

МАГНИТОУПРУГИЙ МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ СИНГЛЕТНОЙ ФАЗЫ КВАНТОВОГО ДВУМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

В. В. Вальков^{*a,b,c}, *В. А. Мицкан*^{a,b}, *Г. А. Петраковский*^{a,b}

^a *Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Красноярский государственный технический университет
660074, Красноярск, Россия*

^c *Красноярский государственный университет
660075, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 30 мая 2005 г.

Предложена модель, описывающая фазовый переход второго рода по параметру магнитоупругой связи в двумерном квантовом магнетике на квадратной решетке из антиферромагнитного состояния в синглетное состояние. На основе атомного представления вычислен спектр элементарных возбуждений в синглетной и антиферромагнитной фазах и изучена эволюция поперечных и продольных ветвей спектра при подходе к точке перехода. В частности, установлено, что переход из антиферромагнитной фазы в синглетную связан со смягчением продольной ветви колебаний. Величина щели в синглетной фазе играет роль параметра, характеризующего степень удаленности от точки перехода. Показано, что в антиферромагнитной фазе спектр поперечных колебаний соответствует голдстоуновскому бозону. На основе анализа устойчивости спектра элементарных возбуждений построена фазовая диаграмма, определяющая области реализации этих фаз с плакетной деформацией решетки.

PACS: 71.27.+a, 74.90.+n, 75.10.Lp

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время значительное внимание уделяется исследованию квантовых магнетиков, в которых по определенным причинам в спектре элементарных возбуждений возникает энергетическая щель (так называемые spin-gap systems). В качестве примеров подобных систем можно привести спин-пайерловский магнетик CuGeO_3 [1, 2], двумерный гейзенберговский магнетик CaV_4O_9 [3], а также двумерные спиновые системы $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [4], $(\text{C}_4\text{H}_{12}\text{N}_2)\text{Cu}_2\text{Cl}_6$ [5].

Хорошо известно, что обменно-связанные спиновые пары (димеры) для случая $S = 1/2$ имеют энергетический спектр, состоящий из синглета и триплета, разделенных энергетическим зазором, определяемым величиной обменного параметра. В слу-

чае антиферромагнитной связи спиновых моментов нижним уровнем является синглет. С другой стороны, для однородной антиферромагнитной цепочки спектр магнитных возбуждений является бесщелевым. Как следствие этого, магнитная восприимчивость этих систем характеризуется различной зависимостью от температуры. Именно, восприимчивость димерного магнетика стремится к нулю при $T \rightarrow 0$, в то время как для однородной антиферромагнитной цепочки восприимчивость при $T = 0$ отлична от нуля. В случае димеризованной цепочки с обменными параметрами J и J^* спектр магнитных возбуждений имеет энергетический зазор $\Delta \propto |J - J^*|$ и магнитная восприимчивость при $T \rightarrow 0$ стремится к нулю по экспоненциальному закону [6]. При этом магнитоупругая связь играет ключевую роль в формировании синглетного (СГ) состояния.

Очевидно, что подобную ситуацию следует ожи-

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

дать и в двумерной спиновой системе с антиферромагнитным обменным взаимодействием. Действительно, резкое уменьшение восприимчивости при понижении температуры обнаружено во многих квазидвумерных квантовых магнетиках (см., например, [4, 5, 7, 8]). В качестве одной из очевидных причин подобного поведения магнитной восприимчивости может выступать своеобразная энергетическая структура спиновых кластеров. В частности, для квадратной решетки важную роль играет характер энергетического спектра четырехспинового квадратного плакета. При антиферромагнитной связи собственные энергетические уровни таковы, что нижнему состоянию соответствует спиновый синглет [9], тогда как остальные уровни отделены энергетическим зазором, определяемым величиной обменного взаимодействия. Поэтому магнитная восприимчивость отдельного плакета будет стремиться к нулю при $T \rightarrow 0$. С другой стороны, однородная двумерная спиновая квадратная решетка имеет спектр спин-волновых возбуждений без энергетического зазора, и магнитная восприимчивость отлична от нуля при $T = 0$.

В этой связи представляется актуальным изучение условий формирования в двумерных квантовых системах основного СГ-состояния, обладающего энергетической щелью в спектре элементарных возбуждений. При этом механизм образования синглетной фазы связывается не с топологией обменных связей, как это имеет место, например, в соединении $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [4], а с возможностью выделения группы спинов в кластеры, как это, по-видимому, реализуется в $(\text{C}_4\text{H}_{12}\text{N}_2)\text{Cu}_2\text{Cl}_6$ [5] (под кластером понимается совокупность спинов, взаимодействия между которыми существенно отличаются от взаимодействий спинов из различных совокупностей). Изучению этого вопроса в упрощенном варианте, когда в качестве спинового кластера будет выступать спиновый плакет на квадратной решетке, и посвящена данная работа.

Изложение статьи организовано следующим образом. В разд. 2 на качественном уровне рассмотрено влияние плакетной деформации квадратной решетки на основное состояние двумерного квантового магнетика. В разд. 3 на основе техники операторов Хаббарда строится плакетное представление, позволяющее точно учесть все внутриплакетные квантовые флуктуации. Вывод дисперсионного уравнения для спектра элементарных возбуждений в синглетной плакетно-деформированной фазе приведен в разд. 4. В разд. 5 приводится решение дисперсионного уравнения в низкотемпературной фа-

зе и анализируется модификация щелевого спектра при приближении к точке перехода в магнитную фазу. В разд. 6 проведен учет эффектов самосогласованного поля при построении плакетного представления. В разд. 7 вычислен спектр коллективных возбуждений в антиферромагнитной фазе и рассмотрена его эволюция в окрестности перехода в СГ-фазу. Обсуждение результатов проведено в заключительном разделе.

2. ПЛАКЕТНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ДВУМЕРНОГО КВАНТОВОГО МАГНЕТИКА

Прежде всего остановимся на качественном анализе влияния магнитоупругой связи (МС) на основное состояние двумерного квантового магнетика при наличии плакетной деформации и введем модельные представления.

Будем считать, что до включения МС спиновые моменты с $S = 1/2$ находились в узлах идеальной квадратной решетки с параметром a_0 . Взаимодействие между спинами описывалось посредством гейзенберговского гамильтониана с двумя обменными параметрами $I > 0$ и $J > 0$:

$$H = \frac{1}{2} \sum_f \sum_{\delta_1} I (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+\delta_1}) + \frac{1}{2} \sum_f \sum_{\delta_2} J (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+\delta_2}), \quad (1)$$

где векторный оператор \mathbf{S}_f соответствует спиновому моменту, находящемуся в узле f . Первое и второе слагаемые в формуле (1) учитывают обменные взаимодействия между спинами, являющимися по отношению друг к другу соответственно ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Выбранные для I и J знаки устанавливают антиферромагнитный тип связи спинов, участвующих во взаимодействии.

При учете МС минимальное значение свободной энергии достигается при деформированном состоянии решетки. Такая ситуация возникает, например, когда имеет место линейная зависимость обменных интегралов от относительных смещений спинов. Тогда квадратичный по смещениям проигрыш в упругой энергии системы будет меньше, чем выигрыш в обменной энергии, линейно зависящий от относительного смещения. Такой механизм магнитоупругости хорошо известен и реализуется во многих магнитоупорядоченных веществах [10].

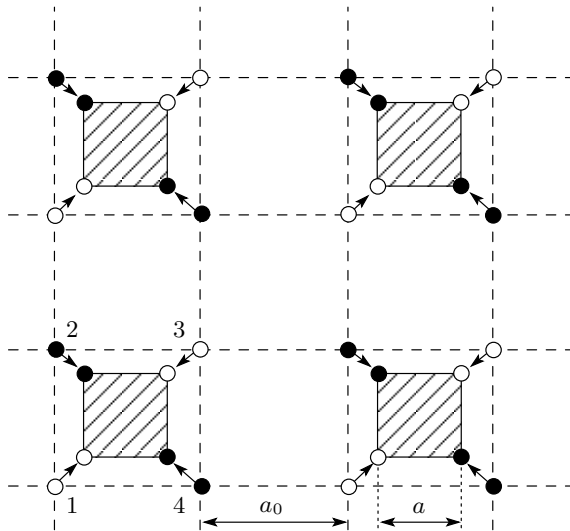


Рис. 1. Схема плакетной деформации квадратной решетки

В системах с развитыми квантовыми флуктуациями (КФ), например в квазидвумерных фрустрированных антиферромагнетиках, учет МС может приводить к более радикальным следствиям. Это связано, прежде всего, с возможностью изменения структуры основного состояния в спиновой подсистеме. Механизм такой модификации определяется конкуренцией между стремлением к синглетизации за счет КФ во фрустрированных низкоразмерных антиферромагнетиках и противоположной тенденцией к сохранению спонтанно нарушенной симметрии при наличии дальнего магнитного порядка.

Проявление отмеченной конкуренции можно продемонстрировать на примере изменения обменной энергии при неоднородной деформации, показанной на рис. 1. В исходном состоянии спиновые моменты находятся в местах пересечения штриховых линий и формируют дальний АФМ-порядок. В каждом узле со светлым кружком среднее значение проекции спинового момента на ось квантования больше нуля, а в узле с темным кружком — меньше. В деформированном состоянии (траектории смещений спиновых моментов показаны на рисунке тонкими линиями со стрелками) спины сгруппированы в 4-спиновые кластеры (плакеты), изображенные посредством заштрихованных квадратов со стороной $a < a_0$. Такое искажение решетки будем называть плакетной деформацией (ПД).

Для неелевской фазы без искажения решетки обменная энергия в расчете на один плакет равна $-2I$ (здесь, ради простоты, ограничиваемся рассмотре-

нием взаимодействий только между ближайшими соседями). Взяв состояние, в котором спиновые моменты каждого плакета формируют спиновый синглет, получим то же самое значение энергии $-2I$. Из этих простых оценок следует, что при неизменном параметре I синглетная фаза не является предпочтительной по сравнению с неелевским состоянием. Как будет показано ниже, более строгие расчеты подтверждают этот вывод.

Иная ситуация имеет место, если при плакетной деформации учитывается увеличение внутриплакетных ($I \rightarrow I^{in} > I$) и уменьшение межплакетных ($I \rightarrow I^{ex} < I$) обменных интегралов. В этом случае для фазы Нееля $E_N = -I^{in} - I^{ex}$, тогда как в синглетно-плакетном состоянии $E_S = -2I^{in}$. Видно, что выигрыш в магнитной энергии при разрушении неелевского состояния $\Delta E = E_N - E_S = I^{in} - I^{ex}$ положителен и синглетная фаза с плакетной деформацией предпочтительнее. Рассмотренный сценарий формирования синглетно-плакетной фазы является очевидным обобщением на двумерный случай схемы димеризации в линейной цепочке при спин-пайерловском переходе.

Проведенные рассуждения носят качественный характер и не определяют условий перехода в синглетную фазу. С целью более полного исследования такой задачи необходимо найти спектр элементарных возбуждений в плакетно-деформированном состоянии фрустрированного двумерного квантового магнетика. Тогда об устойчивости фазы можно судить на основе критерия о положительной определенности энергетического спектра. Кроме того, знание энергий элементарных возбуждений позволит вычислить вклады от КФ в наблюдаемые характеристики системы.

3. ПЛАКЕТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

При нахождении спектра элементарных возбуждений в состоянии с ПД необходимо учесть различие между обменными интегралами для одноплакетных и разноплакетных спинов. В точке разрушения спинового упорядочения это различие может оказаться настолько существенным, что внутриплакетные взаимодействия приобретают роль главных слагаемых гамильтониана. Экстраполируя эту ситуацию на предельный случай, приходим к «плакетной» форме теории возмущений: в качестве нулевого гамильтониана выступает оператор, описывающий ансамбль плакетов с точным учетом всех одно-

плакетных взаимодействий, а межплакетные взаимодействия играют роль возмущения.

Для получения вида гамильтониана в представлении, соответствующем плакетной форме теории возмущений, всю совокупность спиновых моментов распределим по плакетам, как показано на рис. 1. Каждый плакет характеризуется двумерным вектором $l = (nb, mb)$, n и m — положительные и отрицательные целые числа, а $b = 2a_0$ является параметром новой квадратной решетки с базисом, состоящим из четырех спинов. При таком способе описания спиновые моменты приобретают двойную нумерацию: индекс « l » указывает на плакет, в котором находится спиновый момент, а другой обозначает позицию узла в плакете. Соответственно этому векторные операторы четырех спиновых моментов из l -го плакета записываются в виде $\mathbf{S}_1(l)$, $\mathbf{S}_2(l)$, $\mathbf{S}_3(l)$, $\mathbf{S}_4(l)$. Последовательность нумераций показана на левом нижнем плакете рис. 1.

В рамках принятого распределения спинов по плакетам гамильтониан (1) может быть представлен в виде

$$H = H_0 + H_{int}, \quad H_0 = \sum_l h_0(l), \quad (2)$$

где H_0 описывает невзаимодействующие плакеты, или взаимодействующие лишь посредством самосогласованного поля (см. ниже); H_{int} учитывает межплакетные взаимодействия. Оператор $h_0(l)$ является одноплакетным гамильтонианом, описывающим все обменные взаимодействия, относящиеся к плакету с номером l ,

$$h_0(l) = I^{in} [\mathbf{S}_1(l)\mathbf{S}_2(l) + \mathbf{S}_2(l)\mathbf{S}_3(l) + \mathbf{S}_3(l)\mathbf{S}_4(l) + \mathbf{S}_4(l)\mathbf{S}_1(l)] + J^{in} [\mathbf{S}_1(l)\mathbf{S}_3(l) + \mathbf{S}_2(l)\mathbf{S}_4(l)], \quad (3)$$

где посредством I^{in} и J^{in} обозначены обменные интегралы для внутриплакетных взаимодействий (см. рис. 2). В линейном по смещению приближении значения этих интегралов определяются выражениями

$$I^{in} = (1 + k_1\delta)I, \quad J^{in} = (1 + k_2\delta)J, \quad (4)$$

$$I = I(r)|_{r=a_0}, \quad J = J(r)|_{r=\sqrt{2}a_0},$$

где параметры k_1 и k_2 соответствуют относительным скоростям изменения обменных параметров при изменении расстояния для первой и второй координатных сфер,

$$k_1 = -\frac{a_0}{I} \left(\frac{\partial I(r)}{\partial r} \right)_{r=a_0}, \quad (5)$$

$$k_2 = -\frac{\sqrt{2}a_0}{J} \left(\frac{\partial J(r)}{\partial r} \right)_{r=\sqrt{2}a_0}.$$

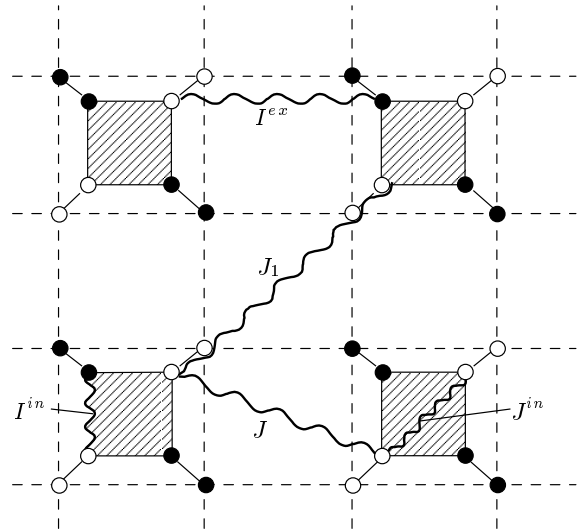


Рис. 2. Идентификация обменных констант в плакетно-деформированном состоянии

Принято, что при плакетной деформации решетки линейный размер уменьшенного плакета a связан с размером a_0 через относительную линейную деформацию δ посредством соотношения $a = (1 - \delta)a_0$.

Для построения плакетного представления введем базис из собственных состояний одноплакетного гамильтониана (3). Решения уравнения Шредингера (индекс плакета временно не указывается)

$$h_0|\Psi_{SM}\rangle = E|\Psi_{SM}\rangle \quad (6)$$

определяют 16 собственных состояний [9]. Функции $|\Psi_{SM}\rangle$ классифицируются по полному спиновому моменту S и по его проекции M на ось квантования z . Ниже для краткости приведены только те $|\Psi_{SM}\rangle$, которые относятся к разным мультиплетам спинового плакета и которые при данном S имеют максимальное значение $M = S$, т. е. функции $|\Psi_{SS}\rangle$. Одноплакетные волновые функции с меньшим M получаются из $|\Psi_{SS}\rangle$ посредством действия на $|\Psi_{SS}\rangle$ оператором понижения проекции суммарного момента $S^- = s_1^- + s_2^- + s_3^- + s_4^-$ соответствующее число раз и умножением на нормировочный коэффициент.

Нижнему по энергии одноплакетному состоянию соответствует первый синглет A_1

$$|\Psi_{00}^{(1)}\rangle \equiv |\Phi_1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3}} \{ |---+\rangle - 2|--+ \rangle + | - + + - \rangle + | + - - + \rangle - 2| + - + - \rangle + | + + - - \rangle \} \quad (7)$$

с энергией $E_1 = E(A_1) = -2I^{in} + J^{in}/2$. Следующим по энергии находится первый спиновый триплет

$$T_1 : \begin{cases} |\Psi_{1,1}^{(1)}\rangle \equiv |\Phi_2\rangle, & E_2 = E(T_1) = -I^{in} + J^{in}/2, \\ |\Psi_{1,0}^{(1)}\rangle \equiv |\Phi_3\rangle, & E_3 = E(T_1), \\ |\Psi_{1,-1}^{(1)}\rangle \equiv |\Phi_4\rangle, & E_4 = E(T_1). \end{cases} \quad (8)$$

Состояние, принадлежащее этому триплету и отвечающее максимальной проекции суммарного спинового момента плакета, описывается функцией

$$|\Phi_2\rangle = \frac{1}{2} \{ | - + + + \rangle - | + - + + \rangle + | + + - + \rangle - | + + + - \rangle \}. \quad (9)$$

Выше этого триплета находится второй синглет A_2 $|\Psi_{00}^{(2)}\rangle$:

$$|\Psi_{00}^{(2)}\rangle \equiv |\Phi_5\rangle = \frac{1}{2} \{ | - - + + \rangle - | - + + - \rangle - | + - - + \rangle + | + + - - \rangle \} \quad (10)$$

с энергией $E_5 = E(A_2) = -3J^{in}/2$. Затем располагаются два вырожденных спиновых триплета

$$T_2 : \begin{cases} |\Psi_{1,1}^{(2)}\rangle \equiv |\Phi_6\rangle, \\ |\Psi_{1,0}^{(2)}\rangle \equiv |\Phi_7\rangle, \\ |\Psi_{1,-1}^{(2)}\rangle \equiv |\Phi_8\rangle, \end{cases} \quad (11)$$

$$T_3 : \begin{cases} |\Psi_{1,1}^{(3)}\rangle \equiv |\Phi_9\rangle, \\ |\Psi_{1,0}^{(3)}\rangle \equiv |\Phi_{10}\rangle, \\ |\Psi_{1,-1}^{(3)}\rangle \equiv |\Phi_{11}\rangle, \end{cases}$$

которым соответствуют энергии $E(T_2) = E(T_3) \equiv E_p = -J^{in}/2$, $p = 6, 7, \dots, 11$. Компоненты этих триплетов с максимальным значением $M = 1$ описываются выражениями

$$|\Phi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ | - + + + \rangle - | + + - + \rangle \}, \quad (12)$$

$$|\Phi_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ | + - + + \rangle - | + + + - \rangle \}.$$

Наибольшей энергии $E_p = E(D) = I^{in} + J^{in}/2$ для $p = 12, 13, \dots, 16$ соответствуют состояния спинового квинтета ($S = 2$)

$$D : \{ |\Psi_{2,2}\rangle \equiv |\Phi_{12}\rangle, \quad |\Psi_{2,1}\rangle \equiv |\Phi_{13}\rangle, \quad |\Psi_{2,0}\rangle \equiv |\Phi_{14}\rangle, \\ |\Psi_{2,-1}\rangle \equiv |\Phi_{15}\rangle, \quad |\Psi_{2,-2}\rangle \equiv |\Phi_{16}\rangle \}.$$

Две его функции в принятой системе обозначений записываются в виде

$$|\Psi_{2,2}\rangle \equiv |\Phi_{12}\rangle = | + + + + \rangle, \\ |\Psi_{2,0}\rangle \equiv |\Phi_{14}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ | - - + + \rangle + | - + - + \rangle + \\ + | - + + - \rangle + | + + - - \rangle + | + - - + \rangle + \\ + | + - + - \rangle \}. \quad (13)$$

Кроме функции с максимальным значением проекции полного спинового момента здесь приведена также и функция $|\Psi_{2,0}\rangle$, поскольку это состояние будет играть существенную роль при описании спектральных свойств в антиферромагнитной фазе. Из выражений для энергий следует, что первый синглет $|\Phi_1\rangle$ является основным состоянием при $I^{in} > J^{in}$, в противном случае в качестве основного состояния выступает второй синглет $|\Phi_5\rangle$.

Базис $\{ |\Phi_q\rangle, q = 1, 2, \dots, 16 \}$ определяет гильбертово пространство, в котором действуют операторы, относящиеся к отдельному плакету. Каждый такой оператор может быть разложен по базисным операторам, в качестве которых удобно использовать операторы Хаббарда

$$X^{pq} = |\Phi_p\rangle \langle \Phi_q|. \quad (14)$$

Действие оператора Хаббарда на состояние $|\Phi_q\rangle$ определяется соотношением

$$X^{pq} |\Phi_{q'}\rangle = \delta_{qq'} |\Phi_p\rangle. \quad (15)$$

Используя свойства операторов Хаббарда и восстанавливая индекс плакета, запишем представление для спиновых операторов в следующем виде:

$$S_i^+(l) = \sum_{pq} \gamma_i^\perp(p, q) X_l^{pq}, \quad (16)$$

$$S_i^-(l) = \sum_{pq} \gamma_i^\perp(p, q) X_l^{qp}, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

где параметры представления $\gamma_i^\perp(p, q)$ в краткой форме обозначают матричные элементы спинового оператора: $\gamma_i^\perp(p, q) = \langle \Phi_p | S_i^+ | \Phi_q \rangle$. Аналогично вводится представление для операторов $S_i^z(l)$:

$$S_i^z(l) = \sum_{pq} \gamma_i^\parallel(p, q) X_l^{pq}, \quad (17)$$

$$\gamma_i^\parallel(p, q) = \langle \Phi_p | S_i^z | \Phi_q \rangle.$$

В терминах операторов Хаббарда гамильтониан H_0 приобретает диагональный вид

$$H_0 = \sum_l \sum_{p=1}^{16} E_p X_l^{pp}. \quad (18)$$

Перейдем к выводу оператора взаимодействия H_{int} в плакетном представлении. С этой целью оператор H_{int} , описывающий обменные связи между спиновыми моментами из разных плакетов, запишем в виде

$$H_{int} = \sum_l \{ I^{ex} [\mathbf{S}_4(l) \cdot \mathbf{S}_1(l + \Delta_x) + \mathbf{S}_3(l) \cdot \mathbf{S}_2(l + \Delta_x) + \mathbf{S}_2(l) \cdot \mathbf{S}_1(l + \Delta_y) + \mathbf{S}_3(l) \cdot \mathbf{S}_4(l + \Delta_y)] + J [\mathbf{S}_4(l) \cdot \mathbf{S}_2(l + \Delta_x) + \mathbf{S}_3(l) \cdot \mathbf{S}_1(l + \Delta_x) + \mathbf{S}_3(l) \cdot \mathbf{S}_1(l + \Delta_y) + \mathbf{S}_2(l) \cdot \mathbf{S}_4(l + \Delta_y)] + J_1 [\mathbf{S}_4(l) \cdot \mathbf{S}_2(l + \Delta_{x-y}) + \mathbf{S}_3(l) \cdot \mathbf{S}_1(l + \Delta_{x+y})] \},$$

где двухкомпонентные векторы

$$\begin{aligned} \Delta_x &= (b, 0), & \Delta_y &= (0, b), \\ \Delta_{x+y} &= (b, b), & \Delta_{x-y} &= (b, -b) \end{aligned} \quad (19)$$

соединяют центр l -го плакета с половиной ближайших к нему плакетов и половиной следующих за ближайшими. Взаимодействие между спинами из разных плакетов в рассматриваемом линейном по относительной деформации приближении характеризуется тремя обменными параметрами (см. рис. 2):

$$I^{ex} = (1 - k_1\delta)I, \quad J, \quad J_1 = (1 - k_2\delta)J. \quad (20)$$

Использование представлений (16) и (17) позволяет записать оператор взаимодействия в виде

$$H_{int} = H_{int}^\perp + H_{int}^\parallel, \quad (21)$$

где поперечная часть H_{int} имеет операторную структуру,

$$H_{int}^\perp = \frac{1}{2} \sum_{l\Delta_i} \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}^\perp(\Delta_i) X_l^\alpha X_{l+\Delta_i}^\beta. \quad (22)$$

Здесь суммирование по Δ_i ограничено четырьмя приведенными в формуле (19) значениями. Индексы « α » и « β » обозначают так называемые корневые векторы [11, 12]. Каждый из них соответствует определенному переходу между одноплакетными состояниями $|\Phi_p\rangle$. Поэтому задание корневого вектора α эквивалентно указанию последовательности из двух номеров одноплакетных состояний. При этом предполагается, что для оператора Хаббарда X^{pq} имеет место следующее соответствие: $X^{pq} \iff X^{\alpha(p,q)} \equiv X^\alpha$. Размерность корневых векторов равна 16 и определяется размерностью базиса, на котором построены операторы Хаббарда. Компоненты корневого вектора α , соответствующего переходу из $|\Phi_q\rangle$ в $|\Phi_p\rangle$, определяются выражением

$\alpha_i(p, q) = \delta_{ip} - \delta_{iq}$. Введение корневых векторов позволяет существенно упростить диаграммную технику для операторов Хаббарда [11, 12]. Сумма по корневым векторам α и β означает проведение суммирования по всем внутривлакетным переходам, имеющим место в плакетах соответственно с индексами l и $l + \Delta_i$. Для дальнейшего существенно, что матричные элементы $V_{\alpha\beta}^\perp(\Delta_i)$ могут быть представлены в расщепленном по индексам « α » и « β » виде скалярного произведения

$$V_{\alpha\beta}^\perp(\Delta_i) = \{ C^\perp(\alpha), \hat{V}^\perp(\Delta_i) C^\perp(-\beta) \} \quad (23)$$

восьмимерного вектора

$$C^\perp(\alpha) = [\gamma_1^\perp(\alpha), \gamma_2^\perp(\alpha), \gamma_3^\perp(\alpha), \gamma_4^\perp(\alpha), \gamma_1^\perp(-\alpha), \gamma_2^\perp(-\alpha), \gamma_3^\perp(-\alpha), \gamma_4^\perp(-\alpha)] \quad (24)$$

на вектор, получающийся после умножения матрицы $\hat{V}^\perp(\Delta_i)$ на вектор $C^\perp(-\beta)$. Матрица $\hat{V}^\perp(\Delta_i)$ записывается в виде прямой суммы

$$\hat{V}^\perp(\Delta_i) = \hat{v}(\Delta_i) \oplus \hat{v}(\Delta_i) \quad (25)$$

четырёхрядных матриц $\hat{v}(\Delta_i)$, составленных из обменных параметров межплакетных взаимодействий,

$$\begin{aligned} \hat{v}(\Delta_x) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ J & I^{ex} & 0 & 0 \\ I^{ex} & J & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{v}(\Delta_y) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ I^{ex} & 0 & 0 & J \\ J & 0 & 0 & I^{ex} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{v}(\Delta_{x-y}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{v}(\Delta_{x+y}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (26)$$

Применяя аналогичную методику, получим продольную часть взаимодействия

$$H_{int}^\parallel = \sum_{l\Delta_i} \sum_{\lambda\lambda'} V_{\lambda\lambda'}^\parallel(\Delta_i) X_l^\lambda X_{l+\Delta_i}^{\lambda'}, \quad (27)$$

$$V_{\lambda\lambda'}^\parallel(\Delta_i) = \{ C^\parallel(\lambda), \hat{v}(\Delta_i) C^\parallel(\lambda') \},$$

где четырехмерные векторы $C^{\parallel}(\lambda)$ конструируются из параметров представления для S_i^z -операторов по правилу

$$C^{\parallel}(\lambda) = [\gamma_1^{\parallel}(\lambda), \gamma_2^{\parallel}(\lambda), \gamma_3^{\parallel}(\lambda), \gamma_4^{\parallel}(\lambda)]. \quad (28)$$

Заметим, что в приведенном для продольной части взаимодействия выражении суммирование по индексу « λ » предполагает, вообще говоря, суммирование не только по парам несовпадающих индексов одно-плакетных состояний, но и по совпадающим индексам. Такая ситуация имеет место, например, когда в системе реализуется дальний магнитный порядок и среднее значение операторов S_i^z не равно нулю (см. ниже). В этом случае часть диагональных матричных элементов $\langle \Phi_p | S_i^z | \Phi_p \rangle$ отлична от нуля, что и приводит к отмеченной особенности для продольного взаимодействия.

4. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Для нахождения спектра коллективных возбуждений плакетно-деформированного магнетика воспользуемся методом диаграммной техники для операторов Хаббарда [11, 12]. С этой целью введем мацубаровские функции Грина

$$D_{\alpha\beta}(f\tau; g\tau') = \langle T_{\tau} \tilde{X}_f^{\alpha}(\tau) \tilde{X}_g^{-\beta}(\tau') \rangle, \quad (29)$$

$$\tilde{X}_f^{\alpha}(\tau) = e^{\tau H} X_f^{\alpha} e^{-\tau H}.$$

В беспетлевом приближении фурье-образ $D_{\alpha\beta}(k, i\omega_n)$ функции (29) выражается через функцию $G_{\alpha\beta}(k, i\omega_n)$ посредством соотношения [11, 12]

$$D_{\alpha\beta}(k, i\omega_n) = G_{\alpha\beta}(k, i\omega_n) b(\beta),$$

где $b(\beta)$ — так называемый концевой множитель. Уравнение для $G_{\alpha\beta}(k, i\omega_n)$ в графической форме имеет вид

$$\begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array} = \begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array} + \begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array} \text{---} \text{---} \text{---} \begin{array}{c} \xrightarrow{\beta_1} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array}. \quad (30)$$

При записи этого уравнения в аналитической форме существенно, что в немагнитной фазе при всех корневых векторах α и для любых значений индексов i, j произведение параметров представления $\gamma_i^{\perp}(\alpha)\gamma_j^{\parallel}(\pm\alpha) = 0$. Это свойство вытекает из того, что $|\Phi_q\rangle$ являются собственными состояниями оператора z -проекции суммарного спинового момента плакета S_{pl}^z . Поскольку оператор S_j^z не изменяет значения z -проекции спинового момента плакета, а оператор S_i^+ увеличивает ее на единицу, одновременно

матричные элементы этих операторов между одно-плакетными состояниями $|\Phi_q\rangle$ не могут быть отличны от нуля. В результате коллективные возбуждения, определяемые поперечной и продольной частями взаимодействия (поперечные и продольные колебания), не взаимодействуют между собой и находятся независимо.

Поперечные колебания

Приведя в соответствие графическим фрагментам в (30) аналитические выражения, получаем

$$G_{\alpha\beta}(k, i\omega_n) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha}(i\omega_n) + \sum_{\beta_1} G_{\alpha}(i\omega_n) b(\alpha) V_{\alpha, \beta_1}^{\perp}(k) G_{\beta_1\beta}(k, i\omega_n), \quad (31)$$

где корневые векторы α, β, β_1 соответствует внутри-плакетным переходам, для которых поперечные параметры представления отличны от нуля. Входящие в это уравнение функции определяются выражениями

$$G_{\alpha}(i\omega_n) = [i\omega_n + \alpha E]^{-1},$$

$$\alpha E = E_p - E_q, \quad \text{если } \alpha = \alpha(p, q),$$

$$V_{\alpha, \beta_1}^{\perp}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta_i} \{ \exp(ik\Delta_i) V_{-\alpha, \beta_1}^{\perp}(\Delta_i) + \exp(-ik\Delta_i) V_{\beta_1, -\alpha}^{\perp}(\Delta_i) \}. \quad (32)$$

Векторы k принадлежат первой зоне Бриллюэна для квадратной решетки с параметром элементарной ячейки b .

При решении системы (31) учтем расщепленную по индексам структуру матричного элемента (23). Вводя восьмимерный вектор $Z_{\beta}(k, i\omega_n)$ с компонентами

$$Z_{\beta}^l(k, i\omega_n) = \sum_{\beta_1} C_l^{\perp}(\beta_1) G_{\beta_1, \beta}(k, i\omega_n), \quad (33)$$

$$l = 1, 2, \dots, 8,$$

получаем для него матричное уравнение

$$Z_{\beta}(k, i\omega_n) = C^{\perp}(\beta) G_{\beta}(i\omega_n) + \hat{L}^{\perp}(i\omega_n) \hat{M}^{\perp}(k) Z_{\beta}(k, i\omega_n). \quad (34)$$

Здесь элементы матрицы $\hat{L}^{\perp}(i\omega_n)$ определяются выражениями

$$L_{lm}^{\perp}(i\omega_n) = \sum_{\alpha} C_l^{\perp}(\alpha) C_m^{\perp}(\alpha) G_{\alpha}(i\omega_n) b(\alpha), \quad (35)$$

а матрица $\hat{M}^{\perp}(k)$ представима в виде

$$\hat{M}^\perp(k) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta_i} \left[\exp(ik\Delta_i) \hat{V}^\perp(\Delta_i) + \exp(-ik\Delta_i) \tilde{V}^\perp(\Delta_i) \right], \quad (36)$$

где $\tilde{V}^\perp(\Delta_i)$ является транспонированной по отношению к $\hat{V}^\perp(\Delta_i)$ матрицей. Из формулы (34) следует дисперсионное уравнение, определяющее спектр поперечных возбуждений (после аналитического продолжения $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$, $\delta \rightarrow +0$),

$$\det \| 1 - \hat{L}^\perp(\omega) \hat{M}^\perp(k) \| = 0. \quad (37)$$

Продольные колебания

Вывод дисперсионного уравнения для продольных колебаний аналогичен изложенному выше. Опуская детали, приведем лишь окончательный вид дисперсионного уравнения

$$\det \| 1 - \hat{L}^\parallel(\omega) \hat{M}^\parallel(k) \| = 0, \quad (38)$$

где $\hat{L}^\parallel(\omega)$ — матрица размером 4×4 с элементами

$$L_{lm}^\parallel(\omega) = \sum_{\alpha} C_l^\parallel(\alpha) C_m^\parallel(\alpha) G_{\alpha}(\omega) b(\alpha). \quad (39)$$

Матрица $\hat{M}^\parallel(k)$ представима в виде

$$\hat{M}^\parallel(k) = \sum_{\Delta_i} \left[\exp(ik\Delta_i) \hat{v}(\Delta_i) + \exp(-ik\Delta_i) \tilde{v}(\Delta_i) \right], \quad (40)$$

где $\tilde{v}(\Delta_i)$ является транспонированной по отношению к $\hat{v}(\Delta_i)$ матрицей.

5. СПЕКТР ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В СИНГЛЕТНО-ПЛАКЕТНОЙ ФАЗЕ

Рассмотрим решения уравнений (37) и (38) в низкотемпературной области, когда $T \ll I^{in}, J^{in}$. В этом случае заселенность верхних одноплакетных состояний экспоненциально мала:

$$N_p \leq \exp(-I^{in}/T) \ll 1, \quad p = 1, 2, \dots$$

Поэтому спектр элементарных возбуждений определяется коллективизацией переходов между основным и возбужденными одноплакетными состояниями. Это обстоятельство отражается посредством входящих в $\hat{L}^\perp(\omega)$ и $\hat{L}^\parallel(\omega)$ концевых множителей $b(\alpha)$. Экспоненциальную малость не содержат лишь

те $b(\alpha)$, для которых у корневого вектора $\alpha = \alpha(p, q)$ один из аргументов (p или q) равен единице. В нашем случае имеется 16 отличных от нуля параметров $\gamma_i^\perp(\alpha)$, определяющих элементарные возбуждения:

$$\begin{aligned} \gamma_1^\perp(1, 4) &= -\gamma_2^\perp(1, 4) = \gamma_3^\perp(1, 4) = \\ &= -\gamma_4^\perp(1, 4) = 1/\sqrt{3}, \\ \gamma_1^\perp(1, 8) &= \gamma_2^\perp(1, 11) = -\gamma_3^\perp(1, 8) = \\ &= -\gamma_4^\perp(1, 11) = -1/\sqrt{6}, \\ \gamma_1^\perp(2, 1) &= -\gamma_2^\perp(2, 1) = \gamma_3^\perp(2, 1) = \\ &= -\gamma_4^\perp(4, 1) = -1/\sqrt{3}, \\ \gamma_1^\perp(6, 1) &= \gamma_2^\perp(9, 1) = -\gamma_3^\perp(6, 1) = \\ &= -\gamma_4^\perp(9, 1) = 1/\sqrt{6}. \end{aligned} \quad (41)$$

Принимая эти факторы во внимание, находим, что восьмимерная матрица $\hat{L}^\perp(\omega)$ имеет квазидиагональный вид

$$\hat{L}^\perp = \hat{l}^\perp \oplus \hat{l}^\perp, \quad \hat{l}^\perp = \begin{bmatrix} u+v & -u & u-v & -u \\ -u & u+v & -u & u-v \\ u-v & -u & u+v & -u \\ -u & u-v & -u & u+v \end{bmatrix}, \quad (42)$$

где через u и v обозначены выражения

$$\begin{aligned} u &= \frac{2}{3} \frac{I^{in}}{(i\omega_n)^2 - (I^{in})^2}, \\ v &= \frac{1}{3} \frac{2I^{in} - J^{in}}{(i\omega_n)^2 - (2I^{in} - J^{in})^2}. \end{aligned} \quad (43)$$

Для матрицы $\hat{M}^\perp(k)$ получаем аналогичное представление в виде прямой суммы двух матриц:

$$\hat{M}^\perp(k) = \hat{m}^\perp(k) \oplus \hat{m}^\perp(k), \quad \hat{m}^\perp(k) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & y^* I^{ex} & m_{31}^* & x^* I^{ex} \\ y I^{ex} & 0 & x^* I^{ex} & m_{42}^* \\ m_{31} & x I^{ex} & 0 & y I^{ex} \\ x I^{ex} & m_{42} & y^* I^{ex} & 0 \end{bmatrix}, \quad (44)$$

где $x = e^{i k_x a}$, $y = e^{i k_y a}$, $m_{31} = (x + y)J + xyJ_1$, $m_{42} = (x + y^*)J + xy^*J_1$. Используя свойство

$$\begin{aligned} \hat{L}^\perp \hat{M}^\perp &= (\hat{l}^\perp \oplus \hat{l}^\perp) (\hat{m}^\perp \oplus \hat{m}^\perp) = \\ &= (\hat{l}^\perp \hat{m}^\perp) \oplus (\hat{l}^\perp \hat{m}^\perp), \end{aligned} \quad (45)$$

получаем представление детерминанта восьмой степени через произведение двух идентичных определителей

телей четвертого порядка. В результате часть спектра поперечных колебаний находится из более простого уравнения

$$\det \| 1 - \hat{l}^\perp(\omega) \hat{m}^\perp(k) \| = 0, \quad (46)$$

а весь спектр получается путем удвоения каждой ветви. Такое вырождение обусловлено очевидной тождественностью уравнений движения для операторов S_l^+ и S_l^- в синглетной фазе.

В приближении ближайших соседей уравнение (46) записывается в виде

$$1 + 4uI^{ex}\gamma_1(k) - 2uv(I^{ex})^2[1 - \gamma_2(k)] - v^2(I^{ex})^2[1 + \gamma_2(k) - 2\gamma_3(k)] = 0, \quad (47)$$

где

$$\gamma_l(k) = \frac{1}{2} [\cos(lk_x b) + \cos(lk_y b)], \quad l = 1, 2, \\ \gamma_3(k) = \cos(k_x b) \cos(k_y b).$$

После подстановки в (46) выражений для u и v получаем кубическое уравнение относительно $\omega^2(k)$, измеряемого в единицах $(I^{in})^2$:

$$\omega^6 + A\omega^4 + B\omega^2 + C = 0, \quad (48)$$

где

$$A = \frac{8}{3}\gamma_1(k) \left(\frac{I^{ex}}{I^{in}} \right) - 9, \\ B = \frac{4}{9} [2\gamma_3(k) + 2\gamma_2(k) - 3] \left(\frac{I^{ex}}{I^{in}} \right)^2 - \frac{64}{3}\gamma_1(k) \left(\frac{I^{ex}}{I^{in}} \right) + 24, \quad (49) \\ C = -\frac{4}{9} [2\gamma_3(k) + 7\gamma_2(k) - 9] \left(\frac{I^{ex}}{I^{in}} \right)^2 + \frac{128}{3}\gamma_1(k) \left(\frac{I^{ex}}{I^{in}} \right) - 16.$$

Решая кубическое уравнение (48), находим три ветви спектра коллективных возбуждений

$$\omega_1^2 = -\frac{1}{3}A + \frac{1}{6}W - \frac{2Z}{W}, \\ \omega_2^2 = -\frac{1}{3}A - \frac{1}{12}W + \frac{Z}{W} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{W}{6} + \frac{2Z}{W} \right), \quad (50) \\ \omega_3^2 = -\frac{1}{3}A - \frac{1}{12}W + \frac{Z}{W} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{W}{6} + \frac{2Z}{W} \right),$$

где

$$W = \left\{ 36BA - 108C - 8A^3 + 12(12B^3 - 3B^2A^2 - 54BAC + 81C^2 + 12CA^3)^{1/2} \right\}^{1/3}, \quad (51) \\ Z = B - \frac{1}{3}A^2.$$

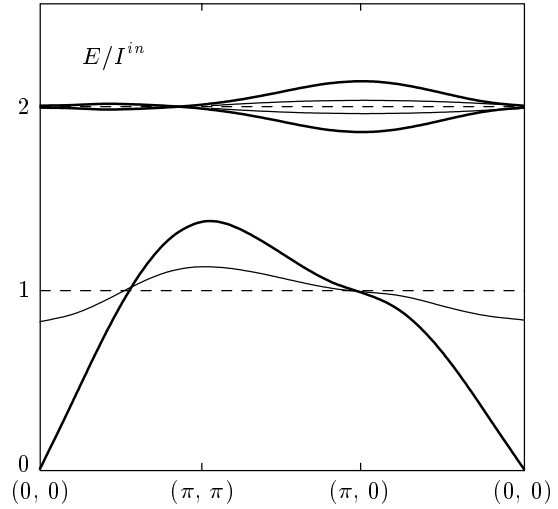


Рис. 3. Спектр возбуждений двумерного квантового магнетика в синглетной фазе

Следующие три ветви находятся из рассмотрения дисперсионного уравнения для продольных колебаний. Поскольку для синглетной фазы операторы S_f^x, S_f^y и S_f^z равноправны, то и динамика, порождаемая этими операторами, будет эквивалентна. Поэтому отличные от нуля параметры представления $\gamma^\parallel(\alpha)$ связывают те же самые одноплетные состояния, что и параметры $\gamma^\perp(\alpha)$. В результате этого дисперсионное уравнение в данном случае идентично уравнению (46). При низких температурах это дает еще три ветви спектра. В итоге полный спектр возбуждений в синглетно-плетной фазе при $T \ll I^{in}$ характеризуется тремя трехкратно вырожденными ветвями.

На рис. 3 продемонстрирована эволюция спектра возбуждений (трехкратная вырожденность ветвей не учитывается) в синглетно-плетной фазе при увеличении отношения I^{ex}/I^{in} . При $I^{ex} = 0$, когда все плетки независимы, в спектре возбуждений имеются одна ветвь с энергией I^{in} и две вырожденные ветви с энергиями $2I^{in}$. Эти ветви на рисунке показаны штриховыми линиями. При конечном, но малом значении отношения I^{ex}/I^{in} появляется дисперсия и расщепление верхних ветвей спектра. Тонкими сплошными линиями показан спектр для $I^{ex}/I^{in} = 1/9$. Жирными сплошными линиями показаны три ветви энергетического спектра для граничного значения $I^{ex}/I^{in} = 3/8$. В этом случае нижняя ветвь становится безактивационной. При $I^{ex}/I^{in} > 3/8$ спектр теряет положительную определенность (ω_2 становится отрицательным). Это соответствует тому, что в системе происходит переход

в состояние с дальним антиферромагнитным порядком.

Включение взаимодействий фрустрированного типа между следующими за ближайшими соседними спиновыми моментами приводит к стабилизации немагнитной фазы. Из-за громоздкости выражений аналитический вид спектра не приводится. Отметим лишь, что раньше всего неустойчивость возникает также в точке $\mathbf{k} = (0, 0)$. Значение ω_2 в этой точке определяется выражением

$$\omega_2^2(\mathbf{k} = 0) = \frac{4}{3}I^{in} \left(2J - 2I^{ex} + \frac{3}{4}I^{in} + J_1 \right). \quad (52)$$

Из условия положительной определенности спектра получаем границу устойчивости плакетно-синглетной фазы (ПСФ)

$$\left(\frac{J}{I} \right)_c = \frac{5 - 11(k_1\delta)}{12 - 4(k_2\delta)}, \quad (53)$$

причем в области $(J/I) > (J/I)_c$ реализуется ПСФ. Без учета деформации синглетно-плакетная фаза реализуется при $J > 5I/12$. В отсутствие фрустрированных взаимодействий фазовый переход из синглетно-плакетной фазы будет происходить при $k\delta = 5/11$, что соответствует $I^{ex}/I^{in} = 3/8$.

В области $(J/I) < (J/I)_c$ ПСФ не соответствует основному состоянию системы. В этом случае происходит спонтанное нарушение симметрии с возникновением дальнего антиферромагнитного упорядочения и дополнительной деформации решетки. Для описания такой фазы необходимо перестроить плакетное представление и учесть влияние магнитной структуры на базисные функции, описывающие одноплакетные состояния. При этом в качестве обязательного критерия корректности описания магнитной фазы выступает требование существования в системе голдстоуновского бозона. Решению этой задачи посвящен следующий раздел.

6. ПЛАКЕТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПРИ УЧЕТЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ

Учитывая, что двумерная система спинов может иметь дальний антиферромагнитный (АФМ) порядок, модифицируем схему построения плакетного представления, чтобы включить эффекты упорядочения. При этом величина параметра порядка должна находиться либо из условия минимума энергии системы, либо из решения уравнения самосогласования.

Возникновение дальнего АФМ-упорядочения приводит к тому, что на каждый спиновый плакет

начинает действовать самосогласованное поле. Предполагая неелевскую структуру основного состояния системы, для определенности положим, что

$$\langle S_1^z(l) \rangle = -\langle S_2^z(l) \rangle = \langle S_3^z(l) \rangle = -\langle S_4^z(l) \rangle = \sigma. \quad (54)$$

Применяя хорошо известную процедуру введения самосогласованного поля (ССП) (в диаграммной форме теории возмущений этому шагу соответствует точный учет всех однохвостных диаграмм [15]), получим, что гамильтониан H_0 модифицируется по правилу

$$\begin{aligned} H_0 &\rightarrow \tilde{H}_0 = \sum_l \tilde{h}_0(\sigma; l) = \\ &= \sum_l \{ 2\tilde{H}\sigma - \tilde{H}D^z(l) + h_0(l) \}, \end{aligned} \quad (55)$$

где $\tilde{H} = (2I^{ex} - 2J - J_1)\sigma$ — самосогласованное поле, а действующий на спиновые моменты плакета l оператор антиферромагнетизма $D^z(l)$ определяется выражением

$$D^z(l) = S_1^z(l) - S_2^z(l) + S_3^z(l) - S_4^z(l). \quad (56)$$

Ренормированные собственные функции одноплакетного гамильтониана, удовлетворяющие уравнению Шредингера

$$\tilde{h}_0(\sigma)|\tilde{\Phi}_p(\sigma)\rangle = E_p(\sigma)|\tilde{\Phi}_p(\sigma)\rangle \quad (57)$$

(индекс плакета для краткости не пишется), удобно искать в виде суперпозиции по прежним одноплакетным состояниям:

$$|\tilde{\Phi}_p(\sigma)\rangle = \sum_{n=1}^{16} C_{pn}(\sigma)|\Phi_n\rangle. \quad (58)$$

При этом собственные функции отдельного плакета становятся зависящими не только от I^{in} и J^{in} , но и от значений параметров межплакетных взаимодействий I^{ex} , J , J_1 . Уравнение самосогласования для равновесной намагниченности имеет вид

$$\sigma = \frac{1}{4} \left\langle \tilde{\Phi}_1(\sigma) \left| \hat{D}^z \right| \tilde{\Phi}_1(\sigma) \right\rangle, \quad (59)$$

где $|\tilde{\Phi}_1(\sigma)\rangle$ — функция основного состояния плакета, находящегося в самосогласованном поле. Энергия системы в расчете на один плакет определяется выражением

$$E(\sigma) = \left\langle \tilde{\Phi}_1(\sigma) \left| \tilde{h}_0(\sigma) \right| \tilde{\Phi}_1(\sigma) \right\rangle. \quad (60)$$

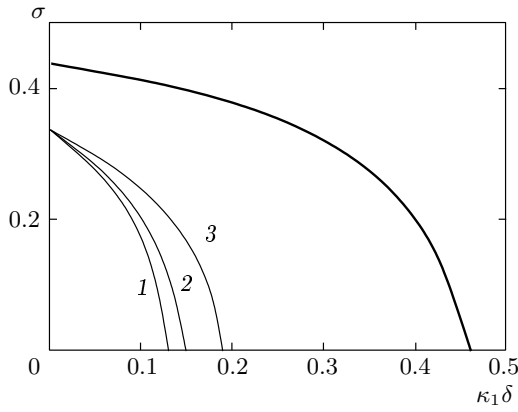


Рис. 4. Зависимости намагниченности подрешетки антиферромагнетика от параметра плакетной деформации

Как известно [13, 14], фрустрированные взаимодействия стремятся подавить дальний антиферромагнитный порядок. В простейшем приближении точке разрушения магнитного упорядочения соответствует критическое значение $J_c = I/2$. В нашем случае из решения уравнения самосогласования (59) следует, что состояние со спонтанно нарушенной симметрией существует лишь в области $J < \tilde{J}_c = 0.417I$. Видно, что учет внутриплакетных квантовых флуктуаций привел к смещению точки перехода в сторону меньших J .

С возникновением плакетной деформации решетки в спиновой подсистеме индуцируется дополнительный механизм разрушения спонтанной намагниченности с последующим переходом спинового ансамбля в синглетное состояние. Этот механизм обусловлен разным изменением внутриплакетных и межплакетных обменных интегралов при плакетной деформации. На рис. 4 показано уменьшение намагниченности подрешетки при появлении плакетной деформации нефрустрированного (жирная кривая) и фрустрированного ($J/I = 0.3$) антиферромагнетика для трех значений отношения между относительными скоростями уменьшения обменных интегралов: 1 — $k_2/k_1 = 0$; 2 — $k_2/k_1 = 1$; 3 — $k_2/k_1 = 3$. Как следует из представленных графиков, критические значения относительной деформации существенно зависят от отношения k_2/k_1 и уменьшаются при возрастании интенсивности фрустрированных взаимодействий.

Отметим, что представленным значениям намагниченности соответствует минимум в зависимости энергии системы от σ . При этом в нефрустриро-

ванном случае в расчете на один плакет $E_{min} = -2.336I$. Уменьшение энергии основного состояния по сравнению с энергией неелевской фазы при обычном описании ($E_{Neel} = -2I$) также обусловлено учетом ближних квантовых флуктуаций.

Учет ССП при наличии дальнего антиферромагнитного упорядочения не изменяет вида поперечного взаимодействия H_{int}^\perp , но модифицирует продольное взаимодействие H_{int}^\parallel . Это обусловлено тем, что возникновение отличной от нуля намагниченности подрешетки приводит к существованию не равных нулю продольных параметров представления $\gamma_i^\parallel(\alpha)$. В результате при суммировании по парным индексам одноплакетных состояний следует учитывать слагаемые с совпадающими индексами. При этом перенормировка нулевого гамильтониана, связанная с включением в него эффектов самосогласованного поля, индуцирует в H_{int}^\parallel замену диагональных операторов Хаббарда по правилу [11, 15] $X_f^{nn} \rightarrow \Delta X_f^{nn} = X_f^{nn} - \langle X_f^{nn} \rangle$.

7. СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ В МАГНИТНОЙ ФАЗЕ. ЭНЕРГИЯ НУЛЕВЫХ КВАНТОВЫХ КОЛЕБАНИЙ

Для нахождения элементарных возбуждений, а также поправки к энергии, обусловленной нулевыми квантовыми колебаниями, в фазе со спонтанно нарушенной симметрией и плакетной деформацией воспользуемся введенным выше представлением для магнитной фазы. При этом также ограничимся рассмотрением случая низких температур. Тогда для решения задачи о спектре удобно воспользоваться бозевским аналогом гамильтониана. Строгая теория построения бозевского аналога гамильтониана с привлечением индефинитной метрики изложена в работах [16, 17]. Для наших целей, когда взаимодействие квазичастиц учитываться не будет, переход к бозевскому аналогу гамильтониана реализуется при замене операторов Хаббарда бозевскими операторами по схеме

$$X_i^{1,p+1} \rightarrow b_p(l), \quad X_i^{p+1,1} \rightarrow b_p^+(l), \quad (61)$$

$$p = 1, 2, \dots, 15,$$

где $b_p(l)$ ($b_p^+(l)$) обозначает оператор уничтожения (рождения) бозона типа p в плакетном представлении. Бозевская форма операторов $X_i^{p+1,q+1}$ при $p \neq 0, q \neq 0$ содержит как минимум произведение двух операторов: $X_i^{p+1,q+1} \rightarrow b_p^+(l)b_q(l)$, и поэтому слагаемые гамильтониана с такими операторами

рами описывают взаимодействие квазичастиц. Следовательно, для получения квадратичной формы гамильтониана достаточно из сумм по корневым векторам α и β оставить только те слагаемые, которые соответствуют переходам между одноплакетными состояниями, одно из которых обязательно является основным состоянием плакета. С учетом сказанного квадратичная форма для поперечной части гамильтониана взаимодействия записывается в виде

$$H_{int}^{\perp} = \frac{1}{2} \sum_{l} \sum_{\Delta_i, p, q=1}^{15} \{ V_{1,p+1;1,q+1}^{\perp}(\Delta_i) b_p(l) b_q(l+\Delta_i) + V_{p+1,1;1,q+1}^{\perp}(\Delta_i) b_p^+(l) b_q(l+\Delta_i) + V_{1,p+1;q+1,1}^{\perp}(\Delta_i) b_p(l) b_q^+(l+\Delta_i) + V_{p+1,1;q+1,1}^{\perp}(\Delta_i) b_p^+(l) b_q^+(l+\Delta_i) \}, \quad (62)$$

где $V_{1,p+1;q+1,1}^{\perp}(\Delta_i)$ обозначает введенный ранее матричный элемент $V_{\alpha\beta}^{\perp}(\Delta_i)$ с $\alpha = \alpha(1, p+1)$, $\beta = \beta(q+1, 1)$. Аналогичные обозначения используются и для других матричных элементов, входящих в формулу (62). В импульсном представлении эта форма принимает вид

$$H_{int}^{\perp} = \sum_k \sum_{p, q \neq 1} \left\{ \frac{1}{2} R_{pq}(k) b_p^+(k) b_q^+(-k) + S_{pq}(k) b_p^+(k) b_q(k) + \frac{1}{2} R_{pq}^*(k) b_p(k) b_q(-k) \right\}, \quad (63)$$

где

$$R_{pq}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta_i} \{ V_{1,p+1;1,q+1}^{\perp}(\Delta_i) \exp(ik\Delta_i) + V_{1,q+1;1,p+1}^{\perp}(\Delta_i) \exp(-ik\Delta_i) \}, \quad (64)$$

$$S_{pq}(k) = \frac{1}{2} \sum_{\Delta_i} \{ V_{p+1,1;1,q+1}^{\perp}(\Delta_i) \exp(ik\Delta_i) + V_{q+1,1;1,p+1}^{\perp}(\Delta_i) \exp(-ik\Delta_i) \}.$$

Полный гамильтониан, описывающий спектр поперечных колебаний, имеет обычную структуру $H^{\perp} = H_0^{\perp} + H_{int}^{\perp}$, в которой оператор энергии одноплакетных невзаимодействующих бозонов H_0 определяется выражением

$$H_0 = \sum_k \sum_p' E_{p+1} b_p^+(k) b_p(k). \quad (65)$$

Штрих у суммы по p означает, что суммирование проводится только по таким p , для которых параметры представления поперечных компонент спиновых

операторов $\gamma_i^{\perp}(1, p+1)$ и $\gamma_i^{\perp}(p+1, 1)$ при $i = 1, 2, 3, 4$ отличны от нуля.

Для вычисления энергетического спектра и вклада нулевых квантовых колебаний в энергию основного состояния проведем унитарное преобразование гамильтониана [18]

$$b_p(k) = \sum_r u_{pr}(k) a_r(k) + \sum_r v_{pr}^*(-k) a_r^+(-k). \quad (66)$$

При этом задача диагонализации гамильтониана сводится к решению алгебраической задачи на собственные значения

$$\begin{aligned} \sum_s \tilde{S}_{ps}(k) u_{sr}(k) + \sum_s R_{ps}(k) v_{sr}(k) &= \\ &= E_r(k) u_{pr}(k), \\ - \sum_s R_{ps}(-k) u_{sr}(k) - \sum_s \tilde{S}_{ps}(k) v_{sr}(k) &= \\ &= E_r(k) v_{pr}(k), \end{aligned} \quad (67)$$

где

$$\tilde{S}_{ps} = S_{ps} + \delta_{ps} (E_{p+1} - E_1). \quad (68)$$

В новых операторах гамильтониан приобретает вид

$$H = \Delta E_0 + \sum_{k, \nu} E_{\nu}(k) a_{\nu}^+(k) a_{\nu}(k), \quad (69)$$

где квантовая добавка к энергии основного состояния определяется следующим образом:

$$\Delta E_0 = - \sum_{\nu, k} \left\{ \sum_p |v_{p\nu}(k)|^2 \right\} E_{\nu}(k). \quad (70)$$

Аналогичным образом проводится вычисление спектра продольных колебаний. Квадратичную форму гамильтониана в этом случае можно получить из формы (63), если в выражениях для R и S сделать замену $V_{\alpha, \beta}^{\perp} \rightarrow V_{\alpha, \beta}^{\parallel}$ и убрать множитель $1/2$. При этом полная квадратичная форма всего гамильтониана представляется в виде прямой суммы двух квадратичных форм, каждая из которых диагонализуется независимо.

На рис. 5 показаны результаты численного расчета низкоэнергетической части спектра в магнитной фазе для трех значений параметра плакетной деформации. Для упрощения мы ограничились представлением результатов для $J = 0$. При $J \neq 0$ характер эволюции спектра качественно аналогичен. В точке перехода, когда $k_1 \delta = 0.45$, низкоэнергетический спектр возбуждений трехкратно вырожден (две ветви поперечные и одна — продольная). Это в

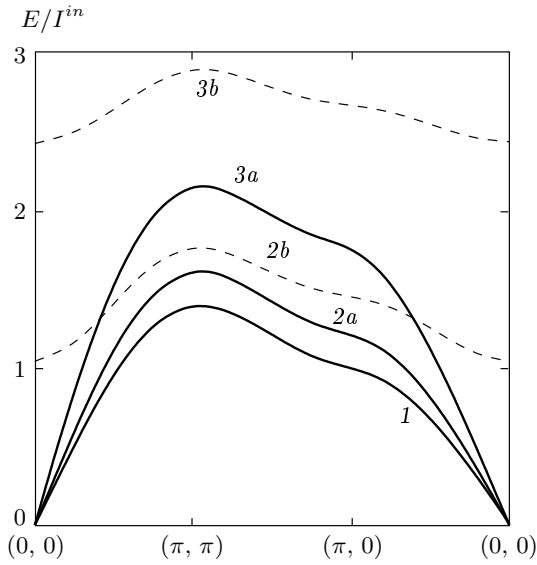


Рис. 5. Эволюция низкоэнергетической части спектра в АФМ-фазе

точности соответствует решению, полученному ранее из кубического уравнения (кривая 1).

Уменьшение плакетной деформации в АФМ-фазе приводит к снятию трехкратного вырождения. Две ветви, соответствующие поперечным колебаниям, остаются голдстоуновскими (сплошная кривая), а продольная ветвь колебаний (штриховая кривая) — активационной. Для $k_1\delta = 0.3$ поперечные и продольная ветви показаны на рис. 5 соответственно кривыми 2a и 2b. Предельному случаю недеформированного антиферромагнетика соответствуют кривые 3a и 3b.

Из представленных результатов по эволюции спектра следует, что при плакетной деформации, пока не разрушен дальний антиферромагнитный порядок, в соответствии с теоремой Голдстоуна существует акустический бозон. При этом по мере приближения к точке перехода в синглетную фазу происходит смягчение продольной (оптической) моды. В точке перехода и в синглетной фазе энергетический спектр поперечных и продольных колебаний полностью совпадает. Увеличение плакетной деформации в синглетной фазе приводит к появлению энергии активации. Таким образом, в синглетной фазе спектр является щелевым и трехкратно вырожденным. При этом величина щели тем больше, чем более устойчивой является синглетная фаза, т.е., чем дальше от точки перехода находится система.

Для определения равновесного значения параметра плакетной деформации δ и построения фазо-

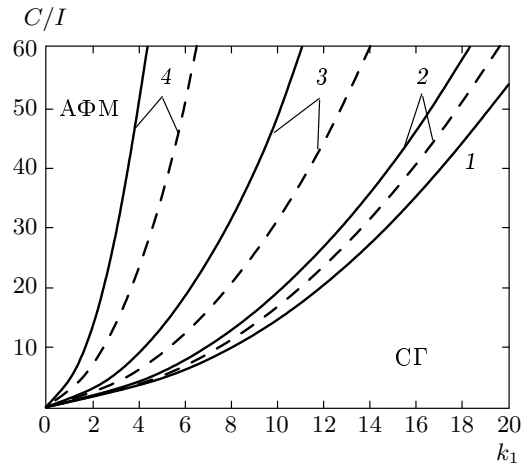


Рис. 6. Фазовая диаграмма плакетно деформированного двумерного квантового магнетика

вой диаграммы двумерного квантового магнетика с фрустрированными связями учтем вклад энергии, связанной с искажением решетки. В нашем случае энергию деформации в расчете на один плакет достаточно представить в виде $E_{el} = 2C\delta^2$, где C/a_0^2 — эффективная константа упругого взаимодействия. Тогда равновесное значение деформации δ получается из решения уравнения

$$\frac{\partial E_m(\delta)}{\partial \delta} + 4Ca_0^2\delta = 0, \quad (71)$$

где E_m — магнитная энергия спиновой системы. В точке перехода в синглетную фазу параметр плакетной деформации δ кроме того, что является решением уравнения (71), должен соответствовать критическому значению произведения $(k_1\delta)_c$. Результатом удовлетворения этих требований выступает уравнение

$$C = \mu k_1^2, \quad (72)$$

определяющее границу раздела антиферромагнитной и синглетно-плакетной фаз. Параметр μ определяется выражением

$$\mu = -\frac{1}{4(k_1\delta)_c} \left(\frac{\partial E_m}{\partial (k_1\delta)} \right)_{k_1\delta=(k_1\delta)_c} \quad (73)$$

и зависит от параметров модели J/I и k_2/k_1 .

На рис. 6 показана фазовая диаграмма фрустрированного плакетно-деформированного квантового магнетика. Кривая 1 демонстрирует границу раздела для нефрустрированного квантового магнетика.

Кривые 2, 3 и 4 отражают линии фазовых переходов фрустрированного квантового магнетика соответственно при $J/I = 0.1, 0.3, 0.4$. Сплошные линии обозначают фазовые границы при $k_2 = 0$ (зависимость от расстояния обменного интеграла J игнорируется), штриховые — при $k_2/k_1 = 1$ (относительные скорости изменения обменных параметров I и J одинаковые). Диаграмма в количественной форме показывает, что при малых значениях k_1 (обменные интегралы медленно изменяются при деформации) и больших значениях упругой константы C основному состоянию квантового магнетика соответствует плакетно-деформированная антиферромагнитная фаза с ренормированной намагниченностью подрешетки. При возрастании k_1 или уменьшении C квантовый магнетик переходит в синглетную фазу; это фазовый переход второго рода.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в работе результаты показывают, что в двумерной спиновой системе на квадратной решетке включение эффектов магнитоупругой связи может иметь решающее значение в механизме формирования синглетного основного состояния с щелевым спектром возбуждения. Подчеркнем, что именно из-за магнитоупругой связи, приводящей к разнице между внутриплакетными и межплакетными обменными взаимодействиями, в синглетной фазе формируется активационный спектр. Только фрустрированных взаимодействий, которые разрушают дальний антиферромагнитный порядок, было бы недостаточно для исчезновения бесщелевых возбуждений.

Второй момент связан с выбором типа деформации решетки. Мы ограничились рассмотрением плакетной деформации по двум причинам. Во-первых, симметрия решетки в определенной степени «навязывает» возможность такой деформации. Во-вторых, энергетические факторы, определяющие предпочтительность синглетного состояния плакета, также работают на оправдание выбранного сценария синглетизации двумерного квантового магнетика с магнитоупругой связью. При этом использование техники операторов Хаббарда в идеологии плакетного представления позволило точно учесть сильные одноплакетные корреляции и, тем самым, корректно отразить отмеченную тенденцию к синглетизации плакетно-деформированного квантового магнетика.

Следует подчеркнуть и третий фактор развитой

теории. Он связан с тем, что при расчете спектра возбуждений использовался полный (а не усеченный) набор одноплакетных состояний. Только при таком подходе спектр возбуждений удовлетворяет необходимым симметричным свойствам. В частности, в фазе со спонтанно нарушенной симметрией реализуется голдстоуновский бозон, как этого требует теорема Голдстоуна. В этой связи уместно отметить, что для его существования оказался необходимым учет не только первых нижних возбужденных одноплакетных состояний, но и самых высоколежащих состояний плакетного квинтета.

В заключение отметим, что предложенная модель описывает фазовый переход на квадратной решетке спинов в синглетное состояние по параметру магнитоупругой связи. В рамках единого подхода вычислен спектр элементарных возбуждений как в синглетной фазе, так и в АФМ-фазе. В частности, это позволило установить, что переход в АФМ-фазу из синглетной фазы связан со смягчением продольной ветви колебаний. При этом величина щели играет роль параметра, характеризующего степень удаленности синглетной фазы от точки перехода.

Авторы выражают благодарность В. И. Зиненко за полезное обсуждение результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке ККФН и РФФИ (грант № 05-02-97710) и в рамках Программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика».

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. А. Петраковский, К. А. Саблина, А. М. Воротынов и др., ЖЭТФ **96**, 1382 (1990).
2. M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
3. N. Katoh and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 4105 (1995).
4. H. Kageyama, K. Yoshimura, and R. Stern et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 3168 (1999).
5. M. B. Stone, I. Zalitznyak, D. H. Reich et al., Phys. Rev. B **64**, 144405 (2001).
6. Л. Н. Булаевский, ЖЭТФ **44**, 1008 (1963).
7. Г. А. Петраковский, К. А. Саблина, А. М. Воротынов и др., ФТТ **41**, 677 (1999).
8. H. Sakurai, N. Tsuboi, M. Kato et al., Phys. Rev. B **66**, 024428 (2002).

9. A. F. Varabanov, L. A. Maksimov, O. A. Starykh et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **2**, 8925 (1990).
10. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971), с. 1032.
11. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
12. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
13. A. Chubukov, *Phys. Rev. B* **44**, 392 (1991).
14. A. Chubukov, S. Suchdev, and J. Ye, *Phys. Rev. B* **49**, 11919 (1994).
15. Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, Москва (1974), с. 224.
16. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, *Письма в ЖЭТФ* **52**, 1179 (1991).
17. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, *ЖЭТФ* **99**, 1881 (1991).
18. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975), с. 528.