Письма в ЖЭТФ, том 93, вып. 7, с. 419 – 425 © 2011 г. 10 апреля

Фазовая диаграмма фрустрированного J_1-J_2-J_3 квантового двумерного антиферромагнетика в рамках сферически симметричных функций Грина

А. В. Михеенков[1)+*], *А. В. Шварцберг*[+*], *Н. А. Козлов*[*], *А. Ф. Барабанов*[+]

[+]*Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Троицк, Московская обл., Россия*

[*]*Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 11 января 2011 г.

После переработки 15 февраля 2011 г.

В рамках подхода двухвременных запаздывающих спин-спиновых самосогласованных функций Грина, не нарушающего трансляционную и SU(2) симметрию, рассматривается фазовая диаграмма $S = 1/2$ фрустрированной J_1-J_2-J_3 модели Гейзенберга на квадратной решетке в области параметров, отвечающих спин-жидкостному состоянию системы. Введение затухания спиновых флуктуаций позволяет получить хорошее согласие с данными кластерных расчетов. Используя единый аналитический подход, найдены непрерывные переходы между тремя фазами с дальним порядком (шахматная, страйп-фаза и геликоид (k, k)) через спин-жидкостное состояние. Кроме того, получены указания на существование геликоида (k, π).

Изучение двумерного фрустрированного J_1-J_2-J_3 квантового $S = 1/2$ антиферромагнетика (АФМ) является актуальным как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения. В рамках этой модели часто рассматривается вопрос о квантовом фазовом переходе. Относительно привычной квазиклассической картины квантовые флуктуации могут переводить систему в квантовое состояние спин-жидкостного типа. В спин-жидкостном состоянии $SU(2)$ симметрия гамильтониана восстанавливается. Вблизи точки квантового фазового перехода ($J_2 = 0.5J_1$, $J_3 = 0$) остается открытым вопрос о наличии фаз с нарушением трансляционной симметрии.

С экспериментальной точки зрения, модель описывает слоистые квазидвумерные соединения – купраты (см., например, [1]) и ванадаты [2–4], при этом могут реализовываться как чисто АФМ случаи ($J_1, J_2, J_3 > 0$), так и случаи, когда одна из констант связи является ферромагнитной (ФМ).

В настоящей работе модель J_1-J_2-J_3 изучается в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода (СССП) [5–8] при нулевой температуре $T = 0$. В отличие от спин-волновых подходов, в методе СССП основные состояния как с дальним порядком, так и без него, являются синглетными; теоремы Маршалла и Мермина-Вагнера выполняются автоматически. Метод позволяет определять микроскопические характеристики, которые не извлекаются из результатов кластерных расчетов, такие как спектр спиновых возбуждений, величина и положение спиновой щели и явный вид динамической спиновой восприимчивости.

В отличие от стандартной реализации СССП метода, в настоящей работе осуществляется выход за среднее поле путем введения затухания в выражение для спиновой функции Грина [9]. Очевидно, вблизи линий фазовых переходов затухание существенно. В рамках принятого метода мы идентифицируем синглетные фазы, которые изучаются в кластерных расчетах. В принципе, наличие этих фаз и их структура могут быть получены и при нулевом затухании. Однако именно учет затухания приводит к разумному совпадению фазовой диаграммы и энергий с данными кластерных расчетов.

Используемый в настоящей работе СССП подход сохраняет спиновую $SU(2)$ симметрию. Это, в частности, означает, что среднее значение любой проекции оператора спина на узле есть ноль, $\langle S^\alpha_{\mathbf{n}} \rangle = 0$ ($\alpha = x, y, z$). То есть рассматриваются такие синглетные состояния плоскости, когда отсутствуют спиновые подрешетки. Кроме того, в подходе СССП спиновые корреляторы $\langle S^\alpha_{\mathbf{n+r}} S^\alpha_{\mathbf{n}} \rangle$ не зависят от положения узла $\mathbf{n}$, это означает, что сохраняется трансляционная симметрия, и мы не рассматриваем так называемые box- и columnar-состояния (синглетные состояния с нарушенной трансляционной симметрией).

При этом могут реализовываться состояния как без дальнего порядка, так и с дальним порядком. Состояния с дальним порядком характеризуются тем, что спин-спиновые корреляторы на бесконечности

[1)]e-mail: mikheen@bk.ru

$\langle S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{0}}\rangle_{r\to\infty}$ отличны от нуля. Если, например, состоянию отвечают АФМ корреляторы с "шахматным" мотивом $\langle S^\alpha_{\mathbf{r}} S^\alpha_{\mathbf{0}}\rangle_{r\to\infty} = c_0(-1)^{n_x+n_y}$ ($\mathbf{r} = n_x\mathbf{g}_x + n_y\mathbf{g}_y$; $\mathbf{g}_x = (1,0)$, $\mathbf{g}_y = (0,1)$ – векторы ближайших соседей) [6], то такое состояние является синглетным аналогом двухподрешеточного неелевского (шахматного) состояния. В этом состоянии щель в спектре спиновых возбуждений закрыта в АФМ точке $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$, и $\mathbf{Q}$ диктует структуру дальнего порядка (LRO). Будем называть такое состояние LRO $C(\pi,\pi)$ (здесь и далее мы пользуемся терминологией работ [10–12]).

В J_1-J_2-J_3 модели, кроме LRO $C(\pi,\pi)$, обсуждаются еще три состояния с дальним порядком: LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ с "полосатой" (страйп) картиной корреляторов, LRO $S(k,k)$ и LRO $S(k,\pi;\pi,k)$ с двумя типами геликоидального (S – spiral) несоизмеримого спинового порядка. Все эти LRO состояния являются отдельными фазами и обладают качественно различными типами дальнего порядка, который диктуется точкой $\mathbf{q}_0$ зануления спиновой щели ($\mathbf{q}_0 = (\pi,\pi)$, $(\pi,0;0,\pi)$, (k,k), $(k,\pi;\pi,k)$). Кроме того, между состояниями с дальним порядком возникает область спиновой жидкости, для которой спин-спиновые корреляторы на бесконечности равны нулю. В соответствии с доминированием для спиновых корреляторов того или иного типа ближнего порядка (SRO), условно различают состояния SRO $C(\pi,\pi)$, SRO $C(\pi,0;0,\pi)$, SRO $S(k,k)$ и SRO $S(k,\pi;\pi,k)$. В нашем подходе все эти SRO состояния отвечают одной и той же спин-жидкостной фазе. Для спин-жидкостной фазы при приближении к границе существования какой-либо LRO фазы спиновая щель в соответствующей точке $\mathbf{q}_0$ зоны Бриллюэна стремится к нулю (а корреляционная длина – к бесконечности).

Стандартные спин-волновые вычисления (СВВ) позволяют вести рассмотрение только в областях, где существует дальний порядок [13, 14]. В противоположность этому, в настоящей работе система рассматривается со стороны областей, где дальний порядок отсутствует, а состояния с дальним порядком диагностируются только на фазовых границах.

Гамильтониан фрустрированной J_1-J_2-J_3 $S = 1/2$ модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в стандартных обозначениях имеет вид

$$\widehat{H} = \tfrac{1}{2}J_1 \textstyle\sum_{\mathbf{i},\mathbf{g}} \mathbf{S_i S_{i+g}} + \tfrac{1}{2}J_2 \sum_{\mathbf{i},\mathbf{d}} \mathbf{S_i S_{i+d}} + \\ + \tfrac{1}{2}J_3 \sum_{\mathbf{i},\mathbf{g}} \mathbf{S_i S_{i+2g}}; \qquad (1)$$

здесь $\mathbf{g}, \mathbf{d}$ и $\mathbf{2g}$ – векторы, соответственно, первых, вторых и третьих ближайших соседей, все обменные константы – антиферромагнитные.

В рамках СССП подхода вычисления сводятся к замыканию цепочки уравнений для двухвременной запаздывающей функции Грина $G^\alpha_{\mathbf{nm}} = \langle S^\alpha_{\mathbf{n}} | S^\alpha_{\mathbf{m}}\rangle_{\omega+i\delta} = -i\int\limits_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\langle[S^\alpha_{\mathbf{n}}(t), S^\alpha_{\mathbf{m}}]\rangle$, $\alpha = x,y,z$, на втором шаге. С учетом того, что средний спин на узле равен нулю, $\langle S^\alpha_{\mathbf{n}}\rangle = 0$, функция Грина имеет следующий вид:

$$G^\alpha(\mathbf{q},\omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega^2_{\mathbf{q}} + i\omega\gamma}; \qquad (2)$$

здесь γ отвечает учету мнимой части поляризационного оператора [15], ниже γ приводится в единицах $J_1 + J_2 + J_3$:

$$F_{\mathbf{q}} = 8\,[J_1(\theta_g(\mathbf{q}) - 1)C_g + J_2(\theta_d(\mathbf{q}) - 1)C_d + \\ + J_3(\theta_{2g}(\mathbf{q}) - 1)C_{2g}], \qquad (3)$$

где $\theta_b(\mathbf{q}) = \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{qb}}$, $C_b = \langle S^\alpha_0 S^\alpha_{\mathbf{b}}\rangle$, $\mathbf{b} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, \mathbf{2g}$.

Мы не приводим выражения для спектра $\omega^2_{\mathbf{q}}$, которое содержит спин-спиновые корреляторы на первых восьми координационных сферах и имеет громоздкий вид.

Функция Грина (2) описывает три вырожденных ветви спиновых возбуждений. При фиксированном значении $\mathbf{q}$ максимум мнимой части спиновой восприимчивости $\operatorname{Im}\chi^\alpha(\mathbf{q},\omega) = -\operatorname{Im} G^\alpha(\mathbf{q},\omega)$ находится вблизи $\omega \approx \omega_{\mathbf{q}}$. Основная сложность в вычислении $G^\alpha(\mathbf{q},\omega)$ заключается в самосогласовании, при котором входящие в $F_{\mathbf{q}}$ и $\omega_{\mathbf{q}}$ девять корреляционных функций (включая условие $C_0 = \langle S^\alpha_0 S^\alpha_0\rangle = 1/4$) сами выражаются через $G^\alpha(\mathbf{q},\omega)$:

$$C_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{qr}} \\ (\mathbf{r} = \mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}, 2\mathbf{d}, \mathbf{g}+\mathbf{d}, 3\mathbf{g}, 2\mathbf{g}+\mathbf{d}, 4\mathbf{g}), \qquad (4)$$

$$C_{\mathbf{q}} = \langle S^z_{\mathbf{q}} S^z_{-\mathbf{q}}\rangle = -\frac{1}{\pi}\int d\omega\, m(\omega)\operatorname{Im} G^z(\mathbf{q},\omega) = \\ = \frac{F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}}\,(2m(\omega_{\mathbf{q}}) + 1)\,; \qquad (5)$$

$$m(\omega) = \left(e^{\frac{\omega}{T}} - 1\right)^{-1}.$$

Спин-жидкостное состояние характеризуется тем, что спектр спиновых возбуждений везде имеет щель, кроме тривиальной точки $\mathbf{q} = 0$, для которой $F_{\mathbf{q}=0} = 0$. Это означает, что при $T \to 0$ вклад от бозевской функции в (5) отсутствует. Переход в состояние с дальним спиновым порядком определяется стремлением к нулю щели в некоторой точке $\mathbf{q}_0$

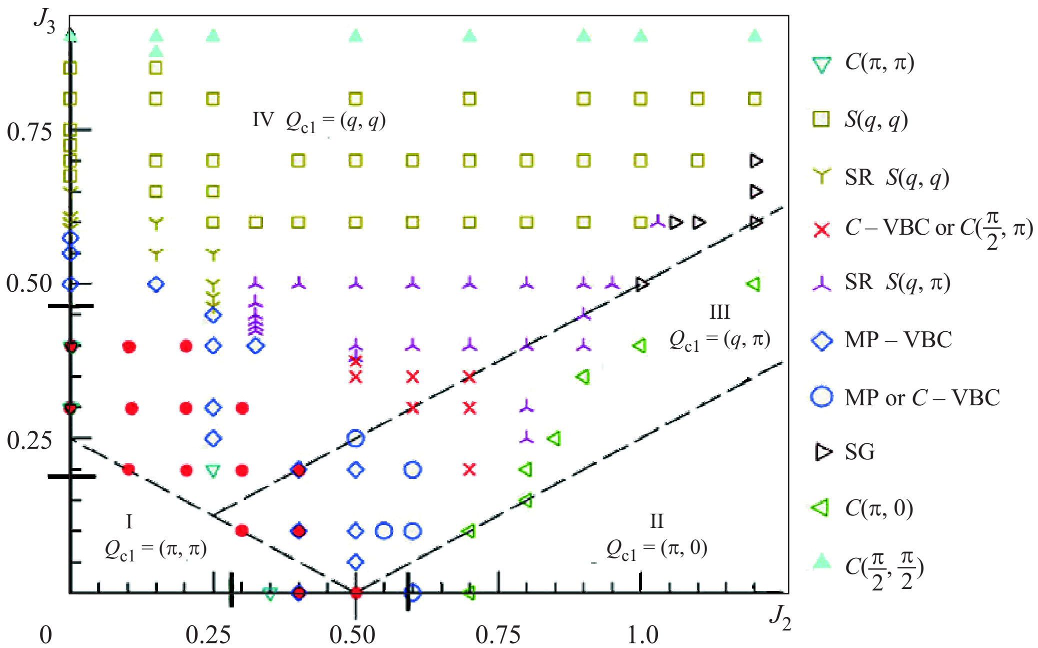

Рис. 1. Фазовая диаграмма основного состояния для $J_1 = 1$. Символы, приведенные справа, отвечают рис. 2 работы [10] и соответствуют основным состояниям, найденным точной диагонализацией кластера с 32-мя узлами. Обозначения $C(\pi,\pi)$, $C(\pi,0)$, $S(q,q)$ отвечают в настоящей работе фазам с дальним порядком LRO $C(\pi,\pi)$, LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ и LRO $S(k,k)$. Символы SR $S(q,q)$ и SR $S(q,\pi)$ отвечают в настоящей работе состояниям спин-жидкостной фазы SRO $S(k,k)$ и SRO $S(k,\pi;\pi,k)$. Состояния с дальним порядком, обозначенные в [10] $C(\pi/2,\pi)$ и $C(\pi/2,\pi/2)$ в настоящей работе не рассматривались. В соответствии с [10], состояния, обозначенные остальными символами, могут носить спин-жидкостной характер с нарушением трансляционной симметрии. Штриховые линии представляют классические границы фаз с дальним порядком. Дополнительно к результатам работы [10] черными кружками отмечены точки, которые отвечают спин-жидкостной фазе работы [11] и для которых аналогичные состояния найдены в настоящей работе. На осях J_2 и J_3 длинными засечками отмечены найденные нами границы спин-жидкостной фазы

зоны Бриллюэна. Положение $\mathbf{q}_0$ диктует структуру дальнего порядка фазы, в которую происходит переход. В выражении для корреляторов (5) при этом возникает конденсатный член $c_0 e^{i\mathbf{q}_0\mathbf{r}}$, отвечающий вкладу от бозевской функции

$$C_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} C_{0\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + c_0 e^{i\mathbf{q}_0\mathbf{r}}. \qquad (6)$$

Ниже мы рассматриваем часть фазовой диаграммы, отвечающую спин-жидкостной фазе, то есть где дальний порядок отсутствует и $c_0 = 0$. Результаты приводятся для значения $\gamma = 0.6$, что дает разумное согласие с кластерными расчетами как для положения границ фаз, так и для значений энергии. Везде ниже на рисунках и в таблице положено $J_1 = 1$.

На рис. 1 вместе с границами классических фаз J_1-J_2-J_3-модели (штриховые линии) приведены результаты кластерных расчетов из работы [10] (см. рис. 2 из [10]). Разные символы отвечают различным спиновым структурам в рамках принятой в [10] классификации. На том же рисунке черными кружками показаны точки, для которых в рамках кластерного

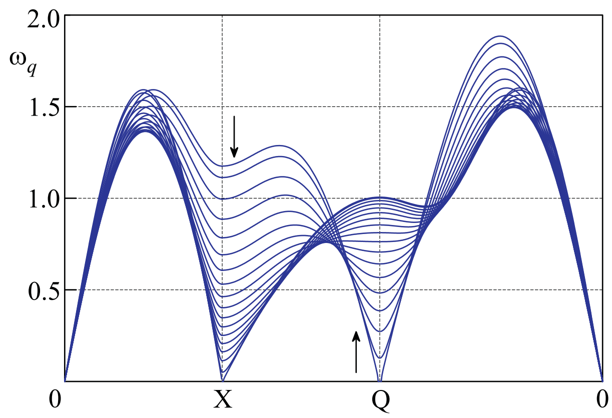

Рис. 2. Эволюция спектра спиновых возбуждений вдоль симметричных направлений в рамках СССП в области спин-жидкостной фазы при движении по J_2 ($J_3 = 0$) от границы "шахматной" фазы LRO $C(\pi,\pi)$ до границы страйп-фазы LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ ($J_2 = 0.281 \div 0.598$). Стрелки указывают направление эволюции соответствующих участков спектра с ростом J_2. Параметр затухания $\gamma = 0.6$

расчета работы [11] (точная диагонализация кластера из 32 узлов) известна энергия. В этих же точках

(J_2, J_3)	E_0^{ED}	E	tol
(0.0, 0.3)	−18.717	−18.163	0.03
(0.0, 0.4)	−18.124	−17.499	0.03
(0.0, 0.5)	−17.925	−17.571	0.02
(0.1, 0.2)	−18.434	−17.719	0.04
(0.1, 0.3)	−17.721	−16.798	0.05
(0.1, 0.4)	−17.331	−16.557	0.04
(0.2, 0.2)	−17.396	−16.112	0.07
(0.2, 0.3)	−16.868	−15.670	0.07
(0.2, 0.4)	−16.669	−15.775	0.05
(0.3, 0.1)	−17.129	−15.358	0.10
(0.3, 0.2)	−16.505	−14.854	0.10
(0.3, 0.3)	−16.176	−14.775	0.09
(0.4, 0.0)	−16.908	−14.581 (−15.329)	0.14 (0.09)
(0.4, 0.1)	−16.218	−14.140 (−14.853)	0.13 (0.08)
(0.4, 0.2)	−15.802	−13.983 (−14.717)	0.12 (0.07)
(0.5, 0.0)	−16.003	−13.963 (−14.526)	0.13 (0.09)

Сравнение энергий основного состояния для точек, отмеченных жирными кружками на рис. 1, с данными кластерных расчетов. E_0^{ED} – результаты точной диагонализации из [11], E – результаты настоящей работы, точность tol $= (E_0^{ED} - E)/E_0^{ED}$. Все результаты, как и в [11], приведены в пересчете на 32 узла. Затухание $\gamma = 0.6$. В некоторых точках в скобках приведены результаты для $\gamma = 1.0$

в работе [11] предполагается отсутствие дальнего порядка. В настоящей работе в области этих точек находились функция Грина, спектр $\omega_{\mathbf{q}}$ и энергия. Наши результаты показывают, что в этой области система действительно находится в спин-жидкостной фазе. В частности, на рис. 1 на осях J_2 и J_3 засечками обозначены полученные в настоящей работе границы спин-жидкостной фазы.

Результаты сравнения полученных энергий с энергиями кластерных расчетов [11] приведены в таблице. Как видно из таблицы, расхождение найденных энергий с данными кластерных расчетов в большинстве точек не превышает 10%, и только в области, близкой к точке фазового перехода $J_3 = 0, J_2 = 0.5$, расхождение несколько больше. Последнее связано с тем, что, по-видимому, эффективное затухание в этой области должно возрастать. Тем не менее, сравнение наших результатов с кластерными расчетами указывает, что приближение постоянного эффективного затухания $\gamma = 0.6$ правильно отражает поведение системы в рассматриваемой области параметров. В ряде точек таблицы приведены также данные при $\gamma = 1.0$. Видно, что с ростом затухания расхождение с численными данными уменьшается. Отметим также, что, как правило, расчеты на конечных кластерах занижают энергию.

Как отмечалось, в отличие от кластерных расчетов, метод СССП позволяет определить парные корреляторы, спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ и проследить величину и положение спиновой щели в зависимости от параметров обмена. На рис. 2 и рис. 3 представлена эволюция $\omega_{\mathbf{q}}$ вдоль симметричных на-

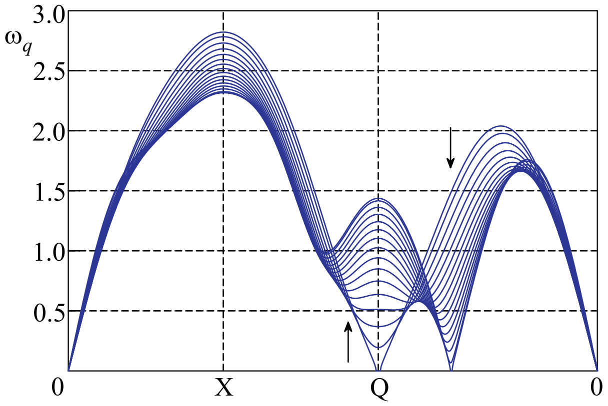

Рис. 3. Эволюция спектра спиновых возбуждений вдоль симметричных направлений в рамках СССП в области спин-жидкостной фазы при движении по J_3 ($J_2 = 0$) от границы "шахматной" фазы LRO $C(\pi,\pi)$ до границы геликоидальной фазы LRO $S(k,k)$ ($J_3 = 0.187 \div 0.467$). Стрелки указывают направление эволюции соответствующих участков спектра с ростом J_3. Параметр затухания $\gamma = 0.6$

правлений зоны Бриллюэна при изменении J_2 ($J_3 = 0$) – рис. 2, и при изменении J_3 ($J_2 = 0$) – рис. 3.

Как видно из рис. 2, при увеличении J_2 от 0.28 до 0.60 (см. границы спин-жидкостной фазы при $J_3 = 0$ на рис. 1), открывается и растет щель $\Delta_{\mathbf{Q}}$ в точке $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$, это означает переход из "шахматной" фазы LRO C(π,π) в спин-жидкостное состояние SRO $C(\pi,\pi)$. При этом с ростом J_2 уменьшается щель $\Delta_{\mathbf{X}}$ в точках $\mathbf{X} = (0,\pi),(\pi,0)$. Закрытие щели в точке $\mathbf{X}$ означает переход из спин-жидкостного состояния SRO $C(\pi,0;0,\pi)$ в страйп-фазу LRO $C(\pi,0;0,\pi)$.

В области малой щели $\Delta_{\mathbf{Q}}$ спин-спиновая корреляционная функция на больших расстояниях имеет основной мотив $\langle S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{0}}\rangle \sim (-1)^{n_x+n_y}$ ($\mathbf{r} = n_x\mathbf{g}_x + n_y\mathbf{g}_y$; $\mathbf{g}_x = (1,0)$, $\mathbf{g}_y = (0,1)$ – векторы ближайших соседей). В квантовой страйп-фазе LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ спин-спиновая корреляционная функция на больших расстояниях ведет себя как $\langle S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{0}}\rangle \sim (-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}$, в отличие от спин-волнового подхода, когда либо $\langle S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{0}}\rangle \sim (-1)^{n_x}$, либо $\langle S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{0}}\rangle \sim (-1)^{n_y}$.

Аналогично, как видно из рис. 3, при увеличении J_3 от 0.19 до 0.47 ($J_2 = 0$), открывается и растет щель $\Delta_{\mathbf{Q}}$ в антиферромагнитной точке $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$, то есть происходит переход из "шахматной" фазы LRO

$C(\pi,\pi)$ в спин-жидкостное состояние SRO $C(\pi,\pi)$. При этом с ростом J_3 уменьшается щель в несоизмеримой точке $\mathbf{q}_0=(k,k)$ на диагонали зоны Бриллюэна. Закрытие этой щели означает переход в геликоидальную фазу с несоизмеримым спиновым порядком LRO $S(k,k)$.

Отметим, что в точке перехода в геликоидальную фазу с дальним порядком LRO $S(k,k)$ ($J_3=0.47$, $J_2=0$) значение вектора $\mathbf{q}_0$, который задает структуру геликоида, отличается от значения $\widetilde{\mathbf{q}}_0$, даваемого классическим пределом [13], при этом $q_0<\widetilde{q}_0$. Последнее неравенство сохраняется и при ненулевых J_2 вдоль границы жидкость – геликоид (k,k) (см. также [14]).

Итак, как видно из представленных рисунков, в настоящей работе при анализе спин-жидкостного состояния и его границ получены следующие фазы:

1) фазы с дальним порядком LRO $C(\pi,\pi)$, LRO $C(\pi,0;0,\pi)$; LRO $S(k,k)$; в этих фазах, кроме тривиальной точки $q=0$, щель в спектре спиновых возбуждений закрыта в соответствующей точке $\mathbf{q}_0$ зоны Бриллюэна, спин-спиновый коррелятор на бесконечности отличен от нуля, а его характер определяется положением точки $\mathbf{q}_0$. Отметим, что все эти фазы диагностированы на их границах со спиновой жидкостью;

2) спин-жидкостная фаза, в которой различаются области с доминированием различного типа ближнего порядка: SRO $C(\pi,\pi)$, SRO $C(\pi,0;0,\pi)$, SRO $S(k,k)$ и SRO $S(k,\pi;\pi,k)$, который диктуется положением наименьшей щели в спиновом спектре.

Подчеркнем еще раз – на примере рис. 2, – что различие между состояниями в фазе спиновой жидкости носит условный характер. А именно, при малых отклонениях J_2 от точки потери дальнего шахматного порядка щель в точке $\mathbf{Q}$ мала и спин-спиновые корреляторы носят "шахматный" характер. При увеличении J_2 щели в точках $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Q}$ сравнимы, коррелятор носит смешанный шахматный и страйп-характер. При дальнейшем увеличении J_2 спиновая щель в точке $\mathbf{X}$ мала, а в точке $\mathbf{Q}$ – большая, и корреляторы приобретают страйп-характер.

Отметим, что состояния SRO $C(\pi,\pi)$ и SRO $C(\pi,0;0,\pi)$ в [10] не диагностированы. Напомним также, что принятый в настоящей работе метод СССП не позволяет рассматривать состояния, нарушающие трансляционную симметрию, в частности, box- и columnar-состояния.

На рис. 4–6 представлены полученные в настоящей работе типичные спектры спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ на границах фаз с дальним порядком (рис. 4 – "шахматная" фаза LRO $C(\pi,\pi)$, рис. 5 – страйп-фаза

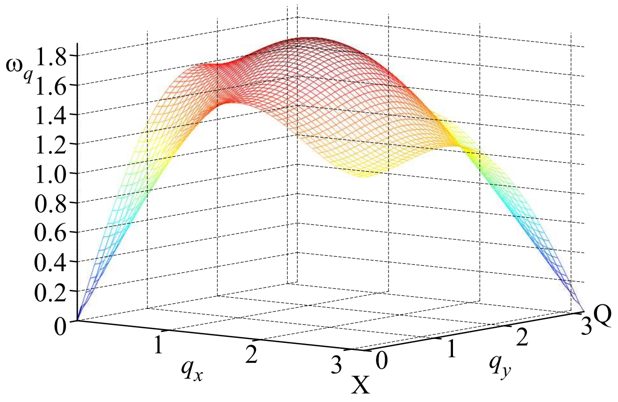

Рис. 4. Типичный спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ на границе "шахматной" фазы LRO $C(\pi,\pi)$ ($J_2=0.281$, $J_3=0$, $\gamma=0.6$). Щель закрыта в антиферромагнитной точке $\mathbf{Q}=(\pi,\pi)$

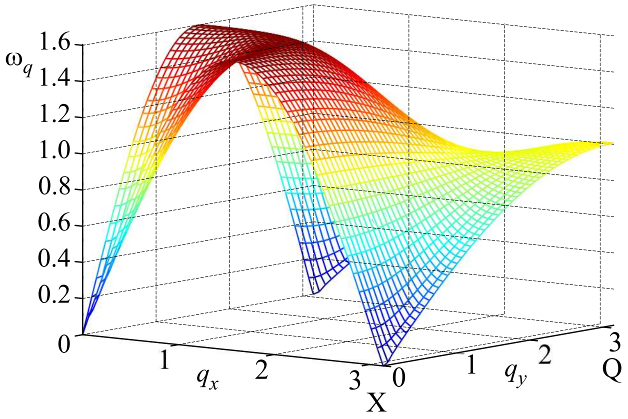

Рис. 5. Типичный спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ на границе страйп-фазы LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ ($J_2=0.6$, $J_3=0$, $\gamma=0.6$). Щель закрыта в точках $\mathbf{X}=(0,\pi),(\pi,0)$

LRO $C(\pi,0;0,\pi)$, рис. 6 – геликоид LRO $S(k,k)$). Из рисунков видно, что щель в спиновом спектре закрыта в соответствующих точках зоны Бриллюэна: в точке $\mathbf{Q}=(\pi,\pi)$ в LRO $C(\pi,\pi)$, в точках $\mathbf{X}=(0,\pi),(\pi,0)$ в LRO $C(\pi,0;0,\pi)$ и в несоизмеримой точке (k,k) на диагонали зоны Бриллюэна в LRO S(k,k).

Приведенные рисунки отвечают граничной ситуации, когда щель в соответствующей точке уже закрыта, а конденсат c_0 в (6) еще равен нулю. Для вычисления спектров и энергий в состоянии с дальним порядком при переходе границы спиновой жидкости к уравнениям самосогласования добавляется конденсат, щель в соответствующей точке остается нулевой (и условие констрейнта $C_0=\langle S_0^\alpha S_0^\alpha\rangle=1/4$ обеспечивается теперь не конечной щелью, а конечным конденсатом c_0). В настоящей работе, однако, как упо-

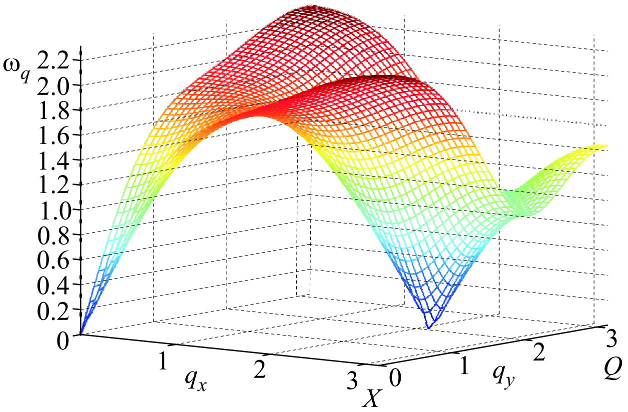

Рис. 6. Типичный спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ на границе геликоидальной фазы LRO $S(k,k)$ ($J_2 = 0$, $J_3 = 0.47$, $\gamma = 0.6$). Щель закрыта в несоизмеримой точке (k,k)

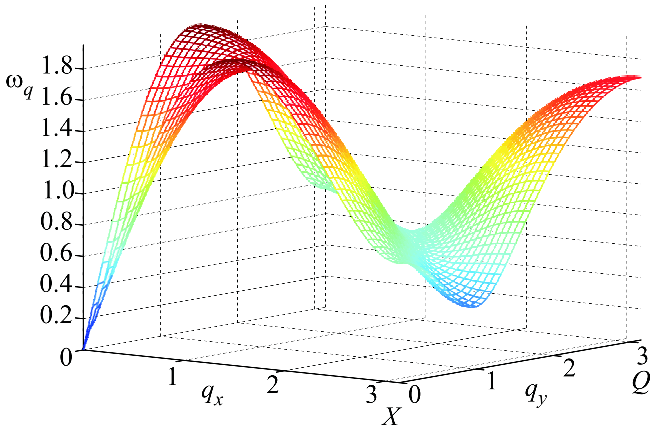

Рис. 7. Характерный спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ в спин-жидкостном состоянии SRO $S(k,\pi;\pi,k)$ без дальнего порядка ($J_2 = 1$, $J_3 = 0.35$, $\gamma = 0.6$). Щель минимальна в несоизмеримой точке (k,π)

мянуто, мы ограничиваемся спиновой жидкостью и ее границами.

Сравнение спектров (рис. 4–6) показывает, что $\omega(\mathbf{q})$ имеет качественно различный вид в случае "шахматной", страйп и геликоидальных фаз. В частности, для геликоидальной и страйп-фаз возникают дополнительные ван-ховские особенности, отвечающие почти бездисперсионному или квазиодномерному характеру спектра. В случае страйп-фазы (см. рис. 5) почти бездисперсионная область находится вблизи точки $\mathbf{Q}$. В случае геликоидальной фазы (рис. 6) имеется линия, параллельная $\mathbf{X}-\mathbf{X}$, вдоль которой спектр бездисперсионен. Приведенные рис. 2–6 дают представление о нетривиальной эволюции спектра ω_q в области фазовой диаграммы, отмеченной черными кружками на рис. 1.

Что же касается существующей в классическом пределе четвертой фазы с дальним порядком, LRO $S(k,\pi;\pi,k)$, то в области $J_2 < 2$, $J_3 < 2$ и при затухании $\gamma = 0.6$ мы обнаружили только указание на ее возможное существование. В этой области СССП дает геликоид без дальнего порядка, то есть состояние с минимальной щелью в точке (k,π). Характерный спектр для такого состояния приведен на рис. 7 ($J_2 = 1$, $J_3 = 0.35$, $\gamma = 0.6$). Отметим, что в кластерных расчетах [10] геликоид (k,π) с дальним порядком также не обнаружен. С ростом затухания в нашем подходе геликоид (k,π) появляется при $\gamma \sim 0.9$. Например, для $J_2 = 0.7$, $J_3 = 0.24$, $\gamma = 0.86$ щель в несоизмеримой точке (k,π) закрыта. Однако вопрос о восстановлении величины затухания в области существования геликоидальной фазы (k,π) в настоящее время представляется открытым.

В заключение отметим, что в рамках используемого метода СССП принципиально может быть получено точное выражение для функции Грина:

$$G^{\alpha}(\mathbf{q},\omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - M(\mathbf{q},\omega)}, \tag{7}$$

учитывающее $\mathbf{q}$- и ω-зависимость поляризационного оператора $M(\mathbf{q},\omega)$, обусловленную спин-спиновым рассеянием (в нашем феноменологическом приближении учитывается только его мнимая часть в рамках выражения $\mathrm{Im}\, M(\mathbf{q},\omega) = -\omega\gamma$). Однако общее выражение для $M(\mathbf{q},\omega)$ даже в случае отсутствия фрустрации имеет сложный вид. Оно может быть получено в рамках метода неприводимых функций Грина [15]:

$$\begin{gathered}\mathrm{Im}\, M(\mathbf{q},\omega) = \frac{2\pi}{F_{\mathbf{q}}N}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3}\int d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \delta(\omega - \sum_{i=1}^{3}\omega_i) \times \\ \times\, m(\omega_1)m(\omega_2)m(\omega_3)\left(1 - e^{\beta\omega}\right)\Theta^2_{\mathbf{q},\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3} \times \\ \times\, \mathrm{Im}\, G^z(\mathbf{k}_1,\omega_1)\,\mathrm{Im}\, G^z(\mathbf{k}_2,\omega_2)\,\mathrm{Im}\, G^z(\mathbf{k}_3,\omega_3);\end{gathered}$$

$$\begin{gathered}\Theta_{\mathbf{q},\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3} = 16N^{-1}\delta_{\mathbf{q}-(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3)} \times \\ \times \left[(-\theta_{\mathbf{k}_2}\theta_{\mathbf{k}_3} + \theta_{\mathbf{k}_1}\theta_{\mathbf{k}_2} - \theta_{\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}\theta_{\mathbf{k}_2} + \theta_{\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3}\theta_{\mathbf{k}3}) - \right. \\ \left. -\, 4^{-1}\left(\theta_{\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3} - \theta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2} - \theta_{\mathbf{k}_3} + \theta_{\mathbf{k}_2}\right)\right].\end{gathered}$$

Здесь $F_{\mathbf{q}}$ имеет вид (3) при $J_2 = J_3 = 0$.

Выражение для $\mathrm{Im}\, M(q,\omega)$ в случае фрустрированной модели должно быть более громоздким, и, насколько нам известно, явный вид его пока не получен. Сложности прямого вычисления поляризационного оператора также заключаются в том, что входящая в него функция Грина должна вычисляться самосогласованным образом.

В альтернативных подходах вычисление мнимой части поляризационного оператора также затруднительно, известны только некоторые асимптотики для нефрустрированной модели при $T \to 0$ в рамках двухподрешеточного формализма Дайсона-Малеева [16].

Наконец, обсудим выбор значения параметра затухания $\gamma = 0.6$, принятый в настоящей работе (и приводящий, как уже упоминалось, к разумному согласию с данными кластерных расчетов [10, 11]). Некоторые указания на порядок величины γ во фрустрированной спиновой модели можно получить, анализируя доступные результаты рассмотрения $t - J$ модели [17, 18]. При этом предполагается, что качественно увеличение допирования в модели с носителями соответствует увеличению фрустрации в чисто спиновой модели. Мы рассматриваем систему в спин-жидкостном состоянии. Поэтому следует сравнивать затухание с данными $t - J$ модели при таком допировании, когда дальний порядок отсутствует. В работе [18] соответствующее допирование $\delta = 0.15$ приводит к минимальному значению $\gamma \sim 0.7J$, близкому к значениям, принятым в настоящей работе. Отметим, что к значениям $\gamma > 0.7J$ приводит экстраполяция к нулю температурного поведения $\gamma(T)$ из данных кластерной диагонализации [17]. Детальный анализ других доступных данных приводит к диапазону оценок для γ в моделях с допированием, $\gamma \sim 0.4 \div 1.0$.

Таким образом, в рамках СССП происходит непрерывный переход между тремя фазами с дальним порядком (“шахматная”, страйп-фаза и геликоид (k, k)) через спин-жидкостную фазу. Отметим, что развитый метод допускает рассмотрение спиновой восприимчивости J_1-J_2-J_3–системы и при конечной температуре.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 10-02-00614).

1. N.M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors*, Springer Berlin, 2010.
2. R. Melzi, P. Carretta, A. Lascialfari et al., Phys. Rev. B **85**, 1318 (2000)
3. R. Nath, A. Tsirlin, H. Rosner, and C. Geibell, Phys. Rev. B **78**, 64422 (2008)
4. A. Tsirlin and H. Rosner, Phys. Rev. B **79**, 214417 (2009)
5. J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
6. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
7. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994); A. F. Barabanov and V. M. Berezovsky, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 3974 (1994).
8. A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, and A.V. Mikheenkov, *Spin polaron in the cuprate superconductor: Interpretation of the ARPES results*, in: N.M. Plakida (Ed.), *Spectroscopy of High-Tc Superconductors. A Theoretical View*, Taylor&Francis, 2003, p. 1.
9. A.F. Barabanov, A.V. Mikheyenkov, and A.M. Belemuk, Phys. Lett. A **365**, 469 (2007).
10. P. Sindzingre, N. Shannon, and T. Momoi, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022058 (2010).
11. M. Mambrini, A. Lauchli, D. Poilblanc, and F. Mila, Phys. Rev. B **74**, 144422 (2006).
12. J. Richter and J. Schulenburg, Eur. Phys. J. B **73**, 117 (2010)
13. A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and Jose Riera, Phys. Rev. B **42**, 6283 (1990).
14. R. Rastelli and A. Tassi, Phys. Rev. B **46** 10793 (1992).
15. A.F. Barabanov and L.A. Maksimov, Phys. Lett. A **207**, 390 (1995).
16. S. Tyc and B. Halperin, Phys. Rev. B **42**, 2096 (1990).
17. P. Prelovsek, I. Sega, and J. Bonca, Phys. Rev. Lett. **92**, 027002 (2004).
18. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, Phys. Rev. B **80**, 104425 (2009).