Письма в ЖЭТФ, том 102, вып. 5, с. 333 – 338 © 2015 г. 10 сентября

Квантовый фазовый переход в двумерном фрустрированном магнетике в матричном проекционном подходе

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

[+]*Институт физики высоких давлений им. Верещагина РАН, 142190 Троицк, Россия*

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

[×]*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 июля 2015 г.

Для описания квантового фазового перехода в двумерном фрустрированном антиферромагнетике развит матричный проекционный формализм. Подход сохраняет достоинства традиционного сферически-симметричного самосогласованного рассмотрения (точное соблюдение спинового констрейнта и теоремы Мермина–Вагнера) и при этом лишен его недостатков. В частности, уже в простейшей реализации достигается хорошее согласие с численными данными в двух наиболее изученных реперных точках: точке нулевой фрустрации и точке перехода из антиферромагнитно упорядоченной фазы в неупорядоченную фазу.

DOI: 10.7868/S0370274X15170099

1. Введение. Одной из базовых моделей при изучении квантового фазового перехода [1] является двумерная J_1–J_2 $S = 1/2$ модель Гейзенберга в области $J_1 > J_2 > 0$. В последнее время переход и его окрестность в этой модели исследуются главным образом численными методами [2] (см. также недавнюю работу [3] и ссылки [1–41] в ней). Общепринятое значение J_2/J_1 в точке перехода при $T = 0$ из состояния с дальним антиферромагнитным (АФМ) порядком в неупорядоченное состояние $J_2/J_1 \approx 0.44$.

Альтернативой численным методам являются аналитические подходы, которые должны учитывать особенности двумерного случая. При сколь угодно малой температуре $T > 0$ в 2D-модели в силу теоремы Мермина–Вагнера дальний порядок невозможен и средний спин на узле равен нулю даже при нулевой фрустрации ($J_2 = 0$), однако присутствуют сильные АФМ спиновые корреляции на близких узлах. Слабо фрустрированная система приобретает дальний порядок только при $T \to 0$.

Для отражения особенностей двумерной J_1–J_2 $S = 1/2$ модели широко применяется сферически-симметричный самосогласованный подход для двухвременных запаздывающих спиновых функций Грина [4, 5] (СССП, в альтернативной англоязычной нотации rotationally invariant second-order Green-function method – RGM). Подход автоматически сохраняет $SU(2)$-симметрию гамильтониана, трансляционную симметрию и спиновый констрейнт на узле. Также автоматически соблюдается теорема Мермина–Вагнера. Метод пригоден для изучения и других двумерных моделей (см., например, недавние работы [6–8]).

Отметим, что теоретическое описание спиновых возбуждений в рамках СССП используется для объяснения экспериментальных результатов по нейтронному рассеянию в купратах и привлекается при трактовке зарядовых возбуждений и их кинетики в случае допирования последних [9, 10]. Кроме того, СССП позволяет в едином подходе описать систему при произвольных величинах и знаках обоих обменов, причем как при $T = 0$, так и при $T > 0$.

Однако при $T \to 0$ результаты СССП в его стандартной реализации неудовлетворительно согласуются с данными численных расчетов. В частности, область упорядоченной фазы оказывается существенно более узкой.

В настоящей работе показано, что исследование задачи в рамках матричного проекционного подхода позволяет, сохраняя достоинства сферически-симметричного аналитического рассмотрения, достичь хорошего согласия с численными данными как по значению J_2/J_1 в точке перехода, так и по характеристикам в другой хорошо изученной численно точке – $J_2 = 0$. При этом подход позволяет найти такие характеристики системы, которые пока не доступны численным методам (например, спектр спиновых возбуждений).

1)e-mail: mikheen@bk.ru

Ряд общих выражений мы будем приводить для случая $J_2 = 0$ (из-за громоздкости формул). Однако результаты расчетов будут представлены и при $J_2 \neq 0$. Это относится, в частности, к общему выражению для среднеполевого спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{k}}^2$ и к трактовке вершинных поправок для спиновых функций Грина $G^{zz}(\omega, \mathbf{q})$. В работе показано, что $\omega_{\mathbf{k}}^2$ выражается через четырехузельные спин-спиновые корреляционные функции и содержит члены, которые принципиально не возникают при традиционном подходе, основанном на процедуре расцепления на уровне уравнений для функций Грина.

2. Формулировка задачи. Гамильтониан $S = 1/2$ J_1–J_2 модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке имеет вид

$$H = \frac{J_1}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}} + \frac{J_2}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{d}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}+\mathbf{d}}, \tag{1}$$

где $\mathbf{g}, \mathbf{d}$ – вектора первых и вторых ближайших соседей (сторона и диагональ квадрата).

Нас будут интересовать двухвременные запаздывающие функции Грина

$$G^{zz}(\omega, \mathbf{k}) = \langle S_{\mathbf{k}}^z | S_{-\mathbf{k}}^z \rangle_\omega, \quad S_{\mathbf{k}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{kn}} S_{\mathbf{n}}^z;$$

$$G_{\mathbf{nm}} = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} \langle [S_{\mathbf{n}}^z(t), S_{\mathbf{m}}^z] \rangle.$$

Выпишем первые два уравнения движения.

Благодаря сферической симметрии отличны от нуля (и равны друг другу) только диагональные по $\beta = x, y, z$ функции Грина, а средний спин на узле равен нулю ($G^{zz} = G^{xx} = G^{yy}$; $\langle S_{\mathbf{n}}^\beta \rangle = 0$). Поскольку $\langle [S_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle = 0$, первые два точных уравнения движения для $G^{zz}(\omega, \mathbf{q})$ имеют вид

$$\omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [S_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle, \tag{2}$$

$$\omega \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle. \tag{3}$$

Введем обозначения для последовательных коммутаторов:

$$D_{\mathbf{n}}^z = [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \tag{4}$$

$$W_{\mathbf{n}}^z = [[S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \hat{H}] = [D_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}], \tag{5}$$

и перепишем (2), (3) в компактном виде:

$$\omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle D_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle, \tag{6}$$

$$\omega \langle D_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle = \langle [D_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle W_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle. \tag{7}$$

Простые вычисления дают для $D_{\mathbf{n}}^z$ и $W_{\mathbf{n}}^z$

$$D_{\mathbf{n}}^z = \Sigma_{\mathbf{g}} i \varepsilon_{z\alpha\beta} S_{\mathbf{ng}}^\alpha S_{\mathbf{n}}^\beta, \tag{8}$$

$$W_{\mathbf{n}}^z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} (S_{\mathbf{n}}^z - S_{\mathbf{ng}}^z) + 2U_{\mathbf{n}}^z, \tag{9}$$

$$U_{\mathbf{n}}^z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}_1, \mathbf{g_2}, \beta} \overline{\Delta}_{\beta,z} u_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2}^\beta, \tag{10}$$

$$u_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2}^\beta = \overline{\Delta}_{\mathbf{g}_1,-\mathbf{g}_2} (S_{\mathbf{ng}_1}^\beta S_{\mathbf{n}}^\beta S_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2}^z - S_{\mathbf{n}}^\beta S_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2}^\beta S_{\mathbf{ng}_1}^z) - \overline{\Delta}_{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2} (S_{\mathbf{n}}^\beta S_{\mathbf{ng}_1}^\beta S_{\mathbf{ng}_2}^z - S_{\mathbf{ng}}^\beta S_{\mathbf{ng}_2}^\beta S_{\mathbf{ng}_1}^z), \tag{11}$$

где $\varepsilon_{z\alpha\beta}$, как обычно, есть абсолютный антисимметричный тензор; $\overline{\Delta}_{\beta,z} = (1 - \delta_{\beta,z})$ и, аналогично, $\overline{\Delta}_{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2} = (1 - \delta_{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2})$; $\mathbf{ng} = \mathbf{n} + \mathbf{g}$, $\mathbf{ng_1g_2} = \mathbf{n} + \mathbf{g_1} + \mathbf{g_2}$.

Далее стандартный алгоритм в СССП состоит в расцеплении трехузельного члена $U_{\mathbf{n}}^z$ в правой части (7) с выделением спин-спиновых корреляционных функций вида $\langle S_{\mathbf{ng}}^\beta S_{\mathbf{n}}^\beta \rangle$ и одновременным введением вершинных поправок (детали см., например, в [5]). Мы, однако, проведем вычисления несколько иным путем.

После перехода в Фурье система первых двух точных уравнений в очевидных обозначениях принимает вид

$$\omega \langle S_{\mathbf{k}}^z | (S_{\mathbf{k}}^z)^+ \rangle = \langle D_{\mathbf{k}}^z | (S_{\mathbf{k}}^z)^+ \rangle, \tag{12}$$

$$\omega \langle D_{\mathbf{k}}^z | (S_{\mathbf{k}}^z)^+ \rangle = F_{\mathbf{k}} + \langle W_{\mathbf{k}}^z | (S_{\mathbf{k}}^z)^+ \rangle, \tag{13}$$

где

$$D_{\mathbf{k}}^z = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{kn}} D_{\mathbf{n}}^z = iN^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{n},\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{kn}} (1 - e^{-i\mathbf{kg}}) S_{\mathbf{ng}}^x S_{\mathbf{n}}^y, \tag{14}$$

$$F_{\mathbf{k}} = \langle [D_{\mathbf{k}}^z, S_{-\mathbf{k}}^z] \rangle_{\mathbf{k}} = -8c_{\mathbf{g}}(1 - \gamma_{\mathbf{k}}), \tag{15}$$

$$W_{\mathbf{k}}^z = 2(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) S_{\mathbf{k}}^z + 2U_{\mathbf{k}}^z. \tag{16}$$

Здесь $c_{\mathbf{g}} = \langle S_{\mathbf{ng}}^z S_{\mathbf{n}}^z \rangle$, $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4} \Sigma_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{kg}}$, а слагаемое $U_{\mathbf{k}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{kn}} U_{\mathbf{n}}^z$ будет вычисляться ниже.

3. Матричный проекционный метод. Для выхода за рамки среднеполевого приближения используем аппарат неприводимых функций Грина в рамках проекционного метода Цванцига–Мори–Церковникова [11–18]. Сначала выпишем соответствующие уравнения в общем виде.

Итак, вычисляются двухвременные запаздывающие функции Грина

$$G_{ij} = \langle \hat{A}_i | \hat{A}_j^+ \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} \langle [\hat{A}_i(t), \hat{A}_j^+] \rangle \tag{17}$$

для конечного набора операторов $\hat{A}_i$ ($i = 1{-}n$), образующих вектор $\mathbf{A} = \{\hat{A}_1 \ldots \hat{A}_n\}$.

Обозначим матрицу $n \times n$ функций Грина G_{ij} как $\mathbf{G}$, матрицу перекрытий $K_{ij} = \langle[\hat{A}_i, \hat{A}_j^+]\rangle$, как $\mathbf{K} = \langle[\mathbf{A}, \mathbf{A}^+]\rangle$, матрицу частот – как $\boldsymbol{\omega} = \omega\mathbf{I}$, $(\mathbf{I})_{ij} = \delta_{ij}$.

Введем вектор $\mathbf{B} = \{\hat{B}_1 \ldots \hat{B}_n\}$ операторов $\hat{B}_i$, возникающих в цепочке уравнений для функций Грина $\mathbf{B} = [\mathbf{A}, \hat{H}]$, $\hat{B}_i = [\hat{A}_i, \hat{H}]$ ($\hat{H}$ – гамильтониан системы), а также энергетическую матрицу $\boldsymbol{\Omega} = \langle[\mathbf{B}, \mathbf{A}^+]\rangle$, элементы которой определяются коммутаторными средними $\Omega_{ij} = \langle[\hat{B}_i, \hat{A}_j^+]\rangle$.

Тогда несложно показать, что аналог уравнения Дайсона для $\mathbf{G}$ в матричном виде следующий:

$$\mathbf{G}\left[\boldsymbol{\omega} - \mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\Omega} - \mathbf{K}^{-1}\mathbf{L}^{irr}\right] = \mathbf{K}. \qquad (18)$$

Здесь матрица неприводимых частей имеет вид

$$\mathbf{L}^{irr} = \langle\mathbf{B}|\mathbf{B}^+\rangle - \langle\mathbf{B}|\mathbf{A}^+\rangle\mathbf{G}^{-1}\langle\mathbf{A}|\mathbf{B}^+\rangle, \qquad (19)$$

а ее элементы

$$L_{ij}^{irr} = \langle\hat{B}_i|\hat{B}_j^+\rangle - \langle\hat{B}_i|\hat{A}_s^+\rangle(\hat{G}^{-1})_{st}\langle\hat{A}_t|\hat{B}_j^+\rangle. \qquad (20)$$

4. Проекционный метод для модели Гейзенберга. Для рассматриваемой спиновой задачи (12), (13) ограничимся базисом из двух операторов $\hat{A}_i$ ($i = 1, 2$). Очевидно, что $\hat{A}_1 = S_{\mathbf{k}}^z$. В качестве второго оператора выберем $\hat{A}_2 = D_{\mathbf{k}}^z$ (см. (4), (8), (14)). Тогда, соответственно, $\hat{B}_1 = [\hat{A}_1, \hat{H}] = D_{\mathbf{k}}^z$, а $\hat{B}_2 = [\hat{A}_2, \hat{H}] = W_{\mathbf{k}}^z$ (см. (5), (9), (10), (16)).

Прямые, но громоздкие вычисления показывают, что для $\mathbf{A} = \{S_{\mathbf{k}}^z, D_{\mathbf{k}}^z\}$, $\mathbf{B} = \{D_{\mathbf{k}}^z, W_{\mathbf{k}}^z\}$ входящие в (18) матрицы и само матричное уравнение (18) имеют следующий точный вид:

$$\mathbf{K} = \begin{vmatrix} 0 & F_{\mathbf{k}} \\ F_{\mathbf{k}} & 0 \end{vmatrix}, \qquad (21)$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{vmatrix} F_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \langle[W_{\mathbf{k}}^z, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]\rangle \end{vmatrix}, \qquad (22)$$

$$\mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\Omega} = \begin{vmatrix} 0 & \omega_{\mathbf{k}}^2 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \qquad (23)$$

где

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = F_{\mathbf{k}}^{-1}\Omega_{22} = F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle[W_{\mathbf{k}}^z, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]\rangle, \qquad (24)$$

$$\mathbf{L}^{irr} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr} \end{vmatrix}. \qquad (25)$$

Тогда в левой части (18)

$$\left[\boldsymbol{\omega} - \mathbf{K}^{-1}\boldsymbol{\Omega} - \mathbf{K}^{-1}\mathbf{L}^{irr}\right] = \\ = \begin{vmatrix} \omega & -\omega_{\mathbf{k}}^2 - F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr} \\ -1 & \omega \end{vmatrix} \qquad (26)$$

и окончательно для уравнения (18)

$$\begin{vmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \omega & -\omega_{\mathbf{k}}^2 - F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr} \\ -1 & \omega \end{vmatrix} = \\ = \begin{vmatrix} 0 & F_{\mathbf{k}} \\ F_{\mathbf{k}} & 0 \end{vmatrix}. \qquad (27)$$

Выберем теперь пару уравнений, относящихся к верхней строчке матрицы $\mathbf{G}$:

$$\begin{cases} \omega G_{11} - G_{12} = 0, \\ -G_{11}\left[\omega_{\mathbf{k}}^2 + F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr}\right] + \omega G_{12} = F_{\mathbf{k}}. \end{cases}$$

Решение этой системы уравнений дает функцию Грина $G_{11} = G^{zz}(\omega, \mathbf{k})$

$$G_{11} = \frac{F_{\mathbf{k}}}{\omega^2 - [\omega_{\mathbf{k}}^2 + F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr}]}. \qquad (28)$$

Подчеркнем, во-первых, что при выводе соотношений (21)–(28) существенно использованы ограничения СССП (требования сферической симметрии и нулевого среднего спина на узле). И во-вторых, при соблюдении указанных ограничений все соотношения (21)–(28) являются точными.

5. Среднеполевой спектр. Мы не будем останавливаться на способах вычисления неприводимой функции Грина $\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr}$, учет которой приводит к возникновению затухания спиновых возбуждений. Нас пока интересует выражение для величины $\omega_{\mathbf{k}}$ (24), которая имеет смысл среднеполевого спектра спиновых возбуждений и существенно определяет $\langle W_{\mathbf{k}}^z|(W_{\mathbf{k}}^z)^+\rangle^{irr}$ при любом способе отыскания последней.

Это выражение имеет вид (см. (15), (16), (24))

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = 2(1 - \gamma_{\mathbf{k}}) + \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2, \quad \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2 = 2F_{\mathbf{k}}^{-1}\langle[U_{\mathbf{k}}^z, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]\rangle. \qquad (29)$$

Последний коммутатор, $M = [U_{\mathbf{k}}^z, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]$, может быть представлен в виде суммы двух частей: $M = M_1 + M_2$, где M_1 содержит вклады от коммутации типа $[S_{\mathbf{ng}}^z, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]$, а M_2 – вклады от коммутации типа $\overline{\Delta}_{\beta,z}[S_{\mathbf{n}}^\beta S_{\mathbf{ng}}^\beta, (D_{\mathbf{k}}^z)^+]$ (см.(10), (11)). При вычислении M_1 и M_2 возникают средние от четырехузельных операторов. Отличный от нуля вклад дают только слагаемые, для которых все четыре узла являются несовпадающими. Выражения для M_1 и M_2 следующие:

$$M_1 = -\sum_\beta \overline{\Delta}_{\beta;z} \tilde{\sum_{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3}} m_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3}^\beta, \qquad (30)$$

$$m^{\beta}_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3} = \left[\cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2)) - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3))\right] \times \times \langle S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1} S^{\beta}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2} S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3}\rangle - - \left[\cos(\mathbf{kg}_1) - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2))\right]\langle S^{\beta}_{\mathbf{n}} S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2} S^{x}_{\mathbf{ng}_1} S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_3}\rangle - - \left[\cos(\mathbf{kg}_2) - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3))\right]\langle S^{\beta}_{\mathbf{n}} S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1} S^{x}_{\mathbf{ng}_2} S^{x}_{\mathbf{ng}_2\mathbf{g}_3}\rangle + + \left[1 - \cos(\mathbf{kg}_3)\right]\langle S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1} S^{\beta}_{\mathbf{ng}_2} S^{x}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_3}\rangle, \qquad (31)$$

$$M_2 = -\tilde{\sum_{\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3}} \mu^{\beta}_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3}, \qquad (32)$$

$$\mu^{\beta}_{\mathbf{n},\mathbf{g}_1,\mathbf{g}_2,\mathbf{g}_3} = \left[1 - \cos(\mathbf{kg}_3) - \cos(\mathbf{kg}_1) + \cos(\mathbf{k}(\overline{\mathbf{g}}_1\mathbf{g}_3))\right] \times \times \langle S^{x}_{\mathbf{ng}_1} S^{x}_{\mathbf{ng}_3} S^{z}_{\mathbf{n}} S^{z}_{\mathbf{ng}_2}\rangle - -\left[1 - \cos(\mathbf{kg}_3) - \cos(\mathbf{kg}_1) + \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3))\right] \times \times \langle S^{x}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_3} S^{z}_{\mathbf{ng}_1} S^{z}_{\mathbf{ng}_2}\rangle + +\left[1 - \cos(\mathbf{kg}_3) - \cos(\mathbf{kg}_2) + \cos(\mathbf{k}(\overline{\mathbf{g}}_2\mathbf{g}_3))\right] \times \times \langle S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2} S^{x}_{\mathbf{ng}_3} S^{z}_{\mathbf{n}} S^{z}_{\mathbf{ng}_1}\rangle - -\left[\cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2)) - \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3)) - - \cos(\mathbf{kg}_1) + \cos(\mathbf{k}(\mathbf{g}_1\mathbf{g}_3))\right]\langle S^{x}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3} S^{z}_{\mathbf{ng}_1\mathbf{g}_2} S^{z}_{\mathbf{ng}_2}\rangle.$$

В (30) и (32) волна у суммы означает упомянутое отсутствие слагаемых, в которых хотя бы два узла совпадают; $\overline{\mathbf{g}} = -\mathbf{g}$; в индексах, как и выше, использовано соглашение вида $\mathbf{g}_1\mathbf{g}_2\mathbf{g}_3 = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3$.

6. Выделение стандартного результата СССП. Таким образом, выражение (29) с учетом (30) и (32) определяет среднеполевой спектр спиновых возбуждений в изложенном выше проекционном подходе.

Широко используемый (см., например, [4, 5, 9, 19]) стандартный спектр СССП имеет вид

$$\omega^2 = 4J^2(1-\gamma_{\mathbf{k}})\left\{\frac{1}{2} + 2[(\tilde{c}_{2g} + 2\tilde{c}_d) - \tilde{c}_g(1+4\gamma_{\mathbf{k}})]\right\}, \qquad (33)$$

где $\tilde{c}_g = \alpha_g c_g$, $\tilde{c}_d = \alpha_d c_d$, $\tilde{c}_{2g} = \alpha_{2g} c_{2g}$ – спин-спиновые корреляторы на первых трех координационных сферах, перенормированные соответствующими вершинными поправками α. Можно показать, что (33) получается из (29) в результате следующих огрублений:

а) член M_2 отбрасывается вовсе;

б) четырехузельные средние в M_1 расцепляются на произведение парных корреляторов по схеме

$$\langle S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1} S^{\beta}_{\mathbf{ng}_2} S^{x}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_3}\rangle \approx \alpha_{|\mathbf{g}_2-\mathbf{g}_1|}\langle S^{\beta}_{\mathbf{ng}_1} S^{\beta}_{\mathbf{ng}_2}\rangle\langle S^{x}_{\mathbf{n}} S^{x}_{\mathbf{ng}_3}\rangle \qquad (34)$$

с выделением вершинной поправки α (индекс вершины определяется узлами коррелятора $\langle S^{\alpha}_{\mathbf{ng}_1} S^{\alpha}_{\mathbf{ng}_2}\rangle$);

с) далее частично снимаются ограничения на суммирование в (30): теперь отличны друг от друга не все четыре узла, а лишь узлы в парах, определяющих корреляторы.

Тогда $\mathbf{k}$-зависимость в (31) в выражении для спектра (29) точно сокращается множителем $F^{-1}_{\mathbf{k}}$ и результат для $\omega^2_{\mathbf{k}}$ совпадает со стандартным спектром СССП (разумеется, в конвенциональной схеме приводящее к стандартному спектру расцепление производится гораздо раньше – на уровне узельного выражения (11)).

Очевидно, что более детальный учет слагаемых в M_1 и M_2 с неизбежностью приведет к $\mathbf{k}$-зависимости вершинных поправок α. То есть представление о вершинных поправках, не зависящих от квазиимпульса, основано на слишком грубом приближении и при более аккуратном рассмотрении должно быть отброшено.

Оговоримся вновь, что в работе во избежание громоздких выражений все выкладки проведены для $J_1 = 1$, $J_2 = 0$. Рассмотрение полного случая, однако, повторяет сделанные выше выводы.

7. От нефрустрированного АФМ-состояния до квантового фазового перехода. Таким образом, основной результат работы – обоснование $\mathbf{k}$-зависимости вершинных поправок в сферически-симметричном подходе. Учет такой зависимости позволяет уже в простейшем приближении исправить наиболее существенный недостаток подхода – неполное количественное совпадение с альтернативными данными при нулевой температуре.

Мы провели вычисления в области фрустрированного АФМ $J_1 > J_2 > 0$, полагая следующий вид для вершинных поправок на первых трех координационных сферах g, d и $2g$:

$$\tilde{c}_g = \alpha_1 V(\mathbf{k}) c_g; \quad V(\mathbf{k}) = 1 + h(1-\gamma^2_{\mathbf{k}}); \qquad (35)$$

$$\tilde{c}_d = \alpha_1 c_d; \quad \tilde{c}_{2g} = \alpha_1 c_{2g}, \qquad (36)$$

где квадратная гармоника $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{kg}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$.

В стандартном подходе СССП (без учета $\mathbf{k}$-зависимости вершин) на вершинные поправки накладываются условия

$$(\alpha_g - 1)/(\alpha_d - 1) = r_\alpha = \text{const}, \qquad (37)$$

$$\alpha_d = (1-p)\,\alpha_{2g} + p\,\alpha_g; \quad p = J_2/(J_1+J_2), \qquad (38)$$

первое из которых обеспечивает разумное температурное поведение вершин, а второе – корректный переход в предел $J_1 = 0$, $J_2 = 1$. В этих рамках невозможно сдвинуть точку перехода из антиферромагнитного в неупорядоченное состояние правее значения параметра фрустрации $p^* \simeq 0.13$. Отказ от ограничений (37), (38) позволяет достичь $p^* \simeq 0.19$ [19]. Общепризнанное же значение p в точке перехода, полученное различными, главным образом численными методами, составляет $p^* \simeq 0.31$, что соответствует $J_2/J_1 = 0.44$ (см. [3] и ссылки там). Наши вычисления позволяют достичь этого значения при $h \simeq -0.47$. Другая проблемная для СССП точка, хорошо изученная альтернативными методами, – точка $p = 0$ (J_1-модель). Здесь стандартный подход СССП в зависимости от выбора вершин дает хорошее согласие с численными данными либо только по энергии (т.е. по первому коррелятору c_g), либо только по эффективной намагниченности (по коррелятору на бесконечности). Наши вычисления показывают, что учет **k**-зависимости вершин позволяет в значительной степени преодолеть и эту трудность.

На рис. 1 приведены характерные зависимости от параметра фрустрации спинового конденсата

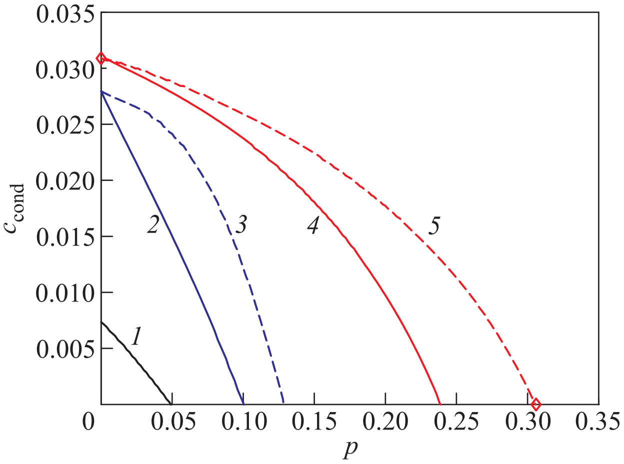

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости спинового конденсата $c_{\rm cond}$ от параметра фрустрации $p = J_2/(J_1+J_2)$ в области $J_1 > J_2 > 0$. Кривые *1*, *2*, *3* получены в стандартном алгоритме СССП: *1* – $r_\alpha = 1$; *2* – $r_\alpha = 0.830$ (наилучшее возможное согласие с численными данными при $p = 0$); *3* – r_α есть линейная интерполяция между $r_\alpha = 0.830$ и 0.764 (наилучшее согласие при $p = 0$ и максимально возможное значение p в точке перехода). Кривые *4*, *5* – результаты настоящей работы. Кривая *4* – $h = -0.37$ (точное согласие с численными данными по конденсату и хорошее – по энергии при $p = 0$). Кривая *5* демонстрирует согласие с численными данными и при $p = 0$, и по значению p в точке перехода $p^* = 0.306$. Ромбы на осях отвечают численным данным из [3] и цитированных там работ: $c_{\rm cond}$ при $p = 0$ и p^*

$c_{\rm cond}$ (спин-спинового коррелятора на бесконечности), который определяет дальний порядок в 2D-антиферромагнетике. Зануление $c_{\rm cond}$ отвечает точке квантового фазового перехода, в данном случае из АФМ-фазы в неупорядоченную фазу. Кривые *1*, *2*, *3* представляют зависимости для трех выбранных вершин в стандартном алгоритме СССП с условиями (37), (38). Кривая *1* отвечает $r_\alpha = 1$. Кривая *2* – $r_\alpha = 0.830$. При этом значении r_α достигается максимально возможное согласие с численными данными в точке $p = 0$. Наконец, кривая *3* отвечает r_α, зависящему от p и подобранному так, чтобы, с одной стороны, соответствовать численным данным при $p = 0$, а с другой – обеспечивать максимально возможное значение $p^* \simeq 0.13$.

Кривые *4* и *5* представляют результаты настоящей работы при простейшем учете **k**-зависимости вершин (36). Кривая *4* отвечает постоянной $h = -0.37$, при которой достигается точное согласие с численными данными по конденсату и хорошее – по энергии при $p = 0$. Кривая *5* отвечает h, зависящему от $p = 0$ так, чтобы не только соответствовать численным данным при $p = 0$, но и обеспечивать совпадение p^* с общепризнанной точкой перехода $p^* = 0.306$.

8. Заключение. Таким образом, в работе получено точное выражение (29), (30), (32) для среднеполевого спектра 2D J_1–J_2 $S = 1/2$ модели Гейзенберга в матричном проекционном подходе в рамках двухоператорного базиса. При простейшем расцеплении четырехоператорных средних возникающие вершинные поправки зависят от квазиимпульса (в отличие от стандартного алгоритма СССП). Учет этой зависимости позволяет корректно описать фрустрированное состояние двумерного магнетика и квантовый фазовый переход.

Отметим, что полученные выше выражения справедливы не только в рассмотренной области $J_1 > J_2 > 0$, но и при любых значениях и знаках обоих обменов.

Работа поддержана грантом РФФИ # 13-02-00909.

1. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, 2nd edn., Cambridge University Press (2011).
2. A. W. Sandvik, AIP Conference Proceedings **1297**, 135 (2010).
3. J. Richter, R. Zinke, and D. J. J. Farnell, Eur. Phys. J. B **88** (2015).
4. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
5. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, ТМФ **168**, 389 (2011).
6. P. Rubin, A. Sherman, and M. Schreiber, Phys. Lett. A **376**, 1062 (2012).
7. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, Eur. Phys. J. B **87**, 112 (2014).

8. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **100**, 207 (2014).
9. А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, ЖЭТФ **132**, 392 (2007).
10. А. Ф. Барабанов, Ю. М. Каган, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков, Т. В. Хабарова, УФН **185**, 479 (2015).
11. R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960).
12. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
13. R. Zwanzig, Annu. Rev. Phys. Chem. **16**, 67 (1965).
14. R. Zwanzig, K. S. J. Nordholm, and W. C. Mitchell, Phys. Rev. A **5**, 2680 (1972).
15. H. Mori, Progr. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
16. H. Mori, Progr. Theor. Phys. **34**, 399 (1965).
17. Ю. А. Церковников, ТМФ **7**, 250 (1971).
18. Ю. А. Церковников, ТМФ **49**, 219 (1981).
19. L. Siurakshina, D. Ihle, and R. Hayn, Phys. Rev. B **64**, 104406 (2001).