Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, Спиновые возбуждения в анизотропной J_1 – J_2 модели Гейзенберга, *ТМФ*, 2013, том 177, номер 2, 306–322

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8554>

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

Параметры загрузки:

IP: 52.87.193.239

26 апреля 2023 г., 17:10:55

© 2013 г. А. А. Владимиров*, Д. Иле[†], Н. М. Плакида*

СПИНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АНИЗОТРОПНОЙ J_1 – J_2 МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Исследован спектр спиновых волн в антиферромагнетике для анизотропной J_1 – J_2 и квазидвумерной изотропной моделей Гейзенберга с произвольным спином S . Рассмотрены приближения случайных фаз (расщепление Тябликова) и линейных спиновых волн. Вычислены температурная зависимость намагниченности и температура Нееля и произведено сравнение с экспериментальными результатами для высокотемпературных купратных сверхпроводников и соединений на основе железа.

Ключевые слова: анизотропная J_1 – J_2 модель Гейзенберга, антиферромагнетик, спиновые волны, температура Нееля.

DOI: 1010.4231/tmf8554

1. ВВЕДЕНИЕ

Недавно был открыт новый класс высокотемпературных сверхпроводников на основе железа (пниктиды) с температурой сверхпроводящего перехода T_c , достигающей 55 К (см. обзоры [1]–[5]). В отличие от медно-оксидных (купратных) высокотемпературных сверхпроводников, нелегированная фаза которых представляет собой диэлектрик Мотта–Хаббарда, нелегированные пниктиды являются металлами. В этих соединениях также наблюдается антиферромагнитный (АФМ) дальний порядок, описываемый волной спиновой плотности. С увеличением легирования АФМ дальний порядок исчезает и возникает сверхпроводимость так же, как и в купратных сверхпроводниках. Таким образом, весьма вероятно, что спиновые флуктуации в парамагнитной фазе играют важную роль в возникновении сверхпроводимости в пниктидах, как и в купратах. В соединениях AFe_2As_2 (122) ($\text{A} = \text{Ba}, \text{Ca}, \text{Sr}$) АФМ упорядочение спинов железа в плоскости (x, y) задается АФМ волновым вектором $\mathbf{Q}_{\text{AF}} = (\pi/a_x, 0, \pi/a_z) \equiv (1, 0, 1)$ в орторомбической фазе (группа симметрии $Fmmm$) с постоянными решетки (a_x, a_y, a_z) . При температуре выше температуры Нееля $T_N = 140$ – 190 К АФМ упорядочение исчезает. Для описания спектра спиновых возбуждений были предложены две основные модели: АФМ J_1 – J_2 модель

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: plakida@theor.jinr.ru

[†]Institute of Theoretical Physics, University Leipzig, Leipzig, Germany

Гейзенберга для локализованных спинов S (см., например, [6]–[10]) и многозонная модель нелокализованных электронов Fe-3d (см., например, [11], [12]). Эксперименты по неупругому магнитному рассеянию нейтронов показали, что J_1 – J_2 модель Гейзенберга хорошо описывает низкоэнергетическую часть спектра до 100 мэВ, где наблюдается сильная анизотропия эффективного обменного взаимодействия спинов железа (см., например, [9], [13], [14]). В то же время при высоких энергиях зонная модель лучше описывает широкий спектр спиновых возбуждений [14].

В настоящей работе вычислен спектр спиновых возбуждений в рамках анизотропной J_1 – J_2 модели Гейзенберга с параметрами, близкими к значениям, полученным для соединений типа 122, а также оценена температура Нееля T_N . Чтобы учесть перенормировку спектра и вычислить температуру Нееля, используется метод уравнений движения в случае функций Грина (ФГ) для произвольного спина S в приближении случайных фаз (ПСФ), основанном на самосогласованном подходе Тябликова [15]. Спектр спиновых возбуждений при низких температурах, полученный в приближении ПСФ, сравнивается с теорией линейных спиновых волн. Также мы рассматриваем АФМ модель Гейзенберга с изотропным взаимодействием J ближайших соседей в плоскости и со слабым взаимодействием между плоскостями $J_z \ll J$. Эта модель используется для описания АФМ упорядочения в нелегированных купратах, где ПСФ дает температуру Нееля, близкую к экспериментально наблюдаемой (см., например, [16]–[20]). В отличие от купратов, ПСФ для J_1 – J_2 модели приводит к температуре Нееля T_N , в несколько раз превышающей экспериментально измеренную в пниктидах типа 122. Это расхождение в результатах, получаемых в ПСФ, может быть связано с различной природой спиновой динамики для локализованных спинов в купратах и зонных электронов в пниктидах.

В разделе 2 дается формулировка J_1 – J_2 модели Гейзенберга и выводятся уравнения для ФГ и намагниченности. Результаты, полученные в случае квазидвумерной модели Гейзенберга в приближении ПСФ, приведены в разделе 3. Обсуждение результатов представлено в разделе 4. В приложении рассматривается теория линейных спиновых волн.

2. (

Анизотропная J_1 – J_2 модель Гейзенберга) Анизотропная J_1 – J_2 модель Гейзенберга

2.1. Гамильтониан модели. Для описания АФМ упорядочения в соединениях железа типа 122 рассмотрим J_1 – J_2 модель Гейзенберга для локализованных спинов со слабой связью между плоскостями. Гамильтониан этой модели запишем в виде

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

где узлы решетки обозначены как $i \equiv \mathbf{r}_i$, $j \equiv \mathbf{r}_j$. Обменное взаимодействие имеет вид

$$J_{1,ij} = J_x \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_x} - J_y \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_y} + J_z \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_z}, \quad J_{2,ij} = J_2 \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{d}_{xy}}. \quad (2)$$

Здесь J_{1x}, J_{1y} – обменное взаимодействие между ближайшими соседями в плоскости вдоль осей x и y соответственно, J_{1z} – взаимодействие между плоскостями,

J_2 – взаимодействие между следующими соседями вдоль диагоналей в плоскости $\mathbf{d}_{xy} = \mathbf{a}_x \pm \mathbf{a}_y$. Принимая во внимание результаты экспериментов по неупругому магнитному рассеянию нейтронов [9], [13], [14], будем считать, что в плоскости (x, z) спины имеют АФМ связь, а вдоль оси y – ферромагнитную (ФМ) связь: $J_x > 0$, $J_y > 0$, $J_z > 0$, $J_2 > 0$, причем $J_x \gg J_y$, $J_x \gg J_z$, $J_x > J_2$. При таких условиях взаимодействие не является фрустрированным, и дальний порядок описывается ФМ упорядочением цепочек вдоль оси y с АФМ упорядочением вдоль осей x и z . АФМ упорядоченную фазу Нееля удобно представить в виде двухподрешеточной (A, B) модели, в которой спины $\mathbf{S}_{\mathbf{r}_j \in B}$ на подрешетке B противоположны спинам $\mathbf{S}_{\mathbf{r}_i \in A}$ на подрешетке A . Эти две подрешетки A, B представляют собой плоскости $(1, 0, 1)$, перпендикулярные вектору $[1, 0, 1]$ в орторомбической фазе, как описано в разделе 1.

Для вычисления спектра спиновых возбуждений введем локальную систему координат в подрешетке B (узлы $j \equiv \mathbf{r}_j$), повернутую вокруг оси y на π . При этом спиновые операторы $(S_j^\alpha)'$ на подрешетке B преобразуются следующим образом:

$$(S_j^x)' = -S_j^x, \quad (S_j^y)' = S_j^y, \quad (S_j^z)' = -S_j^z, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} (S_j^+)' &= (S_j^x)' + i(S_j^y)' = -S_j^x + iS_j^y = -S_j^-, \\ (S_j^-)' &= (S_j^x)' - i(S_j^y)' = -S_j^x - iS_j^y = -S_j^+. \end{aligned} \quad (4)$$

В результате гамильтониан $J_1 - J_2$ модели (1) в представлении двух подрешеток после поворота спинов в одной из них согласно (3) может быть записан как гамильтониан ФМ упорядоченной системы

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left\{ \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-] + S_i^z S_j^z \right\} - \\ & -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij}^y \left\{ \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + S_i^z S_j^z \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь мы ввели следующие обозначения для обменного взаимодействия (2):

$$J_{ij} = J_x \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_x} + J_z \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_z} + J_2 \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{d}_{xy}}, \quad J_{ij}^y = J_y \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_y}. \quad (6)$$

Используя коммутационные соотношения для операторов спина S_i^+ , получим уравнение движения

$$i\dot{S}_i^+ = [S_i^+, H] = \sum_m \{ J_{im} (S_m^z S_i^+ - S_i^z S_m^-) + J_{im}^y (S_m^z S_i^+ - S_i^z S_m^+) \} \quad (7)$$

и аналогичное уравнение для $i\dot{S}_i^- = -([S_i^+, H])^\dagger$. Видно, что в результате преобразования исходной АФМ модели Гейзенберга (1) в ФМ модель (5) операторы S_i^+ и S_m^- оказываются связанными, что приводит к появлению аномальных ФГ, как показано ниже.

2.2. Функции Грина. Для вычисления спектра спиновых возбуждений в модели (5) воспользуемся методом уравнений движения для матричных двухвременных ФГ аналогично тому, как это сделано для ФМ системы [15]. (Метод ФГ для

анизотропной АФМ модели Гейзенберга для спина $S = 1/2$ подробно рассмотрен в главе IV в дополнении к монографии [15].) Определим ФГ для произвольного спина S в виде

$$G_{ij,n}^{\alpha,\beta}(t-t') = \langle\langle S_i^\alpha(t) [S_j^z(t')]^n S_j^\beta(t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \langle\langle S_i^\alpha | [S_j^z]^n S_j^\beta \rangle\rangle_\omega, \quad (8)$$

где $n = 0, \dots, 2S - 1$ и $\alpha, \beta = (+, -)$. Здесь введено следующее обозначение для ФГ [21]:

$$\langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle[A(t), B(t')]\rangle, \quad (9)$$

где $[A, B] = AB - BA$, $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$, $\theta(x) = 1$ для $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ для $x < 0$. Статистическое среднее $\langle AB \rangle$ вычисляется с гамильтонианом (5) при температуре T .

Рассмотрим уравнение движения для ФГ (8) с $n = 0$. Используя уравнение (7), получим

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= 2\langle S_i^z \rangle \delta_{i,j} + \\ &+ \sum_m \langle\langle J_{im} (S_m^z S_i^+ - S_i^z S_m^-) + J_{im}^y (S_m^z S_i^+ - S_i^z S_m^+) | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle S_i^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= - \sum_m \langle\langle J_{im} (S_m^z S_i^- - S_i^z S_m^+) + J_{im}^y (S_m^z S_i^- - S_i^z S_m^-) | S_j^- \rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \quad (10)$$

В ПСФ (расщепление Тябликова) для всех ФГ используем приближение

$$\langle\langle S_m^z S_i^\alpha | S_j^- \rangle\rangle_\omega = \langle S_m^z \rangle \langle\langle S_i^\alpha | S_j^- \rangle\rangle_\omega = S\sigma \langle\langle S_i^\alpha | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \quad (11)$$

где намагниченность $\langle S_m^z \rangle = S\sigma$. В результате получим уравнения для ФГ:

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= 2S\sigma \delta_{i,j} + \sum_m A_{im} \langle\langle S_m^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega - \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle S_i^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= - \sum_m A_{im} \langle\langle S_m^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega + \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь взаимодействие спинов описывается матрицей

$$A_{im} = \delta_{i,m} S\sigma \sum_l (J_{il} + J_{il}^y) - S\sigma J_{im}^y, \quad B_{im} = S\sigma J_{im}. \quad (13)$$

Используя преобразование Фурье для спиновых операторов

$$S_i^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}^\pm e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}, \quad (14)$$

получим фурье-представление для ФГ

$$G_{ij}^{+-}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega. \quad (15)$$

Система уравнений для ФГ (12) в представлении (15) примет вид

$$\begin{aligned} (\omega - A_{\mathbf{q}}) \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega &= 2S\sigma - B_{\mathbf{q}} \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega, \\ (\omega + A_{\mathbf{q}}) \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega &= B_{\mathbf{q}} \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (16)$$

где взаимодействие (13) имеет вид

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{q}} &= S\sigma[J(0) - J_y(\mathbf{q})] \equiv S\sigma a(\mathbf{q}), \\ J(0) &= 2(J_x + J_y + 2J_2 + J_z), \quad J_y(\mathbf{q}) = 2J_y \cos q_y, \\ B_{\mathbf{q}} &= S\sigma J(\mathbf{q}) \equiv S\sigma b(\mathbf{q}), \\ J(\mathbf{q}) &= 2(J_x \cos q_x + 2J_2 \cos q_x \cos q_y + J_z \cos q_z). \end{aligned} \quad (17)$$

Решение системы уравнений (16) дает $\Phi\Gamma$ в виде

$$\begin{aligned} \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{2S\sigma(\omega + A_{\mathbf{q}})}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \right) \frac{2S\sigma}{\omega - \omega_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{A_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \right) \frac{2S\sigma}{\omega + \omega_{\mathbf{q}}}, \\ \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{2S\sigma B_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{2S\sigma B_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{q}}} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

где спектр АФМ спиновых возбуждений определяется соотношением

$$\omega_{\mathbf{q}} = S\sigma \sqrt{a^2(\mathbf{q}) - b^2(\mathbf{q})} \equiv S\sigma \varepsilon_{\mathbf{q}}. \quad (19)$$

Из (17) следует, что $\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow sq$ при $q \rightarrow 0$ и $\omega_{\mathbf{q}} \rightarrow c|\mathbf{q} - \mathbf{Q}_{AF}|$ для $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}_{AF} = (\pi, 0, \pi)$. Заметим, что в ФМ случае ($J_x = J_2 = J_z = 0$) мы имеем обычный спектр ФМ спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}^{\text{FM}} = A_{\mathbf{q}}^{\text{FM}} = S\sigma 2J_y(1 - \cos q_y) \approx sq^2$ при $q \rightarrow 0$.

Аналогично уравнениям (12) для $\Phi\Gamma$ (8) в ПСФ получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+ | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega} &= \delta_{i,j} \langle [S_i^+, [S_i^z]^n S_i^-] \rangle + \sum_m A_{im} \langle\langle S_m^+ | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega} - \\ &\quad - \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^- | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega}, \\ \omega \langle\langle S_i^- | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega} &= - \sum_m A_{im} \langle\langle S_m^- | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega} + \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^+ | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega}, \end{aligned} \quad (20)$$

где мы приняли во внимание, что $\langle [S_i^-, (S_j^z)^n S_j^-] \rangle = \pm \delta_{i,j} \langle [S_i^z]^{n-1} [S_i^-, S_i^-] \rangle = 0$.

Используя спектральное представление для $\Phi\Gamma$, вычислим спиновые корреляционные функции:

$$\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \right] \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} = S\sigma \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \text{cth} \frac{S\sigma \varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} - 1 \right), \quad (21)$$

$$\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{-\mathbf{q}}^- \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \right] \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} = S\sigma \frac{b(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \text{cth} \frac{S\sigma \varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T}, \quad (22)$$

где $n(\omega) = [e^{\omega/T} - 1]^{-1}$. Многочастичные спиновые корреляционные функции находятся из соответствующих $\Phi\Gamma$ (20):

$$\begin{aligned} \langle [S_j^z]^n S_j^- S_i^+ \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \right] \langle\langle S_i^+ | [S_j^z]^n S_j^- \rangle\rangle_{\omega} = \\ &= \langle [S_i^+, [S_i^z]^n S_i^-] \rangle \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \text{cth} \frac{S\sigma \varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} - 1 \right), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned}
\langle [S_j^z]^n S_j^- S_i^- \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \right] \langle \langle S_i^- | [S_j^z]^n S_j^- \rangle \rangle_{(\omega+i\delta)} = \\
&= \langle [S_i^+, [S_i^z]^n S_i^-] \rangle \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \frac{b(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \text{cth} \frac{S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T}.
\end{aligned} \quad (24)$$

Используя эти корреляционные функции, вычислим температурную зависимость намагниченности и температуру Нееля.

2.3. Намагниченность. Для вычисления намагниченности $\langle S_i^z \rangle = S\sigma$ мы можем использовать уравнение для произвольного спина S :

$$S_i^- S_i^+ = S(S+1) - S_i^z - (S_i^z)^2, \quad (25)$$

из которого следует соотношение для соответствующих корреляционных функций

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle = S(S+1) - \langle S_i^z \rangle - \langle (S_i^z)^2 \rangle. \quad (26)$$

Корреляционную функцию (21) удобно записать в виде

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle = 2S\sigma \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \text{cth} \frac{S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} - 1 \right) \equiv 2S\sigma P_S(T). \quad (27)$$

Подобная же функция $P_S(T)$, не содержащая множителя $(a_{\mathbf{q}}/\varepsilon_{\mathbf{q}})$, вводится в ФМ модели Гейзенберга [15]. Поэтому для вычисления намагниченности в J_1 - J_2 модели (5) мы можем воспользоваться самосогласованным приближением Тябликова для функции $P_S(T)$ (27) (см. главу IV в дополнении к монографии [15]).

В случае спина $S = 1/2$, когда среднее значение $\langle (S_i^z)^2 \rangle = 1/4$, из (26) получим уравнение для намагниченности:

$$\sigma = 1 - 2\sigma P_{1/2}(T), \quad \sigma = [1 + 2P_{1/2}(T)]^{-1}. \quad (28)$$

В случае $S \geq 1$ для вычисления $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ в (26) рассмотрим уравнение для корреляционной функции (23), имеющее вид

$$\langle [S_i^z]^n S_i^- S_i^+ \rangle = \langle [S_i^+, [S_i^z]^n S_i^-] \rangle P_S(T), \quad (29)$$

где $n = 1, \dots, 2S-1$. С помощью несложных преобразований (см. [15]) можно получить общее выражение для намагниченности в случае произвольного спина S [22]:

$$S\sigma = \frac{(S - P_S)(1 + P_S)^{2S+1} + (1 + S + P_S)P_S^{2S+1}}{(1 + P_S)^{2S+1} - P_S^{2S+1}}. \quad (30)$$

В частности, в случае спина $S = 1$ (см. ниже) это выражение дает

$$\sigma = \frac{1 + 2P_1(T)}{1 + 3P_1(T) + 3P_1^2(T)}. \quad (31)$$

Рассмотрим намагниченность в пределе низких температур, $T \rightarrow 0$, и в случае температур, близких к температуре Нееля, когда намагниченность $\sigma \rightarrow 0$.

2.3.1. *Намагниченность при низких температурах.* Функцию $P_S(T)$ в (33) можно записать в виде

$$P_S(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} n(\omega_{\mathbf{q}}) \equiv p_0 + p_S(T). \quad (32)$$

Для трехмерной решетки при низких температурах, когда спектр АФМ спиновых волн $\varepsilon_{q \rightarrow 0} \propto cq$ и $a(q = 0) = J(0) - 2J_y$, функцию $p_S(T)$ в (32) можно оценить выражением

$$p_S(T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} n(\omega_{\mathbf{q}}) \propto \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{cq} \frac{1}{e^{cq/T} - 1} \propto \alpha T^2. \quad (33)$$

Таким образом, $P_S(T) \approx p_0 + \alpha T^2$ и намагниченность (30) в низшем порядке по T можно записать в виде

$$\sigma_S(T) = \sigma_S(0) - \beta_S T^2. \quad (34)$$

В частности, для $S = 1/2$ из уравнения (28) имеем

$$\sigma_{1/2}(0) = (1 + 2p_0)^{-1}, \quad \beta_{1/2}(0) = 2\alpha(1 + 2p_0)^{-2}, \quad (35)$$

а в случае спина $S = 1$ из уравнения (31) получим

$$\sigma_1(0) = \frac{1 + 2p_0}{1 + 3p_0(1 + p_0)}, \quad \beta_1 = \alpha \frac{1 + 6p_0(1 + p_0)}{[1 + 3p_0(1 + p_0)]^2}. \quad (36)$$

Подобные же уравнения можно получить для произвольного спина S из (30). Заметим, что в случае ФМ модели Гейзенберга намагниченность в пределе низких температур имеет вид $\sigma(T) = \sigma(0) - \alpha T^{3/2}$, где $\sigma(0) = 1$ (см. [15]). В АФМ случае $\sigma(0) < 1$ из-за квантовых флуктуаций, а квадратичная зависимость от температуры в уравнении (34) возникает за счет линейной дисперсии АФМ спиновых волн.

2.3.2. *Температура Нееля.* В пределе высоких температур, вблизи температуры Нееля T_N намагниченность $\sigma \rightarrow 0$ и функцию $P_S(T)$ в (27) можно разложить в ряд по $x = S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}/2T \ll 1$:

$$P_S(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} x - 1 \right] = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \left[\frac{1}{x} + \frac{1}{3}x - \frac{2}{45}x^3 \right] - \frac{1}{2} + \dots \quad (37)$$

Для вычисления намагниченности в этом пределе рассмотрим разложение уравнения (30) в ряд по степеням $P_S(T)^{-1} \propto \sigma$:

$$S\sigma = \frac{S(S+1)}{3} P_S^{-1} - \frac{S(S+1)}{6} P_S^{-2} + \frac{S(S+1)}{3} \frac{9 - 2S - 2S^2}{30} P_S^{-3} - \dots \quad (38)$$

Разложение $P_S(T)^{-1}$ по степеням σ согласно (37) имеет вид

$$P_S^{-1} = \left\{ \frac{T}{S\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}^2} \left[1 + \frac{1}{3} \left(\frac{S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} \right)^2 - \frac{2}{45} \left(\frac{S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} \right)^4 \right] - \frac{1}{2} \right\}^{-1} + \dots \approx$$

$$\approx \frac{2\sigma}{\tau C} \left\{ 1 + \frac{1}{C} \frac{\sigma}{\tau} + \left(\frac{1}{C^2} - \frac{C_1}{C} \right) \left(\frac{\sigma}{\tau} \right)^2 \right\}, \quad (39)$$

где мы приняли во внимание только члены низшего порядка по σ . Здесь введены безразмерная температура $\tau = 2T/SJ_x$ и параметры

$$C = \frac{J_x}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}^2}, \quad C_1 = \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{a_{\mathbf{q}}}{J_x} = \frac{J(0)}{3J_x}. \quad (40)$$

Используя формулу (39), получим для намагниченности (38) следующее уравнение:

$$S\sigma = \frac{S(S+1)}{3} \frac{2\sigma}{\tau C} \left\{ 1 - \left(\frac{\sigma}{\tau} \right)^2 \frac{1}{C^2} \left[1 + CC_1 + \frac{2}{15}(2S^2 + 2S - 9) \right] \right\}. \quad (41)$$

Решение этого уравнения для $\sigma = 0$ определяет температуру Нееля:

$$T_N = J_x \frac{S(S+1)}{3C}. \quad (42)$$

При $T \lesssim T_N$ из уравнения (41) получаем соотношение для намагниченности:

$$\sigma(T) = \sqrt{D \left(1 - \frac{T}{T_N} \right)}, \quad D = (\tau_N C)^2 \left[1 + CC_1 + \frac{2}{15}(2S^2 + 2S - 9) \right]^{-1}. \quad (43)$$

В случае спина $S = 1/2$ имеем $D_{S=1/2} = \tau_N^2(C/C_1)$.

Вычислим температуру T_N для следующих значений параметров взаимодействия (2): $J_x = 1$, $J_y = 0.1J_x$, $J_2 = 0.4J_x$, $J_z = rJ_x$, выраженных в единицах J_x . Эти значения близки к экспериментальным данным, приведенным в работе [9] при $r = 0.1$. Для этих значений величина $C_1 = J(0)/3J_x = 4/3$, а параметр $C(r)$ (40) определяется соотношением

$$C(r) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1.9 + r - 0.1 \cos q_y}{(1.9 + r - 0.1 \cos q_y)^2 - (\cos q_x + 0.8 \cos q_x \cos q_y + r \cos q_z)^2}. \quad (44)$$

На рис. 1 показана логарифмическая зависимость величины $C(r)$ от параметра r взаимодействия между плоскостями, а на рис. 2 приведена безразмерная температура Нееля $\tilde{T}_N(r) = T_N/J_x S(S+1) = 1/3C$. При $r = 0.1$ имеем $C = 0.418$ и $\tilde{T}_N(r) = 1/3C \approx 0.80$. На рис. 3 представлена намагниченность $\sigma(T)$ для спина $S = 1$ и $r = 0.1$ как функция температуры T/J_x , полученная самосогласованным решением уравнения (31). Корневая зависимость при $T \rightarrow T_N$, определяемая выражением (43) с $T_N \approx 1.60J_x$, хорошо описывает данную кривую при $T \rightarrow T_N$. Соотношение (42) дает такое же значение $T_N = (2/3C)J_x = 1.595J_x$.

Экспериментально измеренная температура Нееля T_N в соединениях MFe_2As_2 оказывается значительно меньше, чем величина $T_N \approx 1.60J_x$, определяемая формулой (42) для значений параметров взаимодействия SJ_x , SJ_y , SJ_2 , SJ_z , полученных из теории спиновых волн при $S = 1$ (см. приложение). В частности, для значений параметров из работы [9] с $J_x \approx 50$ мэВ экспериментальное значение $T_N^{\text{exp}} \approx 170$ К примерно в 5.5 раз меньше, чем теоретическое значение температуры Нееля $T_N \approx 1.60 \cdot 600 \text{ К} = 950 \text{ К}$. Подобное же расхождение наблюдается и для других соединений AFe_2As_2 (см. обзоры [9], [13], [14]). В то же время вычисления в ПСФ для купратных соединений дают значение температуры Нееля, достаточно близкое к экспериментальным значениям (см. ниже раздел 3).

Рис. 1. Зависимость $C(r)$ от параметра взаимодействия $r = J_z/J_x$ между плоскостями.

Рис. 2. Зависимость безразмерной температуры Нееля $\tilde{T}_N = T_N/[S(S+1)J_x]$ от параметра $r = J_z/J_x$ взаимодействия между плоскостями.

3. КВАЗИДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА

3.1. Гамильтониан модели и функции Грина. Рассмотрим АФМ модель Гейзенберга с изотропным взаимодействием в плоскости и слабой связью между плоскостями, как, например, в купратных соединениях La_2CuO_4 (LCO) или $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (SCOC). АФМ упорядочение в соединении LCO наблюдается в орторомбической фазе (группа симметрии $Bmab$) с постоянными решетки a, b в плоскости и с постоянной c между плоскостями (см., например, [23]). В парамагнитной фазе (объемноцентрированная тетрагональная решетка, группа симметрии $I4/mmm$) среднее обменное взаимодействие для спина в центре тетрагональной элементарной ячейки равно нулю, что приводит к слабой связи между плоскостями. Температура Нееля в соединении LCO составляет $T_N = 325$ К, обменное взаимодействие ближайших соседей – $J \approx 120$ мэВ и взаимодействие между плоскостями – $J_z \approx 0.002$ мэВ. В соединении

Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности $\sigma(T) = \langle S_i^z \rangle / S$ для спина $S = 1$ и $r = 0.1$.

SCOC $T_N = 251$ К и $J = 125$ мэВ. В дальнейшем мы пренебрегаем небольшой анизотропией в плоскости xy в LCO и SCOC, которая может стабилизировать АФМ упорядочение, но принимаем во внимание слабое взаимодействие между плоскостями J_z , которое важно для получения конечного значения T_N .

Для упрощения вычислений рассмотрим модель с тетрагональной элементарной ячейкой с параметрами решетки $a_x = a_y$ в плоскости и a_z между плоскостями. Гамильтониан модели в парамагнитной фазе имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left\{ \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + S_i^z S_j^z \right\}. \quad (45)$$

Обменное взаимодействие ближайших соседей J_{ij} запишем в виде

$$J_{ij} \equiv J_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} = J(\delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_x} + \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_y}) + J_z \delta_{\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}_z}, \quad (46)$$

где $J_x = J_y = J$ – взаимодействие в плоскости, J_z – взаимодействие между плоскостями. АФМ упорядочение в LCO описывается двумя подрешетками (A, B) в виде плоскостей $(1/2, 0, 0)$, перпендикулярных вектору $[1, 0, 0]$ в орторомбической фазе. Таким образом, АФМ упорядочение определяется волновым вектором $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi/a, 0, 0) \equiv (1, 0, 0)$, где $2\pi/a$, $2\pi/b$ – векторы обратной решетки в плоскости в орторомбической фазе $Bmab$.

Как и в разделе 2, введем локальные координаты в подрешетке B (узлы $j \equiv \mathbf{r}'_j$). Предполагая, что спины на подрешетке B ориентированы вдоль оси $\mathbf{b}$, повернем их вокруг оси $\mathbf{a}$ на π . При этом спиновые операторы $(S_j^\alpha)'$ на подрешетке B преобразуются следующим образом:

$$(S_j^x)' = S_j^x, \quad (S_j^y)' = -S_j^y, \quad (S_j^z)' = -S_j^z, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} (S_j^+)'' &= (S_j^x)' + i(S_j^y)' = S_j^x - iS_j^y = S_j^-, \\ (S_j^-)' &= (S_j^x)' - i(S_j^y)' = S_j^x + iS_j^y = S_j^+, \end{aligned} \quad (48)$$

где мы использовали обозначения x, y, z для осей в орторомбической фазе. Таким образом, гамильтониан модели (45) в представлении двух подрешеток после поворота спинов (47) записывается как гамильтониан ФМ системы:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left\{ \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-] - S_i^z S_j^z \right\}. \quad (49)$$

Используя уравнения движения для операторов спина в этой модели, получим уравнения для ФГ (10):

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= 2 \langle S_i^z \rangle \delta_{i,j} + \sum_m J_{im} \langle\langle (S_i^z S_m^- + S_m^z S_i^+) | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle S_i^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= - \sum_m J_{im} \langle\langle (S_i^z S_m^+ + S_m^z S_i^-) | S_j^- \rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \quad (50)$$

В ПСФ (11) уравнения (50) принимают вид

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= 2S\sigma \delta_{i,j} + A \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega + \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle S_i^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega &= -A \langle\langle S_i^- | S_j^- \rangle\rangle_\omega - \sum_m B_{im} \langle\langle S_m^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (51)$$

где введено перенормированное взаимодействие

$$A = S\sigma \sum_m J_{im}, \quad B_{im} = S\sigma J_{im}. \quad (52)$$

Для фурье-компонент ФГ, аналогичных (15), система уравнений принимает вид

$$\begin{aligned} (\omega - A) \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega &= 2S\sigma + B_{\mathbf{q}} \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega, \\ (\omega + A) \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega &= -B_{\mathbf{q}} \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (53)$$

где по аналогии с формулами (17) введены взаимодействия

$$\begin{aligned} A &= S\sigma J(0) = S\sigma 2J(2+r), \quad r = \frac{J_z}{J}, \\ B_{\mathbf{q}} &= S\sigma J(\mathbf{q}) = S\sigma 2J[\cos q_x + \cos q_y + r \cos q_z]. \end{aligned} \quad (54)$$

Решение этой системы уравнений дает ФГ, аналогичные (18):

$$\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega = \frac{2S\sigma(\omega + A)}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad \langle\langle S_{-\mathbf{q}}^- | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega = -\frac{2S\sigma B_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (55)$$

где спектр АФМ спиновых волн имеет вид

$$\omega_{\mathbf{q}} = \sqrt{A^2 - B_{\mathbf{q}}^2} = S\sigma \varepsilon_{\mathbf{q}}, \quad \varepsilon_{\mathbf{q}} = J(0) \sqrt{1 - \left[\frac{J(\mathbf{q})}{J(0)} \right]^2}. \quad (56)$$

Энергия спиновых волн равна нулю в центре тетрагональной зоны Бриллюэна, мы имеем $q_x = q_y = q_z = 0$, а также для АФМ волнового вектора $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$.

Для корреляционных функций получим выражения, аналогичные (21), (22):

$$\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = S\sigma \left(\frac{J(0)}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} - 1 \right), \quad \langle S_{\mathbf{q}}^- S_{-\mathbf{q}}^- \rangle = -\frac{S\sigma J(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T}. \quad (57)$$

Подобные же выражения получаются для многочастичных корреляционных функций (23), (24).

ТАБЛИЦА 1. Температура Нееля $T_N^{(1)}$ для J_1 – J_2 модели (1) и $T_N^{(2)}$ для модели (45) как функция взаимодействия между плоскостями $r = J_z/J_x$ или $r = J_z/J$ соответственно. Значения $(T_N^{(2)}/J)$ взяты из работ: ^(a) [19], ^(b) [16] (умноженная на 1/2), ^(c) [17], ^(d) [18].

r	C	$\tilde{C}$	$T_N^{(1)}/J_x = 2/3C$	$T_N^{(2)}/J = 1/\tilde{C}$	$T_N^{(a)}$	$T_N^{(b)}$	$T_N^{(c)}$	$T_N^{(d)}$
0.1	0.42	1.9	1.59=950 (K)	0.53=740 (K)	0.56	0.55		0.68
0.01	0.57	2.6	1.17=700 (K)	0.39=540 (K)	0.36	0.39	0.54	0.47
0.001	0.72	3.3	0.92=550 (K)	0.30=420 (K)	0.22	0.30	0.38	0.34
0.0001	0.86	5.9	0.77=465 (K)	0.17=240 (K)	0.17	0.24	0.29	0.25

3.2. Намагниченность. Вычисление намагниченности $\langle S_i^z \rangle = S\sigma$ для модели (45) производится аналогично п. 2.3. Определим функцию

$$P_S(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{J(0)}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \operatorname{cth} \frac{S\sigma\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2T} - 1 \right). \quad (58)$$

Рассмотрим намагниченность при низких температурах, как и в п. 2.3.1, и вычислим температуру Нееля, используя уравнение (41). Безразмерная температура в уравнении (41) равна $\tau = 2T/SJ(0)$, а параметры C и C_1 определяются аналогично (40) как

$$\tilde{C} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{J^2(0)}{\varepsilon_{\mathbf{q}}^2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 - [J(\mathbf{q})/J(0)]^2}, \quad \tilde{C}_1 = \frac{1}{3}. \quad (59)$$

Из соотношения (42) для температуры Нееля получим

$$T_N = J(0) \frac{S(S+1)}{3\tilde{C}}, \quad T_N(S)|_{S=1/2} \approx \frac{J}{\tilde{C}}, \quad (60)$$

где $J(0) = 2J(2+r)$. Намагниченность при $T \lesssim T_N$ описывается формулой (43) с параметрами $\tilde{C}$ и $\tilde{C}_1$.

В табл. 1 мы сравниваем температуры Нееля для двух моделей: в модели J_1 – J_2 , где $J_x = 600$ K, $S = 1$, выражение (42) дает $T_N^{(1)}/J_x = 2/3C$, а в модели (45), где $J = 1400$ K, $S = 1/2$, выражение (60) дает $T_N^{(2)}/J = 1/\tilde{C}$. Параметр $C(r)$ для модели J_1 – J_2 с взаимодействием $J_x = 1$, $J_y = 0.1J_x$, $J_2 = 0.4J_x$, $J_z = rJ_x$ вычислен по формуле (44) и показан на рис. 1. Для модели (45) с взаимодействием (54): $J(0) = 2J(2+r)$, $J(\mathbf{q}) = 2J[\cos q_x + \cos q_y + r \cos q_z]$, $r = J_z/J$, имеем

$$\begin{aligned} \tilde{C} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 - [(\cos q_x + \cos q_y + r \cos q_z)/(2+r)]^2} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dx dy dz}{1 - [\cos x + \cos y + r \cos z]/(2+r)]^2}. \end{aligned} \quad (61)$$

Результаты для АФМ модели Гейзенберга (45) в случае $S = 1/2$ также сравниваются с вычисленными в работах [16]–[20] и экспериментальными данными для T_N в купратных соединениях. Например, в LCO, где $J \approx 120$ мэВ, $r = J_z/J \approx 0.002/120 =$

$1.7 \cdot 10^{-5}$, температура Нееля $T_N = 310$ К. Наши результаты для $T_N^{(2)}/J$ близки к T_N/J из работы [19] и меньше, чем в работах [16]–[18], как отмечено в работе [19]. Заметим, что в работе [16] обменное взаимодействие в два раза меньше, чем в нашей модели, и результаты работы [16] в табл. 1 умножены на 1/2. Хотя параметры $C(J(0)/J_x) \approx 4C$ и $\tilde{C}$ в табл. 1 сравнимы, значения $T_N^{(1)}$ для J_1 – J_2 модели намного выше, чем экспериментальные значения. Большие значения T_N для J_1 – J_2 модели обусловлены сильной связью между плоскостями, $r = J_z/J_x \approx 0.1$, в отличие от купратных сверхпроводников, где $r = J_z/J \approx 10^{-5}$, и экспериментальные результаты количественно согласуются с вычислениями (при сравнении с экспериментом в купратах анизотропия обменного взаимодействия в плоскости должна приниматься во внимание; см. работу [20]).

4. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе мы рассмотрели спектр спиновых возбуждений в анизотропной J_1 – J_2 и изотропной квазидвумерной моделях Гейзенберга для произвольного спина S . Для вычисления температурной зависимости намагниченности и температуры Нееля T_N было использовано приближение случайных фаз (самосогласованное расщепление Тябликова). Результаты вычислений T_N для квазидвумерной модели Гейзенберга достаточно хорошо воспроизводят экспериментальные значения для купратных соединений, в то время как вычисления для J_1 – J_2 модели дают температуру Нееля в несколько раз выше ее значений, наблюдаемых в соединениях AFe_2As_2 . Это расхождение в результатах, полученных в рамках одного и того же метода вычислений, можно объяснить различной природой спиновой динамики в этих соединениях. В нелегированных купратах спины на узлах меди в фазе Мотта–Хаббарда локализованы, в то время как нелегированные соединения на основе железа представляют собой металлы, дальний АФМ порядок в которых обусловлен волной спиновой плотности зонных электронов. Зонный характер спиновой динамики может приводить к сильному затуханию и перенормировке спектра спиновых возбуждений, что наблюдается в эксперименте для высокоэнергетической части спин-волнового спектра (см., например, [14]). Следовательно, для согласованного описания спиновой динамики в соединениях на основе железа необходимо использовать более общую модель, которая бы учитывала взаимодействие локализованных спинов с зонными электронами (подобные модели связанных локальных спинов и зонных электронов были предложены, например, в работах [24], [25]).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Теория линейных спиновых волн

Для вычисления спектра спиновых возбуждений в низкотемпературном пределе воспользуемся линеаризованным преобразованием Гольштейна–Примакова для

спинов в гамильтониане (5):

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} a_i \approx \sqrt{2S} a_i, \\ S_i^- &= \sqrt{2S} a_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} \approx \sqrt{2S} a_i^\dagger, \\ S_i^z &= S - n_i, \quad n_i = a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \quad (62)$$

Здесь операторы $a_i^\dagger$, a_i удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям для бозонов: $[a_i, a_j^\dagger] = a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{i,j}$, $[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$. Подставляя (62) в (5) и сохраняя только билинейные по бозонным операторам члены, получим

$$H = -\frac{S}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) - S \sum_{i,j} J_{ij}^y a_i^\dagger a_j + S J(0) \sum_i a_i^\dagger a_i - \frac{N}{2} S^2 J(0). \quad (63)$$

Вводя преобразование Фурье для операторов

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}, \quad (64)$$

запишем гамильтониан (63) в виде

$$H = S \sum_{\mathbf{q}} \left[a(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} - \frac{1}{2} b(\mathbf{q}) (a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger) \right] - \frac{N}{2} S^2 J(0), \quad (65)$$

где $a(\mathbf{q})$ и $b(\mathbf{q})$ определяются уравнениями (17).

Рассмотрим метод уравнений движения для бозонных двухвременных ФГ аналогично тому, как это было сделано в разделе 3:

$$G_{\mathbf{q}}(t - t') = \langle\langle a_{\mathbf{q}}(t) | a_{\mathbf{q}}^\dagger(t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \langle\langle a_{\mathbf{q}} | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega}. \quad (66)$$

Используя уравнение движения для бозонов в модели (65)

$$i \left(\frac{d}{dt} \right) a_{\mathbf{q}}(t) = [a_{\mathbf{q}}, H] = S a(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}} - S b(\mathbf{q}) a_{-\mathbf{q}}^\dagger,$$

получим систему уравнений для ФГ (66):

$$\begin{aligned} (\omega - S a(\mathbf{q})) \langle\langle a_{\mathbf{q}} | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} &= 1 - S b(\mathbf{q}) \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^\dagger | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega}, \\ (\omega + S a(\mathbf{q})) \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^\dagger | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} &= S b(\mathbf{q}) \langle\langle a_{\mathbf{q}} | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (67)$$

Решение этой системы уравнений дает ФГ:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\mathbf{q}} | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{\omega + S a(\mathbf{q})}{\omega^2 - (\omega_{\mathbf{q}}^{(0)})^2}, \\ \langle\langle a_{-\mathbf{q}}^\dagger | a_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} &= \langle\langle a_{\mathbf{q}} | a_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{S b(\mathbf{q})}{\omega^2 - (\omega_{\mathbf{q}}^{(0)})^2}. \end{aligned} \quad (68)$$

Спектр спиновых возбуждений имеет вид

$$\omega_{\mathbf{q}}^{(0)} = S\sqrt{a^2(\mathbf{q}) - b^2(\mathbf{q})} = S\varepsilon_{\mathbf{q}}, \quad (69)$$

совпадающий со спектром, вычисленным в приближении ПСФ (19) при $\sigma = 1$, и с результатами, полученными в предшествующих работах. В частности, в работе [10] было проведено детальное изучение спектра спиновых волн в J_1 - J_2 модели Гейзенберга на квадратной решетке для спинов $S = 1/2$ и $S = 1$ с обменным взаимодействием ближайших соседей J_a , J_b и взаимодействием следующих соседей J_2 . Было показано, что модель с сильно анизотропными параметрами взаимодействия $J_b = -0.2J_a$ и $J_2 = 0.4J_a$ дает наилучшее согласие с экспериментом для CaFe_2As_2 (в наших обозначениях $J_b = -J_y$, $J_a = J_x$).

Используя спектральное представление, получим средние значения чисел заполнения:

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \right) n(\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \right) n(-\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}), \\ \langle a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}} \rangle &= \langle a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} \rangle = \frac{b(\mathbf{q})}{2\varepsilon_{\mathbf{q}}} [n(\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}) - n(-\omega_{\mathbf{q}}^{(0)})]. \end{aligned} \quad (70)$$

Для изучения термодинамики в модели (65) вычислим внутреннюю энергию

$$\langle H \rangle = S \sum_{\mathbf{q}} \left\{ a(\mathbf{q}) \langle a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle - b(\mathbf{q}) \langle a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} \rangle \right\} - Nu_0, \quad (71)$$

где $u_0 = S^2 J(0)/2$. Намагниченность одной подрешетки определяется выражением

$$m \equiv \langle S_i^z \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle. \quad (72)$$

Рассмотрим основное состояние системы при $T = 0$, когда корреляционные функции (70) принимают вид

$$\langle a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \right), \quad \langle a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} \rangle = \frac{b(\mathbf{q})}{2\varepsilon_{\mathbf{q}}}. \quad (73)$$

Намагниченность (72) при $T = 0$ равна

$$m(0) = S - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right). \quad (74)$$

Внутренняя энергия (71), отнесенная к одному узлу решетки, при $T = 0$ в приближении линейных спиновых волн определяется соотношением

$$u_{\text{LSWT}} \equiv \frac{\langle H \rangle}{N} = \frac{S}{2N} \sum_{\mathbf{q}} [\varepsilon_{\mathbf{q}} - a(\mathbf{q})] - u_0. \quad (75)$$

Для спина $S = 1/2$ и параметров взаимодействия $J_x = 1$, $J_y = 0.1$, $J_2 = 0.4$, $J_z = 0.1$, где $u_0 = S^2(J_x + J_y + 2J_2 + J_z) = 0.5$, после суммирования в формулах (74), (75) по волновому вектору $\mathbf{q}$ получаем

$$m(0) = 0.402, \quad u_{\text{LSWT}} = -0.105 - u_0 = -0.605. \quad (76)$$

Для изотропной двумерной модели Гейзенберга для спина $S = 1/2$, где $J_x = J_z = 1$, $J_y = 0$, $J_2 = 0$ и $u_0 = 2(S)^2 = 0.5$, находим

$$m(0) = 0.303, \quad u_{\text{LSWT}} = -0.158 - u_0 = -0.658. \quad (77)$$

Эти результаты близки к значениям намагниченности и энергии основного состояния в этой модели, полученным в работе [26] методом Монте-Карло ($u = -0.669$, $m(0) = 0.307$), в работе [27] ($u = -0.702$, $m(0) = 0.300$) и в работе [28] ($u = -0.670$, $m(0) = 0.252$) (см. также работу [29]). Температурная зависимость намагниченности при $T \rightarrow 0$, вычисленная в ПСФ в разделе 3 (см. (40)), совпадает с получаемой в приближении линейных спиновых волн (72), где $n(\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}) \propto T^2$.

Сравним значение для относительной намагниченности при $T = 0$ в изотропной двумерной модели Гейзенберга для спина $S = 1/2$ в приближении линейных спиновых волн

$$\sigma(0)_{\text{LSWT}} = \frac{\langle S_i^z \rangle}{S} = 2m(0) = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{a(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right) \equiv 1 - 2p_0 \quad (78)$$

с величиной намагниченности в ПСФ (35). Как видно, выражение (78) может быть получено как первый член разложения в случае $p_0 \ll 1$ в формуле (35). Учитывая (77), (78), находим $\sigma(0)_{\text{LSWT}} = 0.606$ и значение $p_0 = 0.197$. При этом величина намагниченности в ПСФ (35) составляет $\sigma_{1/2}(0) = 0.717$. Таким образом, намагниченность при нулевой температуре в ПСФ (41) больше, чем ее значение в приближении линейных спиновых волн (78), и не совпадает с результатами вычислений методом Монте-Карло: $\sigma(0)_{\text{MC}} = 2m(0) = 0.614$ [26]. Это различие между приближением линейных спиновых волн и ПСФ также возникает в температурной зависимости намагниченности в ФМ модели Гейзенберга. В самосогласованном подходе Тябликова [15] в низкотемпературном пределе $\sigma_{1/2}(T) = [1 + 2P_{1/2}(T)]^{-1} \approx 1 - \alpha T^{3/2} + \beta T^3$, в то время как в приближении линейных спиновых волн член T^3 не появляется. Как показано в дополнении к монографии [15] и в работе [30], учет вкладов высшего порядка при вычислении ФГ позволяет исключить кинематический член T^3 .

Благодарности. Авторы благодарны Ю. Г. Рудому за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке программы “Гейзенберг–Ландау” ОИЯИ.

Список литературы

- [1] Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Высокотемпературные сверхпроводники на основе FeAs-соединений*, РХД, М.–Ижевск, 2009.
- [2] J. Paglione, R. L. Greene, *Nature Phys.*, **6**:9 (2010), 645–658.
- [3] D. C. Johnston, *Adv. Phys.*, **59**:6 (2010), 803–1061, arXiv:1005.4392.
- [4] I. I. Mazin, *Nature*, **464**:7286 (2010), 183–186.
- [5] P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, I. I. Mazin, *Rep. Prog. Phys.*, **74**:12 (2011), 124508, 44 pp., arXiv:1106.3712.
- [6] T. Yildirim, *Phys. Rev. Lett.*, **101**:5 (2008), 057010, 4 pp., arXiv:0804.2252.
- [7] Q. Si, E. Abrahams, *Phys. Rev. Lett.*, **101**:7 (2008), 076401, 4 pp.
- [8] F. Ma, Z.-Y. Lu, T. Xiang, *Phys. Rev. B*, **78**:22 (2008), 224517, 6 pp., arXiv:0804.3370.

- [9] J. Zhao, D. T. Adroja, D. X. Yao, R. Bewley, S. Li, X. F. Wang, G. Wu, X. H. Chen, J. Hu, P. C. Dai, *Nature Phys.*, **5**:8 (2009), 555–560.
- [10] R. Applegate, J. Oitmaa, R. R. P. Singh, *Phys. Rev. B*, **81**:2 (2010), 024505, 8 pp., arXiv: 0910.1793.
- [11] S. O. Diallo, V. P. Antropov, T. G. Perring, C. Broholm, J. J. Pulikkotil, N. Ni, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. Kreyssig, A. I. Goldman, R. J. McQueeney, *Phys. Rev. Lett.*, **102**:18 (2009), 187206, 4 pp., arXiv:0901.3784.
- [12] E. Kaneshita, T. Tohyama, *Phys. Rev. B*, **82**:9 (2010), 094441, 5 pp., arXiv:1002.2701.
- [13] L. W. Harriger, H. Q. Luo, M. S. Liu, C. Frost, J. P. Hu, M. R. Norman, P. Dai, *Phys. Rev. B*, **84**:5 (2011), 054544, 13 pp., arXiv:1011.3771.
- [14] R. A. Ewings, T. G. Perring, J. Gillett, S. D. Das, S. E. Sebastian, A. E. Taylor, T. Guidi, A. T. Boothroyd, *Phys. Rev. B*, **83**:21 (2011), 214519, 6 pp., arXiv:1011.3831.
- [15] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1975.
- [16] N. Majlis, S. Selzer, G. C. Strinati, *Phys. Rev. B*, **45**:14 (1992), 7872–7881; **48**:2 (1993), 957–964.
- [17] P. Kopietz, *Phys. Rev. Lett.*, **68**:23 (1992), 3480–3483.
- [18] F. Suzuki, C. Ishii, *J. Phys. Soc. Japan*, **62**:10 (1993), 3686–3693.
- [19] L. Siurakshina, D. Ihle, R. Hayn, *Phys. Rev. B*, **61**:21 (2000), 14601–14606, arXiv: cond-mat/0001132.
- [20] D. Ihle, C. Schindelin, H. Fehske, *Phys. Rev. B*, **64**:5 (2001), 054419, 6 pp., arXiv: cond-mat/0105087.
- [21] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71** (1960), 71–116.
- [22] E. Praveczi, *Phys. Lett.*, **6**:2 (1963), 147–149.
- [23] M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, Y. Endoch, *Rev. Modern Phys.*, **70**:3 (1998), 897–928.
- [24] S.-P. Kou, T. Li, Z.-Y. Weng, *Europhys. Lett.*, **88**:1 (2009), 17010, 6 pp., arXiv:0811.4111.
- [25] W. Lv, F. Krüger, P. Phillips, *Phys. Rev. B*, **82**:4 (2010), 045125, 10 pp.
- [26] U.-J. Wiese, H.-P. Ying, *Z. Phys. B*, **93**:2 (1994), 147–150.
- [27] H. Shimahara, S. Takada, *J. Phys. Soc. Japan*, **60**:7 (1991), 2394–2405.
- [28] A. Sokol, R. R. P. Singh, N. Alstner, *Phys. Rev. Lett.*, **76**:23 (1996), 4416–4419, arXiv: cond-mat/9602044.
- [29] S. Winterfeldt, D. Ihle, *Phys. Rev. B*, **56**:9 (1997), 5535–5541.
- [30] Н. М. Плакида, *ТМФ*, **168**:3 (2011), 518–535.

Поступила в редакцию 21.05.2013