Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. С. Овчинников, И. Г. Бострем, Вл. Е. Синицын, Кла-
стерная теория возмущений для спиновых гамильтони-
анов, *ТМФ*, 2010, том 162, номер 2, 216–226

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6465>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.205.19.152

26 апреля 2023 г., 16:11:40

© 2010 г. А. С. Овчинников*, И. Г. Бострем*, Вл. Е. Синицын*

КЛАСТЕРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ СПИНОВЫХ ГАМИЛЬТониАнов

Предложено расширение кластерной теории возмущений для квантовых спиновых систем. В качестве применения теории вычислены спектральная функция и плотность состояний одночастичных возбуждений цепочек спинов $1/2$ с альтернирующими обменными взаимодействиями.

Ключевые слова: кластерная теория возмущений, синглетные магнетики, спиновые цепочки.

1. ВВЕДЕНИЕ

До создания около 10 лет назад квантовых кластерных методов основные численные процедуры, используемые для изучения решеточных моделей, основывались фактически на двух базовых подходах: методе точной диагонализации с периодическими граничными условиями и квантовом методе Монте-Карло. Применение этих алгоритмов включает экстраполяцию на термодинамический предел (предел систем бесконечного размера). Хотя эти методы достаточно просты в использовании, они оставляли открытым вопрос о восстановлении нарушенной трансляционной симметрии и, как следствие, проблему выделения состояний с нарушенной симметрией, определяющих свойства систем в термодинамическом пределе.

Разнообразные современные квантовые кластерные методы: вариационная кластерная теория возмущений (VCPT) [1], кластерная теория динамического среднего поля (CPMFT) [2], метод динамической кластерной аппроксимации (DCA) [3] – рассматривают решеточный кластер конечных размеров, являющийся частью бесконечной решетки, где окружение кластера моделируется либо дополнительными полями, либо дополнительными степенями свободы термостата, находящегося в контакте с кластером. Для определения этих дополнительных параметров используется либо вариационный принцип, либо процедура самосогласования. В отличие от обычной теории среднего поля эти методы являются динамическими и полностью учитывают корреляционные эффекты [4].

*Уральский государственный университет, Екатеринбург, Россия.
E-mail: Alexander.Ovchinnikov@usu.ru, Irene.Bostrem@usu.ru, sinitsyn_ve@mail.ru

Рис. 2. Разбиение цепочки на кластеры для $L = 4$.

бой локализованные внутри димеров триплетные возбуждения (триплтоны) бозонного типа, вид взаимодействия между которыми определяется знаком J_2 (притяжение при $J_2 < 0$ или отталкивание при $J_2 > 0$).

Статья организована следующим образом. Основные положения кластерной теории возмущений изложены в разделе 2. Расчет кластерной функции Грина для одномерных спиновых цепочек приведен в разделе 3. В разделе 4 описываются вычисления соответствующей спектральной функции и плотности одночастичных возбуждений для кластеров различной длины. Здесь же дается краткое обсуждение полученных результатов.

2. ФОРМАЛИЗМ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Основная идея кластерной теории возмущений – определить на исходной решетке сверхрешетку из идентичных кластеров. Спиновая модель на каждом кластере решается точно (вычисляется спиновая функция Грина), тогда как обменное взаимодействие между узлами, принадлежащими разным кластерам, рассматривается по теории возмущений.

Пусть γ – исходная решетка Браве, а Γ – сверхрешетка кластеров, так что $\Gamma \subset \gamma$. Формально кластер является фактор-группой γ/Γ . Будем использовать обозначения $\mathbf{r}$ и $\mathbf{R}$ для векторов, направленных в решеточные узлы γ и Γ соответственно, а L – для числа решеточных узлов внутри кластера. Пример разбиения на кластеры для спиновой цепочки показан на рис. 2. Далее мы рассмотрим несколько вариантов разбиения цепочки на кластеры, чтобы отделить реальные физические эффекты от артефактов, зависящих от способа разбиения.

Гамильтониан, рассматриваемый в рамках кластерной теории возмущений, можно представить в виде

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

где

$$H_0 = \sum_{\mathbf{R}} H_{\mathbf{R}}^0$$

есть сумма гамильтонианов кластеров без учета взаимодействия между ними, а

$$V = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} V_{ab}^{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \mathbf{S}_{\mathbf{R}a} \mathbf{S}_{\mathbf{R}'b}$$

представляет собой сумму межкластерных взаимодействий. Здесь a и b обозначают определенные спины $\mathbf{S}_{\mathbf{R}a}$, $\mathbf{S}_{\mathbf{R}b}$ внутри кластера (например, в приведенном на рис. 2 случае a и b принимают значения либо 1, либо 4), и тогда $V_{ab}^{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ – величина обменного взаимодействия между спином a кластера $\mathbf{R}$ и спином b кластера $\mathbf{R}'$.

Предположим, что известна кластерная спиновая функция Грина $\hat{G}$. Как правило, для ее вычисления используют алгоритм Ланцоша, если известно основное состояние кластера [16]. Мы же воспользуемся представлением Лемана для функции Грина, используя энергетический спектр кластера и его волновые функции (см. раздел 3).

В наинизшем порядке теории возмущений по межкластерному взаимодействию полная спиновая функция Грина $\hat{\mathcal{G}}$ определяется через уравнение Ларкина [17], [18] (уравнение Дайсона для спиновых операторов):

$$\hat{\mathcal{G}}^{-1} = \hat{G}^{-1} - \hat{V},$$

или

$$\hat{\mathcal{G}}(\omega) = \frac{\hat{G}(\omega)}{1 - \hat{V}\hat{G}(\omega)}, \quad (2)$$

где указана зависимость от частоты и опущены кластерные и спиновые индексы. В соотношении (2) использовано координатно-частотное представление $\hat{\mathcal{G}}_{ab}^{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\omega)$, $\delta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\hat{G}_{ab}(\omega)$ и $V_{ab}^{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$. Уравнение (2) следует из обобщения диаграммной техники для описания гейзенберговского ферромагнетика простейшей структуры на случай нескольких подрешеток [19]–[22].

Трансляционная инвариантность вдоль сверхрешетки Γ позволяет выразить $\hat{V}$ и $\hat{\mathcal{G}}$ через волновой вектор $\mathbf{Q}$, принадлежащий редуцированной зоне Бриллюэна BZ_Γ (зоне Бриллюэна сверхрешетки). В частности, обменное взаимодействие между кластерами записывается в следующем виде:

$$V_{ab}(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{ab}^{0,\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}},$$

где индекс “0” сверхрешетки выбирается в начале координат. В таком представлении

$$\hat{\mathcal{G}}_{ab}(\mathbf{Q}, \omega) = \left[\frac{\hat{G}(\omega)}{1 - \hat{V}(\mathbf{Q})\hat{G}(\omega)} \right]_{ab}. \quad (3)$$

Эта формула является стартовой формулой кластерной теории возмущений в одно-родных системах.

Функция Грина (3) задана в смешанном представлении реального пространства внутри кластера и обратного пространства для расстояний между кластерами. Предпочтительным является фурье-представление в терминах волновых векторов $\mathbf{k}$, принадлежащих зоне Бриллюэна исходной решетки BZ_γ .

Волновой вектор $\mathbf{k}$ можно представить в виде

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{Q}, \quad (4)$$

где $\mathbf{Q}$ принадлежит редуцированной зоне Бриллюэна BZ_Γ , а вектор $\mathbf{K}$ – обратной свёрхрешетке Γ^* .

Переход к трансляционно-инвариантной функции Грина осуществляется преобразованием

$$\mathcal{G}_{\text{СРТ}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{a,b=1}^L \mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, \omega) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)}, \quad (5)$$

где $\mathcal{G}_{ab}(\mathbf{Q}, \omega)$ инвариантна относительно трансляций $\mathbf{K}$ на некоторый вектор обратной свёрхрешетки.

Спектральная функция элементарных возбуждений вычисляется по формуле [7]

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2 \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \mathcal{G}_{\text{СРТ}}(\mathbf{k}, \omega + i\eta),$$

и соответствующая плотность состояний равна

$$\mathcal{N}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega),$$

где N – число узлов решетки.

3. КЛАСТЕРНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Опишем способ вычисления кластерной функции Грина $\hat{G}_{ab}$, где индексы a, b маркируют спины, входящие в кластер. В отсутствие анизотропных слагаемых в гамильтониане спектр элементарных возбуждений определяется через мацубаровскую парную функцию Грина поперечных флуктуаций

$$G_{ab}^{-+}(\tau) = -\frac{1}{2} \langle \hat{T} S_a^-(\tau) S_b^+(0) \rangle \quad (6)$$

и продольных флуктуаций

$$G_{ab}^{zz}(\tau) = -\langle \hat{T} (S_a^z(\tau) - \langle S_a^z \rangle) (S_b^z(0) - \langle S_b^z \rangle) \rangle = -\langle \hat{T} S_a^z(\tau) S_b^z(0) \rangle, \quad (7)$$

где в последнем равенстве учтено, что в синглетном основном состоянии $\langle S_{a,b}^z \rangle = 0$. Символ $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение с полным гамильтонианом H :

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta H} \dots\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta H}\}}, \quad \beta = \frac{1}{kT},$$

τ – вещественный параметр, лежащий в интервале $0 < \tau < \beta$.

Переходя к фурье-представлению и используя теорему об аналитическом продолжении, получаем представление Лемана для функции Грина (6) при нулевой температуре:

$$G_{ab}^{-+}(\omega) = \sum_m \frac{\langle 0 | \hat{S}_a^- | m \rangle \langle m | \hat{S}_b^+ | 0 \rangle}{\omega + i\eta - E_m + E_0}, \quad (8)$$

в котором $|0\rangle$ и $|m\rangle$ – волновые функции основного и возбужденного состояний кластера с собственными энергиями E_0 и E_m соответственно.

С помощью теоремы Вигнера–Эккарта для матричных элементов, входящих в формулу (8), имеем

$$\langle 0 | \hat{S}_a^- | m \rangle = (-1)^{0-0} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \langle 0 | \hat{S}_a | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 0 | \hat{S}_a | m \rangle, \quad (9)$$

где индекс m маркирует возбужденные состояния кластера со спином 1, что упрощает выражение для кластерной функции Грина:

$$\hat{G}_{ab}(\omega) = \frac{1}{3} \sum_m \frac{\langle 0 | \hat{S}_a | m \rangle \langle m | \hat{S}_a | 0 \rangle}{\omega + i\eta - E_m + E_0}. \quad (10)$$

В формулах (9), (10) величина $(\dots)$ означает $3j$ -символ Вигнера [23], а символ $\langle \dots || \dots || \dots \rangle$ – приведенный матричный элемент соответствующего спинowego оператора. При выводе формулы (9) учтено, что волновая функция основного состояния имеет в $|SM\rangle$ -представлении квантовые числа $|00\rangle$, а возбужденных – $|11\rangle$.

Для расчета энергий кластера E_m и соответствующих приведенных матричных элементов использовался метод точной диагонализации с сохранением $SU(2)$ -симметрии [24]. Рекурсивная схема вычисления приведенных матричных элементов спинов, расположенных в узлах кластера a и b , приведена в приложении.

Аналогичным образом можно показать, что функция Грина продольных флуктуаций (7) отличается от выражения (10) лишь знаком, что связано с вырождением триплетных состояний по проекции спина в отсутствие анизотропных взаимодействий. Это отличает ситуацию с синглетными магнетиками от систем с упорядоченными магнитными моментами. В последних при низких температурах релевантными возбуждениями являются спиновые волны, описываемые функцией Грина поперечных флуктуаций. Вклад продольных спиновых возбуждений в спектральные свойства становится заметным лишь в критической области, т.е. вблизи температуры магнитного упорядочения.

Отметим, что кластерная функция Грина представляет собой комплексную матрицу размерности $L \times L$, так же как и матрица взаимодействия $\hat{V}$, которая в приближении взаимодействия ближайших соседей имеет вид

$$\hat{V}_{ab}^{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} = J_2(\delta_{a,L} \delta_{b,1} \delta_{\mathbf{R}', \mathbf{R}+1} + \delta_{a,1} \delta_{b,L} \delta_{\mathbf{R}', \mathbf{R}-1}),$$

или

$$\hat{V}_{ab}(Q) = J_2(\delta_{a,L} \delta_{b,1} e^{iQLa} + \delta_{a,1} \delta_{b,L} e^{-iQLa}) \quad (11)$$

после перехода к фурье-представлению по редуцированной зоне Бриллюэна BZ_Γ . Здесь a и La – постоянные решетки и сверхрешетки соответственно, Q – длина вектора $\mathbf{Q}$.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Техника кластерной теории возмущений наглядно иллюстрируется на примере кластера с $L = 4$. Матричная форма функции Грина (10) оказывается достаточно симметричной:

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{12} & G_{22} & G_{23} & G_{13} \\ G_{13} & G_{23} & G_{22} & G_{12} \\ G_{14} & G_{13} & G_{12} & G_{11} \end{pmatrix},$$

что с учетом явного вида матрицы взаимодействия (11) приводит к результату

$$\hat{1} - \hat{V}(\hat{Q})\hat{G}_{ab}(z) = \begin{pmatrix} 1 - J_2 G_{14} e^{-4iQa} & -J_2 G_{13} e^{-4iQa} & -J_2 G_{12} e^{-4iQa} & -J_2 G_{11} e^{-4iQa} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -J_2 G_{11} e^{4iQa} & -J_2 G_{12} e^{4iQa} & -J_2 G_{13} e^{4iQa} & 1 - J_2 G_{14} e^{4iQa} \end{pmatrix}.$$

Вычисляя аналитически обратную матрицу $(\hat{1} - \hat{V}(\hat{Q})\hat{G}_{ab}(z))^{-1}$, а затем $\hat{\mathcal{G}}_{ab}(Q, \omega)$ согласно формуле (3), получаем после некоторых упрощений трансляционно-инвариантную функцию Грина (5):

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\text{СРТ}}(k, \omega) = \frac{1}{2Z} \Big\{ & G_{22} + G_{11} - J_2^2 G_{22} (G_{11}^2 - G_{14}^2) - 2J_2^2 G_{12} G_{13} G_{14} + \\ & + J_2^2 G_{11} (G_{12}^2 + G_{13}^2) 2J_2 (G_{11} G_{12} - G_{13} G_{14}) \cos(2ka - 4Qa) + \\ & + J_2 (G_{11}^2 - G_{14}^2) \cos(3ka - 4Qa) + 2J_2 (-G_{14} G_{22} + G_{12} G_{13}) \cos(4Qa) + \\ & + J_2 (G_{13}^2 - G_{23} G_{14}) \cos(ka + 4Qa) + [G_{23} + 2G_{12} - \\ & - J_2^2 G_{23} (G_{11}^2 - G_{14}^2) - J_2^2 G_{14} (G_{12}^2 + G_{13}^2) + 2J_2^2 G_{11} G_{12} G_{13}] \cos(ka) + \\ & + J_2 (2G_{11} G_{13} - 2G_{12} G_{14} + G_{12}^2 - G_{23} G_{14}) \cos(ka - 4Qa) + \\ & + 2G_{13} \cos(2ka) + G_{14} \cos(3ka) \Big\}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $Z = 1 + J_2^2 (G_{14}^2 - G_{11}^2) - 2J_2 G_{14} \cos(4ka)$.

Обсудим результаты применения кластерной теории возмущений для кластера из четырех узлов. Для вычисления спектральной функции значение мнимой добавки η выбиралось равным 0.01, чтобы получить пики конечной ширины. Волновой вектор k изменялся в пределах положительной половины зоны Бриллюэна цепочки $k \in [0, \pi/a]$. Вектор редуцированной зоны Бриллюэна $Q \in [0, \pi/4a]$ рассчитывался по формуле (4), где $\mathbf{K}$ – один из векторов обратной сверхрешетки, принимающих значения $(0, \pi/4a, \pi/4a, 3\pi/4a)$. Мы рассчитали спектральную функцию $A(k, \omega)$ и соответствующую плотность состояний $\mathcal{N}(\omega)$ для цепочек обоих типов. Отметим, что при наличии аналитической формулы для функции Грина (12) плотность состояний удобнее вычислять интегрированием по k :

$$\mathcal{N}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi A(k, \omega) dk.$$

Рис. 3. $A(k, \omega)$ и $\mathcal{N}(\omega)$ для кластера из четырех димеров. Обменные параметры: $J_1 = -1$, $J_2 = 0.07$.

График спектральной плотности цепочки первого типа (рис. 1а) для случая $J_2/J_1 = 0.07$ (режим халдейновской антиферромагнитной жидкости) демонстрирует наличие двух оптических ветвей в спектре возбуждений с квадратичным законом дисперсии (рис. 3). Нижняя ветвь оказывается щелевой, щель имеет величину порядка $\omega \approx 0.05|J_1|$ и соответствует распространяющимся вдоль цепочки спиновым возбуждениям. Максимум интенсивности второй ветви синглет-триплетных возбуждений приходится на край зоны Бриллюэна и имеет характерный масштаб энергий $\sim |J_1|$. Соответствующая плотность состояний обнаруживает двухпиковую структуру.

Случай димеризованной цепочки (рис. 1б) дает другую картину спектральной функции (рис. 4). Имеется только одна почти бездисперсионная ветвь синглет-триплетных возбуждений вблизи $\omega \approx J_1$, описывающей возбуждения бозонного типа, локализованные внутри димера. Максимум интенсивности $A(k, \omega)$ приходится на край зоны Бриллюэна, плотность состояний имеет один пик.

Рис. 4. $A(k, \omega)$ и $\mathcal{N}(\omega)$ для кластера из четырех димеров. Обменные параметры: $J_1 = 1$, $J_2 = -0.07$.

Рис. 5. $A(k, \omega)$ и $N(\omega)$ для кластера из восьми димеров. Обменные параметры: $J_1 = -1$, $J_2 = 0.07$.

Результаты для спектральной функции и плотности состояний относятся к бесконечной цепочке, однако эти величины содержат эффекты конечного размера, поскольку функция Грина $\hat{G}(\omega)$ вычисляется для конечного кластера. Чтобы оценить размерные эффекты, повторим расчет кластерной теории возмущений на базисе кластера больших размеров, выбрав, например, цепочку первого типа. На рис. 5 представлен результат численного расчета для случая $L = 8$. Отметим, что у кластера из восьми спинов имеется 28 состояний спина 1. Хотя у пиков плотности состояний возникает “тонкая структура”, сравнение графиков для кластеров $L = 4$ и $L = 8$ позволяет сделать вывод, что размерные эффекты незначительны и, следовательно, расчеты для кластера меньших размеров вполне приемлемы.

Подчеркнем, что адекватное описание спектральных свойств в рамках теории возмущений должно обеспечиваться наличием малого параметра, в качестве которого в нашем случае выступает отношение $J_2/(J_1 L)$, где L – длина кластера. Следовательно, увеличение интеграла взаимодействия J_2 между димерами должно сопровождаться соответствующим увеличением минимального размера кластера. При этом может оказаться, что при расчете кластерной функции Грина потребуется процедура сокращения базиса, один из вариантов которой, основанный на учете спиновой $SU(2)$ -симметрии, был представлен в работе [25].

В наших вычислениях необходимость увеличения минимального размера кластера вызвана еще и тем обстоятельством, что вблизи отдельной точки $k \approx 7\pi/(16a)$ максимум спектральной функции $A(k, \omega)$ цепочки первого типа приходится на отрицательную частоту $\omega \approx -0.01J_1$, а значит, аппроксимация спектра одночастичных возбуждений на основе расчетов для малого кластера $L = 4$ не является вполне удовлетворительной. При увеличении длины кластера до $L = 8$ эта точка экстремума смещается в область положительных частот $\omega \approx 0.01J_1$.

В качестве заключения отметим, что с помощью техники кластерной теории возмущений, обобщенной на случай квантовых спиновых систем, нами рассмотрены спектральная функция и плотность одночастичных возбуждений для бесконечных цепочек спинов $1/2$, принадлежащих к классам халдейновских и димеризованных систем. Дальнейшее развитие представленной теории предполагает применение вариационной кластерной теории возмущений [26], что позволит идентифицировать нарушенные симметрии и скрытые параметры порядка с помощью функционала Поттхофа [1]. Последнее может оказаться особенно полезным при исследовании двумерных квантовых магнетиков.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Опишем процедуру вычисления приведенных матричных элементов, возникающих в определении кластерной функции Грина (10).

Пусть на текущем шаге итераций кластер включает два блока из n узлов, левый (l) и правый (r). При запуске итерационной процедуры в качестве блоков берется пара димеров, собственные функции и спектр которых легко определить. Пользуясь правилом сложения моментов, строим базис для полной системы:

$$|(i_l S_l, i_r S_r) SM\rangle = \sum_{m_l m_r} \begin{bmatrix} S_l & S_r & S \\ m_l & m_r & M \end{bmatrix} |i_l S_l m_l\rangle |i_r S_r m_r\rangle, \quad (\text{П.1})$$

где индекс i_l (i_r) нумерует состояния левого (правого) блока с одинаковыми квантовыми числами S_l , m_l (S_r , m_r).

Строим матрицу гамильтониана системы взаимодействующих блоков с помощью теоремы Вигнера–Эккарта:

$$\begin{aligned} \langle (i_l S_l, i_r S_r); SM | \hat{H} | (i'_l S'_l, i'_r S'_r); S' M' \rangle = \\ = (E_{i_l S_l} + E_{i_r S_r}) \delta_{i_l S_l, i'_l S'_l} \delta_{i_r S_r, i'_r S'_r} \delta_{S, S'} \delta_{M, M'} + \\ + J_2 (-1)^{S'_l + S_r + S} \begin{Bmatrix} S_r & S_l & S \\ S'_l & S'_r & 1 \end{Bmatrix} \delta_{S, S'} \delta_{M, M'} \langle i_l S_l || S_{ln} || i'_l S'_l \rangle \langle i_r S_r || S_{r1} || i'_r S'_r \rangle, \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

где $\{\dots\}$ – $6j$ -символ, и находим его собственные функции:

$$|i SM\rangle = \sum_{i_l S_l i_r S_r m_l m_r} \alpha_{i_l S_l i_r S_r}^{i S} |(i_l S_l, i_r S_r) SM\rangle. \quad (\text{П.3})$$

Приведенные матричные элементы спиновых операторов крайних узлов блоков S_{r1} и S_{ln} , участвующих во взаимодействии, вычисляются на предыдущем шаге.

Вновь применяем теорему Вигнера–Эккарта и определяем приведенные матричные элементы для функций образованного кластера длины $2n$. Для узлов с номерами $a = 1, \dots, n$, входящих в левую часть, получаем

$$\begin{aligned} \langle i S || S_a || i' S' \rangle = [S, S']^{1/2} (-1)^{1+S'} \times \\ \times \sum \alpha_{i_l S_l i_r S_r}^{i S} \alpha_{i'_l S'_l i'_r S'_r}^{i' S'} \delta_{i'_l, i_r} \delta_{S'_r, S_r} (-1)^{S_l + S_r} \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ S'_l & S_r & S_l \end{Bmatrix} \langle i_l S_l || S_a || i'_l S'_l \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

Соответствующее выражение для узлов правой части с номерами $a = n + 1, \dots, 2n$ имеет вид

$$\langle iS || S_a || i'S' \rangle = [S, S']^{1/2} (-1)^{1+S} \times \\ \times \sum \alpha_{i_1 S_1 i_r S_r}^{iS} \alpha_{i'_1 S'_1 i'_r S'_r}^{i'S'} \delta_{i'_1, i_1} \delta_{S'_1, S_1} (-1)^{S_1 + S'_1} \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ S'_r & S_1 & S_r \end{matrix} \right\} \langle i_r S_r || S_{a-n} || i'_r S'_r \rangle, \quad (\text{П.5})$$

где принято обозначение $[S] = 2S + 1$.

Список литературы

- [1] M. Potthoff, M. Aichhorn, C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.*, **91**:20 (2003), 206402.
- [2] G. Kotliar, S. Savrasov, G. Pálsson, G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.*, **87**:18 (2001), 186401.
- [3] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B*, **58**:12 (1998), R7475–R7479.
- [4] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, M. H. Hettler, *Rev. Modern Phys.*, **77**:3 (2005), 1027–1080.
- [5] C. Gros, R. Valentí, *Phys. Rev. B*, **48**:1 (1993), 418–425.
- [6] D. Sénéchal, D. Perez, M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.*, **84**:3 (2000), 522–525.
- [7] D. Sénéchal, D. Perez, D. Plouffe, *Phys. Rev. B*, **66**:7 (2002), 075129.
- [8] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B*, **58**:12 (1998), R7475–R7479.
- [9] A. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, J. Freericks, *Phys. Rev. B*, **55**:6 (1997), R3332–R3335.
- [10] M. G. Zacher, R. Eder, E. Arrigoni, W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.*, **85**:12 (2002), 2585–2588.
- [11] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферро-магнетизма*, Наука, М., 1974.
- [12] Y. Hosokoshi, Y. Nakazawa, K. Inoue, K. Takizawa, H. Nakano, M. Takahashi, T. Goto, *Phys. Rev. B*, **60**:18 (1999), 12924–12932.
- [13] T. Goto, N. V. Mushnikov, Y. Hosokoshi, K. Katoh, K. Inoue, *Physica B*, **329–333** (2003), 1160–1161.
- [14] I. Affleck, *Phys. Rev. B*, **41**:10 (1990), 6697–6702; T. Giamarchi, A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B*, **59**:17 (1999), 11398–11407.
- [15] T. M. Rice, *Science*, **298**:5594 (2002), 760–761.
- [16] E. Dagotto, *Rev. Modern Phys.*, **66**:3 (1994), 763–840.
- [17] А. И. Ларкин, *ЖЭТФ*, **37** (1959), 264–272.
- [18] В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, *ЖЭТФ*, **53** (1967), 281–299.
- [19] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-оглы, *ФММ*, **26** (1968), 385.
- [20] М. А. Савченко, В. В. Тарасенко, *ФТТ*, **9** (1967), 3284.
- [21] С. А. Пикин, *ЖЭТФ*, **54**:10 (1968), 1851–1864.
- [22] Э. М. Пикалев, М. А. Савченко, Й. Шойом, *ЖЭТФ*, **55**:4 (1969), 1404–1414.
- [23] Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Л., 1975.
- [24] И. Г. Бострем, А. С. Овчинников, В. Е. Сеницын, *ТМФ*, **149**:2 (2006), 262–280.
- [25] V. E. Sinityn, I. G. Bostrem, A. S. Ovchinnikov, *J. Phys. A*, **40**:4 (2007), 645–668.
- [26] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, M. Potthoff, *Phys. Rev. B*, **70**:24 (2004), 245110.

Поступила в редакцию 4.08.2009