ЖЭТФ, 2003, том 123, вып. 1, стр. 149–160

КВАНТОВАЯ СПИНОВАЯ ЖИДКОСТЬ В ГЦК-РЕШЕТКЕ

Е. В. Кузьмин*

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

Поступила в редакцию 26 января 2002 г.

Исследованы свойства спиновой системы в ГЦК-решетке, описываемой моделью Гейзенберга ($s = 1/2$) с антиферромагнитными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями. В рамках спин-волновой теории показано, что из-за фрустраций обменных связей и поперечных квантовых спиновых флуктуаций дальний антиферромагнитный порядок отсутствует. Система находится в состоянии квантовой спиновой жидкости. Предложен метод ее описания в рамках линейной теории второго порядка с самосогласованным вычислением параметров. Доказано, что основным состоянием спиновой жидкости является синглетное состояние. Рассчитаны термодинамические свойства спиновой жидкости во всем температурном диапазоне и характер пространственных спиновых корреляций (знакопеременность и конечная корреляционная длина). Теория построена на базе метода двувременных температурных функций Грина.

PACS: 75.10.Jm, 75.10.-b

1. ВВЕДЕНИЕ. КРИТЕРИЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ГЦК-РЕШЕТКЕ

Система локализованных спинов описывается моделью Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{f},\mathbf{R}} J(\mathbf{R})\mathbf{s_f}\cdot\mathbf{s_{f+R}}, \qquad J(\mathbf{R}) = J(-\mathbf{R}), \quad J(0) = 0, \tag{1}$$

заданным на идеальной решетке с периодическими граничными условиями. Здесь $\mathbf{f}$ — координаты узлов, $J(\mathbf{R})$ — обменные интегралы на межузельном расстоянии $\mathbf{R}$, $\mathbf{s_f} = (s_\mathbf{f}^+, s_\mathbf{r}^-, s_\mathbf{f}^z)$ — оператор спина на узле $\mathbf{f}$. В большинстве случаев для трехмерных систем гамильтониан (1) используется для описания дальнего магнитного порядка. Точное уравнение движения первого порядка ($\hbar = 1$) линеаризуется (расцепление Тябликова),

$$i\dot{s}_\mathbf{f}^+ \approx \sum_R J(\mathbf{R})\left(\langle s_\mathbf{f+R}^z\rangle s_\mathbf{f}^+ - \langle s_\mathbf{f}^z\rangle s_\mathbf{f+R}^+\right), \tag{2}$$

с предположением, что $\langle s_\mathbf{f}^z\rangle \neq 0$; уравнение (2) является основой спин-волновой теории при различных регулярных распределениях обменов $J(\mathbf{R})$ и средних $\langle s_\mathbf{f}^z\rangle$. При описании коллинеарного антиферромагнитного (АФ) состояния вводится подсистема A ($N/2$ узлов $\boldsymbol{\alpha}$ со спином «вверх», N — число узлов) и подсистема B ($N/2$ узлов $\boldsymbol{\beta}$ со спином «вниз»), причем $\langle s_{\boldsymbol{\alpha}}^z\rangle = \overline{s}$, $\langle s_{\boldsymbol{\beta}}^z\rangle = -\overline{s}$, где $\overline{s} = \overline{s}(T)$, T — температура в энергетических единицах.

Особый интерес представляет ГЦК-решетка с обменными АФ-взаимодействиями между ближайшими соседями: $J(\boldsymbol{\Delta}) = -J$, $J > 0$, где $\boldsymbol{\Delta}$ — векторы, соединяющие $z_1 = z = 12$ ближайших соседей. Существуют четыре типа АФ-упорядочения в ГЦК-решетке [1]. Для любого типа всегда возникают фрустрированные (энергетически невыгодные) обменные J-связи. Например, для АФ-упорядочения первого типа (чередующиеся ферромагнитные плоскости xy со спинами «вверх» и «вниз», т. е. связанные антиферромагнитно) все четыре J-связи в этих плоскостях являются фрустрированными. Однако восемь остальных (межплоскостных) АФ-связей являются нормальными, так что эффективное молекулярное поле равно $\pm 4J\overline{s}$ (знак «плюс» для спинов «вверх», а знак «минус» для спинов «вниз»). Для стабилизации такой АФ-структуры необходим учет по крайней мере ферромагнитных обменных взаимодействий

*E-mail: dir@iph.krasn.ru

между вторыми соседями, $J(\mathbf{a}) = K$, $K > 0$, где $\mathbf{a}$ — векторы, соединяющие $z_2 = 6$ вторых соседей ($|\mathbf{a}| = a$ — параметр ГЦК-решетки, $|\mathbf{\Delta}| = a/\sqrt{2}$).

В работах Лайнса [2, 3] показано, что в квантовой спиновой системе с гамильтонианом (1) в ГЦК-решетке АФ-упорядочение может существовать только при $K \neq 0$. Этот вывод относится и к первому типу ($K > 0$), и к упорядочению третьего типа ($K < 0$). В любом случае параметр порядка $\overline{s} = \overline{s}(\lambda)$ и температура Нееля $T_N(\lambda)$ являются функциями отношения $\lambda = |K|/J$ и обращаются в нуль при $\lambda = 0$ ($K = 0$). Это связано, помимо фрустраций, с существенной ролью поперечных квантовых спиновых флуктуаций, которые разрушают (при $\lambda = 0$) дальний АФ-порядок. Следует отметить, что в системе классических спинов АФ-состояние «выживает» [4, 5].

Вывод об отсутствии АФ-порядка при $K = 0$ следует также из работы [6]. Авторы рассматривали простую кубическую решетку с антиферромагнитными взаимодействиями J_1 и J_2 соответственно для первых и вторых соседей ($s = 1/2$) и ввели параметр $p = J_2/(J_1 + J_2)$. При $J_1 = 0$ фактически имеется ГЦК-решетка спинов, и в этом пределе ($p = 1$) АФ-упорядочение отсутствует.

Таким образом, как следует из [2, 3, 6], в ГЦК-решетке для квантовых спинов с АФ-обменом J только между ближайшими соседями дальний АФ-порядок отсутствует. В каком состоянии находится такая система? Ниже предлагается концепция спиновой жидкости.

2. КВАНТОВАЯ СПИНОВАЯ ЖИДКОСТЬ

Продолжим рассмотрение системы с гамильтонианом (1) при учете антиферромагнитных обменных взаимодействий J только между ближайшими соседями и с оператором полного спина $\mathbf{S}$:

$$h = \frac{H}{zJ} = \frac{1}{2z} \sum_{\mathbf{f},\mathbf{\Delta}} s_{\mathbf{f}} \cdot s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}, \quad \mathbf{S} = \sum_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}}, \quad s = \frac{1}{2}. \tag{3}$$

Поскольку при отсутствии стабилизирующих факторов АФ-состояние на ГЦК-решетке отсутствует, рассмотрим спиновую систему с безразмерным гамильтонианом (3) как квантовую спиновую жидкость.

Определим спиновую жидкость как систему без разрушения симметрии и без дальнего магнитного порядка, в которой

1) спиновые корреляционные функции изотропны,

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^x s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^x \rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^y s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^y \rangle = = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^z \rangle \equiv \frac{1}{4} K_r, \tag{4}$$

зависят только от модуля расстояния $r = |\mathbf{r}|$, причем $K_0 = 1$ (правило сумм);

2) средние для любой компоненты спина на узле решетки и для любой компоненты оператора полного спина равны нулю:

$$\langle s_{\mathbf{f}}^\alpha \rangle = 0, \quad \langle S^\alpha \rangle = 0, \tag{5}$$

$\alpha = x, y, z$ или $\alpha = +, -, z$;

3) средние от произведений спиновых операторов на нечетном числе разных узлов равны нулю:

$$\langle s_{\mathbf{f}}^\alpha s_{\mathbf{m}}^\beta s_{\mathbf{n}}^\gamma \rangle = 0, \quad \mathbf{f} \neq \mathbf{m} \neq \mathbf{n}. \tag{6}$$

Здесь и далее угловые скобки означают термодинамическое среднее при температуре $\tau = T/zJ$ и по волновой функции основного состояния при $\tau = 0$.

На основе гамильтониана (3) и постулатов (4)–(6) необходимо описать всю совокупность свойств спиновой жидкости: основное состояние, спектр возбуждений и термодинамику. Следует отметить, что постулат (6) введен автором впервые в работе [7] и следствия из него будут продемонстрированы ниже. Далее будет показано, что основным является синглетное состояние с полным спином $S = 0$, что эквивалентно равенству

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{\tau=0} = 0. \tag{7}$$

Свойства состояния спиновой жидкости определяются главным образом пространственной и температурной зависимостями спиновых корреляционных функций $K_r(\tau)$. Энергия состояния спиновой жидкости на одну связь в единицах J равна

$$\varepsilon = \frac{\langle H \rangle}{(1/2)zNJ} = -\frac{3}{4} K_1, \tag{8}$$

где $K_{|\mathbf{\Delta}|} = -K_1$ ($K_1 > 0$) является коррелятором между ближайшими соседями.

Для описания состояния спиновой жидкости переходим к фурье-образам спиновых операторов:

$$s^\alpha(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}}^\alpha$$

(аналогично для всех других операторов), где векторы $\mathbf{q}$ принадлежат первой зоне Бриллюэна ГЦК-решетки, и вводим фурье-образ корреляционной функции:

$$K(\mathbf{q}) = \sum_r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} K_r = \\ = 4\langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q})\rangle = 2\langle s^+(\mathbf{q}) s^-(-\mathbf{q})\rangle, \quad (9)$$
$$K_r = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} K(\mathbf{q}),$$

с очевидным свойством $K(\mathbf{q}) = K(-\mathbf{q})$. Для вычисления $K(\mathbf{q})$ используем метод двувременных температурных функций Грина [8]. Из-за изотропности корреляторов достаточно вычислить запаздывающую коммутаторную функцию Грина

$$\langle\langle s^z(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q})\rangle\rangle_\omega \equiv G(\mathbf{q},\omega), \quad (10)$$

где ω — безразмерная спектральная переменная, через которую по спектральной теореме находится $K(\mathbf{q})$:

$$\frac{1}{4}K(\mathbf{q}) = \langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q})\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\mathbf{q},\omega;\tau)\, d\omega, \\ J(\mathbf{q},\omega;\tau) = \frac{e^{\omega/\tau}}{e^{\omega/\tau}-1}\left(-\frac{1}{\pi}\right) \times \\ \times \operatorname{Im}\langle\langle s^z(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q})\rangle\rangle_{\omega+i0}, \quad (11)$$

где $J(\mathbf{q},\omega;\tau)$ — спектральная интенсивность.

3. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И ФУНКЦИЯ ГРИНА ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Теория спиновой жидкости основана на уравнениях не ниже второго порядка, поскольку $\langle s_{\mathbf{f}}^\alpha\rangle = 0$ и линеаризацию уравнений первого порядка (как это делается в спин-волновой теории) осуществить невозможно. Точные уравнения движения имеют вид ($\hbar = 1$)

$$i\dot{s}_{\mathbf{f}}^+ = \frac{1}{z}\sum_{\mathbf{\Delta}}\left(s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^+ - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z s_{\mathbf{f}}^+\right), \\ i\dot{s}_{\mathbf{f}}^z = \frac{1}{2z}\sum_{\mathbf{\Delta}}\left(s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^- - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^+ s_{\mathbf{f}}^-\right) \equiv M_{\mathbf{f}}, \quad (12)$$

$$i\dot{M}_{\mathbf{f}} = -\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z}{\partial t^2} = \frac{1}{2z^2}\sum_{\mathbf{\Delta}}(s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z) + R_{\mathbf{f}}, \quad (13)$$

где

$$R_{\mathbf{f}} = \frac{1}{z^2}\sum_{\mathbf{\Delta}\neq\mathbf{\Delta}'}\left[s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}'}^- + \right. \\ \left. + \left(s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}'}^z\right) s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^- - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z s_{\mathbf{f}}^+ s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'}^-\right]. \quad (14)$$

В уравнении второго порядка учтены кинематические свойства спиновых операторов на одном узле.

Оборвем цепочку зацепляющихся уравнений на втором шаге путем линеаризации оператора $R_{\mathbf{f}}$, в котором фигурируют произведения спиновых операторов на трех разных узлах. Предлагается следующая схема линеаризации:

$$s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{n}}^+ s_{\mathbf{m}}^- \approx s_{\mathbf{f}}^z \alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|}\langle s_{\mathbf{n}}^+ s_{\mathbf{m}}^-\rangle = \\ = \frac{1}{2}\alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|} K_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|} s_{\mathbf{f}}^z, \quad \mathbf{f}\neq\mathbf{n}\neq\mathbf{m}, \quad (15)$$

где $\alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|}$ — параметры, корректирующие расцепление (линеаризацию). Эта схема является простым обобщением процедуры линеаризации, примененной в работах [6, 7, 9–11]. Используя (15), получаем

$$(R_{\mathbf{f}})_{lin} = \\ = \frac{1}{2z^2}\sum_{\substack{\mathbf{\Delta},\mathbf{\Delta}' \\ (\mathbf{\Delta}\neq\mathbf{\Delta}')}}\left[\alpha_{|\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'|} K_{|\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'|}(s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z) + \right. \\ \left. + \alpha_1 K_1 (s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}'}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}'-\mathbf{\Delta}}^z)\right], \quad K_{|\mathbf{\Delta}|} = -K_1. \quad (16)$$

Сумма по $\mathbf{\Delta}'$ в первом члене равна

$$\tilde{K} \equiv \frac{1}{z}\sum_{\substack{\mathbf{\Delta}' \\ (\mathbf{\Delta}'\neq\mathbf{\Delta})}} \alpha_{|\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'|} K_{|\mathbf{\Delta}-\mathbf{\Delta}'|} = \\ = \frac{1}{12}(-4\alpha_1 K_1 + 2\alpha_2 K_2 + 4\alpha_3 K_3 + \alpha_4 K_4), \quad (17)$$

где индексы 1, 2, 3 и 4 обозначают координационные зоны с соответствующими расстояниями $|\mathbf{\Delta} - \mathbf{\Delta}'|$. Теперь линеаризованный оператор $R_{\mathbf{f}}$ можно записать в виде

$$(R_{\mathbf{f}})_{lin} = \frac{1}{2}\left[\left(\tilde{K} + \frac{\alpha_1 K_1}{z}\right)\frac{1}{z}\sum_{\mathbf{\Delta}}(s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z) + \right. \\ \left. + \frac{\alpha_1 K_1}{z^2}\sum_{\mathbf{\Delta},\mathbf{\Delta}'}(s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}^z - s_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}+\mathbf{\Delta}'}^z)\right], \quad (18)$$

причем во второй сумме ограничение ($\mathbf{\Delta}' \neq \mathbf{\Delta}$) уже снято.

Таким образом, вместо точного уравнения (13) получаем линеаризованное уравнение

$$\left(i\dot{M}_{\mathbf{f}}\right)_{lin} = \left(-\frac{\partial^2 s^z_{\mathbf{f}}}{\partial t^2}\right)_{lin} = = \frac{1}{2z^2}\sum_{\boldsymbol{\Delta}}(s^z_{\mathbf{f}} - s^z_{\mathbf{f}+\boldsymbol{\Delta}}) + (R_{\mathbf{f}})_{lin}, \qquad (19)$$

которое после фурье-преобразования принимает вид

$$\left(i\dot{M}(\mathbf{q})\right)_{lin} = \left(-\frac{\partial^2 s^z(\mathbf{q})}{\partial t^2}\right)_{lin} = \frac{1}{2}(1-\Gamma_{\mathbf{q}}) \times \times \left[\left(\tilde{K} + \frac{1+\alpha_1 K_1}{z}\right) + \alpha_1 K_1 \Gamma_{\mathbf{q}}\right] s^z(\mathbf{q}) \equiv \equiv \boldsymbol{\Omega}^2_{\mathbf{q}} s^z(\mathbf{q}). \qquad (20)$$

Здесь

$$\Gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{z}\sum_{\boldsymbol{\Delta}} e^{i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\Delta}} = \frac{1}{3}(c_x c_y + c_x c_z + c_y c_z), \quad c_j \equiv \cos\frac{q_j}{2}. \qquad (21)$$

Введем обозначения

$$\frac{\alpha_1 K_1}{2} \equiv \lambda^2, \quad \frac{\tilde{K} + (1+\alpha_1 K_1)/z}{\alpha_1 K_1} \equiv D, \qquad (22)$$

тогда

$$\Omega^2_{\mathbf{q}} = \lambda^2 (1-\Gamma_{\mathbf{q}})(D+\Gamma_{\mathbf{q}}) \equiv \lambda^2 E^2_{\mathbf{q}}. \qquad (23)$$

На основе уравнений движения (12), (13) после фурье-преобразования получаем уравнения для функций Грина:

$$\omega G(\mathbf{q},\omega) = \langle\langle M(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q})\rangle\rangle_\omega,$$

$$\omega \langle\langle M(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q})\rangle\rangle_\omega = A_{\mathbf{q}} + \langle\langle i\dot{M}(\mathbf{q}) | s^z(-\mathbf{q})\rangle\rangle_\omega,$$

где

$$A_{\mathbf{q}} = \langle [M(\mathbf{q}), s^z(-\mathbf{q})]\rangle = \frac{K_1}{2}(1-\Gamma_{\mathbf{q}}). \qquad (24)$$

Используя приближение $i\dot{M}(\mathbf{q}) \approx (i\dot{M}(\mathbf{q}))_{lin}$ (см. (20)), получаем функцию Грина линейной теории второго порядка в виде

$$G(\mathbf{q},\omega) = \frac{A_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \Omega^2_{\mathbf{q}}}. \qquad (25)$$

Ее спектральная интенсивность (11) равна

$$J(\mathbf{q},\omega;\tau) = \frac{e^{\omega/\tau}}{e^{\omega/\tau}-1}\frac{A_{\mathbf{q}}}{2\Omega_{\mathbf{q}}} \times \times \left[\delta(\omega - \Omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \Omega_{\mathbf{q}})\right], \quad \Omega_{\mathbf{q}} \ge 0. \qquad (26)$$

По спектральной теореме для одновременного среднего получаем

$$\langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q})\rangle \equiv \frac{1}{4}K(\mathbf{q}) = = \int_{-\infty}^{\infty} J(\mathbf{q},\omega;\tau)\,d\omega = \frac{A_{\mathbf{q}}}{2\Omega_{\mathbf{q}}}\operatorname{cth}\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau}$$

или

$$K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda}\frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(D)}\operatorname{cth}\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(D)}{2\tau}. \qquad (27)$$

Полученное выражение (27) свидетельствует о том, что в предлагаемой версии теории спиновой жидкости фигурируют три неизвестных параметра, являющиеся функциями температуры: $K_1(\tau)$ — модуль коррелятора между ближайшими соседями, $\lambda(\tau)$ — параметр «жесткости» спектра возбуждений и $D(\tau)$ — «псевдощель» в спектре. Все они должны быть вычислены самосогласованно по трем уравнениям (см. далее). Предварительно отметим, что $-1/3 \le \Gamma_{\mathbf{q}} \le 1$ в зоне Бриллюэна ГЦК-решетки, поэтому удобно выделить предельную точку спектра $(-1/3)$ и представить параметр D в виде

$$D = 1/3 + \delta, \quad \delta = \delta(\tau) \ge 0, \qquad (28)$$

что необходимо для выполнения условия $\Omega_{\mathbf{q}} \ge 0$ или $E_{\mathbf{q}}(\delta) \ge 0$.

4. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Используя определение пространственных корреляторов K_r (9), получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} K_0 = 1 &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_0(\delta,\tau), \\ K_1 &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}(-\Gamma_{\mathbf{q}})K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_1(\delta,\tau), \\ K_{tot} &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}(\Gamma_{\mathbf{q}})^2 K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_2(\delta,\tau), \end{aligned} \qquad (29)$$

где

$$\begin{aligned} I_n(\delta,\tau) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}(-\Gamma_{\mathbf{q}})^n \frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\delta)}\operatorname{cth}\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau}, \\ E_{\mathbf{q}}(\delta) &= \sqrt{(1-\Gamma_{\mathbf{q}})\left(\frac{1}{3} + \Gamma_{\mathbf{q}} + \delta\right)}, \\ K_{tot} &= \frac{1}{z^2}\sum_{\boldsymbol{\Delta},\boldsymbol{\Delta}'} K_{|\boldsymbol{\Delta}+\boldsymbol{\Delta}'|} = \\ &= \frac{1 - 4K_1 + 2K_2 + 4K_3 + K_4}{z}, \quad z = 12. \end{aligned} \qquad (30)$$

Из уравнений (29) получаем формальное решение (аргументы функций опускаем)

$$\begin{gathered} \lambda = I_1, \quad K_1 = I_1/I_0, \\ K_{tot} = I_2/I_0, \quad \alpha_1 = 2I_0I_1. \end{gathered} \tag{31}$$

Следует обратить внимание на то, что параметр $D = 1/3 + \delta$ (см. (28)) выражается через сложную комбинацию неизвестных корреляторов и параметров расцепления. Нет смысла их рассчитывать по отдельности, и по этой причине далее будет вычисляться величина δ как одна из важнейших характеристик системы, отражающая корреляции в «расширенном» кластере. Однако из уравнений (31) нет возможности определить параметр δ, и для его самосогласованного вычисления воспользуемся методом моментов [7].

Определим и точно вычислим три первых момента:

$$\begin{aligned} &M_0 \equiv \langle s^z_{\mathbf{f}}(t) s^z_{\mathbf{f}}(0)\rangle_{t=0} = \langle s^z_{\mathbf{f}} s^z_{\mathbf{f}}\rangle = \frac{1}{4}, \\ &M_1 \equiv \left\langle i\frac{\partial s^z_{\mathbf{f}}(t)}{\partial t} s^z_{\mathbf{f}}(0)\right\rangle_{t=0} = \\ &= \left\langle \frac{1}{2z}\sum_{\mathbf{\Delta}} (s^+_{\mathbf{f}} s^-_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}} - s^+_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}} s^-_{\mathbf{f}}) s^z_{\mathbf{f}}\right\rangle = \frac{K_1}{4}, \\ &M_2 \equiv \left\langle \left(-\frac{\partial^2 s^z_{\mathbf{f}}(t)}{\partial t^2}\right) s^z_{\mathbf{f}}(0)\right\rangle_{t=0} = \\ &= \left\langle \left(\frac{1}{2z^2}\sum_{\mathbf{\Delta}} (s^z_{\mathbf{f}} - s^z_{\mathbf{f}+\mathbf{\Delta}}) + R_{\mathbf{f}}\right) s^z_{\mathbf{f}}\right\rangle = \\ &\qquad\qquad = \frac{1}{8}\left(\frac{K_1}{z} + K_{tot}\right). \end{aligned} \tag{32}$$

При вычислениях использованы правила умножения операторов на одном узле, а также определения $K_1 = -K_{|\mathbf{\Delta}|}$ и K_{tot} (см. (30)); существенно, что в силу условия (6) вклад в среднее $\langle R_{\mathbf{f}} s^z_{\mathbf{f}}\rangle$ дает только первый член оператора $R_{\mathbf{f}}$ (14).

На основании спектральной теоремы одноузельное среднее представимо в виде

$$\begin{gathered} \langle s^z_{\mathbf{f}}(t) s^z_{\mathbf{f}}(0)\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} J_0(\omega)\, d\omega, \\ J_0(\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q},\omega;\tau), \end{gathered} \tag{33}$$

где спектральная интенсивность $J(\mathbf{q},\omega;\tau)$ в общем случае соответствует точной функции Грина $G(\mathbf{q},\omega)$. Из (33) следуют соотношения

$$\begin{gathered} M_0 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} J_0(\omega)\, d\omega, \quad M_1 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \omega J_0(\omega)\, d\omega, \\ M_2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \omega^2 J_0(\omega)\, d\omega. \end{gathered} \tag{34}$$

Выше вычислена приближенная функция Грина (25), соответствующая ей спектральная интенсивность $J(\mathbf{q},\omega;\tau)$ определена формулой (26) и тогда

$$\begin{aligned} J_0(\omega) = \frac{K_1}{4\lambda}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{\omega/\tau}}{e^{\omega/\tau}-1}\frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}} \times \\ \times \left[\delta(\omega-\Omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega+\Omega_{\mathbf{q}})\right], \quad \Omega_{\mathbf{q}} = \lambda E_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \tag{35}$$

Потребуем, чтобы в рассматриваемой линейной теории второго порядка выполнялись точные соотношения (34). Для нулевого момента M_0 получаем выражение, которое полностью воспроизводит правило сумм $K_0 = 1$. Подстановка (35) в выражение (34) для M_1, как легко убедиться, приводит к тождеству. Однако при подстановке формулы (35) в выражение (34) для M_2 получаем

$$\begin{gathered} M_2 = \frac{\lambda K_1}{4} P(\delta), \\ P(\delta) \equiv \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} (1-\Gamma_{\mathbf{q}}) E_{\mathbf{q}} \operatorname{cth}\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau}. \end{gathered} \tag{36}$$

Используя точное выражение (32) для M_2 и решения (31), получаем уравнение для самосогласованного вычисления щелевого параметра δ:

$$P(\delta) = \frac{I_2(\delta) + I_1(\delta)/12}{2I_1^2(\delta)}, \quad \delta = \delta(\tau). \tag{37}$$

Таким образом, согласованная линейная теория второго порядка основана на выполнении правила сумм $K_0 = 1$, определениях корреляторов K_1 и K_{tot} (уравнения (29)) и требовании точного значения второго момента, которое приводит к уравнению (37). Это уравнение играет важную роль: теория спиновой жидкости становится внутренне замкнутой, появляется возможность самосогласованно вычислить все параметры системы.

Суммы по зоне Бриллюэна в формулах для I_n и P выражаем через интегралы с плотностью состояний $D(\varepsilon)$. Изоэнергетическим поверхностям $\Gamma_{\mathbf{q}} = \varepsilon$ в ГЦК-решетке соответствует плотность состояний

$D(\varepsilon)$, которая должна удовлетворять точным соотношениям

$$D_0 = \int\limits_{-1/3}^{1} D(\varepsilon)\,d\varepsilon = 1,$$
$$D_1 = \int\limits_{-1/3}^{1} \varepsilon D(\varepsilon)\,d\varepsilon = 0, \qquad (38)$$
$$D_2 = \int\limits_{-1/3}^{1} \varepsilon^2 D(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{1}{z}.$$

Плотность состояний $D(x)$ аппроксимировалась выражением

$$D(x) = \begin{cases} A(x), & -1/3 \le x \le 0, \\ B(x), & 0 \le x \le 1, \end{cases} \qquad (39)$$

где

$$A(x) = -0.366664 \ln\left[0.0671182\left(x+\frac{1}{3}\right)\right] - 0.456693x,$$

$$B(x) = 0.226573\sqrt{1-x} + \frac{0.202745}{x+0.151142} - 0.174703.$$

При выборе аппроксимации мы руководствовались, в первую очередь, наличием логарифмической расходимости $D(\varepsilon)$ при $\varepsilon = -1/3$ и выполнением интегральных соотношений (38), так как уравнения самосогласования (31) и (37) также являются интегральными.

Объединяя (31) и (37), получаем систему трех уравнений для самосогласованного вычисления параметров спиновой жидкости:

$$\lambda = I_1, \qquad (40а)$$

$$K_1 = I_1/I_0, \qquad (40б)$$

$$P = \frac{I_2 + I_1/12}{2I_1^2}. \qquad (40в)$$

Здесь

$$I_n(\delta,t) = \int\limits_{-1/3}^{1} d\varepsilon\, D(\varepsilon)(-\varepsilon)^n \frac{1-\varepsilon}{E(\varepsilon,\delta)} \operatorname{cth}\frac{E(\varepsilon,\delta)}{2t},$$
$$P(\delta,t) = \int\limits_{-1/3}^{1} d\varepsilon\, D(\varepsilon)(1-\varepsilon)E(\varepsilon,\delta) \operatorname{cth}\frac{E(\varepsilon,\delta)}{2t}, \qquad (41)$$
$$E(\varepsilon,\delta) = \sqrt{(1-\varepsilon)\left(\frac{1}{3}+\varepsilon+\delta\right)}, \quad t = \frac{\tau}{\lambda}.$$

5. ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ

Рассмотрим свойства спиновой жидкости при $\tau \equiv 0$ (гиперболический котангенс равен единице). Интегралы I_n и P зависят только от $\delta(0)$, причем $K_1 = I_1/I_0$ монотонно убывает с ростом $\delta(0)$ и имеет максимум при $\delta(0) = 0$. Уравнение (40в) при $\tau \equiv 0$ является уравнением относительно $\delta(0)$ и имеет решение $\delta(0) = 1.04 \cdot 10^{-3} \neq 0$. Таким образом, получаем следующие характеристики основного состояния системы:

$$\delta(0) = 1.04 \cdot 10^{-3}, \quad \lambda(0) = 0.538, \qquad K_1(0) = 0.178, \quad \varepsilon_0 = -0.133, \qquad (42)$$

при этом $I_0 = 3.026$, $I_2 = 0.212$, $\alpha_1 = 3.256$, $P = 0.442$.

Располагая решением (42), уместно прокомментировать способ линеаризации уравнений (15). Известно, что в теории первого порядка линеаризация (расцепление Тябликова) проводится без какого-либо корректирующего множителя (он равен единице). Если в рассматриваемой теории второго порядка положить все $\alpha_i = 1$, то уравнения (29) решений вообще не имеют. Если все $\alpha_i = \alpha$ одинаковы, то можно получить, не прибегая к методу моментов, уравнение для щелевого параметра:

$$\delta = \frac{I_2(\delta)}{I_1(\delta)} - \frac{1}{4} - \frac{1}{12}\,\frac{2I_0(\delta)I_1(\delta) - 1}{2I_1^2(\delta)}.$$

Это уравнение при $\tau = 0$ имеет решение $\delta^*(0) = 0.0435$, тогда получаем

$$\lambda^*(0) = 0.319, \quad K_1^*(0) = 0.143,$$

$$\varepsilon_0^* = -0.107, \quad \alpha = 1.418.$$

Очевидно, что по сравнению с (42) в этом варианте имеется значительный проигрыш в энергии основного состояния. Отметим также, что при рассмотрении спиновой жидкости в квадратной решетке с использованием метода моментов [7] получаем энергию основного синглетного состояния $\varepsilon_0 = -0.352$, которая ниже энергии АФ-состояния при $\tau = 0$.

Покажем, что основное состояние является синглетным (полный спин $S = 0$). Введем функцию (среднее от квадрата полного спина системы, отнесенное к одному спину)

$$S^2(\tau) \equiv \frac{1}{N}\langle \mathbf{S}^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{fm}}\langle \mathbf{s_r}\cdot\mathbf{s_m}\rangle =$$
$$= \sum_{\mathbf{r}}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}}\langle \mathbf{s_f}\cdot\mathbf{s_{f+r}}\rangle = \frac{3}{4}\sum_{\mathbf{r}}K_{\mathbf{r}} = \frac{3}{4}K(0), \qquad (43)$$

которая выражается через фурье-образ корреляционной функции (27) при $\mathbf{q} = 0$. При $\tau \equiv 0$ из формулы (27) следует, что $K(0) = 0$, $S^2(0) = 0$, что и доказывает синглетность основного состояния в соответствии с соотношением (7). С другой стороны, выражение (43) можно рассмотреть как предел:

$$K(0) = \lim_{\mathbf{q}\to 0} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} \lim_{\mathbf{q}\to 0} \frac{1-\Gamma_\mathbf{q}}{E_\mathbf{q}(\delta)} \operatorname{cth} \frac{\lambda E_\mathbf{q}(\delta)}{2\tau} = \frac{4\tau}{\alpha_1 \left(\dfrac{1}{3} + \Gamma_0 + \delta\right)}. \quad (44)$$

Отсюда при $\tau \to 0$ получаем по-прежнему $K(0) = 0$ (синглет), однако при $\tau \neq 0$ в системе возникают триплетные возбуждения, за счет которых $S^2(\tau) \neq 0$. К формуле (44) мы обратимся далее при анализе температурных свойств спиновой жидкости.

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ

Система уравнений (40) решалась численно. Задавалось значение t и по уравнению (40в) находилась величина δ; далее при этих значениях t и $\delta(t)$ вычислялись интегралы I_0, $I_1 = \lambda$, $K_1 = I_1/I_0$, $\alpha_1 = 2I_0I_1$ и температура $\tau = \lambda t$. В результате все численно найденные параметры являются функциями температуры $\tau = T/zJ$ ($z = 12$).

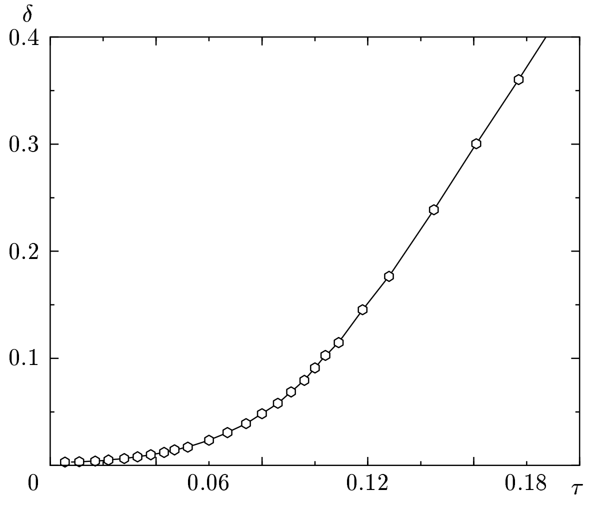

Рис. 1. Зависимость щелевого параметра δ от безразмерной температуры $\tau = T/zJ$ в области низких температур

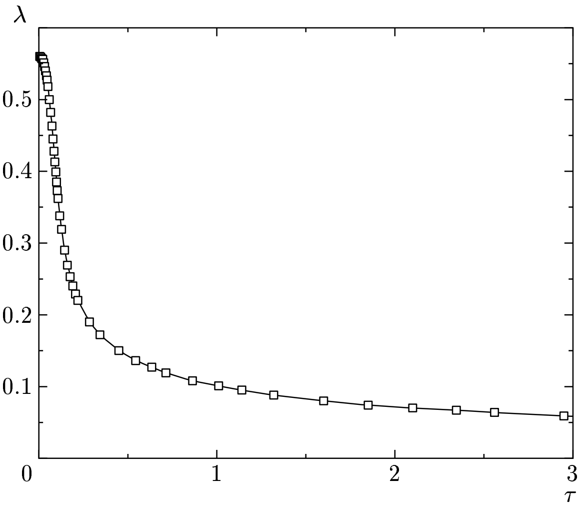

Рис. 2. Температурная зависимость параметра жесткости спектра $\lambda(\tau)$

На рис. 1 представлен результат численных расчетов температурной зависимости щелевого параметра $\delta(\tau)$. В низкотемпературной области возрастание $\delta(\tau)$ близко к степенному и, как показывает анализ, $\delta(\tau) \propto \tau^2$; однако уже при $\tau \geq 0.5$ параметр $\delta(\tau)$ практически совпадает со своим асимтотическим значением 4τ.

Рисунок 2 демонстрирует температурную зависимость «жесткости» спектра возбуждений $\lambda(\tau)$ с асимптотикой $\lambda(\tau) \propto 1/\sqrt{\tau}$.

Известно, что термодинамические свойства системы определяются ее спектром возбуждений. На рис. 3 показана температурная эволюция спектра

$$\Omega_\mathbf{q}(\tau) = \sqrt{1-\Gamma_\mathbf{q}}\,\lambda(\tau)\sqrt{1/3 + \Gamma_\mathbf{q} + \delta(\tau)}\,,$$

полученная в результате самосогласованных вычислений параметров $\lambda(\tau)$ и $\delta(\tau)$. Спектр является бесщелевым и акустическим, т. е. $\Omega_\mathbf{q} \propto q$ при $q \to 0$ (как у фононов или антиферромагнитных магнонов). Средняя энергия возбуждений (напомним, что все энергетические параметры системы приведены к безразмерному виду путем деления на zJ),

$$\overline{\Omega}(\tau) = \lambda(\tau) \int\limits_{-1/3}^{1} D(\varepsilon)\, E(\varepsilon, \delta(\tau))\, d\varepsilon \approx \approx \lambda(\tau)\sqrt{\delta(\tau)}, \quad (45)$$

является возрастающей функцией температуры и при $\tau > 2$ достигает «насыщения»: $\overline{\Omega} \to 0.2$.

Температурное поведение модуля коррелятора между ближайшими соседями, $K_1(\tau)$, представлено

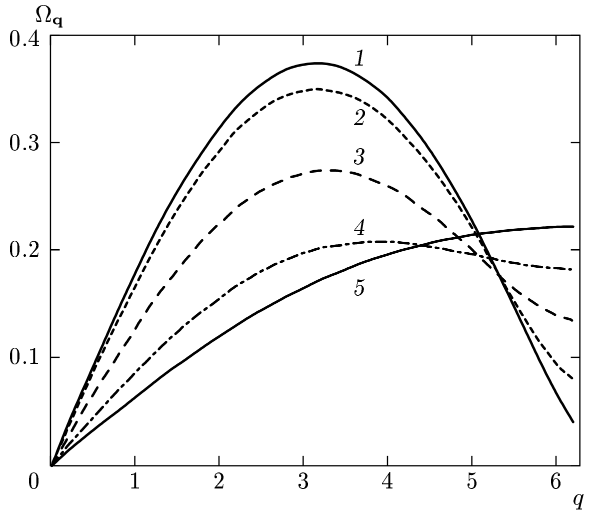

Рис. 3. Температурная эволюция спектра возбуждений $\Omega_{\mathbf{q}}(\tau)$ в направлении [001] при самосогласованно вычисленных параметрах $\delta(\tau)$ и $\lambda(\tau)$: *1* — $\tau = 0$, $\lambda = 0.56$, $\delta = 0.0032$; *2* — $\tau = 0.05$, $\lambda = 0.518$, $\delta = 0.0172$; *3* — $\tau = 0.1$, $\lambda = 0.385$, $\delta = 0.091$; *4* — $\tau = 0.2$, $\lambda = 0.23$, $\delta = 0.47$; *5* — $\tau = 1.0$, $\lambda = 0.1$, $\delta = 3.68$

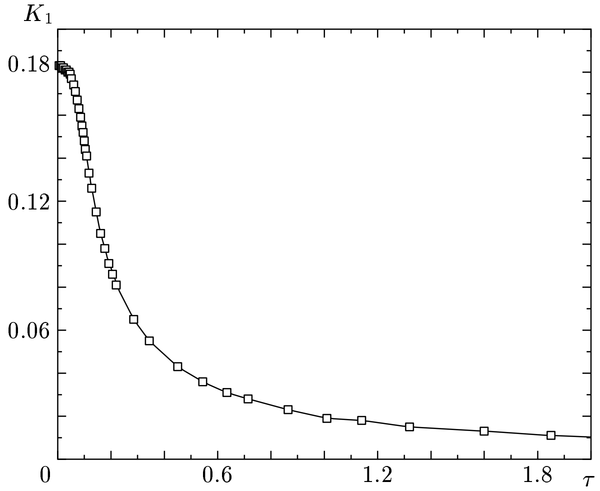

Рис. 4. Температурная зависимость модуля коррелятора между ближайшими соседями, $K_1(\tau)$; энергия системы $\varepsilon(\tau) = -(3/4)K_1(\tau)$

на рис. 4 . При $\tau \geq 0.5$ его температурная зависимость близка к асимптотической, $K_1(\tau) \propto 1/\tau$. Безразмерная теплоемкость

$$c(\tau) = \frac{\partial \varepsilon(\tau)}{\partial \tau} = -\frac{3}{4}\,\frac{\partial K_1(\tau)}{\partial \tau}\,, \tag{46}$$

как показывает расчет, по виду похожа на теплоемкость двухуровневой системы (аномалия Шоттки): максимум при $\tau \approx 0.1 \approx \overline{\Omega}/2$, асимптотика $c(\tau) \propto 1/\tau^2$, однако в низкотемпературной области поведение является степенным, $c(\tau) \propto \tau^3$.

Магнитная восприимчивость. Динамическая восприимчивость спиновой системы в безразмерных единицах определяется соотношением [8]

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

В рассматриваемом состоянии спиновой жидкости из-за изотропности корреляционных функций имеем

$$\chi^{+-}(\mathbf{q},\omega) = 2\chi^{zz}(\mathbf{q},\omega) = -2G(\mathbf{q},\omega).$$

Выражение для статической восприимчивости ($\omega = 0$) в соответствии с (24), (25) имеет вид

$$\chi^{zz}(\mathbf{q},0) = \frac{K_1}{2}\,\frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{\Omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{K_1}{2\lambda^2}\,\frac{1}{1/3+\Gamma_{\mathbf{q}}+\delta} = \frac{1}{\alpha_1}\,\frac{1}{1/3+\Gamma_{\mathbf{q}}+\delta}\,, \tag{47}$$

отсюда следует, что

$$\chi^{zz}(0,0) \equiv \chi(\tau) = \frac{1}{\alpha_1(\tau)\,[4/3+\delta(\tau)]}\,, \qquad \chi^{zz}(0,0)\big|_{\tau=0} \equiv \chi(0) = 0.23, \tag{48}$$

$$\chi^{zz}(\mathbf{Q}_{1,2},0) = \frac{1}{\alpha_1(\tau)\delta(\tau)}, \qquad \chi^{zz}(\mathbf{Q}_{1,2},0)\big|_{r=0} = 295.31, \tag{49}$$

где $\mathbf{Q}_1 \equiv X = (0,0,2\pi)$, $\mathbf{Q} \equiv W = (\pi,0,2\pi)$ — особые точки зоны Бриллюэна ГЦК-решетки, в которых $\Gamma_{\mathbf{Q}_1} = \Gamma_{\mathbf{Q}_2} = -1/3$. Поскольку в спиновой жидкости $\delta(0) \neq 0$, расходимости выражения (49) при $\tau \to 0$ нет, что свидетельствует об устойчивости состояния спиновой жидкости по отношению к коротковолновым возмущениям, соответствующим волновым векторам $\mathbf{Q}_{1,2}$, и конечности корреляционной длины.

Восприимчивость (48) сопоставим с продольной термодинамической восприимчивостью, которая по определению [8] равна

$$\tilde{\chi}^{zz}(\tau) = \frac{1}{\tau}\left[\langle (s^z(0))^2\rangle - \langle s^z(0)\rangle^2\right] \equiv \frac{1}{\tau}\chi_0(\tau), \tag{50}$$

где $s^z(0)$ — фурье-образ оператора при $\mathbf{q} = 0$. Поскольку в состоянии спиновой жидкости $\langle s^z(0)\rangle = 0$, из-за изотропности спиновых корреляторов

$$\chi_0(\tau) = \frac{1}{N}\langle (S^z)^2\rangle = \frac{1}{3}S^2(\tau) = \frac{1}{4}K(\mathbf{q}=0) = \frac{\tau}{\alpha_1(3/4+\delta)}\,, \tag{51}$$

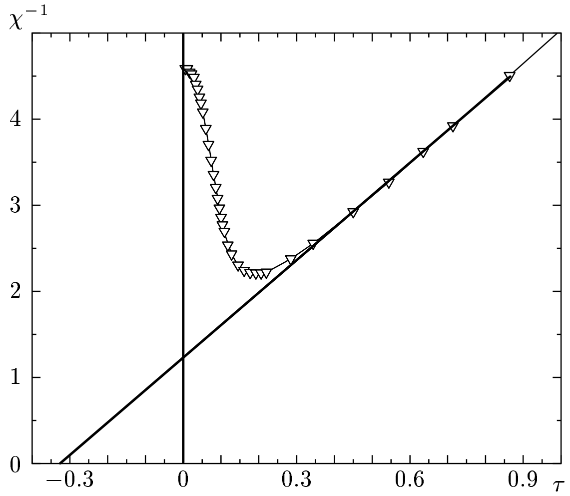

Рис. 5. Температурная зависимость обратной восприимчивости χ^{-1}; при $\tau > 0.5$ функция $\chi^{-1}(\tau)$ практически достигает своего асимптотического значения с парамагнитной точкой Кюри $\Theta = 1/3$

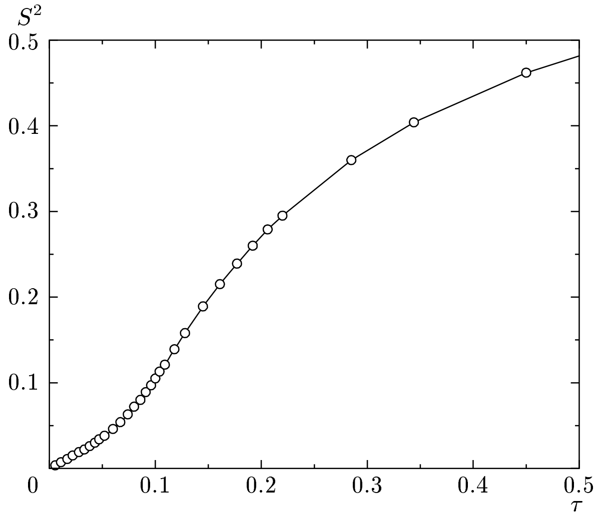

Рис. 6. Поведение функции $S^2(\tau) \equiv N^{-1}\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ в области низких температур, $\mathbf{S}$ — оператор полного спина системы; асимптотически $S^2(\tau) \to 3/4$

где функция $S^2(\tau)$ определена соотношением (43). Из сравнения формул (50), (51) с (48) следует, что продольная термодинамическая восприимчивость совпадает с динамической при $\omega = 0$, $\mathbf{q} = 0$, т. е. $\tilde{\chi}^{zz}(\tau) = \chi(\tau)$, причем имеет место соотношение

$$3\tau\chi(\tau) = S^2(\tau). \tag{52}$$

На рис. 5 представлен численный расчет обратной восприимчивости $\chi^{-1}(\tau)$. Эта функция имеет минимум при $\tau \approx 0.2$ и уже при $\tau \geq 0.5$ становится близкой к функции $\chi^{-1}(\tau) \approx \tau + \Theta$, где $\Theta = 1/3$ является аналогом парамагнитной точки Кюри для антиферромагнетиков. На рис. 6 представлена функция $S^2(\tau)$, вычисленная по соотношению (52). Параметр $\alpha_1(\tau)$ быстро достигает своего асимптотического значения, равного единице, при $\tau \geq 0.5$.

7. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ

В области предельно низких температур удобно использовать представление $\operatorname{cth}(x/2) = 1 + 2n(x)$, где $n(x)$ — функция распределения Бозе. Поскольку в этой области спектр является акустическим (пропорциональным q), имеем степенное поведение параметров:

$$\lambda(\tau) = \lambda(0) - B\tau^4, \quad K_1(\tau) = K_1(0) - A\tau^4. \tag{53}$$

Так как энергия системы $\varepsilon = -(3/4)K_1$, теплоемкость спиновой жидкости в этой области,

$$c(\tau) = \partial\varepsilon/\partial\tau = 4A\tau^3, \tag{54}$$

аналогична теплоемкости дебаевских фононов (или антиферромагнитных магнонов).

При температурах $\tau \geq \tau_0$, где $\tau_0 = \lambda(0)(2/\sqrt{3}\,) \times \times \sqrt{\delta(0)}$ — энергия возбуждения на границе ($\varepsilon = -1/3$ или $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{1,2}$), термодинамика становится более сложной, так как вклад в температурную зависимость параметров дает и эта область. Вначале преимущественной является квадратичная зависимость параметра δ, но при $\tau > 1$ она переходит в линейную.

Асимптотика ($\boldsymbol{\tau \to \infty}$). Коэффициенты в асимптотическом поведении всех функций, когда корреляции исчезают, можно получить аналитически, используя следующие физически очевидные условия:

1) $S^2(\tau) \to 3/4$ (3/4 — значение квадрата спина на узле решетки);

2) $\alpha_1(\tau) \to 1$, т. е. параметр расцепления для нескоррелированных спинов становится равным единице.

Первое условие для восприимчивости (52) приводит к закону Кюри:

$$\chi(\tau) = \frac{S^2(\tau)}{3\tau} \to \frac{1}{4\tau}\,.$$

С другой стороны, эквивалентное определение восприимчивости (48) при выполнении обоих условий дает

$$\chi(\tau) \to \frac{1}{4/3 + \delta(\tau)}\,.$$

Для выполнения закона Кюри, необходимо, чтобы

$$\delta(\tau) \to 4\tau. \tag{55}$$

Асимптотически интегралы принимают вид

$$I_n(\tau) \to \frac{1}{2\lambda(\tau)} \int\limits_{-1/3}^{1} D(\varepsilon)(-\varepsilon)^n \left(1 - \frac{\varepsilon}{4\tau}\right) d\varepsilon,$$

откуда, используя свойства плотности состояний (38), получаем

$$\begin{gathered} I_0(\tau) \to \frac{1}{2\lambda(\tau)}, \quad I_1(\tau) \to \frac{1}{z}\frac{1}{2\lambda(\tau)}\frac{1}{4\tau}, \\ I_2(\tau) \to \frac{1}{z}\frac{1}{2\lambda(\tau)}, \quad z = 12. \end{gathered} \tag{56}$$

Поскольку $I_1 = \lambda$ (из уравнения самосогласования (40а)), из (56) имеем $\lambda^2 = 1/8z\tau$, т. е.

$$\lambda \to \frac{1}{\sqrt{2z}}\frac{1}{2\sqrt{\tau}}, \quad \overline{\Omega} = \lambda\sqrt{\delta} = \frac{1}{\sqrt{2z}}. \tag{57}$$

Таким образом, имеем следующее поведение термодинамических характеристик системы (спиновой жидкости) при $\tau \to \infty$:

$$\begin{gathered} \chi(\tau) \to \frac{1}{4\tau}, \quad \delta(\tau) \to 4\tau, \\ \lambda(\tau) \to \frac{\overline{\Omega}}{2}\frac{1}{\sqrt{\tau}} = \frac{0.102}{\sqrt{\tau}}, \\ K_1(\tau) \to \frac{\overline{\Omega}^2}{2}\frac{1}{\tau} = \frac{0.021}{\tau}. \end{gathered} \tag{58}$$

8. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ

По определению,

$$K_r = 4\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}} \langle s^z_{\mathbf{f}} s^z_{\mathbf{f+r}}\rangle = \frac{4}{3}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{f}} \langle \mathbf{s_f s_{f+r}}\rangle.$$

Общее выражение для пространственных корреляционных функций (см. (14) и (34)) имеет вид

$$K_r = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} K(\mathbf{q}),$$

$$K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda}\frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\delta)} \operatorname{cth}\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau},$$

где параметры $g \equiv K_1/\lambda$ и δ являются функциями температуры.

Рассмотрим характер пространственных корреляций в основном (синглетном) состоянии спиновой жидкости. При $\tau \equiv 0$ имеем

$$K(\mathbf{q}) = g(0)R(\mathbf{q}), \quad R(\mathbf{q}) \equiv \sqrt{\frac{1-\Gamma_{\mathbf{q}}}{1/3+\Gamma_{\mathbf{q}}+\delta(0)}}. \tag{59}$$

Нахождение K_r для произвольных r представляет собой технически сложную вычислительную задачу, поскольку суммирование (интегрирование) ведется по первой зоне Бриллюэна, которая в ГЦК-решетке имеет достаточно сложную форму [12].

Предварительно отметим, что соотношение (43),

$$\sum_{\mathbf{r}} K_r = 0,$$

свидетельствует о том, что в основном синглетном состоянии спиновой жидкости пространственные корреляционные функции знакопеременны и при суммировании взаимно компенсируются.

Из (59) следует, что наибольший вклад в формирование пространственных корреляций дают те области зоны Бриллюэна, в которых $\Gamma_{\mathbf{q}} \to -1/3$, т. е. окрестности точек $\mathbf{Q}_1 = (0,0,2\pi)$, $\mathbf{Q}_2 = (\pi,0,2\pi)$ и других, аналогичных по симметрии.

Окрестность точки $\mathbf{Q_1}$. Положим $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_1 + \mathbf{p}$, где $|\mathbf{p}| = p \ll 1$. В этой области

$$\begin{gathered} \Gamma_{\mathbf{Q_1+p}} \approx -\frac{1}{3} + \frac{1}{12}p_z^2, \\ R(\mathbf{Q}_1+\mathbf{p}) \approx \frac{4}{\sqrt{p_z^2+\kappa^2}}, \quad \kappa^2 \equiv z\delta(0) \end{gathered} \tag{60}$$

и фурье-образ корреляционной функции анизотропен с выделенным z-направлением. Тогда

$$\begin{gathered} K_r \approx 4ge^{i\mathbf{Q}_1\cdot\mathbf{r}} C_{an}(r), \\ C_{an}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{(p_0)} d\mathbf{p}\frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{p_z^2+\kappa^2}}. \end{gathered} \tag{61}$$

Интегрирование проводим в сферической системе координат по сфере малого радиуса p_0 (вектор $\mathbf{r}$ направляем вдоль оси z):

$$C_{an}(r) = \frac{1}{2\pi^2}\int\limits_0^{p_0} p^2 dp \int\limits_0^1 \frac{dx\,\cos(prx)}{\sqrt{p^2x^2+\kappa^2}} = \frac{1}{2\pi^2}\int\limits_0^{p_0} p^2 dp \frac{1}{p}\int\limits_0^{pr} \frac{dz\,\cos z}{\sqrt{z^2+A^2}},$$

где $A^2 = r^2\kappa^2$. Для больших значений r интеграл равен [13]

$$\int\limits_0^{\infty} \frac{dz\,\cos z}{\sqrt{z^2+A^2}} \approx \frac{\pi}{2A}e^{-A}, \quad A \gg 1.$$

В результате получаем следующую асимптотику:

$$C_{an}(r) \propto \frac{\exp(-r/\xi)}{\sqrt{r/\xi}}, \quad \xi = \frac{1}{\kappa} = \frac{1}{\sqrt{z\delta(0)}}, \qquad (62)$$

где ξ — корреляционная длина. Поскольку $\delta(0) \approx \approx 10^{-3}$, $z = 12$, имеем $\xi \approx 8.95$, т. е. приблизительно девять постоянных решетки или около двенадцати–тринадцати расстояний между ближайшими соседями. Из этих оценок следует, что в спиновой жидкости достаточно хорошо развит ближний порядок.

В области высоких температур, используя приближение $\operatorname{cth} x \approx 1/x$, получаем

$$K(\mathbf{q}) \approx \frac{4\tau}{\alpha_1(\tau)} \frac{1}{1/3 + \Gamma_{\mathbf{q}} + \delta(\tau)} \qquad (63)$$

(напомним, что асимптотически $\alpha_1(\tau) \to 1$, $\delta(\tau) \to \to 4\tau$). В этом случае

$$K_r = \frac{4\tau}{\alpha_1(\tau)} \frac{1}{v_B} \int\limits_{(v_B)} d\mathbf{q} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{1/3 + \Gamma_{\mathbf{q}} + \delta(\tau)},$$

$$v_B = 4(2\pi)^3,$$

где v_B — объем зоны Бриллюэна. По-прежнему считаем, что главный вклад в интеграл дают окрестности точек, в которых $\Gamma = -1/3$. В окрестности точки $\mathbf{Q}_1$ имеем

$$K_r \approx \frac{z\tau}{\alpha_1(\tau)} C^*_{an}(r),$$

$$C^*_{an}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int\limits_{(p_0)} d\mathbf{p} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{p_z^2 + \kappa^2}, \qquad (64)$$

причем, в отличие от $C_{an}(r)$, вместо корня в знаменателе фигурирует первая степень. Интегрирование тем же способом дает

$$C^*_{an}(r) \approx \frac{p_0^2}{(2\pi)^2} r \int\limits_0^\infty \frac{dz \cos z}{z^2 + \kappa^2 r^2} =$$

$$= \frac{p_0^2}{(2\pi)^2} r \frac{\pi}{2\kappa r} e^{-\kappa r} \propto e^{-\kappa r}. \qquad (65)$$

Корреляционная длина $\xi = 1/\kappa$ в высокотемпературном режиме становится малой ($\xi \propto 1/\sqrt{\tau}$), и в результате практически остаются корреляции между ближайшими соседями.

Таким образом, пространственные корреляции в главных направлениях являются осциллирующими с периодом $\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{r} = 2\pi r$ и «затухающими» в соответствии с поведением функции $C_{an}(r)$.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем итоги проведенного исследования.

В системах с фрустрированными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями (как в ГЦК-решетке) квантовые флуктуации поперечных спиновых компонент становятся существенными и могут разрушить изинговское АФ-состояние, если нет дополнительных стабилизирующих факторов (обмена между вторыми соседями или анизотропии).

При отсутствии в ГЦК-решетке дальнего АФ-порядка система находится в состоянии, которое названо спиновой жидкостью. Оно характеризуется изотропными спиновыми корреляционными функциями (симметрия гамильтониана не разрушена), ее основное состояние является синглетным (полный спин системы $S = 0$), что соответствует квантовомеханической классификации состояний по величине полного спина.

Спиновая жидкость описана в рамках теории второго порядка методом функций Грина. Предложен метод самосогласованного вычисления температурных зависимостей параметров спиновой жидкости: λ — «жесткости» спектра возбуждений, K_1 — модуля спинового коррелятора между ближайшими соседями, δ — щелевого параметра. Энергия спиновой жидкости (в единицах обменного параметра на одну связь) $\varepsilon = -(3/4)K_1$, энергия основного состояния $\varepsilon_0 = -0.133$. Параметр $\delta \neq 0$ играет важную роль: сохраняет в спиновой системе трансляционную инвариантность основной решетки; определяет корреляционную длину $\xi = 1/\sqrt{z\delta}$; при высоких температурах приводит к закону Кюри для магнитной восприимчивости спиновой жидкости.

В спиновой жидкости имеется ближний порядок, который похож на антиферромагнитный со знакопеременностью спиновых корреляционных функций. Обратная восприимчивость также близка к антиферромагнитной (вплоть до существования парамагнитной точки Кюри).

При наличии стабилизирующих факторов возможна конкуренция между АФ-состоянием и состоянием спиновой жидкости. Можно утверждать, что системы с дальним магнитным порядком при температурах выше критической переходят в состояние спиновой жидкости.

Автор благодарен В. В. Валькову, В. И. Зиненко и С. Г. Овчинникову за полезные дискуссии и критические замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 00-02-16110).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971), с. 704.

2. M. E. Lines, Proc. Roy. Soc. London A **271**, 105 (1963).

3. M. E. Lines, Phys. Rev. **135**, A1336 (1964).

4. H. T. Diep and H. Kawamura, Phys. Rev. B **40**, 7019 (1989).

5. M. T. Heinila and A. S. Oja, Phys. Rev. B **48**, 16514 (1993).

6. A. F. Barabanov, V. M. Beresovsky and E. Zasinas, Phys. Rev. B **52**, 10177 (1995).

7. Е. В. Кузьмин, ФТТ **44**, 1075 (2002).

8. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975), с. 216.

9. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jap. **60**, 2394 (1991).

10. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994).

11. A. F. Barabanov and V. M. Beresovsky, Phys. Lett. **186A**, 175 (1994).

12. Г. Джонс, *Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах*, Мир, Москва (1968), с. 121.

13. Г. Б. Двайт, *Таблицы интегралов и другие математические формулы*, Наука, Москва (1978), с. 169.