ЖЭТФ, 1997, том 112, вып. 2(8), стр. 729–759

СПИНОВАЯ ЖИДКОСТЬ В ПОЧТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ РЕШЕТКЕ КОНДО

К. А. Кикоин, М. Н. Киселев, А. С. Мищенко

Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 января 1997 г.

Построена теория стабилизации спиновой жидкости в решетке Кондо при температурах, близких к температуре антиферромагнитной неустойчивости. Показано, что обменное рассеяние электронов проводимости кондовского типа приводит к тому, что вместо антиферромагнитного состояния в решетке возникает состояние спиновой жидкости типа резонирующих валентных связей (RVB) при $T > T_K$. В силу этой стабилизации низкоэнергетические процессы кондо-рассеяния с энергиями меньше T_K замораживаются, так что «синглетное» состояние кондо-решетки не возникает, а вместо него при низких температурах развивается сильно коррелированная спиновая жидкость с развитыми антиферромагнитными флуктуациями. Для описания элементарных возбуждений в кондо-решетке развит новый вариант диаграммной техники, позволяющий описывать взаимодействие спиновых флуктуаций и резонирующих валентных связей самосогласованным образом. Рассмотрены механизмы возникновения сильно анизотропной спиновой жидкости RVB-типа.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одно из самых удивительных свойств соединений с тяжелыми фермионами — это превращение системы слабо взаимодействующих локализованных спинов, определяющих их парамагнитный отклик при высоких температурах, $T > T^*$, в сильно коррелированную квантовую жидкость с термодинамикой и магнитными свойствами, характерными скорее для ферми-систем при $T < T_{coh} \ll T^*$. Это «растворение» локализованных спинов обычно интерпретируется в рамках модели решетки Кондо, и основным механизмом, определяющим температурную трансформацию спиновой подсистемы, считается кондовское экранирование спинов электронами проводимости, причем механизм этого экранирования практически без изменений переносится на решетку с однопримесной задачи, так что решетка Кондо рассматривается как периодическая структура кондо-примесей, когерентно рассеивающих электроны проводимости (см., например, [1, 2]). В этой модели в качестве характерной температуры смены режима T^* выступает температура Кондо T_K, а основным состоянием системы в приближении среднего поля оказывается так называемый кондо-синглет.

Такая простая картина, однако, оставляет без внимания спиновые корреляции, тесная связь которых с явлением тяжелых фермионов неоспорима: хорошо известно, что их формирование во всех без исключения случаях связано с возникновением либо дальнего антиферромагнитного порядка, либо короткодействующих магнитных корреляций. Для объяснения этой связи теория кондо-решетки обращается к косвенному обменному взаимодействию между локализованными спинами через электроны проводимости (РККИ-обмену), которое возникает в решетке Кондо уже во втором порядке теории возмущений. Нелокальные спиновые корреляции, таким образом, конкурируют с локальными эффектами спинового экранирования [3]. Наивная дихотомия Доньяха, возникающая в приближении среднего поля, предсказывает преобладание тенденции к антиферромагнитному порядку при малых значениях эффективной константы связи

$$\alpha = J_{sf}\mathcal{N}(\varepsilon_F)\Omega_0,$$

где J_{sf} — интеграл sf-обмена, $\mathcal{N}(\varepsilon_F)$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми, Ω_0 — объем элементарной ячейки. При больших значениях α кондовское экранирование подавляет магнитный момент, и основным состоянием системы является кондо-синглет. Тогда при α, слегка превышающих критическое значение α_c, определяемое соотношением $\alpha_c^2 \exp(1/2\alpha_c) \approx 1$, РККИ-взаимодействие учитывается по теории возмущений и магнитные корреляции модифицируют поведение синглетной фазы (см., например, [4, 5]).

Альтернативный подход к проблеме конкуренции одноузельного экранирования и межузельных магнитных корреляций был предложен в [6]. К двум возможностям, предлагаемым простой картиной Доньяха в этой работе была добавлена третья — образование немагнитной спиновой жидкости типа резонирующих валентных связей (resonating valence bonds, RVB) с ферми-статистикой элементарных возбуждений в спиновой подсистеме (спинонов). Было показано, что состояние спиновой жидкости стабилизируется кондо-рассеянием, но при этом и межузельные спиновые корреляции, и одноузельное sf-обменное взаимодействие между спинонами и электронами рассматривались в приближении среднего поля. Введение аномальных одноузельных средних кондовского типа в действительности означает предположение о том, что имеет место полное динамическое экранирование спина, а предположение об образовании синглетов Кондо на каждом узле в результате многократного «переключения» RVB-связей между локализованными спинами и спинами электронов проводимости фактически означает перенос заряда электронов на спиновые степени свободы. Таким образом, в рамках этого сценария, как и в среднеполевой теории решетки Кондо [7], спиновые степени свободы, которые при высоких температурах проявлялись в виде слабых парамагнитных корреляций, не несущих заряда, при $T < T_K$ приобретают заряд и превращаются в заряженные тяжелые фермионы (критическое обсуждение этого сценария см. в [8]). Естественно, что и в этом случае для объяснения существования магнитных корреляций в решетке Кондо требуются дополнительные теоретические усилия [9].

В настоящей статье предлагается альтернативный сценарий формирования спиновой жидкости в решетке Кондо, описываемой гамильтонианом

$$H_{eff} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_k c^+_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + J_{sf} \sum_{\mathbf{i}} \left(\mathbf{s}_\mathbf{i} \mathbf{S}_\mathbf{i} + \frac{1}{4} \right) . \qquad (1)$$

Здесь ε_k — закон дисперсии электронов проводимости, $\mathbf{S}_\mathbf{i}$ и $\mathbf{s}_\mathbf{i} = \frac{1}{2} c^+_{\mathbf{i}\sigma} \hat{\sigma} c_{\mathbf{i}\sigma'}$ — операторы соответственно спина, локализованного в f-оболочке, и делокализованного спина электрона проводимости, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули. Наш подход основан на понимании того обстоятельства, что в критической области, когда все три характерные температуры (температура Кондо $T_K \sim \varepsilon_F \exp(-1/2\alpha)$, температура Нееля $T_N \sim \varepsilon_F \alpha^2$ и температура перехода в состояние спиновой жидкости T^*) одного порядка и кондовское рассеяние способствует переходу в состояние спиновой жидкости, так что $T^* > T_N > T_K$, сам факт возникновения спин-жидкостных корреляций препятствует формированию синглетного основного состояния, поскольку процесс экранирования локализованных спинов кондо-рассеянием фактически замораживается при температурах $T \sim T^* > T_K$, и при дальнейшем понижении температуры магнитные свойства системы определяются скорее нелокальными спин-жидкостными корреляциями, чем одноузельным кондо-рассеянием. Иными словами, спиновые корреляции подавляют эффект Кондо как в упорядоченной (магнитной), так и в неупорядоченной (спин-жидкостной) фазе, и потому простая фазовая диаграмма Доньяха должна быть пересмотрена.

В силу того что состояние спиновой жидкости возникает в критической области $\alpha \sim \alpha_c$ при температурах, близких к T_N, факт сосуществования тяжелых фермионов и магнитных корреляций в этой картине получает естественное объяснение. Кроме того, вполне очевидно, что критические спиновые флуктуации должны играть существенную роль в механизме формирования спиновой жидкости. В данной работе мы ограничиваемся областью высоких температур, $T > T_K$, где справедлива теория возмущений по параметру $\alpha \ln(\varepsilon_F/T_K)$. Мы будем использовать диаграммную технику для спиновых операторов в псевдофермионном представлении [10] в приближении диаграмм без пересечений (noncrossing approximation, NCA) для описания кондо-рассеяния. Результаты высокотемпературных разложений, учитывающих совместно одноузельные и межузельные корреляции, будут экстраполированы в область температур, где парамагнитные флуктуации становятся существенными. Однако при использовании техники псевдофермионов для описания нелокальных спин-жидкостных корреляций возникает проблема нефизических состояний и, как следствие, нарушения локальной спиновой симметрии [11–15]. Имея в виду это обстоятельство, мы построили диаграммную технику для спиновых гамильтонианов, в принципе позволяющую не только исключать нефизические состояния, но и учитывать флуктуации калибровочных полей. В разд. 2 с помощью этой техники рассматривается спиновая жидкость типа однородной RVB-фазы [16, 17] в рамках модели Гейзенберга, в разд. 3, где этот метод применяется к решетке Кондо, описан механизм стабилизации RVB-фазы кондо-рассеянием в обычном приближении среднего поля[1]. Обобщение теории среднего поля для RVB-фазы, учитывающее критические флуктуации, проведено в разд. 4, а в разд. 5 показывается, как с помощью этой диаграммной техники могут быть описаны локальные критические и гидродинамические флуктуации вблизи точки антиферромагнитной неустойчивости.

2. ПРОЕКЦИОННАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ДЛЯ РЕШЕТКИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Наряду со стандартными методами многочастичной теории возмущений, разработанными для ферми- и бозе-операторов, в литературе имеется несколько вариантов диаграммных техник для некоммутирующих операторов, в терминах которых записываются гамильтонианы для спиновых или сильно коррелированных электронных систем (см., например, [19–21] и цитированную в них литературу). Большинство из этих методов основано на использовании проекционных операторов Хаббарда $X_{\mathbf{j}}^{\lambda\mu} = |\mathbf{j}\lambda\rangle\langle\mathbf{j}\mu|$, где $|\mathbf{j}\lambda\rangle$ — кет-вектор, отвечающий состоянию атома λ в узле $\mathbf{j}$, а гамильтониан нулевого приближения теории возмущений диагонален в этом представлении. Диаграммные методы для некоммутирующих операторов гораздо менее удобны в обращении, чем стандартная фейнмановская техника. Они лишь в некоторых случаях допускают самосо-

[1] Предварительные результаты этого описания были представлены в кратком сообщении [18].

гласованную запись замкнутых систем уравнений для скелетных диаграмм. Процедура Годена, факторизующая среднее от n операторов, в отличие от процедуры Вика, играющей ту же роль в обычной технике, страдает неоднозначностью, и удачный выбор иерархии спариваний в значительной мере определяется интуицией вычислителя (см., например, [22]).

В силу этих причин естественно попытаться представить операторы Хаббарда (и спиновые операторы, являющиеся частным случаем этих операторов) в виде произведений ферми- и бозе-операторов, и тем самым восстановить возможность использования инструментария фейнмановской или мацубаровской техники. Такие попытки предпринимались множество раз, начиная с 60-х годов [10, 23–25] вплоть до последнего времени [22, 26–28]. Ясно, однако, что и эти процедуры ни в коей мере не являются универсальными или однозначными. Кроме того, любая факторизация приводит к размножению и усложнению вершин и появлению локальных констрейнтов, введение которых необходимо для сохранения локальной калибровочной инвариантности, присущей данному гамильтониану.

Дополнительные трудности возникают при попытке описания нелокальных спин-жидкостных возбуждений типа RVB. В этом случае проблемы возникают уже на уровне приближения среднего поля для собственно-энергетической части одночастичного пропагатора. Использование обычных приемов самосогласованной теории возмущений приводит к нарушению локальной калибровочной инвариантности [11], и ее восстановление представляет собой весьма сложную физическую и математическую проблему [13, 14].

В этом разделе мы сформулируем вариант диаграммной техники, объединяющий два вышеупомянутых подхода, применительно к гамильтонианам, обладающим локальной $SU(2)$-симметрией. Имея в виду использование этой техники для описания спиновой жидкости в рамках гамильтониана (1), мы начнем с более простого случая гамильтониана Гейзенберга для спина 1/2 с антиферромагнитным взаимодействием,

$$H = h\sum_{\mathrm{i}} S_{\mathrm{i}}^z + J\sum_{\mathrm{i}}\sum_{\mathrm{j}}^{\langle nn\rangle}\left(\mathbf{S}_{\mathrm{i}}\mathbf{S}_{\mathrm{j}} - \frac{1}{4}\right), \qquad (2)$$

а затем перейдем к описанию решетки Кондо при высоких температурах, $T > T_K$, когда справедливо приближение NCA и система может рассматриваться как периодическая решетка независимых кондо-рассеивателей, взаимодействующих по механизму РККИ [3].

Введем представление псевдофермионов [10] для спиновых операторов

$$S^+ = f_\uparrow^+ f_\downarrow, \quad S^- = f_\downarrow^+ f_\uparrow, \quad S^z = \frac{1}{2}\left(f_\uparrow^+ f_\uparrow - f_\downarrow^+ f_\downarrow\right). \qquad (3)$$

Эти операторы подчиняются условию локального констрейнта на каждом узле

$$n = f_\uparrow^+ f_\uparrow + f_\downarrow^+ f_\downarrow = 1. \qquad (4)$$

Первый член в (2) описывает зеемановское расщепление в бесконечно малом магнитном поле $h = g\mu_B H$, а антиферромагнитный знак обменной константы J учтен в явном виде.

$SU(2)$-инвариантность означает, что спиновые операторы $\{S^+, S^-, S^z\}$ могут быть представлены в виде произвольных линейных комбинаций спин-фермионов $\left\{f_\uparrow, f_\downarrow, f_\uparrow^+, f_\downarrow^+\right\}$:

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \left(f_{i\uparrow}^+ \cos\theta + f_{i\downarrow}\sin\theta\right)\left(f_{i\downarrow}\cos\theta - f_{i\uparrow}^+\sin\theta\right), \\ S_i^- &= \left(f_{i\downarrow}^+ \cos\theta - f_{i\uparrow}\sin\theta\right)\left(f_{i\uparrow}\cos\theta + f_{i\downarrow}^+\sin\theta\right), \\ S^z &= \frac{1}{2}\left(f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow}\right). \end{aligned} \tag{5}$$

В частности, для псевдофермионных чисел заполнения имеет место полная частично-дырочная симметрия,

$$f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} = f_{i-\sigma} f_{i-\sigma}^+, \tag{6}$$

которая непосредственно следует из условия (4) или из уравнений (5) при $\theta = 0,\ \pi/2$. Таким образом, гамильтониан (2) в псевдофермионном представлении принимает вид

$$H = H_0 + H_{int} = -\frac{h}{2}\sum_{ij\sigma} \sigma f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \frac{J}{2}\sum_{ij\sigma} f_{i\sigma_1}^+ f_{j\sigma_1} f_{j\sigma_2}^+ f_{i\sigma_2}. \tag{7}$$

Локальный констрейнт существенно ограничивает возможность использования стандартных диаграммных методов или, во всяком случае, затрудняет практическое описание спиновой динамики в фермионном представлении, поскольку функциональные пространства, в которых действуют спиновые и фермиевские операторы, имеют различную размерность. Один из наиболее удобных методов корректного учета спиновой кинематики в фермионном представлении был предложен Абрикосовым [10]. Локализованному спину $\mathbf{S}_i$ соответствует $2S + 1$ состояний (проекций), в то время как при описании его с помощью псевдофермионных операторов возникает $2^{(2S+1)}$ ортогональных состояний в соответствии со значениями чисел заполнения (0,1) для всех $2S + 1$ проекций спина. В частном случае спина $S = 1/2$ имеется четыре состояния фермионов:

$$|0\rangle = |0,0\rangle; \quad |+\rangle = |1,0\rangle; \quad |-\rangle = |0,1\rangle; \quad |2\rangle = |1,1\rangle \tag{8}$$

и только два из них, а именно состояния $|\pm\rangle$, соответствуют физическим состояниям оператора спина. Абрикосов предложил приписывать энергию $\lambda \gg T$ любому состоянию, занятому псевдофермионом. Тогда нефизическое состояние $|2\rangle$ из набора (8) вымораживается при усреднении благодаря дополнительному множителю $\exp(-\lambda/T)$ в статистической сумме $\mathcal{Z}(T)$. Для того чтобы убрать второе нефизическое состояние $|0\rangle$, следует добавить еще один фактор $(1/2)\exp(\lambda/T)$ в $\mathcal{Z}(T)$ и перейти к пределу $\lambda/T \to \infty$ при усреднении по спиновым состояниям. В результате физические состояния $|\pm\rangle$ становятся наинизшими по «энергии», и конечный результат не зависит от λ. Рецепт Абрикосова правильно описывает для локальных спиновых состояний в случае однопримесного гамильтониана sf-обмена. В кондо-решетке им удается воспользоваться только в пределе большого спина с вырождением $N \to \infty$, когда NCA становится асимптотически точным приближением [29], но для описания межузельных спин-жидкостных корреляций этот метод непригоден.

Исходным пунктом предлагаемого метода является хорошо известная аналогия между гамильтонианом Гейзенберга и гамильтонианом Хаббарда в пределе сильного взаимодействия U при половинном заполнении. Представим операторы псевдофермионов в виде сумм,

$$\begin{aligned} f^+_{i\sigma} &= f^+_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}) + f^+_{i\sigma}n_{i-\sigma} \,, \\ n_{i\sigma} &= n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}) + n_{i\sigma}n_{i-\sigma}, \end{aligned} \tag{9}$$

и введем проекционные операторы Хаббарда для псевдофермионов точно так же, как это было сделано самим Хаббардом для операторов реальных электронов [30]:

$$X_i^{\sigma 0} = f^+_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}) \ , X_i^{2\sigma} = -\sigma f^+_{i-\sigma}n_{i\sigma},$$

$$\begin{aligned} X_i^{\sigma\sigma} = n_{i\sigma}(1-n_{i-\sigma}) = n_{i\sigma}n_{i-\sigma}, \quad X_i^{22} = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, \quad X_i^{00} = (1-n_{i\uparrow})(1-n_{i\downarrow}), \\ X_i^{\sigma-\sigma} = f^+_{i\sigma}f_{i-\sigma} = X_i^{\sigma 2}X_i^{2-\sigma} = X_i^{\sigma 0}X_i^{0-\sigma}. \end{aligned} \tag{10}$$

Эти операторы образуют нормированный базис группы $SU(4)$ с очевидным условием полноты

$$\sum_\mu X_i^{\mu\mu} = 1 \,. \tag{11}$$

Последнее из соотношений (9) переписывается в виде

$$n_{i\sigma} = X_i^{\sigma 0}X_i^{0\sigma} + X_i^{\sigma 2}X_i^{2\sigma}. \tag{12}$$

В результате гамильтониан (2), (7) приобретает форму

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int}, \\ H_0 &= -\frac{h}{2}\sum_{i\sigma}\sigma X_i^{\sigma\sigma} + \frac{U}{2}\sum_i \left(X_i^{00} + X_i^{22}\right), \\ H_{int} &= \frac{J}{2}\sum_{ij\sigma}\left(X_i^{\sigma-\sigma}X_j^{-\sigma\sigma} - X_i^{\sigma\sigma}X_j^{-\sigma-\sigma}\right) \ = \ \frac{J}{2}\sum_{ij\sigma\sigma'}\phi^\sigma_{ij}\phi^{\sigma'}_{ji} \,. \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь

$$\phi^\sigma_{ij} = \left(\sigma X_i^{2-\sigma} + X_i^{\sigma 0}\right)\left(\sigma X_j^{-\sigma 2} + X_j^{0\sigma}\right), \tag{14}$$

а фиктивный параметр хаббардовского отталкивания U для псевдофермионов введен таким образом, чтобы сохранить частично-дырочную симметрию гамильтониана Гейзенберга.

Вместо того чтобы воспользоваться диаграммными методами для X-операторов (см., например, [19, 22, 31, 32]), мы попытаемся остаться в рамках стандартного фейнмановского подхода, но использовать в явном виде свойства проекционных операторов $X_i^{\lambda\mu}$. В качестве базиса для диаграммного разложения возьмем собственные состояния гамильтониана H_0 при условии $U/T \equiv \beta U \to \infty$. В результате приходим к редуцированному гамильтониану

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + H_{int}, \quad \tilde{H}_0 = -\frac{h}{2}\sum_{i\sigma} \sigma f^+_{i\sigma} f_{i\sigma} \tag{15}$$

со статистической суммой $\tilde{\mathcal{Z}} = \mathrm{Tr}\left[\exp(-\beta\tilde{H})\right]$, включающей только физические состояния $|\sigma\rangle = |\pm\rangle$ из набора (8). H_0 сводится к $\tilde{H}_0$, поскольку операторы $X^{\sigma\sigma}_i$ и $f^+_{i\sigma} f_{i\sigma}$ имеют одни и те же матричные элементы в редуцированном (физическом) пространстве. Теперь мы можем использовать $\tilde{H}$ в форме (15) в качестве гамильтониана нулевого приближения для мацубаровской диаграммной техники[2)].

Выбор одной из двух форм гамильтониана взаимодействия (13) зависит от того, какое состояние спиновой системы мы собираемся описывать. Если для парамагнитной высокотемпературной фазы или состояния с дальним магнитным порядком наиболее удобно представление H_{int} через спиновые операторы $X^{\sigma\sigma'}_i$, то состояние спиновой жидкости RVB-типа естественно описывать в терминах операторов ϕ^σ_{ij}.

Рассмотрим сначала температурную функцию Грина

$$\mathcal{K}^\perp_{ij}(\tau) = \langle T_\tau S^+_i(\tau) S^-_j(0)\rangle_{\tilde{H}}, \tag{16}$$

описывающую элементарные возбуждения в стандартной теории магнетизма ($i\tau$ — мнимое «время»). В нулевом по взаимодействию приближении эта функция имеет вид

$$\mathcal{K}^0_{ij}(\tau) = \frac{\delta_{ij}}{4}\langle T_\tau f^+_{i\uparrow}(\tau) f_{i\downarrow}(\tau) f^+_{i\downarrow}(0) f_{i\uparrow}(0)\rangle_{\tilde{H}_0}. \tag{17}$$

Усреднение проводится со статистической суммой $\mathcal{Z} = 2\,\mathrm{ch}(\beta h)$. В соответствии с теоремой Вика это среднее представляется в виде двухфермионой петли и сводится к простому выражению

$$\mathcal{K}^0_{ij}(\tau) = \frac{\delta_{ij}}{4} e^{-h\tau} \left\{ \begin{array}{ll} \langle n_{i\uparrow}(1-n_{i\downarrow})\rangle_{\tilde{H}_0} & (\tau > 0) \\ \langle n_{i\downarrow}(1-n_{i\uparrow})\rangle_{\tilde{H}_0} & (\tau < 0) \end{array} \right. . \tag{18}$$

Мы видим, что в силу условия (4) фермионные состояния рождаются парами, а появление чисел заполнения в виде средних от проекционных операторов $\langle X^{\sigma\sigma}\rangle_{\tilde{H}_0}$ (см. (10)) отражает то очевидное обстоятельство, что действие спиновых операторов не выводит систему из пространства «физических» состояний $|\pm\rangle$.

Таким образом, предел $U \to \infty$ для эффективного гамильтониана (13) эквивалентен пределу $\lambda \to \infty$ описанной выше процедуры Абрикосова «вымораживания» нефизических псевдофермионных состояний $|0\rangle$ и $|2\rangle$, причем частично-дырочная симметрия при этом не нарушается.

Ряд теории возмущений для функции $\mathcal{K}^\perp$ строится в соответствии с обычными правилами вычисления двухчастичных двухвременных функций Грина. Эта процедура приводит к уравнению Ларкина [34]

$$\mathcal{K} = \Sigma + J\Sigma\mathcal{K}. \tag{19}$$

[2)] Процедура, сходная с предлагаемой ниже, описана в [33] для случаев примеси Андерсона и решетки Андерсона. Однако, в силу того что гамильтониан Андерсона в отличие от спиновых гамильтонианов (1) и (2) не обладает локальной симметрией $SU(2)$ и требование строгой частично-дырочной симметрии спин-фермионов для него отсутствует, при формулировке правил диаграммной техники возникает много различий.

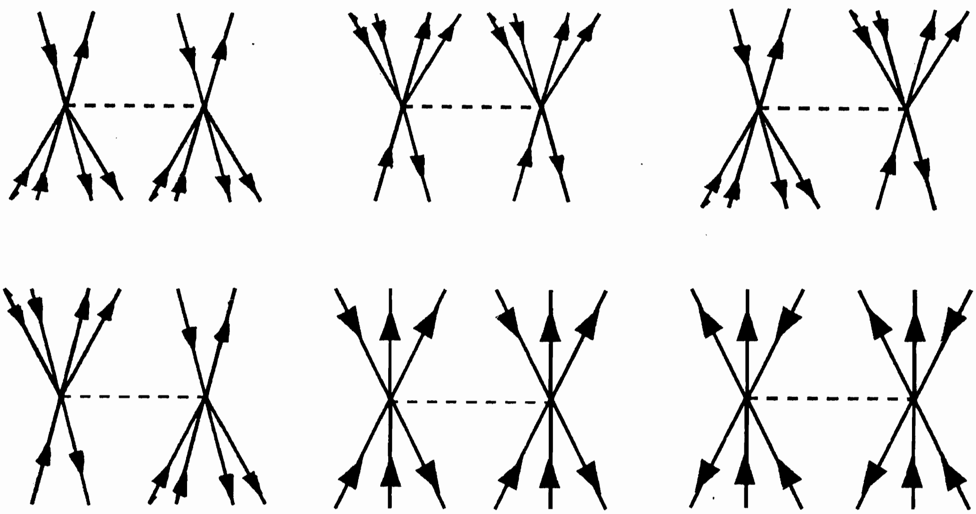

Рис. 1. Затравочные обменные вершины с учетом операторов проектирования

Здесь Σ — неприводимый поляризационный оператор, не разрезаемый по взаимодействию. В разд. 5 мы применим этот вариант диаграммной техники для вычисления коэффициента спиновой диффузии вблизи точки Нееля.

Перейдем к обсуждению нелокальных спин-жидкостных корреляций. В качестве примера рассмотрим однородную спиновую жидкость типа RVB, которая описывается коррелятором

$$\mathscr{L}_{\mathrm{ij}} = \sum_{\sigma} \langle \phi^{\sigma}_{\mathrm{ij}} \phi^{\sigma}_{\mathrm{ji}} \rangle, \tag{20}$$

т. е. воспользуемся вторым вариантом записи H_{int} (13). Поскольку нефизические состояния $|0\rangle, |2\rangle$ устраняются с помощью процедуры Хаббарда, каждый акт рождения фермиона на данном узле сопровождается операцией проектирования в соответствии с (14). Это приводит к усложнению обменной вершины (13), которая в проекционной технике описывается двенадцатихвостками, изображенными на рис. 1. Роль проекторов состоит в том, что при рождении фермиона с данной проекцией спина автоматически исключается состояние с противоположной проекцией и тем самым гарантируется, что оператор рождения действует на состояние из физического подпространства $|\pm\rangle$. Однако, несмотря на то что коррелятор (20) диагонален в подпространстве $|\pm\rangle$, нефизические состояния $|0\rangle, |2\rangle$ появляются как промежуточные при любой попытке описать спиновую жидкость фермионными операторами.

В работах [11, 13] было отмечено, что введение однородного RVB-состояния в рамках приближения среднего поля [16] нарушает локальную калибровочную инвариантность, связанную с констрейнтом (4), (6), и длинноволновые флуктуации калибровочных полей в существенной степени изменяют характер RVB-возбуждений, особенно в случае двумерной решетки Гейзенберга (см. также [14, 35, 36]). В данной работе мы не будем касаться проблемы длинноволновых флуктуаций калибровочных полей. Нас будут интересовать, главным образом, нелокальные высокотемпературные магнитные флуктуации, которые, впрочем, тоже связаны с нарушением констрейнта.

Как было показано в основополагающей работе [16], для описания однородного RVB-состояния необходимо ввести «аномальные» спаривания псевдофермионов на разных узлах. Ясно, что такая процедура выводит систему из физического пространства $|\pm\rangle$. Калибровочная теория спиновой жидкости демонстрирует, что свободное распространение спинона невозможно. Сложный вид вершин в проекционной технике (рис. 1) указывает на то же обстоятельство. Тем не менее мы начнем свое построение с демонстрации того, насколько эта техника справедлива в приближении среднего поля, а затем рассмотрим возможное влияние флуктуаций на среднеполевое решение.

Введем аномальную одночастичную (однофермионную) температурную функцию Грина. Для того чтобы сохранить частично-дырочную симметрию, запишем ее в матричной форме:

$$\hat{\mathscr{G}}_{\mathrm{ij}\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau \hat{X}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau)\hat{X}^+_{\mathrm{j}\sigma}(0)\rangle_{\tilde{H}}, \tag{21}$$

где

$$\hat{X}_{\mathrm{i}\sigma} = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{i}}^{0\sigma} & X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0} \\ \sigma X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2} & \sigma X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma} \end{pmatrix}, \quad \hat{X}^+_{\mathrm{i}\sigma} = \begin{pmatrix} X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0} & \sigma X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma} \\ X_{\mathrm{i}}^{0\sigma} & \sigma X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2} \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Эта функция Грина имеет следующую структуру:

$$\hat{\mathscr{G}}_{\mathrm{ij}\sigma}(\tau) = \\ = -\begin{pmatrix} \begin{array}{c}\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{\sigma 0}(0) + \right. \\ \left. + X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{0\sigma}(0)\right)\rangle\end{array} & \begin{array}{c}\sigma\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{2-\sigma}(0) + \right. \\ \left. + X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{-\sigma 2}(0)\right)\rangle\end{array} \\ \\ \begin{array}{c}\sigma\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{\sigma 0}(0) + \right. \\ \left. + X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{0\sigma}(0)\right)\rangle\end{array} & \begin{array}{c}\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{2-\sigma}(0) + \right. \\ \left. + X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma}(\tau)X_{\mathrm{j}}^{-\sigma 2}(0)\right)\rangle\end{array} \end{pmatrix}. \tag{23}$$

Нулевая (одноузельная) матричная функция Грина

$$\hat{g}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau \hat{X}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau)\hat{X}^+_{\mathrm{i}\sigma}(0)\rangle_{\tilde{H}_0} \tag{24}$$

диагональна, и ее элементы имеют вид

$$g^{(11)}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(\tau)X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(0) + X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(\tau)X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(0)\right)\rangle_0 ,$$

$$g^{(22)}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau \left(X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2}(\tau)X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma}(0) + X_{\mathrm{i}}^{2-\sigma}(\tau)X_{\mathrm{i}}^{-\sigma 2}(0)\right)\rangle_0.$$

Так же, как и в предыдущем случае, усреднение $\langle \ldots \rangle_0 \equiv \langle \ldots \rangle_{\tilde{H}_0}$ оставляет одноузельную функцию Грина в физическом секторе пространства Фока. В частности,

$$\begin{gathered} g^{(11)}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau_1-\tau_2) = -\langle X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(\tau_1)X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(\tau_2)\rangle_0 = -\langle X_{\mathrm{i}}^{\sigma\sigma}\rangle_0 \exp\left(-i\sigma h(\tau_1-\tau_2)/2\right) \quad (\tau_1 > \tau_2), \\ g^{(11)}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau_1-\tau_2) = \langle X_{\mathrm{i}}^{\sigma 0}(\tau_2)X_{\mathrm{i}}^{0\sigma}(\tau_1)\rangle_0 = \langle X_{\mathrm{i}}^{\sigma\sigma}\rangle_0 \exp\left(-i\sigma h(\tau_1-\tau_2)/2\right) \quad (\tau_2 > \tau_1). \end{gathered} \tag{25}$$

В отличие от спиновых функций Грина (17), матричные элементы функции $\hat{g}_{\mathrm{i}\sigma}(\tau)$ формально представляют собой трехфермионные петли, содержащие один частичный (спин вверх) и два дырочных (спин вниз) или один дырочный и два частичных пропагатора. Однако ее можно упростить, воспользовавшись свойством идемпотентности оператора b^+b, условиями (4), (6) и теоремой Вика. Подставляя в (25) операторы Хаббарда в представлении взаимодействия, получаем для элементов одноузельного пропагатора выражения

$$g^{(11)}_{\mathrm{i}\uparrow} = \frac{1}{2}e^{-h\tau}\begin{cases} -\langle(1-n_{\mathrm{i}\downarrow})\rangle_0 & (\tau>0) \\ \langle n_{\mathrm{i}\downarrow}\rangle_0 & (\tau<0)\end{cases}$$

и аналогичное выражение для состояния со спином вниз.

Легко убедиться, что функция Грина $\mathcal{G}^{(\alpha\alpha)}_{\mathrm{i}\sigma}$ обладает свойством периодичности, $\mathcal{G}_{\mathrm{ii}\sigma}(\tau<0) = -\mathcal{G}_{\mathrm{ii}\sigma}(\tau+1/T)$, так что вводя обычным образом мацубаровские частоты $\omega_n = (2n+1)\pi T$, получаем

$$g^{(\alpha\alpha)}_{\mathrm{i}\sigma}(\omega_n) = \frac{1}{2}\,\frac{1}{i\omega_n + (-1)^\alpha\sigma h/2}. \tag{26}$$

Приближение среднего поля [16] основано на введении аномальных средних, $\langle f^+_{\mathrm{i}\sigma} f_{\mathrm{j}\sigma}\rangle$. Для аномальной матричной функции Грина (21) следует ввести четыре компоненты:

$$\begin{aligned} \Delta^{11}_{ij\sigma} &= \langle X^{\sigma 0}_{\mathrm{i}}(\tau)X^{0\sigma}_{\mathrm{j}}(\tau'\to\tau)\rangle, \quad \Delta^{22}_{ij\sigma} = \langle X^{-\sigma 2}_{\mathrm{i}}(\tau)X^{2-\sigma}_{\mathrm{j}}(\tau'\to\tau)\rangle, \\ \Delta^{12}_{ij\sigma} &= \langle X^{\sigma 0}_{\mathrm{i}}(\tau)X^{-\sigma 2}_{\mathrm{j}}(\tau'\to\tau)\rangle, \quad \Delta^{21}_{ij\sigma} = \langle X^{2-\sigma}_{\mathrm{i}}(\tau)X^{0\sigma}_{\mathrm{j}}(\tau'\to\tau)\rangle, \end{aligned} \tag{27}$$

причем $\Delta^{11}_{ij\sigma} = \Delta^{22}_{ij\sigma}$. Тогда легко проверить, что аномальная функция Грина также удовлетворяет условию периодичности по обратной температуре типа (21). Таким образом, мы можем использовать проекционную диаграммную технику для вычисления аномального среднего $\Delta = \sum_\sigma \langle\phi^\sigma_{\mathrm{ij}}\rangle$, характеризующего однородное RVB-состояние. Этот «параметр порядка» находится из соотношения

$$\Delta = \mathrm{Tr}(\hat{1}+\hat{\tau}_1)\hat{\mathcal{G}}_{\mathrm{ij}}(\tau\to -0), \tag{28}$$

где $\hat{1}$ и $\hat{\tau}_1$ — матрицы Паули.

Перепишем операторы Хаббарда (10) в частично-дырочном представлении $f_{\mathrm{i}\uparrow} \equiv$ $\equiv a_{\mathrm{i}}$, $f_{\mathrm{i}\downarrow} \equiv b^+_{\mathrm{i}}$:

$$X^{\uparrow 0}_{\mathrm{i}} = a^+_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}}, \quad X^{2\downarrow}_{\mathrm{i}} = a^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}}, \quad X^{\uparrow\downarrow}_{\mathrm{i}} = a^+_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} \ldots$$

Приближению среднего поля (28) соответствуют следующее расцепление гамильтониана взаимодействия H_{int}:

$$H_{MF} = J\Delta \sum_{\mathrm{i}} \sum_{\mathrm{j}}^{\langle nn\rangle} \left(Y^{(h)}_{\mathrm{ij}} + Y^{(p)}_{\mathrm{ij}}\right), \tag{29}$$

где

$$\begin{aligned} Y^{(p)}_{\mathrm{ij}} &= a^+_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{j}} b_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}} + a^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}} + a^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{j}} b_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}} + a^+_{\mathrm{i}} b^+_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{i}} b_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}}\,, \\ Y^{(h)}_{\mathrm{ij}} &= b_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{j}} a^+_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}} + b_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}} + b_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{j}} a_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}} + b_{\mathrm{i}} a^+_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{i}} a_{\mathrm{j}} a^+_{\mathrm{j}} b^+_{\mathrm{j}}\,. \end{aligned}$$

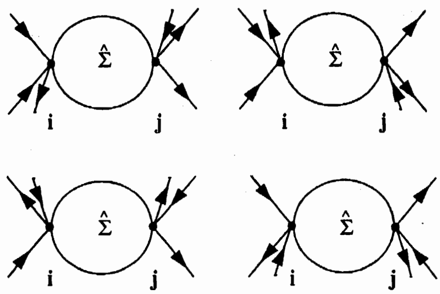

Рис. 2

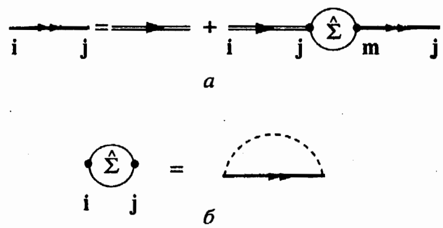

Рис. 3

Рис. 2. Компоненты матрицы $\hat{\Sigma}$ для одночастичной функции Грина $\mathscr{G}_{\mathbf{ij}}$

Рис. 3. Уравнение Дайсона (*а*) и собственно-энергетическая часть (*б*) функции Грина $\mathscr{G}_{\mathbf{ij}\sigma}$ в приближении среднего поля

На языке теории возмущений этому приближению соответствуют диаграммы для собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}_{\mathbf{ij}}$ функции Грина (23), представленные на рис. 2. Четыре диаграммы соответствуют четырем элементам матрицы $\hat{\Sigma}$. Матричное уравнение Дайсона в этом приближении дается диаграммами рис. 3, на которых двойными линиями изображены одноузельные матрицы $g_{\mathbf{i}\sigma}$, штрихом обозначена константа гейзенберговского обмена, а жирными линиями с двумя стрелками — аномальная функция Грина $\hat{\mathscr{G}}_{\mathbf{ij}\sigma}$. Уравнение Дайсона

$$\hat{\mathscr{G}}_{\mathbf{ij}\sigma}(\omega_n) = \hat{g}_{\mathbf{i}\sigma}(\omega_n)\left(\delta_{\mathbf{ij}} + \sum_{\mathbf{l}} \hat{\Sigma}_{\mathbf{il}}\hat{\mathscr{G}}_{\mathbf{lj}\sigma}(\omega_n)\right) \tag{30}$$

после фурье-преобразования принимает форму (при $h \to 0$)

$$2i\omega_n \mathscr{G}^{(\alpha\beta)}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \delta_{\alpha\beta} + J\Delta\varphi(\mathbf{k})\sum_{\gamma} \mathscr{G}^{(\gamma\beta)}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n). \tag{31}$$

Решение этой системы дает

$$\mathscr{G}^{(11)}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{2}\frac{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}/2}{i\omega_n(i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}})}, \quad \mathscr{G}^{(12)}_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{2}\frac{\sigma\epsilon_{\mathbf{k}}/2}{i\omega_n(i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}})}. \tag{32}$$

Здесь $\epsilon_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсии спинонов в приближении среднего поля, имеющий вид

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = J\Delta\varphi(\mathbf{k}) \tag{33}$$

в случае антиферромагнитного обмена только между ближайшими соседями, $\varphi(\mathbf{k})$ — соответствующий структурный фактор:

$$\varphi(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{l}}^{(nn)} e^{i\mathbf{kl}}\,. \tag{34}$$

Подставляя функции Грина (32) в уравнение (28), получаем самосогласованное уравнение для Δ:

$$\Delta = (ZN)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k}) \mathrm{th} \frac{\beta[J\Delta\varphi(\mathbf{k}) - \mu]}{2} \tag{35}$$

(Z — координационное число). Химический потенциал μ вводится как множитель Лагранжа при подстановке условия констрейнта (4) в гамильтониан. Эта операция отвечает замене $i\omega_n$ на $i\omega_n + \mu$. Как обычно, в приближении среднего поля локальный констрейнт заменяется на глобальный:

$$N^{-1}T \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\omega_n} \mathrm{Tr}(\hat{1} + \hat{\tau}_1)\hat{\mathscr{G}}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = 0 \, . \tag{36}$$

Подставляя функции Грина (32) в (36), получаем еще одно уравнение самосогласования, фиксирующее μ в середине спинонной «зоны» в соответствии с требованием частично-дырочной симметрии.

Температура «фазового перехода» T^*, при которой появляется нетривиальное решение для Δ, дается выражением

$$T^* = \frac{J}{2}(ZN)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \varphi^2(\mathbf{k}), \tag{37}$$

которое обычно получается в приближении среднего поля методом функционального интегрирования (см., например, [6, 37, 38]).

Таким образом, мы находим, что кинематические ограничения на псевдофермионное представление спиновых операторов, учтенные методом хаббардовских проекционных операторов не влияют на среднеполевое решение для RVB-состояния при условии, что частично-дырочная симметрия сохраняется на каждой стадии вычислений. В этом отношении рассмотренная ситуация отличается от решения той же задачи методом операторов Хаббарда для $t-J$-модели с конечной концентрацией дырок [39], в которой эта симметрия нарушена с самого начала исключением только дважды заполненных состояний $|2\rangle$. В работе [22] предложен еще один симметричный способ устранения нефизических состояний, когда «фермиевский» набор $|0\rangle, |2\rangle$ заменяется на единый «бозевский» вакуум $|V\rangle$.

Хотя проекционный метод не добавляет ничего нового к среднеполевому решению для однородной RVB-жидкости, он в принципе открывает возможность для учета калибровочных флуктуаций, неизбежно сопровождающих распространение спинонов. Кроме того, как будет показано в следующем разделе, в случае трехмерной решетки Кондо спиновая жидкость образуется в условиях близости к антиферромагнитной неустойчивости, так что магнитные флуктуации оказывают решающее влияние как на температуру перехода в RVB-состояние, так и на механизм этого перехода.

3. СТАБИЛИЗАЦИЯ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ В РЕШЕТКЕ КОНДО ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Хорошо известно [40], что в трехмерной решетке Гейзенберга энергия основного состояния RVB-фазы E_{SL} больше энергии антиферромагнитного состояния E_{AFM}. Было, однако, показано [6, 18], что в решетке Кондо, описываемой гамильтонианом (1), процессы рассеяния с переворотом спина могут приводить к стабилизации RVB-фазы относительно магнитноупорядоченной фазы. Поскольку антиферромагнитные и спин-жидкостные корреляции в sf-обменной модели определяются одной и той же константой взаимодействия J_{RKKY}, температура формирования спиновой жидкости оказывается близкой к точке магнитной неустойчивости, $T^* - T_N < T_N$, так что антиферромагнитные корреляции могут существенно изменить характер перехода в RVB-фазу по сравнением с результатом, получаемым в приближении среднего поля.

Для того чтобы описать образование спиновой жидкости в решетке Кондо, возьмем гамильтониан (1) в исходной форме

$$H_{eff} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_k c^+_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{4} J_{sf} \sum_{\mathbf{i}} c^+_{\mathbf{i}\sigma} c_{\mathbf{i}\sigma'} f^+_{\mathbf{i}\sigma'} f_{\mathbf{i}\sigma}. \tag{38}$$

Как уже говорилось во Введении, мы работаем в области параметров $\alpha \approx \alpha_c$ диаграммы Доньяха [3], в которой все характерные температуры ($T_K \sim \varepsilon_F \exp(-1/2\alpha)$, $T_{N0} \sim \varepsilon_F \alpha^2$ и T^*, которую предстоит определить и вычислить) одного порядка, так что при построении реальной фазовой диаграммы следует принимать во внимание взаимное влияние всех трех типов корреляций друг на друга и, в частности, изменение температуры Нееля по сравнению со значением T_{N0}, диктуемым простой теорией возмущений по параметру α.

Как уже было отмечено, в данной работе мы ограничимся областью высоких температур $T > T_K, T_{N0}$, в которой магнитная подсистема представляет собой решетку парамагнитных спинов, погруженных в ферми-море электронов проводимости, а для одноузельного парамагнитного sf-рассеяния справедливо приближение NCA, т.е. каждый спин, локализованный в узле решетки рассеивает электроны проводимости независимо от остальных спинов. При понижении температуры усиливается как кондо-рассеяние, так и межузельные корреляции, связанные с косвенным РККИ-взаимодействием.

Проблема конкуренции межузельного косвенного обмена и одноузельного sf-рассеяния многократно анализировалась в литературе главным образом в рамках двухпримесной задачи Кондо. В частности, Варма [41] проанализировал взаимное влияние кондо-рассеяния и РККИ-взаимодействия при высоких температурах в рамках теории возмущений и пришел к выводу, что взаимное влияние этих двух процессов мало, по крайней мере в рамках ведущего логарифмического приближения по параметру $\alpha \ln(\varepsilon_F/T)$. Мы покажем в данном разделе, что в решетке Кондо влияние рассеяния с переворотом спина на магнитные корреляции является решающим фактором для стабилизации RVB-фазы в критической области диаграммы Доньяха $\alpha \sim \alpha_c$.

При описании межузельного магнитного взаимодействия в условиях кондовского рассеяния в приближении NCA эффективная вершина РККИ-обмена $\tilde{J}_{\mathbf{ij}}(T,\varepsilon)$ определяется диаграммой рис. 4*а*. На этой диаграмме штриховыми линиями обозначены электронные функции Грина, а входящие и выходящие линии соответствуют псевдофермионным операторам. В одноузельные sf-обменные вершины Γ включены петли, отвечающие ведущему логарифмическому приближению по $\alpha\ \ln(\varepsilon_F/T)$ для задачи Кондо[3)] (рис. 5). В результате эффективное взаимодействие определяется выражением

$$\tilde{J}_{\mathbf{ij}}(T,\varepsilon_m) = \Pi(R,\varepsilon_m)\Gamma^2, \tag{39}$$

где $\varepsilon_m = 2m\pi T$, $R = |R_{\mathbf{i}} - R_{\mathbf{j}}|$.

[3)] Поскольку в случае $S = 1/2$ для одноузельных процессов условие констрейнта выполняется автоматически [10], здесь не возникает необходимости введения проекционных операторов.

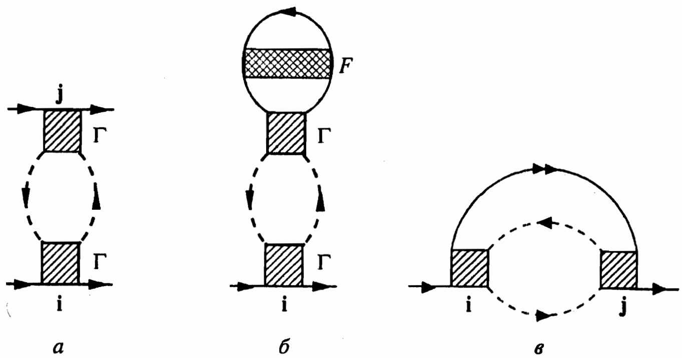

Рис. 4. Эффективная вершина перенормированного РККИ-взаимодействия (*а*); собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина в приближении среднего поля для фазы Нееля (*б*) и для RVB-фазы (*в*)

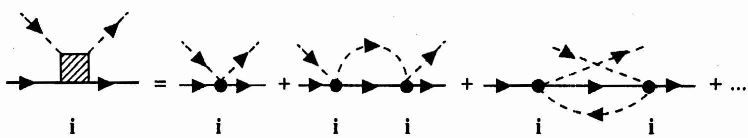

Рис. 5. Паркетные диаграммы для эффективной вершины Г

В духе логарифмической теории возмущений [10] в аргументе вершины Г должна быть удержана только максимальная входная частота, определяющаяся в нашем случае энергиями электронных функций Грина, входящими в поляризационную петлю $\Pi(R, \varepsilon_n)$ в интеграле $\tilde{J}_R(T, \varepsilon_m)$ (39). Поляризационный оператор в координатном представлении имеет вид

$$\Pi(\mathbf{R}, \varepsilon_m) = T \sum_n D(-\mathbf{R}, \omega_n + \varepsilon_m) D(\mathbf{R}, \omega_n). \tag{40}$$

Поскольку для систем с тяжелыми фермионами характерно аномально большие постоянные решетки, для электронны:: функций Грина $D(\mathbf{R}, \omega_n)$ мы используем асимптотическое по $p_F R$ выражение

$$D(R, \omega_n) = -\frac{p_F}{2\pi v_F R} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{2\varepsilon_F} p_F R + i p_F R \, \mathrm{sign}\, \omega_n\right), \tag{41}$$

так что поляризационный оператор приобретает вид

$$\Pi(R, \varepsilon_m) = \left(\frac{p_F}{2\pi v_F R}\right)^2 T \times$$
$$\times \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{v_F} R - \frac{|\omega_n + \varepsilon_m|}{v_F} R + i p_F R \left(\mathrm{sign}\, \omega_n + \mathrm{sign}(\omega_n + \varepsilon_m)\right)\right). \tag{42}$$

В статическом пределе

$$\tilde{J}_R(T,0) = T\sum_n D^2(R,\omega_n)\Gamma^2(\omega_n,T). \tag{43}$$

Температурная зависимость (43) определяется главным образом одноузельными вершинами, а в поляризационной петле можно воспользоваться условием $2\pi TR/v_f \ll 1$ и перейти от суммирования по дискретным частотам к интегрированию (см. Приложение I). Тогда обменный интеграл принимает вид

$$\tilde{J}_R(T,0) = 2\left(\frac{p_F}{2\pi v_F R}\right)^2 \cos(2p_F R)\int\limits_{T\to 0}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}\exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}p_F R\right)\Gamma^2(\varepsilon,T) \tag{44}$$

Это уравнение превращается в стандартный интеграл РККИ-обмена при замене одетых вершин на затравочные интегралы, $\Gamma \to J_{sf}\Omega_0$ (Ω_0 — объем элементарной ячейки):

$$J_R^0 = \left(J_{sf}\Omega_0\right)^2\Pi(R,0) = \left(J_{sf}\Omega_0\right)^2\frac{mp_F^4}{\pi^3}\left[\frac{\cos(2p_F R)}{(2p_F R)^3} + O(\frac{1}{(2p_F R)^4}\right] \equiv$$
$$\equiv \left(\frac{J_{sf}^2}{\varepsilon_F}\right)\frac{(p_F a_0)^6}{2\pi^3}\Phi(2p_F R). \tag{45}$$

Подставим в $\tilde{J}_R(T,0)$ вершину $\Gamma(\varepsilon,T)$, вычисленную в ведущем логарифмическом приближении в соответствии с диаграммами, показанными на рис. 5 со входящей частотой ε, удовлетворяющей условию $\ln(\varepsilon_F/\bar{\varepsilon}) \gg 1$. Для характерной энергии $\bar{\varepsilon} \gg 1$, определяющей интеграл (44) (см. Приложение II), находим, что обменный параметр может быть аппроксимирован функцией

$$\tilde{J}_R(T,0) \approx \varepsilon_F\frac{(p_F a_0)^6}{2\pi^3}\left(\frac{J_{sf}}{\varepsilon_F}\right)^2\Phi(2p_F R)\left[1 + 2\alpha\ln(T/\varepsilon_F)\right]^{-n}. \tag{46}$$

Степень n в этом выражении зависит от величины α и аргумента осциллирующей функции $\Phi(p_F R)$ (см. ниже вставку на рис. 11). Мы видим, таким образом, что на общий вид и пространственную периодичность интеграла косвенного обмена кондовское рассеяние при $T > T_K$ практически не влияет в соответствии с [41]. Однако величина этого интеграла может возрастать, и это возрастание тем больше, чем больше расстояние R между магнитными f-ионами.

При вычислении поляризационного оператора и РККИ-интеграла (46) мы считали электронную ферми-поверхность сферической. Следует, однако, отметить, что величина индекса n в (46) чувствительна к асимптотическому поведению функции $\Phi(2p_F R)$, так что роль кондо-процессов в усилении обменного взаимодействия оказывается существенней в случае сильно анизотропной ферми-поверхности. В предельном случае цилиндрической поверхности Ферми

$$\Phi(2p_F R) = -\left[\frac{\sin(2p_F R)}{(2p_F R)^2} + O\left(\frac{1}{(2p_F R)^3}\right)\right] \tag{47}$$

(см. Приложение I), так что при одном и том же значении параметра $p_F R$ величина интеграла $\tilde{J}_R(T,0)$ в случае цилиндрической поверхности Ферми будет больше, чем для сферической.

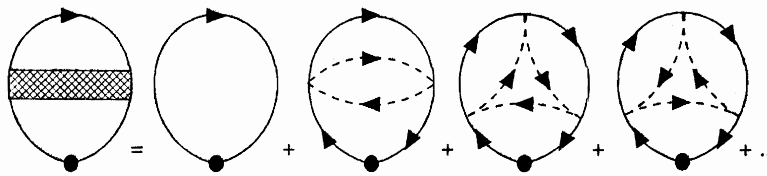

Рис. 6. Одноузельные диаграммы, описывающие кондовское экранирование локализованного спина

Итак, спиновая система при $T > T_K$ описывается эффективным РККИ-гамильтонианом с вершиной, изображенной на рис. 4*а* в приближении ближайших соседей и в предположении, что РККИ-взаимодействие на ближайших соседях имеет антиферромагнитный знак. В приближении среднего поля задачу о стабилизации спиновой жидкости мы понимаем как задачу сравнения температур перехода в состояние RVB ($T^*(\alpha)$) и в антиферромагнитное состояние ($T_N(\alpha)$) в условиях достаточно сильного кондовского рассеяния, $\alpha \to \alpha_{c0} - 0$, и критерием этой стабилизации является неравенство $T^*(\alpha) > T_N(\alpha)$. Зависимость $T_N(\alpha)$ отклоняется от квадратичной, диктуемой голой РККИ-вершиной. Наряду с уже обсуждавшимся усилением одноузельных вершин, описываемым уравнением (46), имеет место динамическое кондовское экранирование локализованных спинов, которое и является причиной подавления антиферромагнитного порядка при $\alpha \to \alpha_{c0}$.

В приближении среднего поля температуры переходов $T_N(\alpha)$ и $T^*(\alpha)$ определяются из обменной вершины рис. 4*а* путем замыкания спин-фермионных линий согласно соответственно рис. 4*б* и 4*в*. Первая из этих диаграмм определяет молекулярное поле для соизмеримого магнитного порядка, характеризуемого антиферромагнитным вектором **Q**, таким что $\mathbf{QR}_{ij} = \pi$. Эффект подавления магнитных корреляций кондо-рассеянием описывается вершиной $F(T)$ в диаграмме рис. 4*б* (см. [42, 43]). Суммирование последовательности логарифмических диаграмм, первые из которых представлены на рис. 6, дает для $F(T)$ выражение

$$F(T) = 1 - 2\alpha \ln \frac{\varepsilon_F}{T} \Big/ \ln \frac{T}{T_K}. \tag{48}$$

Хотя температурная зависимость $F(T)$ отклоняется от этого закона при $T \to T_K$ [44] и полное экранирование имеет место лишь при $T = 0$, эффект подавления магнитных корреляций компенсирует усиление обменного взаимодействия и тем самым уменьшает T_N при $\alpha \to \alpha_{c0}$.

Собственно-энергетическая часть одноузельной функции Грина $\mathcal{G}_{ii}$ (21), отвечающая диаграмме рис. 4*б*, равна

$$\Sigma_N(T) = \lambda \tilde{J}(R, T) \langle S_z \rangle_T \tag{49}$$

(множитель λ определяется геометрией решетки). Отсюда для среднего значения спина

$$\langle S_z \rangle_T = \frac{1}{2} \left(\langle a_i^+ a_i \rangle + \langle b_i^+ b_i \rangle - 1 \right)$$

получаем самосогласованное уравнение

$$\langle S_z \rangle_T = \frac{1}{2} F(T) \mathrm{th} \frac{\Sigma_N(T)}{2T}, \tag{50}$$

которое, естественно, представляет собой стандартное уравнение Бриллюэна для молекулярного поля Вейсса, учитывающее эффект кондовского экранирования.

Уравнение среднего поля для параметра Δ (28) определяется собственно-энергетической частью аномальной функции Грина $\hat{G}_{ij}(\tau)$ (23), изображенной на рис. 4*в*. Эта диаграмма подставляется в уравнение Дайсона (рис. 3), которое в этом случае принимает вид

$$\hat{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = g_0(\omega_n) \left[1 - 2T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \tilde{J}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) \hat{G}(\mathbf{q}, \omega_m) \hat{G}(\mathbf{p}, \omega_n) \right]. \tag{51}$$

Здесь $g_0(\omega_n)$ — нулевая одноузельная функция Грина с компонентами (26), а $\tilde{J}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \omega_n)$ — фурье-образ косвенного обменного интеграла (39), в приближении ближайших соседей имеющий вид

$$\tilde{J}(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = \sum_{\mathbf{l}=0, \langle \mathbf{l} \rangle_{nn}} \tilde{J}_R(\varepsilon_m) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \tilde{J}_0(\varepsilon_m) + \tilde{J}_R(\varepsilon_m) \varphi(\mathbf{q}). \tag{52}$$

Величина одноузельного интеграла $\tilde{J}_0(T, 0)$ оценивается как $\alpha^2 T \ln(\varepsilon_F/T)$. Поскольку этот интеграл содержит дополнительный фактор малости α при $T \sim T^*$ по сравнению с межузельным интегралом (46), он может быть опущен.

Пренебрегая, как обычно, частотной зависимостью РККИ-взаимодействия, мы приходим к среднеполевому уравнению (35) для Δ, рассмотренному в предыдущем разделе, с константой связи $J = \tilde{J}_R(T, 0)$. Как видно из структуры аномальной собственно энергетической части (рис. 4*в*), эффект экранирования, ответственный за подавление локальных магнитных моментов, не влияет на межузельный параметр среднего поля Δ, что естественным образом объясняется синглетностью RVB-спаривания. Радиус кондовского «экранирования» в рамках высокотемпературной теории возмущений оценивается как $\hbar v_F / 2T_K$, что существенно превышает корреляционный радиус синглетной RVB-пары, так что спиновое рассеяние электронов на этих парах неэффективно.

Результат вычисления температур T^* и T_N с помощью уравнений (35), (46), (49) и (50) показан на рис. 7 (см. также [18]). Из этого рисунка видно, что при $\alpha \to \alpha_{c0}$ эти

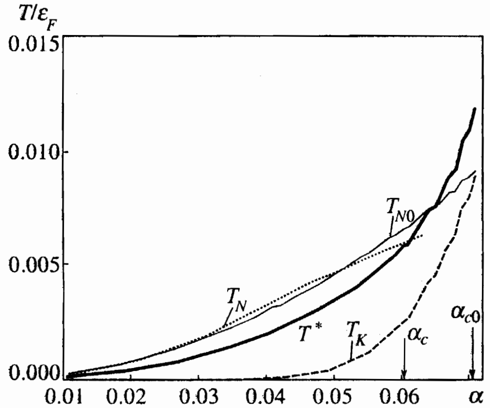

Рис. 7. Обобщенная диаграмма Доньяха, учитывающая существование RVB-фазы

температуры сближаются, на диаграмме Доньяха появляется новая критическая точка α_c, правее которой RVB-фаза стабилизируется относительно антиферромагнитной, и эта стабилизация происходит в логарифмической окрестности температуры Кондо. Вычисление T_N для $\alpha > \alpha_c$ не имеет смысла, поскольку магнитное упорядочение в этой области должно происходить по другому сценарию.

Таким образом, мы приходим к выводу, что стабилизация спиновой жидкости типа однородной RVB-фазы в трехмерной решетке Кондо может иметь место только вблизи точки магнитной неустойчивости в условиях достаточно сильного экранирования локализованных спинов кондо-рассеянием на электронах проводимости. Этот результат, полученный в приближении среднего поля, показывает, что стабилизация спин-жидкостной фазы несовместима с образованием кондо-синглетных состояний, характеризуемых аномальными средними $\langle c_i^+ f_i \rangle$ (см. [6, 45]), поскольку аномальное кондо-рассеяние замораживается при $T \approx T^* > T_K$. Этим самым снимается известный «парадокс Нозьера» [46] о невозможности одновременного экранирования всех спинов в решетке Кондо электронами из тонкого слоя шириной T_K вокруг уровня Ферми. В предлагаемой картине процесс экранирования прекращается при достаточно высоких температурах выше T_K, сама температура Кондо не является сингулярной точкой теории, перенормировка sf-обменного интеграла замораживается при значении $\sim \tilde{J}(T^*)$, а при $T < T_K, T^*$ электроны взаимодействуют уже не с локализованными спинами, а со спин-жидкостными возбуждениями типа спинонов (см. также [47]).

Однако само приближение среднего поля для RVB-спаривания помимо уже отмеченных недостатков, связанных с нарушением локальной калибровочной инвариантности, в рассматриваемом случае обладает еще одним дефектом: оно не учитывает близости спиновой подсистемы к антиферромагнитной неустойчивости. В следующих разделах мы рассмотрим возможные следствия этой близости для RVB-состояния сначала в приближении самосогласованного поля, а затем за его рамками.

4. ВЛИЯНИЕ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ И ЭФФЕКТОВ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА МЕХАНИЗМ СТАБИЛИЗАЦИИ RVB-ФАЗЫ

В предыдущем разделе мы нашли, что антиферромагнитные флуктуации неизбежно оказываются сильными в спиновой жидкости RVB-типа в трехмерной решетке Кондо при высоких температурах $T \sim T^*$ и, в принципе, могут привести к возникновению магнитного порядка при $T \ll T^*$. Оставляя этот вопрос для дальнейших исследований, мы теперь рассмотрим влияние спиновых флуктуаций на характер перехода в состояние спиновой жидкости, оставаясь в рамках приближения среднего поля, но воспользовавшись его модификацией, полученной проекционным методом, в котором параметр порядка определяется уравнением (28). Построенная во втором разделе диаграммная техника с использованием хаббардовских операторов позволяет включить в рассмотрение также длинноволновые флуктуации калибровочных полей, возникающие вследствие $U(1)$-неинвариантности RVB-параметра порядка. Введение в эффективный гамильтониан слагаемых, учитывающих наличие фазы у функции Δ, может быть проведено стандартным способом ([13, 14]). Как известно, длинноволновые флуктуации калибровочных полей не ведут к расходимостям, дестабилизирующим RVB-среднее в трехмерных системах. Поэтому введение таких флуктуаций сводится к обычным ферми-жидкостным перенормировкам с учетом требований частично-дырочной симметрии.

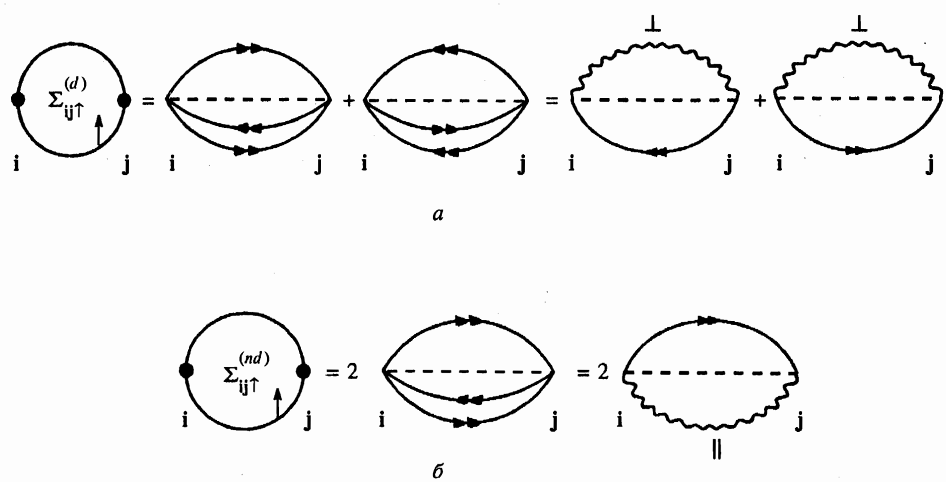

Рис. 8. Собственно-энергетическая часть для аномального пропагатора $\mathcal{G}_{ij}$, включающая вклад от критических флуктуаций в приближении среднего поля

Однако в двумерных решетках Гейзенберга флуктуации оказываются существенными и должны быть включены в рассмотрение [13, 14]. Мы не будем касаться вопроса длинноволновых флуктуаций калибровочных полей в дальнейшем, ограничившись приближением среднего поля в фиксированной калибровке.

Записав гамильтониан среднего поля в виде (29), мы в последующих вычислениях рассматривали дополнительные операторы в $Y_{ij}^{(p,h)}$ как чисто статические проекционные операторы, устраняющие нефизические состояния в термодинамических средних. Рассмотрим теперь флуктуационную компоненту этого «кинематического» взаимодействия, преобразовав эффективный спинонный гамильтониан среднего поля для решетки Кондо следующим образом:

$$H_{MF}^{(RKKY)} = \tilde{J}\Delta \sum_{ij\sigma} \phi_{ij}^{\sigma} \equiv \tilde{J}\Delta \sum_{ij} \left(a_i^+ K_{ij} a_j - a_j K_{ji}^+ a_i^+ + b_i K_{ij}^+ b_j^+ - b_j^+ K_{ji} b_i \right). \tag{53}$$

Здесь $\tilde{J}$ — ренормированная константа РККИ-взаимодействия (46),

$$K_{ij} = S_i^- S_j^+ - S_i^z S_j^z + \frac{1}{4}$$

и $K_{ij}^+ = K_{ji}$. В условиях близости к точке магнитной неустойчивости естественно рассматривать K_{ij} как оператор, описывающий критические возбуждения, сопровождающие распространение спинонов при температурах близких к T_N.

Для того чтобы получить выражение для спинонной функции Грина, соответствующее этому приближению, вернемся к определению ее собственно-энергетической части. В стандартной теории среднего поля (рис. 3) проекционные операторы учитывались в статическом приближении. Диаграммы рис. 8 показывают, каким образом из вершин, представленных на рис. 1, можно построить диагональные и недиагональные компоненты собственно-энергетической части функции Грина $\hat{\mathcal{G}}_{ij}$, включающие поперечные и продольные спиновые корреляторы. На этих диаграммах линиями с двойными стрелками обозначены аномальные пропагаторы

$$g^{\uparrow}_{\mathbf{ij}} = -\langle T_\tau a_{\mathbf{i}}(\tau) a^+_{\mathbf{j}}(\tau')\rangle,$$
$$g^{\downarrow}_{\mathbf{ij}} = -\langle T_\tau b_{\mathbf{i}}(\tau) b^+_{\mathbf{j}}(\tau')\rangle, \qquad (54)$$

а волнистыми линиями — поперечные и продольные корреляционные функции

$$\mathscr{K}^{\pm}_{\mathbf{ij}}(\tau\to 0) = \langle T_\tau a^+_{\mathbf{j}}(\tau+0) b^+_{\mathbf{j}}(\tau+0) b_{\mathbf{i}}(0) a_{\mathbf{i}}(0)\rangle = \langle T_\tau S^+_{\mathbf{j}}(\tau+0) S^-_{\mathbf{i}}(0)\rangle\ ,$$
$$\mathscr{K}^{zz}_{\mathbf{ij}}(\tau\to 0) = \langle T_\tau b^+_{\mathbf{j}}(\tau+0) b_{\mathbf{j}}(\tau+0) b^+_{\mathbf{i}}(0) b_{\mathbf{i}}(0)\rangle = \frac{1}{4} - \langle T_\tau S^z_{\mathbf{j}}(\tau+0) S^z_{\mathbf{i}}(0)\rangle\ . \qquad (55)$$

В отличие от полной аномальной функции Грина (23), аномальные функции (54) есть одночастичные пропагаторы, а из проекционных операторов сформированы межузельные спиновые корреляторы (55). Теперь сумма диагональных элементов

$$\Sigma^{(d)}_{\mathbf{ij}\uparrow} = \Sigma^{(11)}_{\mathbf{ij}\uparrow} + \Sigma^{(22)}_{\mathbf{ij}\uparrow}$$

в уравнении (28) дается диаграммами рис. 8*а*, а вкладу от недиагональных элементов

$$\Sigma^{(nd)}_{\mathbf{ij}\uparrow} = \Sigma^{(12)}_{\mathbf{ij}\uparrow} + \Sigma^{(21)}_{\mathbf{ij}\uparrow}$$

отвечают диаграммы рис. 8*б*. При выводе этих выражений использованы определение (3) и условие (6). Аналогичные диаграммы получаются для $\Sigma_{\mathbf{ij}\downarrow}$. Суммируя все эти вклады в приближении среднего поля, приходим к эффективному гамильтониану (53).

В критической области $T_N < T < T^*$ основной вклад в спиновые корреляторы (55) дают длинноволновые возбуждения с $\mathbf{k}\to 0$ и коротковолновые возбуждения с $\mathbf{k}\to\mathbf{Q}$, (см., например, [48], а также разд. 5). Поведение функции отклика $K^R(\mathbf{k},\omega)$ в длинноволновом (гидродинамическом) пределе $\mathbf{k}\to 0$ определяется флуктуациями суммарной намагниченности подрешеток (в антиферромагнитных системах равной нулю) и имеет диффузионный характер

$$K^R(\mathbf{k},\omega) = K_0(\mathbf{k})\frac{iDk^2}{\omega + iDk^2} \qquad (56)$$

где

$$K_0(\mathbf{k}) = \mathscr{K}(\mathbf{k},\omega=0) = \frac{\chi_0}{\tau + [1 - J(\mathbf{k})/J(\mathbf{Q})]} \approx \frac{1}{2}\chi_0(T_N),$$
$$J(\mathbf{k}) = J\sum_{\langle\mathbf{l}\rangle} e^{i\mathbf{kl}}, \quad \chi_0(T) = \frac{S(S+1)}{3T}, \quad \tau = \frac{T-T_N}{T_N} \qquad (57)$$

(в выражении (56) мы перешли к запаздывающей функции Грина для действительной частоты ω).

Вблизи антиферромагнитного вектора $\mathbf{Q}$ поведение функции отклика носит релаксационный характер:

$$K^R(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{-i\omega/(\Gamma\chi_0) + K_0^{-1}(\mathbf{q})}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{Q}, \qquad (58)$$

где

$$K_0(\mathbf{q}) = \mathscr{K}(\mathbf{q},\omega=0) = \frac{\chi_0}{\tau + (ql_0)^2} \qquad (59)$$

— статическая корреляционная функция Орнштейна–Цернике, l_0 — длина свободного пробега элементарного возбуждения, по порядку величины близкая к постоянной решетки.

В приближении среднего поля мы пренебрегаем запаздыванием РККИ-взаимодействия, и тогда диаграммы рис. 8 дают для собственной энергии спинонов выражение

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \Sigma(\mathbf{k}) = 2\tilde{J}T^2 \sum_{n,m\mathbf{q}} \sum_{s} \varphi(\mathbf{k}-\mathbf{q}) g_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \mathscr{K}^s_{\mathbf{q}}(i\varepsilon_m) \approx$$
$$\approx \tilde{J}\Delta \left(\frac{\varphi(\mathbf{k})}{2} + 2T \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{k}-\mathbf{q}) K_0(\mathbf{q}) \right). \tag{60}$$

Здесь s — индекс поляризации, а аномальная функция Грина $g_{\mathbf{k}}$ берется в виде $g_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = (i\omega_n - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}})^{-1}$. При высоких температурах в среднеполевом решении мы оставили только член с $\varepsilon_m = 0$ в сумме по четным мацубаровским частотам, и тогда спиновая функция Грина $\mathscr{K}^s(\mathbf{q}, 0)$ на диаграммах рис. 8 имеет один и тот же вид как в гидродинамической, так и в критической областях [48], так что главный вклад в перенормировку спинонного спектра дает статическая восприимчивость $K_0(\mathbf{q})$ (59).

Параметр порядка Δ (28), отвечающий приближению (53) и диаграммам рис. 8, определяется уравнением

$$\Delta = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{pq}} \varphi(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \left[\frac{1}{2}\delta_{\mathbf{q},0} + 2TK_0(\mathbf{q}) \right] \operatorname{th} \frac{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{p}}}{2T}. \tag{61}$$

Самосогласованные уравнения (35) и (61) выведены для простейшего случая изотропного обменного взаимодействия, который, вообще говоря, никогда не реализуется в решетках Кондо. Поэтому, прежде чем анализировать влияние спиновых флуктуаций на T^*, мы обобщим теорию среднего поля на случай анизотропного обмена. Введем обменный интеграл $J_{\mathbf{ij}} = \{J_\parallel, J_\perp\}$, где $J_\parallel$ и $J_\perp$ — константы связи для ближайших соседей соответственно в базисной плоскости и в перпендикулярном к ней направлении. Степень анизотропии взаимодействия определяется параметром $\gamma = J_\perp / J_\parallel$. Теперь вместо гамильтониана (29) или (53) следует записать анизотропный гамильтониан среднего поля

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{i},\rho_\perp} J_\perp \Delta_\perp Y_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\rho_\perp} + \sum_{\mathbf{i},\rho_\parallel} J_\parallel \Delta_\parallel Y_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\rho_\parallel}. \tag{62}$$

Здесь аномальные средние $\langle Y_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\rho_u} \rangle$, где $u = \perp, \parallel$, определяются из системы уравнений

$$\Delta_u = \frac{1}{z_u} \sum_{\mathbf{p}} \phi_u \left(\mathbf{p}, \frac{T}{T_N}, \gamma \right) \operatorname{th} \frac{\tilde{\epsilon}^u_{\mathbf{p}}(T/T_N, \gamma)}{2T} \tag{63}$$

с законом дисперсии

$$\tilde{\epsilon}^u_{\mathbf{p}}(T/T_N, \gamma) = J_u \Delta_u \phi_u(\mathbf{p}, T/T_N, \gamma). \tag{64}$$

Перенормированный спиновыми флуктуациями структурный фактор $\phi_u(\mathbf{p}, T/T_N, \gamma)$ выражается через структурный фактор $\varphi_u(\mathbf{p})$ типа (33), где суммирование по ближайшим соседям $\mathbf{l}$ проводится соответственно только в базисной плоскости ($\gamma < 1$) или в перпендикулярном к базисной плоскости направлении ($\tilde{\gamma} = \gamma^{-1} < 1$):

$$\phi_u\left(\mathbf{p}, \frac{T}{T_N}, \gamma\right) = \frac{1}{2}\varphi_u(\mathbf{p}) + 2T\sum_{\mathbf{q}}\varphi_u(\mathbf{p}-\mathbf{q})K_0(\mathbf{q}). \tag{65}$$

Индекс γ в левой части (65) возникает вследствие анизотропного характера коррелятора $K_0(\mathbf{q})$. Таким образом, характер перехода в состояние спиновой жидкости определяется степенью анизотропии: в случае $\gamma < 1$ спин-жидкостные корреляции возникают сначала в базисной плоскости, а при $\gamma > 1$ — в направлении z. При дальнейшем понижении температуры спиновая жидкость, естественно, приобретает трехмерный характер при условии $\gamma \neq (0, \infty)$.

Температура перехода в состояние спиновой жидкости при учете спиновых флуктуаций определяется из решения уравнения

$$T_u^* = \frac{1}{2}\max\left\{J_{\parallel}, J_{\perp}\right\}\theta_u\left(\frac{T_u^*}{T_N}, \gamma\right), \tag{66}$$

где

$$\theta_u\left(\frac{T_u^*}{T_N}, \gamma\right) = (z_u N)^{-1}\sum_{\mathbf{p}}\phi_u^2\left(\mathbf{p}, \frac{T}{T_N}, \gamma\right), \tag{67}$$

$z_{\parallel}$ — координационное число в базисной плоскости, $z_{\perp} = 2$.

Для оценки роли спиновых флуктуаций в установлении режима спиновой жидкости удобно ввести температуру

$$T_u^{*(0)} = \frac{1}{2}\max\left\{J_{\parallel}, J_{\perp}\right\}\theta_u^{(0)} \tag{68}$$

перехода в состояние RVB в анизотропной решетке без учета влияния спиновых флуктуаций. Здесь

$$\theta_u^{(0)} = (z_u N)^{-1}\sum_{\mathbf{p}}\varphi_u^2(\mathbf{p}). \tag{69}$$

Тогда условием реализации перехода по спин-флуктуационному механизму является выполнение неравенства

$$\Upsilon_u(\gamma, T_u^{*(0)}/T_N) = \theta_u(T_u^{*(0)}/T_N, \gamma)/\theta_u^{(0)} > 1. \tag{70}$$

Значения параметра $\Upsilon_u(\gamma)$ $(\Upsilon_u(\tilde{\gamma}))$ для случая простой кубической решетки вычислены в Приложении III. Критические значения параметров анизотропии $\gamma_{1,2}$, при которых стабилизируется состояние спиновой жидкости в почти одномерной и почти двумерной магнитных решетках, приведены для случая $T_u^{*(0)}/T_N = 1$ на рис. 9 для различных значений параметра τ. Видно, что в только в сильно анизотропной ситуации, близкой к двумерной или одномерной (см. выражения (П.III.7) и (П.III.8), спиновые корреляции способствуют возникновению спиновой жидкости, а в изотропном случае учет антиферромагнитных флуктуаций в приближении среднего поля приводит к подавлению спин-жидкостной фазы.

Проведенный в этом разделе анализ еще раз указывает на ограниченность приближения среднего поля для описания спиновой жидкости. В частности, уже из диаграмм рис. 8 видно, что статическое приближение в критической области, вообще говоря, несправедливо, поскольку антиферромагнитные флуктуации задают свои собственные временной и энергетический масштабы, которые и будут определять истинный характер перехода из парамагнитного состояния в состояние спиновой жидкости.

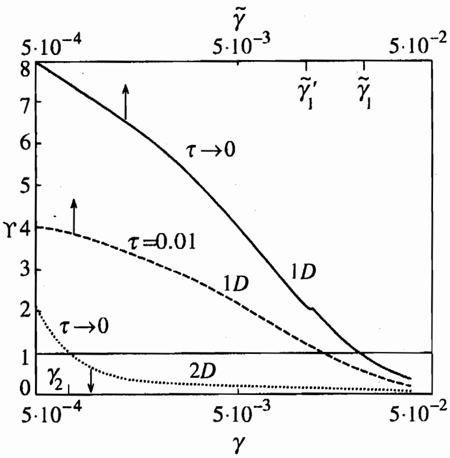

Рис. 9. Параметр Υ, описывающий влияние критических спиновых флуктуаций на температуру перехода в RVB-фазу для квазиодномерной ($1D$) и квазидвумерной ($2D$) решеток Кондо. Значение параметра τ характеризует степень близости к антиферромагнитной неустойчивости. Состояние RVB возникает при $\gamma < \gamma_1$ и $\tilde{\gamma} < \tilde{\gamma}_2$ в случае соответственно оси и плоскости легкого намагничивания

5. КРИТИЧЕСКИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И СПИНОВАЯ ДИФФУЗИЯ

Как уже говорилось в разд. 4, в антиферромагнетиках критические флуктуации носят различный характер в длинноволновой ($k \to 0$) и коротковолновой ($k \to Q$) областях, и функция спинового отклика для этих областей принимает соответственно вид (56) и (58). Критическая динамика антиферромагнетиков обычно рассматривается ренормгрупповыми методами в рамках феноменологических моделей [49, 50]. В работе [48] динамическая восприимчивость двумерного антиферромагнетика в диффузионной и релаксационной областях вычислялась с помощью диаграммной техники в представлении швингеровских бозонов. Мы исследуем частотную и импульсную зависимости динамической восприимчивости в трехмерном случае с использованием техники псевдофермионов.

Для вычисления коэффициента спиновой диффузии D и релаксационной постоянной Γ кроме спиновых корреляторов, определяемых уравнением Ларкина (19), следует знать низкочастотное поведение токового коррелятора

$$K^{\alpha\beta}_{\dot{S}\dot{S}}(\mathbf{k},\tau) = \delta_{\alpha\beta}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} V(\mathbf{k},\mathbf{p}_1)V(-\mathbf{k},-\mathbf{p}_2)\langle T_\tau (S^\mu_{\mathbf{p}_1+\mathbf{k}/2}S^\rho_{-\mathbf{p}_1+\mathbf{k}/2})_\tau (S^\mu_{-\mathbf{p}_2-\mathbf{k}/2}S^\rho_{\mathbf{p}_2-\mathbf{k}/2})_0\rangle, \qquad (71)$$

где

$$V(\mathbf{k},\mathbf{p}) = J(\mathbf{k}+\mathbf{p}/2) - J(-\mathbf{k}+\mathbf{p}/2).$$

Для фурье-образа коррелятора $K_{\dot{S}\dot{S}}$, продолженного в верхнюю полуплоскость, существует точное уравнение, связывающее его с неприводимыми (неразрезаемыми по линии взаимодействия) собственно-энергетическими частями спиновой и токовой корреляционных функций

$$K^R_{\dot{S}\dot{S}}(\omega) = \Sigma^R_{\dot{S}\dot{S}} + \omega^2 \frac{\Sigma^R_{\dot{S}S}\mathscr{V}\Sigma^R_{S\dot{S}}}{1-\Sigma^R_{SS}\mathscr{V}}. \qquad (72)$$

Здесь $\mathscr{V} = (\Sigma^R)^{-1} - (K_0)^{-1}$ — вершинная часть, определяемая статическим откликом в критической области [19, 51].

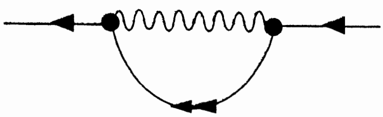

Рис. 10. Собственно-энергетическая часть для функции Грина $\mathscr{G}_{\mathrm{ii}}$, включающая вклад от критических флуктуаций в борновском приближении

Используя дисперсионные соотношения Крамерса–Кронига для запаздывающих и опережающих токовых корреляционных функций и аналитические свойства неприводимых собственно-энергетических частей, из уравнений (19) и (72) можно получить выражение

$$K^R_{SS}(\omega) = K_0 \frac{\Gamma_{\mathbf{k},\omega}}{-i\omega + \Gamma_{\mathbf{k},\omega}}, \tag{73}$$

справедливое как при $\mathbf{k} \to 0$, так и при $\mathbf{k} \to \mathbf{Q}$.

Спиновые корреляционные функции могут быть выражены через псевдофермионные функции Грина. Так, выражение для одноузельной восприимчивости имеет вид

$$\mathscr{K}^{\perp}_{\mathrm{i}}(\varepsilon_m) = T \sum_m \mathscr{G}_{\mathrm{ii}}(\omega_n + \varepsilon_m)\mathscr{G}_{\mathrm{ii}}(\omega_n), \tag{74}$$

см. (16). Здесь $\mathscr{G}_{\mathrm{ii}}(\omega_n)$ — фурье-компонента псевдофермионной функции Грина $\mathscr{G}_{\mathrm{ii}}(\tau) = \langle T_\tau f_{\mathrm{i}}(\tau) f^\dagger_{\mathrm{i}}(0)\rangle$. Поскольку нефизические состояния при вычислении одноузельных средних для S=1/2 не возникают, здесь нет необходимости во введении проекционных операторов. При $T \to T_N$ рассеяние на релаксационной моде дает в собственно-энергетическую часть функции Грина $\Sigma(\omega_n)$ вклад, описываемый диаграммой рис. 10. В отличие от диаграммы рис. 8, здесь сплошным линиям соответствуют одноузельные пропагаторы $\mathscr{G}_{\mathrm{ii}}$, а точкам — обменные вершины $\tilde{J}(\mathbf{q})$. Волнистой линии в этой диаграмме отвечает спиновая функция Грина (16), подчиняющаяся уравнению Ларкина (19). В отсутствие спин-жидкостных корреляций подставим в собственно-энергетическую часть $\Sigma(\omega_n)$ псевдофермионной функции Грина затравочную функцию $g_{\mathrm{i}\sigma}$ (26) и спиновую функцию $\mathscr{K}(\varepsilon_m, \mathbf{q})$ в релаксаторной форме:

$$\Sigma(\omega_n) = \tilde{J}^2 T \sum_m N^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q})^2 \frac{1}{i(\varepsilon_m - \omega_n)} \frac{\Gamma\chi_0(T)}{|\varepsilon_m| + b(q)}, \tag{75}$$

где $b(q) = \Gamma[\tau + (ql_0)^2]$, а Γ должна быть найдена самосогласованно из уравнений Дайсона и Ларкина. Вычисляя сумму по частотам в (75) и делая аналитическое продолжение в комплексную плоскость z, приходим к следующему уравнению для полюсов псевдофермионной функции Грина:

$$z - \Sigma(z) = 0,$$

$$\Sigma(z) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{J^2\varphi^2(\mathbf{q})\mathscr{A}}{\pi} \frac{z}{z^2 + b^2_{\mathbf{q}}} \left[\psi\left(-\frac{iz}{2\pi T}\right) - \psi\left(\frac{b_{\mathbf{q}}}{2\pi T}\right) - \frac{\pi T}{b_{\mathbf{q}}} + \frac{i\pi T}{z}\right], \tag{76}$$

где $\mathscr{A} = \Gamma\chi_0(T)$, а $\psi(y)$ — дигамма-функция. Отсюда видно, что псевдофермионная функция Грина имеет в этом приближении вид $\mathscr{G}^R_{\mathrm{ii}}(\omega) \propto [\omega + i\Gamma(T)]^{-1}$. Подставляя ее в уравнение (74), находим одноузельную восприимчивость

$$K_{\rm i}^R = \frac{\bar{\chi}_0}{1 - i\omega/\Gamma}, \tag{77}$$

которая, в свою очередь, подставляется в уравнение Ларкина (вообще говоря, включающее и вершинные поправки [48]), и система уравнений для Γ и l_0 тем самым замыкается.

Спин-жидкостный вклад в поведение спиновых корреляционных функций в критической области может быть учтен путем введения аномальных межузельных вкладов в $\Sigma(\omega)$ (рис. 10). Нелокальные фермиевские корреляции приведут к появлению новой характерной корреляционной длины, характеризующей ближний порядок, изменят температурную зависимость статической спиновой восприимчивости и динамических функций отклика. В результате следует ожидать изменения скейлингового поведения и частотно-импульсной зависимости спиновой восприимчивости.

Коэффициент спиновой диффузии также определяется собственно-энергетической частью токового коррелятора [51]:

$$D = \lim_{k\to 0,\omega\to 0} \frac{1}{k^2} \frac{\operatorname{Im}\Sigma^R_{\dot S\dot S}(\mathbf{k},\omega)}{\omega} K_0^{-1}(\mathbf{k}). \tag{78}$$

Поскольку поведение токового коррелятора целиком определяется релаксационными процессами, влияние нелокальных спин-жидкостных корреляций должно привести к изменению скейлинговых характеристик спиновой восприимчивости и в гидродинамической области.

Проведенные в этом разделе вычисления не претендуют на полное описание критических явлений в антиферромагнетике. Они носят скорее иллюстративный характер и имеют целью, во-первых, продемонстрировать применимость предложенной диаграммной техники к традиционным задачам теории магнитных фазовых переходов, а во-вторых, наметить возможные пути учета влияния спин-жидкостных корреляций на антиферромагнитные флуктуации в критической области.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе продемонстрировано, что состояние спиновой жидкости в решетке Кондо может оказаться более стабильным, чем состояние кондо-синглета, благодаря тем же процессам спинового рассеяния, которые ответственны за экранирование Кондо в случае достаточно сильного антиферромагнитного sf-обмена. Этот достаточно парадоксальный результат объясняется тем, что сильная конкуренция рассеяния Кондо и спин-жидкостных корреляций возникает при температурах близких к точке Нееля. В результате того что все корреляционные эффекты при этих температурах оказываются одного порядка, простое приближение среднего поля для описания поведения спиновой подсистемы в трехмерной решетке Кондо оказывается практически непригодным.

Предложенная в работе проекционная диаграммная техника, основанная на аналогии гамильтониана Хаббарда для электронов и гамильтониана Гейзенберга для псевдофермионов, в принципе, позволяет выйти за пределы стандартного среднеполевого описания однородной RVB-фазы [6, 16]. Попытка учесть антиферромагнитные флуктуации, не выходя за пределы приближения среднего поля (разд. 4), не приводит к результатам, вызывающим доверие. Однако предварительный анализ [52] показывает, что сформулированная в работе диаграммная техника позволяет отказаться от приближения среднего поля при описании эффектов, имеющих место в области критических антиферромагнитных флуктуаций, и найти более реалистический сценарий возникновения спиновой жидкости в решетке Кондо.

Исследование спиновой диффузии вблизи температуры Нееля, проведенное в последнем разделе, показывает, что диаграммные методы описания критических антиферромагнитных корреляций при высоких температурах позволяют получить новые физические результаты и в гидродинамической области.

Авторы глубоко признательны Ю. Кагану, Н. В. Прокофьеву, Г. Г. Халиуллину, Д. Е. Хмельницкому и Д. И. Хомскому за полезные обсуждения и критические замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 95-02-04250а), Международной ассоциации INTAS (проект 93-2834) и Голландской организации по поддержке научных исследований NWO (проект 07-30-002).

ПРИЛОЖЕНИЕ I

При вычислении поляризационного оператора $\Pi(\mathbf{R})$ (40) мы используем асимптотическую форму функции Грина (41). Подставляя ее в (42), получаем для сферической поверхности Ферми выражение

$$\Pi(R,\varepsilon_m) = T\left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \exp\left(-\frac{2\mid\varepsilon_m\mid}{v}R\right)\frac{\cos(2p_FR + i\varepsilon_m R/v)}{\mathrm{sh}(2\pi TR/v)} +$$
$$+ T\left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \exp\left(-\frac{\mid\varepsilon_m\mid}{v}R\right)\times$$
$$\times\left(\frac{\mid\varepsilon_m\mid}{2\pi T} + \frac{\mathrm{sh}(\mid\varepsilon_m\mid R/v)}{\mathrm{sh}(2\pi TR/v)}\exp\left(-\frac{\mid\varepsilon_m\mid}{v}R + 2ip_FR\,\mathrm{sign}\,\varepsilon_m\right)\right). \qquad (\text{П.I.1})$$

В статическом пределе оно сводится к

$$\Pi(R,0) = T\left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2\frac{\cos(2p_FR)}{\mathrm{sh}(2\pi TR/v)} = \frac{mp_F^4}{8\pi^3}\frac{\cos(2p_FR)}{(p_FR)^3}\left(1 - \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{T}{\varepsilon_F}p_FR\right)^2 + \ldots\right), \qquad (\text{П.I.2})$$

откуда при $T = 0$ получаем (45).

В случае цилиндрической квазидвумерной поверхности Ферми

$$g(\mathbf{R},z,\omega_n) = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})}\exp(i\mathbf{pR} + ip_z z) =$$
$$= \int\limits_{-p_{z0}}^{p_{z0}}\frac{dp_z}{2\pi}e^{ip_z z}\int\frac{pdpd\varphi}{(2\pi)^2}\frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})}e^{i\mathbf{pR}},$$

$$g(\mathbf{R},z,\omega_n) = \frac{\sin(p_{z0}z)}{\pi z}G(\mathbf{R},\omega_n). \qquad (\text{П.I.3})$$

Для $p_{z0} \gg p_F$ эффективное РККИ-взаимодействие не зависит от p_{z0},

$$J_{RKKY}(\mathbf{R}) = \left(\frac{J}{\tilde{n}_0}\right)^2 \Pi(\mathbf{R},0) = \left(\frac{J}{\tilde{n}_0}\right)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} g^2(\mathbf{R},\omega) =$$
$$= \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} G^2(\mathbf{R},\omega). \tag{П.I.4}$$

Здесь $\tilde{n}_0 = 4\pi p_F^2 p_{z0}/(2\pi)^3 = p_{z0}p_F^2/2\pi^2 = p_{z0}n_0/\pi$, $n_0 = p_F^2/2\pi$ — двумерная плотность электронных состояний и $G(R,\omega_n)$ — двумерная функция Грина ($R = \sqrt{R_x^2 + R_y^2}$),

$$G(R,\omega_n) = \int \frac{pdpd\varphi}{(2\pi)^2} \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} \exp(ipR\cos\varphi). \tag{П.I.5}$$

Воспользовавшись интегральным представлением функции Бесселя

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \exp(iz\cos\varphi) \tag{П.I.6}$$

в асимптотическом пределе для больших $|z|$:

$$J_0(z) \approx \sqrt{\frac{2}{z\pi}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right), \tag{П.I.7}$$

получаем

$$G(R,\omega_n) = -i\,\mathrm{sign}\,\omega_n \frac{m}{\sqrt{2\pi p_F R}} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{2\varepsilon_F} p_F R + i\left(p_F R - \frac{\pi}{4}\right)\mathrm{sign}\,\omega_n\right). \tag{П.I.8}$$

Подставив это выражение в (П.I.4), получаем

$$\Pi(R,\varepsilon_m) = -T\frac{m^2}{2\pi p_F R} \exp\left(-\frac{2|\varepsilon_m|}{v}R\right) \frac{\sin(2p_F R + i\varepsilon_m R/v)}{\mathrm{sh}(2\pi T R/v)} -$$
$$- T\frac{m^2}{2\pi p_F R} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v}R\right) \times$$
$$\times \left(\frac{|\varepsilon_m|}{2\pi T} - \frac{\mathrm{sh}(|\varepsilon_m|R/v)}{\mathrm{sh}(2\pi T R/v)} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v}R + 2i(p_F R - \frac{\pi}{4})\,\mathrm{sign}\,\varepsilon_m\right)\right). \tag{П.I.9}$$

В пределе низких температур это выражение переходит в

$$\Pi(R,0) = -T\frac{m^2}{2\pi p_F R} \frac{\sin(2p_F R)}{\mathrm{sh}(2\pi T R/v)} =$$
$$= -\frac{m p_F^2}{4\pi^2} \frac{\sin(2p_F R)}{(p_F R)^2} \left(1 - \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{T}{\varepsilon_F} p_F R\right)^2 + \dots\right), \tag{П.I.10}$$

а при $T = 0$ — в выражение (47).

ПРИЛОЖЕНИЕ II

Усиление обменного РККИ-взаимодействия, связанное с кондовской перенормировкой одноузельной sf-обменной вершины, учтенной в логарифмическом приближении,

$$\Gamma(\varepsilon, \alpha) = \frac{1}{\left(1 + 2\alpha \ln(\varepsilon/\varepsilon_F)\right)^2} \qquad (\text{П.II.1})$$

описывается выражением

$$f\left(p_F R, \alpha, \frac{T}{\varepsilon_F}\right) = \int\limits_{T/\varepsilon_F}^{\infty} \frac{\exp(-p_F R x)\, dx}{(1 + 2\alpha \ln(x))^2}. \qquad (\text{П.II.2})$$

Температурный ход этого интеграла определяется как параметром Доньяха α, так и расстоянием между соседними кондо-центрами (параметром $p_F R$).

Если пренебречь логарифмической перенормировкой (П.II.1), интеграл (П.II.2) при $T \ll \varepsilon_F$ равен $1/(p_F R)$, и интеграл (44) сводится к обычной формуле РККИ (45). При учете процессов Кондо функция f (П.II.1) в интересующем нас интервале температур $[T_K, 3T_K]$ может быть представлена приближенным выражением

$$f\left(p_F R, \alpha, \frac{T}{\varepsilon_F}\right) \approx \frac{1}{p_F R} \frac{1}{\left(1 - 2\alpha \ln(T/\varepsilon_F)\right)^{n(p_F R, \alpha)}}, \qquad (\text{П.II.3})$$

где показатель $n = n(p_F R, \alpha)$ не зависит от температуры. В результате высокотемпературное поведение РККИ-взаимодействия определяется функцией $\tilde{f}(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) = f(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) p_F R$, которая приближенно представляется в виде

$$\tilde{f}\left(p_F R, \alpha, \frac{T}{\varepsilon_F}\right) \approx \frac{1}{\left(1 + 2\alpha \ln(T/\varepsilon_F)\right)^{n(p_F R, \alpha)}}. \qquad (\text{П.II.4})$$

На рис. 11 представлены температурные зависимости точной функции $\tilde{f}(p_F R = 5.0, \alpha = 0.09)$, найденной численно (сплошная линия), и приближенной функции $\tilde{f}(p_F R = 5.0, \alpha = 0.09)$ (пунктирная линия) в интервале температур $T_K < T < 3T_K$. Показатель степени $n = n(p_F R, \alpha)$ приближенной функции (П.II.4) показан на врезке как функция параметра $p_F R$ в интервале $2 < p_F R < 8$ для нескольких значений α в интервале $0.04 < \alpha < 0.165$. Показатель находился по методу наименьших квадратов в интервале температур $1.2T_K < T < 3T_K$.

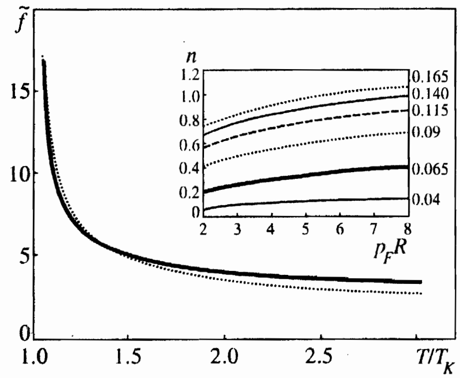

Рис. 11. Численные значения интеграла $\tilde{f}(p_F R)$ (сплошная линия) и аппроксимирующей функции $f(p_F R)$ (см. текст)

ПРИЛОЖЕНИЕ III

В этом приложении вычисляется параметр Υ (70), характеризующий влияние спиновых корреляций на температуру перехода в RVB-фазу для случая простой кубической решетки с анизотропным РККИ-взаимодействием, вызванным, например, несферичностью поверхности Ферми. Введем $J_\parallel \equiv J_x = J_y$, $J_\perp \equiv J_z$. Тогда в выражение (57) для спинового коррелятора $K_0(\mathbf{q}, \gamma)$ следует подставить величину

$$j_\mathbf{q} \equiv J_\mathbf{q}/|J_\mathbf{Q}| = -j_\parallel(\varphi_\parallel + \gamma\varphi_\perp), \tag{П.III.1}$$

где $\varphi_\parallel(\mathbf{q}) = 2(\cos q_x + \cos q_y)$, $\varphi_\perp(\mathbf{q}) = 2\cos q_z$, а $j_\parallel = J_\parallel/J_\mathbf{Q}$ $(a = 1)$. Для вычисления входящих в выражение (65) сумм вида

$$T\sum_\mathbf{q} \varphi_u(\mathbf{p}-\mathbf{q})K_0(\mathbf{q},\gamma) = \frac{S(S+1)T}{6T_N j_0}\sum_\mathbf{q} \frac{\varphi_u(\mathbf{p}-\mathbf{q})}{T/T_N j_0 - j_\mathbf{q}/j_0} \tag{П.III.2}$$

воспользуемся интегральным представлением для спинового коррелятора

$$K_0(\mathbf{q},\gamma) = \frac{S(S+1)j_\mathbf{q}}{6T_N j_0}\int\limits_0^\infty dt \exp\left\{-\left(\frac{T}{T_N j_0} - \frac{j_\mathbf{q}}{j_0}\right)t\right\}. \tag{П.III.3}$$

В случае, когда взаимодействие в базисной плоскости преобладает $(\gamma < 1)$, закон дисперсии спин-жидкостных возбуждений приобретает вид

$$\tilde{\epsilon}_\mathbf{p}^\parallel\left(\frac{T}{T_N},\gamma\right) = \frac{1}{2}J_\parallel\Delta_\parallel\left[1-(2+\gamma)\frac{T}{T_N}A\left(\gamma,\frac{T}{T_N}\right)\right]\varphi_\parallel(\mathbf{q}), \tag{П.III.4}$$

где функции $A\left(\gamma, T/T_N\right)$ выражаются через интегралы от функций Бесселя:

$$A(\gamma,\tau) = \int\limits_0^\infty dt \exp\left\{-(2+\gamma)(1+\tau)t\right\} I_1(t)I_0(t)I_0(\gamma t). \tag{П.III.5}$$

Учитывая, что для простой кубической решетки $\theta_\parallel^{(0)} = \theta_\perp^{(0)} = 1$, получим

$$\Upsilon_\parallel(\gamma, T_u^{*(0)}/T_N) = \left[1-(2+\gamma)(1+\tau)A(\gamma,\tau)\right]^2/4. \tag{П.III.6}$$

В случае, когда преобладает взаимодействие перпендикулярно базисной плоскости ($\tilde{\gamma} < 1$), вместо выражений (П.III.4)–(П.III.6) имеем

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{p}}^{\perp}\left(\frac{T}{T_N}, \gamma\right) = J_\perp \Delta_\perp \left[1 - (1 + 2\tilde{\gamma})\frac{T}{T_N}\tilde{A}\left(\gamma, \frac{T}{T_N}\right)\right] \cos p_z, \qquad (\text{П.III.4}')$$

$$\tilde{A}(\tilde{\gamma}, \tau) = \int_0^\infty dt \exp\{-(1 + 2\tilde{\gamma})(1 + \tau)t\} I_1(t) I_0^2(\tilde{\gamma}t), \qquad (\text{П.III.5}')$$

$$\Upsilon_\perp(\tilde{\gamma}, T_u^{*(0)}/T_N) = \left[1 - (1 + 2\tilde{\gamma})(1 + \tau)\tilde{A}(\tilde{\gamma}, \tau)\right]^2 / 4. \qquad (\text{П.III.6}')$$

Используя асимптотическое разложение интегралов

$$A(\gamma, \tau)|_{\gamma, \tau \to 0)} \propto -\ln \max(\gamma, \tau), \quad \tilde{A}(\tilde{\gamma}, \tau)|_{\tilde{\gamma}, \tau \to 0)} \propto [\max(\tilde{\gamma}, \tau)]^{-1/2},$$

находим, что в окрестности T_N при сильных анизотропиях

$$\Upsilon_{\|}(\gamma, T_u^{*(0)}/T_N) \propto -\ln \max(\gamma, \tau), \qquad (\text{П.III.7})$$

$$\Upsilon_\perp(\tilde{\gamma}, T_u^{*(0)}/T_N) \propto [\max(\tilde{\gamma}, \tau)]^{-1/2}, \qquad (\text{П.III.8})$$

и в результате сильные спиновые флуктуации способствуют возникновению спиновой жидкости.

Литература

1. G. Zwicknagl, Adv. Phys. **41**, 203, (1992).
2. A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, Cambridge (1993).
3. S. Doniach, Physica B **91** 231 (1977).
4. F. J. Ohkawa, Progr. Theor. Phys. Suppl. № 108, 209 (1992).
5. Y. Kuramoto and K. Miyake, Theor. Phys. Suppl. № 108, 199 (1992).
6. P. Coleman and N. Andrei, J. Phys.: Cond. Matt. **1**, 4057 (1989).
7. J. A. Millis and P. A. Lee, Phys. Rev. B **35**, 3394 (1987).
8. Yu. Kagan, K. A. Kikoin, and N. V. Prokof'ev, Physica B **182**, 201 (1992).
9. J. Gan, P. Coleman, and N. Andrei, Phys. Lett. **68**, 3476 (1992).
10. A. A. Abrikosov, Physics **2**, 21 (1965).
11. I. Affleck and J. B. Marston, Phys. Rev. B **37**, 3774 (1988).
12. I. Affleck, Z. Zou, T. Hsu, and P. W. Anderson, Phys. Rev. B **38**, 745 (1988).
13. L. B. Ioffe and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **39**, 8988 (1989).
14. P. A. Lee and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **46**, 5621 (1992).
15. S. Elitzur, Phys. Rev. D **12**, 3978 (1975).
16. G. Baskaran, Z. Zou, and P. W. Anderson, Solid State Comm. **63**, 973 (1987).
17. A. Ruckenstein, P. Hirschfeld, and J. Appel, Phys. Rev. B **36**, 857 (1987).
18. K. A. Kikoin, M. N. Kiselev, and A. S. Mishchenko, JETP Lett. **60**, 358 (1994).
19. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).

20. В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наук. думка, Киев (1984).
21. H. Keiter and G. Morandi. Phys. Reports **109**, 227 (1984).
22. F. Onufrieva and J. Rossat-Mignod, Phys. Rev. B **52**, 7572 (1995).
23. D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Harper and Row, N. Y. (1965) (пер.: Д. Маттис, *Теория магнетизма*, Мир, Москва (1967).
24. W. W. Lewis and R. B. Stinchcombe, Proc. Phys. Soc. **92**, 1002 (1967).
25. S. E. Barnes, J. Phys. F **6**, 1375 (1976).
26. G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
27. P. Coleman, E. Miranda, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. Lett. **70**, 2960 (1993).
28. X-G. Wen and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **76**, 503 (1996).
29. Y. Ono, T. Matsuura, and Y. Kuroda, Physica C **159**, 878 (1989).
30. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **285**, 542 (1965).
31. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
32. T. Yanagisawa, Phys. Rev. B **40**, 6666 (1989).
33. J. Brinckmann, Europhys. Lett. **28**, 187 (1994).
34. А. И. Ларкин, ЖЭТФ **37**, 264 (1959).
35. K. Kuboku, J. Phys. Soc. Jap. **62**, 420 (1993).
36. C. Mudry and E. Fradkin, Phys. Rev. B **49**, 5200 (1994).
37. D. R. Grempel and M. Lavagna, Solid State Comm. **83**, 595 (1992).
38. T. Tanamoto, H. Kohno, and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jap. **62**, 617 (1993).
39. I. S. Sandalov and M. Richter, Phys. Rev. B **50**, 12855 (1994).
40. P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
41. C. M. Varma, in *Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations*, Springer Series in Solid-State Sciences, ed. by T. Kasuya and T. Saso, V. 62, Springer-Verlag, Berlin (1985), p. 277.
42. K. Yosida and A. Okiji, Progr. Theor. Phys. **34**, 505 (1965).
43. A. A. Abrikosov and A. A. Migdal, J. Low Temp. Phys. **3**, 519 (1970).
44. A. M. Tsvelik and P. B. Wiegmann, Adv. Phys. **32**, 453 (1983).
45. K. Miura, T. Ono, and K. Kuboku, Physica C **179**, 411 (1991).
46. F. Nozieres, Ann. de Phys. (Fr) **10**, 1 (1985).
47. K. A. Kikoin, J. Phys.: Cond. Matt. **8**, 3601 (1996).
48. A. Chubukov, Phys. Rev. B **44**, 392 (1991).
49. B. I. Halperin and P. C. Hohenberg, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
50. S. Chakraverty, B. I. Halperin, and D. Nelson, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).
51. S. V. Maleyev, Sov. Sci. Rev. A ed. by I. M. Khalatnikov, Harwood Press, New York (1987), Vol. 8, p. 323.
52. K. A. Kikoin, M. N. Kiselev, and A. S. Mishchenko, Preprint cond-matt/9608121.