Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 8, с. 557 – 563 © 2019 г. 25 апреля

Термодинамика симметричной спин-орбитальной модели: одномерный и двумерный случаи[1)]

В. Э. Валиулин[+*], *А. В. Михеенков*[+*× 2)], *К. И. Кугель*[○∇], *А. Ф. Барабанов*[×]

[+]*Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия*

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

[×]*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия*

[○]*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия*

[∇]*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 6 марта 2019 г.
После переработки 20 марта 2019 г.
Принята к публикации 20 марта 2019 г.

В рамках сферически симметричного самосогласованного подхода рассчитаны теплоемкость и восприимчивости двумерной и одномерной спин-орбитальной модели при различных температурах и соотношениях между параметрами системы. Показано, что даже в отсутствие дальнего спинового и орбитального порядка в системе возникают особенности поведения термодинамических величин, характерные для фазовых переходов. Такие особенности оказываются связанными с появлением квантовой запутанности при взаимодействии спиновых и орбитальных степеней свободы.

DOI: 10.1134/S0370274X19080125

1. Введение. Проблема формирования запутанных (*entangled*) квантовых состояний играет важную роль во многих областях физики, привлекая к себе особое внимание в вопросах квантовых вычислений и их возможной реализации [1, 2]. При этом речь чаще всего идет о смешивании состояний, отвечающих различным проекциям спина. Не менее интересные задачи возникают и в двухспиновых системах, где эта запутанность понимается как некоторое коррелированное состояние двух спиновых переменных [3].

Сами двухспиновые модели характерны обычно для описания особенностей соединений переходных металлов со взаимосвязанными спиновыми и орбитальными степенями свободы, поэтому такие модели часто называются спин-орбитальными [4–6]. Необычные эффекты, связанные со спин-орбитальными корреляциями и соответствующей квантовой запутанностью, широко обсуждались в литературе. В частности, отмечалась возможность своеобразных типов спин-орбитальных квантовых состояний и переходов между ними [7–9].

Интересно, что необычное поведение спин-орбитальных корреляций может проявляться и в системах, в которых, в силу низкой размерности, отсутствует какой-либо спиновый или орбитальный порядок. Так, для симметричной двумерной модели оказывается характерным обращение спин-орбитальных корреляций в нуль при некоторых пороговых значениях температуры или параметров модели [10]. При этом поведение спиновой и орбитальной корреляционных функций не демонстрирует каких-либо особенностей.

Мотивация работы состоит в том, чтобы выяснить, как эта необычная особенность спин-орбитальных корреляций проявляется в термодинамических характеристиках рассматриваемых систем. Ниже мы показываем, что, несмотря на обусловленное низкой размерностью отсутствие дальнего порядка, при некоторой величине межподсистемного обмена одновременно с пороговым ростом спин-орбитальных корреляций четко проявляются особенности термодинамических величин, напоминающие фазовый переход. Появление этих особенностей мы интепретируем как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния.

Рассматриваются одномерный (1D) двумерный случаи (2D), использован сферически симметричный самосогласованный подход, который дает достаточно надежные результаты для низкоразмерных си-

[1)]См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

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

стем [10, 11]. Причем корреляционные и термодинамические особенности проявляются разным образом в разных размерностях. В частности, в рамках принятого подхода оказывается, что в 1D, в отличие от 2D, возможен возвратный (по температуре) переход в состояние с межподсистемными корреляциями.

2. Модель и метод. Будем исходить из симметричного варианта квантовой спин-орбитальной модели (симметричной модели Кугеля–Хомского) на квадратной (или линейной) решетке. Гамильтониан системы имеет вид

$$\widehat{\mathbf{H}} = J\sum_{\langle\mathbf{i},\mathbf{j}\rangle}\mathbf{S_i}\mathbf{S_j} + I\sum_{\langle\mathbf{i},\mathbf{j}\rangle}\mathbf{T_i}\mathbf{T_j} + K\sum_{\langle\mathbf{i},\mathbf{j}\rangle}(\mathbf{S_i}\mathbf{S_j})(\mathbf{T_i}\mathbf{T_j}),$$

$$\widehat{\mathbf{H}} = \widehat{J} + \widehat{I} + \widehat{K}, \tag{1}$$

где $\langle\mathbf{i},\mathbf{j}\rangle$ означает суммирование по связям ближайших соседей на квадратной решетки или линейной цепочке; $\widehat{\mathbf{S}}_\mathbf{i}$ и $\widehat{\mathbf{T}}_\mathbf{i}$ – операторы спина и операторы псевдоспина, отвечающего за орбитальные степени свободы, $S = 1/2$, $T = 1/2$.

Рассматривается случай антиферромагнитного (АФМ) спин-спинового и псевдоспин-псевдоспинового взаимодействий $J = I > 0$ и отрицательного обмена между подсистемами $K < 0$ (везде далее все энергетические величины приведены в единицах $J = I = 1$). Как показано в [12], на примере симметричной спин-орбитальной модели, при таком соотношении обменных параметров взаимодействия спиновых и псевдоспиновых (орбитальных) степеней свободы проявляется наиболее наглядно и приводят к "запутанности" спиновых и псевдоспиновых степеней свободы [13, 14].

В соответствии с теоремой Мермина–Вагнера [15] для несвязанных подсистем ($K = 0$) в 2D и 1D дальний порядок невозможен при любой $T \neq 0$. Естественно считать, что с включением межподсистемного взаимодействия $K \neq 0$ роль температурных и квантовых флуктуаций только растет, и дальнего порядка нет. Ниже мы ограничиваемся ненулевыми температурами.

С учетом сказанного вычисления в работе исходят из предположения, что:

i) все узлы в системе равноправны (трансляционная симметрия не нарушена);

ii) одноузельные средние равны нулю (отсутствует дальний порядок)

$$\langle\widehat{S}_\mathbf{i}\rangle = \langle\widehat{T}_\mathbf{i}\rangle = 0; \tag{2}$$

iii) корреляционные функции для различных компонент спина и псевдоспина ($\alpha \neq \beta$) также равны нулю (SU(2) симметрии в спиновом и псевдоспиновом пространствах не нарушены)

$$\langle\widehat{S}^\alpha_\mathbf{i}\widehat{S}^\beta_\mathbf{j}\rangle = 0, \quad \langle\widehat{T}^\alpha_\mathbf{i}\widehat{T}^\beta_\mathbf{j}\rangle = 0, \quad \langle\widehat{S}^\alpha_\mathbf{i}\widehat{T}^\beta_\mathbf{j}\rangle = 0. \tag{3}$$

Условия **i–iii** автоматически выполняются в квантовом сферически симметричном самосогласованном подходе (СССП) (см., например, [11, 16, 17]), который и используется ниже.

Как и в [10], рассматриваются спин-спиновая и спин-псевдоспиновая запаздывающие функции Грина:

$$G_\mathbf{q} = \left\langle S^z_\mathbf{q} \mid S^z_{-\mathbf{q}}\right\rangle_\omega, \tag{4}$$

$$R_\mathbf{q} = \left\langle T^z_\mathbf{q} \mid S^z_{-\mathbf{q}}\right\rangle_\omega. \tag{5}$$

Очевидно, $\left\langle T^z_\mathbf{q} \mid T^z_{-\mathbf{q}}\right\rangle_\omega = \left\langle S^z_\mathbf{q} \mid S^z_{-\mathbf{q}}\right\rangle_\omega$, поскольку рассматривается симметричный случай $I = J$.

Вычисления в рамках стандартной схемы СССП (см., например, [10, 11]) с учетом принятых в [10] приближений для $\widehat{K}$ и доминирующего вклада внутриузельного межподсистемного обмена приводят к следующим выражениям для $G_\mathbf{q}$ и $R_\mathbf{q}$.

$$G_q = \frac{F_\mathrm{ac}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega^2_\mathrm{ac}(\mathbf{q})} + \frac{F_\mathrm{opt}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega^2_\mathrm{opt}(\mathbf{q})}, \tag{6}$$

$$R_\mathbf{q} = \frac{F_\mathrm{ac}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega^2_\mathrm{ac}(\mathbf{q})} - \frac{F_\mathrm{opt}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega^2_\mathrm{opt}(\mathbf{q})}. \tag{7}$$

Громоздкие выражения для числителей функций Грина и спектров оптической и акустической ветвей возбуждений см. в дополнительных материалах.

В (6) и (7) входят спин-спиновые корреляторы. В двумерном случае

$$c_r = \langle\widehat{S}^z_\mathbf{i}\widehat{S}^z_\mathbf{i+r}\rangle, \quad r = g, d, 2g \tag{8}$$

– спин-спиновые корреляторы, соответственно, для первого (сторона квадрата) $c_g \equiv c_1$, второго (диагональ) $c_d \equiv c_2$ и третьего (удвоенная сторона) $c_{2g} \equiv c_3$ ближайших соседей. В одномерном же случае, очевидно, отсутствуют корреляторы по диагонали.

Спин-псевдоспиновые корреляторы – внутриузельный m_0 и межузельный $m_g \equiv m_1$ равны

$$m_0 = \langle S^z_\mathbf{i}T^z_\mathbf{i}\rangle, \quad m_g = \langle S^z_\mathbf{i}T^z_\mathbf{i+g}\rangle, \tag{9}$$

Далее численная процедура состоит в следующем: все корреляторы – c_r, m_0, m_g находятся самосогласованно через функции Грина G и R.

3. Результаты и обсуждение. Случай 2D. Важный качественный результат в 2D отмечался уже в работе [10]. А именно, при фиксированной температуре и малом параметре межподсистемного взаимодействия $|K|$ спин-псевдоспиновые корреляторы

m_0 и m_1 равны нулю. Но с ростом $|K|$ при достижении некоего порогового значения K_c корреляторы m_0 и m_1 становятся отличными от нуля и нарастают степенным образом. Аналогичная ситуация имеет место при фиксированном K и падении температуры. Корреляторы m_0 и m_1 начинают нарастать степенным образом при достижении пороговой температуры T_c.

В обоих случаях внутриподсистемные (спин-спиновые) корреляторы c_r меняются слабо и не проявляют каких-либо аномалий в критической точке. Для удобства соответствующие кривые из [10] приведены в дополнительных материалах.

Очевидно, что возникновение межподсистемных корреляций должно существенным образом влиять на термодинамические свойства. Энергия в рассматриваемом подходе полностью определяется одноузельными и двухузельными корреляторам. Поэтому естественно ожидать, что резкий рост спин-псевдоспиновых корреляторов в запутанном состоянии приведет к особенности теплоемкости.

На рисунке 1 показана эволюция теплоемкости в зависимости от K при фиксированных T (рис. 1a) и в зависимости от T при фиксированных K (рис. 1b). Как и следовало ожидать, при входе в область с межподсистемными корреляциями теплоемкость испытывает скачок. Чем выше критическая температура T_c, тем больше величина этого скачка. Из рисунка 1b также видно, что при высоких температурах все кривые выходят на единую асимптотику, а при $T \to 0$ для всех кривых $C \to 0$ (теорема Нернста выполняется).

На следующей иллюстрации – рис. 2 представлена спин-спиновая χ_{ss} и спин-псевдоспиновая χ_{st} восприимчивости вдоль тех же линий на фазовой плоскости – в зависимость от K при фиксированных T (рис. 2a) и зависимость от T при фиксированных K (рис. 2b). Как и теплоемкость, восприимчивость испытывает скачок в критических точках.

Вне перехода восприимчивость слабо зависит от T и K. Поведение спин-спиновой восприимчивости при малых $|K|$ согласуется с хорошо изученным случаем модели Гейзенберга [17].

Таким образом, в 2D случае, т.е. на квадратной решетке при любой температуре с ростом межподсистемного взаимодействия K возникает состояние с запутанными спиновой и псевдоспиновой степенями свободы.

4. Результаты и обсуждение. Случай 1D. Вычисления в одномерном случае аналогичны приведенным выше для 2D (соответствующие выражения см. в дополнительных материалах).

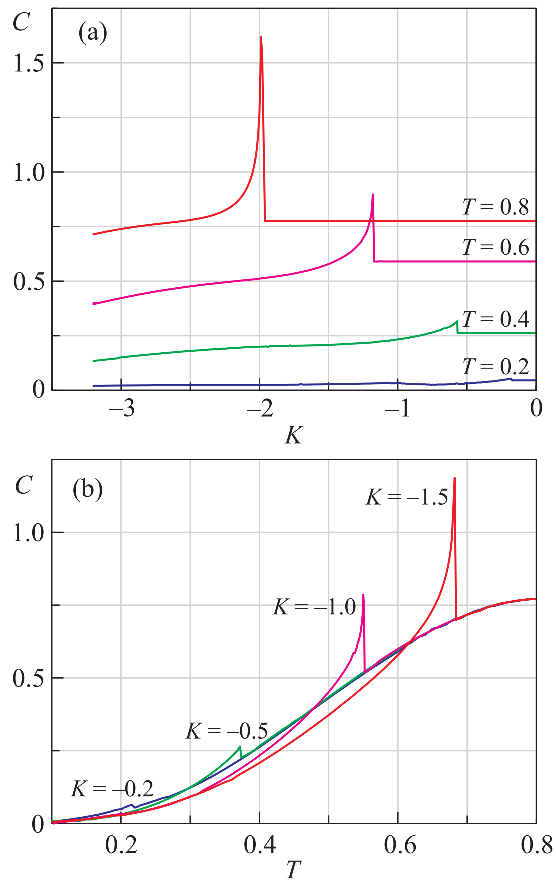

Рис. 1. (Цветной онлайн) 2D решетка. (a) – Теплоемкость в зависимости от межподсистемного обмена K при фиксированных температурах T. Цвета отвечают различным температурам (значения T указаны справа). (b) – Теплоемкость в зависимости от температуры T при фиксированном обмене K. Цвета отвечают различным K (значения K указаны на пиках)

Принятый здесь подход является среднеполевым, в том смысле, что затухание спиновых возбуждений в функциях Грина (6), (7) равно нулю. Однако в 1D его результаты, в силу заложенных условий i–iii (см. раздел 2), приводят к хорошему согласию с данными точного решения, а при наличии фрустрации, когда нет точного решения, – с численными результатами для конечных цепочек [18–20].

Приведем сразу фазовую диаграммы – совместно для обеих размерностей, см. рис. 3. Видно, что одномерный случай качественно отличается от двумерного. В отличие от 2D случая, в 1D линия, разделяющая области с нулевыми и ненулевыми спин-псевдоспиновыми корреляциями, начинается при конечном межподсистемном обмене, в точке ($K \approx \approx -2.44$, $T = 0$). Кроме того, граница раздела немо-

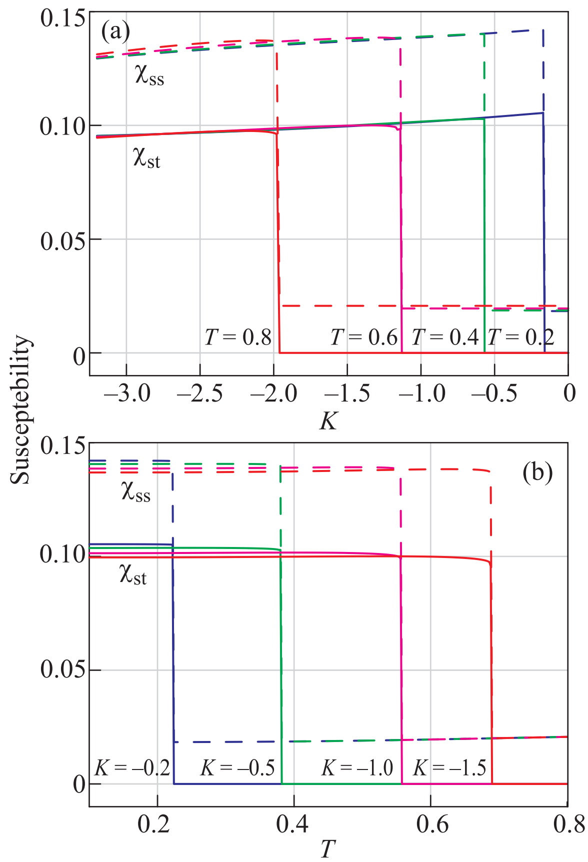

Рис. 2. (Цветной онлайн) 2D решетка. (a) – Восприимчивость в зависимости от межподсистемного обмена K при фиксированных температурах T. (b) – Восприимчивость в зависимости от температуры T при фиксированном межподсистемном обмене K. На обоих рисунках пунктир – спин-спиновая восприимчивость χ_{ss}, сплошная линия – спин-псевдоспиновая восприимчивость χ_{st}. Цвета отвечают различным значениям T (a) и K (b)

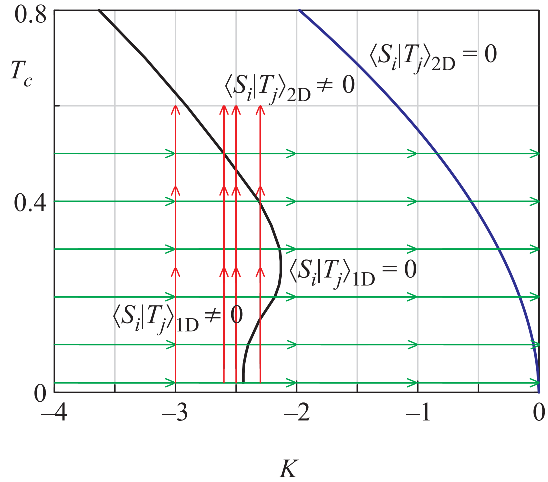

Рис. 3. (Цветной онлайн) 1D и 2D случаи. Области с нулевыми и ненулевыми спин-псевдоспиновыми корреляциями. Черная линия – фазовая граница в 1D, синяя – в 2D. Прямые со стрелками – траектории, вдоль которых представлены результаты в 1D (рис. 4–6)

нотонна, что делает возможным возвратный переход в перепутанную область по температуре.

Эта немонотонность сказывается, разумеется, и на остальных результатах. На рисунке 4a, и 4b (аналог рис. S1 и S3 для 2D из дополнительных материалов) для 1D решетки показана эволюция спин-спиновых и спин-псевдоспиновых корреляторов вдоль горизонтальных и вертикальных траекторий рис. 3 (зависимость от K при фиксированных T и зависимость от T при фиксированных K).

Рисунок 4a гораздо менее нагляден, чем представляющий аналогичные зависимости в 2D рис. S1, поскольку линии, отвечающие температурам по обе стороны от точки перегиба фазовой границы, накладываются. Еще одно качественное отличие от двумерного случая в том, что в точке K_c одновременно с началом степенного роста спин-псевдоспиновых корреляторов (внутриузельного m_0 и межузельного m_1) спин-спиновый коррелятор c_1 испытывает излом.

Наиболее заметная особенность рис. 4b – "пузырь" при $K = -2.3$ – обусловлена именно возвратным переходом по температуре в перепутанную область и обратно. На рисунке 4a также видно, что в точке K_c, одновременно с ростом спин-псевдоспиновых корреляторов спин-спиновый коррелятор c_1 испытывает излом и внутри перепутанной области резко убывает по модулю с ростом $|K|$.

Интуитивно понятно, что наличие в 1D одновременных особенностей у корреляторов обоих типов – внутриподсистемного и межподсистемного, – в отличие от 2D, где особенность есть только у межподсистемных корреляторов, может привести к существенному различию поведения, по крайней мере, теплоемкости в этих двух размерностях.

И это действительно видно на рис. 5 (аналог рис. 1 для 2D). Как и в двумерном случае, при входе в перепутанную область наблюдается скачок теплоемкости. Однако, в отличие от двумерного случая, знак этого скачка зависит от температуры перехода. На нижней части 1D фазовой границы (см. рис. 3) скачок положительный, но на верхней – отрицательный. Такое поведение не согласуется с интуитивным представлением о скачке теплоемкости при переходе в более упорядоченную фазу и обусловлено совместным влиянием разнонаправленных изменений внутриподсистемных и межподсистемных корреляторов. При низких температурах резкий рост спин-

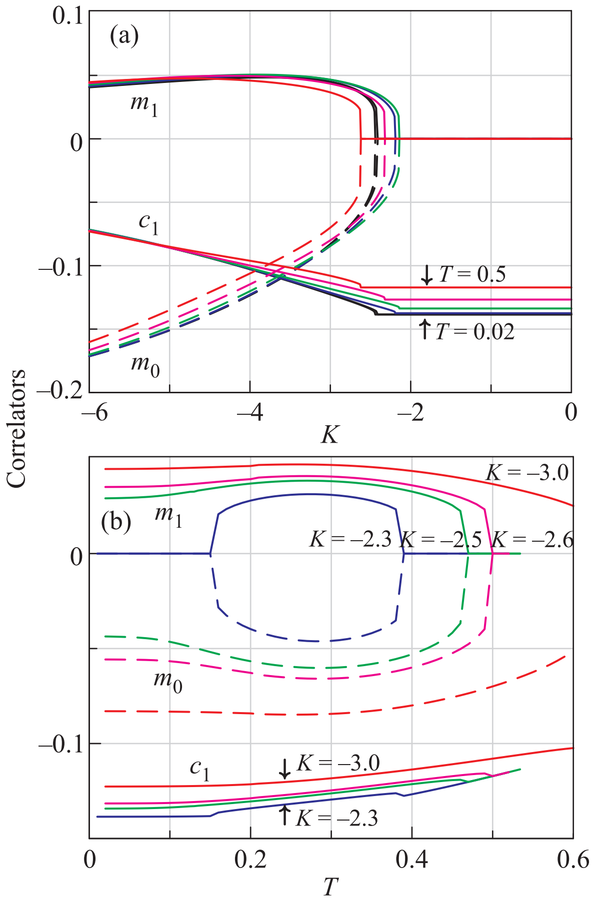

Рис. 4. (Цветной онлайн) 1D решетка. (a) – Корреляторы в зависимости от межподсистемного обмена K при фиксированных температурах T. (b) – Корреляторы в зависимости от температуры T при фиксированных значениях обмена K. Пунктир – внутриузельный спин-псевдоспиновый коррелятор m_0, верхние сплошные линии – спин-псевдоспиновый коррелятор m_1 на ближайших соседях, нижние сплошные – спин-спиновый коррелятор c_1 на ближайших соседях. Цвета отвечают, соответственно, различным значениям T (a) и K (b)

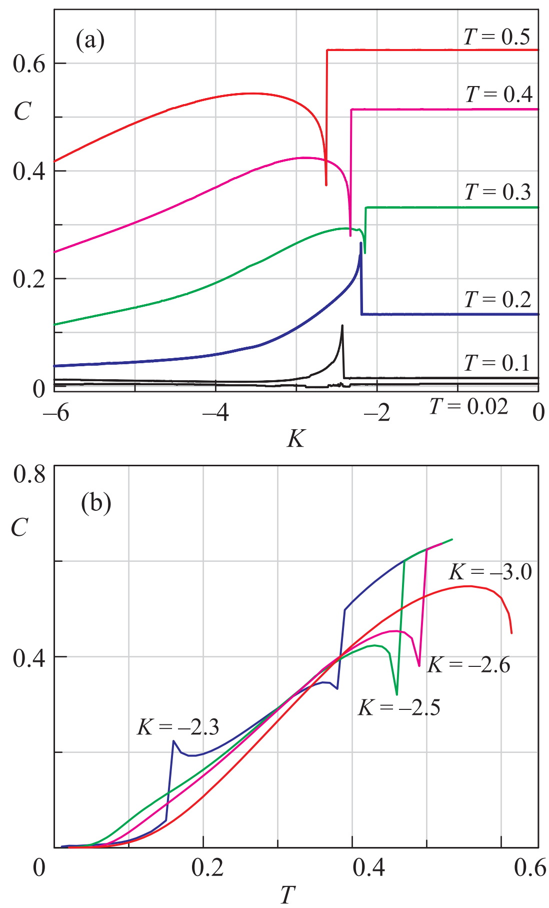

Рис. 5. (Цветной онлайн) 1D решетка. (a) – Теплоемкость в зависимости от межподсистемного обмена K при фиксированных температурах T. Цвета отвечают различным температурам (значения T указаны справа). (b) – Теплоемкость в зависимости от температуры T при фиксированном межподсистемном обмене K. Цвета отвечают различным K (значения K указаны на пиках). Сравните с рис. 1

псевдоспиновых корреляторов превалирует над падением спин-спинового коррелятора, при температурах выше точки перегиба фазовой границы ситуация обратная.

Асимптотическое поведение кривых теплоемкости в пределах высоких и низких температур для всех значений K в 1D качественно такое же, как и в 2D: при высоких температурах все кривые выходят на единую асимптотику, а при $T \to 0$ для всех кривых $C \to 0$.

И, наконец, последняя иллюстрация – рис. 6 (аналог рис. 2 для 2D), где демонстрируется спин-спиновая χ_{ss} и спин-псевдоспиновая χ_{st} восприимчивости вдоль горизонтальных и вертикальных траекторий рис. 3. Рисунок 6a, как и аналогичный рисунок для корреляторов, не очень нагляден из-за наложения линий, отвечающих температурам по обе стороны от точки перегиба фазовой границы. Заметно, однако, быстрое падение спин-спинового коррелятора с ростом $|K|$.

Двусторонние ступени на рис. 6b, как и "пузырь" для коррелятора m_1 на рис. 4b, очевидно, обусловлены возвратным переходом по температуре в перепутанную область и обратно.

В остальном поведение обеих восприимчивостей качественно аналогично ситуации в двумерном случае. И спин-спиновая χ_{ss}, и спин-псевдоспиновая χ_{st} восприимчивости испытывают скачок в критических точках.

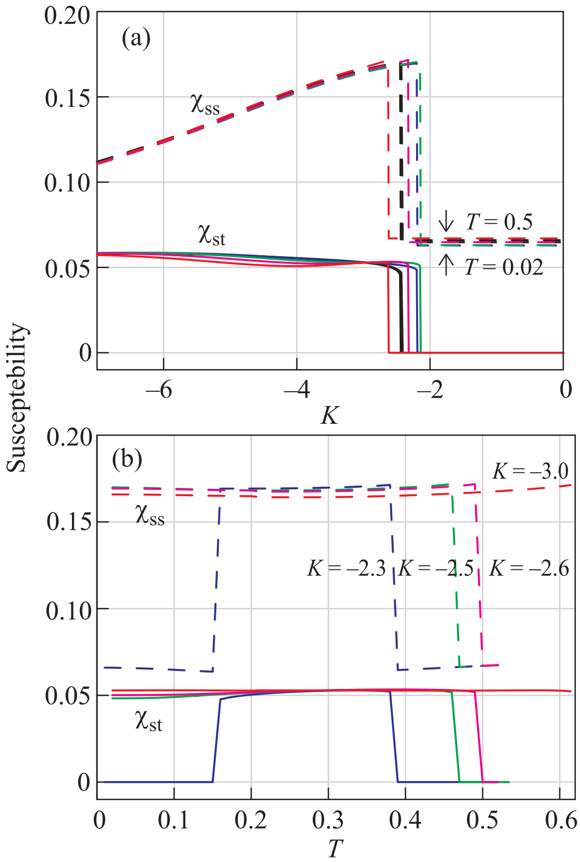

Рис. 6. (Цветной онлайн) 1D решетка. (a) – Восприимчивость в зависимости от межподсистемного обмена K при фиксированных температурах T. (b) – Восприимчивость в зависимости от температуры T при фиксированном обмене K. Пунктир – спин-спиновая восприимчивость χ_{ss}, сплошная линия – спин-псевдоспиновая восприимчивость χ_{st}. Цвета отвечают, соответственно, различным значениям T (a) и K (b). Сравните с рис. 2

5. Заключение. Отметим, что полученные результаты наглядно демонстрируют возможность перехода в состояние с квантовой запутанностью в спин-орбитальных системах даже при отсутствии дальнего порядка. Такой переход, характеризующийся пороговым возникновением спин-орбитальных корреляций, имеет явную аналогию с обычными фазовыми переходами (четко проявляющиеся особенности в теплоемкости и восприимчивостях). Фактически, мы тут имеем дело с фазовым переходом в некоторой квантовой жидкости, что позволяет предположить возможность таких явлений и в других системах с квантовой запутанностью. Отметим, что при выбранном знаке параметров модели $(I, J > 0,\ K < 0)$, запутанное состояние реализуется в широком интервале температур и значений параметров. Заметим здесь, что возможность квантовой запутанности в спин-орбитальных моделях широко обсуждалась в литературе (см., например, [6, 12, 14, 22, 23]), однако обычно при другом соотношении параметров (в частности, когда $K > 0$ при одинаковых знаках I и J), что приводит к возникновению запутанности в довольно ограниченной области фазовой диаграммы. Подчеркнем, что изученные особенности термодинамических характеристик имеют, по-видимому, чисто квантовую природу. Действительно, проведенный анализ точного решения одномерной спин-орбитальной модели для классических спинов [21] не выявляет аналогичных особенностей спин-орбитальной корреляционной функции (резкого обращения ее в нуль при некоторых конкретных значениях температуры и параметров модели) и, соответственно, особенностей термодинамики системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, проекты # 17-52-53014 и 19-02-00509. Работа К. И. Кугеля выполнена также при поддержке проектов #17-02-00323 и 17-02-00135.

1. I. Bengtsson and K. Zyczkowski, *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement*, Cambridge University Press, Cambridge (2006).
2. G. Benenti, G. Casati, and G. Strini, *Principles of Quantum Computation and Information*, World Scientific, Singapore (2007).
3. W.-L. You, A. M. Oleś, and P. Horsch, New J. Phys. **17**, 083009 (2015).
4. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, УФН **136**, 621 (1982).
5. A. M. Oleś, Acta Phys. Pol. A **115**, 36 (2009).
6. A. M. Oleś, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 313201 (2012).
7. A. M. Belemuk, N. M. Chtchelkatchev, A. V. Mikheyenkov, and K. I. Kugel, Phys. Rev. B **96**, 094435 (2017).
8. A. M. Belemuk, N. M. Chtchelkatchev, A. V. Mikheyenkov, and K. I. Kugel, New J. Phys. **20**, 063039 (2018).
9. W. Brzezicki, M. Cuoco, F. Forte, and A. M. Oleś, J. Supercond. Novel Magn. **31**, 639 (2018).
10. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **100**, 207 (2014).
11. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, ТМФ **168**, 389 (2011).
12. S. K. Pati, R. R. P. Singh, and D. I. Khomskii, Phys. Rev. Lett. **81**, 5406 (1998).
13. W.-L. You, A. M. Oleś, and P. Horsch, Phys. Rev. B **86**, 094412 (2012).
14. R. Lundgren, V. Chua, and G. A. Fiete, Phys. Rev. B **86**, 224422 (2012).
15. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).

16. J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
17. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
18. F. Suzuki, N. Shimata, and C. Ishii, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 1539 (1994).
19. I. Junger, D. Ihle, J. Richter, and A. Klümper, Phys. Rev. B **70**, 104419 (2004).
20. M. Härtel, J. Richter, D. Ihle, and S.-L. Drechsler, Phys. Rev. B **78**, 174412 (2008).
21. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, ФНТ **6**, 207 (1980).
22. C. Itoi, S. Qin, and I. Affleck, Phys. Rev. B **61**, 6747 (2000).
23. Y. Chen, Z. D. Wang, Y. Q. Li, and F. C. Zhang, Phys. Rev. B **75**, 195113 (2007).