

Квантовая спиновая жидкость и антиферромагнетизм

Е.В. Кузьмин

*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН
Академгородок, г. Красноярск, 660036, Россия
E-mail: evk@iph.krasn.ru*

*Крымский государственный гуманитарный институт
ул. Севастопольская, 2, г. Ялта, 98635, АРК, Украина
E-mail: kuzmin@cshi.crimea.edu*

Статья поступила в редакцию 18 октября 2002 г.

Развита концепция спиновой жидкости для гейзенберговского гамильтониана (спин $s = 1/2$) с антиферромагнитными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями. Спиновая жидкость описана методом функций Грина в рамках теории 2-го порядка. Приведены уравнения для самосогласованного вычисления параметров системы и ее термодинамических свойств во всем температурном интервале. Предложена версия описания спиновой системы в ПК и ОЦК решетках как пространственно однородной спиновой жидкости с конденсатом и с основным синглетным состоянием. Показано, что модуль «скачущей» намагниченности однозначно выражается через конденсат в граничной точке зоны Бриллюэна и является параметром дальнего порядка. Температурная область существования упорядоченного состояния спиновой жидкости с конденсатом ($T \leq T_0$) шире области существования двухподрешеточного антиферромагнетика ($T_0 > T_N$, где T_N — температура Нееля), а энергия — ниже. При $T > T_0$ система переходит в состояние «обычной» спиновой жидкости.

Розвинуто концепцію спінової рідини для гейзенбергівського гамільтоніана (спін $s = 1/2$) з антиферромагнітними обмінними взаємодіями між найближчими сусідами. Спінову рідину описано за методом функцій Гріна у рамках теорії 2-го порядку. Наведено рівняння щодо самоузгодженого обчислення параметрів системи та її термодинамічних властивостей у всьому температурному інтервалі. Запропоновано версію опису спінової системи у ПК та ОЦК ґратках як просторово однорідної спінової рідини з конденсатом і з основним синглетним станом. Показано, що модель «стрижкової» намагніченості однозначно виражається через конденсат у граничній точці зони Бріллюэна і є параметром дальнього порядку. Температурна область існування упорядкованого стану спінової рідини з конденсатом ($T \leq T_0$) ширше області існування двохпідґраткового антиферромагнетика ($T_0 > T_N$, де T_N — температура Нееля), а енергія — нижче. При $T > T_0$ система переходить у стан «звичайної» спінової рідини.

PACS: 75.10.Jm, 75.10.-b

1. Утверждение Маршалла и антиферромагнетизм

Строгое теоретическое описание антиферромагнитного (АФ) упорядочения все еще остается открытой проблемой, имеющей более чем полувекую историю. Интенсивное обсуждение необходимых и достаточных условий для возникновения в кристаллах дальнего АФ порядка приходится на 50-е годы, когда было дано его описание в рамках теории среднего (молекулярного) поля и создана квантовая

спин-волновая теория АФ. основополагающие работы по этой проблеме представлены в [1].

Принципиальные вопросы теории АФ обсуждаются, как правило, на базе изотропной модели Гейзенберга ($s = 1/2$) с антиферромагнитными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями (БС). Гамильтониан системы

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{f}\Delta} \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}+\Delta}, \quad \mathbf{S} = \sum_{\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \quad (1)$$

задан на идеальной решетке размерности $d = 1, 2, 3$ с периодическими граничными условиями: N — число узлов, \mathbf{f} — координаты узлов, $J > 0$ — обменные интегралы между БС, z — число БС, Δ — векторы, соединяющие БС, $\mathbf{s}_f = (\mathbf{s}_f^+, \mathbf{s}_f^-, \mathbf{s}_f^z)$ — оператор спина на узле \mathbf{f} , \mathbf{S} — оператор полного спина. Одной из основных задач является описание дальнего антиферромагнитного порядка. Свойства системы существенно зависят от ее размерности и геометрии.

По теореме Мермена — Вагнера (см. [2]) дальний магнитный порядок в одно- и двумерных системах (при короткодействующих обменных взаимодействиях) отсутствует при любых конечных температурах $T \neq 0$. Для линейной цепочки ($d = 1$) имеется точное решение Хюльтена [2]: основным состоянием является невырожденный синглет ($S = 0$) с энергией (на связь, в единицах обмена) $\epsilon_0 = 0,25 - \ln 2 = -0,4431$. В квадратной решетке ($d = 2$) только при $T = 0$ можно построить двухподрешеточное АФ состояние и в рамках спин-волновой теории вычислить его энергию ϵ_{AF} . В работе автора [3] на основе концепции спиновой жидкости (СЖ) показано, что основным состоянием спиновой системы с гамильтонианом в квадратной решетке является синглетное состояние с энергией $\epsilon_0 < \epsilon_{AF}$, $\epsilon_0 = -0,352$.

Дискуссионность проблемы дальнего АФ порядка относится, главным образом, к трехмерным системам и заключается в следующем.

С одной стороны, существует традиционный подход к описанию АФ. В альтернантных решетках* (ПК и ОЦК, а также в квадратной и линейной цепочке) возможно «шахматное» распределение спинов, которое описывается неелевской волновой функцией $|AF\rangle$ (антиферромагнетик с двумя зеркальными подрешетками A и B). Известно, что такая функция собственная только для оператора S^z с проекцией полного спина $S^z = S_A^z + S_B^z = 0$, но не является собственной ни для гамильтониана, ни для оператора \mathbf{S}^2 . Это означает, что антиферромагнитное состояние — это состояние с неопределенной мультиплетностью [4]. Однако использование приближенной неелевской функции $|AF\rangle$, в которой зафиксированы подрешетки и постулирован дальний АФ порядок, имеет свои неоспоримые достоинства, так как позволяет в рамках спин-волновой теории вычислить спектр возбуждений, энергию АФ состояния с учетом поперечных квантовых спиновых флуктуаций, подрешеточную намагниченность $\bar{S}(T)$ и температуру Нееля T_N . Теория является приближенной и справедлива только в магнитоупорядоченной фазе при $T \leq T_N$.

С другой стороны, Маршалл [5] (см. [1]) высказал теоремное утверждение о том, что основное состояние гамильтониана (1) с АФ обменными взаимодействиями J между БС на альтернантных решетках является невырожденным синглетом с $S = 0$. Оно строго доказано лишь для одномерной цепочки, а для размерностей $d = 2, 3$ возникают огромные математические трудности при построении точной синглетной функции, которая содержит факториально большое по N число парциальных синглетных функций, составляющих полный набор состояний. Отсутствие точного синглетного состояния не дает возможности непосредственно проверить утверждение Маршалла, которое имеет естественное квантовомеханическое обоснование. Действительно, гамильтониан (1) коммутирует с любой компонентой оператора полного спина \mathbf{S} и поэтому его собственные функции являются собственными функциями операторов S^z и \mathbf{S}^2 , а собственные значения $E(S)$ классифицируются по величине полного спина ($0 \leq S \leq N/2$). По Маршаллу $\min \{E(S)\} = E(0)$ соответствует основному синглетному состоянию с $S = 0$. Маршалл построил приближенную синглетную волновую функцию и вариационным методом рассчитал энергии ϵ_0 в альтернантных решетках (см. таблицу). Сравнение энергий ϵ_0 (по Маршаллу) и ϵ_{AF} показывает, что эти энергии очень близки, но в рамках сделанных приближений (а они, вообще говоря, разные) нельзя сделать окончательного заключения о типе основного состояния.

Таблица

Главные характеристики спиновой системы с антиферромагнитными обменными связями между ближайшими соседями

Тип решетки	Синглет (СЖ и СЖК)				АФ		
	$ \epsilon_0 $ [5]	$ \epsilon_0 $	$ \mathbf{m}_0 $	τ_0	$ \epsilon_{AF} $	$\bar{S}(0)$	τ_N
Квадр.	0,328	0,352	∞	—	0,335	0,3	0
ПК	0,3007	0,312	0,434	0,213	0,296	0,432	0,163
ОЦК	0,2892	0,297	0,452	0,224	0,287	0,448	0,181

Примечание: $\epsilon = \langle H \rangle / (zNJ/2)$ — энергия системы при нулевой температуре (в единицах обмена на связь) в синглетном (0) и антиферромагнитном состояниях; $|\mathbf{m}_0|$ — модуль «скачущей» намагниченности при $T = 0$; $\bar{S}(0)$ — параметр порядка АФ (подрешеточная намагниченность) при $T = 0$; $\tau_0 = T_0 / zJ$ — температура исчезновения $|\mathbf{m}|$; $\tau_N = T_N / zJ$ — температура Нееля.

* Альтернантными называются решетки, которые можно представить в виде двух эквивалентных подрешеток A и B , вставленных друг в друга так, что ближайшими соседями подрешетки A являются узлы подрешетки B и наоборот.

Возникает вопрос: можно ли найти теоретическое согласование между этими двумя подходами? Ниже на основе разработанной автором концепции спиновой жидкости предложена теоретическая версия описания свойств спиновой системы в ПК и ОЦК решетках во всем температурном интервале. Следует отметить, что концепция СЖ имеет достаточно широкую область применимости. Кроме двумерных систем, в ГЦК решетке из-за фрустрированности обменных J -связей и поперечных квантовых спиновых флуктуаций АФ состояние отсутствует при любых температурах, и система является спиновой жидкостью с основным синглетным состоянием [6]. В настоящей работе показано, что в ПК и ОЦК решетках основным является синглетное состояние (по Маршаллу), и, тем не менее, при $T \leq T_0$ в системе существует дальний порядок, который описан модулем «скачущей намагниченности». При $T > T_0$ система находится в состоянии обычной СЖ.

Ниже в рамках единого метода функций Грина [7] кратко изложены результаты спин-волновой теории и основные уравнения теории спиновой жидкости.

2. Спин-волновая теория антиферромагнетизма

На альтернатных решетках возможно «шахматное» распределение спинов «вверх» (подрешетка A , узлы α) и «вниз» (подрешетка B , узлы β) и для БС $\alpha + \Delta = \beta$, $\beta + \Delta' = \alpha'$. Удобно перейти к безразмерному гамильтониану $h = H/zJ$; тогда все энергетические параметры будут измеряться в единицах zJ , в том числе и температура $\tau = T/zJ$.

Спин-волновая теория основана на линеаризованных уравнениях 1-го порядка (расщепление Тябликова)

$$i\dot{s}_\alpha^+ = \bar{s} \left(s_\alpha^+ + \frac{1}{z} \sum_{\Delta} s_{\alpha+\Delta}^+ \right), \quad i\dot{s}_\beta^+ = -\bar{s} \left(s_\beta^+ + \frac{1}{z} \sum_{\Delta} s_{\beta+\Delta}^+ \right), \quad (2)$$

где $\langle s_\alpha^z \rangle = -\langle s_\beta^z \rangle \equiv \bar{s}$. После фурье-преобразования по подрешеткам стандартным образом находятся функции Грина

$$\begin{aligned} \langle\langle S_A^+(\mathbf{q}) | S_A^-(\mathbf{-q}) \rangle\rangle_\omega &= \frac{2\bar{s}(\omega + \bar{s})}{D(\mathbf{q}, \omega)}, \\ \langle\langle S_A^+(\mathbf{q}) | S_B^-(\mathbf{-q}) \rangle\rangle_\omega &= -\frac{2\bar{s}^2 \gamma_{\mathbf{q}}}{D(\mathbf{q}, \omega)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} D(\mathbf{q}, \omega) &= \omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2, \quad \Omega_{\mathbf{q}} = \bar{s} \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2} \equiv \bar{s} \varepsilon_{\mathbf{q}}, \\ \gamma_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{i\mathbf{q}\Delta}. \end{aligned} \quad (4)$$

По спектральной теореме вычисляются фурье-образы корреляционных функций $\langle S_A^+(\mathbf{q}) S_A^-(\mathbf{-q}) \rangle$, $\langle S_A^+(\mathbf{q}) S_B^-(\mathbf{-q}) \rangle$, и далее, используя правило сумм $\langle s_\alpha^+ s_\alpha^- \rangle = (1/2) + \bar{s}$, получаем уравнение для вычисления параметра порядка

$$\bar{s}(\tau) = \frac{1/2}{I(\tau)}, \quad I(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \left(\frac{\bar{s}(\tau) \varepsilon_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right). \quad (5)$$

Из (5) при $\tau = 0$ следует

$$\bar{s}(0) = \frac{1/2}{I_1}, \quad I_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}}}, \quad (6)$$

а при $\tau \rightarrow \tau_N$, $\bar{s} \rightarrow 0$, где $\tau_N = T_N/zJ$ — температура Нееля, имеем

$$\tau_N = \frac{1/4}{I_2}, \quad I_2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{q}}^2}. \quad (7)$$

Энергия антиферромагнетика (в единицах J на одну связь) равна

$$\begin{aligned} \varepsilon_{AF}(\tau) &= \frac{\langle H \rangle}{(1/2)zN \cdot J} \approx \\ &\approx - \left[\bar{s}^2(\tau) + \bar{s}(\tau) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\gamma_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \frac{\bar{s}(\tau) \varepsilon_{\mathbf{q}}}{2\tau} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Для трехмерных альтернатных решеток получены следующие численные результаты (суммы по первой зоне Бриллюэна заменены интегралами с плотностями состояний, приведенными в Приложении):

$$\text{ПК } (z = 6): \varepsilon_{AF}(0) = -0,297, \bar{s}(0) = 0,432,$$

$$\tau_N = 0,163;$$

$$\text{ОЦК } (z = 8): \varepsilon_{AF}(0) = -0,287, \bar{s}(0) = 0,448, \quad (9)$$

$$\tau_N = 0,181.$$

3. Квантовая спиновая жидкость

Рассмотрим спиновую систему с гамильтонианом (1) в решетке произвольной размерности и геометрии. Определим *спиновую жидкость* как в среднем пространственно однородную систему без разруше-

ния спиновой симметрии, в которой спиновые корреляционные функции изотропны:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^x s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^x \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^y s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^y \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^z \rangle \equiv \frac{1}{4} K_r \end{aligned} \quad (10)$$

и зависят только от модуля расстояния $r = |\mathbf{r}|$, причем $K_0 = 1$ (правило сумм); средние для любой компоненты спина на узле решетки и для любой компоненты оператора полного спина равны нулю:

$$\langle s_{\mathbf{f}}^{\alpha} \rangle = 0, \quad \langle S^{\alpha} \rangle = 0, \quad \alpha = x, y, z \text{ или } +, -, z; \quad (11)$$

равны нулю средние от произведений спиновых операторов на нечетном числе *разных* узлов

$$\langle s_{\mathbf{f}}^{\alpha} s_{\mathbf{m}}^{\beta} s_{\mathbf{n}}^{\gamma} \rangle = 0, \quad \mathbf{f} \neq \mathbf{m} \neq \mathbf{n}, \dots \quad (12)$$

Здесь и далее символ $\langle \dots \rangle$ означает термодинамическое среднее при температуре $\tau = T/zJ$ и по волновой функции основного состояния при $\tau = 0$.

На основе гамильтониана (1) и постулатов (10)–(12) необходимо описать всю совокупность свойств СЖ: основное состояние, спектр возбуждений и термодинамику. Следует отметить, что постулат (12) введен автором впервые; следствия из него будут продемонстрированы ниже. Далее будет показано, что основным является синглетное состояние с полным спином $S = 0$, что эквивалентно $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{\tau=0} = 0$.

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

$$\varepsilon = \frac{\langle H \rangle}{(1/2)zNJ} = -\frac{3}{4} K_1, \quad (13)$$

где $K_{|\Delta|} = -K_1$ ($K_1 > 0$) является коррелятором между БС. Для описания СЖ состояния переходим к фурье-образам спиновых операторов и вводим фурье-образ корреляционной функции

$$\begin{aligned} K(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} K_r = 4 \langle s^z(\mathbf{q}) s^z(-\mathbf{q}) \rangle = \\ &= 2 \langle s^+(\mathbf{q}) s^-(\mathbf{q}) \rangle, \quad K_r = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} K(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (14)$$

с очевидным свойством $K(\mathbf{q}) = K(-\mathbf{q})$. Для вычисления $K(\mathbf{q})$ используем метод двухвременных температурных функций Грина [7]. Из-за изотропности корреляторов достаточно вычислить запаздывающую коммутаторную функцию Грина

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

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

Уравнения 2-го порядка и их линейаризация

Теория спиновой жидкости основана на уравнениях не ниже 2-го порядка, поскольку $\langle s_{\mathbf{r}}^{\alpha} \rangle = 0$ и линейаризацию уравнений 1-го порядка (как это делается в спин-волновой теории) осуществить невозможно. Точные уравнения движения имеют вид ($\hbar = 1$)

$$i\dot{s}_{\mathbf{f}}^{+} = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} (s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\Delta}^{+} - s_{\mathbf{f}+\Delta}^z s_{\mathbf{f}}^{+}), \quad (15)$$

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

$$i\dot{M}_{\mathbf{f}} = -\frac{\partial^2 s_{\mathbf{f}}^z}{\partial t^2} = \frac{1}{2z^2} \sum_{\Delta} (s_{\mathbf{f}}^z - s_{\mathbf{f}+\Delta}^z) + R_{\mathbf{f}}, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} R_{\mathbf{f}} &= \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta \neq \Delta'} [s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{f}+\Delta}^{+} s_{\mathbf{f}+\Delta'}^{-} + (s_{\mathbf{f}+\Delta-\Delta'}^z - s_{\mathbf{f}+\Delta'}^z) \times \\ &\quad \times s_{\mathbf{f}}^{+} s_{\mathbf{f}+\Delta}^{-} - s_{\mathbf{f}+\Delta}^z s_{\mathbf{f}}^{+} s_{\mathbf{f}+\Delta-\Delta'}^{-}]. \end{aligned} \quad (17)$$

Проводя линейаризацию оператора $R_{\mathbf{f}}$ по схеме

$$\begin{aligned} s_{\mathbf{f}}^z s_{\mathbf{n}}^{+} s_{\mathbf{m}}^{-} &\approx s_{\mathbf{f}}^z \alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|} \langle s_{\mathbf{n}}^{+} s_{\mathbf{m}}^{-} \rangle = \frac{1}{2} \alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|} K_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|} s_{\mathbf{f}}^z, \\ \mathbf{f} &\neq \mathbf{n} \neq \mathbf{m}, \end{aligned} \quad (18)$$

где $\alpha_{|\mathbf{n}-\mathbf{m}|}$ – параметры, корректирующие расщепление, после фурье-преобразования получаем функцию Грина линейной теории 2-го порядка в виде

$$\begin{aligned} G(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{A_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \Omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad A_{\mathbf{q}} = \frac{K_1}{2} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}), \\ \gamma_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{i\mathbf{q}\Delta}. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь

$$\Omega_{\mathbf{q}}^2 = \lambda^2 (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) (|\varepsilon_{\min}| + \gamma_{\mathbf{q}} + \delta), \quad \lambda^2 = \frac{\alpha_1 K_1}{2}, \quad (20)$$

где α_1 – корректирующий множитель для БС, ε_{\min} – нижняя граница спектра $\gamma_{\mathbf{q}}$, а параметр δ представляет собой сложную конструкцию из корреляторов в 1-й, 2-й и т. д. координационных зонах, умноженных на соответствующие корректирующие множители. Тем самым параметр δ отра-

жает эффективные корреляции в «расширенном» кластере и далее будет самосогласованно вычислен (его явный вид не существует). Спектральная интенсивность функции Грина (19) равна

$$J(\mathbf{q}, \omega; \tau) = \frac{e^{\omega\tau}}{e^{\omega\tau} - 1} \frac{A_{\mathbf{q}}}{2\Omega_{\mathbf{q}}} [\delta(\omega - \Omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \Omega_{\mathbf{q}})],$$

$$\Omega_{\mathbf{q}} \geq 0. \quad (21)$$

По спектральной теореме для одновременного среднего получаем

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

$$= \frac{A_{\mathbf{q}}}{2\Omega_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth}\left(\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau}\right)$$

или

$$K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\delta)} \operatorname{cth}\left(\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau}\right), \quad \Omega_{\mathbf{q}} \equiv \lambda E_{\mathbf{q}}(\delta). \quad (22)$$

Полученное выражение (22) свидетельствует о том, что в предлагаемой версии теории спиновой жидкости фигурируют три неизвестных параметра, являющиеся функциями температуры: $K_1(\tau)$ — модуль коррелятора между БС, $\lambda(\tau)$ — параметр «жесткости» спектра возбуждений и $\delta(\tau)$ — «псевдощель» в спектре. Все они должны быть вычислены самосогласованно по трем уравнениям (см. далее), причем $\delta = \delta(\tau) \geq 0$, что необходимо для условия $\Omega_{\mathbf{q}} \geq 0$ или $E_{\mathbf{q}}(\delta) \geq 0$.

Уравнения самосогласования

Самосогласованному вычислению подлежат три параметра: K_1 , λ и δ . Используя определение пространственных корреляторов K_r (14), получаем систему уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} K_0 = 1 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_0(\delta, \tau), \\ K_1 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (-\gamma_{\mathbf{q}}) K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} I_1(\delta, \tau), \\ K_{\text{tot}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\gamma_{\mathbf{q}})^2 K(\mathbf{q}) = \\ &= \frac{1}{z^2} \sum_{\Delta, \Delta'} K_{|\Delta+\Delta'|} = \frac{K_1}{\lambda} I_2(\delta, \tau), \end{aligned} \right. \quad (23)$$

где

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

$$n = 0, 1, 2. \quad (24)$$

Из уравнений (23) получаем формальное решение (аргументы функций опускаем)

$$\lambda = I_1, \quad K_1 = I_1/I_0, \quad K_{\text{tot}} = I_2/I_0, \quad \alpha_1 = 2I_0I_1. \quad (25)$$

Уравнение для параметра δ возникает из требования точного значения второго момента [3,6,10] и имеет вид

$$M_2 = \frac{1}{8} \left(K_{\text{tot}} + \frac{K_1}{z} \right) = \frac{\lambda K_1}{4} P(\delta),$$

$$P(\delta) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \gamma_{\mathbf{q}}) E_{\mathbf{q}} \operatorname{cth}\left(\frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{2\tau}\right). \quad (26)$$

Используя решения (25), получаем

$$P(\delta) = \frac{I_2(\delta) + I_1(\delta)/z}{2I_1^2(\delta)}, \quad \delta = \delta(\tau). \quad (27)$$

Таким образом, согласованная линейная теория 2-го порядка основана на выполнении правила сумм $K_0 = 1$, определениях корреляторов K_1 и K_{tot} (уравнения (23)) и требовании точного значения второго момента, которое приводит к уравнению (27). Это уравнение играет фундаментальную роль в теории СЖ и ее дальнейших обобщениях.

Суммы по зоне Бриллюэна для I_n и P заменяем интегралами с плотностью состояний $D(\varepsilon)$, соответствующей закону дисперсии $\gamma_{\mathbf{q}} = \varepsilon$. Аппроксимации для плотностей состояний $D(\varepsilon)$ приведены в Приложении. Объединяя (25) и (27), получаем систему трех уравнений для самосогласованного вычисления параметров спиновой жидкости

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda &= I_1(a), \\ K_1 &= I_1/I_0(b), \\ P &= \frac{I_2 + I_1/z}{2I_1^2}(c). \end{aligned} \right. \quad (28)$$

Здесь

$$I_n(\delta, t) = \int D(\varepsilon) (-\varepsilon)^n \frac{1 - \varepsilon}{E(\varepsilon, \delta)} \operatorname{cth}\left(\frac{E(\varepsilon, \delta)}{2t}\right) d\varepsilon,$$

$$P(\delta, t) = \int D(\varepsilon) (1 - \varepsilon) E(\varepsilon, \delta) \operatorname{cth}\left(\frac{E(\varepsilon, \delta)}{2t}\right) d\varepsilon,$$

$$E(\varepsilon, \delta) = \sqrt{(1 - \varepsilon)(|\varepsilon_{\min}| + \varepsilon + \delta)},$$

$$\varepsilon_{\min} \leq \varepsilon \leq 1, \quad t = \tau/\lambda. \quad (29)$$

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

$$\begin{aligned} S^2(\tau) &\equiv \frac{1}{N} \langle \mathbf{S}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}\mathbf{m}} \langle s_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{m}} \rangle = \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}} s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} = \\ &= \frac{3}{4} \sum_{\mathbf{r}} K_{\mathbf{r}} = \frac{3}{4} K(0), \end{aligned} \quad (30)$$

которая выражается через фурье-образ корреляционной функции (22) при $\mathbf{q} = 0$. При $\tau \equiv 0$ из (22) следует, что $K(0) = 0$, $S^2(0) = 0$, что и доказывает синглетность основного состояния. С другой стороны, выражение (30) можно рассмотреть как предел

$$\begin{aligned} K(0) &= \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} K(\mathbf{q}) = \frac{K_1}{\lambda} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}(\delta)} \operatorname{cth} \left(\frac{\lambda E_{\mathbf{q}}(\delta)}{2\tau} \right) = \\ &= \frac{4\tau}{\alpha_1(|\varepsilon_{\min}| + \gamma_0 + \delta)}. \end{aligned} \quad (31)$$

Отсюда при $\tau \rightarrow 0$ получаем по-прежнему $K(0) = 0$ (синглет), однако при $\tau \neq 0$ в системе возникают триплетные возбуждения, за счет которых $S^2(\tau) \neq 0$.

На основе изложенной выше теории и уравнений самосогласования (28) в работах [3,6] описаны термодинамические свойства СЖ в квадратной и ГЦК решетках во всем температурном интервале. Там же показано, что пространственные корреляционные функции знакопеременны, убывают по величине при увеличении расстояния, так что в спиновой жидкости имеется ближний порядок антиферромагнитного типа.

4. Спиновая жидкость с «конденсатом» в ПК и ОЦК решетках

Альтернативные решетки можно рассматривать как две вложенные друг в друга подрешетки A (узлы α) и B (узлы β) вне зависимости от существования реальных магнитных подрешеток. Зона Бриллюэна этих решеток содержит граничную точку \mathbf{Q} , в которой $\gamma_{\mathbf{Q}} = -1 = \varepsilon_{\min}$ и спектр $E_{\mathbf{Q}}(\delta) = \sqrt{2}\delta$. Эти точки таковы: $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$, $\mathbf{Q} = (2\pi, 2\pi, 2\pi)$ соответственно для квадратной, ПК и ОЦК решеток. Из этого рассмотрения следует, что

$$\exp(i\mathbf{Q}\alpha) = 1, \quad \exp(i\mathbf{Q}\beta) = -1. \quad (32)$$

Выше была рассмотрена функция $S^2(\tau)$ (см. (30)) и показано, что при $\tau = 0$ $S^2(0) = 0$ (основное со-

стояние является синглетным), что эквивалентно равенству

$$K(0) = \sum_{\mathbf{r}} K_{\mathbf{r}} = 0 \quad (\tau = 0). \quad (33)$$

С учетом соотношений (32) $K(\mathbf{Q})$ можно записать в виде

$$K(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}} K_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}} |K_{\mathbf{r}}|. \quad (34)$$

Поскольку $K_{\mathbf{r}}$ знакопеременны, то в (33) происходит полная компенсация всех слагаемых в сумме, а величина $K(\mathbf{Q})$ (34) может оказаться макроскопически большой и пропорциональной объему системы ($\propto N$).

«Конденсат» в спиновой жидкости

При этом предположении запишем $K_{\mathbf{r}}$ в виде

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{r}} &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ (\mathbf{q} \neq \mathbf{Q})}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} K(\mathbf{q}) + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \frac{K(\mathbf{Q})}{N}, \\ \frac{K(\mathbf{Q})}{N} &\equiv \frac{K_1}{\lambda} C, \end{aligned} \quad (35)$$

где C — априори неизвестный «конденсат» (функция температуры). Тогда

$$\begin{aligned} K_0 &= 1 = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ (\mathbf{q} \neq \mathbf{Q})}} K(\mathbf{q}) + \frac{K_1}{\lambda} C, \\ K_1 &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ (\mathbf{q} \neq \mathbf{Q})}} (-\gamma_{\mathbf{q}}) K(\mathbf{q}) + \frac{K_1}{\lambda} C, \\ K_{\text{tot}} &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ (\mathbf{q} \neq \mathbf{Q})}} \gamma_{\mathbf{q}}^2 K(\mathbf{q}) + \frac{K_1}{\lambda} C. \end{aligned} \quad (36)$$

В соотношениях (36) переходим от суммирования к интегрированию с плотностью состояний $D(\varepsilon)$. Примем во внимание следующие обстоятельства. Во-первых, нижний предел (из-за ограничения $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}$) равен $-1 + \zeta$, где ζ — бесконечно малая величина ($\zeta \rightarrow +0$). В ПК и ОЦК решетках плотность состояний $D(\varepsilon)$ обращается в нуль корневым образом на границах спектра. По этой причине величину ζ можно положить просто равной нулю (именно так обстоит дело при описании бозе-конденсации в трехмерном газе). Во-вторых, при наличии «конденсата» C полагаем $\delta = 0$ в выражении для $K(\mathbf{q})$. В этом случае спектр $E(\varepsilon, 0) = \sqrt{1 - \varepsilon^2}$ становится симметричным относи-

тельно инверсии $\varepsilon \leftrightarrow -\varepsilon$, и таким же свойством обладает плотность состояний $D(\varepsilon) = D(-\varepsilon)$. С учетом этих симметричных свойств интегралы принимают вид

$$I_0(t) = \int_{-1}^1 D(\varepsilon) \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \operatorname{cth} \left(\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2t} \right) d\varepsilon,$$

$$I_1(t) = I_2(t) = \int_{-1}^1 D(\varepsilon) \frac{\varepsilon^2}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \operatorname{cth} \left(\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2t} \right) d\varepsilon,$$

$$P(t) = \int_{-1}^1 D(\varepsilon) \sqrt{1-\varepsilon^2} \operatorname{cth} \left(\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{2t} \right) d\varepsilon \quad (37)$$

(функция $P(t)$ «конденсатного» члена не содержит). Теперь соотношения (36) записываются в виде

$$1 = \frac{K_1}{\lambda} (I_0 + C), \quad K_1 = K_{\text{tot}} = \frac{K_1}{\lambda} (I_1 + C), \quad (38)$$

а уравнение самосогласования (27) приобретает простую форму

$$P(I_1 + C) = \frac{z+1}{2z}. \quad (39)$$

Из численного решения системы уравнений (38)–(39) при $\tau = 0$ получаем

$$\lambda = 0,645, \quad K_1 = 0,416, \quad \varepsilon_0 = -0,312, \quad C = 0,389 \quad (\text{ПК}).$$

$$\lambda = 0,607, \quad K_1 = 0,396, \quad \varepsilon_0 = -0,297, \quad C = 0,4185 \quad (\text{ОЦК}). \quad (40)$$

Из результатов (40) следует, что энергии синглетного состояния при наличии конденсата ниже энергий АФ состояний (см. таблицу). Тем самым доказано утверждение Маршалла об основном синглетном состоянии спиновой системы на альтернантных решетках.

На рис. 1 представлен результат расчета температурного поведения конденсата в ПК решетке. Эта функция обращается в нуль при температуре $\tau_0 \approx 0,213$, которая выше температуры Нееля ПКР $\tau_N = 0,163$. Таким образом, температурная область существования спиновой жидкости с конденсатом шире области существования АФ, а энергия в этом состоянии $\varepsilon_{SLC} < \varepsilon_{AF}$. При $\tau > \tau_0$ в спектре начинает «зарождаться» псевдощель δ . Для ее вычисления используем то же самое универсальное уравнение самосогласования (28.в). Результат представлен на рис. 1. Фактически имеем фазовый переход

$$\text{СЖК} (\delta = 0, C \neq 0) \Rightarrow \text{СЖ} (\delta \neq 0, C = 0),$$

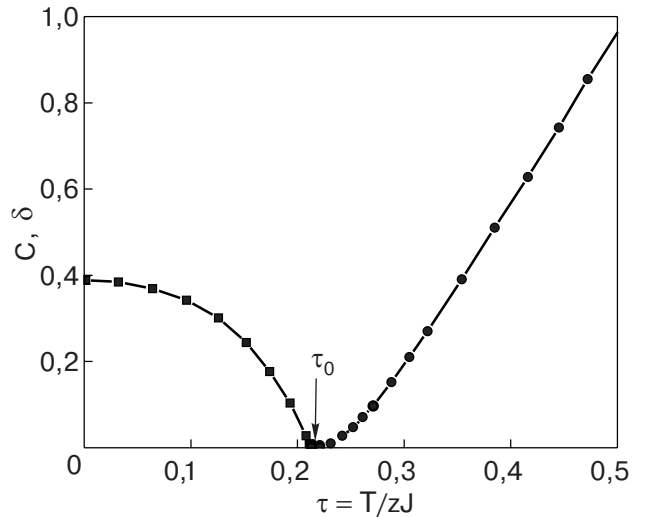


Рис. 1. Температурное поведение конденсата (■) и щелевого параметра (●) в спиновой жидкости в ПК решетке.

а свойства системы можно описать во всем температурном интервале. На рис. 2, 3 показано температурное поведение основных параметров системы. Для сравнения (на рис. 2) приведена энергия АФ состояния (по спин-волновой теории), которая имеет конечную величину в точке Нееля, но выше нее спин-волновая теория не применима.

*«Скачущая» намагниченность,
«конденсат» и дальний порядок*

Для выяснения физического смысла «конденсата» рассмотрим квадрат «скачущей» намагниченности (СН), который по определению [8] равен

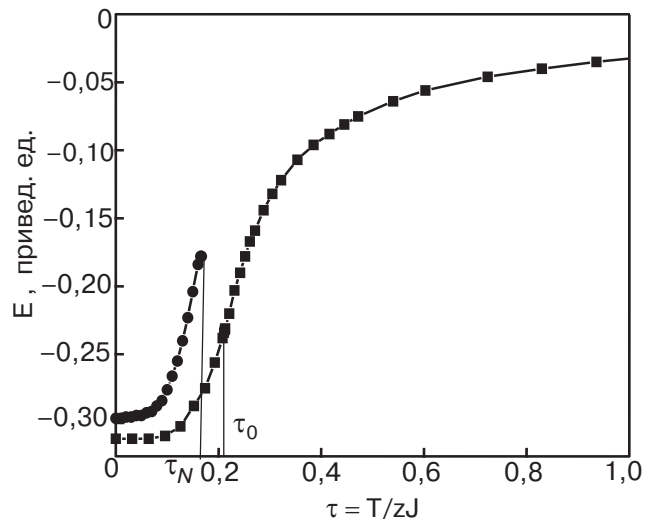


Рис. 2. Энергия антиферромагнитного состояния (●), рассчитанная по спин-волновой теории при $\tau \leq \tau_N$, и энергия спиновой жидкости в ПК решетке (■).

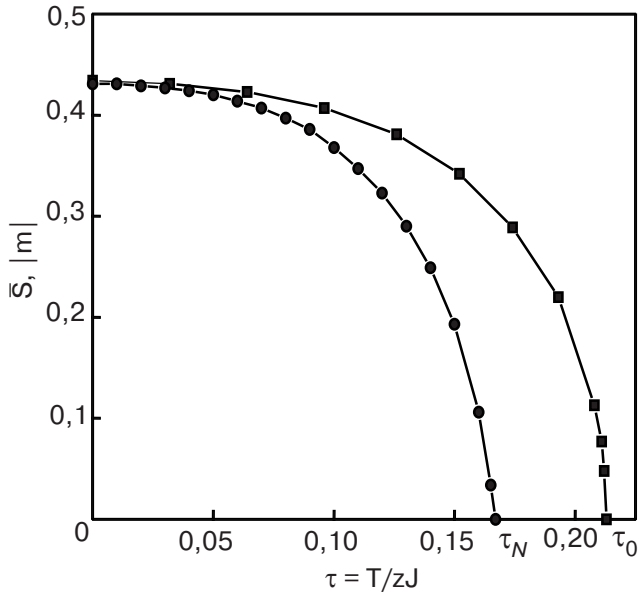


Рис. 3. Параметры порядка: $\bar{s}(\tau)$ — относительная намагниченность подрешетки в АФ состоянии (●) и $|m(\tau)|$ — модуль «скачущей» намагниченности в спиновой жидкости с конденсатом (■) в ПК решетке.

$$m^2 = \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \right)^2 \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \times$$

$$\times \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \frac{3}{4} K_{\mathbf{r}} =$$

$$= \frac{3}{4} \frac{K(\mathbf{Q})}{N} = \frac{3}{4} \frac{K_1}{\lambda} C, \quad (41)$$

где использовано равенство $2\mathbf{Q}\mathbf{f} = 1$ и определение (35). Из (41) следует, что модуль СН равен

$$|m(\tau)| = \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{K_1(\tau)}{\lambda(\tau)} C(\tau)},$$

или с учетом соотношений (38)

$$|m(\tau)| = \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{C(\tau)}{I_0(\tau) + C(\tau)}}. \quad (42)$$

Эту функцию сопоставим с параметром порядка $\bar{s}(\tau)$ в АФ состоянии (рис. 3); отметим, что

$$|m(0)| = 0,434, \quad \bar{s}(0) = 0,432 \text{ в ПК,}$$

$$|m(0)| = 0,452, \quad \bar{s}(0) = 0,448 \text{ в ОЦК.}$$

Таким образом, модуль «скачущей» намагниченности $|m|$ является параметром порядка в квантовой спиновой жидкости ПК и ОЦК решеток.*

Дальний порядок

Наличие дальнего порядка фиксируется по поведению пространственных корреляционных функций при $r \rightarrow \infty$ (подразумевается термодинамический предел $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$; фактически надо положить $r \approx N^{1/d}$ равным максимальному линейному размеру системы и далее совершать предельный переход $N \rightarrow \infty$). При знакопеременных корреляционных функциях дальний порядок определим как ненулевой предел

$$C_{\infty} = \lim_{r \rightarrow \infty} \langle \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} \rangle = \frac{3}{4} \lim_{r \rightarrow \infty} |K_r| = \frac{3}{4} |K_{\infty}|. \quad (43)$$

Таким образом, необходимо вычислить K_r по формуле (35) для больших значений r . В сумме (интеграле) по \mathbf{q} по-прежнему главный вклад дает окрестность точки $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ (хотя сама точка \mathbf{Q} исключена). Полагаем $\mathbf{q} = \mathbf{Q} + \mathbf{p}$ и проводим разложение $\gamma_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = -\gamma_{\mathbf{p}} \approx -1 + p^2/z$; кроме того, формально оставим в спектре величину δ . Тогда

$$K_r \approx e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \frac{K_1}{\lambda} \left[\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \frac{\sqrt{2z}}{\sqrt{p^2 + \kappa^2}} \times \right.$$

$$\left. \times \text{cth} \left(\frac{\sqrt{2}}{z} \frac{\sqrt{p^2 + \kappa^2}}{2t} \right) + C \right], \quad (44)$$

где $\kappa^2 = z\delta$ и $t = \tau/\lambda$ (отметим, что корреляционная длина $\xi = 1/\kappa$). В приближении $\text{cth} x \approx 1/x$ интеграл в (44) сводится к виду

$$2tz \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{p^2 + \kappa^2} \approx 2tz \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(-\kappa r)}{r}, \quad (45)$$

хорошо известному в теории Орнштейна — Цернике. Из (45) следует, что этот интеграл на больших расстояниях обращается в нуль (в том числе и при $\delta = \kappa = 0$), так что дальний порядок обусловлен «конденсатным» членом, т.е.

* В антиферромагнитном состоянии сама «скачущая» намагниченность является параметром порядка

$$\mathbf{m}_{AF} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{f}} \mathbf{s}_{\mathbf{f}} \right\rangle = \mathbf{e} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{f}} \langle s_{\mathbf{f}}^z \rangle = \mathbf{e} \bar{s} \quad (\mathbf{e} \text{ — единичный вектор вдоль оси квантования}).$$

В спиновой жидкости $\mathbf{m}_{SL} = 0$, но $m_{SL}^2 \neq 0$ и $\sqrt{m_{SL}^2} \equiv |m|$ — параметр порядка в СЖК.

$$|K_\infty| = \frac{K_1}{\lambda} C \quad \text{или} \quad C_\infty = \frac{3}{4} |K_\infty| = m^2. \quad (46)$$

Рассеяние нейтронов

В общей теории неупругого рассеяния нейтронов (см., например, [7]) в выражении для дифференциального сечения рассеяния фигурирует функция

$$\Lambda(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) \langle s_{\mathbf{f}}^\alpha(0) s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^\beta(t) \rangle, \quad (47)$$

где $\mathbf{e} = \mathbf{q}/q$, \mathbf{q} — вектор рассеяния нейтрона. В магнитоупорядоченном состоянии (Φ или $A\Phi$), используя принцип ослабления корреляций на больших расстояниях, проводят расщепление корреляционной функции

$$\langle s_{\mathbf{f}}^\alpha s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^\beta \rangle \approx \langle s_{\mathbf{f}}^\alpha \rangle \langle s_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}^\beta \rangle \propto \langle s_{\mathbf{f}}^z \rangle^2 = \bar{s}^2,$$

которая сводится к квадрату параметра порядка. В СЖ $\langle s_{\mathbf{r}}^\alpha \rangle = 0$ и из-за изотропности корреляционных функций (10) выражение (47) принимает вид

$$\Lambda_{SL}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} K_{\mathbf{r}}(t), \quad (48)$$

т.е. выражается через пространственную корреляционную функцию, зависящую от времени.

Таким образом, в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов измеряется корреляционная функция. Интерпретация экспериментальных данных требует отдельного и тщательного анализа.

5. Резюме

В настоящей работе предложена теоретическая версия описания спиновой системы с изотропным гамильтонианом Гейзенберга (спин $s = 1/2$, антиферромагнитный обмен только между ближайшими соседями) как спиновой жидкости с основным синглетным состоянием. Показано, что в трехмерных альтернатных решетках (ПК и ОЦК) в граничной точке зоны Бриллюэна существует «конденсат» возбуждений, который и определяет в системе наличие дальнего порядка, близкого к антиферромагнитному. Отметим, что оба состояния (синглетное и $A\Phi$) очень похожи (это отмечено ранее Андерсоном [9]).

Во-первых, спектры возбуждений идентичны

$$(\Omega_{\mathbf{q}})_{AF} = \bar{s} \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2}, \quad (\Omega_{\mathbf{q}})_{SL} = \lambda \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2} \quad \text{при} \quad \delta = 0,$$

где \bar{s} — параметр порядка (относительная намагниченность подрешетки) в $A\Phi$, $\lambda = \sqrt{\alpha_1} K_1/2$, K_1 — модуль спинового коррелятора между ближайшими соседями в СЖ.

Во-вторых, пространственные спиновые корреляционные функции знакопеременны.

Таким образом, в рамках предложенной версии удается подтвердить утверждение Маршалла о синглетном основном состоянии в альтернатных решетках, сохранив наличие дальнего магнитного порядка $A\Phi$ типа.

Основные результаты настоящей работы следующие.

1. Дано определение спиновой жидкости в виде выражений (10)–(12) для изотропного гамильтониана Гейзенберга. Постулат (12) введен впервые, он играет важную роль при построении самосогласованной и внутренне замкнутой теории СЖ.

2. Спиновая жидкость описана в рамках теории 2-го порядка методом функций Грина. По сравнению со спин-волновой теорией (которая содержит только один априори неизвестный параметр порядка $\bar{s}(T)$) в теории СЖ фигурируют три параметра: λ — «жесткость» спектра возбуждений, K_1 — модуль спинового коррелятора в 1-й координационной зоне (между БС) и δ — псевдощель в спектре (все они — функции температуры).

3. Предложена система уравнений (37) для самосогласованного вычисления этих параметров. В результате решения этой системы (численного и частично аналитического) можно описать термодинамику СЖ во всем температурном интервале [3,6,10].

4. Доказано, что основным состоянием СЖ является синглетное состояние.

5. Предложена теоретическая версия описания спиновой системы в ПК и ОЦК решетках как спиновой жидкости с конденсатом (СЖК). Теория приводит к следующим результатам:

- основное состояние является синглетным (полный спин $S = 0$, что соответствует строгой квантово-механической классификации состояний), энергия синглетного состояния ниже энергии $A\Phi$ состояния, вычисленной по спин-волновой теории;

- найдена температурная зависимость конденсата, он исчезает при критической температуре τ_0 ;

- показано, что модуль «скачущей» намагниченности $|m(\tau)|$ выражается через конденсат $C(\tau)$ и является параметром порядка в СЖК; область существования упорядоченного состояния спиновой жидкости конденсата шире, чем область существования двухподрешеточного $A\Phi$, так как $\tau_0 > \tau_N$.

Таким образом, в рамках предложенной теории спиновая система описана во всем температурном диапазоне.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 00-02-16110.

Приложение

Аппроксимация плотности состояний для закона дисперсии

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{z} \sum_{\Delta} e^{i\mathbf{q}\Delta}, \Delta - \text{векторы, соединяющие БС,}$$

(изоэнергетические поверхности $x = \gamma_{\mathbf{q}}$ параметр решетки $a = 1$).

Линейная цепочка ($d = 1, z = 2$):

$$D(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, |x| \leq 1.$$

Квадратная решетка ($d = 2, z = 4$):

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} (\cos q_x + \cos q_y),$$

$$D(x) = \frac{1}{\pi} - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right) \ln|x|, |x| \leq 1.$$

ПК решетка ($d = 3, z = 6$):

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{3} (\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z),$$

$$D(x) = \begin{cases} 0,876, & |x| \leq 0,329, \\ 0,279 \frac{\sqrt{1-x^2}}{(x^2 - 0,09)^{0,3} + 10^{-8}}, & 0,329 \leq |x| \leq 1 \end{cases}$$

ОЦК решетка ($d = 3, z = 8$):

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) \cos\left(\frac{q_y}{2}\right) \cos\left(\frac{q_z}{2}\right),$$

$$D(x) = 0,431 \frac{(-\ln|x|)}{1 + 3x^2} + 0,186\sqrt{1-x^2}, |x| \leq 1.$$

ГЦК решетка ($d = 3, z = 12$):

$$\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{3} (c_x c_y + c_x c_z + c_y c_z), c_j \equiv \cos\left(\frac{q_j}{2}\right),$$

$$D(x) = \begin{cases} A(x), & \text{если } -\frac{1}{3} \leq x \leq 0, \\ B(x), & \text{если } 0 \leq x \leq 1, \end{cases}$$

$$A(x) = -0,366664 \ln\left(0,0671182\left(x + \frac{1}{3}\right)\right) - 0,456693x,$$

$$B(x) = 0,226573\sqrt{1-x} + \frac{0,202745}{x + 0,151142} - 0,174703.$$

Плотность состояний для рассматриваемого закона дисперсии $\gamma_{\mathbf{q}}$ должна удовлетворять соотношениям

$$\int D(x) dx = 1, \int D(x) x dx = 0, \int D(x) x^2 dx = \frac{1}{z}.$$

1. *Антиферромагнетизм*, С.В. Вонсовский (ред.), Изд-во иностр. лит., Москва (1956).
2. Д. Маттис, *Теория магнетизма*, Мир, Москва (1967).
3. Е.В. Кузьмин, *ФТТ* **44**, 1075 (2002).
4. С.В. Вонсовский, М.С. Свирский, *ЖЭТФ* **57**, 251 (1969).
5. W. Marshall, *Proc. R. Soc. London*, **A232**, 48 (1955).
6. Е.В. Кузьмин, *ЖЭТФ* **123**, 149 (2003).
7. С.В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975).
8. E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
9. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
10. Е.В. Кузьмин, *Квантовая спиновая жидкость и антиферромагнетизм*, Препринт № 814Ф, Институт физики СО РАН, Красноярск (2002).

Quantum spin liquid and antiferromagnetism

E.V. Kuz'min

The conception of spin liquid for the Heisenberg model ($s = 1/2$) with an antiferromagnetic exchange between nearest neighbors is developed. Spin liquid is described with the Green function method within the second order theory. The equations for self-consistent calculation of the parameters and thermodynamic characteristics of the system are presented. A version is suggested to describe the spin system in the SC and BCC lattices as a spatially homogeneous spin liquid with condensate and in the singlet ground state. It is shown that the modulus of «staggered» magnetization is clearly expressed through condensate at the boundary point of the Brillouene zone and is a long-range order parameter. The temperature region of the existence of the spin liquid with condensate ($T \leq T_0$) is wider than that of the two-sublattice antiferromagnet ($T_0 > T_N$), where T_N is the Neel temperature), and the energy is lower. At $T > T_0$ the system turns into a «trivial» spin liquid state.