). \quad (52)$$

Подставляя решение для  $\Delta$  (42), получаем при  $\tau \rightarrow 0$  расходимость

$$K(\mathbf{Q}) = 2K_1\tau^{-1} \exp(2\tau_0/\tau). \quad (53)$$

Обсудим характер поведения корреляционных функций на больших расстояниях  $r$  порядка линейного размера системы  $\sqrt{N}$  ( $D = 2$ ). При  $\tau \equiv 0$ ,  $\Delta = 0$  из (50) имеем

$$K_r = \frac{K_1}{\lambda} \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{i\mathbf{q}r} \sqrt{\frac{1-\gamma_{\mathbf{q}}}{1+\gamma_{\mathbf{q}}}} d^2\mathbf{q}. \quad (54)$$

В этом интеграле главный вклад вносит окрестность точки  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  зоны Бриллюэна радиуса  $k_0 \ll \pi$ . После замены  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{k}$  получаем

$$K_r \approx e^{i\mathbf{Q}r} \frac{K_1}{\lambda} \frac{\sqrt{2}}{\pi} \int_0^{k_0 r} J_0(x) dx \frac{1}{r},$$

$$|K_r| \approx \frac{0.284}{r}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (55)$$

что свидетельствует об отсутствии дальнего порядка в основном состоянии. Интегрируя (55) по двумерному объему, получаем  $K(\mathbf{Q}) \propto \sqrt{N}$ , т.е. расходимость в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ). Параметр „скачущей“ намагниченности (staggered magnetization)  $m$  по определению [3] равен

$$m^2 = \left\langle \left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} (-1)^{x+y} s_{\mathbf{r}} \right)^2 \right\rangle$$

$$= \frac{1}{N} \frac{3}{4} \sum_{\mathbf{r}} |K_r|^2 = \frac{1}{N} \frac{3}{4} K(\mathbf{Q}). \quad (56)$$

В этом определении существен множитель  $1/N$ ; поскольку при  $\tau = 0$   $K(\mathbf{Q}) \propto \sqrt{N}$ ,  $m^2 \propto 1/\sqrt{N} \rightarrow 0$  в термодинамическом пределе.

В области низких температур в (50) по-прежнему существенна окрестность  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  и это выражение принимает вид

$$K_r(\tau) \approx e^{i\mathbf{Q}r} \frac{4\tau}{\alpha_1} \frac{1}{(\pi)^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{k^2 + 4\Delta} d^2\mathbf{k}. \quad (57)$$

Корреляционную длину  $\xi$  определим стандартно  $4\Delta(\tau) = \chi^2 = \xi^{-2}$ . Для больших значений  $r$  имеем

$$|K_r(\tau)| = \frac{4\tau}{\alpha_1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{k_0 r} \frac{x J_0(x)}{x^2 + \chi^2 r^2} dx$$

$$= \frac{4\tau}{\alpha_1} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\exp(-\chi r)}{\sqrt{\chi r}} \left( 1 - \frac{1}{8\chi r} + \dots \right). \quad (58)$$

Из решения (42) следует, что  $\xi/a \propto \tau^{-1} \exp(\tau_0/\tau)$ , как и в работах [8,13,14]. Хотя и можно рассмотреть столь большие значения  $r$ , для которых  $\chi r = r/\xi \sim 1$ , тем не менее, поскольку  $\tau \rightarrow 0$ , то и  $|K_r| \rightarrow 0$  (отсутствие дальнего порядка).

В работе [14] показано, что длинноволновое, низкотемпературное поведение двумерной гейзенберговской системы с АФ обменом можно описать в рамках квантовой нелинейной  $\sigma$ -модели и ренормгруппового анализа. Полученный выше результат соответствует ренормированному классическому режиму, однако в более высоком порядке теории  $\xi/a = C_{\xi} \exp(2\pi\rho_s/T)$ , где  $C_{\xi} \approx 1$ , т.е. предэкспоненциальный множитель не зависит от температуры [3,14]. Таким образом, имеются разные версии низкотемпературного поведения  $\xi$ , но всегда налицо экспоненциальная расходимость при  $T \rightarrow 0$  и для АФ состояния, и для синглетного в спиновой жидкости.

Гейзенберговская система с гамильтонианом (1) на квадратной решетке описана как термодинамически устойчивая однородная и изотропная немагнитная спиновая жидкость при всех  $T$ . Ее предельным состоянием при  $T \rightarrow 0$  является синглетное состояние (полный спин  $S = 0$ ) с энергией (на связь)  $\varepsilon_0 = -0.352$ . При  $T = 0$  с синглетным может конкурировать АФ состояние с энергией  $\varepsilon_{\text{АФ}}$ . Взяв для  $\varepsilon_{\text{АФ}}$  наилучший аналитический результат по спин-волновой теории, получаем  $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_{\text{АФ}}$ , т.е. вывод об основном синглетном состоянии. Следует отметить, что результаты численных расчетов при  $T = 0$  противоречивы, поскольку разность этих энергий крайне мала. В SL состоянии ярком выражен ближний порядок АФ типа со знакопеременностью спиновых корреляторов. При высоких температурах ( $T \gg J$ ) система асимптотически переходит в парамагнитное состояние ( $K_1 \rightarrow 0$ ,  $N^{-1}\langle S^2 \rangle \rightarrow 3/4$ ) с восприимчивостью  $\chi \propto 1/T$ .

Автор благодарен участникам Школы „Коуровка-2000“ С.В. Малееву, Н.М. Плакиде и Ю.Г. Рудому, а также В.В. Валькову, В.И. Зиненко и А.Л. Пантукюрову за полезные дискуссии и критические замечания.

## Список литературы

- [1] W. Marshall. Proc. Roy. Soc. London **A232**, 48 (1955). [В кн.: Антиферромагнетизм. Сб. статей / Под ред. С.В. Вонсовского. ИЛ, М. (1956)].
- [2] Д. Маггис. Теория магнетизма. Мир, М. (1967).
- [3] E. Manousakis. Rev. Mod. Phys. **63**, 1, 1 (1991).
- [4] P.W. Anderson. Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [5] S. Liang, B. Doucot, P.W. Anderson. Phys. Rev. Lett. **61**, 10, 365 (1988).
- [6] K. Fabricius, U. Low, K.-H. Mutter. Phys. Rev. **B44**, 18, 9981 (1991).
- [7] N. Mermen, G. Wagner. Phys. Rev. Lett. **17**, 22, 1136 (1966).
- [8] H. Shimahara, S. Takada. J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
- [9] А.Ф. Барабанов, В.М. Березовский. ЖЭТФ **106**, 1156 (1994).
- [10] A.F. Barabanov, V.M. Beresovsky. Phys. Lett. **A186**, 175 (1994).
- [11] A.F. Barabanov, V.M. Beresovsky, E. Zsinas. Phys. Rev. **B52**, 14, 10 177 (1995).
- [12] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975).
- [13] M. Takahashi. Phys. Rev. **B40**, 4, 2494 (1989).
- [14] S. Chakravarty, B.I. Halperin, D.R. Nelson. Phys. Rev. **B39**, 4, 2344 (1989).