

КВАНТОВЫЕ СПИРАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СИЛЬНОФРУСТРИРОВАННОМ ДВУМЕРНОМ МАГНЕТИКЕ

А. В. Михеенков^{a,b,c*}, В. Э. Валиулин^{a,c}, А. В. Шварцберг^a, А. Ф. Барабанов^b

^a Московский физико-технический институт
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^b Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук
108840, Троицк, Москва, Россия

^c Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 ноября 2017 г.

Исследованы термодинамические свойства квантовой J_1 – J_2 – J_3 -модели Гейзенберга на квадратной решетке со спином $S = 1/2$. Вычисление спин-спиновых корреляторов, спектров спиновых возбуждений, восприимчивости и теплоемкости в рамках сферически-симметричного подхода показывает, что третий обмен J_3 может качественно менять свойства системы. Наряду со стандартными структурами ближнего порядка (антиферромагнитной, ферромагнитной и полосатой) возникают различные квантовые спирали. В частности, они могут быть изотропными с локальным минимумом спектра вдоль окружности в зоне Бриллюэна, причем характер этих состояний представляет собой «закрученный» как ферромагнитный, так и антиферромагнитный квантовый спиновый порядок. Кроме того, определена область параметров, в которой наблюдается двухпиковый температурный ход теплоемкости.

DOI: 10.7868/S0044451018030148

1. ВВЕДЕНИЕ

Фрустрация в соединениях с локализованными магнитными моментами может приводить к интересным и зачастую интуитивно не очевидным эффектам. Это может быть образование нетривиальной спиновой конфигурации или, наоборот, потеря спинового упорядочения даже при нулевой температуре. Как и роль квантовых флуктуаций, эффекты фрустрации особенно сильны в низкоразмерных, в частности, двумерных системах.

Здесь одна из важнейших моделей — модель Гейзенберга на квадратной решетке со спином $S = 1/2$ с учетом обменных взаимодействий не только с ближайшими соседями. В этом случае отсутствует геометрический фактор фрустрации (который есть, например, в треугольной решетке), и ее причиной является конкуренция ближайшего и следующих за ним обменов.

Чаще всего модель рассматривается в варианте J_1 – J_2 , когда учтены ближайший (сторона квадрата)

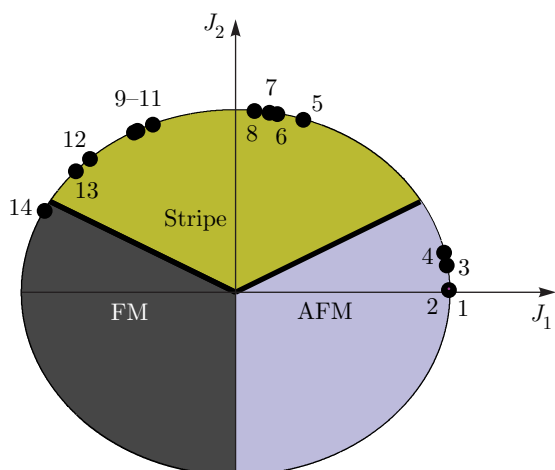
та) и второй (диагональ квадрата) обмены. Фрустрация возникает при антиферромагнитном (АФМ) знаке второго обмена, $J_2 > 0$, и произвольном знаке первого. Случай обоих АФМ-обменов ($J_1 > 0$, $J_2 > 0$) отвечает хорошо изученной спиновой подсистеме ВТСП-купратов [1, 2], а также ряду других квазидвумерных соединений [3–7].

В последние годы обнаружены и исследуются уже несколько десятков J_1 – J_2 -систем, в том числе с ферромагнитным (ФМ) первым обменом, $J_1 < 0$, и с самыми разными соотношениями величин J_1 и J_2 . Это $\text{Pb}_2\text{VO}(\text{PO}_4)_2$ [8–11], $(\text{CuCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$ [7], $\text{SrZnVO}(\text{PO}_4)_2$ [11–14], $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ [10, 12, 15], K_2CuF_4 , Cs_2CuF_4 , Cs_2AgF_4 , $\text{La}_2\text{BaCuO}_5$, Rb_2CrCl_4 , [10, 13, 16–20] и др.

На рис. 1 представлена фазовая диаграмма двумерной J_1 – J_2 -модели в классическом пределе $S \gg 1$, дополненная данными о соотношении обменов в нескольких квазидвумерных соединениях. При $S \gg \gg 1$ возможны три фазы — АФМ, ФМ и полосатая (страйп), в квантовом случае ($S = 1/2$) между ними возникают области неупорядоченной фазы.

Кроме того, предсказанный во фрустрированной модели Гейзенберга переход из АФМ-фазы в неупо-

* E-mail: mikheen@bk.ru



- | | |
|---|---|
| 1. $\text{Pb}_2\text{Cu}(\text{OH})_4\text{Cl}_2$ | 8. $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$ |
| 2. $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$ | 9. $\text{Na}_{1.5}\text{VOPO}_4\text{F}_{0.5}$ |
| 3. VOMoO_4 | 10. $\text{PbZnVO}(\text{PO}_4)_2$ |
| 4. PbVO_3 | 11. $\text{Pb}_2\text{VO}(\text{PO}_4)_2$ |
| 5. $\text{Sr}_2\text{CuMoO}_6$ | 12. $\text{SrZnVO}(\text{PO}_4)_2$ |
| 6. $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$ | 13. $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ |
| 7. Sr_2CuWO_6 | 14. $(\text{CuCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$ |

Рис. 1. (В цвете онлайн) Фазовая диаграмма J_1 - J_2 -модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в классическом пределе. Точки отвечают соотношению обменов J_1 и J_2 для некоторых слоистых соединений (данные из работ [7, 13, 15, 20–23] и упомянутых в них). Обмены J_1 и J_2 параметризуются углом φ : $J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$

рядоченную фазу при $T = 0$ есть один из базовых примеров квантового фазового перехода [21–24].

И, наконец, еще одна, появившаяся совсем недавно причина интереса к модели — квантовые симуляторы [25]. Уже реализованы первые примеры квантовых симуляторов модели Гейзенберга, в том числе фрустрированной (правда, пока в одномерном случае) [26–29].

Как уже сказано, обычно фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решетке рассматривается в J_1 - J_2 -варианте. Однако существенно введение следующего, третьего обмена J_3 . Оно и вызывает интерес по нескольким причинам.

1. В классическом пределе $S \gg 1$, именно начиная с третьего обмена на фазовой диаграмме, кроме стандартных ФМ-, АФМ- и страйп-фаз, возникают три различные несоизмеримые геликоидальные фазы.

2. В классическом пределе $S \gg 1$ в некоторых областях фазовой диаграммы ($J_2 \simeq \pm 0.5J_1$) индуцированные третьим обменом геликоиды появляются уже при $J_3 \ll J_1, J_2$.

3. В квантовом пределе $S = 1/2$ в широких областях вокруг точек $J_2 = \pm 0.5J_1$ фрустрация даже при нулевой температуре разрушает дальний порядок, что приводит к образованию спин-жидкостной фазы. Из предыдущего пункта ясно, что учет J_3 существен при выяснении ее структуры.

4. Экспериментально обнаружены (пока единичные [30–33]) квазидвумерные соединения, в которых наблюдается несоизмеримая спиновая структура, однако стандартное объяснение с привлечением взаимодействия Дзялошинского – Мория невозможно (центральная симметрия не нарушена). Для описания таких систем адекватна J_1 - J_2 - J_3 -модель Гейзенберга.

Ниже будут также продемонстрированы некоторые другие нетривиальные и интуитивно неочевидные свойства модели (как классической, так и квантовой).

Дальнейшая часть работы организована следующим образом. В разд. 2 представлена исследуемая модель и дан краткий обзор ее свойств в классическом пределе $S \gg 1$. В разд. 3 описан используемый в работе сферически-симметричный самосогласованный подход. Результаты работы и их обсуждение содержатся в разд. 4. В Заключении приведены основные выводы.

2. МОДЕЛЬ

Рассматривается модель Гейзенберга на двумерной квадратной решетке с учетом взаимодействия первых, вторых и третьих соседей:

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_2 \sum_{[i,j]} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_3 \sum_{\{i,j\}} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j. \quad (1)$$

Здесь $(\hat{\mathbf{S}}_i)^2 = 3/4$, i, j — узлы квадратной решетки, $\langle i, j \rangle$ обозначает сумму по связям ближайших соседей (сторона квадрата), $[i, j]$ — по связям вторых ближайших соседей (диагональ квадрата), $\{i, j\}$ — по связям третьих ближайших соседей (удвоенная сторона квадрата).

2.1. Классический предел $S \gg 1$

Общее представление о свойствах модели дает ее фазовая диаграмма в классическом пределе $S \gg 1$. Хотя эта задача тривиальна, приведем ее решение чуть детальнее, так как в дальнейшем сравнение с классическим пределом будет существенным.

В двумерном пространстве любой дальний порядок — соизмеримый или несоизмеримый — описыва-

ется следующей подстановкой (плоской спиралью) [34, 35]:

$$\mathbf{S}_r = \mathbf{e}_1 \cos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{e}_2 \sin(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

где \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 — лежащие в плоскости ортогональные орты, \mathbf{r} — радиус-вектор узла решетки, \mathbf{q}_0 — управляющая точка в зоне Бриллюэна (длина спина здесь нормирована на единицу). При фиксированных значениях обменных параметров J_1, J_2, J_3 спиновая структура находится подстановкой выражения (2) в уравнение (1) и минимизацией классической энергии по положению управляющей точки \mathbf{q}_0 .

Ниже приведены полученные таким образом все возможные положения управляющей точки и соответствующие им значения классической энергии:

\mathbf{q}_0	$E(\mathbf{q}_0)$	
$(0, 0)$	$4(J_1 + J_2 + J_3)$	
(π, π)	$-4(J_1 - J_2 - J_3)$	
$(0, \pi), (\pi, 0)$	$-4(J_2 - J_3)$	
$(0, q_1), (q_1, 0)$	$2J_1 - \frac{(J_1 + 2J_2)^2}{4J_3}$	(3)
$(\pi, q_2), (q_2, \pi)$	$-2J_1 - \frac{(J_1 - 2J_2)^2}{4J_3}$	
(q_3, q_3)	$-4J_3 - \frac{J_1^2}{J_2 + 2J_3}$	

где использованы обозначения

$$q_1 = \arccos\left(-\frac{J_1 + 2J_2}{4J_3}\right), \quad (4)$$

$$q_2 = \arccos\left(-\frac{J_1 - 2J_2}{4J_3}\right), \quad (5)$$

$$q_3 = \arccos\left(-\frac{J_1}{2J_2 + 4J_3}\right). \quad (6)$$

Фазовая диаграмма находится отбором спиновой структуры, отвечающей при данных J_1, J_2, J_3 наименьшей энергии, и представлена на рис. 2. Здесь и далее использована следующая параметризация обменов:

$$J_1 = \cos \psi \cos \varphi, \quad (7)$$

$$J_2 = \cos \psi \sin \varphi, \quad (8)$$

$$J_3 = \sin \psi, \quad (9)$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad -\pi/2 \leq \psi \leq \pi/2. \quad (10)$$

Напомним, что при нередко используемой альтернативной параметризации $(J_1, J_2, J_3) \Rightarrow (1, J_2/J_1, J_3/J_1)$ все фазовые границы — прямые линии. Однако такой вариант удобен лишь на локальных участках пространства параметров.

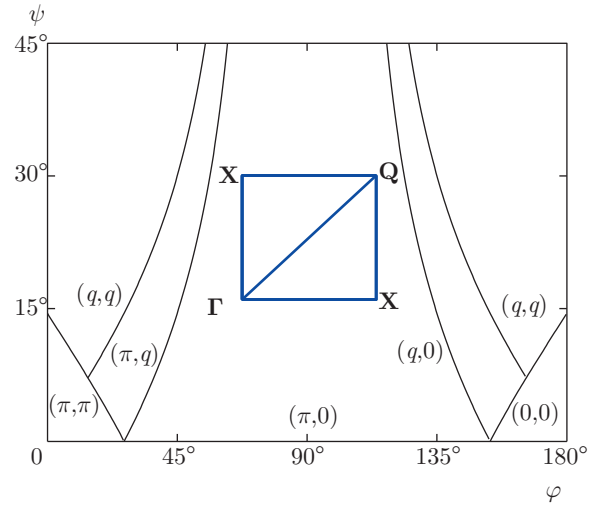


Рис. 2. Фазовая диаграмма J_1 - J_2 - J_3 -модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в классическом пределе. Обмены J_1, J_2 и J_3 параметризуются углами φ и ψ : $J_1 = \cos \psi \cos \varphi, J_2 = \cos \psi \sin \varphi, J_3 = \sin \psi$. Возможные фазы маркированы положением управляющей точки (или одной из двух эквивалентных) на четверти зоны Бриллюэна: (π, π) — АФМ, $(\pi, 0)$ — страйп, $(0, 0)$ — ФМ, $(q, q), (\pi, q), (q, 0)$ — три вида геликоидальных структур. Представлена часть фазовой диаграммы $0 \leq \varphi \leq \pi, 0 \leq \psi \leq \pi/4$. На вставке показана четверть зоны Бриллюэна

Ниже мы рассматриваем наиболее интересную четверть полной фазовой диаграммы $0 \leq \varphi \leq \pi, 0 \leq \psi \leq \pi/2$, т. е.

$$1 \geq J_1 \geq -1, \quad 0 \leq J_2 \leq 1, \quad 0 \leq J_3 \leq 1,$$

$$\sqrt{J_1^2 + J_2^2 + J_3^2} = 1$$

(см. рис. 2). Сюда попадают все известные экспериментальные данные по квазидвумерным соединениям. С точки зрения теории эта область интересна тем, что в ней реализуются все возможные в соответствии с соотношениями (3) фазы. Это, во-первых, три «стандартные» фазы:

1) ФМ-фаза, управляющая точка $\mathbf{q}_0 = (0, 0)$;

2) страйп-фаза, чередующиеся полосы спинов, направленных в противоположные стороны, $\mathbf{q}_0 = (0, \pi), (\pi, 0)$;

3) шахматная АФМ-фаза, $\mathbf{q}_0 = (\pi, \pi)$.

Во-вторых, это три спиновых спирали (геликоидальные фазы), спины поворачиваются от узла к узлу, причем в общем случае период спиновой структуры несоизмерим с периодом решетки:

4) геликоид, $\mathbf{q}_0 = (0, q_1), (q_1, 0)$;

5) геликоид, $\mathbf{q}_0 = (\pi, q_2), (q_2, \pi)$;

б) геликоид, $\mathbf{q}_0 = (q_3, q_3)$.

В первых трех случаях управляющая точка \mathbf{q}_0 во всей области существования соответствующей фазы неподвижна. Для геликоидов же при изменении параметров обмена точка \mathbf{q}_0 движется по симметричным линиям зоны Бриллюэна в соответствии с выражениями (4)–(6) (см. вставку на рис. 2).

Разнообразие фаз обусловлено тем, что в рассматриваемой четверти фазовой плоскости спиновая система максимально фрустрирована — если хотя бы два обмена ненулевые, то одновременно все связи в гамильтониане (1) не могут быть насыщены полностью (что ясно уже из простейших геометрических соображений). В остальных трех четвертях это неверно по отношению по крайней мере к одной из связей, и эти области гораздо «беднее» на фазы. Фрустрированность приводит к появлению между АФМ- и ФМ-фазами «компромиссной» страйп-фазы, а при $J_3 > 0$ — еще и геликоидальных фаз.

Подчеркнем снова, что в модели J_1 – J_2 – J_3 спиновые спирали возникают уже в классическом пределе, без нарушения центральной симметрии и без привлечения взаимодействия Дзялошинского–Мория.

Отметим также еще одно свойство. Как можно видеть из формул (4)–(6) и рис. 2, для модели с более чем одним обменом положение управляющей точки \mathbf{q}_0 не позволяет однозначно восстановить соотношение обменных параметров, конкретному значению \mathbf{q}_0 соответствует целая линия на плоскости φ – ψ , т. е. интерпретация нейтронного эксперимента лишь по положению брэгговского пика (без привлечения дополнительных энергетических соображений) неоднозначна.

2.2. Квантовый случай $S = 1/2$

В квантовом пределе $S = 1/2$ при нулевой температуре ситуация качественно аналогична классическому пределу — возможны все перечисленные выше фазы с дальним порядком. Однако, кроме того, даже при $T = 0$ возможны состояния без дальнего порядка (спиновая жидкость). На фазовой диаграмме они расположены между фазами с дальним порядком при условии наличия фрустрации. В рассматриваемой области параметров (см. рис. 2) это верно для всех фазовых границ, т. е. вблизи всех «классических» фазовых границ возникают неупорядоченные «прослойки» [36–38]. Строго говоря, описанная картина достоверно установлена лишь при $\psi = 0$ (т. е. $J_3 = 0$). Однако нет никаких

оснований полагать, что при $\psi \neq 0$ ситуация может качественно измениться.

При $T \neq 0$ в силу теоремы Мермина–Вагнера [39] дальний порядок невозможен при любых значениях параметров обмена, однако ближний порядок существенным образом перестраивается при движении по фазовой плоскости.

В настоящей работе рассматриваются ближний порядок и термодинамические свойства квантовой ($S = 1/2$) модели при $T \neq 0$. Анализ проводится в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода (СССП) для спиновых функций Грина [40–42].

3. СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫЙ САМОСОГЛАСОВАННЫЙ ПОДХОД

Метод СССП широко используется при изучении модели Гейзенберга (в том числе фрустрированной) [42–45], а также более сложных низкоразмерных спиновых моделей [46–48]. Он адекватен двумерным моделям, так как в нем автоматически соблюдается теорема Мермина–Вагнера. В СССП средний спин на узле всегда равен нулю, в спиновом пространстве сохраняются изотропность (симметрия гамильтониана), условие спинового констрейнта $(\hat{\mathbf{S}}_i)^2 = 3/4$ строго соблюдается на каждом узле, в прямом пространстве сохраняются трансляционная инвариантность и симметрия решетки. Кроме того, СССП позволяет получить самосогласованный спектр спиновых возбуждений во всей зоне Бриллюэна. Заметим, что по физическим основаниям и фактическим результатам метод СССП близок к проекционной технике Цванцига–Мори–Церковникова (см., например, работы [49–52]).

В целом, СССП состоит в следующем (детали можно найти в работах [36, 45]). Вычисляется двухвременная запаздывающая спин-спиновая функция Грина

$$G_{\mathbf{nm}} = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [S_{\mathbf{n}}^z(t), S_{\mathbf{m}}^z] \rangle. \quad (11)$$

В силу сферической симметрии отличны от нуля (и равны друг другу) только диагональные по $\alpha = x, y, z$ функции Грина, а средний спин на узле равен нулю ($G^{zz} = G^{xx} = G^{yy}$; $\langle S_{\mathbf{n}}^{\beta} \rangle = 0$, $\beta = x, y, z$).

После стандартного для СССП замыкания цепочки уравнений движения для функции Грина на

втором шаге [36] фурье-образ спин-спиновой функции Грина приобретает вид

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (12)$$

В модели J_1 - J_2 - J_3 выражение для числителя $F_{\mathbf{q}}$ включает спин-спиновые корреляционные функции $c_{|\mathbf{r}|} = \langle S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^z \rangle$ на первых трех координационных сферах, а для спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ — на первых восьми:

$$F_{\mathbf{q}} = 8 \sum_{r \in \{g, d, 2g\}} J_r (\gamma_r - 1) c_r, \quad (13)$$

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = 2 \sum_{i=1}^{12} \Gamma_i K_i, \quad (14)$$

где \mathbf{g} , \mathbf{d} и $2\mathbf{g}$ — векторы первых, вторых и третьих ближайших соседей, J_g, J_d, J_{2g} — соответственно J_1, J_2 и J_3 ;

$$\gamma_g = \frac{1}{2}(\cos q_x + \cos q_y), \quad \gamma_d = \cos q_x \cos q_y,$$

$$\gamma_{2g} = \frac{1}{2}[\cos(2q_x) + \cos(2q_y)].$$

Громоздкие выражения для входящих в выражение (14) множителей Γ_i , определяющих зависимость спектра от квазиимпульса, и решеточных сумм K_i приведены в Приложении. Входящие в формулы (13), (14) спиновые корреляционные функции далее стандартным образом выражаются через функцию Грина, что приводит к системе самосогласованных уравнений, которая решается численно.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Корреляторы и ближний порядок

На рис. 3 представлены спин-спиновые корреляторы для первых трех координационных сфер (соответственно c_g, c_d и c_{2g}) в диапазоне $0 \leq \varphi \leq 180^\circ, -1^\circ \leq \psi \leq 10^\circ$, т.е. $1 \geq J_1 \geq -1, 0 \leq J_2 \leq 1, -0.018 \leq J_3 \leq 0.174$.

Во избежание путаницы здесь и далее будем представлять параметрические углы φ и ψ в градусах, а координаты в зоне Бриллюэна — стандартно, в радианах. Все энергетические величины нормированы на $\sqrt{J_1^2 + J_2^2 + J_3^2} = 1$.

Сами по себе графики на рис. 3 не дают ясного представления о структуре ближнего порядка. Более того, зависимость корреляторов от ψ на значительной части фазовой плоскости не кажется существенной (хотя обратим внимание на различие масштабов по осям φ и ψ). Однако обусловленное этой

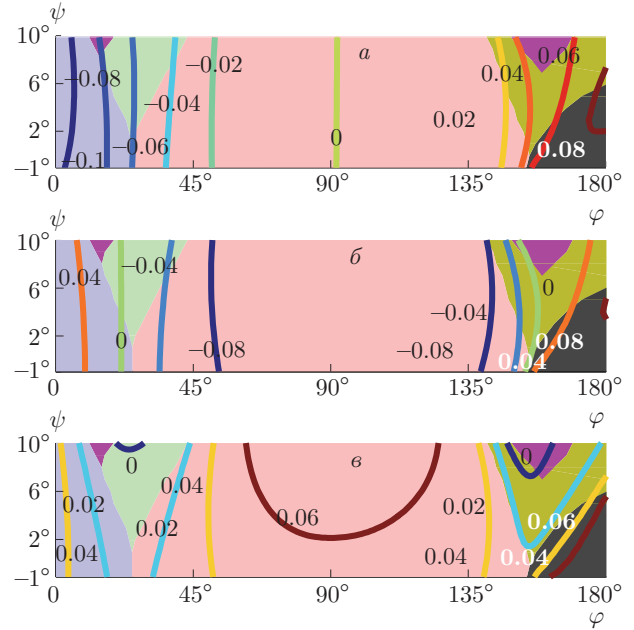


Рис. 3. (В цвете онлайн) Спин-спиновые корреляторы c_g (а), c_d (б) и c_{2g} (в) для первых трех координационных сфер (представлены линии уровня). Цветом обозначены различные структуры ближнего порядка (см. рис. 4)

зависимостью изменение структуры ближнего порядка оказывается более радикальным.

Перейдем теперь к исследованию структуры ближнего порядка. В квантовом случае спин-спиновые корреляторы $c_{\mathbf{r}}$ определяются структурным фактором $c_{\mathbf{q}}$:

$$c_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega [2m(\omega) + 1] \text{Im} G^z(\mathbf{q}, \omega), \quad (15)$$

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}, \quad (16)$$

где $m(\omega)$ — функция Бозе при данной температуре. При $T = 0$ структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ может как содержать дельта-образный вклад (при наличии дальнего порядка), так и быть конечным во всей зоне Бриллюэна (при его отсутствии) [36]. При $T \neq 0$ дальний порядок невозможен и величина $c_{\mathbf{q}}$ везде конечна. Точка \mathbf{q}_0 — положение максимума структурного фактора в зоне Бриллюэна — определяет структуру ближнего порядка, а полуширина пика $c_{\mathbf{q}}$ — корреляционную длину по отношению к соответствующему порядку (мы отвлекаемся от эквивалентных точек в полной зоне Бриллюэна), т.е. точка \mathbf{q}_0 яв-

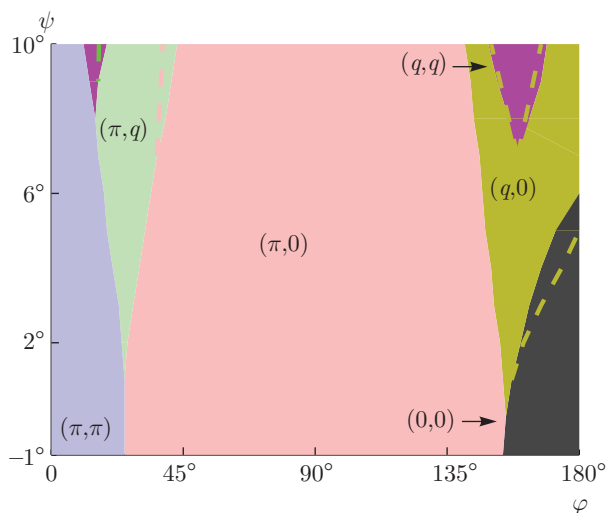


Рис. 4. (В цвете онлайн) Области фазовой плоскости, отвечающие различным положениям \mathbf{q}_0 максимуму структурного фактора c_q , т. е. различным структурам ближнего порядка. Сплошные границы отвечают $T = 0.4$, штриховые линии — $T = 0.2$. Различные цвета соответствуют разным структурам ближнего порядка (в исследованном диапазоне параметров обнаружены все возможные в модели структуры). Обозначены положения максимума структурного фактора

ляется квантовым аналогом управляющей точки в классической модели.

Заметим, что в принципе возможны состояния с более чем одним максимумом c_q (в неэквивалентных точках), что следует трактовать как взаимопроникновение различных порядков [53]. В классическом случае это невозможно.

На рис. 4 на фазовой плоскости φ - ψ представлены области, отвечающие различным положениям \mathbf{q}_0 в зоне Бриллюэна, т. е. различным структурам ближнего порядка при температурах $T = 0.2$ и $T = 0.4$. Видно, что в исследованном диапазоне параметров реализуются все возможные структуры ближнего порядка: АФМ, страйп, ФМ и три вида геликоидов.

С ростом температуры высота любого конкретного пика структурного фактора уменьшается (если не происходит смены типа ближнего порядка), однако вплоть до высоких температур $T \approx 0.5$ полного размывания не наблюдается и структура ближнего порядка остается легко определяемой. Как видно на рис. 4, границы различных областей ближнего порядка слабо зависят от температуры, наиболее существенна эта зависимость в областях геликоидов.

Отметим, что наблюдается только одно качественное отличие от классической картины — сим-

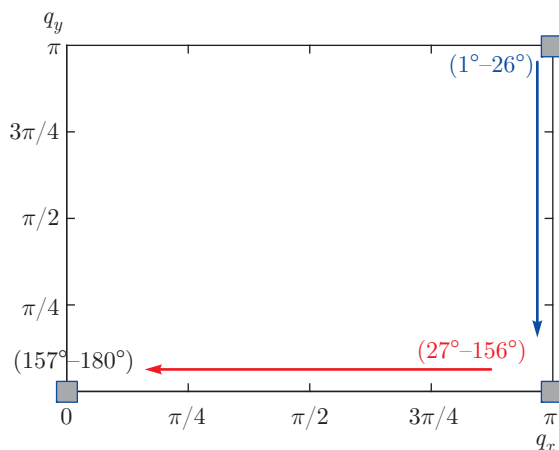


Рис. 5. (В цвете онлайн) Движение управляющей точки в зоне Бриллюэна при $\psi = 0$ ($J_3 = 0$) и изменении φ от 0 до 180° . Цифры возле управляющих точек — границы диапазона φ с соответствующей структурой ближнего порядка: АФМ ($0 \leq \varphi \leq 26^\circ$), страйп ($27^\circ \leq \varphi \leq 156^\circ$), ФМ ($157^\circ \leq \varphi \leq 180^\circ$). Данные для $T = 0.4$

метрия фазовой диаграммы относительно линии $\varphi = 90^\circ$ нарушена, в частности, геликоид (q, q) не граничит с ФМ-областью, а обтекается геликоидом $(q, 0)$.

Эволюцию ближнего порядка проясняют рис. 5 и 6, где показано движение управляющей точки \mathbf{q}_0 при изменении φ от 0 до 180° для двух значений ψ : $\psi = 0$ и $\psi = 10^\circ$ при $T = 0.4$.

В первом случае (рис. 5), при $\psi = 0$, т. е. при нулевом обмене J_3 , возможны только три фазы ближнего порядка: АФМ, страйп и ФМ, каждая из них — с неподвижной управляющей точкой. При $\varphi = 26^\circ$ точка \mathbf{q}_0 скачком переходит из АФМ- в страйп-позицию $(\pi, \pi) \rightarrow (\pi, 0)$, при $\varphi = 156^\circ$ — из страйп- в ФМ-позицию $(\pi, 0) \rightarrow (0, 0)$. Это, разумеется, не означает фазовых переходов. Фаза при $T \neq 0$ и любых значениях обменных параметров одна — спиновая жидкость, или, иными словами, парамагнетик с сильными межузельными корреляциями. «Прыжок» управляющей точки \mathbf{q}_0 сопровождается непрерывным изменением вида структурного фактора c_q .

В втором случае (рис. 6), при $\psi = 10^\circ$ ($J_3 = 0.174$), движение управляющей точки более сложное: неподвижное положение в АФМ-точке $(\pi, \pi) \rightarrow$ движение по диагонали зоны Бриллюэна (геликоид (q, q)) \rightarrow прыжок и движение по стороне зоны Бриллюэна (геликоид $(q, 0)$) \rightarrow неподвижное положение в страйп-точке $(\pi, 0) \rightarrow$ вновь движение по стороне зоны Бриллюэна \rightarrow прыжок и движение по диагонали \rightarrow прыжок и движение по стороне.

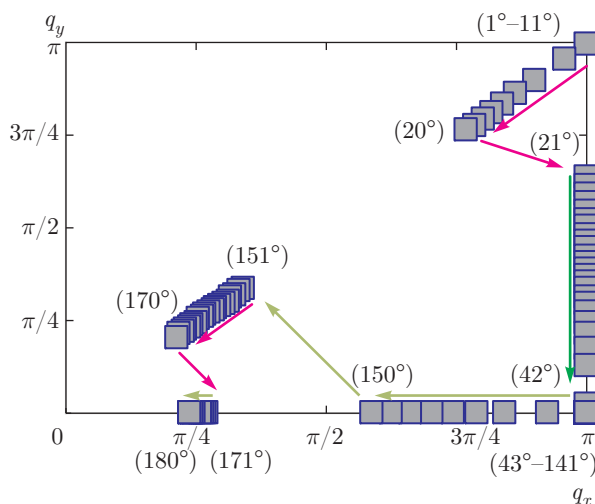


Рис. 6. (В цвете онлайн) Движение управляющей точки в зоне Бриллюэна при $\psi = 10^\circ$ ($J_3 = 0.174$) и изменении φ от 0 до 180° . Цифры возле управляющих точек — границы диапазона φ с соответствующей структурой ближнего порядка: АФМ — ($0 \leq \varphi \leq 11^\circ$), геликоид (q, q) — ($12^\circ \leq \varphi \leq 20^\circ$), геликоид (π, q) — ($21^\circ \leq \varphi \leq 42^\circ$), страйп — ($43^\circ \leq \varphi \leq 141^\circ$), геликоид $(0, q)$ — ($142^\circ \leq \varphi \leq 150^\circ$), снова геликоид (q, q) — ($151^\circ \leq \varphi \leq 170^\circ$), снова геликоид $(0, q)$ — ($171^\circ \leq \varphi \leq 180^\circ$). Для наглядности цвета цифр и стрелок отвечают соответствующим структурам ближнего порядка на рис. 4. Данные для $T = 0.4$

Эта последовательность отвечает эволюции структуры ближнего порядка на рис. 4. Отметим еще раз, что при $\varphi \gtrsim 150^\circ$ полученные результаты не вполне согласуются с классической картиной — геликоид (q, q) не граничит с ФМ-областью, а обтекается геликоидом $(q, 0)$.

4.2. Геликоидальный ближний порядок

Как уже упоминалось, включение третьего обмена J_3 приводит к появлению в некоторых областях фазовой плоскости φ - ψ состояний с геликоидальной (спиральной) структурой ближнего порядка, в общем случае несоизмеримой с периодом решетки. Области параметров обмена, в которых реализуются такие состояния в классическом пределе, показаны выше на рис. 2 (области геликоидальных структур ближнего порядка в квантовом случае см. на рис. 4).

Геликоидальным состояниям отвечает положение точки \mathbf{q}_0 — максимума структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$ — на сторонах треугольника Γ - \mathbf{X} - \mathbf{Q} -зоны Бриллюэна (см. вставку на рис. 2), кроме его вершин, где реализуются соответственно состояния ФМ ($\mathbf{q}_0 = \Gamma = (0, 0)$), страйп ($\mathbf{q}_0 = \mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$) и АФМ

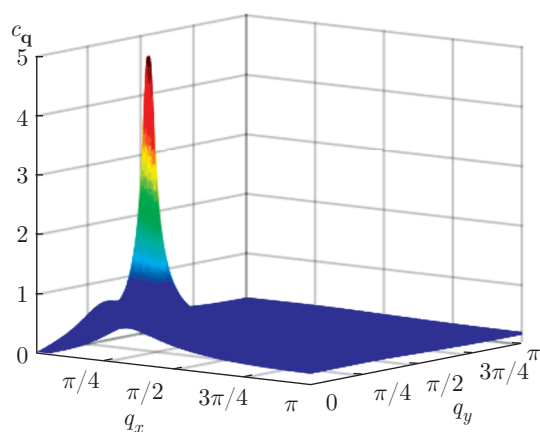


Рис. 7. (В цвете онлайн) Пример геликоидального ближнего порядка. Острый максимум $c_{\mathbf{q}}$ на диагонали зоны Бриллюэна (геликоид (q, q)) при низкой температуре: $T = 0.02$, $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$

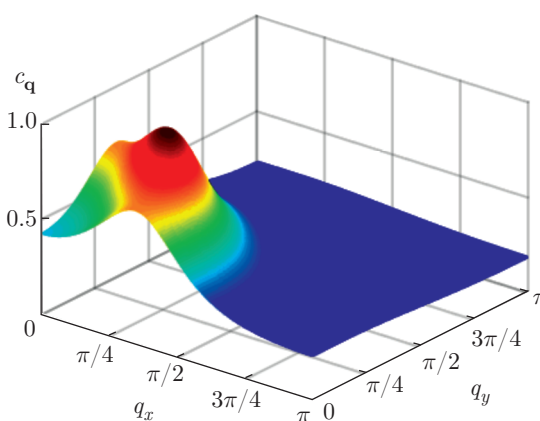


Рис. 8. (В цвете онлайн) Максимум $c_{\mathbf{q}}$ на диагонали зоны Бриллюэна при тех же, что на рис. 7, значениях обменных параметров, но при большей температуре: $T = 0.2$, $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$

($\mathbf{q}_0 = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). Таким образом, возможны три типа геликоидальных состояний.

На рис. 7 и 8 показаны характерные примеры — структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ для «диагонального» геликоида (q, q) при величинах параметрических углов $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$ ($J_1 = -0.9254$, $J_2 = 0.3368$, $J_3 = 0.1736$) и температурах соответственно $T = 0.02$ и $T = 0.2$. Максимум структурного фактора находится в точке (q, q) , $q = 0.82$ (положение максимума слабо зависит от температуры). Обратная ширина пика определяет корреляционную длину — в данном случае по отношению к (q, q) -геликоидальному порядку [54].

В использованном методе СССП изотропность гамильтониана в спиновом пространстве сохраняет-

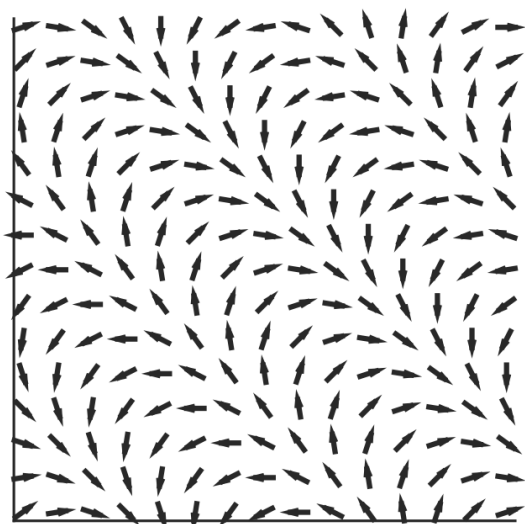


Рис. 9. Спиновая структура геликоида (q, q) на квадратной решетке в классической J_1 - J_2 - J_3 -модели при $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$ (т.е. при тех же значениях обменных параметров, что на рис. 7, 8 и рис. 10, 11)

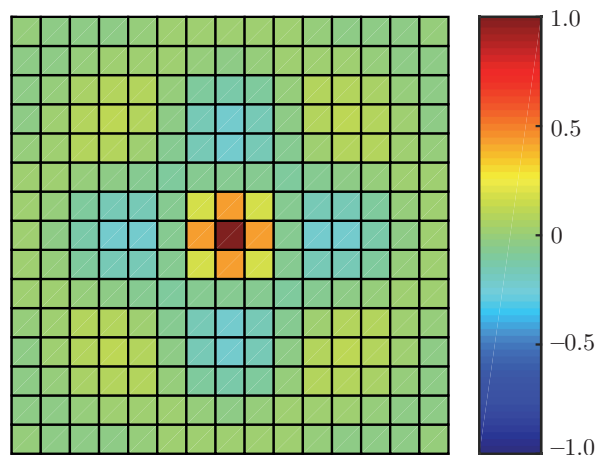


Рис. 11. (В цвете онлайн) Картина квантовых спин-спиновых корреляторов $c_{|r|} = \langle \hat{S}_0 \cdot \hat{S}_r \rangle$, полученных в настоящей работе. За нулевой узел выбран центральный узел решетки, корреляторы нормированы на максимальное значение; $T = 0.02$; $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$ (те же значения обменных параметров, что на рис. 7–11)

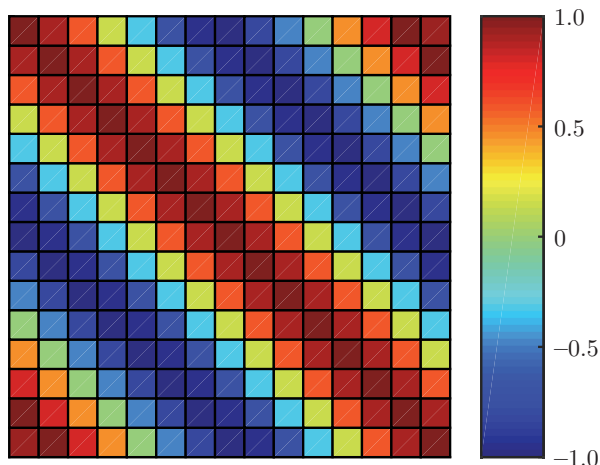


Рис. 10. (В цвете онлайн) Картина спин-спиновых корреляторов $c_{|r|} = \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle$ на квадратной решетке в классической J_1 - J_2 - J_3 -модели при $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$ (те же значения обменных параметров, что на рис. 7–9, 11). За нулевой узел выбран центральный узел решетки

ся, средний спин на узле равен нулю, а спиновый порядок выражается через спин-спиновые корреляторы. Поэтому наглядная картина геликоидального состояния как совокупности спинов, поворачивающихся от узла к узлу, становится неадекватной. Здесь необходимы дополнительные пояснения.

На рис. 9 представлена стандартная геликоидальная спиновая структура в классическом пределе при тех же значениях обменных параметров

$\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$, что на рис. 7 и 8 (в данном случае соизмеримая). На рис. 10 показана отвечающая этим же значениям обменных параметров картина спин-спиновых корреляторов. На обоих рисунках хорошо видна «диагональность» геликоида в прямом пространстве, обусловленная диагональным положением управляющей точки в зоне Бриллюэна.

В использованном здесь сферически-симметричном квантовом подходе аналога рис. 9 быть не может, поскольку средний спин на любом узле равен нулю. Имеет смысл лишь картина спин-спиновых корреляторов. На рис. 11 представлены полученные в настоящей работе спин-спиновые корреляторы при тех же значениях обменных параметров, что на рис. 7–10 ($\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$) и низкой температуре $T = 0.02$.

При сравнении рис. 10 и 11 необходимо иметь в виду два обстоятельства.

1. Использованный метод СССП сохраняет квадратную симметрию решетки, поэтому «диагональная» геликоидальная структура оказывается «двух-диагональной».

2. В квантовом случае вследствие сильной фрустрации даже при низкой температуре корреляционная длина мала.

С учетом этих пунктов можно говорить о качественной схожести рис. 10 и 11. Таким образом, в квантовом случае (q, q) -геликоид есть сохраняющая квадратную симметрию суперпозиция «диагональных» геликоидов.

В принципе, если в системе присутствует анизотропное взаимодействие J' , то может возникать спиновая структура, аналогичная приведенной на рис. 10. Но и в этом случае при $J' \ll T$ мы должны вернуться к описанной выше ситуации.

Аналогичные соображения верны и по отношению к двум другим типам геликоидов — (π, q) и $(q, 0)$: геликоидальная структура проявляется в картине спин-спиновых корреляторов, при этом квадратная симметрия решетки сохраняется.

4.3. Спектры спиновых возбуждений

Для случая $J_3 = 0$ спектры спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ детально рассмотрены в работе [54]. В общих чертах при низких, но ненулевых температурах картина следующая. С ростом φ (т.е. J_2) вид спектра $\omega_{\mathbf{q}}$ непрерывно трансформируется из АФМ в страйп и далее в ФМ.

В АФМ-области ближнего порядка (см. рис. 4) спектр имеет характерный для АФМ без дальнего порядка вид: спиновая щель мала в АФМ-точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. В страйп-области ближнего порядка спиновая щель мала в страйп-точках $\mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$. Кроме того, при $\varphi \simeq 90^\circ$, т.е. при $J_1 \simeq 0$ щель в АФМ-точке также мала, а при $\varphi = 90^\circ$ она равна нулю, подробнее об этом ниже. В ФМ-области ближнего порядка спектр имеет обычный ФМ-вид — величина $\omega_{\mathbf{q}}$ растет при движении по зоне Бриллюэна от нулевой точки $\mathbf{\Gamma} = (0, 0)$ в любом направлении.

При любых значениях обменных параметров и любых температурах спиновая щель закрыта в нулевой точке $\mathbf{\Gamma} = (0, 0)$.

Ненулевой третий обмен $J_3 > 0$ ($\psi > 0$) модифицирует, иногда значительно, изложенную картину.

Если с ростом ψ тип ближнего порядка не меняется, то спектр модифицируется несущественно. На рис. 12 представлена эволюция спектра с ростом ψ при $\varphi = 0$, т.е. в АФМ-области ближнего порядка. При $\psi = 0$ спектр имеет АФМ-вид с малой щелью в АФМ-точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. При максимальном значении $\psi = 10^\circ$ спектр изменен незначительно, несколько увеличилась АФМ-щель.

Несущественно изменяется с ростом ψ спектр и в страйп-области ближнего порядка, мы не будем приводить соответствующие графики.

Если же с ростом ψ тип ближнего порядка меняется, то спектр модифицируется качественно. На рис. 13 показано изменение $\omega_{\mathbf{q}}$ с ростом ψ при $\varphi = 20^\circ$, что отвечает переходу от АФМ-области ближнего порядка к геликоидальному (см. рис. 4). Строго говоря, при максимальном значении $\psi = 10^\circ$

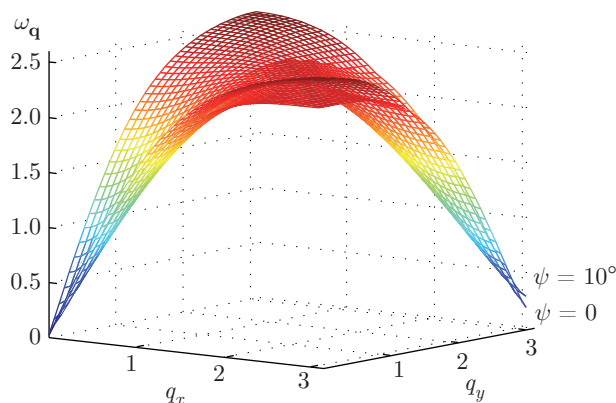


Рис. 12. (В цвете онлайн) Изменение спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ с ростом ψ (т.е. J_3) в АФМ-области ближнего порядка; $\varphi = 0, \psi = 0, 10^\circ, T = 0.2$. Модификация спектра несущественна, слегка возрастает щель в АФМ-точке (π, π)

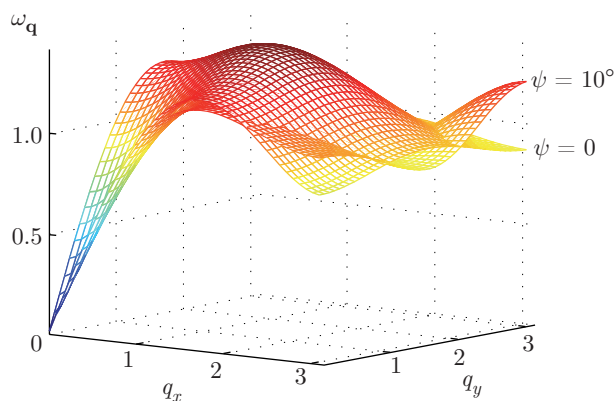


Рис. 13. (В цвете онлайн) Изменение спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ с ростом ψ (т.е. J_3) при переходе от АФМ-области ближнего порядка к геликоидальной структуре; $\varphi = 20^\circ, \psi = 0, 10^\circ, T = 0.2$. Спектр существенно модифицируется, образуется почти бездисперсионный участок на дуге, проходящей через диагональ зоны Бриллюэна (см. также рис. 14)

образуется геликоид (π, q) (минимум спектра на границе зоны Бриллюэна), но фактически появляется почти бездисперсионная область локального минимума на дуге, проходящей через диагональ зоны Бриллюэна (см. также рис. 14).

На рис. 14 для тех же параметров, что и на рис. 13, показана эволюция структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$. Здесь при $\psi = 10^\circ$ виден дугообразный участок постоянных значений $c_{\mathbf{q}}$, отвечающий бездисперсионной области спектра на рис. 13. Такая структура ближнего порядка может быть интерпретирована как изотропное спиральное состояние спиновой

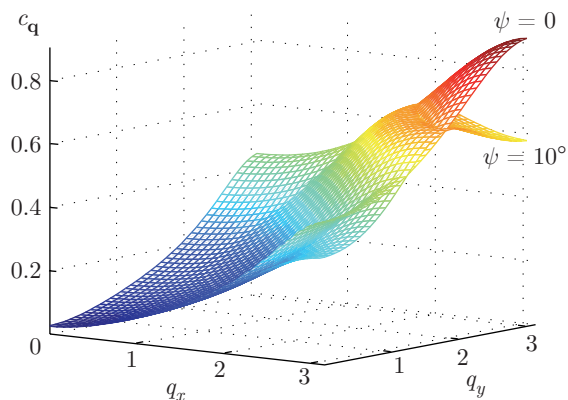


Рис. 14. (В цвете онлайн) Структурный фактор c_q для $\varphi = 20^\circ$, $\psi = 0, 10^\circ$, $T = 0.2$ (те же параметры, что на рис. 13). При $\psi = 10^\circ$ виден дугообразный участок постоянных значений c_q , отвечающий бездисперсионной области спектра на рис. 13

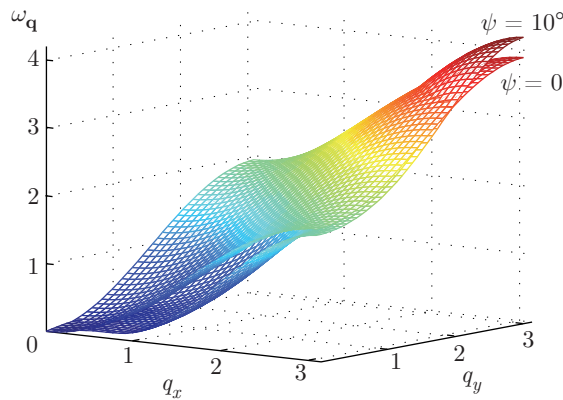


Рис. 16. (В цвете онлайн) Изменение спектра спиновых возбуждений ω_q с ростом ψ (т.е. J_3) при переходе от ФМ-области ближнего порядка к геликоиду $(q, 0)$; $\varphi = 180^\circ$, $\psi = 0, 10^\circ$, $T = 0.2$. Спектр существенно модифицируется, образуется почти бездисперсионный участок на дуге, проходящей через диагональ зоны Бриллюэна, с локальным минимумом в точке $(q, 0)$ (см. также рис. 17)

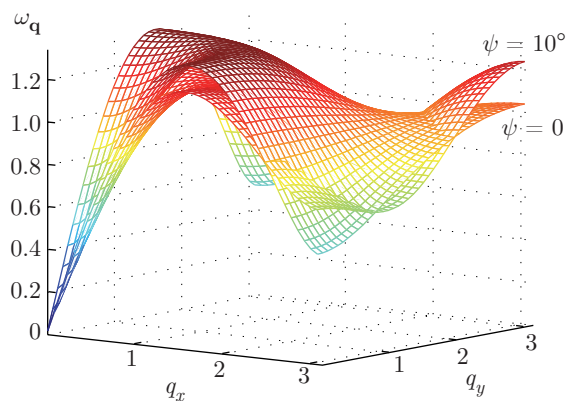


Рис. 15. (В цвете онлайн) Изменение спектра спиновых возбуждений ω_q с ростом ψ (т.е. J_3) при переходе от АФМ-области ближнего порядка к геликоиду (π, q) ; $\varphi = 35^\circ$, $\psi = 0, 10^\circ$, $T = 0.2$. Спектр существенно модифицируется, образуется минимум на боковой стороне зоны Бриллюэна

жидкости. Оно представляет собой квантовую суперпозицию спиралей, распространяющихся во все стороны. Численно указания на подобное состояние получены в работе [55], в которой такое состояние найдено вблизи ФМ-области и трактуется как новая фаза спиновой жидкости. Наши же результаты показывают, что изотропные (или почти изотропные) спирали реализуются вблизи любой границы двух геликоидальных порядков, т.е. как около ФМ-области (малые φ), так и около АФМ-области ($\varphi \simeq 180^\circ$).

На рис. 15 показано изменение ω_q с ростом ψ при большем значении φ ($\varphi = 35^\circ$). В этом случае спектр при $\psi = 0$ имеет страйп-характер (минимум

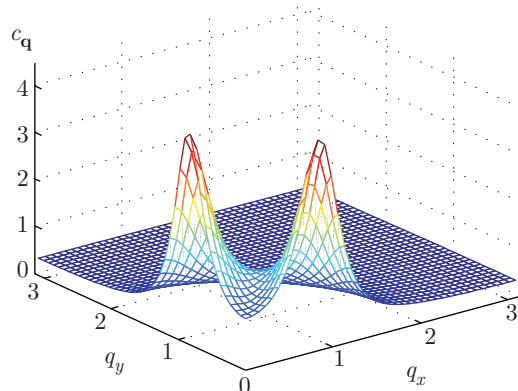


Рис. 17. (В цвете онлайн) Структурный фактор c_q для $\varphi = 180^\circ$, $\psi = 10^\circ$, $T = 0.2$. Структурный фактор существенно отличен от нуля на дуге, отвечающий бездисперсионной области спектра на рис. 16, и имеет максимумы в точках $(q, 0)$, $(0, q)$. Для наглядности координатные оси повернуты иначе, чем на рис. 12–16

в точке $\mathbf{X} = (\pi, 0)$), а при $\psi = 10^\circ$ ему соответствует четко определяемый геликоид (π, q) (см. рис. 4) — минимум спектра на стороне зоны Бриллюэна.

И последний случай — рис. 16 и 17 — где продемонстрированы изменения спектра ω_q и структурного фактора c_q с ростом ψ для $\varphi = 180^\circ$. Здесь при $\psi = 0$ реализуется ФМ-структура ближнего порядка (на рис. 17 величина c_q для $\psi = 0$ не приведена, так как это практически дельта-образный пик в нулевой точке $\Gamma = (0, 0)$). При $\psi = 10^\circ$ в спектре образуется дугообразный участок локального минимума, про-

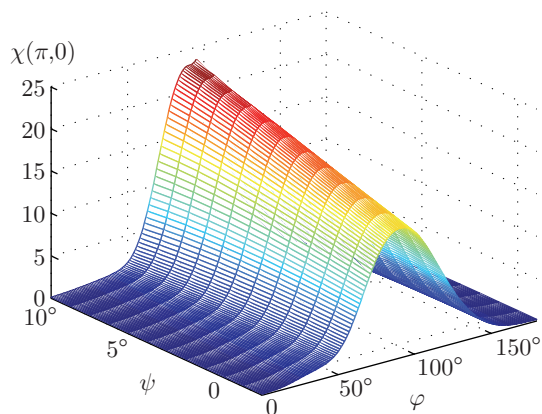


Рис. 18. (В цвете онлайн) Спиновая восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в страйп-точке $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ при $T = 0.4$

ходящий через диагональ зоны Бриллюэна. Структурный же фактор (как и в работе [55]) существенно отличен от нуля на этой же дуге, однако в эквивалентных точках $(0, q)$ и $(q, 0)$ имеются максимумы (соответственно рис. 4).

Таким образом, в зависимости от начального значения φ третий обмен может как слабо влиять на структуру ближнего порядка, так и сильно изменять ее. Во втором случае это приводит либо к геликоидальной структуре с выраженным максимумом $c_{\mathbf{q}}$ (см. рис. 17), что соответствует определенному направлению спирали (с точностью до квадратной симметрии), либо к изотропной квантовой суперпозиции спиралей (см. рис. 14). Последнее принципиально невозможно в классическом пределе.

4.4. Восприимчивость

Перейдем к обсуждению статической спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0) = -G^z(\mathbf{q}, \omega = 0)$. На рис. 18–20 приведены зависимости восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ от параметров обмена φ и ψ , вычисленные для трех различных точек \mathbf{q} зоны Бриллюэна.

На рис. 18 показана восприимчивость в страйп-точке $\mathbf{q} = \mathbf{X} = (\pi, 0)$. Видно, что величина χ максимальна в той области плоскости φ - ψ , где ближний порядок имеет страйп-структуру, т. е. положение \mathbf{q}_0 максимума структурного фактора совпадает с точкой $\mathbf{q} = (\pi, 0)$, в которой вычислена восприимчивость. С ростом ψ в страйп-области, т. е. с увеличением J_3 , растет высота пика структурного фактора, а с ней и восприимчивость. В остальных областях плоскости φ - ψ восприимчивость мала.

Вообще для восприимчивости, вычисленной в любой точке зоны Бриллюэна, отвечающей одной

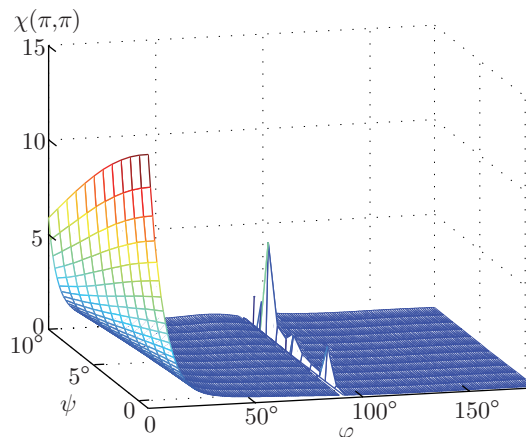


Рис. 19. (В цвете онлайн) Спиновая восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в АФМ-точке $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ при $T = 0.4$

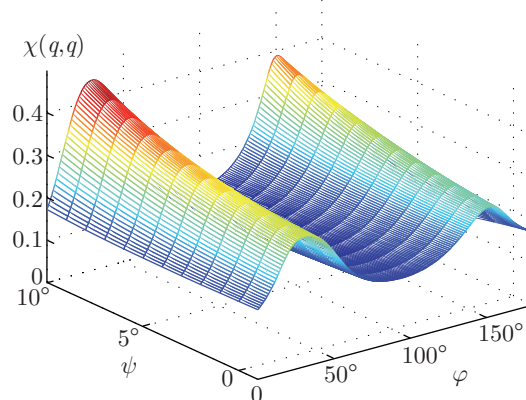


Рис. 20. (В цвете онлайн) Спиновая восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в точке на диагонали зоны Бриллюэна $\mathbf{q} = (0.523\pi, 0.523\pi)$ при $T = 0.4$

из возможных структур ближнего порядка, ситуация аналогична (напомним, что структура ближнего порядка определяется положением \mathbf{q}_0 максимума структурного фактора).

Восприимчивость в ферромагнитной точке $\mathbf{q} = \Gamma = (0, 0)$ ведет себя таким же образом — она максимальна в области ФМ-структуры ближнего порядка и монотонно изменяется с изменением высоты пика структурного фактора (в данном случае убывает с ростом ψ). Мы не будем приводить соответствующий график.

На рис. 19 показана восприимчивость в антиферромагнитной точке $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Восприимчивость максимальна в области фазовой плоскости, отвечающей АФМ-области ближнего порядка и, как и высота максимума структурного фактора, уменьшается с ростом ψ .

Здесь, однако, есть еще одна особенность. Восприимчивость $\chi(\mathbf{q} = (\pi, \pi))$ расходится при $\varphi = 90^\circ$ и при любом ψ , т. е. при $J_1 = 0$ и любых допустимых J_2, J_3 . Это видно из аналитического выражения для функции Грина. Физически же причина в том, что при $J_1 = 0$ система распадается на две не взаимодействующие подсистемы, что приводит к обращению в нуль щели в АФМ-точке при любых температурах, т. е. к обращению в нуль знаменателя статической восприимчивости («зубы» на рис. 19 представляют собой вызванный этой причиной артефакт). Очевидно, что такой вывод не зависит от метода вычисления.

Отметим также, что уменьшение высоты пика структурного фактора с увеличением J_3 в АФМ- и ФМ-областях качественно ясно уже из простых геометрических соображений. Очевидно, что на квадратной решетке третий обмен $J_3 > 0$ ослабляет как АФМ-, так и ФМ-порядки. В отличие от этих двух случаев, в страйп-области при умеренном росте J_3 ($\psi \leq 10^\circ$) пик $c_{\mathbf{q}}$ растет, а затем, как и следует ожидать из геометрических соображений, уменьшается. Эта немонотонность обусловлена сложной структурой страйп-состояния в СССП [42].

Наконец, на рис. 20 приведена восприимчивость в лежащей на диагонали зоны Бриллюэна геликоидальной точке $\mathbf{q} = (q_3, q_3)$ для $q_3 = 0.523\pi$. Отличие от предыдущих случаев состоит в том, что положение \mathbf{q}_0 максимума структурного фактора для геликоида не является неподвижным, а движется с изменением параметров обмена. Качественно это не меняет поведения восприимчивости — она максимальна в области фазовой плоскости, отвечающей соответствующему геликоиду, более того, соответствующему участку области «диагонального» геликоида (примыкающему к АФМ-области). На участке, отвечающем геликоиду «сходной» структуры $\mathbf{q}_0 = (\pi - q_3, \pi - q_3)$ (см. рис. 4), наблюдается еще один максимум, несколько меньшей величины.

4.5. Теплоемкость

Для рассматриваемой модели теплоемкость C при фиксированной температуре в основном слабо модулируется третьим обменом — см. рис. 21, при любом значении $-1^\circ \leq \psi \leq 10^\circ$ зависимость от φ качественно такая же, как при $\psi = 0$. Поскольку случай $\psi = 0$ детально рассмотрен в работе [54], мы не будем далее углубляться в подробности.

Эволюция зависимости $C(T)$ с ростом ψ при фиксированном φ не столь тривиальна. Наиболее интересна область $\varphi \approx 155^\circ$, где с ростом φ возни-

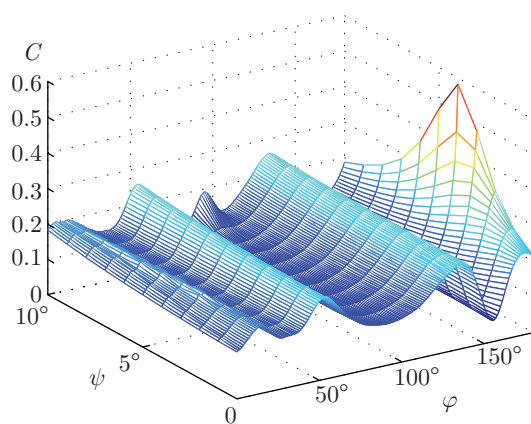


Рис. 21. (В цвете онлайн) Зависимость теплоемкости C от параметров обмена при $T = 0.4$

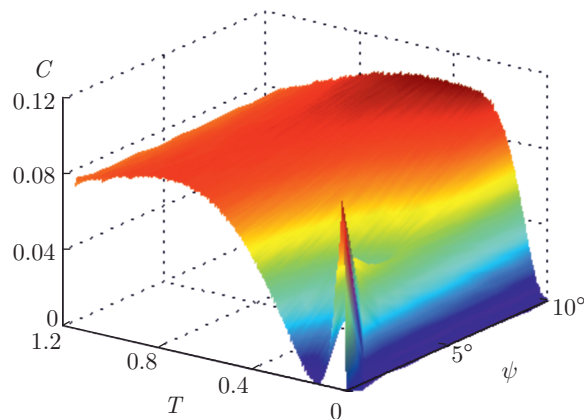


Рис. 22. (В цвете онлайн) Зависимость теплоемкости C от температуры и ψ при $\varphi = 155^\circ$

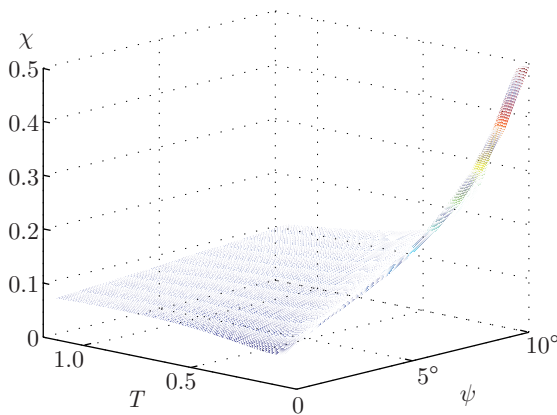


Рис. 23. (В цвете онлайн) Зависимость спиновой восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ в ФМ-точке $\mathbf{q} = (0, 0)$ от температуры и ψ при $\varphi = 155^\circ$

кает ближний (а при $T = 0$ дальний) ФМ-порядок. В этой области при $\psi = 0$ обнаружены свидетельства существования двух пиков на температурной зависимости теплоемкости [54, 56]. На рис. 22 представлена функция $C(\psi, T)$ при $\varphi = 155^\circ$. Видно, что вплоть до $\psi \simeq 5^\circ$ зависимость $C(T)$ сохраняет два максимума — острый при низких температурах и более пологий при $T \simeq 0.6$.

Такого рода двухпиковое температурное поведение теплоемкости встречается в различных низкоразмерных спиновых моделях [44, 57] и, как правило, считается обусловленным фрустрацией.

Интересно, что восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в отвечающей ФМ-порядку точке $\mathbf{q} = \mathbf{\Gamma} = (0, 0)$, не проявляет двухпиковой структуры — это видно из рис. 23, где восприимчивость показана в тех же осях, что и теплоемкость на рис. 22.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены ближний порядок и термодинамические свойства квантовой J_1 - J_2 - J_3 -модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$ на двумерной квадратной решетке. Изучены структура и температурное поведение всех возможных типов ближнего порядка. В широком диапазоне параметров найдены спин-спиновые корреляторы, спектры спиновых возбуждений, восприимчивость и теплоемкость.

Показано, что влияние третьего обмена может качественно менять свойства системы, в частности, приводить к возникновению как ферромагнитных, так и антиферромагнитных изотропных спиновых спиралей. Обнаружена область обменных параметров, в которой наблюдается двухпиковый температурный ход теплоемкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 16-02-00304-а, 17-52-53014 ГФЕН-а), использованы ресурсы Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Входящие в выражение для спектра $\omega_{\mathbf{q}}$ (14) решеточные суммы K_i имеют следующий вид:

$$K_1 = J_1 J_2 K_{gd} + J_1 J_3 K_{g,2g} + J_1^2 [z_g(z_g - 1)\tilde{c}_g + z_g c_0 + K_{gg}],$$

$$\begin{aligned} K_2 &= J_2 J_1 K_{dg} + J_2 J_3 K_{d,2g} + J_2^2 [z_d(z_d - 1)\tilde{c}_d + z_d c_0 + K_{dd}], \\ K_3 &= -J_1^2 z_g^2 \tilde{c}_g, \quad K_4 = -J_2^2 z_d^2 \tilde{c}_d, \\ K_5 &= -J_1 J_2 z_g z_d \tilde{c}_g, \quad K_6 = -J_1 J_2 z_g z_d \tilde{c}_d, \\ K_7 &= J_3 J_1 K_{2g,g} + J_3 J_2 K_{2g,d} + J_3^2 [z_{2g}(z_{2g} - 1)\tilde{c}_{2g} + z_{2g} c_0 + K_{2g,2g}], \\ K_8 &= -J_3^2 z_{2g}^2 \tilde{c}_{2g}, \quad K_9 = -J_1 J_3 z_g z_{2g} \tilde{c}_g, \\ K_{10} &= -J_3 J_1 z_{2g} z_g \tilde{c}_d, \quad K_{11} = -J_2 J_3 z_d z_{2g} \tilde{c}_d, \\ K_{12} &= -J_3 J_2 z_{2g} z_d \tilde{c}_{2g}. \end{aligned} \tag{17}$$

Здесь

$$K_{r_1 r_2} = \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 \neq -\mathbf{r}_2} \tilde{c}_{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}, \quad r_1, r_2 \in \{g, d, 2g\}. \tag{18}$$

Зависимость спектра $\omega_{\mathbf{q}}$ от квазиимпульса определяется множителями Γ_i :

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= 1 - \gamma_g, & \Gamma_2 &= 1 - \gamma_d, \\ \Gamma_3 &= 1 - \gamma_g^2, & \Gamma_4 &= 1 - \gamma_d^2, \\ \Gamma_5 &= (1 - \gamma_g)\gamma_d, & \Gamma_6 &= (1 - \gamma_d)\gamma_g, \\ \Gamma_7 &= 1 - \gamma_{2g}, & \Gamma_8 &= 1 - \gamma_{2g}^2, \\ \Gamma_9 &= (1 - \gamma_g)\gamma_{2g}, & \Gamma_{10} &= (1 - \gamma_{2g})\gamma_g, \\ \Gamma_{11} &= (1 - \gamma_d)\gamma_{2g}, & \Gamma_{12} &= (1 - \gamma_{2g})\gamma_d. \end{aligned} \tag{19}$$

Здесь $\gamma_n = (1/z_n) \sum_i \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_i)$, где сумма берется по z_n узлам соответствующей координационной сферы. Для двумерной квадратной решетки $z_g = z_d = z_{2g} = 4$. В (17), (18) \tilde{c}_r отвечает корреляторам c_r , перенормированным вершинными поправками, использовано приближение одной вершины (детали см. в работах [36, 42]). Отметим, что в СССР используется и альтернативная номенклатура группировки слагаемых в (14) [45, 56].

ЛИТЕРАТУРА

1. N. M. Plakida, in *High-Temperature Cuprate Superconductors*, Springer Ser. in Sol. St. Sci., No. 166, Springer, Berlin (2010), pp. 377–478.
2. J. M. Tranquada, in *Handbook of High-Temperature Superconductivity*, ed. by J. R. Schrieffer and J. S. Brooks, Springer, New York (2007), pp. 257–298.
3. R. Melzi, P. Carretta, A. Lascialfari et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1318 (2000).
4. R. Melzi, S. Aldrovandi, F. Tedoldi et al., *Phys. Rev. B* **64**, 024409 (2001).
5. H. Rosner, R. R. P. Singh, W. H. Zheng et al., *Phys. Rev. B* **67**, 014416 (2003).

6. S. Vasala, M. Avdeev, S. Danilkin et al., J. Phys.: Condens. Matter **26**, 496001 (2014).
7. H. Kageyama, T. Kitano, N. Oba et al., J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1702 (2005).
8. E. E. Kaul, H. Rosner, N. Shannon et al., J. Magn. Magn. Mater. **272–276**, Pt. 2, 922 (2004).
9. M. Skoulatos, J. Goff, N. Shannon et al., J. Magn. Magn. Mater. **310**, 1257 (2007).
10. P. Carretta, M. Filibian, R. Nath et al., Phys. Rev. B **79**, 224432 (2009).
11. M. Skoulatos, J. P. Goff, C. Geibel et al., Europhys. Lett. **88**, 57005 (2009).
12. A. A. Tsirlin and H. Rosner, Phys. Rev. B **79**, 214417 (2009).
13. A. A. Tsirlin, B. Schmidt, Y. Skourski et al., Phys. Rev. B **80**, 132407 (2009).
14. L. Bossoni, P. Carretta, R. Nath et al., Phys. Rev. B **83**, 014412 (2010).
15. R. Nath, A. A. Tsirlin, H. Rosner et al., Phys. Rev. B **78**, 064422 (2008).
16. S. Feldkemper, W. Weber, J. Schulenburg et al., Phys. Rev. B **52**, 313 (1995).
17. S. Feldkemper and W. Weber, Phys. Rev. B **57**, 7755 (1998).
18. H. Manaka, T. Koide, T. Shidara et al., Phys. Rev. B **68**, 184412 (2003).
19. D. Kasinathan, A. B. Kyker, and D. J. Singh, Phys. Rev. B **73**, 214420 (2006).
20. A. A. Tsirlin, O. Janson, S. Lebernegg et al., Phys. Rev. B **87**, 064404 (2013).
21. P. Carretta, N. Papinutto, C. B. Azzoni et al., Phys. Rev. B **66**, 094420 (2002).
22. P. Carretta, R. Melzi, N. Papinutto et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 047601 (2002).
23. L. Bossoni, P. Carretta, R. Nath et al., Phys. Rev. B **83**, 014412 (2011).
24. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions of Antiferromagnets and the Cuprate Superconductors*, Springer, Berlin (2012).
25. I. Georgescu, S. Ashhab, and F. Nori, Rev. Mod. Phys. **86**, 153 (2014).
26. Z.-X. Chen, Z.-W. Zhou, X. Zhou et al., Phys. Rev. A **81**, 022303 (2010).
27. X.-s. Ma, B. Dakić, S. Kropatschek et al., Sci. Rep. **4**, srep03583 (2014).
28. S. Murmann, F. Deuretzbacher, G. Zörn et al., Phys. Rev. Lett. **115**, 215301 (2015).
29. A. G. Volosniev, D. Petrosyan, M. Valiente et al., Phys. Rev. A **91**, 023620 (2015).
30. Y. Tsujimoto, Y. Baba, N. Oba et al., J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 063711 (2007).
31. Y. Tsujimoto, H. Kageyama, Y. Baba et al., Phys. Rev. B **78**, 214410 (2008).
32. S. M. Yusuf, A. K. Bera, C. Ritter et al., Phys. Rev. B **84**, 064407 (2011).
33. C. Ritter, S. M. Yusuf, A. K. Bera et al., Phys. Rev. B **88**, 104401 (2013).
34. J. M. Luttinger and L. Tisza, Phys. Rev. **70**, 954 (1946).
35. G. Misguich and C. Lhuillier, in *Frustrated Spin Systems*, World Sci., Singapore (2005), pp. 229–306.
36. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, ТМФ **168**, 389 (2011).
37. P. Sindzingre, L. Seabra, N. Shannon et al., J. Phys.: Conf. Ser. **145**, 012048 (2009).
38. P. Sindzingre, N. Shannon, and T. Momoi, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022058 (2010).
39. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
40. J. Kondo and K. Yamaji, Progr. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
41. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
42. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheynkov, in *Spectroscopy of High- T_c Superconductors*, ed. by N. M. Plakida, Taylor & Francis, London (2003), pp. 1–96.
43. I. Junger, D. Ihle, L. Bogacz et al., Phys. Rev. B **77**, 174411 (2008).
44. M. Härtel, J. Richter, D. Ihle et al., Phys. Rev. B **84**, 104411 (2011).
45. M. Härtel, J. Richter, O. Götze et al., Phys. Rev. B **87**, 054412 (2013).
46. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. М. Белемук, Письма в ЖЭТФ **75**, 118 (2002).

47. M. V. Eremin, I. M. Shigapov, and I. M. Eremin, *Eur. Phys. J. B* **85**, 131 (2012).
48. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, А. В. Михеенков и др., *Письма в ЖЭТФ* **100**, 207 (2014).
49. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, *Phys. Rev. B* **80**, 104425 (2009).
50. A. A. Vladimirov, D. Ihle, and N. M. Plakida, *Phys. Rev. B* **83**, 024411 (2011).
51. P. Rubin, A. Sherman, and M. Schreiber, *Phys. Lett. A* **374**, 3567 (2010).
52. P. Rubin, A. Sherman, and M. Schreiber, *Phys. Lett. A* **376**, 1062 (2012).
53. A. V. Mikheyenkov, A. F. Barabanov, and A. V. Shvartsberg, *Sol. St. Comm.* **152**, 831 (2012).
54. A. V. Mikheyenkov, A. V. Shvartsberg, V. E. Valiulin et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **419**, 131 (2016).
55. L. Seabra, P. Sindzingre, T. Momoi et al., *Phys. Rev. B* **93**, 085132 (2016).
56. M. Härtel, J. Richter, D. Ihle et al., *Phys. Rev. B* **81**, 174421 (2010).
57. G. Mert, *J. Magn. Magn. Mater.* **374**, 258 (2015).