

Описание гейзенберговского ферромагнетика выше точки Кюри как спиновой жидкости

Е.В. Кузьмин

Таврический национальный университет, пр. Вернадского, 4, г. Симферополь, 95007, Украина
E-mail: ekuz@crimea.edu

Статья поступила в редакцию 11 октября 2004 г., после переработки 5 ноября 2004 г.

Рассмотрен гейзенберговский ферромагнетик (F) со спином $S = 1/2$ при температурах выше точки Кюри τ_C , находящийся в состоянии спиновой жидкости (SL). В этом состоянии дальний магнитный порядок отсутствует, сохраняется ближний порядок, спиновые корреляционные функции изотропны. Спиновая жидкость описана в рамках теории 2-го порядка методом температурных функций Грина. Найдены основные термодинамические характеристики SL как результат самосогласованного численного решения системы из трех интегральных уравнений. Определена точка Кюри τ_C^\pm , в которой статическая магнитная восприимчивость при волновом векторе $\mathbf{q} = 0$ расходится. Проведено сравнение термодинамических характеристик системы в F состоянии ($\tau \leq \tau_C$, спин-волновая теория) и в SL состоянии ($\tau \geq \tau_C^\pm$). Показано, что $\tau_C^\pm > \tau_C$ и указан вариант модификации спин-волновой теории, в котором τ_C достигает значения τ_C^\pm . В точке фазового перехода F–SL спиновые корреляционные функции терпят конечный разрыв и с ростом температуры убывают $\propto 1/\tau$. Теплоемкость ферромагнетика при $\tau \rightarrow \tau_C$ обращается в бесконечность, а в SL состоянии теплоемкость в точке τ_C^\pm остается конечной и убывает при $\tau \gg \tau_C^\pm$ пропорционально $1/\tau^2$. Для восприимчивости выполняется закон Кюри–Вейсса.

Розглянуто гейзенбергівський ферромагнетик (F) зі спіном $S = 1/2$ за температурою вище точки Кюрі τ_C , що знаходиться у стані спінової рідини (SL). В цьому стані далеке магнітне упорядкування відсутнє, зберігається ближнє магнітне упорядкування, спінові кореляційні функції ізотропні. Спінову рідину описано у межах теорії 2-го порядку методом температурних функцій Гріна. Знайдено основні термодинамічні характеристики SL як результат самоузгодженого чисельного рішення системи з трьох інтегральних рівнянь. Визначено точку Кюрі τ_C^\pm , у якій статична магнітна сприйнятливості при хвильовому векторі $\mathbf{q} = 0$ розбігається. Проведено порівняння термодинамічних характеристик системи в F стані ($\tau \leq \tau_C$, спин-хвильова теорія) та в SL стані ($\tau \geq \tau_C^\pm$). Показано, що $\tau_C^\pm > \tau_C$ та указано варіант модифікації спин-хвильової теорії, у якому τ_C досягає значення τ_C^\pm . У точці фазового переходу F–SL спінові кореляційні функції зазнають кінцевий розрив та з ростом температури зменшуються $\propto 1/\tau$. Теплоємність ферромагнетика за $\tau \rightarrow \tau_C$ обертається у безкінечність, а в SL стані теплоємність у точці τ_C^\pm залишається кінцевою та зменшується при $\tau \gg \tau_C^\pm$ пропорційно $1/\tau^2$. Для сприйнятливості виконується закон Кюрі–Вейсса.

PACS: 75.10. Jm

1. Введение

Модель Гейзенберга с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} I \sum_{\mathbf{f}, \Delta} S_{\mathbf{f}} S_{\mathbf{f}+\Delta}, \quad S = 1/2, \quad (1)$$

где $I > 0$, \mathbf{f} — узлы трехмерной кристаллической решетки, Δ — векторы, соединяющие z ближайших соседей, интенсивно исследуется на протяжении многих

десятков лет. Хотя известно точное основное ферромагнитное (F) состояние, до сих пор отсутствует точное решение модели при произвольной температуре. Ниже температуры Кюри T_C , в ферромагнитном состоянии, используется спин-волновое описание, а выше T_C , в немагнитном состоянии, характеристики системы рассчитываются с помощью высокотемпературных разложений (термодинамической теории возмущений). Оба теоретических подхода изложены в

книге Тябликова [1], в которой продемонстрирована эффективность метода двухвременных температурных функций Грина при описании свойств ферромагнетика при $T \leq T_C$.

В настоящей работе высказано предположение, что выше точки Кюри система переходит в состояние спиновой жидкости (SL), т.е. имеет место фазовый переход F–SL. Состояние SL характеризуется изотропностью спиновых корреляторов, так что в этой фазе симметрия гамильтониана восстанавливается. Спиновая жидкость описывается методом функций Грина в рамках теории 2-го порядка [2–4]. Из системы самосогласованных уравнений вычисляются термодинамические свойства SL. Сопоставление характеристик системы в F состоянии при $T \rightarrow T_C$ (снизу) и в SL состоянии при $T \rightarrow T_C$ (сверху) показывает, что в точке Кюри происходит скачок (разрыв) корреляционных функций и теплоемкости.

Далее будем использовать безразмерный гамильтониан $h = \mathcal{H}/zI$, все энергетические параметры обезразмериваются на величину zI , в том числе и температура $\tau = k_B T/zI$, $\tau_C = k_B T_C/zI$. Энергия системы в единицах I на одну связь представима в виде

$$\epsilon(\tau) = \frac{\langle H \rangle}{\frac{1}{2}zNI} = -[K_1(\tau) + L_1(\tau)], \quad (2)$$

где

$$K_1 = \frac{1}{N} \sum_f \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \langle S_f^+ S_{f+\Delta}^- \rangle, \\ L_1 = \frac{1}{N} \sum_f \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \langle S_f^z S_{f+\Delta}^z \rangle \quad (3)$$

– поперечный и продольный корреляторы в первой координационной зоне (для ближайших соседей), N – число узлов в решетке, подразумевается термодинамический предел $N \rightarrow \infty$. Представление (2) является формально точным. Поведение корреляторов существенно различно в F ($\tau \leq \tau_C$) и SL ($\tau \geq \tau_C$) состояниях.

Следует подчеркнуть, что в работе используется безразмерная температура τ и безразмерная температура Кюри τ_C , что дает возможность применения теории к широкому классу веществ. В магнитных диэлектриках величина температуры Кюри T_C может быть самой разной – от десятков до сотен градусов Кельвина. Можно выделить ферромагнетики с достаточно низкими значениями T_C : например, в соединениях $\text{CuV}_x\text{Cr}_{2-x}\text{S}_4$ в зависимости от допирования $T_C = 8\text{--}75$ К, в соединениях двухвалентного европия EuF_2 , EuI_2 , EuSe T_C равна соответственно 2, 5 и 7 К и т.д. [6].

2. Ферромагнитное состояние и спин-волновая теория

Чтобы избежать отдаленных ссылок на стандартную спин-волновую теорию ферромагнетизма, приведем ее основные следствия. Хорошо известно, что она является теорией 1-го порядка (линейная теория спиновых волн), ибо уравнение движения для спинового оператора S_f^+ линейризуется с использованием расщепления Тябликова. Коммутаторная функция Грина имеет вид

$$\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}^F = \frac{2\bar{s}}{\omega - \epsilon_{\mathbf{q}}}, \quad \epsilon_{\mathbf{q}} = \bar{s}(1 - \gamma_{\mathbf{q}}), \quad (4)$$

где $\bar{s} = \bar{s}(\tau) = \langle S_f^z \rangle$, $\bar{s}(0) = 1/2$ (средние понимаются в смысле квазисредних Боголюбова), $S_{\mathbf{q}}^+$ – фурье-образ спинового оператора,

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} \exp(i\mathbf{q}\Delta).$$

Используя спектральную теорему, получаем уравнение для параметра порядка \bar{s} :

$$\bar{s} = \frac{1/2}{\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \text{cth} \left(\frac{\bar{s}(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{2\tau} \right)} \quad (5)$$

и выражение для поперечного коррелятора:

$$K_1(\tau) = 2\bar{s} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\gamma_{\mathbf{q}}}{e^{\epsilon_{\mathbf{q}}/\tau} - 1}, \quad K_1(0) = 0. \quad (6)$$

При низких температурах из (5) следует «закон Блоха 3/2». Температура Кюри τ_C определяется как критическая температура, при которой исчезает намагниченность ферромагнетика, т.е. $\bar{s} \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \tau_C$. В этом пределе, разлагая котангенс в ряд, из (5) и (6) получаем

$$\tau_C = \frac{1}{4W}, \quad K_1(\tau_C) = \frac{W-1}{2W}, \quad (7)$$

где

$$W = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 - \gamma_{\mathbf{q}}} \quad (8)$$

– интеграл Ватсона ($W = 1,516$ для простой кубической решетки). В окрестности τ_C параметр порядка обращается в нуль корневым образом:

$$\bar{s}(\tau) = A\sqrt{\tau_C - \tau}, \quad A = \sqrt{3}, \quad \tau \rightarrow \tau_C. \quad (9)$$

К сожалению, в рамках спин-волновой теории не существует корректного определения коррелятора L_1 (его поведение мы обсудим далее). Поэтому

энергию ферромагнетика рассматривают как идеальный бозе-газ магнонов с законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{q}}$

$$\varepsilon_F(\tau) = \varepsilon_F(0) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} n(\varepsilon_{\mathbf{q}}),$$

$$n(\varepsilon_{\mathbf{q}}) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\tau}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (10)$$

где $\varepsilon_F(0) = -1/4$ — энергия основного состояния. Располагая решением $\bar{s}(\tau)$ уравнения (5), можно вычислить удельную теплоемкость

$$c_F(\tau) = k_B \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial \tau} = \begin{cases} a \left(\frac{\tau}{\tau_C}\right)^{3/2} + b \left(\frac{\tau}{\tau_C}\right)^{5/2} + \dots, & \tau \ll \tau_C, \\ \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\tau_C}{\sqrt{\tau_C - \tau}}, & \tau \rightarrow \tau_C, \end{cases} \quad (11)$$

которая расходится в точке Кюри τ_C .

В ферромагнитном состоянии поперечный коррелятор $K_1(0) = 0$, является возрастающей функцией температуры ($K_1 \propto \tau^{3/2}$ при $\tau \rightarrow 0$) и достигает максимума в точке фазового перехода τ_C . Поведение продольного коррелятора противоположно: он максимален в основном состоянии $L_1(0) = 1/4$ и уменьшается с ростом температуры, однако температурная зависимость $L_1(\tau)$ в общем неизвестна. Если воспользоваться точным выражением для первого момента

$$M_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \left\langle \left(\frac{\partial S_{\mathbf{f}}^+}{\partial t} \right) S_{\mathbf{f}}^- \right\rangle = \frac{\bar{s}}{2} + \frac{K_1}{2} + L_1$$

и его спектральным представлением через функцию Грина (4)

$$M_1^{\text{Sp}} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega J(\omega) d\omega,$$

$$J(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(\omega/\tau)}{\exp(\omega/\tau) - 1} \left(-\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega+i0}^F,$$

то из равенства $M_1 = M_1^{\text{Sp}}$ получаем

$$\frac{\bar{s}}{2} + \frac{K_1}{2} + L_1 = 2\bar{s}^2 \left[1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) n(\varepsilon_{\mathbf{q}}) \right]. \quad (12)$$

Соотношение (12) позволяет установить температурное поведение продольного коррелятора L_1 в рамках спин-волновой теории. При $\tau \rightarrow \tau_C$, $\bar{s} \rightarrow 0$ правая

часть (12) обращается в нуль и, следовательно, $L_1(\tau_C) = -K_1(\tau_C)$, т.е. продольный коррелятор становится отрицательным. Этот эффект (возникновение ближнего «антиферромагнитного» порядка) неоднократно подвергался критике (см. [1]) и свидетельствует о приближенном характере линейной теории спиновых волн. Более серьезные претензии к этой теории состоят в том, что при приближении к τ_C существенно проявляется взаимодействие спиновых волн и их затухание. Принято считать, что спин-волновая теория справедлива при $\tau \leq (2/3)\tau_C$ [5,6]. Тем не менее ее результаты будут служить ориентиром при сравнении с теорией спиновой жидкости.

3. Спиновая жидкость. Функция Грина и корреляционные функции

При температурах выше температуры Кюри ферромагнетик переходит в немагнитное состояние с ближним порядком. Предполагается, что возникает состояние спиновой жидкости. Спиновая жидкость определяется как пространственно-однородная (в среднем) спиновая система, в которой корреляционные функции изотропны

$$K_R = \langle S_{\mathbf{f}}^+ S_{\mathbf{f}+R}^- \rangle = 2 \langle S_{\mathbf{f}}^z S_{\mathbf{f}+R}^z \rangle, \quad \langle S_{\mathbf{f}}^z \rangle = \bar{s} \equiv 0, \quad (13)$$

зависят только от модуля расстояния между узлами $R = |\mathbf{R}|$ ($K_0 = 1/2$ для спина $S = 1/2$), а среднее для любой компоненты оператора спина на узле решетки равно нулю $\langle S_{\mathbf{f}}^{\alpha} \rangle = 0$, $\alpha = +, -, z$. Выражение для энергии (2) в SL состоянии принимает вид

$$\varepsilon_{SL}(\tau) = -\frac{3}{2} K_1(\tau), \quad \tau > \tau_C. \quad (14)$$

Теория SL основана на уравнениях движения 2-го порядка для спиновых операторов и их линеаризации с корректирующими множителями. Функция Грина имеет вид

$$\langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega}^{SL} = \frac{2K_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (15)$$

$$\Omega_{\mathbf{q}}^2 = \lambda^2 E_{\mathbf{q}}^2, \quad E_{\mathbf{q}}^2 = (1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 + \delta - \gamma_{\mathbf{q}}).$$

Здесь K_1 — поперечный коррелятор для ближайших соседей ($K_1 \geq 0$), $\lambda^2 = \alpha_1 K_1$, где α_1 — корректирующий множитель, возникающий при расцеплении трехцентровых средних, $(1 + \delta)$ — сложная комбинация из корреляционных функций в «расширенном» кластере (во 2-й и 3-й координационных зонах). Функция Грина (15) зависит от трех температурно-зависящих параметров $K_1(\tau)$, $\lambda(\tau)$, $\delta(\tau)$ (либо α_1 , λ , δ), которые должны вычисляться самосогласованно.

Функции Грина (15) соответствует спектральная интенсивность

$$J_{SL}(\mathbf{q}, \omega; \tau) = \frac{\exp(\omega/\tau)}{\exp(\omega/\tau) - 1} \times \frac{K_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\Omega_{\mathbf{q}}} [\delta(\omega - \Omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \Omega_{\mathbf{q}})], \quad (16)$$

по которой находим фурье-образ корреляционной функции

$$\langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \equiv K(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} J_{SL}(\mathbf{q}, \omega; \tau) d\omega = \frac{K_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\Omega_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \left(\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right), \quad \tau > \tau_C. \quad (17)$$

Располагая выражением (17), можно вычислить любые пространственные корреляционные функции

$$K_R = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}R} K(\mathbf{q}), \quad K(\mathbf{q}) = \sum_R e^{-i\mathbf{q}R} K_R, \quad (18)$$

в том числе

$$K_0 = \frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_0(\lambda, \delta; \tau), \quad (19)$$

$$K_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_1(\lambda, \delta; \tau), \quad (20)$$

$$K_t = \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta, \Delta'} K_{\Delta-\Delta'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}}^2 K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_2(\lambda, \delta; \tau), \quad (21)$$

где

$$I_n(\lambda, \delta; \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\delta)} \gamma_{\mathbf{q}}^n \operatorname{cth} \left(\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau} \right), \quad (22)$$

$$E_{\mathbf{q}}(\delta) = \sqrt{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 + \delta - \gamma_{\mathbf{q}})}, \quad n = 0, 1, 2.$$

Анализ показывает [2-4], что для самосогласованного вычисления параметров K_1 , λ и δ недостаточно уравнений (19)-(21) и необходимо еще одно уравнение. Таковым является уравнение для второго момента, точное выражение для которого (как результат прямого вычисления) в SL состоянии имеет вид

$$M_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \left\langle \left(-\frac{\partial^2 S_{\mathbf{f}}^+}{\partial t^2} \right) S_{\mathbf{f}}^- \right\rangle = \frac{1}{2} \left(K_t - \frac{K_1}{z} \right), \quad \tau > \tau_C. \quad (23)$$

С другой стороны, M_2 можно вычислить из спектрального представления

$$M_2^{\text{Sp}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 J(\mathbf{q}, \omega; \tau) d\omega,$$

$$J(\mathbf{q}, \omega; \tau) = \frac{\exp(\omega/\tau)}{\exp(\omega/\tau) - 1} \left(-\frac{1}{\pi} \right) \operatorname{Im} \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega+i0}.$$

Используя формулу (16) для $J_{SL}(\mathbf{q}, \omega; \tau)$, находим

$$M_2^{\text{Sp}} = \lambda K_1 P(\lambda, \delta; \tau),$$

$$P(\lambda, \delta; \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) E_{\mathbf{q}}(\delta) \operatorname{cth} \left(\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau} \right). \quad (24)$$

Приравнявая $M_2 = M_2^{\text{Sp}}$, получаем уравнение

$$I_2 - \frac{I_1}{z} = 2\lambda^2 P \quad (25)$$

(аргументы у функций опущены).

Таким образом, замкнутое описание свойств спиновой жидкости определяется самосогласованным решением системы трех интегральных уравнений (19), (20) и (25). Запишем эту систему относительно λ , δ и α_1 в виде ($K_1 = \lambda^2 / \alpha_1$):

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} &= \frac{\lambda}{\alpha_1} I_0(\lambda, \delta; \tau), & A \\ \lambda &= I_1(\lambda, \delta; \tau), & B \\ 2\lambda^2 P(\lambda, \delta; \tau) &= I_2(\lambda, \delta; \tau) - \frac{I_1(\lambda, \delta; \tau)}{z}. & C \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

При вычислениях суммирование по зоне Бриллюэна заменяется интегрированием с плотностью состояний $D(\gamma)$, соответствующей закону дисперсии $\gamma_{\mathbf{q}}$ в трехмерной решетке. Фигурирующие в (26) выражения принимают вид

$$I_n(\lambda, \delta; \tau) = \int_{-1}^1 D(\gamma) \frac{1 - \gamma}{E(\gamma, \delta)} \gamma^n \operatorname{cth} \left(\frac{\lambda E(\gamma, \delta)}{2\tau} \right) d\gamma, \quad n = 0, 1, 2,$$

$$P(\lambda, \delta; \tau) = \int_{-1}^1 D(\gamma) (1 - \gamma) E(\gamma, \delta) \operatorname{cth} \left(\frac{\lambda E(\gamma, \delta)}{2\tau} \right) d\gamma, \quad (27)$$

$$E(\gamma, \delta) = \sqrt{(1 - \gamma)(1 + \delta - \gamma)}.$$

Тем самым вместо высокотемпературных разложений при $\tau > \tau_C$ имеем температурное описание системы, основанное на концепции спиновой жидкости и ее следствий, в виде системы уравнений (26).

4. Магнитная восприимчивость и температура Кюри спиновой жидкости

Безразмерная динамическая магнитная восприимчивость, по определению [1], равна

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega+i0}. \quad (28)$$

В SL состоянии из-за изотропности спиновых корреляторов $\chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega) = \chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega)/2$.

Статическую восприимчивость ($\omega = 0$) спиновой жидкости находим по функции Грина (15):

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, 0) \equiv \chi(\mathbf{q}; \tau) = \frac{2}{\alpha_1} \frac{1}{1 - \gamma_{\mathbf{q}} + \delta}, \quad \tau > \tau_C, \quad (29)$$

где $\alpha_1 = \alpha_1(\tau)$, $\delta = \delta(\tau)$. Определим температуру Кюри спиновой жидкости τ_C^{\pm} соотношением

$$\chi^{-1}(0; \tau_C^{\pm}) = 0, \quad (30)$$

которое означает, что статическая восприимчивость при $\mathbf{q} = 0$ расходится при $\tau \rightarrow \tau_C^{\pm}$ (сверху, т.е. при понижении температуры). Поскольку $\gamma_0 = 1$, то из (29) и (30) следует, что $\delta(\tau_C^{\pm}) = 0$. В окрестности τ_C^{\pm} имеем следующее поведение восприимчивости:

$$\chi(0; \tau) = \frac{2}{\alpha_1(\tau_C^{\pm})\delta'(\tau_C^{\pm})} \frac{1}{\tau - \tau_C^{\pm}}, \quad (31)$$

где $\delta'(\tau)$ – производная функции в точке τ_C^{\pm} .

Для вычисления τ_C^{\pm} необходимо решить систему уравнений (26) при $\delta = 0$. Подлежат вычислению $\lambda(\tau_C^{\pm})$, $\alpha_1(\tau_C^{\pm})$ и τ_C^{\pm} . Численное решение системы для простой кубической решетки (ПКР) с $z = 6$ приводит к результату

$$\begin{aligned} \tau_C^{\pm} &= 0,171, \quad \lambda(\tau_C^{\pm}) = 0,403, \\ \alpha_1(\tau_C^{\pm}) &= 1,332, \quad K_1(\tau_C^{\pm}) = 0,122. \end{aligned} \quad (32)$$

Ферромагнитная точка Кюри, вычисленная по спин-волновой теории, для ПКР имеет значение $\tau_C = 0,165$, а $K_1(\tau_C) = 0,174$. Из сопоставления результатов спин-волновой теории и теории спиновой жидкости (32) следует, что $\tau_C^{\pm} > \tau_C$; такое неравенство является типичным для высокотемпературных разложений [1,5,6].

Хотя полученная разность $\Delta\tau = \tau_C^{\pm} - \tau_C = 0,006$ мала, можно считать, что истинной точкой Кюри является τ_C^{\pm} . Можно предложить вариант теории, в котором τ_C достигает значения τ_C^{\pm} . Если при построении теории спиновых волн использовать расщепление Келлена [1], то получаем следующую модификацию спектра

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{q}} = \bar{s}(1 + aK_1)(1 - \gamma_{\mathbf{q}}), \quad (33)$$

где a – априори неизвестный параметр расщепления Келлена, выбор которого неоднозначен. Уравнение (5) со спектром (33) приводит к выражению для температуры Кюри

$$\tau_C = \frac{1 + aK_1(\tau_C)}{4W}, \quad (34)$$

причем значение $K_1(\tau_C)$ остается прежним (см. (7)). Из условия $\tau_C = \tau_C^{\pm} = 0,171$ (для ПКР) можно найти параметр расщепления Келлена a , он оказывается равным 0,213. Этим приемом мы «сшиваем» значения точек Кюри, ликвидируя «ничейную» область $\Delta\tau$. Тогда в соотношении (9) коэффициент $A^2 = 3/1,037 = 2,89$. Скачок $\Delta K_1 = 0,052$ в точке Кюри имеет принципиальное значение.

Выражение для восприимчивости (31) в малой окрестности точки τ_C^{\pm} имеет вид закона Кюри–Вейсса. Высокотемпературную асимптотику для $\chi(\tau) = 2/\alpha_1(\tau)\delta(\tau)$ при $\tau \gg \tau_C$ можно найти аналитически. В этом пределе $\alpha_1(\tau) \rightarrow 1$ (спины становятся практически нескоррелированными), $\delta(\tau) \gg (1 - \gamma_{\mathbf{q}})$, аргумент котангенса $\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)/2\tau \ll 1$. Разлагая котангенс в ряд, из уравнений (19) и (20) или, эквивалентно, из (A) и (B) в (26), находим

$$\delta(\tau) \rightarrow 4\tau, \quad \lambda(\tau) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{8z\tau}}, \quad K_1(\tau) \rightarrow \frac{1}{8z\tau}, \quad \tau \gg \tau_C. \quad (35)$$

Из полученной асимптотики следует закон Кюри $\chi(\tau) \rightarrow 1/2\tau$, а также ограниченность спектра возбуждений $\Omega_{\mathbf{q}} = \lambda E_{\mathbf{q}}(\delta) \rightarrow \sqrt{(1 - \gamma_{\mathbf{q}})/2z}$.

5. Результаты численного расчета термодинамических свойств спиновой жидкости

Система уравнений (26) решалась численно в программе MathCAD при значении $\tau_C = \tau_C^{\pm} = 0,171$ в зависимости от температуры $t = \tau - \tau_C$. Найденные значения параметров $\lambda(t)$, $\alpha_1(t)$ и $K_1(t)$ представлены на рис. 1. Параметр $\delta(t)$ практически линейно зависит от t . Ниже приводятся основные характеристики спиновой жидкости.

Восприимчивость. Обратная восприимчивость $\chi^{-1}(\tau) = \alpha_1(\tau)\delta(\tau)/2$ линейна во всем температурном диапазоне и подчиняется закону Кюри–Вейсса:

$$\chi^{-1}(\tau) = 2(\tau - \tau_C^{\pm}).$$

Спиновые корреляции между ближайшими соседями описываются поперечным коррелятором $K_1(\tau)$. В точке фазового перехода скачок поперечного коррелятора $\Delta K_1(\tau_C)$ равен 0,052, его температурное поведение (с асимптотикой $\propto 1/\tau$) представлено на рис. 2.

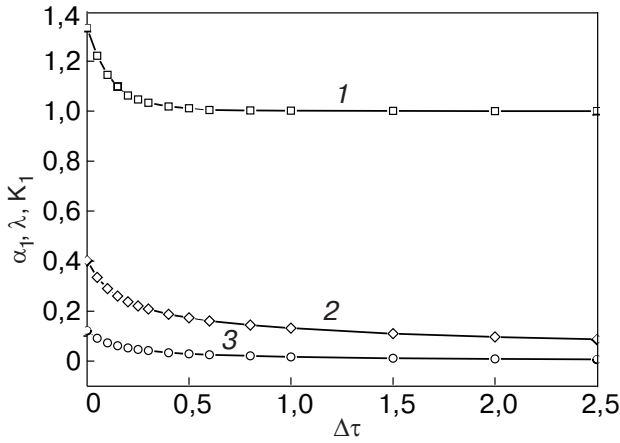


Рис. 1. Зависимость параметра расщепления α_1 (1), параметра «жесткости» спектра λ (2) и поперечного коррелятора между ближайшими соседями K_1 (3) от разности температур $\Delta\tau = \tau - \tau_C^+$ в состоянии спиновой жидкости.

Теплоемкость спиновой жидкости

$$c_{SL}(\tau) = k_B \left(\frac{\partial \epsilon_{SL}}{\partial \tau} \right) = k_B \frac{3}{2} \left(- \frac{\partial K_1(\tau)}{\partial \tau} \right), \quad (36)$$

асимптотически $c_{SL}(\tau) \propto 1/\tau^2$, а в точке фазового перехода ее численное значение равно

$$c_{SL}(\tau_C) = \frac{3}{2} k_B 0,6 = 0,9 k_B.$$

Теплоемкость в ферромагнитной фазе при $\tau \rightarrow \tau_C$ в соответствии с формулой (11) расходится, так что имеем бесконечный скачок теплоемкости в точке фазового перехода. Поведение удельной теплоемкости c/k_B во всем температурном интервале показано на рис. 3. Приведенные результаты температурного поведения $\chi(\tau)$, $K_1(\tau)$ и $c_{SL}(\tau)$ достаточно полно характеризуют спиновую жидкость.

Дальние пространственные спиновые корреляции удобно характеризовать *корреляционной длиной*. В соответствии с формулами (17) и (18) имеем

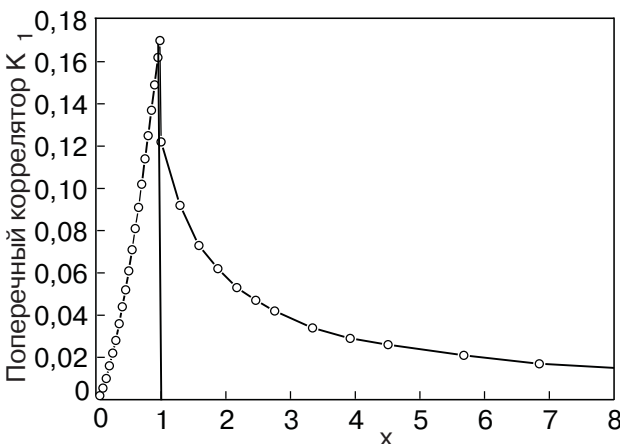


Рис. 2. Зависимость поперечного коррелятора K_1 от относительной температуры $x = \tau/\tau_C$

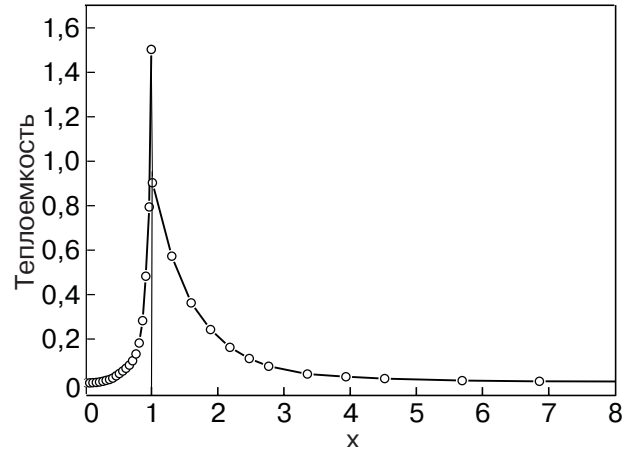


Рис. 3. Зависимость удельной теплоемкости от относительной температуры $x = \tau/\tau_C$

$$K_R = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}R} \frac{K_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\Omega_{\mathbf{q}}} \text{cth} \left(\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right),$$

где суммирование ведется по зоне Бриллюэна. Сумма заменяется интегралом, причем главный вклад в интеграл дает область в окрестности $\mathbf{q} = 0$, где $1 - \gamma_{\mathbf{q}} \approx \mathbf{q}^2/z$ (для ПКР) и $\Omega_{\mathbf{q}}/2\tau \ll 1$. Используя разложение котангенса для малого значения аргумента, получаем

$$K_R \approx \frac{v}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}R} \frac{K_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})}{\Omega_{\mathbf{q}}} \frac{2\tau}{\Omega_{\mathbf{q}}} = \frac{2\tau z}{\alpha_1(\tau)} \frac{v}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \frac{e^{i\mathbf{q}R}}{q^2 + \kappa^2}. \quad (37)$$

В подынтегральном выражении (37) введена, по определению, корреляционная длина ξ (в единицах постоянной решетки):

$$\frac{1}{\xi^2} = \kappa^2 = z\delta; \quad \xi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{z\delta(\tau)}} = \frac{1}{2\sqrt{z}} \frac{1}{\sqrt{\tau - \tau_C^+}}. \quad (38)$$

Интеграл в выражении (37) хорошо известен (см., например, [6]), и для больших значений R получаем

$$K_R \approx \frac{2\tau z}{\alpha_1(\tau)} \frac{\exp(-R/\xi(\tau))}{R}. \quad (39)$$

Расходимость корреляционной длины при $\tau \rightarrow \tau_C^+$ свидетельствует о фазовом переходе спиновой жидкости в ферромагнитное состояние с дальним порядком.

Рассмотрим еще одну характеристику системы — среднее значение квадрата полного спина $\langle S_{\text{tot}}^2 \rangle$, отнесенное к одному спину, т.е. функцию

$$S^2(\tau) \equiv \frac{1}{N} \langle \mathbf{S}_{\text{tot}}^2 \rangle. \quad (40)$$

В ферромагнитном основном состоянии квадрат полного спина равен $S(S+1) \approx N^2/4$, $S^2(0) = N/4$ является макроскопически большой величиной и в термодинамическом пределе $S^2(0) \rightarrow \infty$. Запишем функцию $S^2(\tau)$ в явном виде

$$S^2(\tau) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{f,m} S_f S_m \right\rangle = \sum_R \frac{1}{N} \sum_f \langle S_f S_{f+R} \rangle = \frac{3}{2} \sum_R K_R(\tau), \quad (41)$$

где использовано свойство изотропности спиновых корреляторов, характерное для SL. Сопоставляя (41) с определениями (18), получаем

$$S^2(\tau) = \frac{3}{2} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} K(\mathbf{q}) = \frac{3}{2} K(0). \quad (42)$$

Из выражения (17) для $K(\mathbf{q})$ находим в указанном пределе

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} K(\mathbf{q}) = \frac{2\tau}{\alpha_1(\tau)\delta(\tau)} = \chi(\tau)\tau, \quad (43)$$

$$S^2(\tau) = \frac{3}{2} \chi(\tau)\tau, \quad \tau \geq \tau_C^+.$$

Из выражения (43) следует, что на пороге ферромагнитной неустойчивости при $\tau \rightarrow \tau_C^+$ функция $S^2(\tau)$ расходится (становится макроскопически большой, как и в F состоянии), а при $\tau \rightarrow \infty$ ($\tau \gg \tau_C^+$) функция $S^2(\tau) \rightarrow 3/4$, т.е. имеем систему независимых спинов (истинный парамагнетик).

В SL состоянии все пространственные спиновые корреляторы положительны, в частности продольный коррелятор для ближайших соседей $L_1 = K_1/2 > 0$. Однако по спин-волновой теории $L_1(\tau_C) < 0$. Как можно интерпретировать знак L_1 ? Рассмотрим волновую функцию пары ближайших спинов (1 и 2) в немагнитном состоянии

$$|\Psi\rangle = \alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\downarrow\rangle + \gamma|\uparrow\downarrow\rangle + \delta|\downarrow\uparrow\rangle.$$

Из условия $\langle \Psi | S_{1z}^2 | \Psi \rangle = 0$ следует $\alpha^2 = \beta^2$, $\gamma^2 = \delta^2$. Продольный и поперечный корреляторы соответственно равны

$$L_1 = \langle \Psi | S_1^z S_2^z | \Psi \rangle = \frac{1}{2}(\alpha^2 - \gamma^2),$$

$$K_1 = \langle \Psi | S_1^+ S_2^- | \Psi \rangle = \gamma\delta.$$

Возможны решения $\delta = \pm\gamma$. В рассматриваемом случае $K_1 = \gamma^2 > 0$. Знак L_1 определяется разностью статистических весов состояний с параллельными (α^2) и антипараллельными (γ^2) спинами. При положительном обменном взаимодействии «память» о ферромагнитном упорядочении должна сохранять-

ся в точке фазового перехода (и выше ее), поэтому $\alpha^2 > \gamma^2$, $L_1 > 0$. Результат спин-волновой теории для L_1 в окрестности точки фазового перехода («антиферромагнитный» ближний порядок) неверен. Этот вывод еще раз подчеркивает приближенный характер спин-волновой теории.

6. Заключение

Предложено описание гейзенберговского ферромагнетика (обменный параметр $I > 0$ для ближайших соседей) выше точки Кюри как состояния спиновой жидкости. Фактически мы имеем дело с неупорядоченной системой. Хотя обменные взаимодействия являются короткодействующими, тем не менее в системе возникают кооперативные явления — взаимодействие «эстафетным образом» передается всей решетке. В F состоянии устанавливается дальний магнитный порядок, однако в SL состоянии порядок устанавливается только на конечных расстояниях, т.е. имеем *промежуточный* или *ближний* порядок.

Оба состояния (F состояние при $\tau \leq \tau_C$ и SL состояние при $\tau \geq \tau_C^+$) описываются методом температурных функций Грина в рамках линейной теории 1-го и 2-го порядка соответственно. Этим методом получено полное и самосогласованное описание термодинамических свойств спиновой жидкости. Следует подчеркнуть, что здесь проведено лишь сопоставление результатов спин-волновой теории ферромагнетизма и теории спиновой жидкости: в точке фазового перехода обнаружен скачок спиновых корреляционных функций и теплоемкости. Хотя, как отмечает Маттис [7], до сих пор нет замкнутой теории, которая смогла бы надежно предсказывать критическую температуру произвольного трехмерного ферромагнетика, его поведение во всем температурном интервале приближенно можно описать с помощью объединения теории спиновых волн и предложенной теории спиновой жидкости в рамках единого метода функций Грина.

Автор признателен В.Н. Бержанскому за полезные дискуссии.

1. С.В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1976).
2. Е.В. Кузьмин, *ФТТ* **44**, 1075 (2002).
3. Е.В. Кузьмин, *ЖЭТФ* **123**, 149 (2003).
4. Е.В. Кузьмин, *ФНТ* **29**, 764 (2003).
5. С.В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
6. *Магнитные полупроводники — халькогенидные шпинели*, Изд-во МГУ, Москва (1981).
7. Д. Маттис, *Теория магнетизма*, Мир, Москва (1967).

Description of the Heisenberg ferromagnet above the Curie point as a spin liquid

E.V. Kuz'min

It is supposed that the Heisenberg ferromagnet (F) with $S = 1/2$ is in a spin liquid (SL) state at temperatures above the Curie point τ_C . There is no long-range magnetic order in the SL-state, but there is a short-range order and the spin correlation functions are isotropic. SL is described in the framework of the second order theory using the temperature Green functions. The main characteristics of SL are found numerically by solving a system of three self-consistent integral equations.

The Curie point τ_C^+ , at which the static magnetic susceptibility diverges at wave-vector $\mathbf{q} = 0$, is found. The Curie-Weiss law is valid for the susceptibility. The thermodynamic characteristics of the system are compared for the F-state ($\tau \leq \tau_C$, the spin-wave theory) and for the SL-state ($\tau \geq \tau_C$). It is shown that $\tau_C^+ > \tau_C$, and a variant of the spin-wave theory modification, for which τ_C reaches τ_C^+ , is given. The spin correlation functions have a finite discontinuity at the point of the F-SL phase transition and the correlators between the nearest neighbors decrease as $1/\tau$. The ferromagnetic heat capacity is infinite at $\tau \rightarrow \tau_C$, but in the SL-state it remains finite at τ_C^+ and decreases as $1/\tau^2$ at $\tau \gg \tau_C^+$.