ЖЭТФ, 2005, том 128, вып. 5 (11), стр. 1000–1012

КВАНТОВАЯ СПИНОВАЯ ЖИДКОСТЬ В ДВУХСЛОЙНОМ ТРЕУГОЛЬНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Р.С. Гехт, *И. Н. Бондаренко* *

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

Поступила в редакцию 13 августа 2004 г.

Исследуется возможность реализации состояния типа квантовой спиновой жидкости в двухслойном треугольном антиферромагнетике со спином $1/2$ при $T = 0$. Найдено отношение констант внутри- и межплоскостного обмена (j), при котором происходит переход из классического состояния со 120-градусным упорядочением спинов в квантовое состояние с нулевой намагниченностью на узле; при этом спины соседних слоев образуют синглеты, отделенные от триплетных возбуждений энергетической щелью. В отличие от аналогичной системы с квадратной решеткой, область значений j, в которой реализуется классическое упорядоченное состояние, из-за эффектов фрустраций оказывается на порядок меньше; при этом поведение термодинамических величин в целом аналогично поведению в двухслойных квадратных решетках, отличие проявляется в поведении щели в спектре квазичастиц во внешнем магнитном поле h. Для малых полей h построена $j-h$-фазовая диаграмма, определяющая области существования 120-градусной и синглетной фаз. Установлено, что в окрестности фазового перехода второго рода вклад не учитываемых при спин-волновом описании продольных флуктуаций спина в термодинамические величины соизмерим со вкладом поперечных флуктуаций.

PACS: 75.10.Jm, 75.30.Cr, 75.30.Ds, 75.30.Et, 75.30.Kz, 75.45.+j

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что образование спиновой щели в магнетиках между нижним синглетным состоянием и возбужденными магнитными уровнями приводит к тому, что при низких температурах в них не достигается магнитное упорядочение. Кроме того, в основе феномена ВТСП, вероятно, также лежит спин-щелевая природа. По этой причине в последнее время было изучено множество модельных объектов и реальных соединений, обладающих указанными свойствами [1–19]. Квантовые эффекты оказываются наиболее существенными в низкомерных системах, системах с малым координационным числом, низкоспиновых и фрустрированных системах [20–26]. Фрустрации, в частности, создавая или усиливая вырождение основного состояния [27], дают возможность возникновения новых типов упорядочения в результате конкуренции квантовых эффектов и слабых возмущений другой природы; с другой стороны, приводя к эффективному ослаблению связи, они могут значительно изменить область реализации квантово-неупорядоченной фазы.

В нашей работе рассматриваются условия возникновения синглетной и магнитной фаз, а также термодинамические свойства системы, состоящей из двух слоев треугольного антиферромагнетика. Теоретический интерес к бислойным системам сформирован отчасти экспериментальными факторами. Экспериментальные наблюдения говорят о том, что некоторые из высокотемпературных сверхпроводников содержат пары CuO_2-слоев, отделенных от других слоев немагнитными прослойками [28, 29]. Экспериментально осаждают также слои с треугольной решеткой, образуемой ферромагнитным He^3 [30].

В двумерных треугольных гейзенберговских антиферромагнетиках исследования показывают [31–34], что при $T = 0$ существует дальний порядок даже для систем со спином $S = 1/2$, при этом намагниченность на узле вдвое меньше классической величины и имеет практически то же значение, что и для квадратных решеток [35, 36]. Наряду с этим известно, что взаимодействие между слоями

*E-mail: bondhome@mail.ru

двухслойных квадратных антиферромагнетиков может привести при определенных соотношениях констант внутри- и межплоскостного обмена к переходу в синглетное состояние с полным квантовым сокращением спина [37–39].

Возможность квантового поведения в бислойных антиферромагнетиках видна из следующих соображений. В бислойной системе, состоящей из гейзенберговских спинов 1/2, с внутриплоскостным обменом J_1 и межплоскостным J_2, в предельном случае $J_1 = 0$ мы имеем систему невзаимодействующих димеров, в которой на каждом узле реализуется одно из четырех состояний: синглетное и три триплетных, отстоящих по энергии от основного на величину обмена J_2. Включение слабого внутриплоскостного обмена J_1, очевидно, принципиально не меняет картины: величина щели не равна J_2, как в случае невзаимодействующих димеров, но порядка J_2 (подтверждение этому имеется в тексте, см. ниже формулу (14)). Поэтому при слабом межплоскостном обмене ($J_2 \ll J_1$) щель мала, триплетные состояния на каждом узле заселены, среднее значение намагниченности отлично от нуля и в бислойном треугольном антиферромагнетике должно соответствовать классическому 120-градусному упорядочению. В пределе больших J_2 ($J_2 \gg J_1$) триплетные магнитные уровни отделены слишком большой щелью от основного состояния и система должна жить в синглетном состоянии с нулевой намагниченностью на узле.

Гамильтониан модели ($J_1, J_2 \geq 0$) имеет вид

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_{1i}\mathbf{S}_{1j} + J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2j} + + J_2 \sum_i \mathbf{S}_{1i}\mathbf{S}_{2i} + J_2 \sum_i \mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{1i}, \quad (1)$$

$\langle i,j \rangle$ — пара ближайших соседей в каждом слое, 1, 2 — номера слоев. Кажущееся излишество в последних слагаемых обусловлено тем, что при систематическом переборе в $\sum_{\langle i,j \rangle}$ каждая взаимодействующая пара спинов считается дважды, а в $\sum_i$ — один раз. Пару ближайших спинов соседних плоскостей условимся называть димером.

2. СПИН-ВОЛНОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

В упорядоченной 120-градусной фазе мы провели стандартные спин-волновые вычисления с использованием преобразования Голштейна–Примакова от спиновых операторов к операторам рождения и уничтожения магнонных отклонений от 120-градусной структуры. Установлено, что спектр возбуждений содержит две ветви, каждая из которых содержит голдстоуновский бозон: первая на волновом векторе $\mathbf{k} = (0,0)$, соответствующем ферромагнитному упорядочению, вторая — на волновом векторе $\mathbf{k} = \mathbf{q} = (4\pi/3, 0)$, соответствующем 120-градусной структуре:

$$\begin{aligned} E_{k1}^{HP} &= 3J_1 S\sqrt{(1-\nu_k)(1+2\nu_k+2j)}, \\ E_{k2}^{HP} &= 3J_1 S\sqrt{(1+2\nu_k)(1-\nu_k+2j)} > E_{k1}^{HP}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\nu_k \equiv \frac{1}{3}\left(\cos k_x + 2\cos\frac{k_x}{2}\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right), \quad j \equiv \frac{J_2}{3J_1}. \quad (3)$$

В первом порядке по $1/S$ получены намагниченность на узле и скорость спиновых волн вблизи симметрийного волнового вектора $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ (здесь N — число димеров):

$$\begin{aligned} N_0 &= S + \frac{1}{2} - \frac{S}{2N}\sum_{\alpha,k}\frac{3J_1 + J_2 + 3J_1\nu_k/2}{2E_{k\alpha}^{HP}}, \\ c &= \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} J_1 S\sqrt{1 + \frac{4}{9}\frac{J_2}{J_1}}. \end{aligned} \quad (4)$$

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СВЯЗАННЫХ ОПЕРАТОРОВ

В другом предельном случае в синглетной фазе с нулевой намагниченностью на узле спин-волновое описание неприменимо и использовалось представление связанных операторов, впервые введенное в работе [35], в дальнейшем применявшееся для гейзенберговских моделей с конкурирующим взаимодействием [2, 5, 36] и для двухслойных антиферромагнетиков на квадратной решетке [38, 39]. Вводится система состояний димера:

$$\begin{aligned} |t_a\rangle &= \uparrow\uparrow = \quad |1,1\rangle, \\ |t_b\rangle &= -\downarrow\downarrow = |1,-1\rangle, \\ |t_c\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = |1,0\rangle, \\ |0\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = |0,0\rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

и три бозона a, b, c, описывающие переход из синглетного состояния $|0\rangle$ в одно из триплетных:

$$a^+|0\rangle = |t_a\rangle, \quad b^+|0\rangle = |t_b\rangle, \quad c^+|0\rangle = |t_c\rangle. \quad (6)$$

Операторы рождения и уничтожения синглетного состояния определим так:

$$s^+|0\rangle = |0\rangle, \quad s|0\rangle = |0\rangle. \quad (7)$$

Введенные таким образом операторы s^+ и s равны между собой и равны константе:

$$s^+ = s \equiv u,$$

что является признаком сконденсированности синглетного состояния. Оператор u, определяемый из условия нормировки, позволяет исключить возможность существования нескольких триплетных возбуждений на одном узле. В данный момент на узле реализуется одно из четырех состояний, и оператор полного числа частиц на узле равен 1:

$$s^+s + a^+a + b^+b + c^+c = 1.$$

Поэтому

$$s^+s = u^2 = 1 - a^+a - b^+b - c^+c \Rightarrow u = = \sqrt{1-(a^+a + b^+b + c^+c)}. \quad (8)$$

В представлении новых операторов компоненты векторов ферро- и антиферромагнетизма димера

$$\mathbf{M} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{L} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2$$

выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} &M^z = a^+a - b^+b, \quad M^+ = \sqrt{2}(a^+c - c^+b),\\ &M^- = \sqrt{2}(c^+a - b^+c), \quad L^z = -(c^+u + uc),\\ &L^+ = \sqrt{2}(a^+u + ub), \quad L^- = \sqrt{2}(b^+u + ua). \end{aligned} \quad (9)$$

Внутри корня оператора u вводится параметр λ:

$$u = \sqrt{1 - \lambda(a^+a + b^+b + c^+c)},$$

который позволяет в приближении $\lambda \ll 1$ провести разложение u, а затем, подобно $1/S$-разложению в обычной спин-волновой теории, положить $\lambda = 1$ в окончательных результатах. Чтобы не изменились коммутационные соотношения для спина

$$\begin{aligned} &[M^\alpha, M^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}M^\gamma, \quad [L^\alpha, L^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}M^\gamma,\\ &[M^\alpha, L^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L^\gamma, \end{aligned} \quad (10)$$

фактор $1/\sqrt{\lambda}$ вводится в три компоненты вектора $\mathbf{L}$:

$$\begin{aligned} &L^z = -(c^+u + uc)/\sqrt{\lambda},\\ &L^+ = \sqrt{2}(a^+u + ub)/\sqrt{\lambda},\\ &L^- = \sqrt{2}(b^+u + ua)/\sqrt{\lambda}, \end{aligned} \quad (11)$$

Подставляя (9) и (11) в исходный гамильтониан (1) и учитывая, что для димера с $S = 1/2$ выполняется соотношение

$$\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 = -\frac{3}{4} + a^+a + b^+b + c^+c,$$

получим ($J^*_{ij} \equiv J_{ij}/\lambda$)

$$\begin{aligned} H = &-\frac{3}{2}J_2N + 2J_2\sum_i(a_i^+a_i + b_i^+b_i + c_i^+c_i) + \\ &+ \sum_{ij}\Big\{J_{ij}(c_i^+a_i - b_i^+c_i)(a_j^+c_j - c_j^+b_j) + \\ &+ J_{ij}{}^*(b_i^+u_i + u_ia_i)(a_j^+u_j + u_jb_j) + \\ &+ \frac{1}{2}J_{ij}{}^*(c_i^+u_i + u_ic_i)(c_j^+u_j + u_jc_j) + \\ &+ \frac{1}{2}J_{ij}(a_i^+a_i - b_i^+b_i)(a_j^+a_j - b_j^+b_j)\Big\}, \end{aligned} \quad (12)$$

где операторы a, b, c подчиняются бозонным перестановочным соотношениям

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, \quad [a_i^+, a_j^+] = 0,$$
$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i, b_j] = 0 \quad \text{и т. п.}$$

4. СПЕКТР НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ФАЗЫ

В неупорядоченном состоянии бозоны a, b, c равноправны и квадратичная форма гамильтониана (12) имеет следующий вид ($u \approx 1$):

$$\begin{aligned} H = &-\frac{9}{2}J_2N + \sum_k A_k(a_k^+a_k + b_k^+b_k + c_k^+c_k + \\ &+ a_{-k}a_{-k}^+ + b_{-k}b_{-k}^+ + c_{-k}c_{-k}^+) + \\ &+ \sum_k B_k(a_k^+b_{-k}^+ + b_k^+a_{-k}^+ + b_{-k}a_k + \\ &+ a_{-k}b_k + c_k^+c_{-k}^+ + c_{-k}c_k), \end{aligned} \quad (13)$$

$$A_k = 3J_1^*(j + \nu_k), \quad B_k = 3J_1^*\nu_k, \quad j \equiv \frac{J_2}{3J_1^*}.$$

Область устойчивости синглетной фазы можно найти с помощью анализа спектра возбуждений квазичастиц. Спектр возбуждений неупорядоченного состояния найден без учета квантовых поправок диагонализацией квадратичной формы. В силу равноправия бозонов a, b, c спектр трехкратно вырожден и имеет щель на волновом векторе $\mathbf{q}$ 120-градусной структуры:

$$\begin{aligned} &E_k = \sqrt{A_k^2 - B_k^2} = J_2\sqrt{1 + \frac{1}{j}2\nu_k},\\ &\triangle_{abc} = J_2\sqrt{1 - 1/j} = E_k(\mathbf{k} = \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (14)$$

Щель в спектре элементарных возбуждений неупорядоченной фазы (в том числе в области $J_2 \gg J_1$), как пояснялось во Введении, имеет порядок J_2 и равна точному значению J_2 в случае невзаимодействующих димеров ($J_1 = 0$).

При $j > 1$ спектр всюду действителен; при $j < 1$ спектр становится частично мнимым: система должна перейти в новое состояние. В точке фазового перехода $j = 1$ щель в спектре исчезает, и поэтому энергия возбуждений, связанных с образованием 120-градусной структуры, обращается в нуль. Возникает голдстоуновский бозон $E_k(\mathbf{k} = \mathbf{q}) = 0$, указывающий на понижение симметрии, связанное с конденсацией при $j < 1$ нового состояния — 120-градусной структуры. Таким образом, в этом приближении 120-градусное упорядочение устойчиво в области $j < 1$, синглетная фаза — при $j > 1$. Скорость спиновых волн в точке перехода $c = (3/2)J_1^*$.

5. МОДИФИКАЦИЯ ОПЕРАТОРОВ В 120-ГРАДУСНОЙ ФАЗЕ

В упорядоченной фазе операторы a, b, c модифицируются таким образом, чтобы обеспечивать среднее значение спина на узле, соответствующее 120-градусной структуре. Этого можно добиться выделением среднего значения операторов сорта c на волновом векторе $\mathbf{k} = \mathbf{q}$. Если положить

$$\langle c_q \rangle = \sqrt{N}\alpha \quad \Leftrightarrow \quad c_k = \sqrt{N}\alpha\delta_{kq} + \varepsilon_k, \tag{15}$$

то для среднего значения спина на узле во второй плоскости получим:

$$\langle S_{2i}^z \rangle = \frac{\sqrt{\beta(1-\beta)}}{\lambda}\cos qR_i \equiv N_0^{mid}\cos qR_i,$$

где $\beta \equiv \lambda\alpha^2$. Видно, что $\langle S_{2i}^z \rangle$ ведет себя как проекция модуля N_0^{mid} на ось z под углом $\alpha_i = qR_i$, где α_i при переходе от некоторого узла к соседнему ($R_i = 1$) меняется на $4\pi/3 \cdot 1 = 240^\circ \Leftrightarrow -120^\circ$ (поворот спина). Спины первой плоскости на каждом узле, как и должно быть, противоположны спинам второй. Таким образом,

$$N_0^{mid} \equiv \frac{\sqrt{\beta(1-\beta)}}{\lambda}$$

есть среднее значение спина на узле в нулевом приближении, а представление (15) обеспечивает 120-градусной структуру.

Равновесное значение β определялось из минимума энергии основного состояния. В среднеполевом приближении энергия основного состояния и β $(\partial E_0/\partial\beta = 0)$:

$$\begin{gathered} E_0 = -\frac{3}{2}J_2N + 2J_2N\frac{\beta}{\lambda} - 6J_1^*N\frac{\beta}{\lambda}(1-\beta), \\ \beta_0 = \frac{1}{2}(1-j). \end{gathered} \tag{16}$$

Таким образом, среднее значение операторов c $(\sim\alpha)$ и среднее значение спина на узле имеют смысл при $j < 1$, т. е. в упорядоченной фазе; в точке фазового перехода в среднеполевом приближении $j = 1$ все средние обращаются в нуль.

6. СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ УПОРЯДОЧЕННОЙ ФАЗЫ

Для определения спектра возбуждений в упорядоченной фазе необходимо найти квадратичную форму гамильтониана (12) с учетом соотношений (15).

Гамильтониан упорядоченной фазы можно представить в виде

$$H = E_0 + H_\perp + H_\parallel,$$

где $H_\perp$ — часть, квадратичная по операторам a, b, $H_\parallel$ — часть, квадратичная по операторам ε. $H_\parallel$ даст спектр продольных флуктуаций спина (операторы c, ε определяют среднее значение спина на узле), $H_\perp$ — спектр поперечных колебаний.

6.1. Спектр поперечных колебаний

Поясним, как находилась квадратичная форма по операторам a, b $(H_\perp)$. Для этого в гамильтониане (12) в слагаемых, содержащих явно a, b и u, в качестве u достаточно ограничиться выражением

$$u = \langle u \rangle = \sqrt{1-\beta};$$

в слагаемых, содержащих c, u, — приближением

$$u = 1 - \frac{\lambda}{2}(a^+a + b^+b);$$

в качестве c в $H_\perp$ везде мы используем среднее значение:

$$c = \langle c \rangle.$$

В результате после перехода в k-пространство $H_\perp$ приобретает вид

$$\begin{gathered} H_\perp = \sum_k A_k^\perp (a_k^+a_k + b_k^+b_k + a_{-k}a_{-k}^+ + b_{-k}b_{-k}^+) + \\ + B_k^\perp (a_k^+b_{-k}^+ + b_k^+a_{-k}^+ + a_kb_{-k} + b_ka_{-k}), \\ \frac{A_k^\perp}{3J_1^*} \equiv a_\perp = j + \beta + \nu_k\left(1 - \frac{3}{2}\beta\right), \\ \frac{B_k^\perp}{3J_1^*} \equiv b_\perp = \nu_k\left(1 - \frac{\beta}{2}\right). \end{gathered} \tag{17}$$

Спектр поперечных мод двукратно вырожден, является бесщелевым, содержит голдстоуновскую моду с $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ (при любых j):

$$E_k^{\perp} = \sqrt{{A_k^{\perp}}^2 - {B_k^{\perp}}^2} = J_2\left(1 + \frac{\beta}{j}\right) \times \\ \times \sqrt{\left(1 - \frac{\beta}{j+\beta}\nu_k\right)\left(1 + \frac{1-\beta}{j+\beta}2\nu_k\right)}, \quad (18)$$

$$E_k^{\perp}(\beta_0) = \frac{3}{2}J_1^*(1+j)\sqrt{(1+2\nu_k)\left(1 - \frac{1-j}{1+j}\nu_k\right)}, \quad (19)$$

где $E_k^{\perp}(\beta_0)$ — среднеполевое приближение. Наличие голдстоуновского бозона в спектре колебаний в плоскости слоя, очевидно, связано с нарушением симметрии, обусловленным наличием в плоскости слоя при $j < 1$ 120-градусного неелевского упорядочения. Скорость спиновых волн вблизи $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ равна:

$$c = \frac{3}{2}J_1^*\sqrt{(1-\beta_0)\left(1 - \frac{\beta_0}{2}\right)}.$$

6.2. Спектр продольных колебаний

Квадратичные по ε члены, образующие гамильтониан $H_{\parallel}$, содержатся в следующих слагаемых гамильтониана (12):

$$H_{\parallel} = 2J_2\sum_i \varepsilon_i^+\varepsilon_i + \\ + \frac{1}{2\lambda}\sum_{ij} J_{ij}\Big\{(c_i^+u_i + u_ic_i)(c_j^+u_j + u_jc_j) - \\ - (c_{i0}^+u_{i0} + u_{i0}c_{i0})(c_{j0}^+u_{j0} + u_{j0}c_{j0})\Big\},$$

где достаточно использовать соотношения

$$u = \sqrt{1 - \lambda c^+c}, \quad c = c_0 + \varepsilon,$$

и разложить u по степеням λ. Конденсатное слагаемое, вычитаемое внутри суммы, уже учтено в энергии основного состояния (16). После отделения квадратичной по ε части и перехода в k-пространство получим

$$H_{\parallel} = e_{\parallel}^0 + \sum_k\{A_k^{\parallel}(\varepsilon_k^+\varepsilon_k + \varepsilon_{-k}\varepsilon_{-k}^+) + \\ + B_k^{\parallel}(\varepsilon_k^+\varepsilon_{-k}^+ + \varepsilon_k\varepsilon_{-k})\}, \\ e_{\parallel}^0 = \frac{3}{2}J_1^*N\frac{\beta^2}{1-\beta}, \quad (20)$$

$$\frac{A_k^{\parallel}}{3J_1^*} \equiv a_k^{\parallel} = j + 2\beta + \frac{\beta^2}{2(1-\beta)}(1+2\nu_k) + \nu_k(1-3\beta), \\ \frac{B_k^{\parallel}}{3J_1^*} \equiv b_k^{\parallel} = \beta + \frac{\beta^2}{2(1-\beta)}(1+2\nu_k) + \nu_k(1-3\beta).$$

Спектр продольных колебаний щелевой ($E_k^{\parallel}(\beta_0)$ — среднеполевое приближение) и имеет вид

$$E_k^{\parallel} = \sqrt{{A_k^{\parallel}}^2 - {B_k^{\parallel}}^2} = 3J_1^*\sqrt{(j+\beta)\frac{j(1-\beta) - \beta(2\beta-3)}{1-\beta}\left[1 + \frac{(2\beta-1)^2}{j(1-\beta) - \beta(2\beta-3)}2\nu_k\right]}, \quad (21)$$

$$E_k^{\parallel}(\beta_0) = 3J_1^*\sqrt{1 + 2\nu_kj^2}, \\ \Delta_{\parallel}(\beta_0) = 6J_1^*\sqrt{\beta_0(1-\beta_0)} = E_k^{\parallel}(\mathbf{k} = \mathbf{q}). \quad (22)$$

Щель закрывается в точке фазового перехода $\beta_0 = 0$. В окрестности критической точки ($\beta_0 \to 0$) величина щели мала ($\Delta_{\parallel}(\beta_0) \sim \sqrt{\beta_0}$), поэтому при вычислении различных физических величин можно ожидать, что вклад от продольных флуктуаций будет соизмерим с вкладом поперечных.

7. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Мы исследовали поведение корреляционных функций между ближайшими спинами в слое $\langle\mathbf{S}_{ni}\mathbf{S}_{nj}\rangle$ и между слоями $\langle\mathbf{S}_{1i}\mathbf{S}_{2i}\rangle$ в обеих фазах:

$$\langle\mathbf{S}_{1i}\mathbf{S}_{1j}\rangle = \left\langle\frac{\mathbf{M}_i + \mathbf{L}_i}{2}\,\frac{\mathbf{M}_j + \mathbf{L}_j}{2}\right\rangle, \\ \langle\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2j}\rangle = \left\langle\frac{\mathbf{M}_i - \mathbf{L}_i}{2}\,\frac{\mathbf{M}_j - \mathbf{L}_j}{2}\right\rangle, \quad (23)$$

где мы используем соотношения (9), (11) и ограничиваемся квадратичным приближением по операторам. Например, в неупорядоченной фазе для $\langle\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\rangle^{1,2}$ получаем

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle^{1,2} = \frac{1}{4\lambda N} \sum_k 2 \Bigg(\langle a_k^+ b_{-k}^+ \rangle + \langle a_k b_{-k} \rangle + \\ + \langle a_k^+ a_k \rangle + \langle b_k^+ b_k \rangle + \langle c_k^+ c_k \rangle + \\ + \frac{1}{2} \left[\langle c_k^+ c_{-k}^+ \rangle + \langle c_k c_{-k} \rangle \right] \Bigg) \cos \mathbf{k}\Delta.$$

Средние значения в последнем выражении находились с помощью преобразования Боголюбова к новым операторам, в представлении которых исходный гамильтониан (в данном случае неупорядоченного состояния) диагонален. В результате эти средние содержат константы и операторы числа частиц того или иного сорта с определенным значением $\mathbf{k}$, которые согласно распределению Бозе равны нулю для рассматриваемого случая магнонного газа с химическим потенциалом $\mu = 0$ при $T = 0$. Аналогично находились и остальные корреляционные функции. Результаты для неупорядоченной фазы выглядят следующим образом ($j > 1$):

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle^{1,2} = \frac{3}{4\lambda N} \sum_k \frac{\cos \mathbf{k}\Delta}{\sqrt{1 + \frac{2\nu_k}{j}}}, \\ \langle \mathbf{S}_{1i} \mathbf{S}_{2i} \rangle = -\frac{9}{4} + \frac{3}{2N} \sum_k \frac{1 + \dfrac{\nu_k}{j}}{\sqrt{1 + \dfrac{2\nu_k}{j}}}. \tag{24}$$

Для упорядоченной фазы ($j < 1$) аналитические формулы в силу их громоздкости мы не приводим. Подробное изложение всех обсуждаемых результатов можно найти в работе [40]. Поведение корреляционных функций приведено на рис. 1. Как и должно быть, в пределе $j \to \infty$ корреляции между спинами одного димера $\langle \mathbf{S}_{1i} \mathbf{S}_{2i} \rangle$ имеют асимптоту $-3/4$, а внутриплоскостные корреляции $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ стремятся к нулю. В точке перехода корреляционные функции непрерывны. В пределе $j = 0$ слагаемые в $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$, обусловленные продольными флуктуациями, в сумме дают нуль, т. е. не вносят вклада. В отличие от результатов модифицированных спин-волновых методов корреляции между спинами в слое в синглетной фазе имеют конечное значение и нарастают по мере приближения к точке фазового перехода ($j = 1$). Корреляции между спинами соседних слоев с уменьшением j уменьшаются и достигают значения -0.47, которое меньше, чем в модифицированной спин-волновой теории.

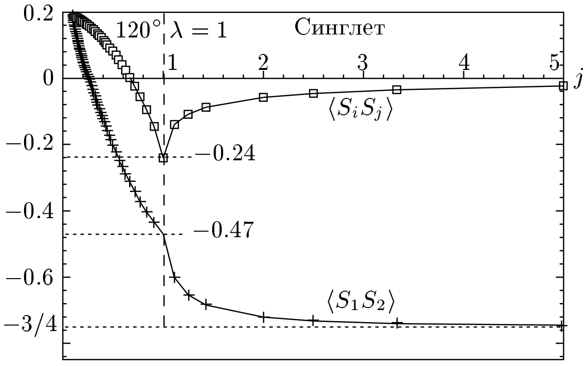

Рис. 1. Корреляционные функции между ближайшими спинами (среднеполевое приближение)

8. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ С УЧЕТОМ ФЛУКТУАЦИЙ

После диагонализации составляющие гамильтониана упорядоченной фазы $H_\perp$ и $H_\parallel$ имеют стандартный вид, позволяющий вычислить энергию основного состояния E с учетом флуктуационных поправок:

$$H_\perp = \sum_k E_k^\perp (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k + \alpha_{-k} \alpha_{-k}^+ + \\ + \beta_{-k} \beta_{-k}^+) + 2 \sum_k (E_k^\perp - A_k^\perp), \\ H_\parallel = e_\parallel^0 + \sum_k E_k^\parallel (\gamma_k^+ \gamma_k + \gamma_{-k} \gamma_{-k}^+) + \\ + \sum_k (E_k^\parallel - A_k^\parallel), \\ E = E_0 + e_\parallel^0 + 2 \sum_k (E_k^\perp - A_k^\perp) + \\ + \sum_k (E_k^\parallel - A_k^\parallel), \tag{25}$$

а также уточнить равновесное значение параметра β ($\partial E / \partial \beta = 0$). Уравнение для равновесного β имеет самосогласованный вид:

$$\beta = \beta_0 - \lambda Z_b(\beta), \\ Z_b(\beta) = Z_1(\beta) + Z_2(\beta) + \\ + Z_3(\beta) + Z_4(\beta) + Z_5(\beta), \tag{26}$$

$$Z_1(\beta) = \frac{\beta(2-\beta)}{8(1-\beta)^2},$$

$$Z_2(\beta) = \frac{1}{N 6 J_1^*} \sum_k \frac{\partial A_k^\perp}{\partial \beta} \left(\frac{A_k^\perp}{E_k^\perp} - 1 \right),$$

$$Z_3(\beta) = -\frac{1}{N 6 J_1^*} \sum_k \frac{\partial B_k^\perp}{\partial \beta} \frac{B_k^\perp}{E_k^\perp},$$

$$Z_4(\beta) = \frac{1}{N 12 J_1^*} \sum_k \frac{\partial A_k^\parallel}{\partial \beta} \left(\frac{A_k^\parallel}{E_k^\parallel} - 1 \right),$$

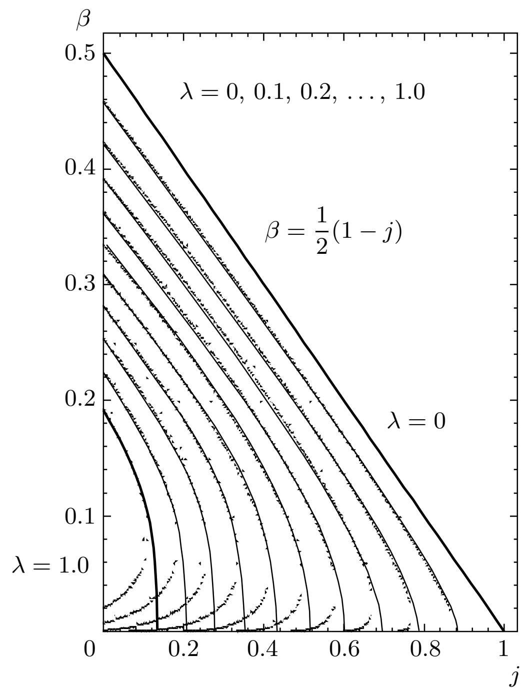

Рис. 2. Равновесное β с учетом квантовых поправок. Точками показано решение самосогласованного уравнения (26) для $\lambda = 0.1, \ldots, 1.0$, сплошные кривые — аппроксимация, исключающая нефизичную двузначность функции, обусловленную расходимостью гауссовых флуктуаций вблизи фазового перехода ($\beta \to 0$). Точка обращения β в нуль для физического случая $\lambda = 1$: $j = 0.132$

$$Z_5(\beta) = -\frac{1}{N12J_1^*}\sum_k \frac{\partial B_k^{\parallel}}{\partial \beta}\,\frac{B_k^{\parallel}}{E_k^{\parallel}}.$$

Мы рассчитывали $Z_b(\beta)$ в первом приближении, проводя преобразования точных функций β, после чего использовали для β среднеполевое приближение β_0. Корни уравнения найдены методом половинного деления с точностью 0.01. Семейство функций $\beta(j)$, соответствующих различным λ, представлено на рис. 2. Как видно на рисунке, имеется асимптота

$$\beta = \beta_0 = \frac{1}{2}(1-j)$$

при $\lambda \to 0$. Характерной особенностью функций при больших λ является двузначность $\beta(j)$ в области малых β, что нефизично. Такие результаты обусловлены гауссовыми флуктуациями, неограниченно возрастающими при приближении к фазовому переходу ($\beta \to 0$), что подробно обсуждается в работе [38]. Поэтому, опираясь на рассчитанные значения β вдали от фазового перехода, в окрестности фазового перехода ($\beta \approx 0$) мы аппроксимируем функции так, чтобы избежать двузначности (рис. 2). Согласно этой аппроксимации, точка обращения β в нуль при $\lambda = 1$ есть $j = J_2/3J_1 = 0.132$, т. е. $J_2/J_1 = 0.4$. В аналогичной системе с квадратной решеткой точка перехода в неупорядоченное состояние соответствует величине $J_2/J_1 = 1.86$–4.5 в зависимости от метода расчета [38, 39]. Как и ожидалось, классическое упорядоченное состояние в треугольной системе (120°) разрушается значительно быстрее, чем в квадратной — область значений j, в которой реализуется упорядоченное состояние, на порядок меньше. Такое существенное отличие частично может быть объяснено фрустрированностью связей в плоскости. При равных J_1 и J_2 в квадратной и треугольной системах эффективное взаимодействие двух спинов в плоскости треугольной решетки $\widetilde{J_1}$ из-за ориентации спина не в соответствии с локальным минимумом энергии оказывается слабее в 2 раза, а величина отношения J_2/J_1 в точке перехода — эффективно больше (приближаясь тем самым к значению в квадратной). Качественно ясно, что эффективное возрастание J_2/J_1, увеличивая щель между синглетным и триплетными уровнями, приводит к более раннему (по j) заселению синглетной орбитали и разрушению 120-градусного упорядочения.

9. СПОНТАННАЯ НАМАГНИЧЕННОСТЬ

Среднее значение спина на узле в 120-градусной фазе равно

$$N_0 = |\langle S_1^z\rangle| = |\langle S_2^z\rangle| = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\langle c^+u\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\times$$
$$\times\left\langle(\alpha+\varepsilon^+)\sqrt{1-\lambda\left[a^+a+b^+b+(\alpha+\varepsilon^+)(\alpha+\varepsilon)\right]}\right\rangle. \quad (27)$$

С точностью до квадратичных по операторам слагаемых имеем

$$N_0 = \frac{\alpha\sqrt{1-\beta}}{\sqrt{\lambda}}\times$$
$$\times\left[1 - \frac{\lambda}{2(1-\beta)}(\langle a_k^+a_k\rangle + \langle b_k^+b_k\rangle + \langle\varepsilon_k^+\varepsilon_k\rangle) -\right.$$
$$-\frac{\lambda}{2(1-\beta)}(\langle\varepsilon_k^+\varepsilon_k\rangle + \langle\varepsilon_k^+\varepsilon_{-k}^+\rangle) - \frac{\lambda\beta}{8(1-\beta)^2}\times$$
$$\left.\times(\langle\varepsilon_k\varepsilon_{-k}\rangle + \langle\varepsilon_k^+\varepsilon_{-k}^+\rangle + \langle\varepsilon_k^+\varepsilon_k\rangle + \langle\varepsilon_k\varepsilon_k^+\rangle)\right]. \quad (28)$$

Средние находились с помощью преобразования Боголюбова, полученного в разделе о корреляционных функциях. В результате получим

$$
\begin{aligned}
&N_0 = \frac{\sqrt{\beta(1-\beta)}}{\lambda}(1 - \lambda Z_a(\beta)),\\
&Z_a(\beta) = Z_6(\beta) + Z_7(\beta) + Z_8(\beta) + Z_9(\beta),\\
&Z_6(\beta) = \frac{\beta}{8(1-\beta)^2},\\
&Z_7(\beta) = -\frac{2-\beta}{8(1-\beta)^2}\frac{1}{N}\sum_k \frac{B_k^{\|}}{E_k^{\|}},\\
&Z_8(\beta) = \frac{4-3\beta}{8(1-\beta)^2}\frac{1}{N}\sum_k \left(\frac{A_k^{\|}}{E_k^{\|}} - 1\right),\\
&Z_9(\beta) = \frac{1}{2(1-\beta)}\frac{1}{N}\sum_k \left(\frac{A_k^{\perp}}{E_k^{\perp}} - 1\right).
\end{aligned}
\tag{29}
$$

Здесь

$$\frac{\sqrt{\beta(1-\beta)}}{\lambda} = \frac{\langle c_0^+ u_0\rangle}{\sqrt{\lambda}}$$

— приближение намагниченности без учета флуктуаций.

Приближение спонтанной намагниченности, не зависящее от таблицы значений $\beta(j)$, можно получить, используя первое итерационное приближение для β:

$$\beta \approx \beta_1 = \beta_0 - \lambda Z_b(\beta_0).$$

Тогда, принимая

$$Z_a \approx Z_a(\beta_0), \quad Z_b \approx Z_b(\beta_0),$$

с учетом того, что $\lambda \ll 1$, получим приближение намагниченности, показанное на рис. 3. Такое приближение имеет существенный недостаток: точки обращения в нуль величин N_0 и β (точка фазового перехода) не совпадают. Однако оно выявляет характерную особенность функции — наличие небольшого максимума в области малых j, особенно выраженного для средних значений λ — поведение, аналогичное поведению в двухслойных квадратных решетках [38].

Мы установили, что в пределе $j = 0$ продольные волны не дают вклада в намагниченность, поскольку слагаемые в Z_a, обусловленные продольными флуктуациями, в сумме равны нулю. В другом предельном случае, в окрестности фазового перехода ($\beta \to 0$), намагниченность исчезает как $N_0 \propto \sqrt{\beta}$, и все слагаемые в $Z_a(\beta = 0)$, как поперечные, так и продольные, оказываются одного порядка. Таким образом, продольные флуктуации спина, не учитываемые при спин-волновом описании, в окрестности фазового перехода оказываются соизмеримыми с поперечными.

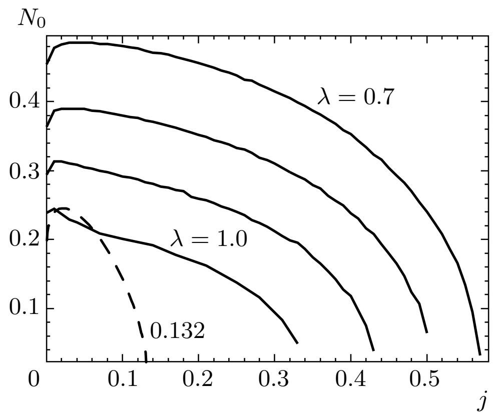

Рис. 3. Спонтанная намагниченность с учетом флуктуаций. Сплошные кривые получены с использованием первого итерационного приближения для β, штриховая кривая — примерное поведение, соответствующее таблице равновесных $\beta(j)$ при $\lambda = 1.0$

Может показаться, что полученная таблица равновесных значений $\beta(j)$ позволяет определить точное поведение намагниченности. Однако это заблуждение, поскольку подстановка найденных с учетом флуктуаций значений $\beta(j)$ в интегральные функции $Z_a(\beta)$ и $Z_b(\beta)$, содержащие в себе спектр и рассчитанные лишь в квадратичном приближении по операторам вторичного квантования без учета квантовых поправок, является превышением точности. В квадратичном приближении спектр определен в диапазоне $j \in (0,1)$, точка фазового перехода $j = 1$, равновесное значение $\beta = (1/2)(1-j)$. Подстановка уточненных значений $\beta(j) < (1/2)(1-j)$, определенных в интервале $j \in (0, 0.132)$, делает спектры упорядоченной фазы частично мнимыми (например, поперечный спектр положительно определен на всей зоне Бриллюэна, только если $\beta \in ((1/2)(1-j), 1))$. Таким образом, для определения более точного поведения намагниченности и других величин необходимо либо находить спектр возбуждений и равновесное β в одном и том же согласованном приближении, что зачастую связано с исключением нефизичных состояний в высоких порядках разложения по операторам, либо проводить вычисления методом Монте-Карло. Мы, однако, ограничились примерным определением поведения, основанным на знании точки фазового перехода и представлениях о характерном виде функции. На рис. 3 штриховой линией показано примерное поведение намагниченности. Согласно рисунку, ее обращение в нуль происходит одновременно с $\beta(j)$ при $j = J_2/3J_1 = 0.132$.

Сделанные расчеты позволяют оценить среднее значение спина на узле: оно составляет от приблизительно 1/4 до 0. Таким образом, квантовое сокращение спина в 120-градусной фазе лежит в интервале 50–100 % в зависимости от j.

10. НАЧАЛЬНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

Мы вычислили начальную восприимчивость в поле $H = H_x$, перпендикулярном плоскостям. Вместо a- и b-бозонов в поле H_x удобны операторы s и p:

$$s = \frac{a+b}{\sqrt{2}}, \quad p = \frac{a-b}{\sqrt{2}},$$

для которых

$$a^+a + b^+b = s^+s + p^+p$$

и векторы ферро- и антиферромагнетизма равны

$$\begin{gathered} M^x = c^+p + p^+c, \quad M^y = i(c^+s - s^+c), \\ M^z = s^+p + p^+s, \quad L^x = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}(s^+u + us), \\ L^y = -\frac{i}{\sqrt{\lambda}}(p^+u - up), \quad L^z = -\frac{1}{\sqrt{\lambda}}(c^+u + uc). \end{gathered} \tag{30}$$

Удобство новых операторов обусловлено тем, что поле, приложенное вдоль x, вносит конденсацию только p-поля, причем на волновом векторе $\mathbf{k} = \mathbf{q}$. Действительно, ожидаемое значение индуцированной намагниченности,

$$\langle S_x(i)\rangle = M_\perp(i) = \langle c_i^+ p_i\rangle = \mathrm{const}(i),$$

не должно зависеть от узла, а это накладывает ограничение на допустимый вид операторов p. В общем случае

$$c_i^+ = \langle c_i^+\rangle + \varepsilon_i^+, \quad p_i = \langle p_i\rangle + \chi_i,$$

поэтому

$$\begin{gathered} M_\perp = \langle S_x\rangle = \langle c_i^+ p_i\rangle = \langle c_i^+\rangle\langle p_i\rangle + \langle \varepsilon_i^+ \chi_i\rangle \equiv \\ \equiv M_\perp^0(i) + \triangle M_\perp(i) = \mathrm{const}(i), \\ M_\perp^0(i) = \langle c_i^+\rangle\langle p_i\rangle = \alpha \exp(-iqR_i)\langle p_i\rangle = \\ = \mathrm{const}(i) \Rightarrow \langle p_i\rangle = \widetilde{\alpha}\exp(iqR_i), \\ p_k = \sqrt{N}\widetilde{\alpha}\delta_{kq} + \chi_k, \\ M_\perp^0 = \alpha\widetilde{\alpha} = \frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\lambda}, \quad \gamma \equiv \lambda\widetilde{\alpha}^2, \end{gathered} \tag{31}$$

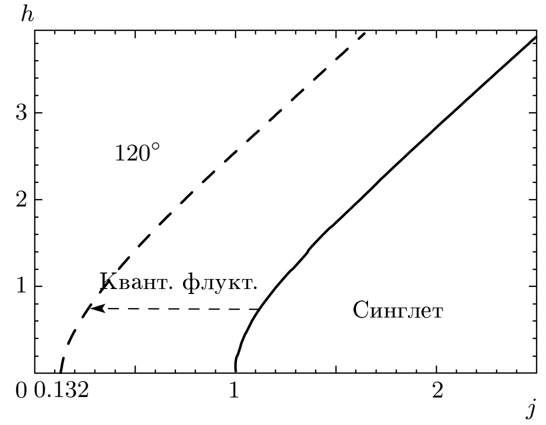

Рис. 4. $j-h$-фазовая диаграмма при малых h. Сплошная кривая показывает положение фазовой границы в среднеполевом приближении, штриховая кривая — с учетом флуктуаций. При увеличении поля h основным состоянием в области малых j становятся другие семь фаз вместо 120-градусной структуры [41]

т. е. бозоны c и p конденсируются на волновом векторе $\mathbf{k} = \mathbf{q}$. Индуцированная намагниченность и восприимчивость имеют вид

$$\begin{gathered} M_\perp = \frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\lambda} + \frac{1}{N}\sum_k \langle \varepsilon_k^+ \chi_k\rangle \equiv M_\perp^0 + \Delta M_\perp, \\ \chi_\perp = \left.\frac{\partial M_\perp}{\partial H_x}\right|_{H_x=0} \equiv \chi_\perp^0 + \Delta\chi_\perp. \end{gathered} \tag{32}$$

Из минимума энергии основного состояния $\widetilde{e_0}$ в магнитном поле можно определить параметры β и γ. В среднеполевом приближении ($h \equiv H_x/3J_1^*$) имеем

$$\begin{gathered} \widetilde{e_0} \equiv \frac{\lambda E_0}{N} = -\frac{3}{2}J_2\lambda + 2J_2(\beta+\gamma) - \\ - 2H_x\sqrt{\beta\gamma} + 18J_1^*\beta\gamma - 6J_1^*\beta(1-\beta), \end{gathered} \tag{33}$$

$$\begin{gathered} \gamma_0 = \beta_0\left[\frac{h}{2(j+3\beta_0)}\right]^2, \\ j = 1 - 2\beta_0 + j\left[\frac{h}{2(j+3\beta_0)}\right]^2. \end{gathered} \tag{34}$$

На кривой

$$j_k = \frac{1}{2}\left[1 + \sqrt{1+h^2}\right]$$

величины β_0 и γ_0 одновременно обращаются в нуль при $h \neq 0$. Эта функция является кривой фазовых переходов в среднеполевом приближении, так как при этом исчезает 120-градусное упорядочение.

На рис. 4 приведена соответствующая $j-h$-фазовая диаграмма модели. Там же штриховой линией показано, как изменится фазовая диаграмма при учете влияния квантовых флуктуаций. Магнитное поле, как и должно быть, сдвигает точку фазового перехода в неупорядоченное состояние в область бо́льших j. Однако такое поведение кривой равновесия характерно лишь для малых h; при повышении магнитного поля 120-градусная структура уже не является основным состоянием, а фазовая $j-h$-плоскость обнаруживает в области малых j и h сложную структуру, определяя области существования семи фаз с различными типами спинового упорядочения [20, 41, 42]. Заметим, что тепловые флуктуации в чисто двумерных системах приводят к полному разрушению упорядочения при $h=0$ из-за исчезновения эффективной спиновой длины (теорема Мермина – Вагнера). Температурное поведение квазидвумерных треугольных антиферромагнетиков на примере $RuFe(MnO_4)_2$ исследовалось недавно в работе [43].

Используя полученные значения β_0 и γ_0, находим среднеполевое приближение индуцированной намагниченности и начальной восприимчивости:

$$\begin{aligned} M_\perp^0(h\to 0) &= \left.\frac{\sqrt{\beta_0\gamma_0}}{\lambda}\right|_{h\to 0} = \frac{1}{2\lambda}\frac{(1-j)}{(3-j)}h, \\ \chi_\perp^0 &= \frac{\partial M_\perp^0(h\to 0)}{\partial H_x} = \frac{1}{6J_1}\frac{(1-j)}{(3-j)}. \end{aligned} \tag{35}$$

В предельном случае $j=0$ имеем $\chi_\perp^0 = 1/18J_1$, что совпадает с результатами для однослойных треугольных решеток.

Для вычисления флуктуационной поправки к намагниченности

$$\Delta M_\perp = \frac{1}{N}\sum_k \langle \varepsilon_k^+\chi_k\rangle$$

необходимо найти собственные функции гамильтониана в магнитном поле, который в квадратичном приближении можно привести к виду

$$H_h = E_0 + H_s + H_{cp},$$

где H_s, H_{cp} — квадратичные формы по s- и $\varepsilon\chi$-операторам, соответственно. Имеем

$$\begin{aligned} H_s &= \sum_k 2A_k^s s_k^+ s_k + B_k^s(s_k^+ s_{-k}^+ + s_k s_{-k}), \\ \frac{A_k^s}{3J_1^*} &\equiv a_s = j+\beta+\nu_k\left(1-\frac{3}{2}\beta-\frac{3}{2}\gamma\right), \\ \frac{B_k^s}{3J_1^*} &\equiv b_s = \nu_k\left(1-\frac{\beta}{2}-\frac{3}{2}\gamma\right). \end{aligned} \tag{36}$$

Спектр s-возбуждений щелевой:

$$E_k^s = 3J_1^*(j+\beta)\times \\ \times\sqrt{\left(1-\frac{\beta}{j+\beta}\nu_k\right)\left(1+\frac{1-\beta-\frac{3}{2}\gamma}{j+\beta}2\nu_k\right)}, \tag{37}$$

$$\Delta_s = E_k^s(\mathbf{k}=\mathbf{q})|_{h\to 0} \to 3J_1^*\frac{2-\beta_0}{4(1+\beta_0)}h. \tag{38}$$

Щель, в отличие от квадратных решеток, зависит от j. Она закрывается в нулевом поле. При этом спектр s-возбуждений в нулевом поле переходит в спектр поперечных колебаний упорядоченной фазы. Имеем

$$\begin{aligned} H_{cp} = &-J_q^*\frac{\beta(\beta+\gamma)}{2(1-\beta-\gamma)}N + \\ &+\sum_k\Big\{2A_k^\varepsilon\varepsilon_k^+\varepsilon_k + B_k^\varepsilon(\varepsilon_k^+\varepsilon_{-k}^+ + \varepsilon_k\varepsilon_{-k}) + \\ &2A_k^\chi\chi_k^+\chi_k + B_k^\chi(\chi_k^+\chi_{-k}^+ + \chi_k\chi_{-k}) + \\ &+C_k(\varepsilon_k^+\chi_k + \chi_k^+\varepsilon_k) + D_k(\varepsilon_k^+\chi_{-k}^+ + \varepsilon_k\chi_{-k})\Big\}, \end{aligned} \tag{39}$$

$$\frac{A_k^\varepsilon}{3J_1^*} \equiv a_\varepsilon = \\ = j+2\beta+\frac{\beta^2}{2(1-\beta-\gamma)}(1+2\nu_k)+\nu_k\left(1-3\beta-\frac{3}{2}\gamma\right),$$

$$\frac{B_k^\varepsilon}{3J_1^*} \equiv b_\varepsilon = \\ = \beta+\frac{\beta^2}{2(1-\beta-\gamma)}(1+2\nu_k)+\nu_k\left(1-3\beta-\frac{3}{2}\gamma\right),$$

$$\frac{A_k^\chi}{3J_1^*} \equiv a_\chi = \\ = j+\beta+\frac{\beta\gamma}{2(1-\beta-\gamma)}(1+2\nu_k)+\nu_k\left(1-\gamma-\frac{3}{2}\beta\right),$$

$$\frac{B_k^\chi}{3J_1^*} \equiv b_\chi = \frac{\beta\gamma}{2(1-\beta-\gamma)}(1+2\nu_k)+\nu_k\left(-1+\gamma+\frac{\beta}{2}\right),$$

$$\frac{C_k}{3J_1^*} \equiv c = -h+\sqrt{\beta\gamma}\left[5+\frac{\beta}{1-\beta-\gamma}(1+2\nu_k)-3\nu_k\right],$$

$$\frac{D_k}{3J_1^*} \equiv d = \sqrt{\beta\gamma}\left[1+\frac{\beta}{1-\beta-\gamma}(1+2\nu_k)-3\nu_k\right].$$

Аналитическое выражение для спектра cp-возбуждений в магнитном поле имеет вид

$$\begin{aligned} &E_k^{cp} = 3J_1^*\sqrt{m \pm \sqrt{m^2-\widetilde{c}}},\\ &m = \frac{1}{2}\left[a_\varepsilon^2 - b_\varepsilon^2 + a_\chi^2 - b_\chi^2 + \frac{1}{2}(c^2-d^2)\right],\\ &\widetilde{c} = c_1 c_2, \\ &c_1 = \frac{(c-d)^2}{4} - (a_\varepsilon - b_\varepsilon)(a_\chi - b_\chi),\\ &c_2 = \frac{(c+d)^2}{4} - (a_\varepsilon + b_\varepsilon)(a_\chi + b_\chi). \end{aligned} \tag{40}$$

К сожалению, его невозможно записать в виде компактной функции переменных (j,h) или (β,γ) или других. Спектр cp-возбуждений содержит две ветви. При этом, во-первых, нижняя ветвь спектра содержит голдстоуновский бозон при $\mathbf{k}=\mathbf{q}$, а при $h=0$ переходит в спектр поперечных (ab) мод упорядоченной фазы; во-вторых, верхняя ветвь щелевая, а при $h=0$ переходит в спектр продольных (c) колебаний, причем величина щели (в среднеполевом приближении) равна

$$\Delta_{cp} = E_{k(2)}^{cp}(\mathbf{k}=\mathbf{q}) = 6J_1^*\sqrt{(j+\beta_0)(j-1+3\beta_0)}. \tag{41}$$

В результате диагонализации H_s имеем:

$$H_s = \sum_k (E_k^s - A_k^s) + \sum_k 2E_k^s \gamma_k^+ \gamma_k.$$

Диагонализация H_{cp} приводит при $h\to 0$ (ε_c и ε_p — спектры при $h\to 0$) к выражению

$$\begin{aligned} &H_{cp} = E_{cp}^0 + \sum_k\left[(\varepsilon_c - A_k^\varepsilon) + (\varepsilon_p - A_k^\chi) - O(h^2)\right] + \\ &\quad + 2\sum_k(\varepsilon_p a_k^+ a_k + \varepsilon_c b_k^+ b_k),\\ &E_{cp}^0 = 3J_1^*\frac{\beta(\beta+\gamma)}{2(1-\beta-\gamma)}N, \quad \varepsilon_c = \sqrt{A_k^{\varepsilon\,2} - B_k^{\varepsilon\,2}},\\ &\varepsilon_p = \sqrt{A_k^{\chi\,2} - B_k^{\chi\,2}}. \end{aligned} \tag{42}$$

Энергия основного состояния в магнитном поле $h\to 0$

$$E_h = E_0 + E_{cp}^0 + \sum_k (E_k^s - A_k^s) + \sum_k\left[(\varepsilon_c - A_k^\varepsilon) + (\varepsilon_p - A_k^\chi) - O(h^2)\right] \tag{43}$$

позволяет определить равновесные значения β и γ (положив $\partial E_h/\partial\beta = 0$, $\partial E_h/\partial\gamma = 0$). Достаточно уточнить один параметр (γ), другой взять в среднеполевом приближении, так как β и γ входят в

$$M_\perp = \frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\lambda} + \Delta M_\perp$$

в виде произведения. В итоге получим

$$\gamma = \beta\left[\frac{h}{2(j+3\beta)+\lambda\varphi}\right]^2,$$

где $\varphi = \varphi(\beta,\gamma,j,h)$ — интеграл, содержащий коэффициенты гамильтонианов H_s, H_{cp}.

Таким образом, с учетом перенормированного значения γ и диагонализующих преобразований мы получили выражение для индуцированной намагниченности

$$M_\perp = \frac{\sqrt{\beta_0\gamma}}{\lambda} + \Delta M_\perp$$

и начальной восприимчивости

$$\chi_\perp = \chi_\perp^0 + \Delta\chi_\perp,$$

где средние и флуктуационные компоненты имеют вид (здесь $h\to 0$, $\beta=\beta_0$, $j\approx 1-2\beta_0$)

$$\begin{aligned} &M_\perp^0 \approx \frac{\sqrt{\beta_0\gamma}}{\lambda} \approx \\ &\approx h\frac{\beta_0}{\lambda\left[2(1+\beta_0)+\lambda\varphi(h=0)\right]},\\ &\chi_\perp^0 = \frac{1}{3J_1^*}\,\frac{\beta_0}{\lambda\left[2(1+\beta_0)+\lambda\varphi(h=0)\right]},\\ &\Delta M_\perp = -h\frac{1}{4(1+\beta_0)}\frac{1}{N}\sum_k u_c^2 u_p^2 (x_c+x_p)\times\\ &\times\frac{\left[-2(1-\beta_0)+\beta_0 d'\right](x_c+x_p)+\beta_0 d'(1+x_c x_p)}{e_c+e_p},\\ &\Delta\chi_\perp = -\frac{1}{3J_1^*}\,\frac{1}{4(1+\beta_0)}\,\frac{1}{N}\times\\ &\times\sum_k\frac{u_\parallel^2 u_\perp^2(x_\parallel + x_\perp)}{e_\parallel + e_\perp}\times\\ &\times\Big\{\left[-2(1-\beta_0)+\beta_0 d'\right](x_\parallel + x_\perp) + \\ &+\beta_0 d'(1+x_\parallel x_\perp)\Big\}. \end{aligned} \tag{44}$$

$$u_i = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{a_i}{e_i}+1\right)}, \quad x_i = -\frac{b_i}{a_i+e_i},$$

$$e_i = \sqrt{a_i^2 - b_i^2} = \frac{\varepsilon_i}{3J_1^*}, \quad i = c(\varepsilon),\ p(\chi),$$

$$\alpha_{c(\varepsilon)}(h=0) = \alpha_k^\parallel, \quad \alpha_{p(\chi)}(h=0) = \alpha_k^\perp,$$

$$\alpha = a,e,u,x, \quad b_\varepsilon(h=0) = b_k^\parallel,$$

$$b_\chi(h=0) = -b_k^\perp, \quad d' \equiv 1 + \frac{\beta_0}{1-\beta_0}(1+2\nu_k) - 3\nu_k.$$

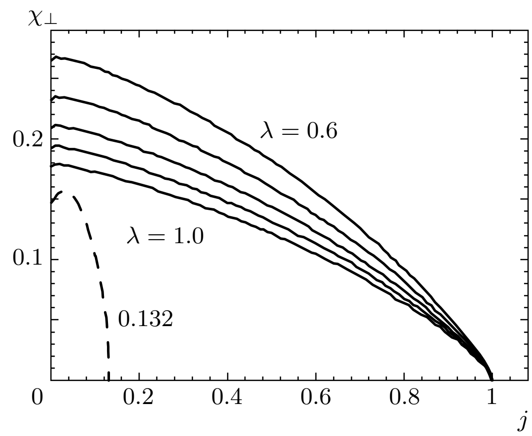

Рис. 5. Начальная восприимчивость. Сплошные кривые получены с использованием среднеполевого приближения для β, штриховая кривая — примерное поведение, соответствующее $\beta(j)$ с учетом флуктуаций: $\chi_\perp \sim \sqrt{\beta}$, поэтому β и $\chi_\perp$ обращаются в нуль одновременно при $j = 0.132$

Вид функции $\chi_\perp$ приведен на рис. 5. Зависимость немонотонная с небольшим максимумом в окрестности малых j. Штриховой линией показано поведение, соответствующее таблице равновесных значений $\beta(j)$.

В работе не рассматривалась возможность образования синглетных пар в слое. Учет этой возможности, по мнению авторов, должен привести к исчезновению спина на узле и $\chi_\perp$ при $j \approx 0$, так что интервал 120-градусной фазы будет еще сужен.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика».

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
2. Jun Zang, A. R. Bishop, and D. Schmeltzer, Phys. Rev. B **52**, 6723 (1995).
3. A. V. Chubukov, Phys. Rev. B **43**, 3337 (1991).
4. А. В. Чубуков, Письма в ЖЭТФ **49**, 108 (1989).
5. A. V. Chubukov and T. Jolicoeur, Phys. Rev. B **44**, 12050 (1991).
6. J. Darriet and J. P. Regnault, Sol. St. Comm. **86**, 409 (1993).
7. M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994).
8. S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui et al., J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 2758 (1995).
9. H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 3168 (1999).
10. B. S. Shastry and B. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981).
11. H. Kageyama, H. Suzuki, M. Nohara et al., Physica B **281**, 667 (2000).
12. H. Kageyama, M. Nishi, N. Aso et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 5876 (2000).
13. R. W. Smith and D. A. Keszler, J. Sol. St. Chem. **93**, 430 (1991).
14. H. Nojiri, H. Kageyama, K. Onizuka et al., J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 2906 (1999).
15. P. Lemmens, M. Grove, M. Fischer et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 2605 (2000).
16. S. Miyahara and K. Yeda, Phys. Rev. Lett. **82**, 3701 (1999).
17. Y. Sasago, M. Hase, K. Uchinokura et al., Phys. Rev. B **52**, 3533 (1995).
18. A. V. Syromyatnikov and S. V. Maleyev, Phys. Rev. B **66**, 132408 (2002).
19. Х. Кагеяма, А. Н. Васильев, Природа № 2 (2002).
20. H. Shiba and T. Nikuni, in *Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds*, ed. by A. Kotani and N. Suzuki, World Scientific. (1993), p. 372.
21. Р. С. Гехт, УФН **159**, 261 (1989).
22. А. С. Боровик-Романов, Б. С. Думеш, А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ **66**, 724 (1997).
23. А. С. Боровик-Романов, Б. С. Думеш, С. В. Петров и др., ЖЭТФ **113**, 352 (1998).
24. Б. С. Думеш, С. В. Петров, А. М. Тихонов, Письма в ЖЭТФ **67**, 988 (1998).
25. Б. С. Думеш, М. И. Куркин, С. В. Петров и др., ЖЭТФ **115**, 2228 (1999).
26. Б. С. Думеш, УФН **170**, 403 (2000).
27. M. F. Collins and O. A. Petrenko, Can. J. Phys. **75**, 605 (1997).
28. T. Siegrist et al., Phys. Rev. B **35**, 7137 (1989).

29. J. M. Tranquada, G. Shirane, B. Keimer et al., Phys. Rev. B **40**, 4503 (1989).

30. H. Godfrin, R. R. Ruel, and D. D. Osheroff, Phys. Rev. Lett. **60**, 305 (1988).

31. B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre, Phys. Rev. Lett. **69**, 2590 (1992).

32. P. Asaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **70**, 2483 (1993).

33. A. V. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil, J. Phys.: Cond. Mat. **6**, 8891 (1994).

34. R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **39**, 9764 (1989).

35. S. Sachdev and R. N. Bhatt, Phys. Rev. B **41**, 9323 (1990).

36. A. V. Chubukov, E. Gagliano, and C. Balseiro, Phys. Rev. B **45**, 7889 (1992).

37. R. Chitva, S. Rao, D. Sen et al., Phys. Rev. B **52**, 1061 (1995).

38. A. V. Chubukov and D. K. Morr, Phys. Rev. B **52**, 3521 (1995).

39. Guo-Zhu Wei and An Du, J. Phys.: Cond. Mat. **7**, 8813 (1995).

40. И. Н. Бондаренко. Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, КГПУ, ИФ СО РАН, Красноярск (2003).

41. Р. С. Гехт, И. Н. Бондаренко, ЖЭТФ **111**, 627 (1997).

42. E. Rastelli and A. Tassi, J. Phys.: Cond. Mat. **8**, 1811 (1996).

43. L. E. Svistov, A. I. Smirnov, L. A. Prozorova et al., Phys. Rev. B **67**, 094434 (2003).