

Сферически-симметричные подходы в теоретическом исследовании низкоразмерных магнетиков

А.Ф. Барабанов⁽¹⁾, В.Э. Валиулин, А.В. Михеенков, П.С. Савченков

Представлены основные идеи и некоторые важнейшие результаты сферически-симметричного самосогласованного подхода и ряда родственных теоретических алгоритмов. Эти методы позволяют исследовать низкоразмерные спиновые модели гейзенберговского типа, в том числе фрустрированные, при точном учёте теоретических (Мермина – Вагнера и Маршалла) ограничений, а также узельного спинового констрейнта. Таким образом, обходятся трудности, которые могут возникать при традиционном анализе низкоразмерных магнитных систем. Подход работает и в спин-псевдоспиновой модели, а также встраивается в более сложные конструкции при рассмотрении спиновых моделей со свободными носителями, таких как базовая и трёхзонная модели Хаббарда, $t-J$ и $s-d$ модели, решётка Кондо.

Ключевые слова: низкоразмерный магнетизм, мультиобменная модель Гейзенберга, фрустрация, сферически-симметричный подход

PACS numbers: 75.10.Jm, **74.72. – h**, 75.30.Kz, 75.50.Ee, 75.50.Gg, 75.70.Tj DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.06.039948>

Содержание

1. Введение (125).
2. Предварительные замечания (126).
 - 2.1. Размерность пространства. 2.2. Геометрия решётки.
 - 2.3. Величина спина.
3. Модель $J_1 - J_2 - J_3$, последовательность усложнения (127).
 - 3.1. Гамильтониан. 3.2. Последовательность усложнений.
4. Магнитный порядок в классическом пределе (128).
 - 4.1. Появление новых фаз с ростом числа обменов. 4.2. Особенности классической фазовой диаграммы. 4.3. О квантовой фазовой диаграмме.
5. Алгоритм сферически-симметричного самосогласованного подхода (129).
 - 5.1. Схема вычислений. 5.2. Случай $T = 0$. 5.3. Вершинные поправки.

6. Достоинства и недостатки сферически-симметричного самосогласованного подхода (131).
 7. Результаты для квадратной решётки (131).
 - 7.1. Модель J_1 . 7.2. Модель $J_1 - J_2$. 7.3. Модель $J_1 - J_2 - J_3$.
 8. Связь с другими сферически-симметричными подходами (138).
 - 8.1. Матричный проекционный метод. 8.2. Метод непрерывной дроби и другие.
 9. "Тонкая настройка" вычислений (140).
 10. Сферически-симметричный самосогласованный подход и квантовая запутанность (141).
 11. Модели с допированием и спиновый полярон (143).
 12. Переход в 3D (144).
 13. Влияние анизотропии (144).
 - 13.1. Магнитное поле. 13.2. Одноионная анизотропия. 13.3. Экзотические анизотропии: тетрагональная решётка и компас-модель.
 14. Заключение (145).
 15. Приложение. Функция Грина и спектр в сферически-симметричном самосогласованном подходе (146).
- Список литературы (146).

А.Ф. Барабанов⁽¹⁾, В.Э. Валиулин^(1,2),
А.В. Михеенков^(1,2,*), П.С. Савченков^(3,4)

⁽¹⁾ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Калужское шоссе 14, 108840 Троицк, Москва, Российская Федерация

⁽²⁾ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер. 9, 141701 Долгопрудный, Московская обл., Российская Федерация

⁽³⁾ Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова 1, 123182 Москва, Российская Федерация

⁽⁴⁾ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Каширское шоссе 31, 115409 Москва, Российская Федерация
E-mail: (*) mikheen@bk.ru

Статья поступила 11 апреля 2025 г.,
после доработки 8 июня 2025 г.

1. Введение

В низкоразмерных системах, в том числе магнитных, роль квантовых флуктуаций оказывается существенной. Дополнительным дезорганизующим фактором служит фрустрация. Фрустрация в соединениях с локализованными магнитными моментами может приводить к интересным и зачастую интуитивно не очевидным эффектам. Это, например, образование нетривиальной спиновой конфигурации или потеря спинового упорядочения даже при нулевой температуре. Как и роль квантовых флуктуаций, эффекты фрустрации особенно сильны в низкоразмерных, в частности двумерных, системах.

Описание подобного рода эффектов в рамках традиционных методов теории магнетизма может оказаться затруднительным. Это побуждает искать альтернативные алгоритмы. Один из них — сферически-симметричный самосогласованный подход, СССРП (англоязычная нотация Rotation-invariant Green's function Method, RGM).

Идея СССРП была предложена ещё полвека назад в пионерской работе Кондо и Ямадзи [1], тогда для 1D модели Гейзенберга. Идея чрезвычайно простая — в цепочке уравнений для двухвременных запаздывающих спин-спиновых функций Грина производить замыкание не на первом шаге (как это традиционно делается [2]), а на втором. Такая схема позволяет описывать спиновое состояние не через средний спин, который теперь может быть нулевым, а через спин-спиновые корреляторы¹.

Следующий импульс к развитию возник после появления ВТСП купратов — в почти одновременно вышедших статьях [4] и [5] метод Кондо-Ямадзи был распространён на актуальную для купратов двумерную квадратную гейзенберговскую решётку. Практически сразу же появился вариант для фрустрированной, с обменими на первых и вторых соседях, решётки [6, 7].

В дальнейшем СССРП неоднократно модифицировался и дополнялся, а также был перенесён на более сложные модели. Поначалу, разумеется, всё это делалось под флагом поиска теории ВТСП. Позднее такое самоограничение было снято, и сейчас данную область исследований можно считать вполне самостоятельной и сформировавшейся.

Ниже излагаются основные идеи и некоторые важнейшие результаты СССРП, главным образом на примере двумерной квадратной решётки.

2. Предварительные замечания

2.1. Размерность пространства

2.1.1. 3D и 1D. СССРП разумно описывает парамагнитное состояние магнитной системы (средний спин на узле равен нулю, $\langle \hat{S}_i \rangle = 0$) с сильными спин-спиновыми корреляциями. То есть он, например, применим в трёхмерном случае при температурах несколько выше температуры Кюри или Нееля, разумеется, вне флуктуационной области².

В противоположном — одномерном — пределе применение СССРП лишено смысла в силу наличия точного решения. Но уже для фрустрированных или так называемых декорированных одномерных систем, для нескольких слабо связанных цепочек, где точного решения нет, СССРП может быть использован [8–12]. То же самое касается и нескольких слабо связанных плоскостей [13–15].

2.1.2. 2D. Естественной областью применения СССРП является чисто двумерная ситуация. Здесь традиционно существуют две линии исследований: "линия точных теорем" и "линия слабой трёхмерности".

В первом случае базовый тезис такой: теорема Мермина – Вагнера [16] в 2D запрещает при $T > 0$ спонтанное нарушение симметрии, т.е. привычная картина магнетика со средним спином $\langle \hat{S}_i \rangle \neq 0$, направленным либо в одну, либо в чередующиеся стороны, неадекватна. К тому же теорема Маршалла [17] требует для АФМ фазы синглетного основного состояния. Соответственно, применимые в 3D стандартные аналитические методы должны быть изменены, чтобы учесть эти обстоятельства.

Вторая схема исходит из тезиса: "строго двумерных систем не существует". Слабая трёхмерность есть всегда, что автоматически отбрасывает 2D-ограничения. В худшем случае приходится иметь дело не с дальним порядком, а с экспоненциально большой корреляционной длиной. На теорему же Маршалла, верную только при нулевой температуре, можно вообще не обращать внимания. Поэтому видоизменить стандартные методы надо только в той степени, которую требует конкретная геометрия (число ближайших соседей, наполнение координационных сфер и т.п.).

Спор этих двух концепций, бывший довольно ярким на волне раннего бума ВТСП, в дальнейшем затих, и сейчас они мирно сосуществуют. Часть базовых свойств магнитной 2D системы, вычисленных в рамках той либо другой концепции, качественно и полуколичественно совпадают. Хотя имеются и существенные различия. Анализ таких различий занял бы слишком много места и не является целью настоящей работы.

Сферически-симметричный самосогласованный подход относится к первой ветви. В этом подходе состояние магнитной системы — при любом количестве и любых знаках обменных взаимодействий, при любой температуре $T \geq 0$ — является синглетным, все узлы равноправны, средний спин на узле равен нулю $\langle \hat{S}_i \rangle = 0$, а спиновый порядок, дальний или ближний, описывается спин-спиновыми корреляторами.

Таким образом, в СССРП ни одна из исходных симметрий — спиновая и решёточная — не нарушена.

2.2. Геометрия решётки

Итак, естественной областью применения СССРП является 2D спиновая решётка. Следующий вопрос — конкретная геометрия этой решётки.

Здесь особое место занимают решётки с геометрической фрустрацией, т.е. такие, в которых невозможен АФМ шахматный порядок (треугольная решётка, решётка Кагоме, в 3D это решётки пирохлора и гипер-Кагоме...). В такого рода системах неизбежно возникает понятие киральности (различия правого и левого) и множество других ярких эффектов, вплоть до скирмионов. Исследования в данной области чрезвычайно многочисленны и очень интересны (см., например, обзоры [18–20] и приведённые там ссылки). Здесь СССРП зарекомендовал себя как вполне эффективный метод (треугольная решётка [21–26], решётка Кагоме, в том числе квазитрёхмерная [13, 27–29], шестиугольная, в том числе квазитрёхмерная [30, 31], решётка пирохлора [32, 33]).

Сосредоточимся, однако, мы на другом случае — квадратной решётки (забегая вперёд, фрустрация здесь тоже возникает, но по другой причине). Экспериментально исследованные соединения со слабо связанными квадратными (или сводящимися к квадратным через суперобмен) магнитными плоскостями многочисленны. Наиболее известные и лучше всего изученные — это

¹ Идея выделения спин-спиновых корреляторов из функции Грина была предложена в [3] задолго до Кондо и Ямадзи, но там это происходило на первом шаге после алгебраических манипуляций.

² Фактически СССРП в 3D работает в широком температурном диапазоне, подробнее об этом см. в разделе 12.

ВТСП купраты, но, повторимся, они далеко не единственные.

Что касается решёток с геометрической фрустрацией, эта область заслуживает отдельного рассмотрения, и даже краткий её анализ увеличил бы объём настоящего обзора до недопустимого уровня.

2.3. Величина спина

Таким образом, ниже рассматривается применение ВТСП на примере 2D квадратной спиновой решётки. Последнее предварительное замечание касается величины спина.

В принципе, метод работает при любых спинах (см., например, [29, 32, 34, 35]). Однако, как можно показать, для наиболее интересного АФМ случая вычисления в рамках СССП для спина $S > 1$ приводят к следующему: щель в спектре спиновых возбуждений в антиферромагнитной точке зоны Бриллюэна $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ экспоненциально мала вплоть до температур порядка обменного взаимодействия. Соответственно, корреляционная длина экспоненциально велика. Хотя состояние системы в СССП в этом случае остаётся синглетным, но все вычисляемые величины: спектр спиновых возбуждений, структурный фактор, магнитная восприимчивость — почти не отличаются от полученных в стандартном спин-волновом подходе или близких к нему. Таким образом, для больших спинов СССП представляется хотя и возможным, но избыточным.

Случай $S = 1$ — промежуточный, и он также исследуется в рамках СССП для разных решёток [24–26, 29, 32, 35, 36] (в некоторых решётках анализируется и случай произвольного спина [29, 32]). Но подавляющее большинство работ рассматривают $S = 1/2$, где различия между результатами СССП и спин-волнового подхода (или близких к нему) нередко оказываются существенными.

3. Модель $J_1 - J_2 - J_3$, последовательность усложнения

3.1. Гамильтониан

Итак, рассматривается двумерная квадратная решётка, в каждом узле которой закреплён спин $S = 1/2$ (исключения будут в разделах 10–12).

Гамильтониан имеет стандартный гейзенберговский вид, исследуются три случая: взаимодействие только ближайших соседей, ближайших и следующих за ближайшими соседями на третьей координационной сфере (рис. 1а). Итак, гамильтониан имеет вид:

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

Здесь $\langle i, j \rangle$ обозначает суммирование по парам (связям) ближайших соседних узлов, $[i, j]$ — по парам вторых соседей, $\{i, j\}$ — по парам третьих соседей; как уже сказано, $(\hat{S}_i)^2 = 3/4$.

3.2. Последовательность усложнений

Выбор модели с тремя обменами не случаен. На каждом следующем шаге усложнения модели возникают качественно новые эффекты. Забегая вперёд, опишем их кратко (детали и ссылки будут представлены в разделах 7.1–7.3).

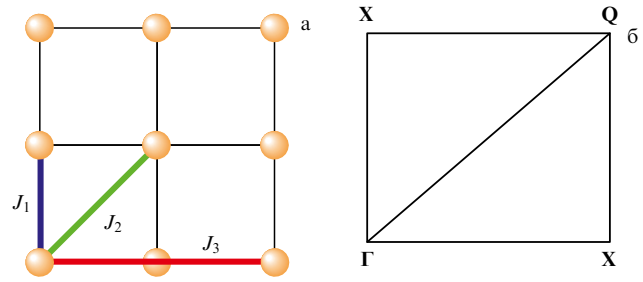


Рис. 1. (а) Первые, вторые и третьи ближайшие соседи для 2D квадратной решётки и соответствующие обменные параметры. (б) Стандартные обозначения симметричных точек в зоне Бриллюэна квадратной решётки. $\Gamma = (0, 0)$ — нулевая (ФМ) точка, $X = (0, \pi)$, $(\pi, 0)$ — страйп-точки, $Q = (\pi, \pi)$ — АФМ-точка. Показана четверть полной зоны.

Модель J_1 . Описание двумерного антиферро- и ферромагнетика в точном соответствии с теоремами Маршалла [17] и Мермина – Вагнера [16]. Состояние системы при $T \geq 0$ является синглетным с нулевым средним спином на узле. В спиновом пространстве спонтанного нарушения симметрии нет. В прямом пространстве сохраняются трансляционная инвариантность и симметрия решётки.

При $T = 0$ возникает дальний порядок: модуль спин-спиновой коррелятора на бесконечности $\langle \hat{S}_0 \hat{S}_R \rangle (R \rightarrow \infty)$ выходит на ненулевую асимптотику, знак коррелятора для ФМ случая постоянен, для АФМ чередуется в шахматном порядке.

Условие спинового констрейнта $\langle \hat{S}_i^2 \rangle = 3/4$ соблюдается на каждом узле точно³. Заметим, что в стандартном спин-волновом подходе и близких к нему на необходимость соблюдения этого условия обычно просто не обращают внимания, в некоторых других подходах, например в методе вспомогательных бозонов [37], констрейнт выполняется лишь в среднем по всей системе.

Модель $J_1 - J_2$. Всё сказанное выше выполняется. При $T = 0$ реализуются уже три фазы с дальним порядком: АФМ, ФМ и полосатая страйп-фаза — а также две неупорядоченные фазы спиновой жидкости. Потеря дальнего порядка при переходе в спиновую жидкость — канонический пример квантового фазового перехода [38]. При $T > 0$ и любых J_1 и J_2 дальнего порядка нет, ближний порядок эволюционирует в соответствии со структурой нультемпературной фазы.

Модель $J_1 - J_2 - J_3$. В дополнение к перечисленным выше появляются три различные фазы спиновых спиралей. Существенно, что спирали возникают без взаимодействия Дзялошинского – Моррии ([39–42], см. также недавний обзор [43]).

Кроме того, в определённом диапазоне параметров реализуется состояние с двумя взаимопроникающими дальними порядками.

И, наконец, для модели с числом обменов больше трёх трудно представить её физическую реализацию. Для трёх предыдущих случаев такие реализации существуют.

Подчеркнём ещё раз, что различные фазы и, соответственно, фазовые переходы между ними в СССП возни-

³ Эта двуязычная конструкция (constraint — ограничение), в СССП фактически стала общеупотребимым термином.

кают только при $T = 0$. При $T > 0$ состояние системы всегда является парамагнитным — с сильными корреляциями, структура которых зависит от параметров обмена.

И отметим в качестве примечания, что в треугольной решётке, несмотря на совершенно иную геометрию, возникающие с ростом числа обменов эффекты качественно аналогичны. При $T = 0$ с добавлением J_2 появляются новые структуры дальнего порядка, а также неупорядоченные области, при $T > 0$ увеличивается количество разных структур ближнего порядка. Третий обмен J_3 порождает несоизмеримые геликоидальные структуры [24–26].

4. Магнитный порядок в классическом пределе

4.1. Появление новых фаз с ростом числа обменов

Прежде чем перейти к ультраквантовому пределу $S = 1/2$, естественно рассмотреть противоположный, классический предел $S \gg 1$.

В этом пределе на 2D квадратной решётке любой дальний порядок — соизмеримый или несоизмеримый — описывается стандартным анзацем (плоской спиралью) [44, 45]

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

где $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ — лежащие в плоскости ортогональные орты (длина спина здесь нормирована на единицу), $\mathbf{r}$ — радиус-вектор узла решётки. Точку $\mathbf{q}_0$ в зоне Бриллюэна — именно она определяет магнитный порядок — иногда называют управляющей точкой. Четверть зоны Бриллюэна квадратной решётки с принятыми обозначениями симметричных точек показана на рис. 1б.

При заданных значениях обменных параметров J_1, J_2, J_3 спиновая структура находится подстановкой (2) в (1), где вместо спиновых операторов стоят классические вектора единичной длины, и минимизацией классической энергии по положению управляющей точки $\mathbf{q}_0$.

Для модели J_1 при единичной нормировке обменного параметра $|J_1| = 1$ множество значений обменного пара-

метра представляет собой две точки $J_1 = \pm 1$. Подстановка (2) даёт тривиальный результат: для $J_1 > 0$ реализуется АФМ фаза (управляющая точка $\mathbf{q}_0 = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$)⁴, для $J_1 < 0$ реализуется ФМ фаза (управляющая точка $\mathbf{q}_0 = \mathbf{\Gamma} = (0, 0)$).

Для модели $J_1 - J_2$ естественно использовать параметризацию

$$J_1 = \cos \varphi, \quad J_2 = \sin \varphi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad \sqrt{J_1^2 + J_2^2} = 1. \quad (3)$$

Тогда множество значений обменных параметров представляет собой окружность единичного радиуса. Подстановка (2) приводит к чуть более сложным уравнениям, решение которых показывает, что, наряду с АФМ и ФМ фазами, появляется полосатая (страйп) фаза. Она представляет собой чередование полос со спином вверх и спином вниз. Это состояние дважды вырождено в соответствии с двумя возможными направлениями полос. Управляющие точки для страйп-фазы $\mathbf{q}_0 = \mathbf{X} = (0, \pi), (\pi, 0)$. Области существования трёх фаз показаны на рис. 2а.

Теперь модель $J_1 - J_2 - J_3$. Здесь удобна "сферическая" параметризация⁵

$$J_1 = \cos(\psi) \cos(\varphi), \quad J_2 = \cos(\psi) \sin(\varphi), \quad J_3 = \sin(\psi), \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad -\pi/2 \leq \psi \leq \pi/2, \quad \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + J_3^2} = 1. \quad (4)$$

Множество значений обменных параметров представляет собой сферу единичного радиуса.

Подстановка (2) генерирует довольно громоздкие уравнения, решение которых приводит к появлению ещё трёх фаз. Ниже приведены все возможные положения управляющей точки и соответствующие им значения

⁴ Иногда в литературе для этой точки используется обозначение $\mathbf{M}$.
⁵ При исследовании локальных участков области параметров нередко бывают удобны параметризации, отличные от (3) и (4). Однако в полных областях обменов (3) и (4) представляются наиболее адекватными.

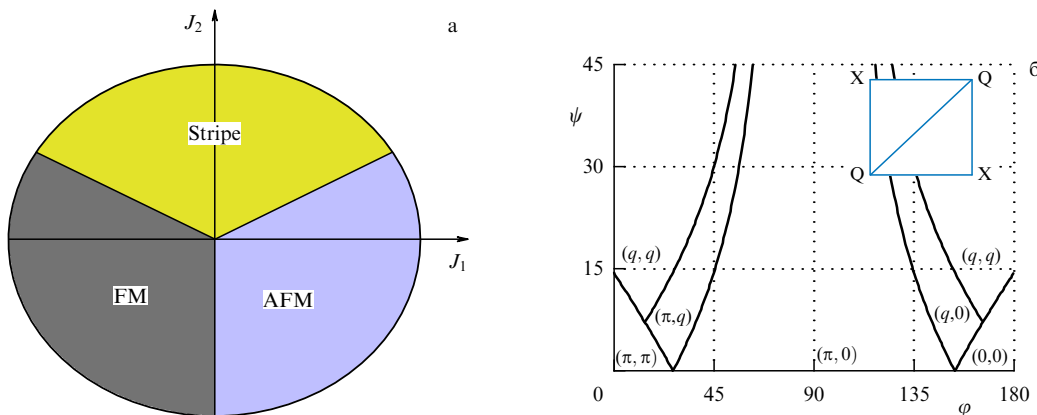


Рис. 2. (а) Фазовая диаграмма $J_1 - J_2$ круга для квадратной решётки в классическом пределе. Реализуются АФМ, страйп и ФМ фазы. Переходы в страйп фазу происходят при $0 < J_2 = \pm J_1/2$. (б) Плоская развёртка части фазовой диаграммы классической $J_1 - J_2 - J_3$ сферы, $0 \leq \varphi \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq \pi/2$. Показаны положения управляющих точек. На вставке — четверть зоны Бриллюэна.

классической энергии.

$\mathbf{q}_0$	$E(\mathbf{q}_0)$
1 (0, 0)	$4(J_1 + J_2 + J_3)$
2 (π, π)	$-4(J_1 - J_2 - J_3)$
3 $(0, \pi), (\pi, 0)$	$-4(J_2 - J_3)$
4 $(0, q_1), (q_1, 0)$	$2J_1 - \frac{(J_1 + 2J_2)^2}{4J_3}$
5 $(\pi, q_2), (q_2, \pi)$	$-2J_1 - \frac{(J_1 - 2J_2)^2}{4J_3}$
6 (q_3, q_3)	$-4J_3 - \frac{J_1^2}{J_2 + 2J_3}$

где использованы обозначения:

$$\begin{aligned} q_1 &= \arccos\left(-\frac{J_1 + 2J_2}{4J_3}\right), \quad q_2 = \arccos\left(-\frac{J_1 - 2J_2}{4J_3}\right), \\ q_3 &= \arccos\left(-\frac{J_1}{2J_2 + 4J_3}\right). \end{aligned} \quad (6)$$

В выражениях (5) первые три фазы (в левом столбце) — уже упоминавшиеся ФМ, АФМ и страйп структуры. Фазы 4–6 (в правом столбце) — это спиновые спирали (геликоидальные фазы), спины поворачиваются от узла к узлу, причём период спиновой структуры не обязательно соизмерим с периодом решётки.

На рисунке 2б показана плоская развертка наиболее интересной четверти полной сферы — фазовой диаграммы $0 \leq \varphi \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq \pi/2$, т.е. $1 \geq J_1 \geq -1$, $0 \leq J_2 \leq 1$, $0 \leq J_3 \leq 1$ (углы показаны в градусах⁶). Сюда попадают все известные авторам данные экспериментов по квазидвумерным соединениям.

4.2. Особенности классической фазовой диаграммы

Обращают на себя внимание следующие особенности фазовой диаграммы.

1. Для ФМ, АФМ и страйп фаз управляющая точка неподвижна во всей области существования соответствующей фазы и скачком меняет положение при переходе в другую фазу. Для геликоидов же при изменении параметров обмена точка $\mathbf{q}_0$ движется по симметричным линиям зоны Бриллюэна в соответствии с (6). Для геликоидов №№ 4–5 из выражений (5) это движение по сторонам зоны Бриллюэна, для геликоида № 6 — по диагонали. Таким образом, геликоиды с меняющимся шагом осуществляют непрерывный переход между симметричными точками.

Подчеркнём, что, как упомянуто выше, в модели $J_1 - J_2 - J_3$ спиновые спирали возникают уже в классическом пределе, без нарушения симметрии относительно инверсии и без привлечения взаимодействия Дзялошинского–Мории.

2. Полную область обменных параметров можно разделить на фрустрированную и нефрустрированную части. В нефрустрированной части все обмены работают в одну сторону, все связи насыщены полностью. Простейший случай: $J_1, J_2, J_3 < 0$, когда все три обмена благоприятствуют ФМ фазе. Ещё пример: $J_1 > 0$, $J_2 < 0$, $J_3 > 0$, насыщены все связи в АФМ конфигурации.

В литературе обсуждается вопрос о видах и мере фрустрации [45] и (в квантовом случае) о её связи с запутанностью [46–48], но мы не имеем возможности отклоняться в эту сторону.

Показанная на рис. 2б четверть полной фазовой диаграммы максимально фрустрирована — в том смысле, что если хотя бы два обмена ненулевые, то все связи в гамильтониане (1) не могут быть насыщены одновременно. В остальных трёх четвертях это неверно по отношению по крайней мере к одной из связей. Именно фрустрация приводит к появлению между АФМ и ФМ фазами промежуточной страйп-фазы, а при $J_3 > 0$ — ещё и геликоидов. В квантовом случае последствия фрустрации ещё богаче (см. ниже).

3. Можно обсуждать вопрос об экспериментальной реализуемости или принципиальной нереализуемости конкретных состояний. Ясно, например, что случай $J_3 \gg J_1, J_2$ вряд ли когда-либо будет найден на эксперименте. В этом смысле важно, что некоторые геликоиды возникают уже при малых J_3 . В целом же на поставленный вопрос не представляется возможным ответить корректно.

4.3. О квантовой фазовой диаграмме

Итак, в классическом пределе в модели $J_1 - J_2 - J_3$ возможны шесть спиновых конфигураций: ФМ, АФМ, страйп и три различных спирали.

В рамках СССП в ультраквантовом пределе $S = 1/2$ при $T = 0$ ситуация качественно аналогична — возможны все эти фазы с дальним порядком (хотя сам дальний порядок описывается не средним узельным спином, а спин-спиновыми корреляторами). Однако даже при $T = 0$ возможны и состояния без дальнего порядка (спиновая жидкость). На фазовой диаграмме они возникают между фазами с дальним порядком при наличии фрустрации.

При $T \neq 0$ дальний порядок невозможен, ближний порядок при изменении параметров обмена эволюционирует в соответствии со структурой нультемпературных фаз. Детальное описание см. ниже, в разделе 7.

5. Алгоритм сферически-симметричного самосогласованного подхода

5.1. Схема вычислений

Вернёмся к гамильтониану (1). Первичной вычисляемой величиной в СССП является двухвременная запаздывающая узельная спин-спиновая функция Грина [49]

$$G_{\mathbf{nm}}^{zz} = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^\infty dt \exp(i\omega t) \langle [S_{\mathbf{n}}^z(t), S_{\mathbf{m}}^z] \rangle. \quad (7)$$

Поскольку рассматривается сферически-симметричное состояние, то отличны от нуля (и равны друг другу) только диагональные по $\alpha = x, y, z$ функции Грина $G^{zz} = G^{xx} = G^{yy}$, имеются три вырожденные по α ветви спиновых возбуждений, средний спин на узле равен нулю $\langle S_{\mathbf{n}}^z \rangle = 0$.

Основная идея алгоритма СССП — замыкание цепочки уравнений движения для функции Грина (7) на втором шаге. Первое уравнение движения в частотном представлении имеет вид

$$\omega G_{\mathbf{nm}}^{zz} = \langle [S_{\mathbf{n}}^z, S_{\mathbf{m}}^z] \rangle + \langle [S_{\mathbf{n}}^z, \hat{H}] | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega+i\delta}. \quad (8)$$

⁶ Параметрические углы показаны в градусах, чтобы в дальнейшем избежать путаницы с координатами — в радианах — в зоне Бриллюэна.

Поскольку $\langle [S_n^z, S_m^z] \rangle = 0$, замыкание по традиционной тьябликовской схеме на первом шаге [2], с извлечением среднего спина из двухузельной функции Грина, невозможно⁷.

Ненулевой член в правой части (8) представляет собой сумму нескольких двухузельных функций Грина. Не раскрывая пока конкретного вида, запишем для него уравнение движения.

$$\omega \langle [S_n^z, \hat{H}] | S_m^z \rangle_{\omega+i\delta} = \langle [[S_n^z, \hat{H}], S_m^z] \rangle + \langle [[S_n^z, \hat{H}], \hat{H}] | S_m^z \rangle_{\omega+i\delta}. \quad (9)$$

Здесь справа первый член уже ненулевой, а второй член представляет собой сумму различных трёхузельных функций Грина. Из них извлекаются спин-спиновые корреляторы с замыканием на исходную функцию Грина (7) (подробнее см. ниже (16)). При вычислениях принимаются во внимание следующие из сферической симметрии соотношения $\langle S_n^x S_{n+r}^x \rangle = \langle S_n^y S_{n+r}^y \rangle = \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle = c_r = c_{|r|}$, где c_r — спин-спиновый коррелятор⁸ на длине r .

После преобразования Фурье

$$S_q^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) S_r^z \quad (10)$$

решение системы уравнений (8)–(9) даёт окончательное выражение для функции (7).

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle_\omega = -\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_q}{\omega^2 - \omega_q^2} \quad (11)$$

(здесь и далее второй индекс z у функции Грина опущен, $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ — восприимчивость).

Конечные выражения для числителя F_q и спектра спиновых возбуждений ω_q^2 зависят от геометрии решётки и вида гамильтониана. Но в любом случае они содержат спин-спиновые корреляторы на нескольких первых координационных сферах. Из простых геометрических соображений понятно, что для квадратной решётки в модели J_1 таких координационных сфер три, для $J_1 - J_2$ их пять и для модели $J_1 - J_2 - J_3$ затронуты восемь координационных сфер. Громоздкие выражения для F_q и ω_q^2 в наиболее общем случае приведены в разделе 15.

Сами эти корреляторы стандартным образом выражаются через $G^z(\mathbf{q}, \omega)$

$$c_r = \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_q c_q \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (12)$$

$$c_q = \langle S_q^z S_{-q}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega (2m(\omega) + 1) \text{Im } G^z(\mathbf{q}, \omega), \quad (13)$$

где $m(\omega)$ — функция Бозе при данной температуре. Напомним, что бозе-функция автоматически возникает в уравнениях для коммутаторной функции Грина, что само по себе ещё не означает наличия бозеподобных возбуждений.

⁷ Вместо $\langle S_n^z | S_m^z \rangle$ можно рассматривать и обычную для спиновых задач функцию Грина $\langle S_n^+ | S_m^- \rangle$, тогда требование зануления первого слагаемого в правой части (8) $\langle [S^+, S^-] \rangle = 2\langle S^z \rangle$ накладывается директивно.

⁸ Во избежание недоразумений уточним, что сферическая симметричность — в спиновом пространстве, в прямом пространстве геометрия может быть самой разной.

Сюда же входит и внутриузельный коррелятор $c_r = 0$ — это условие спинового констрейнта $c_r = 0 = \langle S_n^z S_n^z \rangle = 1/4$.

Полученная система самосогласованных уравнений далее решается численно. Отметим, что необходимые для этого вычислительные ресурсы несопоставимо меньше тех, что нужны для изначально численного решения задачи из первых принципов даже для малого фрагмента решётки.

Необходимое пояснение во избежание недоразумений. В СССР при любой температуре, любом количестве и любых знаках обменов (в том числе для ФМ) состояние системы является сферически-симметричным, синглетным. Строго говоря, математически безупречного доказательства синглетности в СССР нет, поскольку состояние конструктивно не строится. Однако для иного состояния трудно ожидать выполнения условий равенства корреляторов вдоль трёх осей, приведённого после формулы (9).

5.2. Случай $T = 0$

В СССР случай нулевой температуры требует отдельного рассмотрения. Продемонстрируем его на примере АФМ-фазы (детали различаются для разных фаз).

При $T = 0$ в системе возникает дальний порядок. Математически причина в том, что при $T \rightarrow 0$ в структурном факторе c_q (13) возникает δ -образный пик в соответствующей симметричной точке зоны Бриллюэна, в данном случае в АФМ точке $\mathbf{Q}$. В правой стороне выражения (13) вклада без бозевской функции не хватает, чтобы обеспечить условие констрейнта. Коррелятор c_r по необходимости принимает вид

$$c_r = \frac{1}{N} \sum_q c_q \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + c_{\text{cond}}^{\text{afm}} \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}). \quad (14)$$

Здесь $c_{\text{cond}}^{\text{afm}}$ — модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности (принят термин спиновый конденсат), сам коррелятор меняет знак в шахматной порядке

$$\langle S_0^\alpha S_{\mathbf{r} \rightarrow \infty}^{\text{afm}} \rangle = c_{\text{cond}}^{\text{afm}} (-1)^{n_x + n_y}, \quad \alpha = x, y, z, \quad \mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y. \quad (15)$$

В остальном схема вычислений остаётся прежней, $c_{\text{cond}}^{\text{afm}}$ становится ещё одним параметром самосогласования.

Приведённые выше рассуждения могут показаться недостаточно строгими. Более аккуратное обоснование можно найти, например, в [50].

Вообще говоря, детальное рассмотрение случая $T = 0$ нужно главным образом для полноты, чтобы продемонстрировать, что метод работает и при нулевой температуре, где происходит "бозе-конденсация спиновых возбуждений". Или для решения отдельных задач, например, о квантовом фазовом переходе. Почти все существенные выводы, в том числе о границах фаз с дальним порядком, можно получить экстраполяцией низкотемпературных результатов. Поэтому ниже мы иногда не будем отвлекаться на случай нулевой температуры.

5.3. Вершинные поправки

В СССР начиная с пионерских работ [1, 4–7] вводятся так называемые вершинные поправки (к диаграммной технике термин прямого отношения не имеет). Введение

поправки сводится к перенормировке спин-спинового коррелятора при выделении его из трёхузельной функции Грина.

$$\langle S_{\mathbf{I}}^z S_{\mathbf{I}+\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{n}}^z | \dots \rangle \rightarrow \alpha_r \langle S_{\mathbf{I}}^z S_{\mathbf{I}+\mathbf{r}}^z \rangle \langle S_{\mathbf{n}}^z | \dots \rangle = \alpha_r c_r \langle S_{\mathbf{n}}^z | \dots \rangle = \tilde{c}_r \langle S_{\mathbf{n}}^z | \dots \rangle. \quad (16)$$

И во всех выражениях, где возникает подобное выделение, используются уже перенормированные корреляторы $\tilde{c}_r$ (детали можно найти в цитированной выше литературе).

Вершинные поправки зависят от решёточного вектора r , и, в принципе, каждой координационной сфере может соответствовать своя α_r (три, пять или восемь соответственно для моделей J_1 , $J_1 - J_2$ и $J_1 - J_2 - J_3$). Простейший одновершинный вариант (все вершины совпадают) достаточен для удовлетворения условия констрейнта, и уже в этом случае воспроизводятся все основные результаты.

Более сложные настройки осуществляются исходя из разного рода разумных физических соображений, детали можно найти в упомянутых работах. С ростом температуры все поправки $\alpha \rightarrow 1$. При низких температурах в большинстве работ вершинные поправки не уходят далеко от единицы, $\alpha \leq 1,5$.

Наличие вершинных поправок следует иметь в виду при сравнении результатов разных работ. В одной и той же модели одни и те же вычисляемые величины качественно и полуколичественно всегда совпадают, но строго количественно — вследствие разного выбора вершин — могут слегка различаться.

6. Достоинства и недостатки сферически-симметричного самосогласованного подхода

В предыдущих разделах описан сферически-симметричный самосогласованный подход (СССП) для двухвременных запаздывающих спиновых функций Грина, главной областью применения которого являются низкоразмерные магнитные системы. Перечислим теперь основные достоинства и недостатки СССП. Начнём с недостатков.

Недостатки.

1. При некоторой изощрённости и громоздкости СССП — это всё-таки среднестатистический подход. Определить затухание спиновых возбуждений в рамках его базовой версии невозможно. Сдвинуться в данном направлении можно только с помощью полуфеноменологических перенормировок или иных усложнений.

2. СССП — метод с неконтролируемой точностью. И хотя нередко ошибку можно оценить с помощью разного рода побочных соображений, "внутрь" метода эта оценка не встроена. Малога параметра, как правило, нет (впрочем, для магнитных задач такая ситуация обычна).

3. В методе имеется настроечный параметр (вершинная поправка), иногда несколько.

4. Конструктивно исследуемое состояние не строится, оно лишь описывается через функцию Грина, спиновые корреляторы, структурный фактор и спектр возбуждений. Хотя, строго говоря, вряд ли это можно считать существенным недостатком.

5. Локальный недостаток — в области спиновой жидкости (в общем случае их несколько, но лучше исследована расположенная между АФМ- и страйп-фазами (см.

рис. 3)). Методы, основанные на резонансных валентных связях (RVB), в зависимости от параметров обмена детектируют здесь несколько структур, различающихся высшими корреляторами (см. например, обзоры [19, 51] и приведённые там ссылки). Для СССП же это одна фаза без дальнего порядка с эволюционирующим ближним порядком.

Достоинства.

1. В СССП соблюдаются теоремы Мермина–Вагнера и Маршалла, а также точный спиновый констрейнт на каждом узле.

2. При $T = 0$ метод позволяет анализировать состояния как с дальним порядком, так и без него.

3. В широком температурном диапазоне $T > 0$ в едином подходе воспроизводятся все возможные в системе структуры ближнего порядка.

4. СССП позволяет вычислить: спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$, динамическую восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega, T)$, структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$, энергию и, соответственно, теплоёмкость. Существенно, что никаких изначальных предположений о виде спектра спиновых возбуждений не делается, спектр определяется в результате самосогласования.

5. Метод может быть встроен в более сложные конструкции при рассмотрении спиновых моделей со свободными носителями, таких как базовая и трёхзонная модели Хаббарда, $t - J$ и $s - d$ модели, решётка Кондо (см. раздел 11 и ссылки в нём).

6. На многих локальных участках фазовой диаграммы результаты СССП согласуются с численными данными (см. раздел 7.2.3 и ссылки в нём).

7. Результаты для квадратной решётки

Выше были описаны базовые идеи и стандартный алгоритм вычислений СССП на примере двумерной квадратной решётки. В этом разделе демонстрируются основные результаты СССП для трёх вариантов модели Гейзенберга на квадратной решётке — J_1 , $J_1 - J_2$ и $J_1 - J_2 - J_3$ (везде подразумевается спин $S = 1/2$).

Представлены будут главным образом результаты, касающиеся спиновой структуры: структурный фактор, ближний и дальний магнитный порядок, спектр спиновых возбуждений и эволюция всех этих величин с изменением температуры и параметров обмена.

Намагниченность, магнитная восприимчивость, теплоёмкость будут упоминаться лишь в той степени, которая необходима для демонстрации возможности метода. Аналитически достижимые пределы или, наоборот, фитинг численных данных простыми функциональными зависимостями здесь систематизированы не будут. Всё это представлено в цитированной литературе, однако аккуратный анализ перечисленного увёл бы далеко в сторону от предмета настоящего обзора и занял бы непозволительно много места.

7.1. Модель J_1

Важнейший результат СССП для модели с обменом только ближайших соседей [4, 5] — сама возможность синглетного описания спиновой структуры как в ФМ, так и в АФМ случае при температурах $T \geq 0$. В обоих вариантах на каждом узле средний спин равен нулю, и точно выполняется условие констрейнта $\langle \hat{S}_i \rangle = 0$, $\langle \hat{S}_i^2 \rangle = 3/4$. Спин-спиновый коррелятор $\langle S_0^z S_r^z \rangle$ не зави-

сит от α : $\langle S_0^x S_r^x \rangle = \langle S_0^y S_r^y \rangle = \langle S_0^z S_r^z \rangle$, существуют три выродженных ветви спиновых возбуждений.

ФМ обмен $J = -1$.

При $T = 0$ структурный фактор c_q имеет δ -образный пик в нулевой точке зоны Бриллюэна $\Gamma = (0, 0)$. Спин-спиновый коррелятор $\langle S_0^z S_r^z \rangle$ знакоположителен и при $r \rightarrow \infty$ выходит на константу (ФМ корреляционная длина бесконечна)

$$T = 0, \quad \langle S_0^z S_r^z \rangle_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \text{const}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (17)$$

Для рассматриваемого состояния с нулевым средним спином константа в (17), так называемая эффективная намагниченность m , характеризует спиновую структуру:

$$m = \left(\lim_{r \rightarrow \infty} |\langle S_0 S_r \rangle| \right)^{1/2}, \quad (18)$$

в СССР для ФМ случая, как и должно быть, $m = 1/2$.

Спектр спиновых возбуждений близок к стандартному спин-волновому (малые отличия зависят от выбора вершинных поправок), щель закрыта только в точке Γ .

При $T > 0$ спектр эволюционирует, но качественных изменений не наблюдается. Однако высота пика c_q становится конечной, а его ширина определяет теперь уже конечную корреляционную длину. Спин-спиновый коррелятор с ростом r убывает на нулевую асимптотику

$$T > 0, \quad \langle S_0^z S_r^z \rangle_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad \alpha = x, y, z. \quad (19)$$

Таким образом, СССР позволяет описывать синглетное состояние с конечной корреляционной длиной и сильными ФМ корреляциями.

АФМ обмен $J = +1$.

При $T = 0$ δ -образный пик структурного фактора c_q находится в АФМ точке зоны Бриллюэна $Q = (\pi, \pi)$. Спин-спиновый коррелятор меняет знак в шахматном порядке, его модуль при $r \rightarrow \infty$ выходит на константу (АФМ корреляционная длина бесконечна)

$$T = 0, \quad |\langle S_0^z S_r^z \rangle|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \text{const}, \quad \alpha = x, y, z. \quad (20)$$

Эффективная намагниченность в (20) для АФМ случая ненулевая и равна $m = 0,3$. Последняя величина совпадает с получаемой множеством альтернативных аналитических и численных подходов, в том числе в двухподрешеточных подходах [52], что служит дополнительным аргументом в пользу корректности СССР.

Как и в ФМ случае, спектр спиновых возбуждений близок к стандартному спин-волновому (незначительные отличия зависят от выбора вершинных поправок), щель закрыта в нулевой точке $\Gamma = (0, 0)$ и в АФМ точке $Q = (\pi, \pi)$.

При $T > 0$ высота пика c_q становится конечной, спин-спиновый коррелятор с ростом r убывает на нулевую асимптотику, корреляционная длина конечна

$$T > 0, \quad \langle S_0^z S_r^z \rangle_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad \alpha = x, y, z. \quad (21)$$

Однако, в отличие от ФМ варианта, спектр при конечной температуре претерпевает качественное изменение. А именно, открывается и с ростом температуры растёт щель в АФМ точке $Q = (\pi, \pi)$.

Сказанное выше представляет важнейшее отличие СССР от спин-волнового и близких к нему подходов. В сферически-симметричном подходе возникает возможность описания синглетного состояния системы с сильными АФМ корреляциями.

Математическая причина этого в следующем. В СССР трансляционная симметрия не нарушена, удвоения решётки в АФМ случае не происходит, и рассмотрение ведётся в полной (а не уменьшенной магнитной) зоне Бриллюэна, точка $Q = (\pi, \pi)$ не эквивалентна точке $\Gamma = (0, 0)$.

7.2. Модель $J_1 - J_2$

Модель $J_1 - J_2$ изучена наиболее детально, ей посвящено большее число работ [6, 7, 53–62] (ранние обзоры некоторых идей этой области можно найти в [63, 64]).

Первичным импульсом к исследованию модели были, конечно, ВТСП купраты, в которых спиновая подсистема квазидвумерна и имеет квадратную симметрию. Сейчас известно уже больше полутора десятков соединений, в которых эксперимент указывает на фрустрированный $J_1 - J_2$ магнетик [65–82]. Кроме собственно ВТСП купратов, это, например $\text{Pb}_2\text{VO}(\text{PO}_4)_2$, $(\text{CuCl})\text{LaNb}_2\text{O}_7$, $\text{SrZnVO}(\text{PO}_4)_2$, $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$, K_2CuF_4 , Cs_2CuF_4 , Cs_2AgF_4 , $\text{La}_2\text{BaCuO}_5$, Rb_2CrCl_4 и др.

Эти соединения заполняют всю верхнюю полуокружность $J_1 - J_2$ круга [59, 60, 62, 83]. Причём среди них немало таких, где фрустрация разрушает дальний порядок [71, 72, 74–79].

Далее необходимы два уточнения.

Первое. На раннем этапе работы по $J_1 - J_2$ модели вдохновлялись идеей воспроизвести магнитные свойства ВТСП купратов. В некоторых из них были попытки описать наблюдаемые экспериментально "тонкие свойства" спинового спектра ВТСП купратов, например, так называемую "резонансную моду" или "hour-glass spectrum" (детали см. в [84]). Для этого в стандартную схему привносились дополнительные параметры и соображения. Здесь мы не будем входить в такого рода детали, и ниже будут изложены базовые, основные свойства спиновых спектров в $J_1 - J_2$ модели⁹.

Второе. По той же причине — описание ВТСП — во многих работах рассматривались теоретические модели, содержащие как магнитный фон, так и (взаимодействующих с ним) носителей заряда. Эта область находится вне предмета настоящего обзора и лишь кратко упомянута в разделе 11.

Прежде чем приступить к "инвентаризации" возможных спиновых структур $J_1 - J_2$ модели, необходимо сделать несколько общих вводных замечаний.

При $T = 0$ структурный фактор c_q может как содержать δ -образный вклад, так и быть конечным во всей зоне Бриллюэна. В первом случае это фаза с дальним порядком, структура которого определяется положением пика. Во втором — спин-жидкостная фаза без дальнего порядка, ближний порядок определяется профилем структурного фактора.

При $T \neq 0$ в СССР дальний порядок невозможен при любых обменах, и c_q везде конечен. Точка q_0 — положение максимума структурного фактора в зоне Бриллюэна — определяет структуру ближнего порядка, а полуширина пика c_q — корреляционную длину по отношению к соответствующему порядку (отвлекаясь от эквивалентных точек в полной зоне Бриллюэна), т.е. точка q_0 является квантовым аналогом управляющей точки в классической модели.

⁹ Большая часть количественных результатов этого раздела соответствует стандартной реализации СССР в приближении одной вершины.

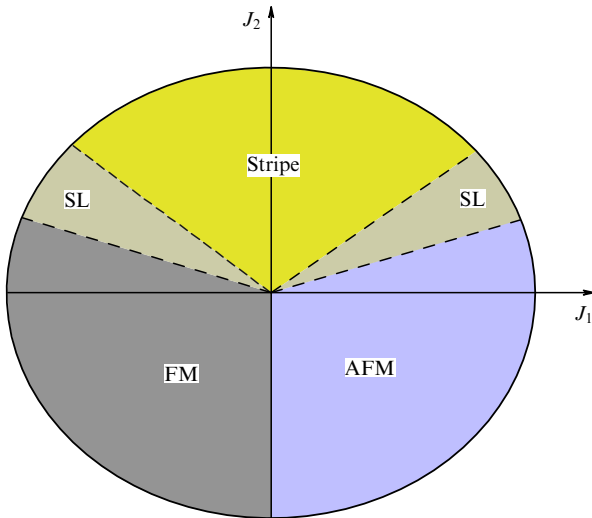


Рис. 3. Схематический вид фазовой диаграммы квантовой $S = 1/2$ J_1 - J_2 модели при $T = 0$. Между АФМ- и страйп-фазами с дальним порядком реализуется неупорядоченная спин-жидкостная фаза (SL — spin liquid). Вторая область спиновой жидкости появляется между ФМ и страйп дальними порядками. Границы спиновой жидкости показаны условно, без точного соответствия с расчетными данными.

7.2.1. Спиновый порядок при нулевой температуре. При $T = 0$ в зависимости от соотношения обменов обнаруживаются пять различных спиновых структур: это три фазы с дальним порядком (АФМ, страйп и ФМ) и две области спиновой жидкости (рис. 3). При движении по J_1 - J_2 кругу реализуется каскад квантовых фазовых переходов.

Эволюция спин-спиновых корреляторов на всём J_1 - J_2 круге представлена на рис. 4. Щели в спектре спиновых возбуждений в симметричных точках зоны Бриллюэна показаны на рис. 5. Использована упомянутая в разделе 4.1 тригонометрическая параметризация обменов $J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $[J_1^2 + J_2^2]^{1/2} = 1$ ¹⁰.

Верхняя половина J_1 - J_2 круга.

$0 \rightarrow SL_1$. На верхней полуокружности между $\varphi = 0$ и нижней границей спин-жидкостной фазы SL_1 реализуется АФМ фаза с дальним порядком. Структурный фактор c_q имеет δ -образный пик в АФМ точке зоны Бриллюэна $Q = (\pi, \pi)$. Щель в спектре спиновых возбуждений в точке Q закрыта¹¹. Модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности выходит на константу, а его знак меняется в шахматном порядке

$$\langle S_{\mathbf{r}}^{\alpha} S_{\mathbf{r}+\infty}^{\alpha} \rangle^{\text{afm}} = c_{\text{cond}}^{\text{afm}} (-1)^{n_x+n_y}, \quad \alpha = x, y, z, \quad \mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y. \quad (22)$$

С ростом φ величина спинового конденсата $c_{\text{cond}}^{\text{afm}}$ убывает, и в точке SL_1 происходит квантовый фазовый переход в *спиновую жидкость без дальнего порядка*.

$SL_1 \rightarrow SL_2$. В спиновой жидкости пик в структурном факторе в точке Q становится конечным, его ширина определяет корреляционную длину. Щель в спектре в точке Q открыта, но мала. Ближний порядок сохраняет АФМ структуру (см. рис. 4), коррелятор на ближайших

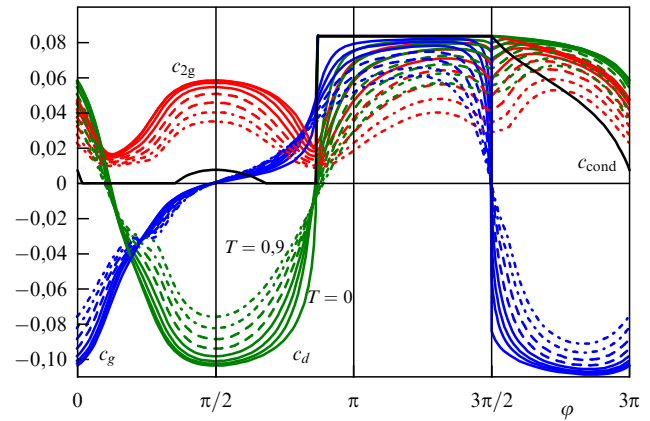


Рис. 4. Модель J_1 - J_2 . Спин-спиновые корреляторы на ближайших соседях (c_g , синий), вторых ближайших (c_d , зелёный) и третьих ближайших (c_{2g} , красный) в зависимости от параметрического угла φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$). Жирные сплошные линии отвечают температуре $T = 0$, тонкие сплошные — $T = 0,3, 0,4, 0,5$, штриховые — $T = 0,6, 0,7$ и пунктирные — $T = 0,8, 0,9$. Спиновый конденсат c_{cond} (в другом масштабе) показан сплошной чёрной линией. Тригонометрическая параметризация обменов $J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$, $\varphi \leq 2\pi$, $[J_1^2 + J_2^2]^{1/2} = 1$. (Данные из [62].)

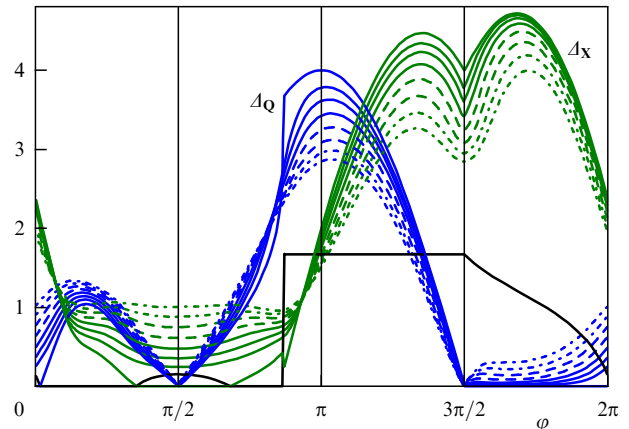


Рис. 5. Щели в спектре спиновых возбуждений Δ_Q (синий цвет) и Δ_X (зелёный) в симметричных точках зоны Бриллюэна $Q = (\pi, \pi)$ и $X = (0, \pi), (\pi, 0)$ в зависимости от параметрического угла φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$). Жирные сплошные линии отвечают температуре $T = 0$, тонкие сплошные — $T = 0,3, 0,4, 0,5$, штриховые — $T = 0,6, 0,7$ и пунктирные — $T = 0,8, 0,9$. Спиновый конденсат c_{cond} (в другом масштабе) показан сплошной чёрной линией. (Данные из [62].)

соседях $c_g < 0$, на вторых и третьих соседях $c_d > 0$, $c_{2g} > 0$.

С дальнейшим ростом φ при движении от SL_1 к верхней границе спиновой жидкости SL_2 уменьшаются щели и растут максимумы структурного фактора в страйп-точках зоны Бриллюэна $X = (0, \pi), (\pi, 0)$. В АФМ точке, наоборот, растёт щель и убывает пик c_q . Таким образом, ближний порядок эволюционирует в сторону страйп-структуры. На верхней границе спиновой жидкости SL_2 происходит квантовый фазовый переход в *страйп-фазу с дальним порядком*.

$SL_2 \rightarrow SL_3$. Это область страйп-фазы. Структурный фактор имеет δ -образный пик в страйп-точках зоны Бриллюэна $X = (0, \pi), (\pi, 0)$. Щель в спектре спиновых возбуждений в точках X закрыта. Модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности выходит на кон-

¹⁰ Все энергетические величины в этом разделе (кроме рис. 7) нормированы на $[J_1^2 + J_2^2]^{1/2}$.

¹¹ Как и в модели J_1 , в J_1 - J_2 щель в нулевой точке $\Gamma = (0, 0)$ закрыта при любой температуре и любых обменах.

станту. В СССР страйп-фаза представляет собой квантовую суперпозицию горизонтальных и вертикальных полос, и коррелятор на бесконечности имеет вид

$$\langle S_0^\alpha S_r^\alpha \rangle_{r \rightarrow \infty}^{\text{stripe}} = c_{\text{cond}}^{\text{stripe}} \frac{1}{2} [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}], \quad \alpha = x, y, z, \\ \mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y. \quad (23)$$

Точка $\varphi = \pi/2$ $J_1 - J_2$ круга выделена. Она соответствует $J_1 = 0$, $J_2 = 1$. Из геометрических соображений очевидно, что при таких обменах решётка распадается на две сдвинутые по диагонали невзаимодействующие подрешётки. Это приводит, например, к расходимости магнитной восприимчивости. Сколь угодно малое значение $J_1 \neq 0$ устраняет расходимость¹².

С ростом φ величина спинового конденсата $c_{\text{stripe}}^{\text{cond}}$ убывает, и в точке SL_3 происходит следующий квантовый фазовый переход — во *вторую область спиновой жидкости без дальнего порядка*.

$SL_3 \rightarrow SL_4$. Во второй области спиновой жидкости пики структурного фактора в страйп-точках зоны Бриллюэна становятся конечными, как и корреляционная длина. Щели в точках X открыты. Ближний порядок сохраняет страйп структуру (см. рис. 4), для которой характерны $c_d < 0$, $c_{2g} > 0$, знак c_g может меняться.

С дальнейшим ростом φ при движении от SL_3 к SL_4 растёт максимум структурного фактора в нулевой точке зоны Бриллюэна $\Gamma = (0, 0)$ (щель в спектре в этой точке закрыта всегда). Ближний порядок эволюционирует в сторону ФМ структуры.

В точке SL_4 происходит ещё один квантовый фазовый переход — в *ФМ-область с дальним порядком*.

$SL_4 \rightarrow \pi$. ФМ-область. δ -образный пик структурного фактора в нулевой точке зоны Бриллюэна $\Gamma = (0, 0)$ (там же закрыта щель). Все спин-спиновые корреляторы положительны. Коррелятор на бесконечности выходит на знакопостоянную константу $c_{\text{fm}}^{\text{cond}}$.

Нижняя половина $J_1 - J_2$ круга.

Нижняя полуокружность не представляет интереса для экспериментов — соединений с $J_1 < 0$, $J_2 < 0$ (третий квадрант, $\pi < \varphi < 3\pi/2$) и с $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ (четвёртый квадрант, $3\pi/2 < \varphi < 2\pi$) не выявлено.

С точки зрения теории эта область тоже не очень увлекательна, поскольку здесь нет фрустрации: в третьем квадранте оба обмена работают на ФМ фазу, а в четвёртом — оба на АФМ. Некоторый интерес представляет разве что переход при $\varphi = 3\pi/2$, когда скачком меняет знак коррелятор на ближайших соседях.

7.2.2. Спиновая структура при конечной температуре. При $T > 0$ в СССР дальнего порядка нет для любых обменов. Спин-спиновые корреляторы на бесконечности равны нулю. Щели в спектре в симметричных точках зоны Бриллюэна открыты (за исключением точки $\Gamma = (0, 0)$, где щель всегда закрыта), пики структурного фактора имеют конечную высоту.

Однако ближний порядок вплоть до высоких температур $T \sim 1$ сохраняет структуру соответствующей нуль-

температурной фазы. Так, например, для области, лежащей над АФМ фазой, ближний порядок имеет по-прежнему "шахматный" характер ($c_g < 0$, $c_d > 0$, $c_{2g} > 0$) (см. рис. 4).

Вид спектра спиновых возбуждений также напоминает спектр при $T = 0$, с той разницей, что щели в соответствующих симметричных точках зоны Бриллюэна теперь не нулевые.

На рисунке 6 представлены примеры спинового спектра при $T = 0,3$ в широком диапазоне обменов на верхней полуокружности. Рисунок 6а соответствует $\varphi = 0$, это область нультемпературной АФМ фазы с дальним порядком, здесь мала щель в АФМ точке Δ_Q (напомним, щель в нулевой точке Δ_Γ закрыта при любых обменах и температуре). Рисунок 6б, $\varphi = \pi/4$ — над областью спиновой жидкости, щели в симметричных точках сопоставимы. Рисунок 6в, $\varphi = \pi/2$ — над страйп-фазой с дальним порядком, малы щели в страйп-точках Δ_X (щель Δ_Q при точном равенстве $\varphi = \pi/2$ нулевая всегда, подробнее см. примечание 12). Рисунок 6г, $\varphi = 3\pi/4$ — также над областью спиновой жидкости, щели в точках Δ_X несколько больше, чем на предыдущем графике.

Пример эволюции спектра на локальном участке — с ростом φ от $\varphi = 0$ — показан на рис. 7. Видно, что щель в АФМ точке при этом растёт, а щели в страйп-точках убывают (хотя та и другая остаются ненулевыми), т.е. характер спектра трансформируется от АФМ вида к страйп виду. Одновременно убывает (конечный) максимум структурного фактора в АФМ точке и растёт — в страйп-точке.

Что касается нижней полуокружности при $T > 0$, как отмечено выше, здесь нет фрустрации, оба обмена работают в одну сторону. Можно сказать, что это приводит к "антифрустрации" — в третьем секторе $J_1 < 0$, $J_2 < 0$ возникает "сверхферромагнетик", а в четвёртом $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ — "сверхантиферромагнетик". В данных областях при $T > 0$ корреляционная длина экспоненциально велика вплоть до температур $T \sim 1$, т.е. порядка $J = [J_1^2 + J_2^2]^{1/2}$.

Восприимчивость и теплоёмкость. Как было обещано в начале этого раздела, здесь представлены главным образом результаты, касающиеся спиновой структуры. Упомянем, однако, некоторые другие вычисляемые в СССР величины.

В значительной части цитированных выше работ определялось также поведение спиновой восприимчивости (обычно статической) и теплоёмкости.

При $T = \text{const}$ зависимость статической восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$ от параметров обмена ожидаема — на $J_1 - J_2$ круге $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в конкретной симметричной точке $\mathbf{q}_0$ зоны Бриллюэна, демонстрирует максимум в области соответствующей спиновой структуры. Температурное поведение восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega, T)$, хотя бы только статической, в зависимости от параметров обмена демонстрирует большее разнообразие режимов. В некоторых работах анализировалась также "локальная спиновая восприимчивость" $\chi_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega, T)$, обладающая скейлинговым свойством (подробнее см. в конце раздела 9). Мы позволим себе уклониться от полной систематизации этих результатов.

Теплоёмкость C_V демонстрирует более простое поведение на $J_1 - J_2$ круге. При любых обменах C_V имеет

¹² Более того, в точке $\varphi = \pi/2$ и противоположной $\varphi = 3\pi/2$ щель Δ_Q закрыта при любых T (см. рис. 5). Формально это следует из аналитического выражения для Δ_Q . Физическое объяснение в том, что система двух невзаимодействующих подрешёток вырождена по отношению к их взаимному вращению. Поэтому передача спинового возбуждения на соседний узел не требует энергии.

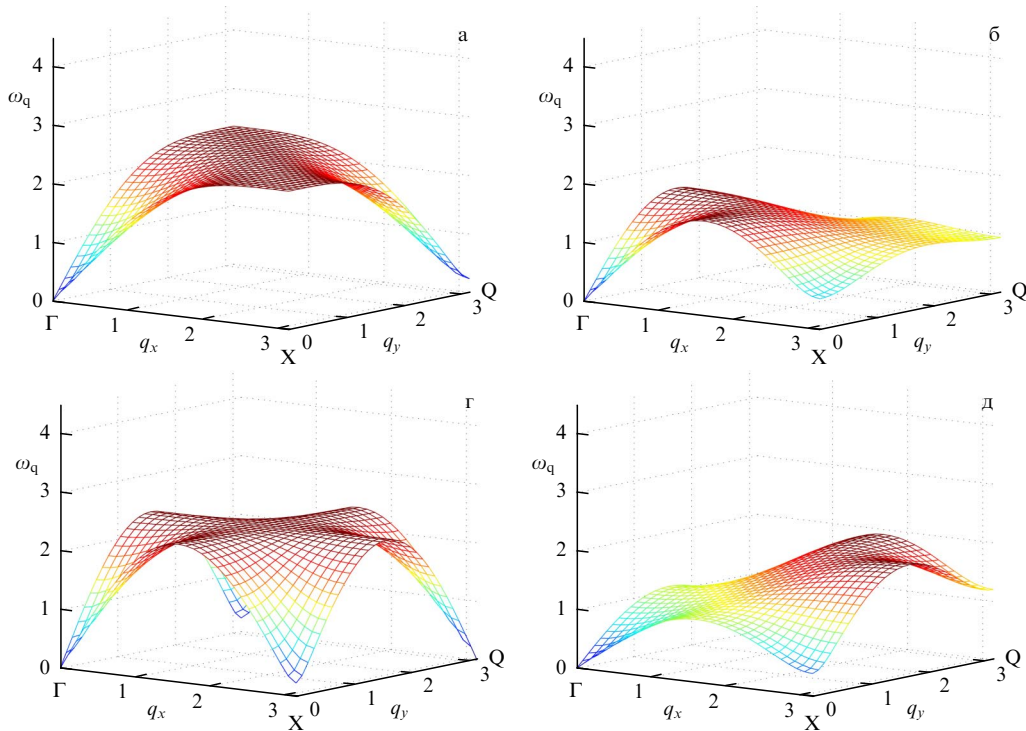


Рис. 6. Спектры спиновых возбуждений при $T = 0,3$ на верхней половине $J_1 - J_2$ -круга. (а) $\varphi = 0$, соответствует АФМ нулевой температурной фазе, мала щель Δ_Q . (б) $\varphi = \pi/4$ — над областью спиновой жидкости, щели в симметричных точках сопоставимы. (в) $\varphi = \pi/2$ — соответствует нулевой температурной страйп фазе, малы щели Δ_X (относительно Δ_Q при $\varphi = \pi/2$ см. текст). (г) $\varphi = 3\pi/4$ — также над областью спиновой жидкости, щели Δ_X несколько больше, чем на предыдущем графике. Щель в нулевой точке Δ_Γ закрыта при любых обменах и температуре. Показана четверть зоны Бриллюэна [60].

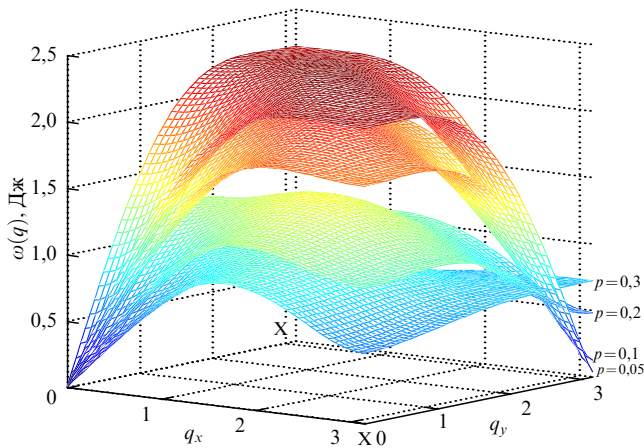


Рис. 7. Эволюция спектра спиновых возбуждений при конечной температуре в первой четверти $J_1 - J_2$ круга с ростом φ от $\varphi = 0$. На этом рисунке из [50] использован стандартный для первой четверти параметр фрустрации $p = J_2/J_1$, $J = J_1 + J_2$ (рост p отвечает росту φ) и альтернативное обозначение для АФМ точки $\mathbf{M} \equiv \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Видно, что с ростом p (т.е. с ростом φ) щель в АФМ точке растёт, а щели в страйп точках $\mathbf{X}$ убывают. Происходит трансформация ближнего порядка из АФМ-подобного в страйп-подобный. Здесь температура $T = 0,1$ в единицах $J = J_1 + J_2$, спектр в тех же единицах.

стандартную температурную зависимость: $C_V \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$ и единственный максимум при конечной температуре, положение максимума зависит от обменов. Исключение — область вблизи перехода страйп $\leftrightarrow$ ФМ, где наблюдается дополнительный низкотемпературный максимум (впервые обнаружен в [57]). В литературе он обычно приписывается фрустрации.

При любой фиксированной температуре C_V демонстрирует локальные минимумы в областях над упорядоченными фазами и в областях над переходами между фазами. Оба случая отвечают локальным экстремумам энергии при $T = \text{const}$, первый — максимумам, второй — минимумам [62].

7.2.3. О сравнении с экспериментом и с численными методами. В значительной части работ по модели $J_1 - J_2$, использовавших сферически-симметричный подход (о разновидностях метода см. раздел 8), проводилось сравнение результатов с данными численных методов. Не углубляясь в многочисленные детали, можно констатировать, что согласие с численными результатами по меньшей мере удовлетворительное, а обычно хорошее. Для полноты ниже упомянуты также родственные модели в сферически-симметричном подходе.

Сравнение с численными результатами проводилось не только для вариантов модели Гейзенберга на квадратной решётке [23, 34, 36, 85, 86], но и для треугольной решётки [21, 23, 26], решётки Кагоме и пироклора [29, 32]. Многочисленные сравнения с вариантами одномерной цепочки [8–12, 23, 86]. Наконец, аналогичная процедура проводилась для $t - J$ модели — наиболее распространённой модели с магнитным фоном и носителями заряда (см. раздел 11) [53, 87, 88].

Что касается использованных численных методов, чаще всего это, конечно, точная диагонализация, обычно в алгоритме Ланцоша [8–12, 21, 23, 26, 36, 53, 86–88]. Но были и другие методы: квантовый метод Монте-Карло [23, 34, 87], подход coupled cluster [85], высокотемпературное разложение [12, 29, 32]. Для базового ва-

рианта одномерной задачи естественный репер — анзац Бете [23, 86].

Резюмируя, можно сказать, что доступные численные методы показывают полную адекватность СССРП и родственных подходов.

О сравнении с экспериментом. На начальном этапе развития теории, инспирированном появлением ВТСП купратов, сравнение с экспериментом было, по существу, директивным требованием к статьям на данную тему. Практически в каждой работе сравнивались с экспериментом основные характеристики спектра спиновых возбуждений, тонкие детали спектра (например, "hour-glass spectrum"), корреляционная длина, положение максимума структурного фактора, спиновая восприимчивость, прочие магнитные и термодинамические характеристики. Детальный анализ этого массива данных, тем более в контексте нескольких различных теорий ВТСП, представляет собой неподъёмную задачу, выходит далеко за рамки настоящего обзора и здесь представлен не будет.

7.3. Модель $J_1 - J_2 - J_3$

Теперь обратимся к модели $J_1 - J_2 - J_3$.

Гамильтониан имеет вид (1) с тремя обменами. Напомним, для квадратной решётки J_1 — это обмен вдоль стороны квадрата, J_2 — вдоль диагонали и J_3 — по удвоенной стороне (см. рис. 1).

Схема вычислений остаётся прежней, как описано в разделе 5.1, хотя выражения для функции Грина становятся весьма громоздкими (приведены в разделе 15).

Ниже используется упомянутая в разделе 4.1 "сферическая" параметризация обменов

$$J_1 = \cos(\psi) \cos(\varphi), \quad J_2 = \cos(\psi) \sin(\varphi), \quad J_3 = \sin(\psi),$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \psi \leq \frac{\pi}{2}, \quad \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + J_3^2} = 1. \quad (24)$$

В данном разделе имеется в виду случай низких, но ненулевых температур. Этого вполне достаточно, чтобы детектировать все виды возникающих магнитных структур.

На рисунке 8 показан участок наиболее интересной, полностью фрустрированной четверти фазовой диаграм-

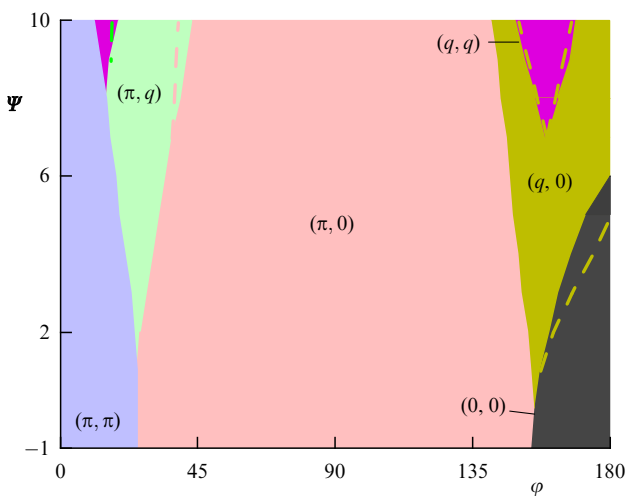


Рис. 8. Области фазовой плоскости, отвечающие различным структурам ближнего порядка (углы по осям в градусах). Обозначены положения максимума структурного фактора. (π, π) — АФМ, $(\pi, 0)$ — страйп, $(0, 0)$ — ФМ, (π, q) , $(q, 0)$ и (q, q) — три вида геликоидов. Сплошные границы соответствуют $T = 0,4$, пунктирные — $T = 0,2$. При более низких температурах границы стабилизируются. (Данные из [89, 90].)

мы с указанием различных структур ближнего порядка. Реализуются следующие виды ближнего порядка: АФМ, страйп, ФМ и три вида квантовых спиралей. Как и в классическом пределе (см. выражения (5)), они отвечают положениям управляющей точки (максимума структурного фактора), соответственно $\Gamma = (0, 0)$, $\mathbf{X} = (0, \pi)$, $(\pi, 0)$, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$; для спиралей — её движению вдоль одной или другой стороны зоны Бриллюэна, а также вдоль её диагонали (геликоиды $(0, q)$, $(q, 0)$ и (q, q)).

Рисунок 8 отвечает конечным температурам, поэтому везде детектируется только ближний порядок. Качественно картина не меняется вплоть до предельно низких температур. При $T = 0$ возникают области дальнего порядка, разделенные спин-жидкостной фазой. Вопрос о границах спиновой жидкости детально изучен при $J_3 = 0$ (см ссылки в разделе 7.2) и почти не исследован при $J_3 \neq 0$, в частности, при $J_3 > 0$.

7.3.1. Фрустрированные спирали. Наиболее важное новое свойство, которое возникает с добавлением J_3 — возможность спиральных, геликоидальных спиновых структур, и соизмеримых, и несоизмеримых. Этот эффект нетривиален, так как обычно спирали (см., например, [43]), в том числе в 2D, связывают со взаимодействием Дзялошинского–Мории (Dzyaloshinskii–Moriya interaction, DMI), [39–42] ссылки на недавние работы можно найти в [91, 92], общую классификацию спиралей см. в [93]. Для реализации DMI-спиралей необходимо, в частности, нарушение симметрии относительно инверсии.

В модели $J_1 - J_2 - J_3$ спирали возникают без нарушения указанной симметрии, без взаимодействия DMI. Причиной их появления здесь является фрустрация. Поэтому такие спирали иногда называют фрустрированными, в DMI, соответственно, нефрустрированными [94].

Сами по себе фрустрированные спирали — в классическом пределе $S \gg 1$ известны с середины прошлого века. Здесь же рассматривается ультраквантовый случай $S = 1/2$ в интерпретации СССРП.

Сразу надо иметь в виду следующее. Квантовые геликоидальные состояния в СССРП не стоит представлять себе в квазиклассическом стиле как решётку спинов-стрелок, меняющих направление от узла к узлу. Любое спиновое состояние, в том числе спираль, является синглетным, средний спин на узле равен нулю. Структуру спирали можно идентифицировать одним из трёх способов: либо по картине корреляторов, либо по положению максимума структурного фактора, либо по особенностям спектра спиновых возбуждений.

Первый способ кажется очевидным, но он менее нагляден. Необходимо построить картину корреляторов для классического аналога искомой квантовой спирали и сравнить с корреляторами в квантовом случае (примеры в [89]). Эта процедура осложняется двумя обстоятельствами. Во-первых, корреляционная длина при $T > 0$ конечна, корреляторы затухают с расстоянием. Во-вторых, поскольку в СССРП ни одна из исходных симметрий не нарушена, геликоидальное состояние представляет собой суперпозицию квантовых спиралей, определяемых эквивалентными точками в полной зоне Бриллюэна.

Второй и третий критерии (уже упомянутые в разделе 7.3) тесно связаны. При не слишком высоких температурах в управляющей точке зоны Бриллюэна, которая определяет структуру спирали (и эквивалентных),

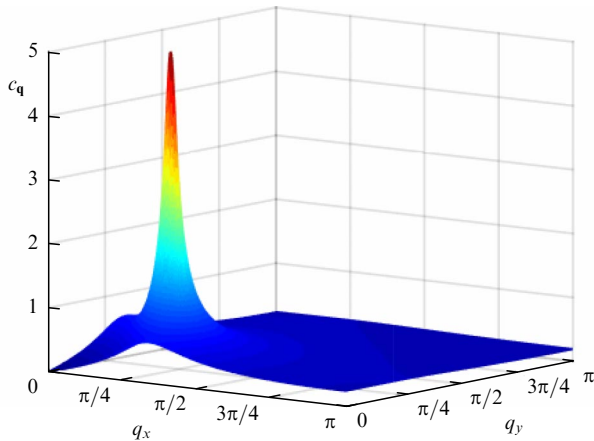


Рис. 9. Пример структурного фактора для геликоида. Острый максимум c_q на диагонали зоны Бриллюэна (геликоид (q, q)) при низкой температуре указывает на характер ближнего порядка. Ширина пика определяет корреляционную длину. $T = 0,02$, $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$. (Данные из [89].)

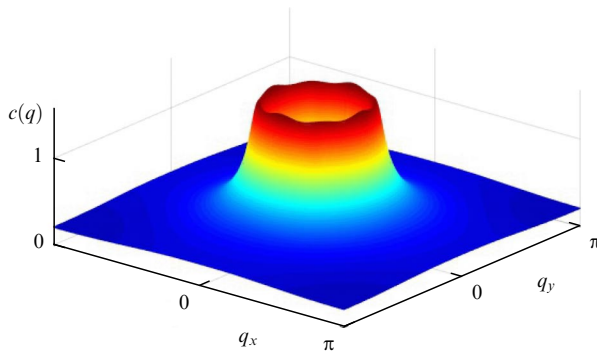


Рис. 10. Структурный фактор с почти идеальной круговой симметрией. $T = 0,02$, $\varphi = 160^\circ$, $\psi = 10^\circ$. Управляющая точка (q, q) близка к той, что определяет рис. 9, но сдвинута ближе к ФМ точке $\Gamma = (0, 0)$. При таком сдвиге расплывание острого пика рис. 9 приводит к почти круговой структуре. В отличие от рис. 9, здесь для наглядности показана полная зона Бриллюэна. (Данные из [90].)

структурный фактор имеет локальный максимум. В этой же точке в спектре спиновых возбуждений есть локальный минимум. При $T = 0$ и при наличии дальнего порядка максимум структурного фактора δ -образный, а в спиновом спектре щель нулевая (исключение — точка $\Gamma = (0, 0)$, где спектр всегда бесщелевой). На рисунке 9 показан пример максимума структурного фактора, в данном случае на диагонали зоны Бриллюэна, что отвечает геликоиду (q, q) .

Оказывается, что, как и в классическом пределе, при $S = 1/2$, кроме АФМ, ФМ и страйп спиновых структур, реализуются три вида спиралей. Они отвечают положению максимума c_q на одной из сторон или диагонали зоны Бриллюэна (см. рис. 8).

В модели $J_1 - J_2 - J_3$ возникает ещё одна нетривиальная черта, которая не реализуется в $J_1 - J_2$ и J_1 моделях. Поскольку переход от одного мотива спинового порядка к другому происходит непрерывно, в переходной области вследствие их интерференции могут возникать самые причудливые структуры, в частности, обладающие почти круговой симметрией. Пример такого изотропного геликоида показан на рис. 10. Практически изотропный вид структурный фактор приобретает при расплывании

острого максимума рис. 9, когда управляющая точка (q, q) движется вдоль диагонали к ФМ точке $\Gamma = (0, 0)$. Аналогичный эффект наблюдается при приближении управляющей точки вдоль диагонали к АФМ точке $\Gamma = (0, 0)$. Такие спиновые структуры можно рассматривать как квантовые спирали, "распространяющиеся во все стороны".

В модели $J_1 - J_2$ усечённым аналогом этого эффекта является постепенный переток структурного фактора из одной симметричной точки в другую при движении по $J_1 - J_2$ окружности (см. предыдущий раздел 7.3).

Восприимчивость и теплоёмкость. Коротко упомянем поведение спиновой восприимчивости и теплоёмкости в $J_1 - J_2 - J_3$ модели.

Добавление третьего обмена в целом качественно не меняет поведения C_V и $\chi(q, \omega = 0)$. Теплоёмкость демонстрирует стандартную температурную кривую — единственный максимум и нулевая асимптотика при $T \rightarrow 0$ (исключение — дополнительный низкотемпературный максимум в области перехода страйп $\leftrightarrow$ ФМ).

Статическая восприимчивость $\chi(q, \omega = 0)$, вычисленная в конкретной симметричной точке q_0 зоны Бриллюэна, демонстрирует максимум в области параметров обмена, отвечающих соответствующей спиновой структуре.

Можно упомянуть не вполне тривиальный эффект — восприимчивость $\chi(q, \omega = 0)$, вычисленная на диагонали зоны Бриллюэна, т.е. в любой точке с координатами $q = (q_0, q_0)$, кроме максимума в области этой точки, имеет также меньший, но сопоставимый по величине максимум в области точки $q = (\pi - q_0, \pi - q_0)$. Последняя отвечает геликоиду "сходной" структуры.

7.3.2. Сосуществование двух дальних порядков. В двумерной квантовой модели $J_1 - J_2 - J_3$ возможен ещё один нетривиальный эффект — сосуществование при $T = 0$ двух различных дальних порядков [95]. На такую возможность указывают уже простые геометрические соображения. Как видно из рис. 11, на квадратной решётке отрицательный третий обмен J_3 благоприятствует одновременно как антиферромагнитному, так и страйп-порядку.

В СССР в квантовом случае $S = 1/2$ это приводит к появлению при $J_1, J_2 > 0$, и достаточно большом по модулю $J_3 < 0$ в определённом диапазоне параметра J_2/J_1 состояния с двумя сосуществующими дальними порядками — антиферромагнитным и страйп (рис. 12).

Структурный фактор c_q такого состояния имеет δ -образные пики как в АФМ точке зоны Бриллюэна $Q = (\pi, \pi)$, так и в страйп-точках $X = (0, \pi)$, $(\pi, 0)$. Присутствуют спиновые конденсаты обеих симметрий (детали см. в разделе 7.2). Интенсивность АФМ конденсата убывает, а страйп-конденсата нарастает при увеличении J_2/J_1 от одного берега области с двумя конденсатами до другого. Спектр спиновых возбуждений имеет нулевые щели во всех четырёх высокосимметричных точках: $\Gamma = (0, 0)$, $X = (0, \pi)$, $(\pi, 0)$ и $Q = (\pi, \pi)$.

Таким образом, переход из АФМ в страйп-фазу при положительных и малых отрицательных J_3 происходит через спин-жидкостную фазу, а при больших отрицательных J_3 — через фазу с двумя дальними порядками.

В классическом пределе описанный эффект невозможен. Интуитивно это очевидно, но и строгое доказательство, т.е. подстановка анзаца (2) в классическое выраже-

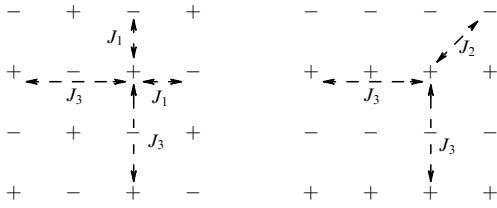


Рис. 11. Отрицательный, т.е. ферромагнитный обмен J_3 (на удвоенной постоянной решётки) благоприятствует как антиферромагнитной, так и страйп фазе. В первом случае АФМ связь реализуется на ближайших соседях, во втором — на вторых ближайших. В обоих случаях связь на третьих соседях антиферромагнитная.

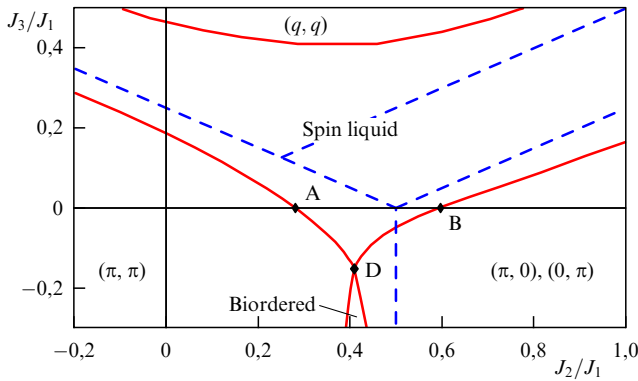


Рис. 12. Участок фазовой диаграммы $J_1-J_2-J_3$ модели при $T=0$, использована параметризация обменов, отличная от вида (4). Красные линии — границы квантовых фаз: сверху диагональный геликоид $\mathbf{q} = (q, q)$, в центре спиновая жидкость, внизу слева АФМ, внизу справа страйп дальний порядок, внизу по центру фаза с двумя порядками. Пунктирные линии отвечают границам классических фаз: внизу АФМ и страйп, выше два геликоида. (Данные из [95].)

ние для энергии с дальнейшей минимизацией, приводит к тому же ответу.

Выше в разделах 7.2 и 7.3.1 уже упоминалось сосуществование различных спиновых порядков в СССП. В частности, при $T=0$ страйп-фаза представляет собой квантовую суперпозицию двух дальних порядков. Описанный здесь случай отличается тем, что сосуществуют два дальних порядка разных симметрий.

7.3.3. $J_1-J_2-J_3$ и эксперимент. Изложенное выше может показаться хоть и красивыми, но лишь модельными спекуляциями, так как сложно ожидать реализации в эксперименте соотношения обменов $J_3 \sim J_1, J_2$. Такое может быть получено разве что в подходящем квантовом симуляторе (хрестоматийные обзоры [96–99] и недавний обзор – прогноз [99]).

Здесь важно, что на некоторых участках фазовой диаграммы геликоиды возникают уже при малых J_3 . Это делает экспериментальную реализацию $J_1-J_2-J_3$ спирали все-таки реальной. Один из возможных примеров — $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$, квазидвумерное соединение с квадратной решёткой в плоскости. Нейтронный эксперимент [100–103] обнаруживает пик структурного фактора в позиции $(3\pi/4, 0)$, что соответствует соизмеримой спиновой спирали. Нарушение симметрии относительно инверсии отсутствует, а это делает невозможным DMI сценарий.

Стандартная реализация СССП для модели $J_1-J_2-J_3$ позволяет получить для низких температур положение пика в точке $(3\pi/4, 0)$ при достаточно малом J_3 ($J_1 =$

$= -0,81$, $J_2 = 0,56$, $J_3 = 0,17$) [95]. При этом с хорошей точностью воспроизводятся экспериментально наблюдаемые теплоёмкость и спиновая восприимчивость системы.

8. Связь с другими сферически-симметричными подходами

Кроме изложенного выше подхода, существуют другие сферически-симметричные методы, отличающиеся от СССП. Однако в них реализуется та же идея — описание состояния с нулевым средним спином на узле, осуществляемое через выделение спин-спиновых корреляторов из функции Грина. Во всех этих методах рассматриваются двухвременные запаздывающие функции Грина, для которых известно несколько канонических алгоритмов анализа. В сущности, каждый метод представляет собой адаптацию какого-либо канонического алгоритма к требованиям сферической симметричности и нулевого спина на узле. Все подходы при некоторых математических различиях идейно близки друг к другу, и нередко провести жесткую границу между одним и другим затруднительно. Качественно, а часто и с высокой точностью количественно, их результаты совпадают. Существенные зависимости одинаковы, чуть упрощая, можно сказать, что различие численных ответов сводится фактически к манипулированию вершинными поправками¹³.

Описанный в предыдущих разделах путь представляет адаптацию одного из стандартных алгоритмов — это последовательное дифференцирование по "второму" времени и замыкание цепочки с выделением спин-спиновых корреляторов. Ниже кратко описаны некоторые родственные СССП подходы.

8.1. Матричный проекционный метод

В принципе, проекционный метод Цванцига–Мори–Церковникова [104–111] универсален, в том смысле, что его соответствующий вариант может быть использован для состояний как с нулевым, так и с ненулевым средним спином на узле. Ниже изложена возможная схема его адаптации для сферически-симметричного случая [61]. Это вариант наиболее близок к СССП, а при некоторых упрощениях прямо переходит в СССП. Поэтому ниже он описан чуть более детально.

Сначала приведём базовые уравнения метода в общем виде.

Пусть для набора операторов $\hat{A}_i$, ($i = 1-n$) вычисляются двухвременные запаздывающие функции Грина

$$G_{ij} = \langle \hat{A}_i | \hat{A}_j \rangle_{\omega+i\delta} = -i \int_0^\infty dt \exp(i\omega t) \langle [\hat{A}_i(t), \hat{A}_j^+] \rangle. \quad (25)$$

Здесь i — не индекс узла, как выше, а номер оператора. Операторы $\hat{A}_i$ образуют вектор $\mathbf{A} = \{\hat{A}_1 \dots \hat{A}_n\}$.

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

Введём теперь вектор $\mathbf{B} = \hat{B}_1 \dots \hat{B}_n$ операторов $\hat{B}_i$, возникающих в цепочке уравнений для функций Грина

¹³ Поскольку этот раздел посвящён не конкретным результатам, а методам — аналогам СССП, в нём будут упомянуты работы, относящиеся не только к квадратной решётке, но и к другой геометрии.

$\mathbf{B} = [\mathbf{A}, \hat{H}]$ ($\hat{H}$ — гамильтониан), а также энергетическую матрицу $\Omega = \langle [\mathbf{B}, \mathbf{A}^+] \rangle$, определяемую коммутаторными средними $\Omega_{ij} = \langle [\hat{B}_i, \hat{A}_j^+] \rangle$.

Тогда можно показать, что аналог уравнения Дайсона для $\mathbf{G}$ имеет следующий вид

$$\mathbf{G} \times (\omega - \mathbf{K}^{-1}\Omega - \mathbf{K}^{-1}\mathbf{L}^{\text{irr}}) = \mathbf{K}, \quad (26)$$

где матрица неприводимых частей

$$\mathbf{L}^{\text{irr}} = \langle \mathbf{B}|\mathbf{B}^+ \rangle - \langle \mathbf{B}|\mathbf{A}^+ \rangle \mathbf{G}^{-1} \langle \mathbf{A}|\mathbf{B}^+ \rangle, \quad (27)$$

а её элементы

$$L_{ij}^{\text{irr}} = \langle \hat{B}_i|\hat{B}_j^+ \rangle - \langle \hat{B}_i|\hat{A}_s^+ \rangle (\hat{G}^{-1})_{st} \langle \hat{A}_t|\hat{B}_j^+ \rangle. \quad (28)$$

Теперь вернёмся к сферически-симметричному подходу. Введём обозначения для последовательных коммутаторов

$$D_n^z = [S_n^z, \hat{H}]; \quad W_n^z = [[S_n^z, \hat{H}], \hat{H}] = [D_n^z, \hat{H}]. \quad (29)$$

Тогда первые два шага в цепочке уравнений для функции Грина (8) и (9) запишутся в компактном виде

$$\omega \langle S_n^z | S_m^z \rangle = \langle D_n^z | S_m^z \rangle, \quad (30)$$

$$\omega \langle D_n^z | S_m^z \rangle = \langle [D_n^z, S_m^z] \rangle + \langle W_n^z | S_m^z \rangle. \quad (31)$$

Здесь частотные индексы для простоты опущены.

Далее в стандартном алгоритме СССРП (описан в разделе 5) из трёхузельных членов в правой части (31) выделяются спин-спиновые корреляционные функции с вершинными поправками. В проекционном методе реализуется несколько иной путь. После преобразования Фурье система уравнений (30), (31) приобретает вид

$$\omega \langle S_q^z | (S_q^z)^+ \rangle = \langle D_q^z | (S_q^z)^+ \rangle, \quad (32)$$

$$\omega \langle D_q^z | (S_q^z)^+ \rangle = F_q + \langle W_q^z | (S_q^z)^+ \rangle. \quad (33)$$

Конкретные выражения для D_q^z , F_q и W_q^z зависят от модели (J_1 , $J_1 - J_2$ или $J_1 - J_2 - J_3$), и мы не будем их здесь приводить. В частности, F_q — это числитель функции Грина (11). Подчеркнём, что пока уравнения (32), (33) — точные.

Теперь перейдём к реализации проекционного метода. Ограничимся базисом из двух операторов, тогда их выбор очевиден: $\hat{A}_1 = S_q^z$, $\hat{A}_2 = D_q^z$. В этом базисе входящие в (26) величины приобретают вид

$$\mathbf{K} = \begin{vmatrix} 0 & F_q \\ F_q & 0 \end{vmatrix}, \quad (34)$$

$$\mathbf{K}^{-1}\Omega = \begin{vmatrix} 0 & \omega_q^2 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad (35)$$

где $\omega_q^2 = F_q^{-1} \langle W_q^z | (D_q^z)^+ \rangle$, и матрица неприводимых частей

$$\mathbf{L}^{\text{irr}} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}} \end{vmatrix}. \quad (36)$$

Тогда в левой части (26)

$$(\omega - \mathbf{K}^{-1}\Omega - \mathbf{K}^{-1}\mathbf{L}^{\text{irr}}) = \begin{vmatrix} \omega & -\omega_q^2 - F_q^{-1} \langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}} \\ -1 & \omega \end{vmatrix}. \quad (37)$$

И окончательно уравнение (26) приобретает вид

$$\begin{vmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \omega & -\omega_q^2 - F_q^{-1} \langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}} \\ -1 & \omega \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & F_q \\ F_q & 0 \end{vmatrix}. \quad (38)$$

Решение пары уравнений, относящихся к верхней строчке матрицы $\mathbf{G}$

$$\omega G_{11} - G_{12} = 0, \quad (39)$$

$$-G_{11} [(\omega_q^2 + F_q^{-1} \langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}})] = F_q \quad (40)$$

даёт функцию Грина $G_{11} = G^{zz}(\omega, \mathbf{q})$ ¹⁴

$$G_{11} = G^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{F_q}{\omega^2 - [(\omega_q^2 + F_q^{-1} \langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}})]}. \quad (41)$$

Это и есть интересующая нас функция Грина.

Здесь необходимо сделать два замечания. Во-первых, при выводе соотношений (34)–(41) строго соблюдены ограничения СССРП, т.е. требования сферической симметрии и нулевого среднего спина на узле. И, во-вторых, все указанные соотношения по-прежнему являются точными.

В выражении (41) величина ω_q имеет смысл среднего полевого спектра спиновых возбуждений, а учёт $\langle W_q^z | (W_q^z)^+ \rangle^{\text{irr}}$ приводит к выходу за среднее поле, в частности, к возникновению затухания.

Можно показать [61], что если при последовательном вычислении ω_q сделать ряд упрощений, то полученное выражение сводится к стандартному спектру СССРП (с вершинными поправками). При попытке же продвинуться дальше с неизбежностью возникает вывод о $\mathbf{q}$ -зависимости вершинных поправок. Однако прямое определение её вида наталкивается на существенные математические трудности.

Частично эти трудности можно преодолеть в полуфеноменологическом подходе, если предположить физически естественную $\mathbf{q}$ -зависимость вершин (детали в [61]) и учесть её в полной процедуре самосогласования. Уже такой простейший вариант существенно уточняет количественные результаты СССРП.

Это касается, в частности, предела нулевой температуры в модели с одним обменом, т.е. точки $J_2 = J_3 = 0$, $T = 0$, детально изученной альтернативными, главным образом численными, методами. Здесь базовый вариант СССРП в зависимости от выбора вершин даёт хорошее согласие с численными, данными либо только по энергии (т.е. по первому коррелятору), либо только по эффективной намагниченности (по коррелятору на бесконечности). Учёт $\mathbf{q}$ -зависимости вершин устраняет указанную проблему.

Некоторые другие способы "тонкой настройки" СССРП описаны в разделе 9.

¹⁴ Здесь для ясности сохранены оба верхних индекса у функции Грина G^{zz} .

8.2. Метод непрерывной дроби и другие

Метод непрерывной (цепной) дроби основан на использовании техники проекционных операторов Мори [108, 109] для двухвременных запаздывающих функций Грина вида (7) (аналогично разделам 5 и 8.1). Этот метод применялся в рамках t - J модели на треугольной [22] и квадратной [87, 112] решётках, а также для различных вариаций модели Гейзенберга на треугольной решётке ($S = 1/2 J_1$ [21], $S = 1 J_1 - J_2$ [24] и $S = 1 J_1 - J_3$ [25]).

В рамках этого метода спиновую функцию Грина можно представить в виде непрерывной дроби (см., например, [87]):

$$G^{zz}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega - E_0 - \frac{V_0}{\omega - E_1 - \frac{V_1}{\ddots}}}, \quad (42)$$

где в общем случае элементы E_i и V_i вычисляются с помощью рекурсивной процедуры:

$$[A_n, H] = E_n A_n + A_{n+1} + V_{n-1} A_{n-1}, \quad (43)$$

$$E_n = ([A_n, H], A_n^\dagger) (A_n, A_n^\dagger)^{-1}, \quad (44)$$

$$V_{n-1} = (A_n, A_n^\dagger) (A_{n-1}, A_{n-1}^\dagger)^{-1}. \quad (45)$$

Операторы A_i образуют ортогональный набор, удовлетворяющий условию $(A_i, A_j^\dagger) \propto \delta_{ij}$, где введено обозначение:

$$(A, B) = i \int_0^\infty dt \langle [A(t), B] \rangle. \quad (46)$$

Для спиновых моделей стартовая точка рекурсии выбирается в виде

$$V_{-1} = 0, \quad A_0 = S_{\mathbf{q}}^z, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (47)$$

Дальнейшие вычисления в перечисленных работах сводятся к обрыву дроби на втором шаге, т.е. выбору приближения $V_1 = 0$. Подобное приближение фактически эквивалентно пренебрежению четырёхузельными (и выше) функциями Грина. Возникающие трёхузельные функции Грина вида $S_i^z S_m^+ S_n^-$ расщепляются обычным для СССР путём — введением вершинных поправок. Метод строго удовлетворяет условиям СССР благодаря учёту требования нулевой намагниченности на узле:

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_n^- S_n^+ \rangle = 0. \quad (48)$$

Как легко показать, это ограничение эквивалентно условию констрейнта (в частности, для $S = 1/2$ $\langle S_n^2 \rangle = 3/4$).

Система уравнений для спиновых корреляторов совместно с требованием констрейнта (48) решается самоогласованно. Если выбрана только одна вершинная поправка, система уравнений замкнута, и её решение возможно без дополнительных условий. Однако если используются две вершинные поправки, то возникает дополнительная свобода: количество переменных превосходит количество уравнений. В этом случае появляется необходимость введения дополнительных ограничений для решения, например, требования воспроизведения ре-

зультатов расчётов методом точной диагонализации для значения коррелятора c_g [21].

В литературе можно встретить также упоминания метода дифференцирования по обоим временам функции Грина и метода формально точного решения (общие обзоры см. в [113, 114]), модифицированных для учёта сферической симметрии. Эти подходы (они не будут описаны здесь детально) в конечном счёте сводятся к аналогичным расщеплениям и такому же выражению для функции Грина, как везде выше.

9. "Тонкая настройка" вычислений

Как уже сказано выше в разделе 6, метод СССР, хотя довольно изощрённый и громоздкий, позволяющий описать множество эффектов в низкоразмерных магнетиках, всё-таки является среднеполевым подходом. Определить затухание спиновых возбуждений в рамках его базовой версии невозможно.

Исправить этот недостаток можно только феноменологически [50, 54, 55, 115] (или, правильнее сказать, полуфеноменологически, см. пояснения ниже). Один из таких подходов был упомянут выше в разделе 8.1. Далее описан ещё один возможный путь.

В выражение для функции Грина (11) вводятся действительная и мнимая перенормировки, и оно приобретает вид

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - M(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (49)$$

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \text{Re } M + i \text{Im } M.$$

Вид (49) кажется интуитивно очевидным. Это, однако, формально точное выражение для функции Грина $\langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_\omega$. Оно может быть получено методом неприводимых функций Грина (детали см. в разделе 8). Здесь $M(\mathbf{q}, \omega)$ — фурье-образ новой сложной функции Грина, аналитически свойства которой такие же, как у $G^z(\mathbf{q}, \omega)$ [116]. Функция $M(\mathbf{q}, \omega)$ отвечает трёхузельной неприводимой запаздывающей функции Грина и описывает распад спинового возбуждения.

Прямое вычисление $M(\mathbf{q}, \omega)$ даже для самых простых моделей наталкивается на существенные математические трудности, поэтому приходится прибегать к полуфеноменологическому рассмотрению.

Запишем (49) в несколько ином виде

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (50)$$

В (50) $\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 - \text{Re } M_{\mathbf{q}}$ даёт эффективный перенормированный спектр спиновых волн (если пренебречь зависимостью $\text{Re } M_{\mathbf{q}}$ от ω). Мнимая же часть перенормировки является нечётной функцией ω и в (50) записана в виде $\text{Im } M = -\omega\gamma(\mathbf{q}, \omega)$, что удобно для конкретных вычислений (таким образом, $\gamma(\mathbf{q}, \omega)$ — чётная функция ω).

Необходимое пояснение. Слово "полуфеноменологический" употреблено в следующем смысле. С одной стороны, функциональный вид действительной и мнимой перенормировок и коэффициенты при них не вычисляются напрямую, а вводятся "снаружи" и определяются с учётом дополнительных соображений и ограничений. Но, с другой стороны, вклады от перенормировок на

общих основаниях включены в полную процедуру самосогласования.

Введение перенормировок позволяет улучшить количественные результаты СССРП, а иногда и описать эффекты, в принципе недоступные с исходной функцией Грина (11). Опуская технические детали и ограничиваясь лишь базовыми ссылками, приведем два примера, оба относятся к модели $J_1 - J_2$.

Ширина области спиновой жидкости. При $T = 0$ СССРП в базовом варианте правильно определяет последовательность фаз с дальним порядком и без него на всём $J_1 - J_2$ круге (см. рис. 3).

В том числе это верно для первой четверти круга $J_1 > 0, J_2 > 0$. При $J_1 \gg J_2$ СССРП предсказывает АФМ фазу с дальним порядком, при $J_1 \sim J_2$ — спиновую жидкость (spin liquid, SL) без дальнего порядка и при $J_1 \ll J_2$ — страйп-фазу с дальним порядком.

Переходы АФМ-SL и SL-страйп на квадратной решётке являются каноническими, хрестоматийными примерами квантовых фазовых переходов [38], поэтому они детально изучены различными аналитическими и численными методами. Точки переходов, а следовательно, и ширина спин-жидкостной области считаются надёжно установленными. СССРП же с функцией Грина (11) завышает ширину этой области.

Однако уже простейшая перенормировка вида (50) с $\text{Re}M = 0, \gamma(\mathbf{q}, \omega) = \text{const}$ при умеренных величинах γ возвращает SL-область к консенсусным значениям.

Скейлинг спиновой восприимчивости. Ещё на начальном этапе изучения ВТСП в квазидвумерных купратах был обнаружен скейлинг восприимчивости ([117], см. также соответствующий раздел [118]).

Скейлинговый закон относится к так называемой "локальной спиновой восприимчивости" $\chi_{2D}(\omega, T)$ — мнимой части восприимчивости, проинтегрированной по квазиимпульсу

$$\chi_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} \text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega, T). \quad (51)$$

Оказывается, что зависимость χ_{2D} от ω и T в широком диапазоне допирований хорошо описывается следующим выражением

$$\frac{\chi_{2D}(\omega, T)}{\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0)} = f\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad (52)$$

где скейлинговая функция f обычно аппроксимируется арктангенсом от кубического полинома с коэффициентами, зависящими от допирования.

Легко показать, что в базовом варианте СССРП, без затухания спиновых возбуждений, этот эффект не может быть описан в принципе. Но уже простая перенормировка вида (50), где $\text{Re}M = 0$, а параметр затухания зависит только от температуры (причём линейно), позволяет воспроизвести скейлинг. Более того, в данном случае задачу при фиксированных значениях обменов удаётся решить даже аналитически. Что касается действительной перенормировки, она позволяет количественно точнее описать эксперимент для χ_{2D} .

Заметим, что в более сложных случаях линейная зависимость γ от температуры, по необходимости следующая из скейлинга, служит дополнительным ограничением при выборе перенормировок.

10. Сферически-симметричный самосогласованный подход и квантовая запутанность

СССП может быть применён не только к модели Гейзенберга в её различных вариантах, но и к более сложным конструкциям с локализованными спинами. Это, в частности, спин-орбитальная модель (спин-псевдоспиновая, модель Кугеля–Хомского [119, 120]).

Исследования этой модели, предложенной ещё в 1970-е годы, в последнее время переживают активный подъём. Тому причиной два обстоятельства.

Во-первых, уже в нынешнем веке были наконец-то экспериментально обнаружены предсказываемые моделью орбитальные волны [121–124].

И, во-вторых, спин-орбитальная модель оказалась чрезвычайно удобным полигоном для исследования многочастичной квантовой запутанности [125–132]. В данной области аналитическое продвижение почти невозможно. Численный результат получить тоже непросто, так как необходимо определить матрицу плотности макроскопической системы. Особенности спин-псевдоспиновой модели — естественное разделение на две подсистемы, математическая тождественность операторов спина и псевдоспина и наличие вычислительных спиновых пакетов высокого уровня — упрощают эту работу. Но и здесь ресурсные потребности принуждают ограничиться малым размером системы.

Анализ же в рамках СССРП, хотя не даёт возможности строго определить меру запутанности, позволяет указать на "подозрительные области" и качественно предсказать ожидаемые результаты [133, 134]. А для описания стандартных магнитных и термодинамических свойств модели он тем более пригоден.

Гамильтониан спин-псевдоспиновой модели имеет вид [119, 120]

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{S}_i \hat{S}_j + I \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{T}_i \hat{T}_j + K \sum_{\langle i, j \rangle} (\hat{S}_i \hat{S}_j)(\hat{T}_i \hat{T}_j). \quad (53)$$

В каждом узле решётки закреплён спин $S = 1/2$ и псевдоспин $T = 1/2$. Внутренние взаимодействия в спиновой и псевдоспиновой подсистемах имеют гейзенберговский вид, взаимодействие между подсистемами — последнее слагаемое в (53). Как и в гамильтониане (1), $\langle i, j \rangle$ обозначает суммирование по парам ближайших соседних узлов.

Выражение (53) представляет собой наиболее симметричный, $SU(2) \times SU(2)$ вид модели, в других вариантах псевдоспиновая часть может быть иной.

Пусть рассматриваются низкоразмерные (1D цепочка и 2D квадратная) решётки при $T > 0$. В соответствии с теоремой Мермина–Вагнера [16] для несвязанных подсистем ($K = 0$) дальний порядок в них невозможен. Естественно считать, что с включением междосистемного взаимодействия $K \neq 0$ роль температурных и квантовых флуктуаций только растёт, и дальнего порядка нет. Этим обосновывается применение схемы СССРП.

Таким образом, исходные предположения идейно такие же, как и в модели Гейзенберга: одноузельные средние для спина и псевдоспина равны нулю $\langle \hat{S}_i \rangle = \langle \hat{T}_i \rangle = 0$, а корреляционные функции $\langle \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta \rangle$, $\langle \hat{T}_i^\alpha \hat{T}_j^\beta \rangle$ и $\langle \hat{S}_i^\alpha \hat{T}_j^\beta \rangle$ равны нулю при $\alpha \neq \beta$ и не зависят от α при $\alpha = \beta$.

Необходимо рассматривать три связанные между собой функции Грина: спин-спиновую $\langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle_\omega$, спин-псевдоспиновую $\langle T_q^z | S_{-q}^z \rangle_\omega$ и псевдоспин-псевдоспино-

вую $\langle T_{\mathbf{q}}^z | T_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$. Можно показать [135], что эффекты взаимодействия спиновых и орбитальных степеней свободы, в том числе запутанность [126, 136], выражены наиболее ярко и наглядно при $J = I > 0$ и $K < 0$. При $J = I$, очевидно, $\langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = \langle T_{\mathbf{q}}^z | T_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$, и остаются две функции Грина.

Однако и с этими упрощениями вычисления по схеме (8)–(9) провести невозможно, так как коммутирование спинового (псевдоспинового) оператора с последним слагаемым в (53) заведёт слишком далеко, и замкнуть цепочку уравнений движения не удастся. Тем не менее, упрощая член межподсистемного взаимодействия в духе среднего поля (с сохранением внутриузельных спин-псевдоспиновых взаимодействий, детали см. в [133]), можно получить замкнутую систему, решение которой приводит к нетривиальным результатам.

При учёте взаимодействия подсистем спин-спиновая $G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega}$ и спин-псевдоспиновая функции Грина приобретают вид

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = \frac{F_{\text{ac}}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\text{ac}}^2(\mathbf{q})} + \frac{F_{\text{opt}}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{q})}, \quad (54)$$

$$R^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle T_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle_{\omega} = \frac{F_{\text{ac}}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\text{ac}}^2(\mathbf{q})} - \frac{F_{\text{opt}}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\text{opt}}^2(\mathbf{q})}. \quad (55)$$

Конкретные выражения для числителей и спектров в (54) и (55), несущественные для дальнейшего изложения, можно найти в [133].

Основные результаты СССРП для низкоразмерных спин-псевдоспиновых моделей следующие. При фиксированной температуре $T > 0$, с ростом модуля межподсистемного взаимодействия $|K|$ (напомним, $K < 0$), начиная с некоторого граничного значения K_c , появляются ненулевые спин-псевдоспиновые корреляторы, внутриузельный $m_0 = \langle S_i^z T_i^z \rangle$ и межузельный $m_g = \langle S_i^z T_{i\mathbf{g}}^z \rangle$, для 2D (рис. 13а).

Границы областей с нулевыми и ненулевыми спин-псевдоспиновыми корреляторами в 1D и 2D показаны на рис. 13б. Обращает на себя внимание контринтуитивное поведение границы в одномерном случае — в некотором диапазоне величины межподсистемного взаимодействия с ростом температуры наблюдается возвратный переход.

Одновременно с появлением межподсистемных корреляторов спектр возбуждений расщепляется на акустическую и оптическую ветви (рис. 14а) (2D). При малых $|K|$ расщепление заметно главным образом в симметричных точках зоны Бриллюэна Γ и Q . При больших $|K|$ верхние участки ветвей спектра образуют практически бездисперсионную область (см. тот же рис. 14а).

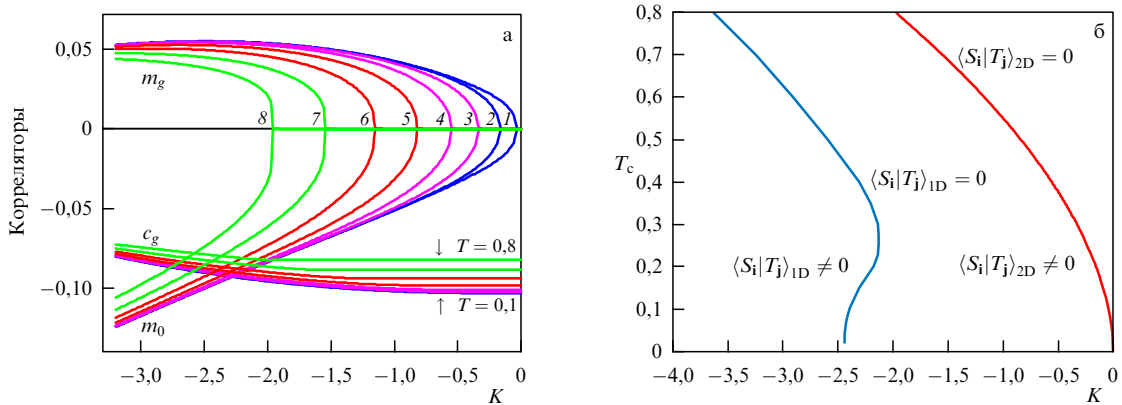


Рис. 13. (а) 2D решётка. Зависимость спин-спиновых коррелятора c_g на ближайших соседях, спин-псевдоспиновых корреляторов — внутриузельного m_0 и межузельного m_g от температуры и межподсистемного обмена K . Кривые, образующие "нос утюга" — m_0 ($m_0 < 0$) и m_g ($m_g > 0$). Цифры 1–8 нумеруют температуру. 1 — $T = 0,1$, 2 — $T = 0,2$ и т.д. Нижние кривые — c_g (указаны граничные значения T). (б) Фазовая диаграмма модели для 1D и 2D. Показаны границы областей нулевых и ненулевых спин-псевдоспиновых корреляторов m_0 и m_g (т.е. на рисунке $\mathbf{j} = \mathbf{i} + \mathbf{g}$). Обращают на себя внимание особенности одномерного случая (см. текст). (Данные из [133, 134].)

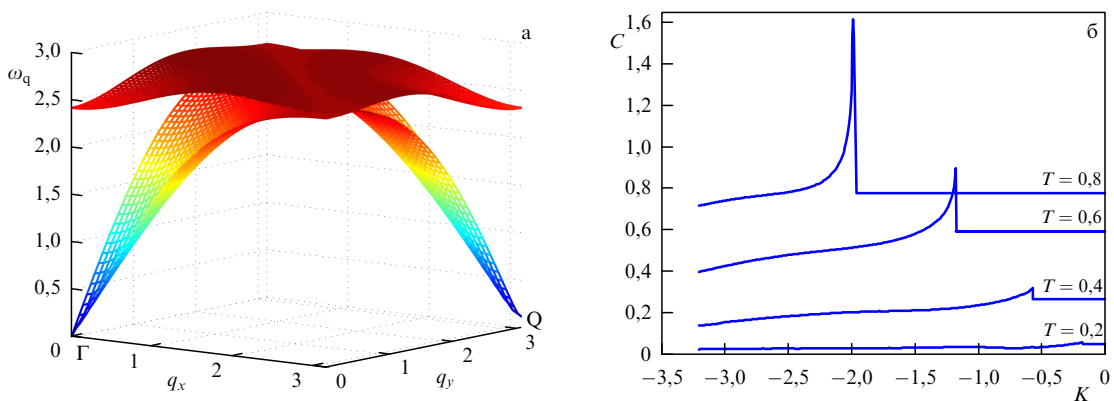


Рис. 14. (а) 2D решётка. Спектры элементарных возбуждений $\omega_{\text{ac}}(\mathbf{q})$ и $\omega_{\text{opt}}(\mathbf{q})$ при $T = 0,3$ и сильном расщеплении $K = -3,0$. Верхние участки ветвей спектра образуют почти бездисперсионную область. Показана четверть полной зоны Бриллюэна. (б) 2D решётка. Зависимость теплоёмкости при фиксированной температуре от величины межподсистемного взаимодействия K . Горизонтальные участки отвечают нулевым значениям спин-псевдоспиновых корреляторов. (Данные из [133, 134].)

В точке перехода испытывает скачок также теплоёмкость системы, тем больший, чем больше критическое значение $|K|$ (рис. 146) (2D). Одновременно претерпевают скачки обе восприимчивости, спин-спиновая $\chi_{ss}(\mathbf{q}, \omega) = -G^z(\mathbf{q}, \omega)$ и спин-псевдоспиновая $\chi_{st}(\mathbf{q}, \omega) = -R^z(\mathbf{q}, \omega)$.

Совокупность указанных выше индикаторов может, по-видимому, считаться свидетелями запутанности (entanglement witnesses), хотя теория свидетелей запутанности в конденсированной среде пока далека от завершения (см. недавний обзор [137]).

При точном численном решении задачи для малой одномерной цепочки [131, 132] выводы, полученные в СССР, в том числе относительно межподсистемной запутанности, подтверждаются. В 2D имеющиеся вычислительные ресурсы даже при минимально разумном числе частиц не позволяют определить эволюцию запутанности.

Замечание в заключение раздела. Спин-псевдоспиновая модель для квадратной решётки качественно напоминает модель Гейзенберга для двух взаимодействующих плоскостей. На одной из плоскостей локализованы спины, на другой — псевдоспины. Однако взаимодействие между ними имеет не гейзенберговский, а более сложный вид (последнее слагаемое в (53)). Тем не менее некоторые эффекты в этих двух моделях аналогичны (см. раздел 12).

11. Модели с допированием и спиновый полярон

За четверть века "борьбы за истинную теорию ВТСП" было предложено множество сценариев нефононного спаривания. Сколько-нибудь детальное описание этой области представляет собой геркулесов труд (краткий недавний обзор с обширным списком литературы можно найти в [138]). Здесь будет кратко затронута только одна сторона вопроса, имеющая отношение к предмету настоящей работы, а именно, концепция спинового полярона и спин-поляронного спаривания (ранние обзоры можно найти в [139–141], недавний обзор с многочисленными ссылками — [142], см. также соответствующий раздел всесторонней книги по ВТСП [118]).

Итак, пусть рассматривается какая-либо теоретическая модель, в которой есть магнитный фон и сильно взаимодействующие с ним носители заряда. Это может быть $p-d$ модель [142], решётка Кондо [139, 140], различные варианты модели Хаббарда [143–147], базовая $t-J$ модель и её усложнения [22, 31, 87, 88, 112, 148–151] и другие. Наиболее часто в литературе встречается $t-J$ модель.

Носитель заряда возмущает АФМ фон, тем самым повышая энергию (эффект был рассмотрен ещё в 1960-х гг. [152]). Это проще показать на дырочном примере. Представим шахматную доску с выдернутой одной клеткой. При передвижении образовавшейся дыры по доске шахматный порядок очевидно нарушается, растёт число соседствующих клеток одного цвета (для ФМ такое рассмотрение очевидно не имеет смысла).

Разумеется, в продвинутых моделях картина гораздо сложнее, более того, так называемые петли Трагмана¹⁵ ослабляют приведённую аргументацию [153]. Однако

базовая идея остаётся прежней — двигающийся над АФМ фоном носитель существенно его искажает. Носитель плюс возмущение фона образуют "хорошую" квазичастицу — спиновый полярон.

Идея спин-поляронного спаривания, реализованная в самых разных моделях и самыми разными теоретическими методами, в основе своей тоже проста. Два полярона, расположенные рядом, внесут меньшее возмущение в магнитный фон, нежели когда они далеки друг от друга. Такой эффект может пересилить кулоновское отталкивание (в отличие от БКШ, пара в этом случае получается локальной). Подчеркнём ещё раз, что изложенное выше есть лишь предельно упрощённое, примитивизированное описание.

Свойства спин-поляронной системы зависят от затронутого спектра носителей, вида их взаимодействия с фоном и — что важно для настоящей работы — структуры магнитной подсистемы. Ясно, что носитель заряда, живущий на шахматном, неелевском АФМ фоне, и такой же носитель на фоне синглетного состояния с сильными АФМ корреляциями образуют существенно разные поляроны.

И здесь открывается область применения СССР и аналогичных методов. Выше упомянуты именно те работы, в которых для спиновой подсистемы используется сферически-симметричный подход.

В рамках грубой классификации можно сказать, что в этих работах применяются три алгоритма.

Первый, наиболее сложный (см., например [87, 142]). Записываются выражения как для обычных зарядовых, так и для спиновых функций Грина (в некоторых моделях это могут быть функции Грина в операторах Хаббарда). Далее в каком-либо — всегда приближённом — подходе эти функции Грина вычисляются с учётом взаимодействия подсистем и ограничений, накладываемых на спиновую подсистему сферически-симметричным подходом. На выходе возникает довольно громоздкая система самосогласованных уравнений, решаемая численно.

Второй (см., например [139–141]). Детально рассматривается только зарядовая подсистема, но с учётом её взаимодействия со спиновой. Это требует привлечения спин-спиновых корреляторов. А последние заимствуются из вычислений для недопированной, но фрустрированной модели J_1-J_2 . Соединительным мостом служит предположение об аналогии между (малым) допированием в моделях со свободными носителями и фрустрацией в чисто спиновой модели. Такая идея физически естественна: движущаяся дырка разрушает магнитный порядок, в спиновой модели то же происходит с ростом фрустрации. Кроме того, она основана на давно обнаруженном сходном характере изменения спиновых корреляторов в зависимости от допирования и от фрустрации [154]. И хотя указанное предположение не является строго доказанным, оно считается достаточно обоснованным.

И, наконец, *третий алгоритм* (см., например [147, 150]). Он аналогичен второму в том смысле, что из спиновой задачи берётся только наиболее существенное. Степень математической детализации этого наиболее существенного может быть разной, но в основе всегда лежит простая физическая идея. При $T > 0$, в отличие от двух-подрешёточного антиферромагнитного состояния, в синглетном состоянии с АФМ корреляциями открыта

¹⁵ После нескольких обходов квадрата дырка перемещается по диагонали, оставляя за собой невозмущённую магнитную конфигурацию.

щадь в точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ зоны Бриллюэна и, соответственно, конечна АФМ корреляционная длина.

Подчеркнём, что приведённые выше ссылки не претендуют на полноту, а служат лишь иллюстрацией использования сферически-симметричных подходов в концепции спинового полярона.

12. Переход в 3D

В принципе, СССР даёт разумное описание и трёхмерного случая как для модели J_1 [155], так и для $J_1 - J_2$ [156]. Но эта линия по понятным причинам не получила дальнейшего развития — ограничений теоремы Мермина–Вагнера в 3D нет, и стандартные методы там проще и удобней.

В рамках СССР представляет интерес именно переход от двумерного к трёхмерному случаю, т.е. от квадратной решётки к кубической. В данном случае корректнее говорить о переходе к стопке квадратных решёток.

Первый шаг в этом направлении сделан в [15, 50], где рассмотрены две взаимодействующие плоскости. Гамильтониан такой задачи имеет приведённый ниже вид (56) для случая $n = 1, 2$.

В [15, 50] декларирована цель количественного описания нейтронных экспериментов для ВТСР купратов с двумя близко расположенными магнитными плоскостями. Поэтому подробное изложение её результатов в контексте настоящего обзора не кажется необходимым. Упомянем, однако, один важный, хотя интуитивно и очевидный результат — при включении межплоскостного взаимодействия спектр спиновых возбуждений расщепляется на оптическую и акустическую ветви. Качественно эффект аналогичен наблюдаемому в спин-псевдоспиновой модели (раздел 10). Конечно, количественного совпадения — в силу разного вида межплоскостного взаимодействия — нет.

Детально переход $2D \rightarrow 3D$ изучен в [14]. В этой работе рассмотрена трёхмерная стопка плоских квадратных решёток с регулируемым взаимодействием между ними. В каждой плоскости учтены первый и второй ближайшие АФМ обмены, т.е. наличествует фрустрация.

Таким образом, гамильтониан модели имеет вид

$$\hat{H} = \sum_n \left(J_1 \sum_{\langle i, j \rangle} \hat{S}_{i,n} \hat{S}_{j,n} + J_2 \sum_{[i, j]} \hat{S}_{i,n} \hat{S}_{j,n} \right) + J_{\perp} \sum_{i,n} \hat{S}_{i,n} \hat{S}_{i,n+1}. \quad (56)$$

Здесь индекс n нумерует различные квадратные плоскости, в каждой плоскости, как и в базовом гамильтониане (1), $\langle i, j \rangle$ обозначает суммирование по парам ближайших соседних узлов, а $[i, j]$ — по парам вторых соседей. Обмен $J_{\perp}$ есть межплоскостное взаимодействие. Рассматривается первая четверть $J_1 - J_2$ круга (см. рис. 3), т.е. первый и второй обмены антиферромагнитные: $J_1 > 0$ (далее принято $J_1 = 1$) и $J_2 > 0$. Межслоевой обмен $J_{\perp}$ также принят неотрицательным, $J_{\perp} \geq 0$.

Для таких параметров на одной плоскости, т.е. при $J_{\perp} = 0$, при температуре $T = 0$ в области $J_2 \simeq 1/2$ реализуется спин-жидкостная фаза без дальнего порядка. Со стороны малых $J_2 < 1/2$ она граничит с АФМ фазой, а со стороны больших $J_2 > 1/2$ — со страйп-фазой¹⁶. В чисто

¹⁶ Напомним, $J_2 = 1/2$ — точка перехода АФМ-страйп в классическом пределе.

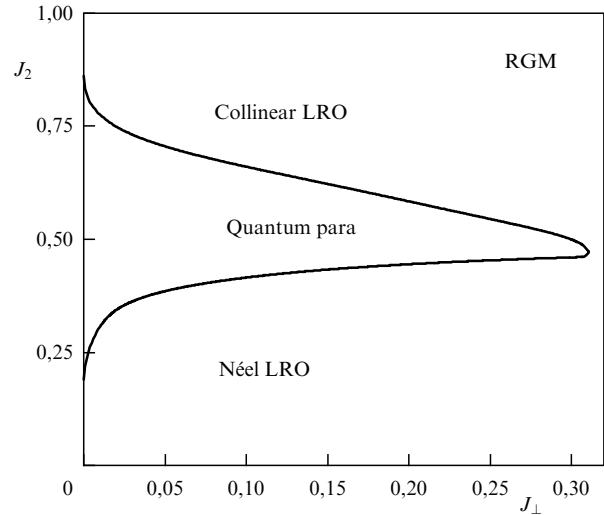


Рис. 15. Фазовая диаграмма для стопки квадратных плоскостей в осях $J_{\perp}, J_2$ ($J_1 = 1$) из [14]. Здесь Néel LRO — АФМ фаза, quantum para — спиновая жидкость и collinear LRO — страйп-фаза. Метка RGM в правом верхнем углу указывает на метод вычисления (RGM, Rotation-invariant Green's function Method, это англоязычное обозначение СССР). При $J_{\perp} \geq 0,3J_1$ спиновой жидкости не остаётся. (Данные из [14].)

трёхмерной ситуации спин-жидкостной фазы нет. Поэтому исчезновение области спиновой жидкости с ростом $J_{\perp}$ служит естественным критерием "подлинной трёхмерности".

Опуская технические детали, позволяющие реализовать сферически-симметричный подход для стопки квадратных решёток (в том числе алгоритм определения вершинных поправок), приведём на рис. 15 наиболее существенный результат работы [14]. Из рисунка видно, что с ростом $J_{\perp}$ ширина спин-жидкостной области убывает (сначала быстро, затем несколько медленнее) и при $J_{\perp} \sim 0,3J_1$ спиновой жидкости не остаётся.

Таким образом, уже при достаточно малом взаимодействии между плоскостями эффект, характерный для чисто двумерной системы, полностью исчезает.

13. Влияние анизотропии

Использование СССР не ограничивается изучением изотропного гамильтониана Гейзенберга, но также позволяет учитывать различные виды анизотропии. Хотя следует признать, что влияние анизотропии изучено пока недостаточно полно. Ниже рассмотрены основные результаты, касающиеся некоторых анизотропных вкладов в гамильтониан (1).

13.1. Магнитное поле

В модели J_1 в рамках СССР учёт влияния магнитного поля $\mathcal{H} = h \sum_i \hat{S}_i^z$ выполнен и для ФМ [34, 86], и для АФМ [157] случая.

При наличии магнитного поля условие равенства трёх корреляторов очевидно нарушается и переходит в $\langle S_{\mathbf{n}}^x S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^x \rangle = \langle S_{\mathbf{n}}^y S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^y \rangle \neq \langle S_{\mathbf{n}}^z S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^z \rangle$.

Это означает появление двух различающихся функций Грина G^{zz} и $G^{xx} = G^{yy}$ и, соответственно, увеличение числа вершинных поправок.

После стандартного для СССР выделения корреляторов функции Грина принимают вид

$$G_q^{xx}(\omega) = \frac{F_{1q}^{xx}}{\omega - \omega_q^+(h)} + \frac{F_{2q}^{xx}}{\omega - \omega_q^-(h)}, \quad (57)$$

$$G_q^{zz}(\omega) = \frac{F_q^{zz}}{\omega^2 - (\omega_q^z)^2}. \quad (58)$$

Явные выражения для числителей функций Грина и спектров спиновых возбуждений приведены в [34, 86, 157]. Магнитное поле полностью снимает вырождение ветвей спиновых возбуждений, формируя три ветви: одна ветвь ω_q^z зависит от магнитного поля косвенно, через перенормирующиеся с магнитным полем корреляторы, две другие — $\omega_q^+(h)$ и $\omega_q^-(h)$ — явно зависят от поля. Свидетельства такого расщепления наблюдаются в нейтронном эксперименте [158].

В ФМ случае для 2D и 1D моделей, спина $S = 1/2$, $S \geq 1$ в [34, 86] получены зависимости термодинамических величин (намагниченности, магнитной восприимчивости и удельной теплоёмкости) от магнитного поля и температуры. Обнаружены степенные законы для положения и высоты максимума магнитной восприимчивости, а также показано наличие двух максимумов в температурной зависимости теплоёмкости для $S = 1/2$ и $S = 1$; для $S > 1$, как и в 2D, максимум один. Результаты согласуются с расчётами методом точной диагонализации [159] и квантовым методом Монте-Карло [34].

13.2. Одноионная анизотропия

Одноионная анизотропия (добавка к гамильтониану $\hat{H}_D = D \sum_i (\hat{S}_i^z)^2$, где D — константа одноионной анизотропии) в рамках СССР исследовалась в [36] для 1D ферромагнитного случая.

Для расчётов использовался вариант [160, 161] изложенного в разделе 8.1 матричного проекционного метода в двухоператорном базисе $A^v = (\hat{S}_q^v, i\hat{S}_q^v)(v = +, z)$. При замыкании цепочек уравнений для функций Грина на втором шаге дифференцирования появляются четыре вершинные поправки.

Спектр спиновых возбуждений расщепляется на две ветви: зависящую от параметра анизотропии $\omega_q^{+-}(D)$ и ω_q^{zz} , которая зависит от D косвенно через корреляторы.

Результаты для термодинамических свойств (продольной и поперечной восприимчивостей, удельной теплоёмкости) в широком диапазоне температур согласуются с данными точной диагонализации для конечных цепочек. Отметим, что температурная зависимость теплоёмкости показывает два максимума, если отношение параметра анизотропии D к обменному взаимодействию J_1 превышает характерное значение $D/J_1 > 7,4$, и только один максимум при $D/J_1 < 7,4$.

13.3. Экзотические анизотропии: тетрагональная решётка и компас-модель

Успешное применение метода СССР не ограничивается двумерными системами и классическими задачами, связанными с магнитным полем и одноионной анизотропией. Например, в работе [162] этим методом был описан магнетизм железных пниктидов, которые имеют трёхмерную тетрагональную кристаллическую решётку. В работе [162] исследовался гамильтониан Гейзенберга

на тетрагональной решётке:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (59)$$

$$J_{ij} = J_x \delta_{\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_i \pm \mathbf{a}_x} + J_y \delta_{\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_i \pm \mathbf{a}_y} + J_z \delta_{\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_i \pm \mathbf{a}_z} + J_2 \delta_{\mathbf{R}_j, \mathbf{R}_i \pm \mathbf{d}_{xy}}, \quad (60)$$

где J_x , J_y и J_z — обменные взаимодействия между ближайшими соседями вдоль соответствующих направлений, а J_2 — обменное взаимодействие между вторыми ближайшими соседями в плоскости xy .

В результате для модели (59)–(60) как функции температуры и спина были самосогласованно вычислены двухспиновые корреляционные функции, спектр спиновых возбуждений, температура Нееля и намагниченность. В работе была получена температурная зависимость статической магнитной восприимчивости, включая линейный рост в широком диапазоне температур, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными по неупругому рассеянию нейтронов. Этот эффект объясняется наличием сильного антиферромагнитного ближнего порядка в плоскости xy . Однако установлено, что модель (59)–(60), в которой учитываются межплоскостные взаимодействия, основанные на данных нейтронного рассеяния, не способна корректно описать антиферромагнитный дальний порядок в железных пниктидах: рассчитанные значения температуры Нееля оказались примерно в пять раз выше измеренных. Для более точного описания необходимо расширение модели для учёта взаимодействия локализованных спинов и свободных электронов.

Ещё один пример применения сферически-симметричного подхода к моделям с выраженной анизотропией представлен в исследовании компас-модели [163] на квадратной решётке [164]. Это модель гейзенберговского типа, когда обмены в обе стороны вдоль оси x не равны обменам вдоль оси y . В [164] вычислены термодинамические характеристики двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга с компасным взаимодействием, а также исследована зависимость температуры Нееля от обменных параметров модели. Было установлено, что температура Нееля остаётся конечной даже при симметричном взаимодействии в компас-модели. Кроме того, было объяснено влияние ближнего магнитного порядка на температурные зависимости статических магнитных восприимчивостей.

14. Заключение

Сферически-симметричный самосогласованный подход, возникший полвека назад и получивший существенный импульс к развитию в 1990-х годах, и к настоящему времени представляет собой вполне работоспособный алгоритм, позволяющий исследовать низкоразмерные спиновые модели и модели с допированием при точном учёте теоремных ограничений.

Это вовсе не противоречит использованию альтернативных: спин-волновых, вспомогательных бозонов или фермионов и других — аналитических подходов. В зависимости от условий конкретной задачи более эффективным может оказаться любой из них.

Благодарности. Авторы благодарны К.И. Кугелю, П.А. Алексею, Р.О. Кузяну и А.М. Белемуку за полезные замечания и детальные обсуждения.

15. Приложение. Функция Грина и спектр в сферически-симметричном самосоогласованном подходе

В стандартном варианте СССП — замыкание цепочки уравнений движения на втором шаге — фурье-образ спин-спиновой функции Грина имеет вид

$$G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (61)$$

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 трёх координационных сферах, а выражение для спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ — на первых восьми

$$F_{\mathbf{q}} = 8 \sum_{\mathbf{r} \in \{\mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}\}} J_{\mathbf{r}} (\gamma_{\mathbf{r}} - 1) c_{\mathbf{r}}, \quad (62)$$

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = 2 \sum_{i=1}^{12} \Gamma_i K_i, \quad (63)$$

где $\mathbf{g}$, $\mathbf{d}$ и $2\mathbf{g}$ — векторы первых, вторых и третьих ближайших соседей; $J_{\mathbf{g}}, J_{\mathbf{d}}, J_{2\mathbf{g}}$ есть соответственно J_1, J_2 и J_3 ; $\gamma_{\mathbf{g}} = 1/2(\cos(q_x) + \cos(q_y))$, $\gamma_{\mathbf{d}} = \cos(q_x) \cos(q_y)$, $\gamma_{2\mathbf{g}} = 1/2(\cos(2q_x) + \cos(2q_y))$.

Входящие в выражение для спектра $\omega_{\mathbf{q}}$ (63) решёточные суммы K_i имеют вид:

$$\begin{aligned} K_1 &= J_1 J_2 K_{gd} + J_1 J_3 K_{g,2g} + \\ &\quad + J_1^2 (z_g(z_g - 1)\tilde{c}_g + z_g c_0 + K_{gg}); \\ K_2 &= J_2 J_1 K_{dg} + J_2 J_3 K_{d,2g} + \\ &\quad + J_2^2 (z_d(z_d - 1)\tilde{c}_d + z_d c_0 + K_{dd}); \\ K_3 &= -J_1^2 z_g^2 \tilde{c}_g; \quad K_4 = -J_2^2 z_d^2 \tilde{c}_d; \\ K_5 &= -J_1 J_2 z_g z_d \tilde{c}_g; \quad K_6 = -J_1 J_2 z_g z_d \tilde{c}_d; \\ K_7 &= J_3 J_1 K_{2g,g} + J_3 J_2 K_{2g,d} + \\ &\quad + J_3^2 (z_{2g}(z_{2g} - 1)\tilde{c}_{2g} + z_{2g} c_0 + K_{2g,2g}); \\ K_8 &= -J_3^2 z_{2g}^2 \tilde{c}_{2g}; \quad K_9 = -J_1 J_3 z_g z_{2g} \tilde{c}_g; \\ K_{10} &= -J_3 J_1 z_{2g} z_g \tilde{c}_d; \quad K_{11} = -J_2 J_3 z_d z_{2g} \tilde{c}_d; \\ K_{12} &= -J_3 J_2 z_{2g} z_d \tilde{c}_{2g}; \end{aligned} \quad (64)$$

здесь

$$K_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2} = \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 \neq -\mathbf{r}_2} \tilde{c}_{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}, \quad \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \{\mathbf{g}, \mathbf{d}, 2\mathbf{g}\}. \quad (65)$$

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

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= 1 - \gamma_g; & \Gamma_2 &= 1 - \gamma_d; \\ \Gamma_3 &= 1 - \gamma_g^2; & \Gamma_4 &= 1 - \gamma_d^2; \\ \Gamma_5 &= (1 - \gamma_g)\gamma_d; & \Gamma_6 &= (1 - \gamma_d)\gamma_g; \\ \Gamma_7 &= 1 - \gamma_{2g}; & \Gamma_8 &= 1 - \gamma_{2g}^2; \\ \Gamma_9 &= (1 - \gamma_g)\gamma_{2g}; & \Gamma_{10} &= (1 - \gamma_{2g})\gamma_g; \\ \Gamma_{11} &= (1 - \gamma_d)\gamma_{2g}; & \Gamma_{12} &= (1 - \gamma_{2g})\gamma_d. \end{aligned} \quad (66)$$

В (62), (66) $\gamma_n = (1/z_n) \sum_i \exp(i\mathbf{q}\mathbf{n}_i)$, где сумма берётся по z_n узлам соответствующей координационной сферы. Для 2D квадратной решётки $z_g = z_d = z_{2g} = 4$. В (64), (65) $\tilde{c}_{\mathbf{r}}$ отвечает корреляторам $c_{\mathbf{r}}$, перенормированным вершинными поправками $\alpha_{\mathbf{r}}$, т.е. $\tilde{c}_{\mathbf{r}} = \alpha_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}$. Отметим, что в СССП используется и альтернативная номенклатура группировки слагаемых в (63) (см., например, [57, 58]).

Результаты для моделей $J_1 - J_2$ и J_1 получаются из приведённых выше занулением соответствующих слагаемых.

Список литературы

1. Kondo J, Yamaji K *Prog. Theor. Phys.* **47** 807 (1972)
2. Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* 2-е изд., испр. и доп. (М: Наука, 1975); Пер. на англ. яз. 1-го русск. изд.: Tyablikov S V *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (New York: Plenum Press, 1967) DOI:10.1007/978-1-4899-7182-1
3. Callen H B *Phys. Rev.* **130** 890 (1963)
4. Shimahara H, Takada S *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** 2394 (1991)
5. Barabanov A F, Starykh O A *J. Phys. Soc. Jpn.* **61** 704 (1992)
6. Barabanov A F, Beresovsky V M *J. Phys. Soc. Jpn.* **63** 3974 (1994)
7. Барабанов А Ф, Березовский В М *ЖЭТФ* **106** 1156 (1994); Barabanov A F, Berezovskii V M *J. Exp. Theor. Phys.* **79** 627 (1994)
8. Härtel M et al. *Phys. Rev. B* **78** 174412 (2008)
9. Richter J et al. *J. Phys. Conf. Ser.* **145** 012064 (2009)
10. Härtel M et al. *Phys. Rev. B* **84** 104411 (2011)
11. Hutak T et al. *Eur. Phys. J. B* **95** 93 (2022)
12. Hutak T et al. *Eur. Phys. J. B* **96** 50 (2023)
13. Schmalfuß D, Richter J, Ihle D *Phys. Rev. B* **72** 224405 (2005)
14. Schmalfuß D et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 157201 (2006)
15. Козлов Н А, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **85** 673 (2007); Kozlov N A, Barabanov A F *JETP Lett.* **85** 544 (2007)
16. Mermin N D, Wagner H *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966)
17. Marshall W *Proc. R. Soc. London A* **232** 48 (1997)
18. Starykh O A *Rep. Prog. Phys.* **78** 052502 (2015)
19. Zhou Y, Kanoda K, Ng T-K *Rev. Mod. Phys.* **89** 025003 (2017)
20. Маркина М М и др. *УФН* **191** 358 (2021); Markina M M et al. *Phys. Usp.* **64** 344 (2021)
21. Rubin P, Sherman A *Phys. Lett. A* **334** 312 (2005)
22. Rubin P, Sherman A, Schreiber M *Phys. Lett. A* **372** 5229 (2008)
23. Antsygina T N et al. *Phys. Rev. B* **77** 024407 (2008)
24. Rubin P, Sherman A, Schreiber M *Phys. Lett. A* **374** 3567 (2010)
25. Rubin P, Sherman A, Schreiber M *Phys. Lett. A* **376** 1062 (2012) DOI:10.1016/j.physleta.2012.01.045
26. Rubin P, Sherman A *J. Phys. Conf. Ser.* **833** 012019 (2017) DOI:10.1088/1742-6596/833/1/012019
27. Yu W, Feng S *Eur. Phys. J. B* **13** 265 (2000)
28. Bernhard B H, Canals B, Lacroix C *Phys. Rev. B* **66** 104424 (2002)
29. Müller P, Zander A, Richter J *Phys. Rev. B* **98** 024414 (2018)
30. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Eur. Phys. J. B* **90** 48 (2017)
31. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Eur. Phys. J. B* **91** 195 (2018)
32. Müller P et al. *Phys. Rev. B* **96** 174419 (2017)
33. Müller P et al. *Phys. Rev. B* **100** 024424 (2019)
34. Junger I J et al. *Phys. Rev. B* **77** 174411 (2008)
35. Suzuki F, Shimata N, Ishii C *J. Phys. Soc. Jpn.* **63** 1539 (1994)
36. Junger I J, Ihle D, Richter J *Phys. Rev. B* **72** 064454 (2005)
37. Auerbach A, Arovas D P "Schwinger bosons approaches to quantum antiferromagnetism", in *Introduction to Frustrated Magnetism. Materials, Experiments, Theory* (Springer Ser. in Solid-State Sciences, Vol. 164, Eds C Lacroix, P Mendels, F Mila) (Berlin: Springer, 2011) p. 365, DOI:10.1007/978-3-642-10589-0_14
38. Sachdev S *Quantum Phase Transitions* 2nd ed. (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2011) DOI:10.1017/CBO9780511973765
39. Дзялошинский И Е *ЖЭТФ* **32** 1547 (1957); Dzialoshinskii I E *Sov. Phys. JETP* **5** 1259 (1957)
40. Dzyaloshinsky I *J. Phys. Chem. Solids* **4** 241 (1958)
41. Moriya T *Phys. Rev. Lett.* **4** 228 (1960)
42. Moriya T *Phys. Rev.* **120** 91 (1960)
43. Борисов А Б *УФН* **190** 291 (2020); Borisov A B *Phys. Usp.* **63** 269 (2020)
44. Luttinger J M, Tisza L *Phys. Rev.* **70** 954 (1946)

45. Diep H T (Ed.) *Frustrated Spin Systems* 2nd ed. (Singapore: World Scientific, 2013) DOI:10.1142/8676
46. Wolf M M, Verstraete F, Cirac J I *Int. J. Quantum Inform.* **01** 465 (2003)
47. Amico L et al. *Rev. Mod. Phys.* **80** 517 (2008)
48. Facchi P et al. *New J. Phys.* **12** 025015 (2010)
49. Зубарев Д Н *УФН* **71** 71 (1960); Zubarev D N *Sov. Phys. Usp.* **3** 320 (1960)
50. Барабанов А Ф, Михеенков А В, Шварцберг А В *ТМФ* **168** 389 (2011); Barabanov A F, Mikheenkoy A V, Shvartsberg A V *Theor. Math. Phys.* **168** 1192 (2011)
51. Savary L, Balents L *Rep. Prog. Phys.* **80** 016502 (2017)
52. Manousakis E *Rev. Mod. Phys.* **63** 1 (1991)
53. Siurakshina L, Ihle D, Hayn R *Phys. Rev. B* **64** 104406 (2001)
54. Mikheyenkoy A V, Barabanov A F, Kozlov N A *Phys. Lett. A* **354** 320 (2006)
55. Barabanov A F, Mikheyenkoy A V, Belemuk A M *Phys. Lett. A* **365** 469 (2007)
56. Mikheyenkoy A V, Kozlov N A, Barabanov A F *Phys. Lett. A* **373** 693 (2009)
57. Härtel M et al. *Phys. Rev. B* **81** 174421 (2010)
58. Härtel M et al. *Phys. Rev. B* **87** 054412 (2013)
59. Михеенков А В, Шварцберг А В, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **98** 178 (2013); Mikheenkoy A V, Shvartsberg A V, Barabanov A F *JETP Lett.* **98** 156 (2013)
60. Михеенков А В, Валиулин В Э, Шварцберг А В, Барабанов А Ф *ЖЭТФ* **148** 514 (2015); Mikheenkoy A V, Valiulin V E, Shvartsberg A V, Barabanov A F *J. Exp. Theor. Phys.* **121** 446 (2015)
61. Барабанов А Ф, Михеенков А В, Козлов Н А *Письма в ЖЭТФ* **102** 333 (2015); Barabanov A F, Mikheenkoy A V, Kozlov N A *JETP Lett.* **102** 301 (2015)
62. Mikheyenkoy A V, Shvartsberg A V, Valiulin V E, Barabanov A F *J. Magn. Magn. Mater.* **419** 131 (2016)
63. Richter J, Schulenburg J, Honecker A "Quantum magnetism in two dimensions: From semi-classical Néel order to magnetic disorder", in *Quantum Magnetism* (Lecture Notes in Physics, Vol. 645, Eds U Schollwöck et al.) (Berlin: Springer, 2004) pp. 85–153, DOI:10.1007/BFb0119592
64. Fröblich P, Kuntz P J *Phys. Rep.* **432** 223 (2006) DOI:10.1016/j.physrep.2006.07.002
65. Feldkemper S et al. *Phys. Rev. B* **52** 313 (1995)
66. Feldkemper S, Weber W *Phys. Rev. B* **57** 7755 (1998)
67. Melzi R et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 1318 (2000)
68. Melzi R et al. *Phys. Rev. B* **64** 024409 (2001)
69. Rosner H et al. *Phys. Rev. B* **67** 014416 (2003) DOI:10.1103/PhysRevB.67.014416
70. Manaka H et al. *Phys. Rev. B* **68** 184412 (2003)
71. Kaul E E et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276** 922 (2004)
72. Kageyama H et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** 1702 (2005)
73. Kasinathan D, Kyker A B, Singh D J *Phys. Rev. B* **73** 214420 (2006)
74. Skoulatos M et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **310** 1257 (2007)
75. Nath R et al. *Phys. Rev. B* **78** 064422 (2008)
76. Carretta P et al. *Phys. Rev. B* **79** 224432 (2009)
77. Tsirlin A A, Rosner H *Phys. Rev. B* **79** 214417 (2009)
78. Tsirlin A A et al. *Phys. Rev. B* **80** 132407 (2009)
79. Skoulatos M et al. *Europhys. Lett.* **88** 57005 (2009)
80. Tsirlin A A et al. *Phys. Rev. B* **81** 174424 (2010)
81. Tsirlin A A et al. *Phys. Rev. B* **84** 014429 (2011)
82. Guchhait S et al. *Phys. Rev. B* **106** 024426 (2022)
83. Schmidt B, Shannon N, Thalmeier P *J. Phys. Condens. Matter* **19** 145211 (2007)
84. Plakida N "Antiferromagnetism in cuprate superconductors", in *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications* (Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 166) (Berlin: Springer, 2010) p. 51, DOI:10.1007/978-3-642-12633-8_3
85. Darradi R et al. *Phys. Rev. B* **78** 214415 (2008)
86. Junger I et al. *Phys. Rev. B* **70** 104419 (2004)
87. Sherman A, Schreiber M *Phys. Rev. B* **65** 134520 (2002)
88. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Phys. Rev. B* **80** 104425 (2009)
89. Михеенков А В, Валиулин В Э, Шварцберг А В, Барабанов А Ф *ЖЭТФ* **153** 483 (2018); Mikheenkoy A V, Valiulin V E, Shvartsberg A V, Barabanov A F *J. Exp. Theor. Phys.* **126** 404 (2018)
90. Valiulin V E, Mikheyenkoy A V, Chchelkatchev N M, Barabanov A F *J. Phys. Condens. Matter* **31** 455801 (2019)
91. Noculak V et al. *Phys. Rev. B* **107** 214414 (2023)
92. Silva G A et al. *Phys. Rev. E* **109** 064113 (2024)
93. Изюмов Ю А *УФН* **144** 439 (1984); Izyumov Yu A *Sov. Phys. Usp.* **27** 845 (1984)
94. Sorokin A O *J. Magn. Magn. Mater.* **479** 32 (2019)
95. Mikheyenkoy A V, Valiulin V E, Barabanov A F *Physica B* **599** 412533 (2020)
96. Lewenstein M et al. *Adv. Phys.* **56** 243 (2007)
97. Bloch I, Dalibard J, Zwirger W *Rev. Mod. Phys.* **80** 885 (2008)
98. Georgescu I M, Ashhab S, Nori F *Rev. Mod. Phys.* **86** 153 (2014)
99. Fraxanet J, Salamon T, Lewenstein M "The coming decades of quantum simulation", in *Sketches of Physics: The Celebration Collection* (Lecture Notes in Physics, Vol. 1000, Eds R Citro et al.) (Cham: Springer, 2023) p. 85, 10.1007/978-3-031-32469-7_4
100. Tsujimoto Y et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** 063711 (2007)
101. Tsujimoto Y et al. *Phys. Rev. B* **78** 214410 (2008)
102. Yusuf S M et al. *Phys. Rev. B* **84** 064407 (2011)
103. Ritter C et al. *Phys. Rev. B* **88** 104401 (2013)
104. Zwanzig R *J. Chem. Phys.* **33** 1338 (1960)
105. Zwanzig R *Phys. Rev.* **124** 983 (1961)
106. Zwanzig R *Annu. Rev. Phys. Chem.* **16** 67 (1965)
107. Zwanzig R, Nordholm K S J, Mitchell W C *Phys. Rev. A* **5** 2680 (1972)
108. Mori H *Prog. Theor. Phys.* **33** 423 (1965)
109. Mori H *Prog. Theor. Phys.* **34** 399 (1965)
110. Церковников Ю А *ТМФ* **7** 250 (1971); Tserkovnikov Yu A *Theor. Math. Phys.* **7** 511 (1971)
111. Церковников Ю А *ТМФ* **49** 219 (1981); Tserkovnikov Yu A *Theor. Math. Phys.* **49** 993 (1981)
112. Sherman A *Phys. Lett. A* **337** 435 (2005)
113. Плакида Н М *ТМФ* **168** 518 (2011); Plakida N M *Theor. Math. Phys.* **168** 1303 (2011)
114. Рудой Ю Г *ТМФ* **168** 536 (2011); Rudoy Yu G *Theor. Math. Phys.* **168** 1318 (2011)
115. Михеенков А В, Барабанов А Ф *ЖЭТФ* **132** 392 (2007); Mikheenkoy A V, Barabanov A F *J. Exp. Theor. Phys.* **105** 347 (2007)
116. Barabanov A F, Maksimov L A *Phys. Lett. A* **207** 390 (1995)
117. Kastner M A et al. *Rev. Mod. Phys.* **70** 897 (1998)
118. Plakida N "Theoretical models of high- T_C superconductivity", in *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications* (Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 166) (Berlin: Springer, 2010) p. 377, DOI:10.1007/978-3-642-12633-8_7
119. Кугель К И, Хомский Д И *ЖЭТФ* **64** 1429 (1973); Kugel' K I, Khomskii D I *Sov. Phys. JETP* **37** 725 (1973)
120. Кугель К И, Хомский Д И *УФН* **136** 621 (1982); Kugel' K I, Khomskii D I *Sov. Phys. Usp.* **25** 231 (1982)
121. Saitoh E et al. *Nature* **410** 180 (2001)
122. Grüninger M et al. *Nature* **418** 39 (2002)
123. Saitoh E et al. *Nature* **418** 40 (2002)
124. Ishihara S et al. *New J. Phys.* **7** 119 (2005)
125. Chen Y et al. *Phys. Rev. B* **75** 195113 (2007)
126. You W-L, Oleś A M, Horsch P *Phys. Rev. B* **86** 094412 (2012)
127. Brzezicki W, Dziarmaga J, Oleś A M *Phys. Rev. Lett.* **112** 117204 (2014)
128. You W-L, Horsch P, Oleś A M *Phys. Rev. B* **92** 054423 (2015)
129. Gotfryd D et al. *Phys. Rev. Res.* **2** 013353 (2020)
130. Mohapatra S et al. *J. Phys. Condens. Matter* **35** 045801 (2023)
131. Valiulin V E et al. *Phys. Rev. B* **102** 155125 (2020)
132. Valiulin V E et al. *SciPost Phys. Core* **6** (2) 025 (2023)
133. Коган М Ю, Кугель К И, Михеенков А В, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **100** 207 (2014); Kagan M Yu, Kugel' K I, Mikheenkoy A V, Barabanov A F *JETP Lett.* **100** 187 (2014)
134. Валиулин В Э, Михеенков А В, Кугель К И, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **109** 557 (2019); Valiulin V E, Mikheenkoy A V, Kugel' K I, Barabanov A F *JETP Lett.* **109** 546 (2019)
135. Pati S K, Singh R R P, Khomskii D I *Phys. Rev. Lett.* **81** 5406 (1998)
136. Lundgren R, Chua V, Fiete G A *Phys. Rev. B* **86** 224422 (2012)
137. Laurell P et al. *Adv. Quantum Technol.* **8** 2400196 (2025) DOI:10.1002/qute.202400196

138. Веденеев С И *УФН* **191** 937 (2021); Vedeneev S I *Phys. Usp.* **64** 890 (2021)
139. Барабанов А Ф, Максимов Л А, Михеенков А В *Письма в ЖЭТФ* **74** 362 (2001); Barabanov A F, Maksimov L A, Mikheenko A V *JETP Lett.* **74** 328 (2001)
140. Барабанов А Ф, Михеенков А В, Белемук А М *Письма в ЖЭТФ* **75** 118 (2002); Barabanov A F, Mikheenko A V, Belemuk A M *JETP Lett.* **75** 107 (2002)
141. Barabanov A F, Maksimov L A, Mikheenko A V "Spin polaron in the cuprate superconductors: Interpretation of the ARPES results", in *Spectroscopy of High- T_c Superconductors. A Theoretical View* (Ed. N M Plakida) (London: Taylor and Francis, 2003) p. 1
142. Вальков В В, Дзедзисашвили Д М, Коровушкин М М, Барабанов А Ф *УФН* **191** 673 (2021); Val'kov V V, Dzebisashvili D M, Korovushkin M M, Barabanov A F *Phys. Usp.* **64** 641 (2021)
143. Plakida N M *J. Supercond. Nov. Magn.* **28** 1309 (2015)
144. Plakida N M *Physica C* **531** 39 (2016)
145. Plakida N M, Oudovenko V S *J. Supercond. Nov. Magn.* **29** 1037 (2016)
146. Plakida N M *Physica C* **549** 69 (2018)
147. Plakida N M *Phys. Part. Nucl.* **51** 797 (2020)
148. Shimahara H, Takada S *J. Phys. Soc. Jpn.* **61** 989 (1992)
149. Владимиров А А, Иле Д, Плакида Н М *ТМФ* **152** 538 (2007); Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Theor. Math. Phys.* **152** 1331 (2007)
150. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Eur. Phys. J. B* **92** 135 (2019)
151. Tung N D, Vladimirov A A, Plakida N M *Physica C* **587** 1353900 (2021)
152. Булаевский Л Н, Нагаев Э Л, Хомский Д И *ЖЭТФ* **54** 1562 (1968); Bulaevskii L N, Nagaev E L, Khomskii D I *Sov. Phys. JETP* **27** 836 (1968)
153. Trugman S A *Phys. Rev. B* **37** 1597 (1988)
154. Inui M, Doniach S, Gabay M *Phys. Rev. B* **38** 6631 (1988)
155. Barabanov A F, Zhasinas E V *Phys. Lett. A* **193** 191 (1994)
156. Barabanov A F, Beresovsky V M, Zhasinas E *Phys. Rev. B* **52** 10177 (1995)
157. Savchenkov P S, Barabanov A F *J. Magn. Magn. Mater.* **521** 167505 (2021)
158. Nemkovski K S et al. *Phys. Procedia* **42** 18 (2013)
159. Lüscher A, Läuchli A M *Phys. Rev. B* **79** 195102 (2009)
160. Winterfeldt S, Ihle D *Phys. Rev. B* **56** 5535 (1997)
161. Winterfeldt S, Ihle D *Phys. Rev. B* **59** 6010 (1999)
162. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Eur. Phys. J. B* **87** 112 (2014)
163. Nussinov Z, van den Brink J *Rev. Mod. Phys.* **87** 1 (2015)
164. Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Eur. Phys. J. B* **88** 148 (2015)

Spherically symmetric approaches in the low-dimensional magnetism theory

A.F. Barabanov⁽¹⁾, V.E. Valiulin^(1,2), A.V. Mikheenko^(1,2,*), P.S. Savchenkov^(3,4)

⁽¹⁾ Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences, Kaluzhskoe shosse 14, 108840 Troitsk, Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), Institutskii per. 9, 141701 Dolgoprudny, Moscow region, Russian Federation

⁽³⁾ National Research Center Kurchatov Institute, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russian Federation

⁽⁴⁾ National Research Nuclear University MEPhI, Kashirskoe shosse 31, 115409 Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(*) mikheenko@bk.ru

The main ideas and the most important results of the spherically symmetric self-consistent approach and a number of related theoretical algorithms are presented. These methods make it possible to study low-dimensional Heisenberg-type spin models, including frustrated ones, with careful consideration of the theoretic (Mermin–Wagner and Marshall) theorems, as well as the site spin constraint. Thus, the difficulties that may arise in the traditional analysis of low-dimensional magnetic systems are avoided. The approach can also be applied to the spin-pseudospin model, and is also embedded in more complex constructions when considering spin models with free carriers, such as the basic and three-band Hubbard models, $t-J$ and $s-d$ models, and the Kondo lattice.

Keywords: low-dimensional magnetism, multi-exchange Heisenberg model, frustration, spherically symmetric approach

PACS numbers: 75.10.Jm, **74.72.-h**, 75.30.Kz, 75.50.Ee, 75.50.Gg, 75.70.Tj

Bibliography — 164 references

Received 11 April 2025, revised 8 June 2025

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **196** (2) 125–148 (2026)

Physics – Uspekhi **69** (2) (2026)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.06.039948>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2025.06.039948>