ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2012, том 76, № 7, с. 858–860

УДК 538.931

МОДИФИКАЦИЯ СПИНОВОЙ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ КВАНТОВЫХ МАГНЕТИКОВ С СИЛЬНЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ

© 2012 г. Т. А. Валькова[1], В. В. Вальков[2, 3]

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Для квантовых магнетиков методом диаграммной техники для спиновых операторов получены точные представления, выражающие функции Грина через компоненты массового оператора $\Sigma^{\alpha\beta}$, концевые множители L, Q и неприводимую ни по Ларкину, ни по Дайсону часть T_{irr}^{--}. С точностью до вкладов первого порядка по параметру r_0^{-3} метода самосогласованного поля проведены вычисления спектра элементарных возбуждений и средней намагниченности.

Свойства квантовых магнетиков с сильными флуктуациями – предмет дискуссий многих научных публикаций. Это объясняется тем, что описание отмеченных систем традиционными методами часто оказывается проблематичным. В данной работе показано, что модификация диаграммной техники для спиновых операторов (ДТСО) [1] позволяет получить регулярную процедуру вычисления спектральных и термодинамических свойств анизотропных квантовых магнетиков.

Эффективный гамильтониан квантового магнетика запишем в виде

$$H = -\sum_f S_f^z - \sum_{fm}\left\{I_{fm}^{\perp} S_f^z S_m^z + I_{fm} S_f^+ S_m^- + \xi_{fm}\left(S_f^+ S_m^+ + S_f^- S_m^-\right)\right\}, \quad (1)$$

где введены обозначения

$$I_{fm} = \frac{1}{2}\left(I_{fm}^{\parallel} + I_{fm}^{\perp}\right), \quad \xi_{fm} = \frac{1}{4}\left(I_{fm}^{\parallel} - I_{fm}^{\perp}\right). \quad (2)$$

Если параметры $I_{fm}^{\parallel}$, $I_{fm}^{\perp}$ и ξ_{fm} независимы, то (1) соответствует *XYZ*-модели. При этом в импульсном представлении

$$I_q = \frac{1}{2}\left(\tilde{I}_q^x + \tilde{I}_q^y\right), \quad \xi_q = \frac{1}{4}\left(\tilde{I}_q^x - \tilde{I}_q^y\right), \quad I_q^{\perp} = \tilde{I}_q^z. \quad (3)$$

Использование гамильтониана в форме (1) позволяет описывать не только анизотропные ферромагнитные системы, но и анизотропные двухподрешеточные антиферромагнетики (АФМ) при нулевом значении внешнего магнитного поля.

В отличие от изотропной гейзенберговской модели в данном случае присутствует дополнительное взаимодействие, связанное с параметром ξ_{fm}. Это приводит к необходимости введения матричной функции Грина

$$\hat{K}(f\tau;\ m\tau') = \begin{pmatrix} K^{++}(f\tau;\ m\tau'), & K^{+-}(f\tau;\ m\tau') \\ K^{-+}(f\tau;\ m\tau'), & K^{--}(f\tau;\ m\tau') \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$K^{\alpha\beta}(f\tau;\ m\tau') = -\frac{1}{2}\left\langle T_\tau\ \tilde{S}_f^{\alpha}(\tau)\ \tilde{S}_m^{\beta}(\tau')\right\rangle, \quad (5)$$

где $(\alpha,\ \beta = +,\ -)$.

В (5) T_τ – оператор хронологического упорядочения по "временной" переменной τ $(0 \le \tau \le \delta)$, $\delta = 1/T$, (T – температура), а операторы записаны в "гейзенберговском" представлении:

$$\tilde{S}_f^{\alpha}(\tau) = e^{\tau H}\ S_f^{\alpha}\ e^{-\tau H}. \quad (6)$$

Из диаграммного представления для функции Грина получим точное представление для матричных компонент фурье-образа функции Грина

$$K^{++}(q,\ i\omega_n) = \frac{\left(1 - 2\xi_q T_{irr}^{--}\right) + 2\xi_q Q^+ Q^-}{\Delta(q,\ i\omega_n)},$$

$$K^{+-}(q,\ i\omega_n) = \frac{\left(L^+ + I_q T_{irr}^{--}\right)\Sigma^{--} + \left(i\omega_n + \varepsilon - Q^- I_q - \Sigma^{+-}\right)Q^+}{\Delta(q,\ i\omega_n)},$$

$$K^{-+}(q,\ i\omega_n) = \frac{\left(L^- + I_q T_{irr}^{--}\right)\Sigma^{--} + \left(-i\omega_n + \varepsilon - Q^+ I_q - \Sigma^{-+}\right)Q^-}{\Delta(q,\ i\omega_n)}, \quad (7)$$

---

[1] Сибирский федеральный университет, Красноярск.

[2] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики имени Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск.

[3] Сибирский государственный аэрокосмический университет, Красноярск.

$$K^{--}(q,\ i\omega_n) =$$
$$\frac{1}{\Delta(q,\ i\omega_n)}\Big\{\big(i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{+-}\big)\big(-i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{-+}\big) +$$
$$+\big(Q^+Q^- - T_{irr}^{--}\Sigma^{--}\big)\big(2\xi_q + \Sigma^{++}\big)\Big\} +$$
$$+\ L^+L^-\Sigma^{--} + L^+Q^-\big(-i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{-+}\big) +$$
$$L^-Q^+\big(i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{+-}\big)\Big\}.$$

Входящая в выражения (7) величина $\Delta(q,\ i\omega_n)$ определяется следующим образом:

$$\Delta(q,\ i\omega_n) = \big(1 - 2\xi_q T_{irr}^{--}\big)\Big\{\big(i\omega_n - \varepsilon + \Sigma^{-+}\big)\times$$
$$\times\big(i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{+-}\big) + \big(2\xi_q + \Sigma^{++}\big)\Sigma^{--}\Big\} +$$
$$+\Big[\big(L^+ + L^-\big)I_q + 2\xi_q L^+L^- + I_q^2T_{irr}^{--}\Big]\Sigma^{--} + \tag{8}$$
$$+\big(4\xi_q^2 - I_q^2 + 2\xi_q\Sigma^{++}\big)Q^+Q^- +$$
$$+\big(I_q + 2\xi_q L^-\big)\big(i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{+-}\big)Q^+ +$$
$$+\big(I_q + 2\xi_q L^+\big)\big(-i\omega_n + \varepsilon - \Sigma^{-+}\big)Q^-.$$

В (7), (8) для сокращения записи опущены аргументы q и $i\omega_n$, от которых зависят T_{irr}^{--}, $\Sigma^{\alpha\beta}$, $L^{\pm}$, $Q^{\pm}$ и введены обозначения

$$L^+ \equiv L(q,\ i\omega_n);\quad L^- \equiv L(-q,\ -i\omega_n);$$
$$Q^+ \equiv L(q,\ i\omega_n); Q^- \equiv L(-q,\ -i\omega_n).$$

Дисперсионное уравнение для спектра возбуждений получаем после аналитического продолжения на действительную ось с последующим приравниванием нулю полученного выражения:

$$\Delta(q,\ i\omega_n \to \omega + i\delta) = 0. \tag{9}$$

При проведении конкретных вычислений использовано однопетлевое приближение. После сопоставления диаграммному ряду аналитических выражений найдем спектр коллективных возбуждений:

$$E_k^2 = \left\{1 + \frac{2b_0'}{N}\sum_q \frac{\big(I_k - I_{k-q}^{\perp}\big)\big(I_q - I_{k-q}^{\perp}\big) - 4\xi_k\xi_q}{\big(1 - b_0'I_{k-q}^{\perp}/T\big)\big(E_k^2 - \omega_{0q}^2\big)}\right\}\omega_{0q}^2 +$$
$$+\ 2\Big[\varepsilon_{0q}\big(I_0^{\perp} - I_k\big) - 4b_0\xi_k^2\Big]\sigma^{(1)} + \frac{2}{N}\times$$
$$\times\sum_q \frac{\varepsilon_{0k}\Phi(q,k) + 4b_0\xi_k\xi_q\Big[H + b_0\big(I_0^{\perp} - I_{k-q}^{\perp}\big)\Big]}{\omega_{0q}}\times \tag{10}$$
$$\times\left(\frac{1}{2} + n_q\right) + \frac{2b_0'}{N}\sum_q \frac{\Phi(q,k)\Phi(k,q) + 4\xi_k\xi_q\big(\varepsilon_0 - b_0I_{k-q}^{\perp}\big)^2}{\big(1 - b_0'I_{k-q}^{\perp}/T\big)\big(E_k^2 - \omega_{0q}^2\big)},$$

где

$$\Phi(q,k) = \varepsilon_{0q}\big(I_q - I_{k-q}^{\perp}\big) + 4b_0\xi_q^2,$$
$$\varepsilon_{0q} = H + b_0\big(I_0 - I_q^{\perp}\big),$$
$$\varepsilon_0 = H + b_0I_0^{\perp},\quad \omega_{0q} = \sqrt{\varepsilon_{0q}^2 - 4b_0^2\xi_q^2}, \tag{11}$$
$$n_q = \big[\exp(\omega_{0q}/T) - 1\big]^{-1}.$$

При учете квантовых флуктуаций намагниченность подсистемы определяется выражением

$$\sigma = b_0 + \frac{1}{1 - b_0'I_0^{\perp}/T}\times$$
$$\times\left\{\frac{1}{2N}\sum_q \frac{\omega_{0q} - \varepsilon_{0q}}{\omega_{0q}} - \frac{1}{N}\sum_q\left(\frac{\varepsilon_{0q}}{\omega_{0q}}n_q - n_\varepsilon\right) + \right. \tag{12}$$
$$\left. + \frac{b_0'}{TN}\sum_q \frac{I_q\varepsilon_{0q} + 4b_0\xi_q^2}{\omega_{0q}}\left(\frac{1}{2} + n_q\right) + \frac{b_0''}{2TN}\sum_q \frac{I_q^2}{1 - b_0'I_0^{\perp}/T}\right\},$$

где $n_\varepsilon = \big[\exp(\varepsilon/T) - 1\big]^{-1}$.

Из (10) следует, что для легкоплоскостного ферромагнетика в области температур $0 \ge T \ge T_C$, когда между I_k, $I_k^{\perp}$ и ξ_k имеется связь (см. [2]) $I_k^{\perp} = I_k - 2\xi_k$, в нулевом внешнем магнитном поле $E_k \to 0$ при $k \to 0$. Используя выражение для спектра, нетрудно убедиться, что щель в спектре коллективных возбуждений обращается в нуль для легкоплоскостного АФМ. При этом следует учесть, что при описании АФМ через анизотропный ферромагнетик рассмотрение проводится в расширенной (по отношению к антиферромагнитному случаю) зоне Бриллюэна. Так, например, в нулевом приближении по r_0^{-3} спектр АФМ описывается формулой

$$\omega_q^0 = b_0\sqrt{\big(I_0^x - I_q^z + J_0^x - J_q^z\big)\big(I_0^x - I_q^x + J_0^x + J_q^x\big)}. \tag{13}$$

В первом порядке по r_0^{-3} спектр этого АФМ задается выражением (10), если под $I_q, I_q^{\perp}$ и ξ_q понимаются следующие комбинации исходных обменных интегралов:

$$I_q = \frac{1}{2}\big(I_q^z + I_q^x + J_q^z - J_q^x\big),\quad I_q^{\perp} = I_q^x + J_q^x,$$
$$\xi_q = \frac{1}{4}\big(I_q^z - I_q^x + J_q^z + J_q^x\big). \tag{14}$$

Для легкоосного АФМ получаем

$$\omega_q^0 = b_0\sqrt{\big(I_0^z - I_q^x + J_0^z - J_q^x\big)\big(I_0^z - I_q^x + J_0^z + J_q^z\big)}.. \tag{15}$$

Ренормированный спектр легкоосного АФМ описывается той же самой формулой, но при иных выражениях для параметров $I_q, I_q^{\perp}$ и ξ_q а именно

$$I_q = I_q^x,\quad I_q^{\perp} = I_q^z + J_q^z,\quad \xi_q = \frac{1}{2}J_q^x. \tag{16}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено развитие диаграммной техники для спиновых операторов (ДТСО) в применении к системам с нулевыми квантовыми колебаниями.

Анализ структуры диаграммного ряда позволил в явной форме получить представление для спиновой функции Грина через компоненты массового оператора, нормальных $Q(\vec{q};i\omega_n)$ и аномальных $L(\vec{q};i\omega_n)$ концевых множителей и неприводимой ни по Ларкину, ни по Дайсону части функции Грина $T_{irr}^{--}(\vec{q};i\omega_n)$.

В первом порядке по r_0^{-3} метода самосогласованного поля вычислен ренормированный спектр коллективных возбуждений квантового магнетика с развитыми нулевыми квантовыми колебаниями. Полученные выражения позволяют проанализировать влияние фрустрированных связей на физические характеристики квантового магнетика с сильными квантовыми флуктуациями.

В первом порядке по r_0^{-3} метода самосогласованного поля получена поправка для спонтанной намагниченности, обусловленная квантовыми флуктуациями и применимая в широком температурном интервале.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН "Квантовая физика конденсированных сред", ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Igarashi Jun-ichi, Watabe A.* // Phys.Rev. B. 1991. V. 43. P. 13456; V. 44. P. 5057.
2. *Вальков В.В., Валькова Т.А.* // Письма в ЖЭТФ. 1991. Т. 52. С. 1179.
3. *Вальков В.В., Валькова Т.А.* // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. С. 1881.
4. *Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А.* // ЖЭТФ, 1967. Т. 53. С. 281; 1089.
5. *Пикалев Э.М., Савченко М.А., Шойом Й.* // ЖЭТФ. 1968. Т. 55. С. 1404.
6. *Шойом Й.* // ЖЭТФ. 1968. Т. 55. С. 2355.
7. *Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А.* // ТМФ. 1983. Т. 56. С. 149.