

Институт физики металлов УрО РАН

На правах рукописи

Катанин Андрей Александрович

# **Флуктуационные эффекты в низкоразмерных локализованных и зонных магнетиках**

Специальность 01.04.09 – физика низких температур

Диссертация на соискание  
ученой степени доктора  
физико-математических наук

Екатеринбург  
2011

# Содержание.

Введение .....	4
<b>Раздел I. Флуктуационные эффекты в низкоразмерных локализованных магнетиках</b>	
Глава 1. Квазидвумерные магнетики	
1.1. Спин-волновые приближения и приближение Тябликова.....	22
1.2. Перенормировка вершины межмагнетонного взаимодействия и подрешеточной намагниченности поправками по $1/S$ .....	33
1.3. Представление континуального интеграла для спиновых систем .....	38
1.4. Ренормгрупповой анализ изотропных и легкоосных магнетиков .....	43
1.5. $1/N$ разложение в $O(N)$ модели изотропных и легкоосных квантовых антиферромагнетиков .....	54
1.6. Сравнение с экспериментальными данными .....	74
1.7. Квазидвумерные магнетики с анизотропией типа «легкая плоскость» .....	81
Глава 2. Квазиодномерные изотропные антиферромагнетики	
2.1. Модель.....	88
2.2. Самосогласованная спин-волновая теория .....	88
2.3. Процедура бозонизации.....	91
2.4. Приближение среднего поля для бозонизированного гамильтониана	92
2.5. Теория возмущений по $J'$ и поправки первого порядка по $1/z_{\perp}$ к межцепочечному приближению среднего поля .....	95
2.6. Поправки к подрешеточной намагниченности основного состояния	101
2.7. Сравнение с экспериментальными данными .....	102

## Раздел II. Магнитные и сверхпроводящие флуктуации в зонных магнетиках

Глава 3. Магнетизм и сверхпроводимость в однозонной модели Хаббарда в режиме слабой и промежуточной связи	
3.1. Модель и приближение случайных фаз .....	105
3.2. Ренормгрупповые подходы .....	110
3.3. Фазовые диаграммы .....	121
Глава 4. Спектральные свойства вблизи магнитных неустойчивостей	
4.1. Собственная энергия в некоторых простых подходах .....	142
4.2. Результаты функциональной РГ в окрестности АФМ неустойчивости .....	149
4.3. Результаты функциональной РГ в окрестности ФМ неустойчивости .....	155
4.4. Самосогласованный подход вблизи ФМ неустойчивости при $T \ll T^*$ .....	160
4.5. Приближение динамической вершины в окрестности АФМ неустойчивости .....	168
Заключение .....	176
Список литературы .....	182

## Введение

Исследование низкоразмерного магнетизма - важная задача современной физики твердого тела. Экспериментальный интерес к этой проблеме связан с магнитными свойствами медно-оксидных высокотемпературных сверхпроводников, органических соединений, ферромагнитных пленок, мультислоев и поверхностей [1]. Существенный прогресс в теории основного состояния и термодинамических свойств слоистых систем был достигнут благодаря использованию численных методов (квантовый метод Монте-Карло и метод ренормгруппы). В то же время, аналитические подходы, позволяющие описать термодинамические свойства слоистых систем в широком интервале температур, могут быть полезны как для теоретического понимания физических свойств этих систем, не очевидных из результатов численных расчетов, так и для практических целей описания реальных соединений.

Магнитное упорядочение в низкоразмерных системах возникает главным образом благодаря слабой анизотропии и/или слабому межцепочечному (межплоскостному) обмену. Эта особенность согласуется с теоремой Мермина-Вагнера, утверждающей, что двумерные *изотропные* магнетики обладают дальним порядком только в основном состоянии. В связи со слабостью анизотропии и/или межцепочечного (межплоскостного) обмена в большинстве магнитных систем, они обладают конечной, но малой температурой магнитного перехода  $T_M \ll |J|$  ( $J$  - величина обменного взаимодействия в плоскости или вдоль цепочек).

Относительно низкие значения температур магнитного перехода приводит к ряду специфических особенностей этих систем. В частности, ближний магнитный порядок не разрушается полностью выше  $T_M$  (в двумерной ситуации он сохраняется до  $T \sim |J|$ ), так что существует широкая область при  $T > T_M$  с сильным ближним порядком.

Экспериментально, ближний порядок может быть обнаружен в исследованиях упругого и неупругого нейтронного рассеяния: четкие пики неупругого рассеяния наблюдаются в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [2],  $\text{Rb}_2\text{MnF}_4$  и  $\text{K}_2\text{NiF}_4$  [3], хорошо определенные спиновые волны наблюдаются в  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  вплоть до температуры  $T \sim 2T_N$  [4].

Простейшим методом исследования магнетиков с локальными моментами является стандартная спин-волновая теория, применимая, однако, лишь при низких температурах  $T \ll T_M$ . При более высоких температурах поправки вследствие взаимодействия спиновых волн становятся существенными. Поправки низшего порядка (так называемая перенормированная спин-волновая теория) были рассмотрены много лет назад для трехмерной модели Гейзенберга [5], аналогичные результаты были получены в рамках вариационного подхода для изотропной [6] и анизотропной [7] модели Гейзенберга. Близкие идеи использовались для двумерных магнетиков в теории «среднего поля» для бозонных операторов [8-10], основанной на представлении операторов спина через швингеровские бозоны, и «модифицированной спин-волновой теории» [11], основанной на представлении Дайсона-Малеева. Результаты этих теорий находятся в хорошем согласии со скейлинговыми вычислениями [12,13] и экспериментальными данными для спектра возбуждений в  $\text{CuO}_2$  плоскостях  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Подходы [8-11] также были применены к квазидвумерным [14-17], фрустрированным двумерным [18-22] и трехмерным [19] антиферромагнетикам.

Однако при не слишком низких температурах эти приближения недостаточны. В частности, величина температуры магнитного перехода, получаемая в спин-волновых теориях, оказывается завышенной по сравнению с экспериментальными данными, критическое поведение описывается также неправильно. Эти недостатки связаны с учетом динамического взаимодействия спиновых волн лишь в наинизшем,

борновском, приближении. Для правильного описания термодинамических свойств в широком температурном интервале необходимо суммирование ведущих вкладов в термодинамические величины во всех порядках теории возмущений по магнон-магнонному взаимодействию. При этом, в отличие от трехмерных систем, кинематическое взаимодействие спиновых волн менее важно для слоистых систем (фактически, оно играет роль только в узкой критической области около  $T_M$ ).

В случае квазидвумерных магнетиков со слабым межплоскостным обменом и/или слабой анизотропией типа «легкая ось», спектр возбуждений может существенно отличаться от спин-волнового. При этом можно выделить три температурных режима. При низких температурах  $T \ll T_M$ , как уже упоминалось, применима спин-волновая теория. При промежуточных температурах  $T \sim T_M$  вне критической области взаимодействие спиновых волн становится существенным, но спиновые флуктуации носят двумерный изотропный характер (по этой причине этот режим далее именуется «двумерный гейзенберговский режим»). Наконец, в узкой критической области вблизи  $T_M$  происходит переход от вышеупомянутого двумерного гейзенберговского режима к трехмерному гейзенберговскому (или двумерному изинговскому) критическому режиму. Описание поведения (подрешеточной) намагниченности в этих режимах и вычисление температуры магнитного перехода с учетом неспинволновых возбуждений представляет собой важную теоретическую задачу, актуальную также для описания экспериментальных данных слоистых соединений.

Ситуация, аналогичная системам с анизотропией «легкая ось», имеет место для двумерных системы с анизотропией типа «легкая плоскость». Сюда относятся, например, соединения  $K_2CuF_4$ ,  $NiCl_2 \cdot BaNi_2(PO_4)_2$  [27]. Классическая двумерная XY модель была изучена подробно в ранних работах [28,29], где было продемонстрировано наличие топологических

(вихревых) возбуждений. В частности, было показано, что в этой модели существует переход Костерлица-Таулеса, связанный с диссоциацией вихревых пар при температуре  $T_{KT} = \pi |J| S^2 / 2$ , при которой степенная зависимость корреляционной функции спинов от расстояния изменяется на экспоненциальную (в квантовой XY модели ситуация более сложна, поскольку в этом случае должны быть учтены не только поперечные, но также и  $z$ -компоненты спина). В случае слабой анизотропии типа «легкая плоскость» выражение для температуры Костерлица-Таулеса в ведущем логарифмическом порядке (в приближении невзаимодействующих спин-волновых возбуждений) было получено в [30]. Также как в случае изотропных и легкоосных магнетиков, результат работы [30] недостаточен для количественного описания экспериментальных данных и актуальной является проблема вычисления  $T_{KT}$  с более высокой точностью. Такое вычисление может также позволить определить температуру магнитного перехода, близкую к  $T_{KT}$ .

Еще один класс низкоразмерных магнитных систем с локальными моментами - системы, содержащие цепочки магнитных атомов. Существует много реальных соединений, являющихся квазиодномерными, то есть обладающих маленьким межцепочечным обменом. Сюда принадлежат, например,  $KCuF_3$ ,  $Sr_2CuO_3$  ( $S = 1/2$ ),  $CsNiCl_3$  ( $S = 1$ ),  $CsVCl_3$  ( $S = 3/2$ ) и т.д. Хотя существует множество подходов, позволяющих определить параметры основного состояния и термодинамические свойства чисто одномерных магнетиков (Бете-анзац, точная диагонализация, различные версии численной ренормгруппы, квантовый метод Монте-Карло и т.д.), их обобщение на случай наличия межцепочечного обмена не тривиально. Точные решения типа Бете-анзаца не обобщаемы на случай конечного межцепочечного обмена, в то время как температуры фазовых переходов в этом случае малы для надежного применения численных методов, таких как квантовый метод Монте-Карло.

Таким образом, представляет интерес развитие теоретических подходов, которые могут адекватно описать ситуацию в квазиодномерных магнетиках в присутствии межцепочечного обмена.

Известный теоретический результат Халдейна [31], выполнившего преобразование проблемы цепочки к нелинейной-сигма модели, утверждает что случаи цепочек целого и полуцелого спина качественно различны. Для цепочек полуцелого спина появляется так называемый топологический  $\theta$ -член в эффективном действии, приводящий к необычному магнитному поведению таких цепочек. Согласно результатам Бете-анзаца и бозонизации для одной цепочки с  $S=1/2$  (та же самая ситуация имеет место при любом полуцелом значении спина), основное состояние в этом случае обладает «квазидальним порядком», при котором спиновые корреляции на больших расстояниях спадают по степенному, а не экспоненциальному закону. Спектр возбуждений является при этом бесщелевым, хотя намагниченность равна нулю (ситуация напоминающая XY модель ниже точки Костерлица-Таулеса  $T_{KT}$ ).

Естественно предположить, что в этом случае истинный дальний порядок образуется при произвольно малом межцепочечном обмене  $J'$  и/или магнитной анизотропии. Для изотропной модели Гейзенберга, эта проблема была исследована с помощью различных теоретических методов. Межцепочечная теория среднего поля [32-34] предсказывает для подрешеточной намагниченности основного состояния  $\bar{S}_0$  и температуры Нееля  $T_N$  результаты

$$\bar{S}_0 \propto \sqrt{|J'|/J}, \quad T_N \propto |J'| \quad (0.0.1)$$

и, таким образом, наличие дальнего порядка при произвольно малых  $|J'|$ . Результат (0.0.1) существенно отличается от результата стандартной спин-волновой теории, которая не делает различия между целым и полуцелыми спинами и предсказывает конечное критическое значение,  $J'_c \sim J e^{-\pi S}$ , так, что при  $|J'| < J'_c$  подрешеточная намагниченность  $\bar{S}_0$  исчезает и

$$\bar{S}_0 \propto \ln |J'/J'_c|, \quad T_N \propto \bar{S}_0 \sqrt{|J'|} \quad (0.0.2)$$

при  $|J'| > J'_c$ . Это противоречие было разрешено с помощью метода ренормгруппы [35-38], показавшего, что для масштабов обратной длины  $\mu \gg J'_c/J$  стандартная спин-волновая теория действительно применима, и намагниченность логарифмически зависит от масштаба  $\bar{S}_0 \propto \ln \mu$ . В то же время, для полуцелых спинов при  $\mu \ll J'_c/J$  имеет место зависимость  $\bar{S}_0 \propto \mu^{1/2}$  [36,37], что означает справедливость результата (0.0.1) при  $|J'| \ll J'_c$ .

В предельном квантовом случае  $S = 1/2$  имеем  $J'_c \sim J$  и результат (0.0.1) межцепочечной теории среднего поля является качественно правильным в широкой области  $|J'|$ . В то же время, эта теория не принимает во внимание эффекты корреляций между спинами, расположенными на разных цепочках. В частности, значение температуры Нееля (0.0.1) не чувствительно к пространственной размерности системы, хотя в случае цепочек, находящихся в одной плоскости температура Нееля должна быть равна нулю в силу теоремы Мермина-Вагнера, а для трехмерного случая, значения  $T_N$  оказываются слишком высокими по сравнению с экспериментальными данными.

Чтобы определить поправки к межцепочечной теории среднего поля, можно использовать  $1/z_\perp$ -разложение ( $z_\perp$  - число ближайших соседей в направлениях поперечных к цепочкам). Этот подход подобен  $1/z$  разложению (или разложению по обратному радиусу взаимодействия) использовавшемуся много лет назад, чтобы улучшить стандартную теорию среднего поля гейзенберговских магнетиков [39-41]. Применение подхода  $1/z_\perp$ -разложения для нахождения поправок к межцепочечной теории среднего поля представляет в этой связи актуальную задачу, поскольку может позволить определить температуру Нееля квазиодномерных систем с большей точностью, чем в межцепочечном приближении среднего поля.

Ситуация, отличная от магнетиков с локализованными моментами, имеет место в зонных магнетиках. В этом случае магнитный момент на узле, определяемый величиной  $\langle \mathbf{S}^2 \rangle$ , может сильно варьироваться в зависимости от параметров модели. В этой связи случаи слабых ( $\langle \mathbf{S}^2 \rangle \ll S^2$ ) и сильных ( $\langle \mathbf{S}^2 \rangle \sim S^2$ ) магнетиков существенно различаются [42]. В то время как описание сильных магнетиков неизбежно связано с рассмотрением режима сильной связи по электрон-электронному взаимодействию, случай слабых магнетиков может быть рассмотрен на основе методов теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию.

Теория возмущений для слабых зонных магнетиков сталкивается, однако, со значительными трудностями в присутствии сингулярностей Ван-Хова. Эти сингулярности наиболее типичны для двумерных систем, но могут также проявляться в трехмерных системах в связи с наличием линий «слившихся» сингулярностей, возникающих из-за геометрических особенностей решетки, либо других факторов [43]. Присутствие ван-хововских сингулярностей приводит к логарифмическим расходимостям в рядах теории возмущений, приводя, таким образом, к необходимости суммирования бесконечных последовательностей диаграмм. Поскольку расходимости появляются одновременно во всех каналах электрон-электронного рассеяния, естественным методом такого суммирования является либо паркетный либо ренормгрупповой подход. Ситуация в присутствии ван-хововских сингулярностей во многом аналогична проблеме одномерных зонных систем [44], где применение указанных подходов оказалось особенно эффективным. В двумерном случае однако, наряду с однократными логарифмическими расходимостями возникают квадраты логарифмов, что вносит дополнительные сложности.

Другая особенность зонных систем – возможность формирования сверхпроводящего состояния. В то время, как в отсутствие взаимодействия электронов с решеткой формирование «обычной» сверхпроводимости со

сверхпроводящей щелью, однородной на Ферми-поверхности, является затруднительным, магнитные флуктуации могут приводить к «необычным» типам сверхпроводимости со сверхпроводящей щелью, существенно изменяющейся в зависимости от положения на Ферми поверхности. Тесная связь между антиферромагнетизмом (АФМ) и сверхпроводимостью  $d$ - типа явилась предметом интенсивных исследований в течение последних двух десятилетий [45-51]. В частности, свойства высокотемпературных сверхпроводящих материалов (ВТСП) считаются тесно связанными с антиферромагнитными корреляциями имеющимися в этих материалах, и многие особенности этих материалов удалось объяснить с точки зрения конкуренции между антиферромагнитными и сверхпроводящими корреляциями [47]. В некоторых системах (например, слоистом рутенате  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [52]) наиболее вероятным типом сверхпроводящего спаривания является спаривание триплетного типа. Было предложено, что спаривание в этом материале возникает благодаря ферромагнитным спиновым флуктуациям [53,54]. Хотя неупругое рассеяние нейтронов не показывает наличия существенных ферромагнитных спиновых флуктуаций в этом материале [55], эта идея находит экспериментальную поддержку измерениями восприимчивости электронно-допированных соединений  $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{RuO}_4$  [56].

Таким образом, представляет интерес исследование конкуренции и взаимодействия между магнитными и сверхпроводящими неустойчивостями в двумерных коррелированных электронных системах. Для этого типа анализа важно учитывать особенности формы Ферми поверхности и электронной дисперсии. Влияние формы Ферми-поверхности на сверхпроводимость и магнитные свойства представляет интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения, причем теоретический анализ может руководствоваться информацией,

полученной из экспериментальных данных, в частности фотоэмиссионных экспериментов (ARPES) [57-60].

Простейшей теоретической моделью, позволяющей исследовать влияние зонной структуры на магнитное упорядочение и сверхпроводимость двумерных систем, является однозонная  $t-t'$  модель Хаббарда на квадратной решетке, учитывающая перескок электронов между ближайшими  $t$  и следующими за ближайшими  $t'$  соседями. Уже в ранних исследованиях в рамках приближения среднего поля и квантового метода Монте-Карло [61] было установлено, что в зависимости от отношения  $t'/t$  и заполнения зоны, возможны различные типы неустойчивостей в этой модели. При малых  $t'/t$  около половинного заполнения Ферми-поверхность обладает свойством нестинга, которое является причиной возникновения антиферромагнетизма. В то же время, конечное значение  $t'$  исключает нестинг Ферми-поверхности и поэтому приводит к «фрустрации» антиферромагнетизма, связанной с процессами перескока в пределах одной подрешетки. Эти процессы одновременно способствуют появлению сверхпроводимости [62]. При больших значениях  $t'$  система ближе к ферромагнитной неустойчивости, поскольку для  $t'/t$  близко к  $1/2$  дисперсия является плоской вблизи дна зоны. Это приводит к ферромагнетизму, образованному почти плоской зоной [63-66].

В то время как основные тенденции (ферро- и антиферромагнетизм, сверхпроводимость) были выявлены уже в рамках ранних подходов, надежное построение фазовой диаграммы является затруднительным ввиду наличия вышеотмеченной проблемы сингулярностей Ван-Хова. Эти сингулярности приводят к появлению расходимостей как в частично-дырочном так и в частично-частичном каналах, что делает ранее использованные приближения среднего поля и T-матрицы качественно недостаточными, поскольку они предназначены для учета сингулярностей

только в *одном*, частично-дырочном или частично-частичном каналах соответственно.

Адекватным способом учета расходимостей, появляющихся в разных каналах электронного рассеяния, являются паркетный подход или метод ренормгруппы. Паркетный подход был ранее применен к случаю одномерных [67] и квазиодномерных [68] систем, а также для систем с сингулярностями Ван-Хова при  $t'=0$  [69-71]. Этот метод позволяет просуммировать ведущие логарифмические сингулярности, возникающие в разных каналах электронного рассеяния. Метод функциональной ренормгруппы [72-75], с другой стороны, учитывает как полную импульсную зависимость вершин электрон-электронного взаимодействия на всей Ферми-поверхности, так и оба типа вкладов, сингулярные и регулярные, в перенормировку этих вершин. Этот метод обладает несомненно большей мощностью по сравнению с паркетным подходом работ [67-71] поскольку позволяет получить количественно правильные результаты относительно возможности различных неустойчивостей как при ван-хововских, так и при других заполнениях. Задача систематического исследования фазовых диаграмм в режиме слабой связи двумерной модели Хаббарда в рамках метода РГ является, таким образом, важной для понимания условий формирования магнетизма и сверхпроводимости в двумерных системах. Представляет также интерес задача правильного определения зависимости сверхпроводящего параметра порядка от импульса на Ферми поверхности.

Еще один аспект проблемы зонных систем – возможность формирования нефермижидкостного состояния. Это состояние привлекло к себе значительное внимание в последнее время и обычно связывается с нарушением квазичастичной концепции в некотором диапазоне энергий вокруг уровня Ферми. Важный пример - явление псевдощели, наблюдаемое в слабодопированных ВТСП соединениях [76], проявляющееся в частичном исчезновении Ферми поверхности и

существовании дырочных «карманов» около диагонали зоны Бриллюэна. Существующие теории связали происхождение псевдощели с антиферромагнитными флуктуациями [76-79], наличием предсформировавшихся куперовских пар [80,81], а также с существованием орбитальных токов [82].

Исходно, формирование псевдощели благодаря АФМ корреляциям было исследовано в рамках модельной формы магнитной восприимчивости в [76]. Последующие исследования формирования псевдощели в двумерной модели Хаббарда использовали ФЛЕКС-приближение [83,84], двухчастично-самосогласованное приближение (TPSC) [85, 86] и приближение динамического кластера [87]. ФЛЕКС-приближение и двухчастично-самосогласованное приближение рассматривают лишь определенный набор диаграмм для собственной энергии и следовательно не являются достаточными. Так, ФЛЕКС-приближение показало возможность нефермижидкостных состояний при половинном заполнении и низких температурах [83], но при заполнении отличном от половинного, ФЛЕКС обнаружил лишь слабую вариацию квазичастичного веса вокруг Ферми-поверхности [84]. Исследования квантовым методом Монте-Карло на конечных кластерах [88] обеспечили понимание поведения спектральной функции в режиме сильной связи, но были не способны проследить формирование псевдощели в режиме слабой и промежуточной связи. При этом, режим слабой и промежуточной связи при неполновинном заполнении является мало исследованным в настоящее время и представляет несомненный интерес для исследования. Даже вне попыток исчерпывающего описания физики ВТСП материалов, изучение формирования псевдощели и его связи с нарушением концепции Ферми жидкости (ФЖ) в рамках модельных подходов является важным с теоретической точки зрения.

В то время как некоторые результаты были получены ранее для электронных свойств около АФМ состояния, гораздо меньше известно об

эволюции электронных свойств в парамагнитной фазе около ферромагнитной неустойчивости. Теория парамагнонов [42,89-91], сосредоточилась главным образом на описании магнитных свойств, игнорируя перенормировку электронных функций Грина. Однако, уже Дониах и Энгельсберг [92] показали, что в трех измерениях квазичастичный вес исчезает логарифмически при приближении к ФМ квантовому фазовому переходу. Для двумерных систем, зависимость собственной энергии в квантовой критической точке (ККТ)  $\varepsilon^{2/3}$  может быть определена из аналогичных вычислений в контексте калибровочных теорий [93].  $\varepsilon^{2/3}$  зависимость собственной энергии от частоты приводит к исчезновению квазичастичного веса на уровне Ферми и нарушению квазичастичной концепции.

Нарушение квазичастичной концепции вблизи ККТ может оказаться даже более выраженным при конечных температурах. Для фермионов, взаимодействующих с калибровочным полем, было показано, что мнимая часть собственной энергии расходится на уровне Ферми при  $T > 0$  как следствие расходящейся статической спиновой восприимчивости  $\chi(0,0)$  [93]. Эта расходимость должна необходимо приводить к особенностям частично-дырочных неустойчивостей с нулевой передачей импульса (в частности ферромагнитной неустойчивости) в фермионных системах с короткодействующим взаимодействием. Хотя магнитная корреляционная длина  $\xi$  в двумерных системах конечна при конечной температуре, большие значения корреляционной длины над упорядоченным основным состоянием (в так называемом перенормированном классическом режиме, обладающим экспоненциально большой корреляционной длиной) [94] могут привести к особенно сильным собственно-энергетическим эффектам.

Таким образом, представляет интерес исследование конечно-температурного поведения собственной энергии вблизи ФМ и АФМ неустойчивости. При этом могут использоваться как методы, не учитывающие обратное влияние поправок к электронным свойствам, такие

как двухчастично-самосогласованная теория<sup>1</sup>, метод функциональной РГ [72-75], и приближение динамической вершины, так и более сложные подходы, самосогласованные относительно собственно-энергетических поправок. Наиболее последовательно такое самосогласование может быть осуществлено в паркетном подходе [67,97,98], который однако довольно сложен для численных исследований фермионных систем в пространстве размерности  $d > 1$ . Чтобы получить качественные результаты в перенормированном классическом режиме, альтернативой может служить применение подхода тождеств Уорда, использованный ранее Эдвардсом и Герцем [99] для вычисления собственной энергии в упорядоченной ФМ фазе. Обобщение этого подхода на магнитно-разупорядочные системы до настоящего времени не было осуществлено.

Все вышеперечисленные проблемы представляют собой проблемы адекватного учета флуктуационных эффектов в системах с локализованными и делокализованными электронами, выходящие за пределы наинизших порядков теории возмущений и приближения среднего поля. Применение современных математических методов к этому классу проблем является актуальной задачей и служит содержанием данной работы.

Диссертация состоит из Введения, двух разделов, содержащих четыре главы, а также Заключение.

Первый раздел посвящен вычислению флуктуационных поправок к намагниченности и температуре магнитного фазового перехода локализованных магнетиков, второй раздел посвящен рассмотрению магнитных и сверхпроводящих флуктуаций в зонных системах.

---

<sup>1</sup> Указанная теория является самоогласованной относительно двухчастичных свойств, но не учитывает собственно-энергетических поправок.

В первой главе исследуются намагниченность и температура магнитного фазового перехода слоистых магнетиков с анизотропией типа «легкая ось» и «легкая плоскость». В параграфе 1.1 суммированы основные результаты спин-волновых теорий и приближения Тябликова, а также приведены аналитические результаты этих подходов для намагниченности и температур Кюри (Нееля) в пределе малой анизотропии и межплоскостного обмена. Затем, в параграфе 1.2 модель Гейзенберга формулируется на языке континуальных интегралов, что позволяет в параграфах 1.3 и 1.4 применить для ее анализа соответственно метод ренормгруппы (РГ) и  $1/N$  разложения и получить результаты для намагниченности и температуры магнитного перехода с учетом флуктуационных поправок. В параграфе 1.5 производится сравнение полученных результатов с экспериментальными данными по слоистым системам. Наконец, в параграфе 1.6 ренормгрупповой подход применяется для вычисления температуры Костерлица-Таулеса и температуры магнитного фазового перехода систем с анизотропией «легкая плоскость», полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными.

Во второй главе исследуются намагниченность и температура магнитного фазового перехода квазиодномерных изотропных магнетиков. В параграфах 2.1, 2.2 содержится формулировка модели Гейзенберга для указанных систем и обсуждается применимость к ним стандартной спин-волновой теории. В параграфе 2.3 выполняется переход от исходных спиновых операторов к эффективным бозе-возбуждениям (так называемая процедура бозонизации). В параграфе 2.4 межцепочечное приближение среднего поля формулируется в виде, удобном для дальнейшего изложения. В параграфах 2.5 и 2.6 развивается теория возмущений по межцепочечному обмену  $J'$  и вычисляются поправки первого порядка по  $1/z_{\perp}$  к намагниченности и температуре Нееля, определенным в межцепочечном приближении среднего поля. В параграфе 2.7

производится сравнение полученных результатов с экспериментальными данными по квазиодномерным системам.

В третьей главе рассматриваются фазовые диаграммы однозонной модели Хаббарда – простейшей модели, позволяющей описать зонные магнитные системы. В параграфе 3.1 содержится формулировка модели и приближения случайных фаз, а также показывается качественная недостаточность этого приближения для построения фазовых диаграмм модели. Параграф 3.2 содержит формулировку двух- и много-патчевого ренормгруппового подходов. В параграфе 3.3 приводятся результаты численного решения ренормгрупповых уравнений.

В четвертой главе рассматриваются спектральные свойства: собственная энергия электронов и их спектральные функции вблизи магнитных неустойчивостей. В параграфе 4.1 производится предварительный анализ собственной энергии электронов в рамках теории среднего поля и двухчастично-самосогласованного приближения. В параграфах 4.2 и 4.3 функциональная ренормгруппа применяется для определения спектральных свойств вблизи антиферро- и ферромагнитных нестабильностей. Параграф 4.4 содержит самосогласованный анализ спектральных свойств вблизи ФМ неустойчивости при низких температурах. Параграф 4.5 посвящен обсуждению приближения динамической вершины, применимого в режиме сильного кулоновского взаимодействия. Наконец, Заключение суммирует основные результаты работы.

На защиту выносятся следующие положения данной работы:

- 1) Построена количественная теория квазидвумерных магнетиков с анизотропией типа «легкая ось» и «легкая плоскость», согласующаяся с экспериментальными данными.

2) Предложен новый метод вычисления температур Нееля квазиодномерных изотропных магнетиков, приводящий к согласию с экспериментальными данными

3) Определены фазовые диаграммы двумерной модели Хаббарда вблизи ван-хововских заполнений; продемонстрировано наличие конкуренции различных параметров порядка и существенное отличие результатов от предсказаний теории среднего поля

4) Выявлено наличие сильной анизотропии спектральных свойств двумерной модели Хаббарда вблизи антиферромагнитной неустойчивости в качественном согласии с экспериментальными данными.

5) Установлен эффект пред-расщепления Ферми поверхности вблизи ферромагнитной неустойчивости.

Апробация работы. Результаты работы опубликованы в печати и докладывались на конференциях: «17-й семинар по спиновым волнам» (г. Санкт-Петербург, 1998 г.), «Новые магнитные материалы для микроэлектроники» (г. Москва, 1999 г.), «12-я конференция по сильнокоррелированным системам» (г. Триест, Италия, 2000 г.), «Электронная структура и магнетизм сильнокоррелированных систем» (г. Миасс, 2001 г.), Гордоновская конференция по сверхпроводимости (г. Оксфорд, Англия, 2001 г.), «Ежегодная конференция немецкого физического сообщества» (г. Регенсбург, Германия, 2002 г. и 2004 г.), «Передовые достижения исследований электронных систем» (г. Гронинген, Голландия, 2002 г.), «Функциональная ренормгруппа для квантовых многочастичных проблем» (г. Дрезден, Германия, 2003 г.), «Международная конференция по сильнокоррелированным системам» (г. Карлсруэ, Германия, 2004 г.), «Ренормгрупповые методы для взаимодействующих электронов» (г. Бразилья, Бразилия, 2004 г.), «Методы ренормгруппы для коррелированных электронных систем» (г. Хайдельберг, Германия, 2006 и 2008 гг.), «2-й Евразийский симпозиум

«Тенденции в магнетизме» (г. Красноярск, 2004 г.), конференциях Макс-Планк Института Исследований Твердого Тела (Рингберг, Германия, 2007 и 2009 гг.), а также на семинарах Института Физики Металлов УрО РАН, Института Физики Университета г. Аугсбург (Германия), Института теоретической физики университета г. Кельн (Германия), Макс-Планк Института г. Штутгарт (Германия).

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в работах [A1-A28].

# **Раздел I.**

## **Флуктуационные эффекты в низкоразмерных локализованных магнетиках**

# Глава 1. Квазидвумерные магнетики

В данной главе рассматриваются флуктуационные поправки к намагниченности и температуре Кюри (Нееля) локализованных квазидвумерных магнетиков, описываемых моделью Гейзенберга с маленьким межплоскостным обменом и анизотропией

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i\delta_{\parallel}} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_{\parallel}} + H_{3D} + H_{\text{anis}} \quad (1.1.1)$$

$$H_{3D} = -\frac{\alpha J}{4} \sum_{i\delta_{\perp}} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_{\perp}},$$

$$H_{\text{anis}} = -\frac{J\eta}{2} \sum_{i\delta_{\parallel}} S_i^z S_{i+\delta_{\parallel}}^z - J\zeta \sum_i (S_i^z)^2 \quad (1.1.2)$$

где  $J > 0$  для ферромагнетика,  $J < 0$  для антиферромагнетика,  $\delta_{\parallel}$  и  $\delta_{\perp}$  соответствуют ближайшим соседним узлам в пределах слоя и для различных слоев,  $\alpha > 0$  является параметром обмена между слоями,  $\eta, \zeta$  - соответственно параметры обменной и одноионной анизотропии.

## 1.1. Спин-волновые приближения и приближение Тябликова в теории квазидвумерных и легкоосных магнетиков

Перед применением более сложных подходов, проанализируем результаты различных имеющихся приближений для модели Гейзенберга, для (подрешеточной) намагниченности и температуры Кюри (Нееля) квазидвумерных систем с целью последующего вычисления флуктуационных поправок к этим результатам.

### а) Спин-волновая теория

Простейшим приближением, позволяющим описать дальний

магнитный порядок в локализованных системах является спин-волновая теория (СВТ). Для применения этой теории удобно перейти от спиновых операторов к бозонным. В настоящее время используются различные представления такого вида, при этом одним из наиболее употребляемых является представление Дайсона-Малеева, имеющее для ферромагнетика вид [100,101]

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S}b_i, S_i^z = S - b_i^\dagger b_i \\ S_i^- &= \sqrt{2S} \left( b_i^\dagger - \frac{1}{2S} b_i^\dagger b_i^\dagger b_i \right) \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

( $b_i^\dagger, b_i$  – магнонные бозе-операторы) и удобное для описания магнитно-упорядоченной фазы. Обобщение представления (1.1.3) на случай двухподрешеточного антиферромагнетика имеет вид

$$\begin{aligned} S_l^- &= \sqrt{2S}b_l^+, S_l^+ = \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{b_l^+ b_l}{2S} \right) b_l, S_l^z = S - b_l^+ b_l, l \in A \\ S_m^- &= -\sqrt{2S}b_m^+, S_m^+ = \sqrt{2S}b_m^+ \left( 1 - \frac{b_m^+ b_m}{2S} \right), S_m^z = -S + b_m^+ b_m, m \in B, \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

где  $A$  и  $B$  соответствуют двум подрешеткам. Отметим, что представления (1.1.3) и (1.1.4) исходно нарушают симметрию между продольными и поперечными спиновыми флуктуациями, и, следовательно вопрос о их применимости вблизи магнитных фазовых переходов требует отдельного рассмотрения. Указанная симметрия может быть также явно восстановлена в рамках более сложных теоретико-полевых подходов, рассматриваемых в параграфах 1.3-1.5.

Отбрасывая члены четвертой степени по бозе операторам, приходим к квадратичному гамильтониану спин-волновой теории со спектром спиновых волн

$$E_q^{SWT} = \begin{cases} S[J_0(1+\eta) - J_q + (2S-1)|J|\zeta] & (\text{ФМ}) \\ S\{[J_0(1+\eta) + (2S-1)|J|\zeta]^2 - J_q^2\}^{1/2} & (\text{АФМ}) \end{cases}, \quad (1.1.5)$$

где Фурье-образ обменного взаимодействия

$$J_q = J[2(\cos q_x + \cos q_y) + \alpha \cos q_z] \quad (1.1.6)$$

(Подрешеточная) намагниченность определяется выражениями

$$\bar{S} = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \quad (\text{ФМ}), \quad (1.1.7)$$

$$\bar{S} = S + \frac{1}{2} - \sum_{\mathbf{q}} \frac{J_0 S}{2E_{\mathbf{q}}} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \quad (\text{АФМ}).$$

В основном состоянии намагниченность ферромагнетика  $\bar{S}_0 = S$ , подрешеточная намагниченность двумерного изотропного антиферромагнетика имеет вид [102]

$$\bar{S}_0 = S - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{\sqrt{1 - \phi_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right] \equiv S - \Delta \bar{S}_0 \quad (1.1.8)$$

где  $\phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$ .  $\Delta \bar{S}_0 \approx 0.1966$  есть квантовая поправка к намагниченности основного состояния за счет нулевых колебаний спинов. При малых  $\alpha, \zeta, \eta \ll 1$  поправками к намагниченности основного состояния, связанными с межплоскостным обменом и анизотропией можно пренебречь, и, таким образом, формула (1.1.8) справедлива также в присутствии слабого межплоскостного обмена и/или анизотропии.

Рассмотрим намагниченность при малых значениях межплоскостного обмена  $J' = \alpha J / 2$  и анизотропии  $\eta, \zeta$  и конечных  $T$ . СВТ приводит к различным результатам для намагниченности в «квантовом» и «классическом» температурных режимах. Эти режимы не связаны однозначно со случаем квантовых ( $S \sim 1$ ) и классических ( $S \gg 1$ ) спинов (хотя классический режим реализуется лишь при  $S \gg 1$ ), поскольку реальные критерии оказываются температурно-зависящими (см. ниже). В квантовом режиме, который имеет место при не слишком низких температурах

$$\begin{aligned} J' S \ll T \ll JS \quad (\text{ФМ}) \\ (JJ')^{1/2} S \ll T \ll |J| S \quad (\text{АФМ}) \end{aligned} \quad (1.1.9)$$

(подрешеточная) намагниченность определяется выражениями

$$\bar{S} = S - \frac{T}{4\pi JS} \ln \frac{T}{S \max\{J', \Delta\}} \quad (\text{ФМ}), \quad (1.1.10)$$

$$\bar{S} = \bar{S}_0 - \frac{T}{4\pi |J| S} \ln \frac{T^2}{8J \max\{J', \Delta\}} \quad (\text{АФМ}), \quad (1.1.11)$$

где  $\Delta = E_{q=0}$  - щель в спектре спиновых волн. Результаты (1.1.10) и (1.1.11) не зависят от деталей структуры решетки, поскольку ультрафиолетовое обрезание интегралов по квазиимпульсам в (1.1.7) фактически осуществляется на волновом векторе

$$q_0 = \begin{cases} (T/JS)^{1/2} & (\text{FM}) \\ T/c & (\text{AFM}) \end{cases}, \quad (1.1.12)$$

находящемся в аргументе логарифмов, а не на границе зоны Бриллюэна. Температуры Кюри (Нееля) могут быть определены из условия обращения в ноль намагниченности (как обсуждалось в начале главы, при этом фактически производится экстраполяция результатов теории на температуры  $T \sim T_M$ ),

$$T_C = \frac{4\pi JS^2}{\ln(T/S \max\{J', \Delta\})}, \quad (1.1.13)$$

$$T_N = \frac{4\pi |J| S\bar{S}_0}{\ln(T^2 / 8JS^2 \max\{J', \Delta\})}$$

Результаты (1.1.13) являются правильными с ведущей логарифмической точностью, т.е. с точностью до членов  $o(\ln(T/S \max\{J', \Delta\}))$  в знаменателе в ФМ случае и  $o(\ln(T^2/8JS^2 \max\{J', \Delta\}))$  в антиферромагнитном случае; как показывается в следующих параграфах, флуктуационные поправки являются формально субведущими по сравнению с указанными логарифмами. Однако, как отмечалось во введении, величина температуры магнитного перехода, получаемая в спин-волновых теориях, оказывается завышенной по сравнению с экспериментальными данными, критическое поведение описывается также неправильно: как следует из (1.1.7), критический индекс намагниченности  $\beta_{sw} = 1$  (то же самое критическое поведение имеет место при произвольном  $d > 2$ ). Последний результат правилен только в размерности  $d = 2 + \varepsilon$  в ведущем порядке по  $\varepsilon$

( $\beta = 1 - 2\varepsilon$ , см., например, [23,24]), в то время как для более высоких размерностей  $\beta < 1$ .

При  $JS \ll T \ll JS^2$  (случай, возможный лишь при больших  $S$ ), получаем для ферро- и антиферромагнетиков

$$\bar{S} = S - \frac{T}{4\pi |J| S} \ln \frac{q_0^2 J}{\max\{J', \Delta\}}, \quad (1.1.14)$$

где параметр обрезания  $q_0^2$  зависит от типа решетки, для квадратной решетки  $q_0^2 = 32$ . Для критической температуры классического магнетика с  $1 \ll \ln(q_0^2 / \max\{J', \Delta\}) \ll 2\pi S$  имеем, таким образом,

$$T_M = \frac{4\pi |J| S^2}{\ln(q_0^2 JS / \max\{J', \Delta\})}. \quad (1.1.15)$$

Результат (1.1.15) обладает теми же недостатками, что и вышеприведенные результаты в квантовом режиме. Из-за дополнительного множителя  $q_0^2$  критерий применимости результата (1.1.15) удовлетворяется лишь для очень больших спинов  $S$ , для остальных спинов оказывается справедлив результат квантового режима (1.1.13).

## б) Самосогласованная спин-волновая теория

Самосогласованная спин-волновая теория (ССВТ) [8-11] принимает во внимание динамическое взаимодействие между спиновыми волнами в наинизшем (борновском) приближении. Ниже мы следуем подходу [14,15], обобщающему ССВТ на квазидвумерный случай с малыми  $J'/J$ . Для вывода уравнений ССВТ используем представление Дайсона-Малеева (1.1.3). После подстановки в гамильтониан представления спиновых операторов через бозонные, возникают члены второй и четвертой степени по бозонным операторам. В частности, для ферромагнетика находим

$$H = \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}}^{\text{SWT}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_4} \phi(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) b_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} b_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} b_{\mathbf{q}_3} b_{\mathbf{q}_4} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4} \quad (1.1.16)$$

где  $E_{\mathbf{q}}^{\text{SWT}}$  определяется выражением (1.1.5) и

$$\phi(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4) = J_{\mathbf{q}_3} + J_{\mathbf{q}_4} - (1 + \eta)(J_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_3} - J_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_4}) - 4J\zeta \simeq -2J(\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 + f) \quad (1.1.17)$$

где  $f = 2\zeta + 4\eta$ . В то время как квадратичные вклады описывают распространение свободных спиновых волн, четверные члены в (1.1.16) соответствуют их взаимодействию. Учитывая самосогласованно взаимодействие спиновых волн в наинизшем приближении, т.е. расцепляя четверные формы бозонных операторов по теореме Вика, получаем квадратичный гамильтониан ССВТ. Спектр спиновых волн в ССВТ несколько изменяется по отношению к его виду (1.1.5) в спин-волновой теории и имеет вид

$$E_{\mathbf{q}}^{\text{SSWT}} = \begin{cases} S[\gamma_0(1+r) - \gamma_{\mathbf{q}}] & \text{ФМ,} \\ S[\gamma_0^2(1+r)^2 - \gamma_{\mathbf{q}}^2]^{1/2} & \text{АФМ,} \end{cases} \quad (1.1.18)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{q}} &= 2\gamma(\cos q_x + \cos q_y) + 2\gamma' \cos q_z, \\ r &= (\bar{S}/S)^2 [(2S-1)\zeta + 4\eta S|J|/\gamma], \end{aligned}$$

$\gamma$  и  $\gamma'$  - так называемые перенормированные обменные параметры, определяемые уравнениями

$$\gamma_{\delta} / J_{\delta} = \sum_{\mathbf{q}} \cos q_{\delta} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} + \bar{S}(T) \quad (1.1.19)$$

в ферромагнитном случае и

$$\gamma_{\delta} / J_{\delta} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\gamma_{\mathbf{q}} S}{2E_{\mathbf{q}}} \cos q_{\delta} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} + \bar{S}(T) \quad (1.1.20)$$

в антиферромагнитном случае, где  $\delta = x, z$ ;  $\gamma_x = \gamma$ ,  $\gamma_z = \gamma'$  и аналогично для  $J_{\delta}$ . (Подрешеточная) намагниченность определяется уравнением

$$\begin{aligned} \bar{S} &= S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} & (\text{ФМ}) \\ \bar{S} &= S + \frac{1}{2} - \sum_{\mathbf{q}} \frac{\gamma_0 S}{2E_{\mathbf{q}}} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} & (\text{АФМ}) \end{aligned} \quad (1.1.21)$$

Величины  $\gamma$  и  $\gamma'$  определяют спиновые корреляционные функции на соседних узлах,

$$|\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta} \rangle| = (\gamma_{\delta} / J_{\delta})^2. \quad (1.1.22)$$

Отметим, что поскольку лишь перенормированные обменные параметры  $\gamma$  и  $\gamma'$  входят в спектр (1.1.18), только они (а не затравочные обменные параметры  $J, J'$ ) являются экспериментально наблюдаемыми. Этот факт имеет весьма общий характер и должен учитываться при сравнении результатов вычислений с экспериментальными данными. Раскладывая (1.1.18) в ряд по компонентам волновых векторов, лежащим в плоскости, имеем

$$\left. \begin{aligned} E_{\mathbf{k}} / (\gamma S) \\ E_{\mathbf{k}}^2 / 8(\gamma S)^2 \end{aligned} \right\} \simeq k_{\perp}^2 + \frac{2\gamma'}{\gamma} (1 - \cos k_z) + \frac{r|J|}{\gamma S} \quad \begin{array}{l} \text{(ФМ)} \\ \text{(АФМ)} \end{array} \quad (1.1.23)$$

Сравнивая спектр (1.1.23) с затравочным спектром спиновых волн (1.1.5), разложенным при малых  $\mathbf{k}$ , получаем соотношение между затравочными  $\alpha, \eta, \zeta$  и наблюдаемыми  $\alpha_r, f_r$  параметрами межплоскостного обмена и анизотропии, справедливые при  $\bar{S}/S \lesssim 1$ :

$$f_r = \frac{r|J|}{\gamma S} = (\bar{S}/S)^2 \left[ \frac{(2S-1)\zeta|J|}{\gamma S} + \frac{4\eta J^2}{\gamma^2} \right] \quad (1.1.24)$$

$$\alpha_r = \frac{2\gamma'}{\gamma} = \alpha \bar{S}/S \quad (1.1.25)$$

Отметим, что в отличие от параметра внутриплоскостного обмена, перенормировка параметров  $\alpha$  и  $\eta, \zeta$  пропорциональна намагниченности и квадрату намагниченности соответственно, и, таким образом, обладает сильной температурной зависимостью.

В основном состоянии намагниченность двумерного антиферромагнетика совпадает с ее значением в спин-волновой теории (1.1.8). Параметр ближнего порядка  $\gamma$ , определяющий отношение эффективного и затравочного обменных интегралов в плоскости, в основном состоянии имеет значение  $[\gamma_0 \equiv \gamma(T=0)]$

$$\gamma_0/|J| = 1 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{k}} \left[ 1 - \sqrt{1 - \phi_{\mathbf{k}}^2} \right] \approx 1 + \frac{0.0790}{S} \quad (1.1.26)$$

где второе слагаемое отвечает перенормировке обменного интеграла за счет квантовых флуктуаций. Спиновая жесткость и скорость спиновых волн определяется выражениями

$$\rho_s = \gamma_0 S \bar{S}_0, \quad c = \sqrt{8} \gamma_0 S \quad (1.1.27)$$

Как можно видеть из (1.1.26), для квантового случая  $S=1/2$  перенормировка параметра обмена в плоскости достигает 15%.

Как и в спин-волновой теории, в случае маленьких значений межплоскостного обмена  $J'/J \ll 1$  и анизотропии  $\eta, \zeta \ll 1$  возможно получение аналитических результатов для температурной зависимости намагниченности [14, 15]. В квантовом режиме (1.1.9) (подрешеточная) намагниченность определяется выражениями

$$\bar{S} = \begin{cases} S - \frac{T}{4\pi JS} \ln \frac{T}{\gamma' S} & (\text{ФМ}), \\ \bar{S}_0 - \frac{T}{4\pi \gamma S} \ln \frac{T^2}{8\gamma\gamma'} & (\text{АФМ}) \end{cases} \quad (1.1.28)$$

с  $\gamma \approx \gamma_0$  и  $\gamma'$ , определяемым уравнением

$$\gamma' = |J'| \begin{cases} S - \frac{T}{4\pi JS} \left( \ln \frac{T}{\gamma'} - 1 \right) & (\text{ФМ}), \\ \bar{S}_0 - \frac{T}{4\pi |J| \gamma} \left( \ln \frac{T^2}{8\gamma\gamma'} - 1 \right) & (\text{АФМ}). \end{cases} \quad (1.1.29)$$

так что  $\gamma'_0 = \gamma'(T=0) = \bar{S}_0$ . Для температур магнитного перехода в режиме (1.1.9) получаем результаты

$$T_C = \frac{4\pi JS^2}{\ln(T/\gamma'_c)}, \quad (1.1.30)$$

$$T_N = \frac{4\pi \gamma_c \bar{S}_0}{\ln(T^2/8\gamma_c \gamma'_c)}$$

где  $\gamma_c \approx \gamma_0$  и  $\gamma'_c$  - перенормированные обменные параметры при  $T_M = T_C(T_N)$ , значение  $\gamma'_c$  определенное из (1.1.29) есть

$$\gamma'_c = (T_M/4\pi \gamma_c S^2) J' \quad (1.1.31)$$

Перенормировка межплоскостного обмена в (1.1.30) играет значительную роль в понижении температуры Кюри (Нееля) по сравнению с ее значением в СВТ (1.1.13), поскольку  $\gamma_c \gamma'_c = J' T_M / 4\pi S^2 \ll J J'$ .

В случае больших  $S$  (снова предполагаем  $T \gg |J| S$ ) получаем для ферро- и антиферромагнетиков

$$\bar{S} = S - \frac{T}{4\pi |J| S} \ln \frac{q_0^2 JS}{\gamma'} \quad (1.1.32)$$

и

$$\gamma' = |J'| \left[ S - \frac{T}{4\pi |J| S} \left( \ln \frac{q_0^2 JS}{\gamma'} - 1 \right) \right] \quad (1.1.33)$$

с  $q_0^2 = 32$  для квадратной решетки. Соответствующее выражение для критической температуры классического магнетика с  $1 \ll \ln(q_0^2 J/J') \ll 2\pi S$  имеет вид

$$T_M = \frac{4\pi |J| S^2}{\ln(q_0^2 JS / \gamma'_c)}. \quad (1.1.34)$$

где  $\gamma'_c = (T_M / 4\pi S)(J' / J)$ . Как и должно быть, критическая температура одинакова для классического ферро- и антиферромагнитного случая. С логарифмической точностью мы воспроизводим в этом случае результаты спин-волновой теории, где  $\gamma'_c / (|J'| S) \rightarrow 1$ .

Выделяя, аналогично случаю малого межплоскостного обмена, логарифмические особенности при малой анизотропии, получаем

$$\begin{aligned} \bar{S} &= S - \frac{T}{4\pi JS} \ln \frac{T}{JS\Delta}, & (\text{FM}), \\ \bar{S} &= \bar{S}_0 - \frac{T}{4\pi |J| \gamma} \ln \frac{T^2}{8\gamma^2 \Delta}, & (\text{AFM}). \end{aligned} \quad (1.1.35)$$

В отличие от квазидвумерного случая, в точке магнитного перехода имеет место нефизический результат  $\Delta(T_M) = 0$ , возникающий из-за пропорциональности щели  $(\bar{S}/S)^2$  (фактически конечная величина щели при  $T = T_M$  обусловлена топологическими эффектами, которые не

учитываются спин-волновой теорией). Таким образом, спин-волновая теория неспособна описать зависимость  $\Delta(T)$  близко к  $T_M$ . Обозначая формально  $\Delta_c = \Delta(T_M)$ , имеем для критической температуры при  $2\pi S \ll \ln(1/\Delta)$

$$T_C = \frac{4\pi JS^2}{\ln(T/JS\Delta_c)}, \quad (1.1.36)$$

$$T_N = \frac{4\pi |J| \bar{S} \gamma_c}{\ln(T^2 / 8\gamma_c^2 \Delta_c)}$$

В случае больших  $S$  находим для ферро- и антиферромагнетиков

$$\bar{S} = S - \frac{T}{4\pi |J| S} \ln \frac{32 |J|}{\Delta} \quad (1.1.37)$$

Это приводит к выражению для критической температуры классического магнетика с анизотропией типа «легкая ось» и  $1 \ll \ln(32/\Delta) \ll 2\pi S$

$$T_M = \frac{4\pi |J| S^2}{\ln(32 |J| / \Delta_c)}. \quad (1.1.38)$$

Сравнение результатов (1.1.28), (1.1.30), (1.1.36) и (1.1.38) с экспериментальными данными произведено в параграфе 1.5.

### в) Приближение Тябликова

Приближение Тябликова [103] не опирается на малость температуры по сравнению с температурой фазового перехода, а является интерполяционной теорией во всем температурном интервале  $T \leq T_M$ . Однако, как показывается ниже, это приближение не учитывает квантовых флуктуаций в окрестности точки магнитного перехода (хотя, будучи интерполяционной теорией, приводит к гораздо лучшему согласию с экспериментальными данными по сравнению со спин-волновыми теориями). По причине своего интерполяционного характера это приближение почти не поддается улучшению, см. например [103]. Тем не менее, представляет интерес сравнение результатов этого приближения с результатами спин-волновых приближений, обсуждавшихся выше.

Спектр спиновых возбуждений в приближении Тябликова имеет вид

$$E_q^{\text{ТТ}} = \begin{cases} \bar{S}(J_0 - J_q) & (\text{ФМ}) \\ \bar{S}(J_0^2 - J_q^2)^{1/2} & (\text{АФМ}) \end{cases} \quad (1.1.39)$$

Пропорциональность спектра намагниченности не совсем правильна при низких температурах: в ферромагнетиках энергия спиновых волн изменяется как  $T^{5/2}$ , в то время как намагниченность подрешетки как  $T^{3/2}$  (см., например, [104]), в антиферромагнетиках -  $T^4$  и  $T^2$  соответственно.

Уравнение для  $\bar{S}$  при  $S = 1/2$  имеет вид

$$1/\bar{S} = \sum_q \frac{J_0 \bar{S}}{E_q} \tanh \frac{E_q}{2T}, \quad (1.1.40)$$

и имеет более сложную форму для более высоких спинов [103]. Вблизи температуры Нееля приближение Тябликова упрощается и при произвольном  $S$  и любой размерности  $d > 2$  имеем

$$\bar{S} = \left[ \frac{2\Gamma_s T_M}{SJ_0} \left( 1 - \frac{T}{T_M} \right) \right]^{1/2} \quad (1.1.41)$$

где  $\Gamma_s$  - некоторая функция  $S$ ,  $\Gamma_{1/2} = 3$ . Таким образом, в отличие от ССВТ, критический индекс намагниченности имеет значение  $\beta_{\text{ТТ}} = 1/2$ , совпадающее с результатом теории среднего поля. При малых  $J'/J$ , результат приближения Тябликова для температуры магнитного перехода имеет вид

$$T_M \simeq \frac{4\pi JS(S+1)}{3 \ln(Jq_0^2 / J')} \quad (1.1.42)$$

с  $q_0^2 = 32$ . Результат (1.1.42) численно меньше чем значение ССВТ (1.1.30) и, как следствие, лучше описывает экспериментальные данные (см. параграф 1.5). При  $S=1/2$  коэффициент перед обратным логарифмом в уравнении (1.1.42) совпадает с таковым в ССВТ для ферромагнетика, хотя выражение под знаком логарифма напоминает его вид в классическом пределе ССВТ (1.1.34). Это показывает двойственный характер приближения Тябликова, которое вблизи критической температуры не полностью учитывает квантовые флуктуации. Кроме того, в классическом

пределе  $S \rightarrow \infty$  результат (1.1.42) совпадает с таковым для сферической модели [26,105], что показывает его интерполяционный характер. Таким образом, приближение Тябликова может быть в некоторых ситуациях удовлетворительно с практической, но не с теоретической точки зрения.

С логарифмической точностью, все обсуждавшиеся подходы приводят к одному и тому же значению температуры Нееля. Однако, эта точность недостаточна, чтобы описать с экспериментальные данные. Чтобы улучшить описание критической области и получать лучше приближения для температуры Нееля в квантовом случае, необходимо принять во внимание флуктуационные поправки к результату теории спиновых волн более правильно, чем в ССВТ и приближении Тябликова.

## **1.2. Перенормировка вершины взаимодействия и подрешеточной намагниченности поправками по $1/S$**

В данном параграфе рассмотрим поправки к ССВТ (вычисление поправок к теории Тябликова крайне затруднительно в связи с ее интерполяционным характером). Поправки к ССВТ определяются диаграммы второго и более высокого порядка по  $1/S$ , которые можно разделить на собственно-энергетические, приводящие к перенормировке энергии одночастичных возбуждений (и возникновение их затухания) и поправки к вершине межмагнонного взаимодействия. Как обсуждалось выше, ССВТ удовлетворительно описывает спектр возбуждений (этот спектр уже перенормирован в соответствии с диаграммами первого порядка, см. рис. I-1(a)). Вычисление затухания спиновых волн, возникающего во втором и более высоких порядках теории возмущений, показывает, что оно относительно мало в широкой температурной области [106, 107].

Таким образом, вершинные поправки представляются наиболее существенными в двумерных системах. Для их вычисления рассмотрим сначала двумерные магнетики с анизотропией типа «легкая ось». Как

обсуждается ниже, для рассмотрения перенормировки вершины достаточно ограничиться рассмотрением лестничных диаграмм в частично-дырочном канале, соответствующем продольным спиновым возбуждениям (рис. I-1 (б)). Соответствующее интегральное уравнение для вершины  $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}; \mathbf{p})$ , справедливое при  $q \ll |\mathbf{k} \pm \mathbf{p}|$ , имеет вид [А6]

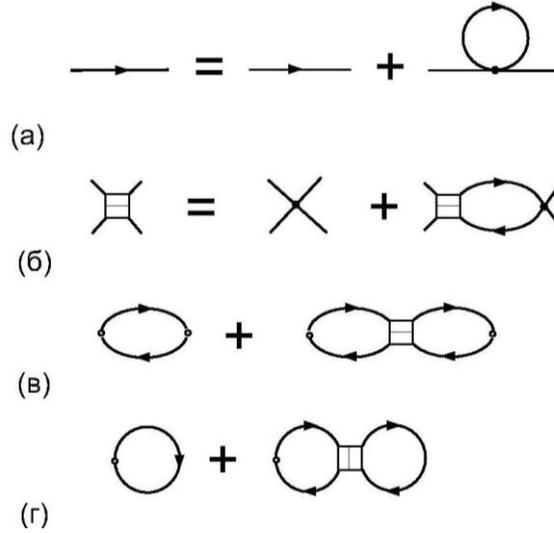


Рис. I-1. Диаграммное изображение: (а) хартриевских поправок к спектру магнонов, рассматриваемых в самосогласованной спин-волновой теории; (б) лестничного уравнения для вершины взаимодействия магнонов; (в) поправок к (подрешеточной) восприимчивости; (г) поправок к (подрешеточной) намагниченности

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}; \mathbf{p}) = \phi(\mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{p}) - \frac{T}{\gamma^2 S^2} \sum_s \frac{\phi(\mathbf{k}, \mathbf{s} - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{s})}{(s^2 + f_r)[(s - \mathbf{q})^2 + f_r]} \Phi(\mathbf{s}, \mathbf{p} - \mathbf{q}; \mathbf{s} - \mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad (1.2.1)$$

(мы сохраняем здесь только вклад членов с нулевой мацубаровской частотой  $\omega_n = 0$ , приводящих к логарифмически-расходящимся вкладам, с одновременным обрезанием интегралов по квазиимпульсам на волновом векторе  $q_0$ , определенным в (1.1.12)). Результат решения уравнения (1.2.1) в двумерном случае имеет вид

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{p} - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{2J\mathbf{k}(\mathbf{q} - \mathbf{p})}{1 - (TJ / 2\pi\gamma^2 S^2) \ln(q_0 / \max(f_r^{1/2}, q))} + O(Jf) \approx \frac{2J\mathbf{k}(\mathbf{q} - \mathbf{p})}{\bar{S} / S + (Jq^2 / 2)\chi_{q_0}^{zz}} + O(Jf) \quad (1.2.2)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{q0}^{zz} &= \frac{T}{\gamma^2 S^2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{(p^2 + f_r)[(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2 + f_r]} \\ &\simeq \begin{cases} T / [2\pi(\gamma q S)^2] \ln(q^2 / f_r), & q^2 \gg f_r \\ \chi_0 = T / [4\pi(\gamma S)^2 f_r], & q^2 \ll f_r \end{cases} \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

суть продольная восприимчивость в спин-волновой теории. Как следует из результата (1.2.2), аналогично стандартному приближению случайных фаз для зонных магнетиков, рассматриваемая вершина магنونного взаимодействия усиливается флуктуациями (см. также Раздел 2). Результат, аналогичный (1.2.2) с заменой  $\bar{S} / S \rightarrow \bar{S} / \bar{S}_0$  может быть также получен для антиферромагнетиков.

Более общее рассмотрение логарифмически расходящихся вкладов возможно в рамках паркетного приближения [104]. Проводя указанное рассмотрение, можно показать, что результат (1.2.2) остается также справедливым вплоть до  $q \sim |\mathbf{k} \pm \mathbf{p}|$  из-за сокращения вкладов частично-частичного и частично-дырочного каналов, не учитываемых лестничным приближением (1.2.1). Интересна аналогия такого сокращения с ситуацией в ферми-системах (см. Раздел II) с той разницей, что в рассматриваемом случае дополнительный знак «минус» возникает из-за билинейной импульсной зависимости вершины, а не из-за фермиевских антикоммутиационных соотношений.

Для статической (подрешеточной) неоднородной продольной восприимчивости (со сдвигом  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} + \mathbf{Q}$  в АФМ случае) получаем с учетом диаграмм рис. I-1(в) результат

$$\begin{aligned} \chi_q^{zz} &= \frac{(\bar{S} / \bar{S}_0) \chi_{q0}^{zz}}{\bar{S} / \bar{S}_0 + (T / 2\pi |J| \gamma \bar{S}_0) \ln[\max(f_r^{1/2}, q) / f_r^{1/2}]} \\ &= \frac{\chi_{q0}^{zz}}{1 + (|J| \gamma / 2\bar{S}) q^2 \chi_{q0}^{zz}} \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

Как следует из результата (1.2.4), продольная восприимчивость имеет

различную импульсную зависимость на малых и достаточно больших импульсах:

$$\chi_q^{zz} \approx \begin{cases} \chi_{q0}^{zz}, & |J| \gamma q^2 \chi_{q0}^{zz} \ll 2\bar{S} \\ 2\bar{S} / (|J| \gamma q^2), & |J| \gamma q^2 \chi_{q0}^{zz} \gg 2\bar{S} \end{cases} \quad (1.2.5)$$

Первая строка соответствует стандартному спин-волновому результату (1.2.3), в то время как вторая описывает вклад неспинволновых степеней свободы: пренебрегая анизотропией при  $q^2 \gg f$ , находим  $\chi_q^{zz} \propto 1/q^2$ , что отвечает критическим спиновым флуктуациям и согласуется с результатом сферической модели [11].

Рассмотрим теперь поправки к намагниченности, обусловленные рассмотренными выше продольными возбуждениями. Вычисление поправок к (подрешеточной) намагниченности  $\bar{\sigma} \equiv \bar{S} / \bar{S}_0$  (см. диаграммы рис. I-1(г)) дает

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{T}{\gamma S \bar{S}_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k^2 + f} + \frac{T^2}{(\gamma S)^3 \bar{S}_0} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \frac{\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k} - \mathbf{q}; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k})}{(k^2 + f)^2 [(k - \mathbf{q})^2 + f]} \quad (1.2.6)$$

Интегрирование в (1.2.6) приводит к результату

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{t}{2} \left[ \ln \frac{q_0^2}{f_r(T)} + 2 \ln \frac{1}{\max(\sigma, t)} + \Phi_a(t/\bar{\sigma}) \right] \quad (1.2.7)$$

где  $t = T / (2\pi |J| \gamma_0 \bar{S}_0)$ . Функция  $\Phi_a$  учитывает вклад несингулярных членов. Температурная перенормировка  $f_r(T) \propto f_r(T=0) \bar{\sigma}^{-2}$ , определяемая уравнением (1.1.24), увеличивает в два раза множитель перед вторым слагаемым в квадратных скобках в промежуточной температурной области.

В изотропическом квазидвумерном случае инфракрасное обрезание для интегралов по зоне Бриллюэна осуществляется величиной  $J' \gamma' / (J \gamma)$  а не  $f_r$ . Аналогичным вычислением находим

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{t}{2} \left[ \ln \left( q_0^2 \frac{|J| \gamma_0}{|J' \gamma'(T)|} \right) + 2 \ln \frac{1}{\max(\sigma, t)} + \Phi_{ic}(t/\bar{\sigma}) \right] \quad (1.2.8)$$

Температурная перенормировка параметра межплоскостного обмена (см. (1.1.29)) приводит к изменению множителя перед вторым слагаемым в (1.2.8) в промежуточной температурной области в полтора раза.

Как видно из результатов (1.2.7) и (1.2.8), флуктуационные поправки к намагниченности уменьшают ее значение. В зависимости от величины температуры возможны три случая:

(а) низкие температуры,  $T \ll T_M \sim 2\pi |J| S^2 / \ln(q_0^2 / \max(f, J/J'))$ . Тогда второе условие в (1.2.5) не может быть удовлетворено, и таким образом возбуждения во всей зоне Бриллюэна имеют спин-волновой характер. При этом важен только первый член в квадратных скобках (1.2.7) и (1.2.8), и температурная зависимость намагниченности описывается спин-волновой теорией;

(б) промежуточные температуры  $T \sim T_M$ , для которых выполнено условие  $(\bar{S}/S) / \ln(q_0^2 / \max(f, J/J')) \ll T / 2\pi |J| S^2 \ll \bar{S}/S$ . Тогда при достаточно малых  $q$  имеем  $\chi_q^{zz} \approx \chi_{q_0}^{zz}$ , но второе условие в (1.2.5) выполнено для достаточно больших  $q$ , так что возбуждения на соответствующих волновых векторах являются неспинволновыми (т. е. соответствуют критическим флуктуациям). Температурная зависимость намагниченности  $\bar{S}(T)$  существенно модифицируется поправками к спин-волновой теории;

(в) критическая область,  $T / 2\pi |J| S^2 \gg \bar{S}/S$  ( $1 - T/T_M \ll 1$ ). В этом режиме первое условие в (1.2.5) удовлетворено только для  $q^2 \ll f$ , тогда как для всех остальных  $q$  возбуждения имеют неспинволновой характер. При этом вклады  $\Phi_a, \Phi_{ic}$  имеют тот же самый порядок, что и другие члены в квадратных скобках и температурная зависимость намагниченности должна рассматриваться в рамках более сложных подходов (см. 1.3-1.5).

Для более детального анализа указанных результатов в последующих параграфах рассматривается теоретико-полевой подход к низкоразмерным магнетикам.

### 1.3. Представление континуального интеграла для спиновых систем

Для учета флуктуационных эффектов переформулируем исходную проблему вычисления термодинамических свойств модели с гамильтонианом (1.1.1) в стандартном формализме континуальных интегралов [108,109]. В этом формализме система характеризуется так называемым производящим функционалом  $Z[h]$  зависящим от внешнего неоднородного магнитного поля  $h$ , логарифмические производные которого определяют намагниченность и корреляционные функции.

Для вывода выражений для производящего функционала используем представление когерентных состояний [108,109]

$$|\mathbf{n}_i\rangle = \exp(-i\varphi_i S_i^z) \exp(-i\theta_i S_i^y) |0\rangle, \quad (1.3.1)$$

параметризуемых векторами  $\mathbf{n}_i$  единичной длины с полярными координатами  $(\theta_i, \varphi_i)$ , определенных для каждого узла решетки  $i$ ,  $|0\rangle$  - собственное состояние оператора  $S_i^z$  с максимальной проекцией спина:  $S_i^z |0\rangle = S |0\rangle$ . Преимущество использования состояний (1.3.1) состоит в том, что среднее значение операторов спина по ним имеет простой вид:

$$\langle \mathbf{n}_i | S_i^m | \mathbf{n}_i \rangle = S n_i^m \quad (1.3.2)$$

т.е. когерентные состояния являются «квазиклассическими» спиновыми состояниями. Можно показать, что с помощью когерентных состояний (1.3.2) производящий функционал может быть записан в виде

$$Z = \int D\mathbf{n} \exp \left\{ \int_0^{1/T} d\tau \left[ \mathbf{A}(\mathbf{n}_i) \frac{\partial \mathbf{n}_i}{\partial \tau} - \langle \mathbf{n} | H | \mathbf{n} \rangle \right] \right\} \quad (1.3.3)$$

где первый член в показателе экспоненты учитывает динамику спинов, связанную с их квантовым характером (так называемая фаза Берри [31]), а второй член описывает взаимодействие спинов; интегрирование в (1.3.3) производится по угловым переменным вектора  $\mathbf{n}_i$  на каждом узле и для

каждого мнимого времени  $\tau$ ,  $\mathbf{A}(\mathbf{n})$  – векторный потенциал единичного магнитного монополя, удовлетворяющий соотношению  $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = 1$ .

Среднее по когерентным состояниям гамильтониана (1.1.1) может быть легко вычислено с учетом соотношений (1.3.2) и приводит к выражению для производящего функционала в виде

$$Z[h] = \int D\mathbf{n} D\lambda \exp \left\{ \frac{JS^2}{2} \int_0^{1/T} d\tau \sum_{i, \delta_{\parallel}, \delta_{\perp}} \left[ \frac{2i}{JS} \mathbf{A}(\mathbf{n}_i) \frac{\partial \mathbf{n}_i}{\partial \tau} + \mathbf{n}_i \mathbf{n}_{i+\delta_{\parallel}} + \frac{\alpha}{2} \mathbf{n}_i \mathbf{n}_{i+\delta_{\perp}} + \eta n_i^z n_{i+\delta_{\parallel}}^z + \text{sgn}(J) \zeta (n_i^z)^2 + h n_i^z + i \lambda_i (\mathbf{n}_i^2 - 1) \right] \right\} \quad (1.3.4)$$

где члены в экспоненте, следующие за фазой Берри последовательно отвечают обмену в плоскости, между плоскостями, двухионной и одноионной магнитной анизотропии и неоднородному внешнему полю. Последний член в экспоненте возникает вследствие ограничения  $\mathbf{n}^2=1$ .

Действие (1.3.4) является обобщением известного результата для представления статистической суммы двумерной модели Гейзенберга на случай присутствия межплоскостного обмена анизотропии и содержит две переменные с размерностью длины:

$$\xi_{j'} = a / \max(\alpha, \tilde{\zeta}, \eta)^{1/2} \gg a \quad (1.3.5)$$

и

$$L_{\tau} = \begin{cases} a\sqrt{JS/T} & (\text{ФМ}) \\ c/T & (\text{АФМ}) \end{cases}, \quad (1.3.6)$$

( $c \sim JSa$  - скорость спиновых волн). В то время как масштаб  $L_{\tau}$ , соответствующий переходу от квантовых флуктуаций к классическим, присутствует также в действии для двумерной модели Гейзенберга, масштаб  $\xi_{j'}$  является характерной особенностью квазидвумерных и/или анизотропных систем. На этом масштабе происходит обсуждавшееся во Введении изменение типа флуктуаций с двумерных флуктуаций гейзенберговского характера на трехмерные флуктуации гейзенберговского характера или двумерные изинговские флуктуации, в

зависимости от того, какой из параметров доминирует в знаменателе (1.3.5) – анизотропия или межплоскостной обмен.

В зависимости от соотношения этих параметров возможны три режима.

(I)  $L_\tau \gtrsim \xi_{J'}$ , или, эквивалентно,  $T \lesssim J'S$  (ФМ),  $T \lesssim S(JJ')^{1/2}$  (АФМ). В этом режиме  $T \ll T_M$  и, таким образом, он хорошо описывается стандартной теорией спиновых волн (или ССВТ).

Случай  $L_\tau \ll \xi_{J'}$  подразделяется на два других режима:

(II) Квантовый режим  $a \ll L_\tau \ll \xi_{J'}$  или  $J'S \ll T \ll JS$  (ФМ),  $S(JJ')^{1/2} \ll T \ll JS$  (АФМ).

(III) Классический режим  $L_\tau \ll a$  ( $JS \ll T$ ).

Отметим, что случай (а) параграфа 1.2 соответствует режиму (I), в то время как случаи (б), (в) могут соответствовать одному из режимов (II) или (III) в зависимости от величины спина.

Как показано в параграфах 1.1 и 1.2, выражения для температуры магнитного фазового перехода имеют существенно различный вид в режимах (II) и (III). Исходя из того, что температура магнитного перехода не имеет размерности длины, а единственный энергетический масштаб теории определяется спиновой жесткостью, в режимах (II) и (III) находим

$$T_M = \rho_s \Phi(\xi_{J'}/L_\tau, \xi_{J'}/a)$$

где  $\Phi(x, y)$  - некоторая функция с  $\Phi(\infty, \infty) = 0$ . В режиме (II),  $\xi_{J'}/L_\tau \ll \xi_{J'}/a$ , так, что зависимость  $\Phi(x, y)$  от первого аргумента является более важной, и

$$T_M = \rho_s \Phi(\xi_{J'}/L_\tau, \infty) = \begin{cases} \rho_s \Phi_q(T_M/\alpha^{1/2}c) & \text{АФМ} \\ \rho_s \Phi_q(T_M/\alpha^{1/2}J) & \text{ФМ} \end{cases} \quad (1.3.7)$$

в то время как в режиме (III) более важна зависимость от второго аргумента,

$$T_M = \rho_s \Phi(\infty, \xi_{J'}/a) = \rho_s \Phi_{cl}(1/\alpha^{1/2}) \quad (1.3.8)$$

В то время как результаты СВТ (1.1.13) и ССВТ (1.1.30) для температуры магнитного перехода согласуются с результатом (1.3.7) для квантового

режима и с (1.3.8) для классического режима, результат приближения Тябликова (1.1.42) удовлетворяет при всех спинах лишь результату для классического режима (1.3.8), что подтверждает отсутствие квантовых флуктуаций в окрестности температуры магнитного перехода в этом приближении.

Производящий функционал (1.3.4) может быть далее преобразован к виду, удобному для конкретных вычислений, способом, аналогичным имеющемуся рассмотрению двумерных систем. При этом результат определяется температурным режимом, в котором производятся вычисления. Рассмотрим сначала классический режим  $T \gg JS$ . В силу того, что  $L_z \ll a$ , зависимость поля  $\mathbf{n}$  от мнимого времени можно пренебречь, и производящий функционал сводится к

$$Z_{cl}[h] = \int D\mathbf{n} D\lambda \exp \left\{ \frac{\rho_s^0}{2T} \sum_i \left[ \mathbf{n}_i \mathbf{n}_{i+\delta_{\parallel}} + \frac{\alpha}{2} \mathbf{n}_i \mathbf{n}_{i+\delta_{\perp}} \right. \right. \\ \left. \left. + \eta n_i^z n_{i+\delta_{\parallel}}^z + \zeta (n_i^z)^2 + h n_i^z + i \lambda (\mathbf{n}_i^2 - 1) \right] \right\} \quad (1.3.9)$$

с затравочной спиновой жесткостью  $\rho_s^0 = |J|S^2$ . Чтобы получить (1.3.9) в антиферромагнитном случае, необходимо произвести замену  $\mathbf{n}_i \rightarrow -\mathbf{n}_i, \lambda_i \rightarrow -\lambda_i$  для одной из двух подрешеток. Таким образом, в классическом случае результаты для  $Z$  идентичны для ферро- и антиферромагнетиков. Действие (1.3.9) является обобщением классической нелинейной сигма-модели [109] на случай конечного межплоскостного обмена.

Рассмотрим теперь квантовый случай. В силу  $\xi_j \gg a$ , в этом случае можно перейти к континуальному (непрерывному) пределу для каждого слоя. Для ферромагнетика удобно использовать представление

$$\mathbf{A}(\mathbf{n}) = \frac{\mathbf{z} \times \mathbf{n}}{1 + (\mathbf{z}\mathbf{n})} \quad (1.3.10)$$

( $\mathbf{z}$  - единичный вектор вдоль оси  $z$ ). В этом представлении находим

$$\begin{aligned}
Z_F[h] = & \int \frac{D\pi}{\sqrt{1-\pi^2}} \exp \left\{ -\frac{\rho_s^0}{2} \int_0^{1/T} d\tau \int d^2\mathbf{r} \sum_{i_z} \left[ \frac{2i}{JS} \frac{1-\sqrt{1-\pi_{i_z}^2}}{\pi_{i_z}^2} \right. \right. \\
& \times \left( \pi_{i_z}^x \frac{\partial \pi_{i_z}^y}{\partial \tau} - \pi_{i_z}^y \frac{\partial \pi_{i_z}^x}{\partial \tau} \right) + (\nabla \pi_{i_z})^2 + \frac{\alpha}{2} (\pi_{i_z+1} - \pi_{i_z})^2 \\
& \left. \left. + (\nabla \sqrt{1-\pi_{i_z}^2})^2 + \frac{\alpha}{2} (\sqrt{1-\pi_{i_z+1}^2} - \sqrt{1-\pi_{i_z}^2})^2 + f \pi_{i_z}^2 + h \sqrt{1-\pi_{i_z}^2} \right] \right\} \quad (1.3.11)
\end{aligned}$$

где  $i_z$  - номер слоя,  $\pi = \mathbf{n} - (\mathbf{nz})\mathbf{z}$  - двухкомпонентное векторное поле,

$$f = \zeta + 4\eta \equiv 2\zeta(1-1/2S) + 4\eta \quad (1.3.12)$$

и произведена замена  $i\lambda \rightarrow i\lambda + f$  перед интегрированием по  $\lambda$ .

В антиферромагнитном квантовом случае необходимо использовать процедуру Халдейна, [31] (см. также [109]) чтобы проинтегрировать по «быстрым» компонентам  $\mathbf{n}$ . При этом параметр  $\xi_j \gg a$  используется для отделения «быстрых» и «медленных» переменных вместо обычно используемой корреляционной длины, равной бесконечности ниже точки перехода. С помощью указанной процедуры, приходим к производящему функционалу квантовой нелинейной сигма-модели для антиферромагнетиков,

$$\begin{aligned}
Z_{AF}[h] = & \int D\sigma D\lambda \exp \left\{ -\frac{\rho_s^0}{2} \int_0^{1/T} d\tau \int d^2\mathbf{r} \sum_{i_z} \left[ \frac{1}{c_0^2} (\partial_\tau \sigma_{i_z})^2 \right. \right. \\
& \left. \left. + (\nabla \sigma_{i_z})^2 + \frac{\alpha}{2} (\sigma_{i_z+1} - \sigma_{i_z})^2 - f (\sigma_{i_z}^z)^2 + h \sigma_{i_z}^z + i\lambda (\sigma_{i_z}^2 - 1) \right] \right\} \quad (1.3.13)
\end{aligned}$$

где  $\sigma_{i_z}$  - трехкомпонентное поле единичной длины и  $c_0 = \sqrt{8JS}$  - затравочная скорость спиновых волн. Модель (1.3.13) обладает  $O(3)/O(2)$  группой симметрии. В отличие от случая квантового ферромагнетика, эта модель может быть расширена до  $O(N)/O(N-1)$  симметрии с произвольным  $N$  путем введения  $N$ -компонентного векторного поля  $\sigma_i = \{\sigma_1 \dots \sigma_N\}$  и замены  $\sigma^z$  на  $\sigma_N$ . Представляя  $\sigma = \{\pi_1 \dots \pi_{N-1}, \sigma_N\}$ , имеем

$$Z_{AF}[h] = \int \frac{D\pi}{\sqrt{1-\pi^2}} \exp \left\{ -\frac{\rho_s^0}{2} \int_0^{1/T} d\tau \int d^2\mathbf{r} \sum_{i_z} \left[ (\partial_\mu \pi_{i_z})^2 \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& +(\partial_\mu \sqrt{1-\pi_{i_z}^2})^2 + \frac{\alpha}{2}(\pi_{i_z+1} - \pi_{i_z})^2 + f\pi^2 \\
& + \frac{\alpha}{2}(\sqrt{1-\pi_{i_z+1}^2} - \sqrt{1-\pi_{i_z}^2})^2 + h\sqrt{1-\pi_{i_z}^2} \Big] \Big\} \quad (1.3.14)
\end{aligned}$$

где  $\partial_\mu = (\partial/\partial(c_0\tau), \nabla)$  и произведен сдвиг  $i\lambda \rightarrow i\lambda + f$ . При  $N=\infty$  указанная модель эквивалентна сферической модели [26], однако при конечных значениях  $N$  она правильно учитывает поправки связанные со спин-спиновым взаимодействием, поскольку основана на флуктуационной картине спектра возбуждений. Это обстоятельство приводит к важным преимуществам при температурах, сравнимых с температурой фазового перехода, но ведет к некоторым трудностям при описании низких и промежуточных температур, где возбуждения имеют чисто спин-волновой характер.

## 1.4. Ренормгрупповой анализ изотропных и легкоосных магнетиков

Вышеприведенные выражения для производящего функционала могут быть далее исследованы в рамках ренормгруппового подхода. РГ подход ранее успешно применялся для описания классических и квантовых изотропных магнетиков в пространстве размерности  $d=2$  [12,23] и  $d=2+\varepsilon$  [24,25]. В последнем случае температура магнитного перехода  $T_M/|J|S^2 \sim \varepsilon$  и может быть применена стандартная техника  $\varepsilon$ -разложения. Физически это означает, что картина спектра возбуждений слабо отличается от спин-волновой (поправки к спектру спиновых волн  $\delta E_q \sim |J|\varepsilon \ln q$ ).

В данном параграфе рассматривается обобщение этого анализа на квазидвумерные магнитные системы, произведенное в работе [A4]. Как упоминалось во Введении, применение ренормгруппового анализа ожидается наиболее успешным в спин-волновой и двумерной флуктуационных областях, где картина спиновых возбуждений близка к

спин-волновой. Как видно из результатов спин-волновых подходов (1.1.10), (1.1.11), (1.1.14), (1.1.28), (1.1.32), в этих режимах имеются логарифмические расходимости, определяемые параметрами  $\ln(\xi_{J'} / L_r)$  в квантовом и  $\ln(\xi_{J'} / a)$  в классическом случае. Таким образом, естественно применение ренормгруппового анализа для суммирования указанных логарифмических расходимостей.

Конкретный вид ренормгрупповых уравнений зависит от типа магнитного обмена в плоскости и величины спина. В дальнейшем последовательно рассматриваются случаи квантовых антиферро-, ферромагнетиков и классических магнетиков.

### **а) Квантовые антиферромагнетики**

Рассмотрим сначала случай квантовых антиферромагнетиков. В этом случае выражения для намагниченности и температуры фазового перехода являются универсальными (т.е. не зависящими от типа решетки) при условии, что намагниченность выражена через квантово-перенормированные (наблюдаемые) значения параметров основного состояния: намагниченность  $\bar{S}_0$ , спиновую жесткость  $\rho_s$ , скорость спиновых волн  $c$ , межплоскостной обмен  $\alpha_r$  и анизотропии  $f_r$ . В соответствии с этим, введем параметры квантовой перенормировки  $Z_i(g, c)$  намагниченности, скорости спиновых волн  $c$ , константы связи, являющейся отношением скорости спиновых волн к спиновой жесткости  $g = \rho_s / c$ , межплоскостного обмена  $\alpha$  и анизотропии  $f$  согласно соотношениям

$$g_0 = gZ_1, c_0 = cZ_c$$

$$f = f_r Z_2, \alpha = \alpha_r Z_3$$

связывающим квантово-перенормированные (наблюдаемые) параметры основного состояния  $g, c, \alpha_r, f_r$  и затравочные параметры модели  $g_0, c_0, \alpha, f$ .

В силу неуниверсальности перенормировочных констант  $Z_i$ , то есть их зависимости от деталей структуры решетки, они могут быть определены лишь из рассмотрения конкретной модели в некотором приближении. Поскольку указанные параметры не содержат логарифмических расходимостей, они могут быть вычислены с помощью спин-волновой теории, являющейся фактически разложением в ряд по  $g$  ( $g \sim 1/S$  для больших  $S$ ). Для антиферромагнетиков с квадратной решеткой результаты параграфов 1.1, 1.2 приводят к выражениям

$$Z = 1/Z_1 = Z_2 = Z_3^{1/2} = 1 - 0.197/S, \quad (1.4.1)$$

$$Z_c = 1 + 0.079/S.$$

с точностью до членов первого порядка по  $1/S$ . Для учета квантовых перенормировок в рамках континуальной модели (1.3.13), удобно иметь эквивалент результатов (1.4.1), определенный в рамках этой модели. В первом порядке по  $g$  находим

$$Z = 1 - (N-1) \frac{g\Lambda}{4\pi} + O(g^2),$$

$$Z_1 = 1 - (N-2) \frac{g\Lambda}{4\pi} + O(g^2), \quad Z_c = 1 + O(g^2) \quad (1.4.2)$$

$$Z_2 = 1 + \frac{g\Lambda}{2\pi} + O(g^2), \quad Z_3 = 1 + \frac{3g\Lambda}{4\pi} + O(g^2)$$

где введен параметр ультрафиолетовой обрезки  $\Lambda$ , необходимый для регуляризации расходимостей континуальной модели (1.3.13), возникающих при вычислении параметров основного состояния. После выполнения квантовой перенормировки (1.4.2) в континуальной модели (или, эквивалентно, перенормировки (1.4.1) в исходной решеточной модели), теория, как показывается ниже, становится полностью универсальной, то есть термодинамические свойства не зависят от параметра обрезки  $\Lambda$ .

Результирующая теория, однако, содержит логарифмические расходимости  $\ln(\xi_{J'} / L_\tau)$ , которые и необходимо просуммировать в рамках РГ подхода. С введением параметра инфракрасной обрезки  $\mu$ , указанные

расходимости заменяются на  $\ln[1/(\mu L_r)]$ . Для устранения указанных расходимостей, введем, согласно теоретико-полевой формулировке РГ преобразования [24,111], перенормировочные параметры  $\tilde{Z}_i$  согласно

$$\begin{aligned} g &= g_R \tilde{Z}_1, u_r = u_R \tilde{Z}_u \\ \pi &= \pi_R \tilde{Z}, h = h_R \tilde{Z}_1 / \sqrt{\tilde{Z}} \\ f_r &= f_R \tilde{Z}_2, \alpha_r = \alpha_R \tilde{Z}_3 \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

где индекс  $R$  соответствует (квантово- и температурно-) перенормированным величинам,  $u_r = c/T$ . Перенормировочные параметры  $Z_i$  выбираются из условия, чтобы перенормированная теория не содержала логарифмических расходимостей, т.е чтобы термодинамические свойства были независимы от  $\mu$ . Перенормируемость нелинейной сигма-модели [111] делает достаточным введение пяти перенормировочных параметров для пяти независимых параметров модели.

Для вычисления перенормировочных параметров достаточно вычислить перенормировку одночастичной функции Грина во внешнем магнитном поле [24,111]. Проводя вычисления аналогично двумерному случаю [24], находим  $\tilde{Z}_u \equiv 1$ ,

$$\begin{aligned} Z &= 1 + t_r (N-1) \ln(u_r \mu) + t_r^2 (N-1)(N-3/2) \ln^2(u_r \mu) + O(t_r^3), \\ Z_1 &= 1 + t_r (N-2) \ln(u_r \mu) + t_r^2 (N-2) \ln^2(u_r \mu) + O(t_r^3), \\ Z_2 &= 1 - 2t_r \ln(u_r \mu) + O(t_r^2), \quad Z_3 = 1 - t_r \ln(u_r \mu) + O(t_r^2), \end{aligned} \quad (1.4.4)$$

где  $t_r = g / (2\pi u_r) = T / (2\pi \rho_s)$  - эффективная температура, отличающаяся от затравочной из-за перенормировки константы спиновой жесткости  $\rho_s$ . В отличие от соответствующих результатов для классического случая [24], ультрафиолетовый параметр обрезания в (1.4.4) суть  $u_r$  (а не  $\Lambda$  как в классическом случае). Кроме того, (1.4.4) определяет также два новых параметра перенормировки,  $\tilde{Z}_2$  и  $\tilde{Z}_3$  для параметров анизотропии и межплоскостного обмена соответственно.

Бесконечно малое изменение  $\mu$  генерирует преобразование ренормгруппы, при этом производные  $Z$ - факторов относительно  $\mu$  определяют изменение параметров модели. Так как перенормировка констант (1.4.2) инвариантна при РГ преобразовании, достаточно вычислить производные величин  $Z$ . В двухпетлевом приближении, по аналогии с [23, 24, 111], получаем

$$\beta(t_r) \equiv \mu \frac{dt_r}{d\mu} = -(N-2)t_r^2 - (N-2)t_r^3 + O(t_r^4) \quad (1.4.5)$$

$$\zeta(t_r) \equiv \mu \frac{d \ln Z}{d\mu} = (N-1)t_r + O(t_r^3) \quad (1.4.6)$$

Отметим, что перенормировка эффективной температуры  $t_r$ , являющейся также константой связи соответствующей классической нелинейной сигма модели (см., напр., [12]), полностью аналогична перенормировке вершины взаимодействия магнонов в  $1/S$ -разложении, рассмотренной в параграфе 1.2, и при  $N = 3$  совпадает с указанными результатами в ведущем логарифмическом приближении. Перенормировка параметров межплоскостного обмена и анизотропии будет необходима только в однопетлевом приближении и описывается функциями

$$\gamma_f(t_r) \equiv \mu \frac{d \ln Z_2}{d\mu} = -2t_r + O(t_r^2) \quad (1.4.7)$$

$$\gamma_\alpha(t_r) \equiv \mu \frac{d \ln Z_3}{d\mu} = -t_r + O(t_r^2) \quad (1.4.8)$$

Уравнения (1.4.5) - (1.4.8) определяют эволюцию параметров модели при РГ преобразовании. Результаты для эффективной температуры  $t_\rho$  и перенормировочного параметра  $Z_\rho$  поля  $\pi$  на масштабе  $\mu\rho$  имеют вид, аналогичный двумерным [24]

$$\rho = \exp \left[ \int_{t_r}^{t_\rho} \frac{dt}{\beta(t)} \right] = \left( \frac{t_\rho}{t_r} \right)^{1/(N-2)} \exp \left[ \frac{1}{N-2} \left( \frac{1}{t_\rho} - \frac{1}{t_r} \right) \right] \left[ 1 + O(t_\rho) \right], \quad (1.4.9)$$

$$Z_\rho = \exp \left[ - \int_{t_r}^{t_\rho} \frac{\zeta(t)}{\beta(t)} dt \right] = \left( \frac{t_\rho}{t_r} \right)^{(N-1)/(N-2)} \left[ 1 + \frac{N-1}{N-2} (t_r - t_\rho) + O(t_\rho^2) \right]. \quad (1.4.10)$$

Выражения для эффективных параметров межплоскостного обмена и анизотропии  $f_\rho, \alpha_\rho$  на масштабе  $\mu\rho$  имеют вид

$$f_\rho = f_r \exp \left[ - \int_{t_r}^{t_\rho} \frac{\gamma_f(t)}{\beta(t)} dt \right] = f_r \left( \frac{t_\rho}{t_r} \right)^{-2/(N-2)} \left[ 1 + O(t_\rho) \right], \quad (1.4.11)$$

$$\alpha_\rho = \alpha_r \exp \left[ - \int_{t_r}^{t_\rho} \frac{\gamma_\alpha(t)}{\beta(t)} dt \right] = \alpha_r \left( \frac{t_\rho}{t_r} \right)^{-1/(N-2)} \left[ 1 + O(t_\rho) \right] \quad (1.4.12)$$

Используя приведенные результаты, можно вычислить относительную подрешеточную намагниченность  $\bar{\sigma}_r = \bar{\sigma} / \bar{\sigma}_0$ , где  $\bar{\sigma} = \bar{S} / S$  ( $\bar{S} = \langle S_Q^z \rangle$  - намагниченность подрешетки) и  $\bar{\sigma}_0 \equiv \bar{\sigma}(T=0)$  в РГ подходе. Результат теории возмущений для намагниченности в нулевом магнитном поле до членов порядка  $t_r^2$  имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_r = 1 - \frac{t_r(N-1)}{4} \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_r, \alpha_r)} + \frac{t_r^2(3-N)(N-1)}{32} \ln^2 \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_r, \alpha_r)} \\ - \frac{t_r^2(N-1)(B_2-2)}{8} \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_r, \alpha_r)}, \end{aligned} \quad (1.4.13)$$

где

$$\Delta(f, \alpha) = f + \alpha + \sqrt{f^2 + 2\alpha f} \quad (1.4.14)$$

$$B_2 = 3 + f_r / \sqrt{f_r^2 + 2\alpha_r f_r} \quad (1.4.15)$$

В ведущем логарифмическом порядке в физическом случае  $N=3$  этот результат совпадает с результатом спин-волновой теории (1.1.11). Намагниченность подрешетки определяется при РГ преобразовании уравнением

$$\bar{\sigma}_r(t_r, f_r, \alpha_r, \mu_r) = Z_\rho^{-1/2} \bar{\sigma}_r(t_\rho, f_\rho, \alpha_\rho, \mu\rho) \quad (1.4.16)$$

или, с учетом (1.4.10),

$$\frac{\bar{\sigma}_r(t_r, f_r, \alpha_r, \mu)}{\bar{\sigma}_r(t_\rho, f_\rho, \alpha_\rho, \mu\rho)} = \left( \frac{t_r}{t_\rho} \right)^{\beta_2} \left[ 1 - \beta_2(t_r - t_\rho) + O(t_\rho^2) \right] \quad (1.4.17)$$

где

$$\beta_2 = \frac{N-1}{2(N-2)} \quad (1.4.18)$$

«критический индекс» намагниченности подрешетки в рассматриваемом температурном интервале, являющийся  $\varepsilon \rightarrow 0$  пределом критического индекса  $\beta_{2+\varepsilon}$  в пространстве размерности  $d = 2 + \varepsilon$  [24]. Величина  $t_\rho/t_r$  определяется уравнением (1.4.9), которое может быть переписано как

$$\frac{t_r}{t_\rho} = 1 + t_r \ln\left(\frac{t_r}{t_\rho} \rho^{N-2}\right) + t_r O(t_\rho) \quad (1.4.19)$$

Наконец, масштаб  $\rho$  определяется условием, что аргументы логарифмов в результате теории возмущений (1.4.13) на этом масштабе были равны единице, то есть,  $\bar{\sigma}_r(t_\rho, f_\rho, \alpha_\rho, \mu\rho) = 1$ . Принимая во внимание, что  $u$  перемасштабируется тривиальным образом,  $u_\rho = u_r/\rho$ , получаем дополнительное уравнение для  $\rho$ :

$$2\rho^2 = u_r^2 \Delta(f_\rho, \alpha_\rho) \quad (1.4.20)$$

Из формул (1.4.11), (1.4.12), (1.4.19) и (1.4.20) находим уравнение для относительной намагниченности подрешетки в двухпетлевом РГ подходе

$$\bar{\sigma}_r^{-1/\beta_2} = 1 - \left[ \frac{t_r}{2} (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_t, \alpha_t)} + \frac{2}{\beta_2} \ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) + O(t_r / \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.21)$$

где  $f_t$  и  $\alpha_t$  - температурно-зависящие параметры межплоскостного обмена и анизотории

$$f_t/f_r = \bar{\sigma}_r^{4/(N-1)} \left[ 1 + O(t_r/\bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.22)$$

$$\alpha_t/\alpha_r = \bar{\sigma}_r^{2/(N-1)} \left[ 1 + O(t_r/\bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.23)$$

При числе компонент  $N=3$  результаты (1.4.22), (1.4.23) совпадают с результатами ССВТ (1.1.24) и (1.1.25) соответственно. Ведущий логарифмический член в квадратных скобках (1.4.21) соответствует результату ССВТ (1.1.28), в то время как другие два члена описывают поправки к этой теории и совпадают с результатами анализа в рамках  $1/S$  разложения, рассмотренным в параграфе 1.2.

Как уже указывалась, температура Нееля не может быть вычислена непосредственно в РГ подходе, поскольку возбуждения неспинволнового типа дают вклад вблизи  $T_M$ , что приводит к необходимости учета диаграмм с произвольным числом петель. Однако, можно получить общее выражение для температуры Нееля следующим образом. Рассмотрим сначала температуру  $t_r^*$  перехода в критическую область. Она определяется условием перехода в режим сильной связи, т.е. условием  $t_\rho \sim 1$  (или, эквивалентно,  $t_r^* \sim \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}$ , масштаб  $\rho$  определен в (1.4.20)). Подставляя это соотношение в (1.4.21), имеем

$$t_r^* = 2 \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f^*, \alpha^*)} + 2 \ln(2/t_r^*) + C_{AF} \right]^{-1} \quad (1.4.24)$$

где  $f^* = f_r (t_r^*)^{2/(N-2)}$ ,  $\alpha^* = \alpha_r (t_r^*)^{1/(N-2)}$ ,  $C_{AF}$  некоторая константа порядка единицы. При дальнейшем РГ преобразовании, трехмерные гейзенберговские (или двумерные изинговские) флуктуации могут изменить только постоянный (несингулярный) член  $C_{AF}$ , который заменяется универсальной функцией  $\Phi_{AF}(\alpha_r/f_r) \sim 1$ . Таким образом, для температуры Нееля имеем

$$t_N = 2 \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_c, \alpha_c)} + 2 \ln(2/t_N) + \Phi_{AF}(\alpha_r/f_r) \right]^{-1} \quad (1.4.25)$$

где

$$f_c = f_r t_N^{2/(N-2)}, \quad \alpha_c = \alpha_r t_N^{1/(N-2)}. \quad (1.4.26)$$

$[t = T/(2\pi\rho_s), u_r = c/T]$ . Второй член в знаменателе (1.4.25), представляющий поправку к ССВТ и имеющий порядок  $\ln \ln(2T_N^2/\alpha)$  приводит к существенному понижению температуры Нееля по сравнению с ее значением в ССВТ. Функция  $\Phi$  определяется неспинволновыми возбуждениями и не может быть вычислена в рамках РГ подхода. В квазидвумерном изотропном случае  $\Phi$  может быть вычислена с помощью  $1/N$  разложения (см. следующий параграф), более общий случай требует численного анализа (например, квантовым методом Монте-Карло).

Можно выделить три частных случая результатов (1.4.21), (1.4.25):

(а) Анизотропный двумерный случай  $\alpha = 0$ . Уравнение для намагниченности (1.4.21) принимает вид

$$\bar{\sigma}_r^{1/\beta_2} = 1 - \frac{t_r}{2} \left[ (N-2) \ln \frac{1}{u_r^2 f_r} + \frac{4}{\beta_2} \ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) + O(t_r / \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.27)$$

Уравнение для температуры Нееля имеет вид

$$t_N = 2 \left[ (N-2) \ln \frac{1}{u_r^2 f_r} + 4 \ln(2/t_N) + \Phi_{AF}(\infty) \right]^{-1} \quad (1.4.28)$$

(б) Изотропный квазидвумерный случай  $f = 0$ .

$$\bar{\sigma}_r^{1/\beta_2} = 1 - \frac{t_r}{2} \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \alpha_r} + \frac{3}{\beta_2} \ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) + O(t_r / \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.29)$$

$$t_N = 2 \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \alpha_r} + 3 \ln(2/t_N) + \Phi_{AF}(0) \right]^{-1} \quad (1.4.30)$$

(в) Случай больших  $N$ . Чтобы сохранить структуру уравнения (1.4.27) при большом, но конечном  $N$ , удобно разлагать (1.4.27) по  $1/(N-2)$  а не по  $1/N$ . Имеем

$$\rho^2 \simeq \frac{\Delta(f_r, \alpha_r)}{2} \left[ 1 + \frac{B_2 - 2}{N-2} \ln \frac{t_r}{t_\rho} \right] \simeq \frac{\Delta(f_r, \alpha_r)}{2} \left( \frac{t_r}{t_\rho} \right)^{(B_2-2)/(N-2)} \quad (1.4.31)$$

Намагниченность определяется уравнением

$$\bar{\sigma}_r^{1/\beta_2} = 1 - \frac{t_r}{2} \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_r, \alpha_r)} + B_2 \ln(1/\bar{\sigma}_r^2) + 2(1 - \bar{\sigma}_r^2) + O(t_r/\bar{\sigma}_r^2, 1/N) \right], \quad (1.4.32)$$

температура Нееля

$$t_N = 2 \left[ (N-2) \ln \frac{2}{u_r^2 \Delta(f_r, \alpha_r)} + B_2 \ln(2/t_N) + \Phi_{AF}(\alpha_r/f_r) \right]^{-1} \quad (1.4.33)$$

## б) Квантовые ферромагнетики

Ферромагнитный случай может быть рассмотрен способом, аналогичным антиферромагнитному. В этом случае перенормировки

благодаря квантовым флуктуациям отсутствуют, и рассматриваемый температурный режим определен как

$$T \gg JS \max\{f, \alpha\} \quad (1.4.34)$$

Чтобы развить теорию возмущений для производящего функционала (1.3.11), удобно перейти от вещественных полей  $\pi_x, \pi_y$  к циклическим компонентам

$$\pi^\pm = \pi_x \pm i\pi_y \quad (1.4.35)$$

и разложить снова квадратные корни в ряд по  $\pi^+, \pi^-$ . Затравочные функции Грина полей  $\pi^+, \pi^-$  имеют вид

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{1}{g} \left[ i\omega_n + p_{\parallel}^2 + \alpha(1 - \cos p_z) + f + h \right]^{-1} \quad (1.4.36)$$

где  $g = 1/S$ . Из-за отсутствия квантовой перенормировки индексы  $r$  могут быть опущены. Множители  $\tilde{Z}_i$  имеют тот же самый вид (22) как в антиферромагнитном случае с  $N=3$  с заменой  $\ln(u, \mu) \rightarrow \ln(u\mu)/2$ , где  $u = JS/T$ .

Относительная намагниченность  $\bar{\sigma} \equiv \bar{S}/S$  ( $\bar{S} = \langle S^z \rangle$ ) в во втором порядке теории возмущений дается выражением

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{t}{2} \ln \frac{2}{u\Delta(f, \alpha)} - \frac{t^2}{4} (B_2 - 2) \ln \frac{2}{u\Delta(f, \alpha)} \quad (1.4.37)$$

( $t = g/u$ ). Соотношение (1.4.17) справедливо также и в ферромагнитном случае. Уравнение для  $\rho$  в этом случае имеет вид

$$2\rho^2 = u\Delta(f_\rho, \alpha_\rho) \quad (1.4.38)$$

Таким образом, получаем уравнение для намагниченности квантового ферромагнетика

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{t}{2} \left[ \ln \frac{2}{u\Delta(f_t, \alpha_t)} + 2\ln(1/\bar{\sigma}) - 2(1 - \bar{\sigma}) + O(t/\bar{\sigma}) \right] \quad (1.4.39)$$

Результаты для температурной перенормировки параметров анизотропии и межплоскостного обмена имеют тот же самый вид (1.4.22), (1.4.23). Результат (1.4.39) также совпадает с результатом анализа в рамках  $1/S$

разложения, (1.2.7). Температура Кюри определяется тем же способом, что и температура Нееля в антиферромагнитном случае, результат имеет вид

$$t_C = 2 / \left[ \ln \frac{2}{u\Delta(f_c, \alpha_c)} + 2 \ln(2/t_C) + \Phi_F(\alpha f) \right] \quad (1.4.40)$$

### в) Классические магнетики

Анализ классических анизотропных квазидвумерных магнетиков подобен изотропному двумерному случаю [12]. В этом случае относительная температура  $t = T/(2\pi\rho_s^0)$  играет роль константы связи, и мы имеем вместо первой строки (1.4.3) соотношение

$$t = Z_1 t_R \quad (1.4.41)$$

где  $t_R$  - перенормированная температура. Затравочная функция Грина поля  $\pi = \mathbf{n} - (\mathbf{nz})\mathbf{z}$  имеет вид

$$G^{(0)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi t} [2(2 - \cos q_x a - \cos q_y a) + \alpha(1 - \cos q_z a) + f + h]^{-1} \quad (1.4.42)$$

где  $a$  - постоянная решетки. Перенормировочные константы могут быть рассчитаны по двухточечной вершинной функции. Эти константы могут быть представлены как

$$Z_i(t, a) = Z_{Li}(t) \tilde{Z}_i(t_L, a) \quad (1.4.43)$$

где  $t_L = tZ_{L1}^{-1}$ ,  $Z_{Li}$  содержат нелогарифмические вклады, которые не изменяются при РГ преобразованиях, и  $\tilde{Z}_i$  содержат все остальные вклады.

Мы имеем

$$Z_{L1} = Z_{L2} = Z_{L3} = 1 - \pi t/2 + O(t^2); Z_L = 1 \quad (1.4.44)$$

Результаты для констант перенормировки имеют вид

$$Z = 1 + t_L(N-1) \ln(64a\mu) + t_L^2(N-1)(N-3/2) \ln^2(64a\mu) + O(t_L^3), \quad (1.4.45)$$

$$Z_1 = 1 + t_L(N-2) \ln(64a\mu) + t_L^2(N-2) \ln^2(64a\mu) + O(t_L^3),$$

$$Z_2 = 1 - 2t_L \ln(64a\mu) + O(t_L^2), \quad Z_3 = 1 - t_L \ln(64a\mu) + O(t_L^2),$$

Выражение для намагниченности во втором порядке теории возмущений есть

$$\bar{\sigma} = 1 - \frac{t_L(N-1)}{4} \ln \frac{64}{\Delta(f_L, \alpha_L)} + \frac{t_L^2(3-N)(N-1)}{32} \ln^2 \frac{64}{\Delta(f_L, \alpha_L)} - \frac{t_L^2(N-1)}{8} \left[ 1 + \frac{f_L}{\sqrt{f_L^2 + 2\alpha_L f_L}} \right] \ln \frac{64}{\Delta(f_L, \alpha_L)} \quad (1.4.46)$$

где введены перенормированные величины параметров обмена и анизотропии,

$$f_L = fZ_{L2}^{-1}, \quad \alpha_L = \alpha Z_{L3}^{-1} \quad (1.4.47)$$

Уравнение для намагниченности в двухпетлевом РГ подходе может быть получено таким же образом как и для квантового случая, имеем

$$\bar{\sigma}^{1/\beta_2} = 1 - \frac{t_L}{2} \left[ (N-2) \ln \frac{64}{\Delta(f_i, \alpha_i)} + \frac{2}{\beta_2} \ln(1/\bar{\sigma}) - 2(1 - \bar{\sigma}^{1/\beta_2}) + O(t_L/\bar{\sigma}^{1/\beta_2}) \right] \quad (1.4.48)$$

Температура магнитного перехода удовлетворяет уравнению

$$t_M = 2 / \left[ (N-2) \ln \frac{64}{\Delta(f_c, \alpha_c)} + 2 \ln(1/t_M) + \Phi_{cl}(\alpha/f) \right] \quad (1.4.49)$$

Таким образом, РГ подход достаточен для вычисления намагниченности при температурах не слишком близких к температуре магнитного перехода, при которых спин-волновые возбуждения играют решающую роль, а также позволяет вычислить температуры Кюри (Нееля) с точностью до некоторой постоянной, являющейся универсальной в квантовом случае.

## 1.5. $1/N$ разложение в $O(N)$ модели изотропных и легкоосных квантовых антиферромагнетиков

Подходом, альтернативным ренормгрупповому подходу и позволяющем вычислить намагниченность и температуру Нееля квазидвумерных квантовых антиферромагнетиков, является  $1/N$  разложение. Несмотря на то, что это разложение не воспроизводит полностью низкотемпературное поведение намагниченности, найденное в ренормгрупповом анализе, его результаты позволяют лучше описать

область температур, близкую к температуре магнитного фазового перехода и, в частности, критическую область. Для температуры Нееля  $1/N$  разложение воспроизводит РГ результат (1.4.25), но при этом позволяет вычислить постоянную  $\Phi_{AF}(0)$ , которая не может быть определена в рамках РГ подхода.

Построение  $1/N$  разложения [A2-A4] производится аналогично двумерному случаю [110] на основе действия (1.3.13). Рассмотрим отдельно изотропный и анизотропный случаи.

### а) Изотропный случай

В связи с наличием дальнего порядка ниже температуры Нееля, произведем сдвиг поля  $\sigma = \tilde{\sigma} + \bar{\sigma}$  где  $\bar{\sigma}$  - относительная подрешеточная намагниченность  $\bar{S}/S$ . После интегрирования по  $\tilde{\sigma}$ , производящий функционал (1.3.13) принимает вид

$$Z[h] = \int D\lambda \exp(NS_{eff}[\lambda, h]) \quad (1.5.1)$$

$$S_{eff}[\lambda, h] = \frac{1}{2} \ln \det \hat{G}_0 + \frac{1}{2g} (1 - \bar{\sigma}^2) \text{Sp}(i\lambda) + \frac{1}{2g} \text{Sp} \left[ (i\lambda \bar{\sigma} - h/\rho_s^0) \hat{G}_0 (i\lambda \bar{\sigma} - h/\rho_s^0) \right] \quad (1.5.2)$$

где

$$\hat{G}_0 = [\partial_\tau^2/c_0^2 + \nabla^2 + \alpha \Delta_z]^{-1} \quad (1.5.3)$$

$$\Delta_z \sigma_{i_z}(\mathbf{r}, \tau) = \sigma_{i_z+1}(\mathbf{r}, \tau) - \sigma_{i_z}(\mathbf{r}, \tau)$$

Поскольку  $N$  входит в действие (1.5.2) лишь как множитель в показателе экспоненты, разложение около седловой точки показателя генерирует ряд по степеням  $1/N$ . При  $T < T_N$  имеется седловая точка с  $i\lambda = 0$  и  $\bar{\sigma}^2 \neq 0$ .

Функция Грина поля  $\sigma$  определяется выражением

$$G^{mn}(\mathbf{q}, q_z, \omega_n) = \frac{\rho_s^0}{Z[0]} \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^2} \int \frac{dp_z}{2\pi} \times \sum_{\omega_l} \frac{\partial^2 Z[h]}{\partial h^m(p, p_z, \omega_l) \partial h^n(\mathbf{q} - \mathbf{p}, q_z - p_z, \omega_{l-n})} \Big|_{h=0} \quad (1.5.4)$$

где  $h(\mathbf{p}, p_z, \omega)$  - Фурье-образ  $h_i(\mathbf{r}, \tau)$ . Только диагональные элементы  $G^{mm}$  отличны от нуля и пропорциональны неоднородной динамической спиновой восприимчивости:

$$G^{mm}(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \frac{\rho_s^0}{S^2} \chi^{mm}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, q_z + \pi, \omega) \delta_{mm} \quad (1.5.5)$$

где  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  - волновой вектор антиферромагнитной структуры в плоскости; для  $N = 3$

$$\chi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \sum_i e^{i(\mathbf{q}\mathbf{R}_i + q_z R_i^z)} \langle\langle S_0^\alpha | S_i^\beta \rangle\rangle_\omega \quad (1.5.6)$$

$S_i^\alpha$  - операторы спина,  $\alpha, \beta = x, y, z$ . Так как функция  $Z[0]$  инвариантна при вращениях в спиновом пространстве, далее мы полагаем что подрешеточная намагниченность направлена в  $N$ -м направлении и  $\bar{\sigma}^m = \bar{\sigma} \delta_{mN}$ . Тогда  $G^{NN}$  соответствует продольной функции Грина  $G_l$ , в то время как другие диагональные компоненты - поперечной функции Грина  $G_t$ . При  $T < T_N$ , значение  $\bar{\sigma}$  определяется из условия  $\langle \sigma^2 \rangle = 1$ , которое принимает вид

$$1 - \bar{\sigma}^2 = \frac{T}{\rho_s^0} \sum_{\omega_n} \sum_m \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} G^{mm}(k, k_z, \omega_n) \quad (1.5.7)$$

Ниже используется «релятивистскую» обрезку суммирования по частотам и интегрирования по импульсам  $\omega_n^2 + k^2 < \Lambda^2$ ; при этом значение затравочной скорости спиновых волн  $c_0$  необходимо заменить на полностью перенормированную скорость  $c$ , которая в дальнейшем полагается равной единице.

В пределе  $N \rightarrow \infty$  можно заменить  $\lambda$  в (1.5.2) его значением в седловой точке (равным нулю), чтобы получить "свободную" функцию Грина (совпадающую для поперечных и продольных спиновых компонент)

$$G_0(k, k_z, \omega_n) = \left[ \omega_n^2 + k^2 + \alpha(1 - \cos k_z) \right]^{-1} \quad (1.5.8)$$

После интегрирования и суммирования по частотам в (1.5.7) получаем температуру Нееля в пределе  $N \rightarrow \infty$

$$T_N^0 = \frac{4\pi\rho_s^{N=\infty}}{N \ln(2T_N^2/\alpha c^2)} \quad (1.5.9)$$

где  $\rho_s^{N=\infty} = N(1/g - 1/g_c)$  - перенормированная жесткость спиновых волн в нулевом порядке по  $1/N$ ,  $g_c = 2\pi^2/\Lambda$ . Сравнивая выражение (1.5.9) с результатом ССВТ (1.1.30) и ренормгруппового подхода (1.4.21) в ведущем логарифмическом порядке, можно видеть, что значение (1.5.9) в  $N/(N-2)$  раз ниже полученных ранее результатов [Для сравнения результата (1.5.9) с результатом ССВТ (1.1.30), необходимо принять во внимание значение спиновой жесткости и скорости спиновых волн в ССВТ (1.1.27)].

Как следует из сравнения результата (1.5.8) с результатом  $1/S$  разложения (1.2.4), ведущий порядок  $1/N$  разложения описывает правильно продольную корреляционную функцию лишь в длинноволновом пределе  $q \rightarrow 0$ . Это связано с «флуктуационным» (неспинволновым) характером возбуждений в сферической модели, являющейся пределом нелинейной сигма-модели при  $N \rightarrow \infty$ . Как показано ниже, указанное расхождение устраняется рассмотрением поправок первого порядка по  $1/N$ . Кроме того, далее показано, что в первом порядке по  $1/N$

- (а) Множитель  $N$  в знаменателе (1.5.9) заменяется на  $N-2$
- (б)  $\rho_s^{N=\infty}$  и  $\alpha$  в (1.5.9) должны быть заменены их перенормированными значениями,  $\rho_s$  и  $\alpha_c$
- (в) В знаменателе (1.5.9) возникают члены порядка  $\ln \ln(2T^2/\alpha)$  и единицы, что позволяет воспроизвести результаты ренормгруппового подхода и  $1/S$  - разложения предыдущих параграфов и вычислить постоянную  $\Phi(0)$ .

Точная спиновая функция Грина  $G$  может быть записана как

$$G^{mm}(k, k_z, \omega_n) = \left[ \omega_n^2 + k^2 + \alpha(1 - \cos k_z) + \Sigma(k, k_z, \omega_n) \right]^{-1} - C(k, k_z, \omega_n) \delta_{mN} \quad (1.5.10)$$

В первом порядке по  $1/N$  собственно-энергетическая часть  $\Sigma(k, k_z, \omega_n)$  и функция  $C(k, k_z, \omega_n)$ , описывающая перенормировку функции Грина вследствие дальнего порядка, имеют вид

$$\Sigma(k, k_z, \omega_n) = \frac{2T}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_z}{2\pi} \times \frac{G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, k_z + q_z, \omega_n + \omega_m) - G_0(q, q_z, \omega_m)}{\Pi(q, q_z, \omega_m)} \quad (1.5.11)$$

$$C(k, k_z, \omega_n) = \frac{2\bar{\sigma}^2}{g} \frac{1}{\Pi(k, k_z, \omega_n)} \quad (1.5.12)$$

где

$$\Pi(q, q_z, \omega_n) = \Pi(q, q_z, \omega_n) + \frac{2}{g} \bar{\sigma}^2 G_0(q, q_z, \omega_n) \quad (1.5.13)$$

$$\Pi(q, q_z, \omega_n) = T \sum_{\omega_l} \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_z}{2\pi} G_0(p, p_z, \omega_l) \times G_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, p_z + q_z, \omega_l + \omega_n). \quad (1.5.14)$$

Величина  $C$  в (1.5.12) - нулевого порядка по  $1/N$ , но соответствующий вклад в условие (1.5.7) имеет первый порядок. Поляризационный оператор  $\Pi(q, q_z, \omega_n)$  определяет перенормированную продольную функцию Грина

$$G_l^{N=\infty}(q, q_z, \omega_n) = \frac{\Pi(q, q_z, \omega_n)}{(q^2 + \omega_n^2)\Pi(q, q_z, \omega_n) + 2\bar{\sigma}^2/g} \quad (1.5.15)$$

Вычисление поляризационного оператора с логарифмической точностью [A2, A3] приводит к результату

$$\Pi(q, q_z, \omega_n) = \frac{T}{2\pi} \frac{1}{(q^2 + \omega_n^2)} \ln \frac{q_0}{\max(q, \omega_n, \alpha^{1/2}, \Delta^{1/2})} \quad (1.5.16)$$

Подставляя это выражение в (1.5.15) можно видеть, что результат для продольной функции Грина в первом порядке  $1/N$ -разложения имеет вид, полностью аналогичный результату  $1/S$ -разложения первой строки (1.2.4), устраняя, однако, подрешеточную намагниченность в числителе (1.2.4), приводившей к неэквивалентности продольной и поперечной восприимчивостей вблизи критической точки и связанной с использованием спин-волновой теории в качестве исходной точки в  $1/S$ -

разложении. Кроме того, подрешеточная намагниченность в знаменателе первой строки (1.2.4) заменяется ее квадратом в (1.5.15). Это различие обусловлено неточностью  $1/N$ -разложения первого порядка при низких и промежуточных температурах, при которых  $1/S$  разложение является более систематическим методом анализа. В то же время, как обсуждается ниже, результат (1.5.15) (а также другие результаты в первом порядке  $1/N$  разложения) является более правильным в критической области, в которой флуктуационные (критические) возбуждения играют доминирующую роль.

В первом порядке по  $1/N$  условие (1.5.7) принимает вид

$$\begin{aligned}
1 - \bar{\sigma}^2 = & gT \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} G_0(k, k_z, \omega_m) \\
& - gT \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} G_0^2(k, k_z, \omega_m) \Sigma(k, k_z, \omega_m) \\
& - \frac{2\bar{\sigma}^2 T}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \frac{G_0^2(k, k_z, \omega_m)}{\Pi(k, k_z, \omega_m)}. \quad (1.5.17)
\end{aligned}$$

Следуя [110], введем функцию

$$\begin{aligned}
I(k, k_z, \omega_m) = & T \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \int \frac{dq_z}{2\pi} G_0^2(q, q_z, \omega_n) \\
& \times [G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, k_z + q_z, \omega_m + \omega_n) - G_0(k, k_z, \omega_m)], \quad (1.5.18)
\end{aligned}$$

так, что уравнение (1.5.17) сводится к

$$1 = gT \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} G_0(k, k_z, \omega_m) - gR(T, x_{\bar{\sigma}}) + \bar{\sigma}^2 [1 - F(T, x_{\bar{\sigma}})], \quad (1.5.19)$$

где

$$R(T, x_{\bar{\sigma}}) = \frac{2T}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \frac{I(k, k_z, \omega_m)}{\Pi(k, k_z, \omega_m)}, \quad (1.5.20)$$

$$F(T, x_{\bar{\sigma}}) = \frac{2T}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_z}{2\pi} \frac{G_0^2(k, k_z, \omega_m)}{\Pi(k, k_z, \omega_m)}, \quad (1.5.21)$$

и

$$x_{\bar{\sigma}} = 4\pi\bar{\sigma}^2/gT. \quad (1.5.22)$$

Вычисляя функции  $R$ ,  $F$  при  $T \gg \alpha^{1/2}$  и  $\ln(2T_N^2/\alpha c^2) \gg 1$  и используя результаты для подрешеточной намагниченности основного состояния

$\bar{\sigma}_0 = \bar{\sigma}(T=0) = \bar{S}_0/S$  и спиновой жесткости  $\rho_s$  в нелинейной сигма-модели квантового двумерного антиферромагнетика [110],

$$\frac{\bar{\sigma}_0^{-2}}{\rho_s} = \frac{g}{N} \left( 1 - \frac{8}{3\pi^2 N} \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right), \quad (1.5.23)$$

$$\rho_s = \rho_s^{N=\infty} \left( 1 + \frac{32}{3\pi^2 N} \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right), \quad (1.5.24)$$

а также вводя перенормированный параметр межплоскостного обмена

$$\alpha_r = \alpha \left( 1 - \frac{8}{3\pi^2 N} \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right), \quad (1.5.25)$$

находим уравнение для намагниченности в виде

$$\begin{aligned} 1 - \frac{NT}{4\pi\rho_s} \left[ \left(1 - \frac{2}{N}\right) \ln \frac{2T^2}{\alpha_r} + \frac{3}{N} \ln \frac{4\pi\rho_s}{NTx_\sigma^-} - \frac{2}{N} \frac{\ln(2T^2/\alpha_r)}{\ln(2T^2/\alpha_r) + x_\sigma^-} - I_1(x_\sigma^-) \right] \\ = \frac{\bar{\sigma}_0^{-2}}{\rho_s} \left[ 1 + \frac{1}{N} \ln \frac{4\pi\rho_s}{NTx_\sigma^-} - I_2(x_\sigma^-) \right] \end{aligned} \quad (1.5.26)$$

где

$$\begin{aligned} I_1(x_\sigma^-) = \frac{4}{N} \int_0^\infty q dq \int_{-\pi}^\pi \frac{dq_z}{2\pi} \left[ \frac{1}{q^2 + 1 - \cos q_z} \frac{I(q, q_z, 0) - \Pi(q, q_z, 0)}{\Pi(q, q_z, 0)} \right. \\ \left. + \frac{3 + 2x_\sigma^-}{2q^2} \frac{\theta(q^2 - 1/2)}{\ln(2q^2) + x_\sigma^-} \right] \end{aligned} \quad (1.5.27)$$

$$\begin{aligned} I_2(x_\sigma^-) = \frac{4}{N} \int_0^\infty q dq \int_{-\pi}^\pi \frac{dq_z}{2\pi} \left[ \frac{1}{(q^2 + 1 - \cos q_z)^2} \frac{1}{\Pi(q, q_z, 0)} \right. \\ \left. - \frac{1}{2q^2} \frac{\theta(q^2 - 1/2)}{\ln(2q^2) + x_\sigma^-} \right] \end{aligned} \quad (1.5.28)$$

Можно видеть, что как и в ренормгрупповом подходе, намагниченность подрешетки, выраженная в терминах квантово-перенормированных величин  $\rho_s, \bar{\sigma}_0$  и  $\alpha$ , не зависит от  $\Lambda$ , то есть является универсальной величиной.

Рассмотрим сначала случай  $x_\sigma^- \gg 1$ , или,

$$NT/4\pi\rho_s \ll \bar{\sigma}_0^2 / \bar{\sigma}_0^2 \quad (1.5.29)$$

Поскольку  $x_\sigma^-$  - убывающая функция температуры, это неравенство удовлетворяется при достаточно низких температурах. В этом случае

$I_1(x_{\bar{\sigma}})$  и  $I_2(x_{\bar{\sigma}})$  порядка  $1/x_{\bar{\sigma}}$ , то есть малы по сравнению с остальными вкладами. По аналогии с  $d = 2 + \varepsilon$  случаем (см. подробное обсуждение в [110]) необходимо преобразовать логарифмический вклад в правой стороне (1.5.26) в степень и произвести замену  $N \rightarrow N - 2$  во вкладах порядка  $1/N$  (что изменяет ответ лишь в порядке  $1/N^2$ ), после чего находим

$$(\bar{\sigma} / \bar{\sigma}_0)^{1/\beta_2} \left[ 1 - I_2(x_{\bar{\sigma}}) \right] = 1 - \frac{NT}{4\pi\rho_s} \left[ \left(1 - \frac{2}{N}\right) \ln \frac{2T^2}{\alpha_r} + \frac{3}{N} \ln \frac{\bar{\sigma}_0^{-2}}{\bar{\sigma}^{-2}} - \frac{2}{N} \frac{\ln(2T^2/\alpha_r)}{\ln(2T^2/\alpha_r) + x_{\bar{\sigma}}} - I_1(x_{\bar{\sigma}}) \right] \quad (1.5.30)$$

где

$$x_{\bar{\sigma}} = \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T} \frac{\bar{\sigma}^{-2}}{\bar{\sigma}_0^{-2}} \quad (1.5.31)$$

Результат (1.5.30) имеет вид, сходный с результатом ренормгруппы (1.4.21), однако отличается от него

- (а) Коэффициентом при субведущем члене  $\ln(\bar{\sigma}_0 / \bar{\sigma}) - 6/N$  вместо  $3/\beta_2$
- (б) Видом поправок  $O(t_r / \bar{\sigma}_r^{1/\beta_2})$ , которые входят теперь явным образом в виде известных функций  $I_1, I_2$ .

Первое отличие связано с тем, что, как указывалось выше,  $1/N$  разложение не способно описать вполне корректно режим двумерных флуктуаций. Указанное различие проявляется, однако, лишь в членах порядка  $1/N^2$ , лежащих за пределами точности первого порядка по  $1/N$ , рассматриваемого в данном параграфе, и не приводит к существенному отклонению результатов  $1/N$  разложения от РГ результатов в области низких и промежуточных температур, см. параграф 1.5. В то же время, при качественно правильном описании двумерного режима, это различие позволяет произвести сшивку с критическим режимом, корректно описываемом в рамках  $1/N$  разложения. Таким образом, подходы РГ и  $1/N$  разложения в  $O(N)$  модели имеют преимущества в различных температурных областях и взаимно дополняют друг друга. В то время как первый метод хорошо описывает двумерный режим, имеющий место при

промежуточных температурах,  $1/N$  разложение удовлетворительно описывает критическую область.

Для исследования критического режима, рассмотрим температуры, близкие к  $T_N$ , так что  $\bar{\sigma}$  достаточно мало, чтобы удовлетворить условию  $x_{\bar{\sigma}} \ll 1$ , то есть

$$\bar{\sigma}^2 / \bar{\sigma}_0^2 \ll (N-2)T/4\pi\rho_s. \quad (1.5.32)$$

После разложения (1.5.30) вблизи  $T = T_N$ ,  $x_{\bar{\sigma}} = 0$ , аналитического выделения логарифмически расходящихся при малых  $x_{\bar{\sigma}}$  вкладов в  $I_1(x_{\bar{\sigma}})$  и  $I_2(x_{\bar{\sigma}})$ , и численного вычисления оставшихся интегралов, имеем

$$1 - \frac{T}{T_N} = \frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{\sigma}_0^2} \left[ 1 + \frac{1}{N} \ln \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T_N} + \frac{8}{\pi^2 N} \ln x_{\bar{\sigma}} - A_0 \right] \quad (1.5.33)$$

где  $A_0 = 2.8906/N$ . Уравнение для температуры Нееля  $T_N$  имеет вид

$$T_N = 4\pi\rho_s \left[ (N-2) \ln \frac{2T_N^2}{\alpha_r} + 3 \ln \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T_N} - 0.0660 \right]^{-1}. \quad (1.5.34)$$

Собирая отдельно логарифмические члены в (1.5.30), возникающие от квазиимпульсов  $q \gg \alpha^{1/2}$  (двумерный режим) и  $q \ll \alpha^{1/2}$  (трехмерный режим), имеем

$$1 - \frac{T}{T_N} = \frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{\sigma}_0^2} (1 - A_0) \left( 1 + \frac{8}{\pi^2 N} \ln x_{\bar{\sigma}} \right) \left[ 1 + \frac{1}{N} \ln \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T_N} \right] \quad (1.5.35)$$

В отличие от двумерного режима, коэффициенты при логарифмах различны. Преобразовывая логарифмические члены в степени, получаем результат для подрешеточной намагниченности в критической области,

$$\frac{\bar{\sigma}}{\bar{\sigma}_0} = \left[ \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T_N} \right]^{(\beta_3/\beta_2-1)/2} \left[ \frac{1}{1-A_0} \left( 1 - \frac{T}{T_N} \right) \right]^{\beta_3}, \quad (1.5.36)$$

где

$$\beta_3 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{8}{\pi^2 N} \right) \quad (1.5.37)$$

трехмерный критический индекс намагниченности. При  $N = 3$  имеем  $\beta_3 \approx 0.36$ , что совпадает с результатом  $1/N$  разложения в модели  $\phi^4$  [112] при  $d = 3$ , в согласии с гипотезой универсальности. Зависимость (1.5.36) может быть сравнена с результатом приближения Тябликова (1.1.41), где  $\beta = 1/2$  и отсутствует переход от двумерного к трехмерному критическому поведению намагниченности.

Чтобы показать, что в интервале (1.5.29) экспериментально наблюдаемый параметр межплоскостного обмена совпадает с  $\alpha_r$ , рассмотрим собственную энергию спиновых возбуждений  $\Sigma(k, k_z, 0)$ . Из (1.5.11) получаем

$$\Sigma(k, k_z, 0) = \frac{8k^2}{3\pi^2 N} \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \quad (1.5.38)$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} G_t^{-1}(k, k_z, 0) &= k^2 \left[ 1 + \frac{8}{3\pi^2 N} \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right] + \alpha(1 - \cos k_z) \\ &= Z^{-1} \left[ k^2 + \alpha_r(1 - \cos q_z) \right]. \end{aligned} \quad (1.5.39)$$

Мы видим, что перенормированная функция Грина отличается от затравочной только множителем  $Z$  и заменой  $\alpha \rightarrow \alpha_r$ . Таким образом экспериментально наблюдаемым параметром межплоскостного обмена является  $\alpha_r$ . При более высоких температурах температурная перенормировка межплоскостного обмена становится важной.

Для определения спектра магнитных возбуждений в точке магнитного фазового перехода, рассмотрим собственно-энергетическую часть  $\Sigma(k, k_z, 0)$  при  $T = T_N$ . При  $\alpha^{1/2} \ll k \ll T_N$  собственно-энергетическая часть имеет тот же самый вид как в двумерном случае [110] с заменой  $\xi$  на  $\xi_j$ :

$$\Sigma(k, k_z, 0) = k^2 \left[ \eta \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} + \frac{1}{N} \ln \frac{\ln(2T_{\text{Neel}}^2/\alpha)}{\ln(2k^2/\alpha)} + \frac{1}{N} \right]. \quad (1.5.40)$$

Соответствующее выражение для функции Грина имеет вид ( $G = G_t = G_l$ )

$$G(k, k_z, 0) = \frac{1}{k^2} \left[ \frac{(N-2)T_N}{4\pi\rho_s} \ln \frac{2k^2}{\alpha} \right]^{1/(N-2)} \frac{N-1}{N} \left[ 1 - \eta \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right] \quad (1.5.41)$$

Множитель  $N-1$  в этом результате имеет простой физический смысл – это число голдстоуновских мод в  $N$ -компонентной модели.

При  $k \ll \alpha^{1/2}$ ,  $k_z \ll 1$  импульсная зависимость функции Грина изменяется. После интегрирования по импульсам и суммирования по частотам в (1.5.11), имеем

$$\Sigma(k, k_z, 0) = A_1 k^2 + \frac{\alpha}{2} A_2 k_z^2 + \frac{\eta}{2} (k^2 + \frac{\alpha}{2} k_z^2) \ln \frac{\alpha}{k^2 + \alpha k_z^2 / 2}. \quad (1.5.42)$$

где

$$A_1 = \eta \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} + \frac{1}{N} \ln \ln \frac{2T^2}{\alpha} + \frac{0.4564}{N}, \quad (1.5.43)$$

$$A_2 = -0.6122/N.$$

и

$$\eta = 8/(3\pi^2 N) \quad (1.5.44)$$

трехмерный критический индекс для асимптотики корреляционной функции в точке перехода в первом порядке по  $1/N$ . При  $N=3$  мы имеем  $\eta \simeq 0.09$ . Используя (1.5.42), находим

$$G^{-1}(k, k_z, 0) = (1 + A_1) \alpha_c^{\eta/2} \left( k^2 + \frac{\alpha_c}{2} k_z^2 \right)^{1-\eta/2} \quad (k \ll \alpha^{1/2}, k_z \ll 1). \quad (1.5.45)$$

Величина

$$\alpha_c = \alpha(1 + A_2)/(1 + A_1) \quad (1.5.46)$$

может интерпретироваться как перенормированный параметр межплоскостного обмена при  $T = T_N$ .

С учетом (1.5.46), находим следующее соотношение между перенормированными параметрами обмена при низких  $T$  и при  $T = T_{\text{Neel}}$ :

$$\alpha_c = \alpha_r \left( 1 + \frac{1.0686}{N} \right) \left[ \frac{(N-2)T_N}{4\pi\rho_s} \right]^{1/(N-2)}. \quad (1.5.47)$$

где члены с  $\ln \ln(2T^2/\alpha)$  преобразованы в степени и произведена замена  $N \rightarrow N-2$  в показателе. Также как в ССВТ (см., параграф 1.1),

перенормированное значение параметра межплоскостного обмена в  $T_N$  ниже чем его низкотемпературное значение, но конкретное выражение в  $N = 3$  отличается от ССВТ численным множителем, примерно равным 1.3.

Используя (1.5.47), получаем следующее уравнение для температуры Нееля  $T_N$  в терминах наблюдаемого межплоскостного обмена при этой же температуре,  $\alpha_c$

$$T_N = 4\pi\rho_s \left[ (N-2) \ln \frac{2T_N^2}{c^2\alpha_c} + 2 \ln \frac{4\pi\rho_s}{(N-2)T_N} + 1.0117 \right]^{-1}. \quad (1.5.48)$$

где  $c$  - квантово-перенормированная скорость спиновых волн. При  $N = 3$  мы имеем результат

$$T_N = 4\pi\rho_s / \ln \left[ 5.5005 \frac{(4\pi\rho_s)^2}{c^2\alpha_c} \right] \quad (1.5.49)$$

похожий на результат приближения Тябликова (1.1.41), но затравочное значение  $\alpha$  заменено ее перенормированным значением при критической температуре (1.5.47) и спиновая жесткость  $\rho_s$  также заменена ее перенормированной величиной.

В дополнение к результатам этого параграфа, рассмотрим спиновую корреляционную функцию

$$S(R, R_z) = -\frac{1}{\pi} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} e^{i(\mathbf{kR} + k_z R_z)} \sum_m \int d\omega \text{Im} \chi^{mm}(k, k_z, \omega) \frac{1}{e^{\omega/T} - 1} \quad (1.5.50)$$

при  $T = T_N$ . При  $N = 3$  мы имеем

$$S(R, R_z) = |\langle \mathbf{S}_i(\mathbf{r}) \mathbf{S}_{i+R_z}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \rangle|$$

Статическое приближение достаточно для определения асимптотики корреляционной функции при  $R \rightarrow \infty$ . Используя (1.5.50), получаем

$$S(R, R_z) = \frac{T \bar{S}_0^2}{\rho_s} \left[ 1 + \eta \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right] \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} G(k, k_z, 0) e^{i(\mathbf{kR} + k_z R_z)}. \quad (1.5.51)$$

Можно видеть, что при  $R^2\alpha + R_z^2 \gg 1$  асимптотика (1.5.51) определяется областью  $k \ll \alpha^{1/2}$  и  $k_z \ll 1$ . Подставляя (1.5.45) в (1.5.50) мы имеем

$$S(R) = \frac{1}{4\pi} \frac{T_{\text{Neel}} \bar{S}_0^2}{\rho_s} (1 - A_1 - \eta C) \left[ 1 + \eta \ln \frac{N\Lambda}{16\rho_s} \right] \left( \frac{2}{\alpha_c^{1+\eta} R^{2+2\eta}} \right)^{1/2} \quad (1.5.52)$$

где  $R = (R^2 + 2R_z^2/\alpha_c)^{1/2}$  и  $C \approx 0.5772$  постоянная Эйлера. Подставляя значение  $A_1$  (1.5.43) и преобразовывая член с  $1/N \ln \ln(2T^2/\alpha)$  в степень, получаем окончательный результат для спиновой корреляционной функции при  $T = T_N$  и  $R\alpha_c^{1/2} \gg 1$ :

$$S(R) = \frac{T_N \bar{S}_0^2}{4\pi\rho_s} \left[ \frac{(N-2)T_N}{4\pi\rho_s} \right]^{1/(N-2)} (1 - \bar{A}_1 - \eta C) \left( \frac{2}{\alpha_c^{1+\eta} R^{2+2\eta}} \right)^{1/2}, \quad (1.5.53)$$

где  $\bar{A}_1 = 0.4564/N$ . Как и можно было ожидать, переписанная через перенормированные параметры  $\rho_s$  и  $\alpha_c$ ,  $S(R)$  не содержит параметр обрезки  $\Lambda$  и, таким образом, полностью универсальна.

При  $1 \ll R \ll \alpha_c^{1/2}$  мы получаем исходя из (1.5.41), (1.5.50) ведущий член асимптотики корреляционной функции в плоскости ( $N = 3$ )

$$S(R, 0) = \frac{\bar{S}_0^2}{3\rho_s} \left( \frac{T}{4\pi\rho_s} \right)^2 \ln^2 \frac{8}{\alpha_c R^2} \quad (1.5.54)$$

Таким образом, мы имеем в этом случае логарифмическую зависимость корреляционной функции, также как при  $1 \ll R \ll \xi$  в двумерном случае [12].

### **б) Случай анизотропии типа «легкая ось»**

Рассмотрим кратко обобщение результатов предыдущего пункта на случай дополнительной малой анизотропии типа «легкая ось» [A3]. В анизотропном случае в упорядоченной фазе (которая только и будет рассматриваться) спектр возбуждений в нулевом порядке по  $1/N$ , определяемый полюсами невозмущенной продольной и поперечной функций Грина, содержит щель  $f^{1/2}$  для всех компонент  $\sigma_m$  кроме  $m = N$ . В отсутствие межплоскостного обмена имеем

$$G_t^0(q, \omega_n) = (q^2 + \omega_n^2 + f)^{-1}, \quad G_l^0(q, \omega_n) = (q^2 + \omega_n^2)^{-1}. \quad (1.5.55)$$

Как и в изотропном случае, подрешеточная намагниченность  $\langle S_Q^z \rangle = S\bar{\sigma}$  определяется уравнением  $\langle \sigma^2 \rangle = 1$ . В нулевом порядке по  $1/N$  это условие принимает вид

$$1 - \bar{\sigma}^2 = gT \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_t^0(k, \omega_m), \quad (1.5.56)$$

где  $g = N/\rho_s^0$  - константа связи. Соответствующее значение температуры Нея определяется уравнением

$$T_N^0 = 4\pi\rho_s^{N=\infty}/[N \ln(T_N^2/c^2 f)] \quad (1.5.57)$$

где  $\rho_s^{N=\infty} = N(1/g - 1/g_c)$  - перенормированная спиновая жесткость в нулевом порядке по  $1/N$ ,  $g_c = 2\pi^2/\Lambda$ . Так же, как и в изотропном случае, результат (1.5.57) в  $N/(N-2)$  раз больше соответствующих результатов ССВТ (1.1.36) и РГ подхода (1.4.28).

В первом порядке по  $1/N$  уравнение для подрешеточной намагниченности принимает вид

$$1 - \bar{\sigma}^2 = gT \frac{N-1}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_t^0(k, \omega_m) + g [F(T, \bar{\sigma}) - R(T, \bar{\sigma})], \quad (1.5.58)$$

где

$$R(T, \bar{\sigma}) = T \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} [G_t^0(k, \omega_m)]^2 [\Sigma_t(k, \omega_m) - \Sigma_t(0, 0)], \quad (1.5.59)$$

$$F(T, \bar{\sigma}) = \frac{2T}{N} \sum_{\omega_m} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_t^0(k, \omega_m) \frac{\Pi(k, \omega_m)}{\Pi(k, \omega_m)}. \quad (1.5.60)$$

Собственно-энергетические части даются выражениями

$$\Sigma_{t,l}(k, \omega_m) = \frac{2T}{N} \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{G_{t,l}^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_m - \omega_n)}{\Pi(q, \omega_n)} \quad (1.5.61)$$

где

$$\Pi(q, \omega_n) = \Pi(q, \omega_n) + \frac{2\bar{\sigma}^2}{g} G_t^0(q, \omega_n), \quad (1.5.62)$$

$$\Pi(q, \omega_n) = T \sum_{\omega_l} \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^2} G_t^0(p, \omega_l) G_t^0(\mathbf{q} + \mathbf{p}, \omega_n + \omega_l). \quad (1.5.63)$$

Так как поляризационный оператор  $\Pi(q, \omega_n)$  входит в (1.5.58) только в поправки первого порядка по  $1/N$ , вклад в  $\Pi(q, \omega_n)$ , содержащий  $G_l^0(q, \omega_n)$ , изменяет термодинамические свойства лишь в порядке  $1/N^2$ , и им можно формально пренебречь. Это соответствует пренебрежению вкладом возбуждений изинговского типа с переворотом спина на узле. Однако, эти возбуждения незначительны только при волновых векторах  $q \gg f^{1/2}$  (см., например, [113]). Согласно (1.5.62), (1.5.63), такие квазиимпульсы дают доминирующий вклад не слишком близко к температуре Неля, при  $T \ll 2\bar{\sigma}^2/g$ . Противоположный случай  $T \gg 2\bar{\sigma}^2/g$  соответствует критической области с флуктуациями изинговского ( $N=1$ ) типа, которая не может быть рассмотрена в рамках  $1/N$ -разложения.

В интервале  $T < f^{1/2}c$  подрешеточная намагниченность хорошо описывается ССВТ; при  $T \ll f^{1/2}c$  мы имеем  $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_0 - [T/(4\pi\rho_s)]\exp(-f^{1/2}c/T)$ . Далее мы рассматриваем только температурную область  $T \gg f^{1/2}c$ . Процедура интегрирования и суммирования по частотам в (1.5.58) аналогична изотропному случаю. Используя значения квантово-перенормированного параметр анизотропии

$$f_r = f(1 - 4Q_\Lambda), \quad (1.5.64)$$

спиновой жесткости  $\rho_s$  и намагниченности основного состояния  $\bar{\sigma}_0$ , (1.5.23) и (1.5.24). находим результат для подрешеточной намагниченности

$$\frac{\bar{\sigma}}{\bar{\sigma}_0} \left[ 1 + \frac{1}{N} \ln \frac{\ln(T^2/f_r) + x_\sigma}{x_\sigma} \right] = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ (N-2) \ln \frac{T^2}{f_r} + B_2 \ln \frac{\ln(T^2/f_r) + x_\sigma}{x_\sigma} - 2 \frac{\ln(T^2/f_r)}{\ln(T^2/f_r) + x_\sigma} + O(1/x_\sigma) \right] \quad (1.5.65)$$

где  $B_2 = 4$  и  $x_\sigma = (4\pi\rho_s/NT)(\bar{\sigma}^2/\bar{\sigma}_0^2)$ , члены порядка  $1/x_\sigma$  малы за исключением узкой критической области. В первом порядке по  $1/N$  при подрешеточной намагниченности отличной от нуля, расходимости,

связанные с наличием продольных флуктуаций сокращаются. Можно ожидать, что это сокращение имеет место в произвольном порядке в  $1/N$ .

При достаточно низких температурах

$$T \gg f_r^{1/2}, NT \ln(T^2/f_r)/4\pi\rho_s \ll \bar{\sigma}^2/\bar{\sigma}_0^2. \quad (1.5.66)$$

имеем результат

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_0 \left[ 1 - \frac{T(N-1)}{8\pi\rho_s} \ln \frac{T^2}{f_r c^2} - \frac{N(B_2-2)T^2}{2(4\pi\rho_s)^2} \ln \frac{T^2}{f_r c^2} \right], \quad (1.5.67)$$

совпадающий с результатом теории спиновых волн (1.1.35). Последний член в квадратных скобках в (1.5.67) соответствует температурной перенормировке параметра анизотропии

$$f(T) = f_r \left[ 1 - \frac{T(B_2-2)}{4\pi\rho_s} \ln \frac{T^2}{f_r c^2} \right]. \quad (1.5.68)$$

При промежуточных температурах, где

$$TN \ln(T^2/f_r)/4\pi\rho_s \gg \bar{\sigma}^2/\bar{\sigma}_0^2 \gg TN/4\pi\rho_s, \quad (1.5.69)$$

вновь используем тождество  $\ln(T^2/f) + x_{\bar{\sigma}} = 4\pi\rho_s/NT$ , имеющее место в нулевом порядке по  $1/N$ , и преобразовывая логарифмический вклад в левой части (1.5.65) в степень, находим

$$(\bar{\sigma} / \bar{\sigma}_0)^{1/\beta_2} = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ (N-2) \ln \frac{T^2}{f_r c^2} + B_2 \ln \frac{\bar{\sigma}_0^2}{\bar{\sigma}^2} - 2 + 2 \frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{\sigma}_0^2} + O\left(\frac{NT}{4\pi\rho_s} \frac{\bar{\sigma}_0^2}{\bar{\sigma}^2}\right) \right] \quad (1.5.70)$$

Температурно-зависимый параметр анизотропии может быть определен из

$$[G_t(q,0)]^{-1} \equiv [G_t^0(q,0)]^{-1} + \Sigma_t(q,0) - \Sigma_t(0,0) \propto q^2 + f(T). \quad (1.5.71)$$

Вычисляя собственно-энергетическую часть  $\Sigma_t(q,0)$ , находим в температурной области (1.5.69)

$$f(T)/f_r = (\bar{\sigma}/\bar{\sigma}_0)^{4/(N-2)}. \quad (1.5.72)$$

Результат (1.5.70) следует сравнить с РГ результатом (1.4.27). При  $N \rightarrow \infty$  эти выражения совпадают, но при конечном  $N$  коэффициент во втором члене в квадратных скобках различен. Как обсуждается в параграфе 1.4, в отличие от уравнения (1.5.70), результат РГ (1.4.27) неприменим к температурной области переходной к критическому поведению. В то же

самое время, результат  $1/N$  разложения (1.5.70) должен рассматриваться как удовлетворительная интерполяция между низкой температурой и истинным критическим поведением.

В критической области, определяемой неравенством  $\bar{\sigma}^2/\bar{\sigma}_0^2 \ll TN/4\pi\rho_s$  имеет место поведение намагниченности изинговского типа и  $1/N$ - разложение не применимо. Это проявляется, в частности, в том что  $\bar{\sigma}(T)$  имеет расходящуюся производную  $\partial\bar{\sigma}/\partial T$  при некоторой температуре  $T_M$ . Однако, соответствующая критическая область очень узка (также как критическая область трехмерных флуктуаций в изотропном квазидвумерном случае). Таким образом температура Нееля может быть оценена как  $T_N \simeq T_M$ . Значение  $T_M$  для  $N=3$  определяется решением уравнения

$$T_M = \frac{4\pi\rho_s(1-r)}{\ln(T_M^2/f_r c^2) + B_2 \ln(1/r^2) - 2(1-r^2)}, \quad (1.5.73)$$

где

$$r = (\bar{\sigma}/\bar{\sigma}_0)_{T=T_M} = -\frac{\pi\rho_s}{2T_M} + \sqrt{\left(\frac{\pi\rho_s}{2T_M}\right)^2 + \frac{B_2}{2}}. \quad (1.5.74)$$

При больших  $N$  мы имеем  $r = O(1/N^{1/2})$ . Более правильно, температура Нееля может быть вычислена сшивкой (1.5.70) с температурной зависимостью  $(\bar{\sigma}/\bar{\sigma}_0)^8$ , которая фактически линейна при  $0.9T_M < T < T_M$ , с двумерным поведением изинговского типа

$$(\bar{\sigma}/\bar{\sigma}_0)^8 = A(1-T/T_N), \quad (1.5.75)$$

где  $A$  и  $T_N$  определяются из величины при  $T=0.9T_M$  и углового коэффициента указанной линейной зависимости.

В присутствии маленького межплоскостного обмена  $J'$  результаты (1.5.70), (1.5.73) сохраняют свой вид с заменой

$$f_r \rightarrow \Delta = \frac{1}{2}(\alpha_r + f_r + \sqrt{f_r^2 + 2\alpha_r f_r}) \quad (1.5.76)$$

$$B_2 = 3 + f_r/\sqrt{f_r^2 + 2\alpha_r f_r} \quad (1.5.77)$$

где  $\alpha_r$  - квантово-перенормированный параметр межплоскостного обмена. Использование (1.5.76) и (1.5.77) позволяет определить относительную роль магнитной анизотропии и межплоскостного обмена в слоистых магнитных системах.

Аналогичные приближения для квантового ферромагнетика в случае  $T \gg JSf$ ,  $TN \ln(T/JSf)/4\pi\rho_s \gg \bar{\sigma}^2/\bar{\sigma}_0^2 \gg TN/4\pi\rho_s$  приводят к результату

$$\bar{\sigma}^{-1/\beta_2} = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s^0} \left[ (N-2) \ln \frac{T}{JSf} + 2B_2 \ln(1/\bar{\sigma}) + O(1) \right] \quad (1.5.78)$$

(В ферромагнитном случае, квантовые перенормировки параметров основного состояния отсутствуют так что  $f_r = f$ , и температурная перенормировка в этой области определяется (1.5.72). Тогда выражение для температуры Кюри принимает вид

$$T_M = \frac{4\pi\rho_s^0(1-r)}{\ln(T_M/JSf) + 2B_2 \ln(1/r) + O(1)} \quad (1.5.79)$$

с  $r$  определенной в (27). В присутствии межплоскостного обмена необходимо выполнить замены (1.5.76) и (1.5.77).

Вышеприведенная теория обеспечивает описание дальнего порядка в квантовых и классических магнетиках в различных температурных областях. Суммируем результаты, полученные в практически важном случае  $N = 3$ . В спин-волновой и двумерной областях, то есть при

$$\bar{\sigma}_r \gg T/4\pi\rho_s, \Gamma \gg \Delta \quad (1.5.80)$$

мы имеем результат РГ для относительной (подрешеточной) намагниченности

$$\bar{\sigma}_r = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ \ln \frac{2\Gamma(T)}{\Delta(f, \alpha)} + 2 \ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r) \right] \quad (1.5.81)$$

где функция  $\Delta(f, \alpha)$  определена в (1.4.14), температурно-перенормированные значения межплоскостного обмена, и параметра анизотропии

$$f_t/f_r = (\alpha_t/\alpha_r)^2 = \bar{\sigma}_r^2 \quad (1.5.82)$$

и величины  $\Gamma(T), \bar{\sigma}_r, f_r, \alpha_r, \rho_s$  определены в Таблице I-1.

	$\Gamma(T)$	$\bar{\sigma}_r$	$\rho_s$	$f_r$	$\alpha_r$
квантовый АФМ	$T^2/c^2$	$\bar{S}/\bar{S}_0$	$\gamma S \bar{S}_0$	$f \bar{S}_0^2/S^2$	$\alpha \bar{S}_0/S$
квантовый ФМ	$T/JS$	$\bar{S}/S$	$\rho_s^0$	$f$	$\alpha$
классический ФМ, АФМ	32	$\bar{S}/S$	$\rho_s^0 Z_{L1}$	$f Z_{L2}^{-1}$	$\alpha Z_{L3}^{-1}$

Таблица I-1. Параметры уравнения для подрешеточной намагниченности (1.5.81) и температуры магнитного перехода (1.5.83) для различных магнитных систем,  $Z_{L1} = Z_{L2} = Z_{L3} = 1 - T/8\pi\rho_s^0$ .

Уравнение для  $T_M$  имеет вид

$$T_M = 4\pi\rho_s \left[ \ln \frac{2\Gamma(T_M)}{\Delta(f_c, \alpha_c)} + 2 \ln \frac{4\pi\rho_s}{T_M} + \Phi(f/\alpha) \right] \quad (1.5.83)$$

где  $\Phi(x)$  - некоторая функция порядка единицы (в квантовом случае она является универсальной, то есть не зависит от верхнего параметра обрезки),  $f_c$  и  $\alpha_c$  - температурно-перенормированный межплоскостной обмен, и параметры анизотропии при  $T = T_M$

$$f_c/f_r = (\alpha_c/\alpha_r)^2 = (T_M/4\pi\rho_s)^2 \quad (1.5.84)$$

Так как  $T_M/4\pi\rho_s \sim 1/\ln(1/\Delta) \ll 1$  температурные перенормировки важны при рассмотрении экспериментальных ситуаций. В частности параметры, которые измерены в различных температурах, могут значительно отличаться.

При  $\alpha = 0$  мы имеем

$$\bar{\sigma}_r = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ \ln \frac{\Gamma(T)}{f_r} + 4 \ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r) \right] \quad (1.5.85)$$

$$T_M = 4\pi\rho_s \left[ \ln \frac{\Gamma(T_M)}{f_r} + 4 \ln \frac{4\pi\rho_s}{T_M} + \Phi(0) \right] \quad (1.5.86)$$

При  $f = 0$

$$\bar{\sigma}_r = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ \ln \frac{2\Gamma(T)}{\alpha_r} + 3\ln(1/\bar{\sigma}_r) - 2(1 - \bar{\sigma}_r) \right] \quad (1.5.87)$$

$$T_M = 4\pi\rho_s \left[ \ln \frac{2\Gamma(T_M)}{\alpha_r} + 3\ln \frac{4\pi\rho_s}{T_M} + \Phi(\infty) \right] \quad (1.5.88)$$

Результаты ССВТ (1.1.28) - (1.1.36) отличаются от (1.5.85) - (1.5.88) заменой  $4(3) \rightarrow 2(1)$  для коэффициента во втором члене в квадратных скобках в анизотропном двумерном (изотропном квазидвумерном) случаях соответственно. Таким образом, роль поправок к ССВТ более важна в изотропном случае квазидвумерного чем в двумерном анизотропном случае.

В температурном интервале вне критической области

$$\bar{\sigma}_r^2 > T/4\pi\rho_s, \Gamma \gg \Delta \quad (1.5.89)$$

результат  $1/N$  разложения в  $O(N)$  модели в первом порядке по  $1/N$  имеет вид

$$\begin{aligned} [1 - I_2(x_{\bar{\sigma}})] \bar{\sigma}_r = 1 - \frac{T}{4\pi\rho_s} \left[ \ln \frac{2\Gamma(T)}{\Delta(f_r, \alpha_r)} \right. \\ \left. + 2B_2 \ln(1/\bar{\sigma}_r) + 2(1 - \bar{\sigma}_r^2) + I_1(x_{\bar{\sigma}}) \right] \end{aligned} \quad (1.5.90)$$

где  $x_{\bar{\sigma}} = 4\pi\rho_s \bar{\sigma}_r^2 / T$ ,  $B_2$  и  $\Delta$  определены в (1.5.76) и (1.5.77),  $I_{1,2}(x)$  - некоторые функции с асимптотикой  $1/x$  при больших  $x$ , другие величины даются в Таблице 1. В частных случаях  $\alpha = 0$  и  $f = 0$  коэффициенте при втором члене в квадратных скобках в (1.5.90) - вдвое больше чем для результатов РГ (1.5.85), (1.5.87). В спин-волновой и двумерной температурных областях это различие является недостатком разложения первого порядка по  $1/N$ . В то же время,  $1/N$  разложение обеспечивает более правильное описание переходной температурной области к критическому поведению и критической области. Из-за различия в условии на переходную область (1.5.80) и (1.5.89), уравнения для  $T_M$  имеют тот же самый вид (1.5.86), (1.5.88) в обоих подходах. В изотропном

случае  $f=0$  результат  $1/N$  разложения для подрешеточной намагниченности в критической области

$$\bar{\sigma}_r = \left( \frac{4\pi\rho_s}{T_N} \right)^{(\beta_3-1)/2} \left[ \frac{1}{1-A_0} \left( 1 - \frac{T}{T_N} \right) \right]^{\beta_3} \quad (1.5.91)$$

где  $A_0 = 0.9635$  и  $\beta_3 \approx 0.36$ .

## 1.6. Сравнение с экспериментальными данными для систем с анизотропией «легкая ось»

Рассмотрим теперь экспериментальную ситуацию

На Рис. I-2 представлены экспериментальная температурная зависимость намагниченности подрешетки в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [114], результаты спин-волновых приближений (СВТ, ССВТ и теории Тябликова) для этого соединения, РГ подхода и  $1/N$  разложения (1.5.90). Значение  $\gamma \approx 1850\text{K}$  было определено исходя из экспериментальных данных для спин-волнового спектра при низких температурах [115], в то время как  $\alpha_r = 1 \cdot 10^{-3}$  было определено из сравнения намагниченности в ССВТ с экспериментальной зависимостью  $\bar{\sigma}_r(T)$  при низких температурах. Результат первого порядка  $1/N$ -разложения -  $T_N = 345\text{K}$ , что значительно ниже всех спин-волновых приближений и находится в хорошем согласии с экспериментальным значением  $T_N^{\text{exp}} = 325\text{K}$ .

РГ подход правильно описывает зависимость  $\bar{\sigma}_r(T)$  в спин-волновой области ( $T < 300\text{K}$ ) и области двумерных флуктуаций (которая очень узка при данном маленьком значении  $\alpha$ ), в то время как при более высоких температурах этот подход переоценивает  $\bar{\sigma}$ . В то же время, кривая  $1/N$  разложения расположена ближе всего к экспериментальным данным и правильно описывает критическое поведение. Результаты численного решения уравнения (1.5.90) в температурной области (1.5.89) и зависимости (1.5.91) в критической области, совпадают в точке  $T = 330\text{K}$  (отмеченной крестом).

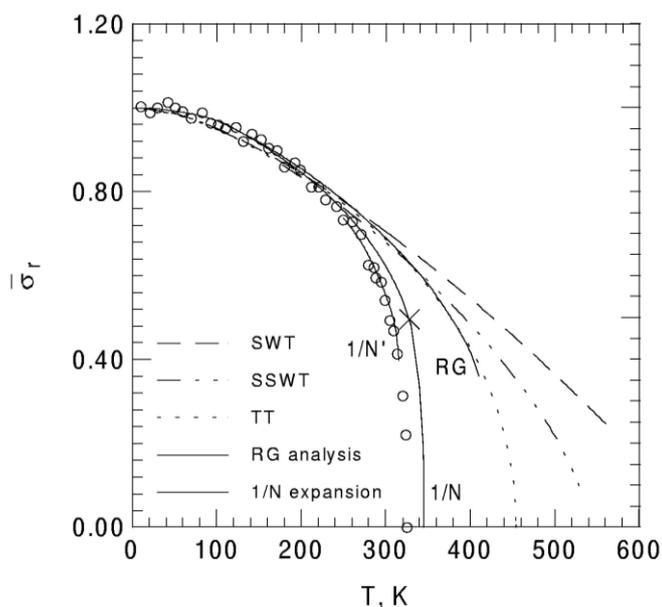


Рис. I-2. Теоретические температурные зависимости относительной намагниченности подрешетки  $\bar{\sigma}_r$  в различных приближениях: спин-волновых теориях, РГ подходе (1.5.81) и  $1/N$  разложении в  $O(N)$  модели (уравнения (1.5.90) и (1.5.91)), и экспериментальные точки для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [4]. Кривая РГ приведена вплоть до температуры, где производная  $\partial\bar{\sigma}_r/\partial T$  расходится. Кривая, обозначенная  $1/N'$  ближе к экспериментальным данным в переходной температурной области благодаря включению анизотропии, определенной из условия равенства  $T_M$  его экспериментальному значению (см. обсуждение в тексте).

В переходной к критической области  $320\text{K} < T < 340\text{K}$  теоретическая  $O(3)$  кривая находится слегка выше экспериментальной. Это может быть обусловлено влиянием анизотропии. При фиксированном  $\Delta$  в (1.5.90) и  $B_2$ , определенном из наилучшего совпадения с экспериментальными данными при промежуточных температурах (см. Рис. I-2), находим значения  $\alpha_r = 1 \cdot 10^{-4}$ ,  $f_r = 5 \cdot 10^{-4}$ . Таким образом, рассматриваемый подход дает возможность оценить относительную роль межплоскостного обмена и магнитной анизотропии в слоистых соединениях.

Небольшое расхождение между теоретическим и экспериментальным значением температуры Нееля может быть также устранено учетом

циклического (четырёхспинового) обмена [A13,A16]. Подгонка экспериментально наблюдаемого спин-волнового спектра под его теоретический вид с учетом циклического обмена приводит к значениям спиновой жесткости, скорости спиновых волн и перпендикулярной восприимчивости  $\rho_s = 23.8 \text{ meV}$ ,  $c = 206 \text{ meV}$  и  $\chi_{\perp} = 4.8 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  [A13]. Отметим, что значение жесткости спиновых волн находится в очень хорошем согласии с оценкой  $\rho_s = 23.9 \text{ meV}$ , найденный из температурной зависимости корреляционной длины  $\xi$  при  $T > T_N$  [114]. Из сравнения температурной зависимости намагниченности подрешетки при температурах  $T < T_N / 2$  с теоретической получаем  $J_{\perp} / J = 10^{-3}$  и  $\gamma_{\perp} / \gamma = 5.67 \cdot 10^{-4}$  что фактически совпадает с результатом в отсутствие циклического обмена. Из значений параметров, полученных выше, мы получаем  $T_N = 328 \text{ K}$  в очень хорошем согласии с экспериментальной ценностью  $T_N = 325 \text{ K}$ .

В слоистых перовскитах  $\text{K}_2\text{NiF}_4$ ,  $\text{Rb}_2\text{NiF}_4$  и  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  магнитная анизотропия, как известно, является более важной чем межплоскостной обмен.  $\text{K}_2\text{NiF}_4$  имеет спин  $S = 1$ , данные нейтронного рассеяния приводят к  $|J| = 102 \text{ K}$  и  $T_N^{\text{exp}} = 97.1 \text{ K}$  [27]. На рис. I-3 показана экспериментальная зависимость  $\bar{\sigma}(T)$  [3] и результаты спин-волновых подходов, РГ подхода и численного решения уравнения (1.5.90). Значение  $f_r = 0.0088$  было получено из сравнения результата намагниченности ССВТ с экспериментальными данными при низких температурах (это значение хорошо согласуется с экспериментальным  $f_r = 0.0084$  [27]). В спин-волновом и двумерном флуктуационном температурных режимах (1.5.80) ( $T < 80 \text{ K}$ ) кривые, соответствующие  $1/N$  разложению и РГ подходу располагаются несколько выше, чем экспериментальные точки, поскольку  $T^2/f_r c^2$  в этой области не велико, и перенормировано-классическое описание является не полностью адекватным.

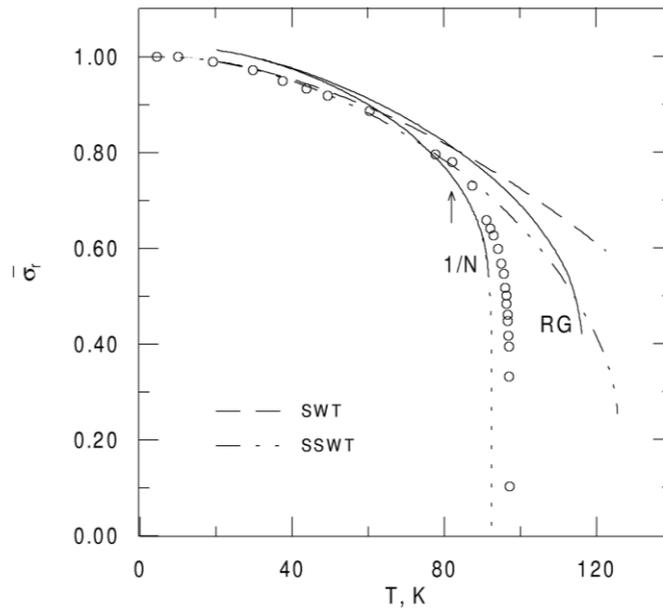


Рис. I-3. Относительная намагниченность подрешетки  $\bar{\sigma}_r(T)$  для  $K_2NiF_4$  (точки) по сравнению со стандартной спин-волновой теорией (пунктир), ССВТ (точка-пунктир), РГ подходом и результатом решения уравнения (1.5.90) в промежуточной температурной области (сплошная линия). Короткий пунктир показывает экстраполяцию результата  $1/N$ -разложения на изинговскую критическую область согласно уравнению (1.5.75). Граница между областью флуктуаций двумерного типа и поведения, переходного к критическому, отмечена стрелкой.

В то же самое время, кривая  $1/N$  разложения находится в хорошем численном согласии с экспериментальными данными. Процедура сшивки с изинговским критическим поведением (1.5.75) может быть выполнена в довольно широкой температурной области  $0.85T_N < T < 0.9T_N$  и дает  $A = 0.01$ ,  $T_N = 91.4\text{K}$ . Ширина критической изинговской области составляет 1К. Отметим, что учет членов порядка  $1/x_\sigma$  в (1.5.90) приводит к  $T_N = 92.7\text{K}$ . В переходной области к критическому поведению  $80\text{K} < T < 90\text{K}$  теоретическая  $O(3)$  кривая для  $K_2NiF_4$ , в отличие от случая  $La_2CuO_4$ , находится слегка ниже экспериментальной. Этот факт может быть приписан влиянию межплоскостного обмена. Определение

соответствующих параметров в переходной области приводит к значениям  $\alpha_r = 0.0017$ ,  $f_r = 0.0069$ , которые соответствуют  $T_{\text{Neel}} = 97$  К и затравочным параметрам  $\alpha |J| = 0.1$  К,  $\zeta |J| = 0.76$  К. Соответствующие экспериментальные данные для  $\alpha$  отсутствуют, поэтому сравнение с экспериментом в данном случае затруднительно.

Соединение  $\text{Rb}_2\text{NiF}_4$  обладает сильной магнитной анизотропией. Согласно [27], это соединение характеризуется параметрами  $|J| = 82$  К,  $|J| f_r = 3.45$  К,  $T_{\text{Neel}}^{\text{exp}} = 94.5$  К. Из сравнения экспериментальной зависимости  $\bar{\sigma}_r(T)$  с результатом ССВТ при низких температурах имеем  $f_r = 0.046$ , что также находится в хорошем согласии с вышеупомянутым экспериментальным значением. Из (1.5.83) находим  $T_N = 95.5$  К, в хорошем согласии с экспериментальными данными.

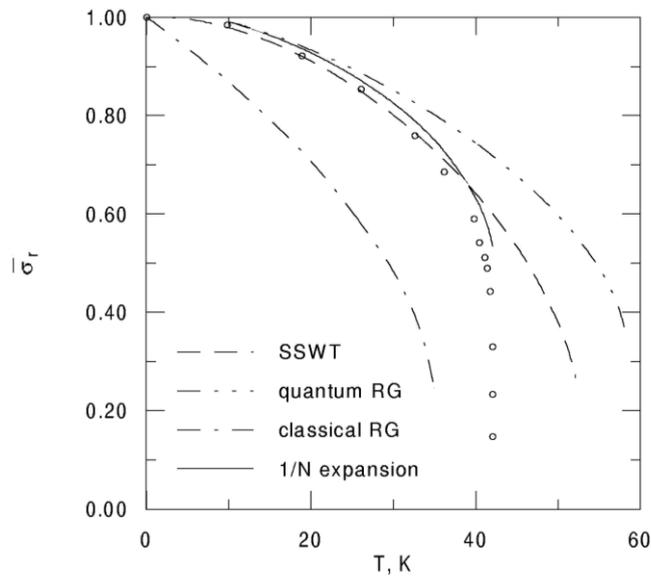


Рис. I-4. Экспериментальная зависимость  $\bar{\sigma}_r(T)$  для  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  (точки) по сравнению с результатами ССВТ (пунктирная линия), квантовым РГ анализом (две точки-пунктир) и классическим РГ анализом (точка-пунктир), и решением (1.5.90) (сплошная линия).

Соединение  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  имеет спин  $S = 5/2$  и поэтому представляет промежуточную ситуацию между квантовым и классическим случаями.

Рис. I-4 показывает сравнение результатов различных подходов с экспериментальными данными для этого соединения. Используемые параметры  $|J| = 8.4 \text{ K}$ ,  $|J|/f_r = 0.13 \text{ K}$  взяты из [27]. Можно видеть, что  $1/N$  разложение приводит к результатам, хорошо описывающим экспериментальную ситуацию во всем интервале температур. В то же время экспериментальные точки расположены между квантовой и классической кривыми РГ, квантовое приближение при этом является более удовлетворительным. Это подтверждает еще раз трудность реализации классического предела даже при относительно большой величине спина.

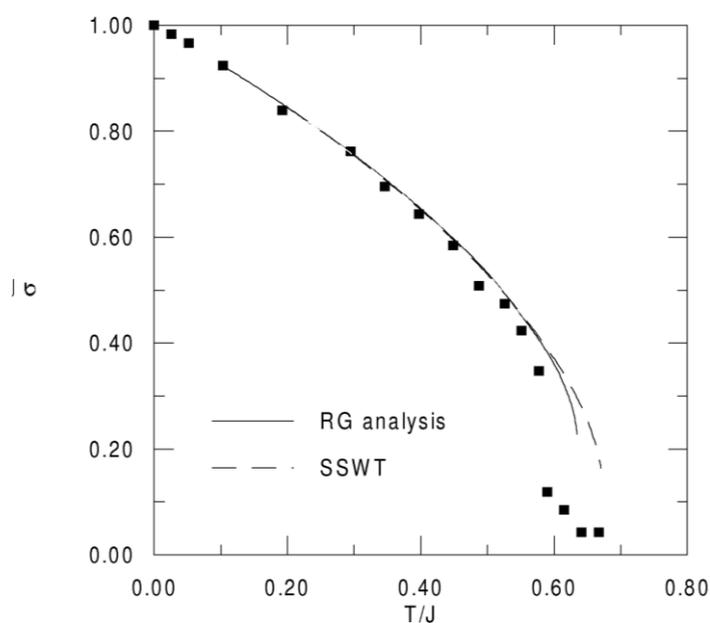


Рис. I-5. Результаты ренормгруппового подхода (сплошная линия) и ССВТ (пунктирная линия) для относительной намагниченности  $\bar{\sigma}$  классического анизотропного двумерного магнетика ( $\zeta = 0$ ,  $\eta = 0.001$ ) в сравнении с результатами вычисления методом Монте-Карло [117]. РГ и ССВТ кривые показаны до температуры, где  $\partial\bar{\sigma}/\partial T = \infty$ .

В рассматриваемом случае также ССВТ, правильно учитывающая возбуждения на масштабах постоянной решетки, приводит к лучшим результатам по сравнению с РГ подходом. Таким образом точное

рассмотрение таких ситуаций в рамках континуальных моделей требует численного вычисления интегралов по импульсам и суммирования по мацубаровским частотам.

Рис. I-5 показывает сравнение результатов ССВТ и РГ подхода для намагниченности классического магнетика с вычислениями методом Монте-Карло [117]. Можно видеть, что за исключением узкой критической области, результат РГ довольно точен, хотя при этом пренебрегается топологическими возбуждениями. Область применимости РГ подхода в классическом случае более широка чем в квантовом случае, так, что нет необходимости использовать  $1/N$  разложение для описания переходной и критической области.

Соединение	S	J, К	J', К	$\eta$	$T_{\text{СВТ}}$ , К	$T_{\text{ССВТ}}$ , К	$T_{1/N}$ , К	$T_{\text{эксп}}$ , К
$\text{La}_2\text{CuO}_4$	1/2	1600	0.8	0	672	537	343(325)	325
$\text{K}_2\text{NiF}_4$	1	102	0	0.0088	160	125	90.0	97.1
$\text{Rb}_2\text{NiF}_4$	1	82	0	0.046	180	118	88.4	94.5
$\text{K}_2\text{MnF}_4$	5/2	8.4	0	0.015	74.8	52.1	42.7	42.1
$\text{CrBr}_3$	3/2	12.38	1	0.024	79.2	51.2	39.0	40.0

Таблица I-2. Экспериментальные параметры и температуры магнитного перехода слоистых магнетиков и соответствующие теоретические значения  $T_M$  в стандартной спин-волновой теории (СВТ), самосогласованной спин-волновой теории (ССВТ) и  $1/N$  разложении. В скобках – значение температуры Неля  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  с учетом циклического обмена.

Таким образом, РГ подход и  $1/N$  разложение в  $O(N)$  модели приводят к количественно правильным результатам в различных температурных областях. Принимая во внимание, что первый метод описывает хорошо температурную область с флуктуациями двумерного типа,  $1/N$  разложение успешно описывает переход к критической области

и, в отсутствие анизотропии, критическое поведение. Оба метода дают те же самые результаты для точки магнитного перехода. Помимо этого,  $1/N$  разложение позволяет вычислять несингулярные вклады в квазидвумерном случае. Полученные выше результаты суммированы в Таблице I-2.

Указанные результаты дают возможность описать магнитные свойства реальных слоистых магнетиков с хорошей точностью и могут быть полезны для рассмотрения систем с магнитными и структурными фазовыми переходами.

## **1.7. Квазидвумерные магнетики с анизотропией типа «легкая плоскость»**

Рассмотрение предыдущих параграфов относилось к случаю легкоосной анизотропии  $\eta, \zeta \geq 0$ . В случае анизотропии «легкая плоскость» ( $\eta, \zeta < 0$ ) лишь одна из двух ветвей спектра содержит щель аналогично случаю анизотропии «легкая ось», вторая ветвь является в магнитно-упорядоченном состоянии бесщелевой. Бесщелевой характер этой ветви согласуется с утверждением теоремы Голдстоуна, утверждающей, что наличие непрерывной симметрии (в рассматриваемом случае - симметрии  $O(2)$  вращения в плоскости) приводит к бесщелевой моде в спектре возбуждений. В отличие от изотропного случая, обладающего симметрией  $O(3)$  и двумя бесщелевыми ветвями спектра, понижение до  $O(2)$  симметрии в случае анизотропии «легкая плоскость» приводит к качественному изменению магнитных свойств: как обсуждалось во Введении, даже в отсутствие межплоскостного обмена возникает переход Костерлица-Таулеса при конечной температуре  $T_{KT}$ . В случае слабой анизотропии типа «легкая плоскость» выражение для температуры Костерлица-Таулеса, полученное в [30], имеет вид

$$T_{KT} = \frac{4\pi |J| S^2}{\ln(\pi^2 / |\eta|)} \quad (1.6.1)$$

Этот результат напоминает результат для температуры магнитного упорядочения двумерных магнетиков с анизотропией типа «легкая ось». Также как в случае изотропных и легкоосных магнетиков, формула (1.6.1) недостаточна для количественного описания экспериментальных данных. В этой ситуации ренормгрупповой анализ может быть также применен для вычисления  $T_{КТ}$  с более высокой точностью. При этом включение сколь угодно малого межплоскостного обмена приводит к *конечной* температуре магнитного перехода  $T_M > T_{КТ}$ .

Для определения флуктуационных поправок к температурам перехода Костерлица-Таулеса  $T_{КТ}$  и магнитного перехода  $T_M$  вновь используем метод ренормгруппы. Производящий функционал модели (1.1.2) может быть записан в виде, аналогичном (1.3.4) с заменой  $\eta \rightarrow -\eta$ ,  $\zeta \rightarrow -\zeta$ . В классическом случае (то есть в пренебрежении динамической частью действия, содержащей производную по времени), поле  $n_y$  описывает бесщелевые возбуждения в плоскости, а поле  $n_z$  описывает возбуждения с выходом спина из плоскости, содержащие щель в спектре (ось направления (подрешеточной) намагниченности предполагается вдоль  $x$ ). Разложение (1.3.4) по  $n_{y,z}$  приводит в ведущем порядке по  $1/S$  к действию

$$L_{st} = \frac{1}{2} S^2 \int_0^{1/T} d\tau \sum_{\mathbf{k}} \left[ (J_0 - J_{\mathbf{k}}) \pi_{y\mathbf{k}} \pi_{y,-\mathbf{k}} + (J_0 - J_{\mathbf{k}} - \eta J_{\mathbf{k}}) \pi_{z\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \pi_{z,-\mathbf{k}-\mathbf{Q}} \right] \quad (1.6.2)$$

где  $\mathbf{Q}$  - волновой вектор магнитной структуры и вектор  $\mathbf{n}$  был представлен аналогично (1.3.14) в виде  $n = \{\sigma, \pi_y, \pi_z\}$ . Также как и в случае магнетиков с анизотропией типа «легкая ось», динамическая часть действия  $L_{dyn}$ , присутствующая в квантовом случае, приводит к (а) квантовым перенормировкам параметров гамильтониана (только в АФМ случае) и (б) ограничению суммирования по волновым векторам величиной  $\sqrt{T/JS}$  в ФМ случае или  $T/c$  в АФМ случае ( $c$  - квантово-перенормированная скорость спиновых волн), а не границей зоны Бриллюэна.

Температура Костерлица-Таулеса может быть вычислена методом, аналогичным вычислению температуры магнитного перехода в случае анизотропии типа «легкая ось». Уравнения ренормгруппы в двумерном гейзенберговском режиме остаются теми же, что и для анизотропии «легкая ось» (1.4.5) - (1.4.7) с заменой  $\eta \rightarrow |\eta|$ ,  $\zeta \rightarrow |\zeta|$ . Соответствующее выражение для температуры Костерлица-Таулеса имеет вид [A7]

$$t_{KT} = \left[ \ln(\mu_0 / \sqrt{|\eta|}) + 2\ln(2/t_{KT}) + C \right]^{-1} \quad (1.6.3)$$

где  $C$  – универсальная постоянная.

Для вычисления корреляционной длины при температурах, больших температуры Костерлица-Таулеса и определения температуры магнитного фазового перехода в присутствии межплоскостного обмена, произведем «сшивку» результатов, полученных в  $O(3)$  режиме с известными результатами для эффективной классической ХУ – модели. Действительно, даже если исходная модель - квантовая, на масштабах  $\mu \ll \sqrt{|\eta|} \ll L_\tau^{-1}$  эффективная ХУ модель является классической, поскольку  $L_\tau$  определяет характерный масштаб, отделяющий квантовые флуктуации от классических (см. параграф 1.2). Таким образом, все квантовые эффекты уже учтены на масштабах  $\mu \gg \sqrt{|\eta|}$ , где поведение РГ траекторий – гейзенберговское и определяется уравнениями (1.4.5) - (1.4.7).

Стандартная система РГ уравнений [28,29] двумерной классической ХУ модели может быть записана в используемых обозначениях в виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{d(1/t_\mu)}{d\mu} &= 32\pi^2 y_\mu^2 \\ \mu \frac{dy_\mu}{d\mu} &= -y_\mu \left( 2 - \frac{1}{2t_\mu} \right) \end{aligned} \quad (1.6.4)$$

Необходимо отметить, что константой связи для системы вихрей является не  $t$  (как для спиновых волн), а  $y = \exp(-E_0/T)$  где  $E_0$  - энергия вихря.

Пусть  $\mu_1 \ll \sqrt{|\eta|}$  - масштаб, где осуществляется переход от уравнений

(1.4.5) - (1.4.7) к уравнениям (1.6.4). Обозначим соответствующую эффективную температуру  $t_1 \equiv t_{\mu_1}$ , константу связи вихрей  $y_1 \equiv y_{\mu_1}$  так что

$$\frac{1}{t_1} = \frac{1}{t} - \ln \frac{\mu_0}{\sqrt{|\eta|}} + 2 \ln \frac{t}{t_1} + \Phi(\mu_1) \quad (1.6.5)$$

$$y_1 = \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{\mu}{2} \frac{d\Phi(\mu)}{d\mu} \right]_{\mu=\mu_1}^{1/2}$$

Тогда решение уравнений (1.6.4) для  $t \geq t_{KT}$  имеет вид

$$\frac{1}{t_\mu} = 4 + 2C_1 \tan \left( C_1 \ln \frac{\mu}{\mu_1} + C_2 \right) \quad (1.6.6)$$

где

$$C_1 = \sqrt{(8\pi y_1 t_1)^2 - (4t_1 - 1)^2} / (2t_1)$$

$$\tan C_2 = \frac{1 - 4t_1}{\sqrt{(8\pi y_1 t_1)^2 - (4t_1 - 1)^2}} \quad (1.6.7)$$

Температура Костерлица-Таулеса  $T_{KT}$  определяется уравнением сепаратрисы

$$8\pi y_1 = 1/t_1 - 4, t = t_{KT} \quad (1.6.8)$$

отделяющей низко- и высокотемпературные фазы. Для достаточно малых  $\mu$  имеем  $\Phi(\mu) \rightarrow \text{const}$ ,  $d\Phi(\mu)/d\mu \rightarrow 0$ , и для  $t_{KT} = T_{KT}/(2\pi JS^2)$  (или  $T_{KT}/(2\pi \rho_s)$  в АФМ-случае) воспроизводим результат (1.6.3) с  $C = 4 - 6 \ln 2 - \Phi(\mu \rightarrow 0)$ .

В критической области выше  $t_{KT}$ ,

$$\frac{1}{8\pi} (t_{KT}^{-1} - t^{-1}) \ll 1, \quad (1.6.9)$$

выражение для корреляционной длины, полученное из (1.6.6), имеет вид

$$\xi = \frac{1}{\mu_1} e^{-C_2/C_1} \simeq \frac{1}{\sqrt{|\eta|}} \exp \left( \frac{A}{2\sqrt{t_{KT}^{-1} - t^{-1}}} \right) \quad (1.6.10)$$

сходный с результатом для классической ХУ модели (A - некоторая константа). При условии, обратном (1.6.9), имеем стандартное гейзенберговское поведение [12]

$$\xi = (C_\xi/\mu_0) t \exp(1/t) \quad (1.6.11)$$

В присутствии межплоскостного обмена, при достаточно низких температурах возникает магнитный порядок. Из-за топологических эффектов, температура перехода при малом межплоскостном обмене стремится к  $T_{КТ}$ , а не к нулю. В случае  $\alpha \ll \eta$  выберем  $\mu_1$  таким, что  $\alpha^{1/2} \ll \mu_1 \ll |\eta|^{1/2}$ . В терминах РГ преобразования, при  $\mu = \mu_1$  необходимо рассматривать квазидвумерную эффективную ХУ модель с постоянной решетки  $\mu_0/\mu_1$  и межплоскостным обменом  $(\mu_0/\mu_1)^2 \alpha_1$ , где

$$\alpha_1 \equiv \alpha_{\mu_1} = \alpha t/t_1 \quad (1.6.12)$$

При РГ преобразовании эта модель преобразуется к трехмерной ХУ модели. Описание этой части РГ преобразования затруднительно вследствие сложной геометрии вихревых петель в трехмерном пространстве. Вместо прямого вычисления РГ траекторий, используем те же самые аргументы как в параграфе 1.3 для квазидвумерного случая с анизотропией «легкая ось». Температура перехода может быть определена из требования, чтобы корреляционная длина модели без межплоскостного обмена ( $\alpha = 0$ ) совпадала с характерным масштабом перехода от двумерной к трехмерной ХУ модели,  $1/\alpha_1^{1/2}$  (в единицах постоянной решетки). Тогда находим для критической температуры  $t_c = T_c/(2\pi JS^2)$  (или  $T_N/(2\pi\rho_s)$ ) в случае  $\alpha \ll |\eta|$

$$t_c = \left\{ \ln \frac{\mu_0}{\sqrt{|\eta|}} + 2 \ln \frac{2}{t_{КТ}} + C - \frac{A^2}{\ln^2(|\eta|/\alpha)} \right\}^{-1} \quad (1.6.13)$$

Последний член в знаменателе определяет разницу между  $t_c$  и  $t_{КТ}$ . Так как этот член может быть не слишком мал, по нему не производится разложение результата (1.6.13).

Результат (1.6.13) качественно правилен вплоть до  $\alpha$  порядка  $|\eta|$  (в этом случае последний член в знаменателе приводит только к перенормировке константы  $C$ ). В обратном случае  $\alpha \gg |\eta|$  поправки к результату РГ для квазидвумерных магнетиков вследствие анизотропии типа «легкая плоскость» определяются как

$$t_c = \left[ \ln \frac{\mu_0}{\sqrt{\alpha}} + 2 \ln \frac{2}{t_c} + C' + O\left(\frac{|\eta|^{1/\psi}}{\alpha^{1/\psi}}\right) \right]^{-1} \quad (1.6.14)$$

где  $\psi = \nu_3(2 - \gamma_\eta)$  - критический индекс перехода (кроссовера) между изотропным и анизотропным поведением,  $\nu_3$  - соответствующий критический индекс трехмерной модели Гейзенберга, и  $\gamma_\eta$  - аномальная размерность параметра анизотропии трехмерной модели Гейзенберга. Результат  $\varepsilon$ -разложения в анизотропной  $\phi^4$  модели в размерности  $4 - \varepsilon$  при  $\varepsilon = 1$  есть  $\psi \approx 0.83$  [111]. Для антиферромагнетика, согласно (1.5.34) постоянная  $C' \approx -0.066$ . В отличие от (1.6.13), последний член в знаменателе (1.6.14) имеет степенную зависимость от параметра анизотропии. Это есть следствие факта, что корреляционная длина в трехмерной модели Гейзенберга имеет степенное поведение с температурой (значение  $\nu_3$  конечно). По этой причине поправка в знаменателе (1.6.14) мала и для малой анизотропии ей можно пренебречь.

Рассмотрим экспериментальную ситуацию для слоистых магнетиков. Наиболее исследованная система с анизотропией типа «легкая плоскость» - соединение  $K_2CuF_4$ , являющееся  $S = 1/2$  ферромагнетиком с  $T_{KT} = 5.5K$ ,  $T_C = 6.25K$  и параметрами  $J = 20K$ ,  $\eta = -0.04$ ,  $\alpha = 6 \cdot 10^{-4}$  [27]. При подстановке этих значений в (1.6.3) и (1.6.13) получаем  $C \approx -0.5$  и  $A \approx 3.5$ . Эти значения констант могут быть проверены на других системах.

Другой пример квазидвумерного ФМ с анизотропией «легкая плоскость» - соединение  $NiCl_2$  с  $S = 1$ . Согласно [27] его параметры есть  $J = 20K$ ,  $\eta = -8 \cdot 10^{-3}$  и  $\alpha = 5 \cdot 10^{-5}$ . Используя те же самые значения  $A$  и  $C$ , которые определены для  $K_2CuF_4$ , находим  $T_{KT} = 17.4 K$  и  $T_C = 18.7 K$ , в согласии с экспериментальными данными (оба значения  $T_{KT}$  и  $T_C$  лежат в области 18–20 K). Вычисления с ведущей однологарифмической

точностью согласно (1.6.1) приводят к  $T_{KT} = 35.3\text{K}$ , что вдвое больше экспериментального значения.

Соединение  $\text{BaNi}_2(\text{PO}_4)_2$  согласно [27] является  $S = 1$  антиферромагнетиком с  $|J| = 22.0\text{K}$  и анизотропией  $\eta = -0.05$ ,  $\alpha = 1 \cdot 10^{-4}$ . При этих параметрах находим  $T_{KT} = 23.0\text{K}$ , что совпадает с экспериментальным значением и  $T_N = 24.3\text{K}$ , снова в хорошем согласии с  $T_N^{\text{exp}} = 24.5 \pm 1\text{K}$ . Несмотря на то, что для этого соединения  $T_{KT} \sim |J|S$ , истинный критерий квантового режима -  $(T/JS)^2 \ll 32$  (см. параграф 1.1), и этот случай также должен рассматриваться как квантовый.

## Глава 2. Квазиодномерные изотропные антиферромагнетики

### 2.1. Модель

В данной Главе рассматривается  $S=1/2$  модель Гейзенберга квазиодномерного изотропного антиферромагнетика

$$H = J \sum_{n,i} \mathbf{S}_{n,i} \mathbf{S}_{n+1,i} + \frac{1}{2} J' \sum_{n, \langle ij \rangle} \mathbf{S}_{n,i} \mathbf{S}_{n,j} \quad (2.1.1)$$

где  $n$  нумерует узлы в цепочке и  $i, j$  - индексы цепочек,  $J > 0$  и  $J'$  - внутри- и междоцепочечные обменные интегралы соответственно.

### 2.2. Самосогласованный спин-волновой подход

Чтобы применить самосогласованный спин-волновой подход, разделим решетку на подрешетки  $A$  и  $B$  и используем представление Дайсона-Малеева (1.1.4) для операторов спина в каждой подрешетке. Расщепление четырех-бозонных членов приводит к результату

$$H_{SSWT} = \sum_{i,\delta} \gamma_\delta (B_i^\dagger B_i - B_{i+\delta}^\dagger B_i), \quad (2.2.1)$$

где

$$B_i = \begin{cases} a_i & i \in A \\ b_i^+ & i \in B \end{cases}$$

$\delta = x, y$  соответствуют ближайшим соседям в направлениях  $x$  и  $y$ ,

$$\gamma_\delta = J_\delta (\bar{S} + \langle a_i b_{i+\delta} \rangle) \quad (2.2.2)$$

параметры ближнего порядка,  $J_x=J$ ,  $J_y=J'$  и  $\bar{S}$  - подрешеточная намагниченность. Диагонализуя гамильтониан (2.2.1), находим уравнения ССВТ при  $T=0$

$$\begin{aligned} \gamma_\delta &= \bar{S} + \sum_k \frac{\Gamma_k}{2E_k} \cos k_\delta \\ \bar{S} &= S + 1/2 - \sum_k \frac{\Gamma_0}{2E_k}, \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

где спектр спиновых волн имеет вид

$$E_k = \sqrt{\Gamma_0^2 - \Gamma_k^2}, \quad (2.2.4)$$

с

$$\Gamma_k = 2(\gamma_x \cos k_x + \gamma_y \cos k_y) \quad (2.2.5)$$

и  $\Gamma_0 \equiv \Gamma_{k=0}$  (мы предполагаем, что основное состояние антиферромагнитно упорядочено). Аналогично рассмотрению Главы 1 параметры  $\gamma_\delta$  просто связаны с корреляционной функцией спинов на соседних узлах,  $\gamma_\delta / J_\delta = |\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta} \rangle|^{1/2}$ . Константа спиновой жесткости вдоль направлений  $x$  и  $y$  выражается через эти параметры как

$$\rho_{s\delta} = S \bar{S} \gamma_\delta \quad (2.2.6)$$

Результаты вычислений согласно уравнениям (2.2.3)-(2.2.6) показаны на Рис. I-6, где также произведено их сравнение с результатами численного анализа модели (2.1.1), проведенного на основе построения разложений по введенному параметру анизотропии типа «легкая ось» с последующим переходом к изотропному пределу [A23].

Для спина  $S = 1$  спин-волновые результаты близки к численным во всем диапазоне  $0 < J'/J < 1$ . Дальний антиферромагнитный порядок исчезает при значении анизотропии  $J'/J = 0.01$  в согласии с результатами других подходов (см., например, [118]). Спиновая жесткость исчезает в точке магнитного квантового фазового перехода с критическим индексом  $\nu = 0.7$  в согласии с результатами масштабного анализа [119]; спин-волновая теория предсказывает несколько большее значение индекса  $\nu = 1$ .

С другой стороны, при  $S = 1/2$  два рассмотренных метода дают качественно-различные результаты для спиновой жесткости вдоль цепочек  $\rho_{sx}$ : в то время как спиновая жесткость в спин-волновой теории уменьшается с уменьшением  $J'/J$  (аналогично случаю  $S=1$ ), численный анализ приводит к увеличению  $\rho_{sx}$ . При этом количественное несоответствие между теорией спиновых волн и разложениями видно уже

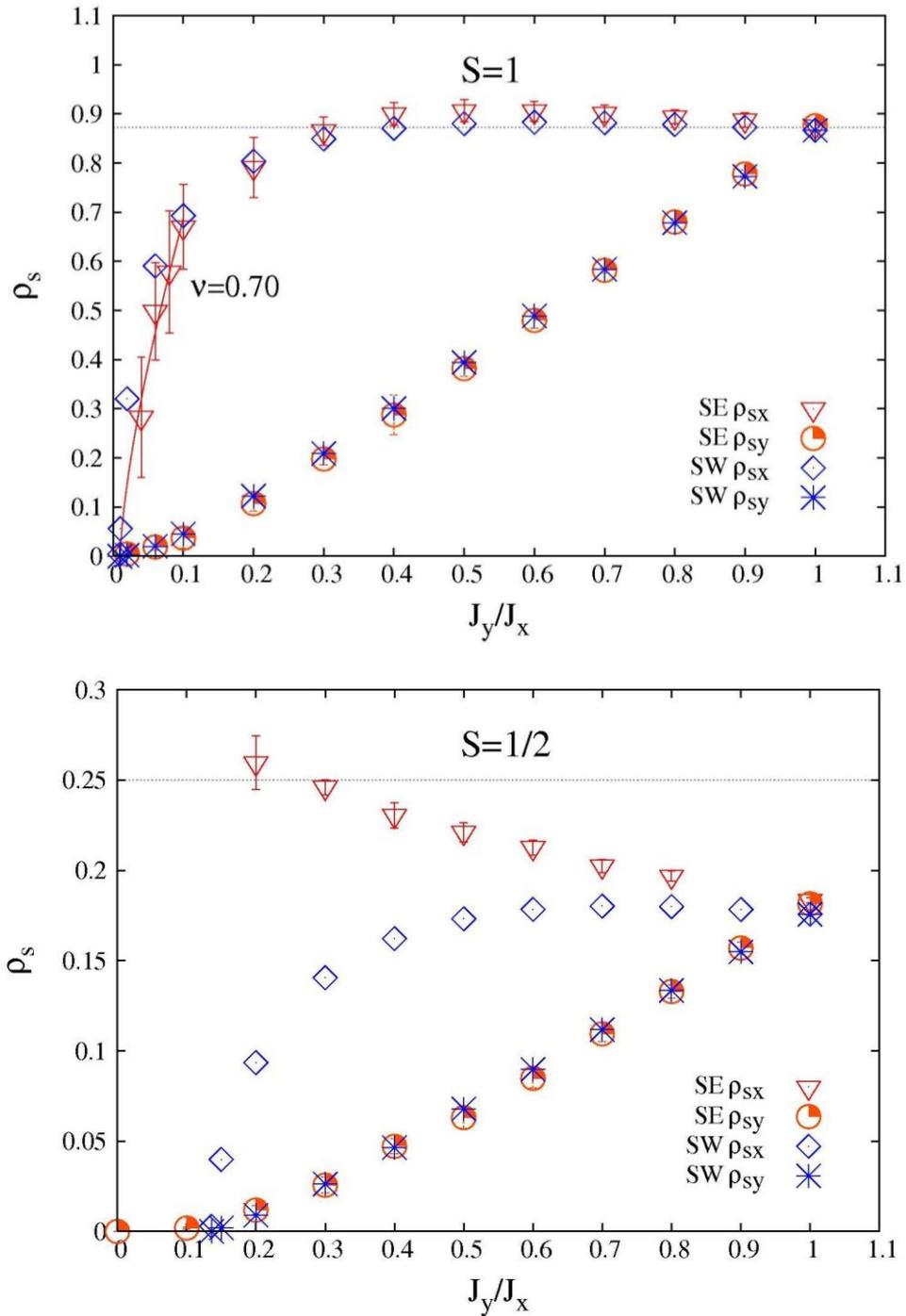


Рис. I-6. Результаты разложений (SE) и самосогласованной спин-волновой теории (SW) для спиновой жесткости вдоль  $x$  и  $y$  направлений квазиодномерной модели Гейзенберга с  $S=1$  (верхний рисунок) и  $S=1/2$  (нижний рисунок) как функция  $J_y/J_x$ . Тонкая линия показывает значение спиновой жесткости в одномерной модели.

при маленьких анизотропиях, с увеличением анизотропии различие становится качественным. Расхождение между результатами спин-

волновой теории и численными данными демонстрирует недостаточность спин-волновой теории для описания квазиодномерных систем со спином  $S = 1/2$  и возникает в связи с наличием топологических возбуждений, не учитываемым в рамках этой теории.

### 2.3. Процедура бозонизации

Для учета топологических возбуждений в случае спина  $S = 1/2$  необходим выход за рамки спин-волновой теории. Наиболее удобной процедурой, учитывающей неспинволновые возбуждения, является процедура «бозонизации». С этой целью, спиновые операторы представляются как функции Ферми-операторов, которые затем выражаются существенно нелинейным образом через бозонные операторы (см., например, [120]). Полученные соотношения между спиновыми и бозевскими операторами содержат информацию как о спин-волновых, так и топологических возбуждениях и имеют вид

$$\mathbf{S}_{n,i} = \mathbf{J}_i(x) + (-1)^n \mathbf{n}_i(x) \quad (2.3.1)$$

где

$$\begin{aligned} J_i^z(x) &= \frac{\beta}{2\pi} \partial_x \varphi_i(x) \\ J_i^\pm(x) &= \frac{\lambda}{\pi} \exp[\pm i\beta\theta_i(x)] \cos \beta\varphi_i(x) \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

и

$$\begin{aligned} n_i^z(x) &= \frac{\lambda}{\pi} \cos \beta\varphi_i(x) \\ n_i^\pm(x) &= \frac{\lambda}{\pi} \exp[\pm i\beta\theta_i(x)] \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

$\lambda$  - постоянная масштаба обратной постоянной решетки,  $\varphi_i(x)$  - бозе-оператор,  $\beta = \sqrt{2\pi}$ .

Соответствующий гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{v}{2} \sum_i \int dx [\Pi_i^2 + (\partial_x \varphi_i)^2] + g_u \sum_i \int dx \cos 2\beta\varphi_i$$

$$-\frac{J' \lambda^2}{2\pi^2} \sum_{i, \delta_{\perp}} \int dx \left[ \cos(\beta\varphi_i) \cos(\beta\varphi_{i+\delta_{\perp}}) + \cos \beta(\theta_{i+\delta_{\perp}} - \theta_i) \right] \quad (2.3.4)$$

где  $v = \pi J/2$ ,  $\Pi_i$  является импульсом, канонически сопряженным к  $\varphi_i$ ,  $\theta_i$  удовлетворяет соотношению  $\partial_x \theta_i = -\Pi_i$ . Первая строка в (2.3.4) соответствует системе отдельных цепочек и имеет форму гамильтониана стандартной модели синус-Гордона. Первый член в (2.3.4) описывает свободную бозе-систему и совпадает с его видом в непрерывном пределе спин-волновой теории с тем (важным) отличием, что  $\varphi_i$  - периодическая переменная с периодом  $2\pi$ . Этот член соответствует так называемой «конформной» теории поля, инвариантной относительно масштабных преобразований. Второй член возникает из-за рассеяния с процессом переброса («umklapp» рассеяния) фермионов, осуществляющих преобразование Йордана-Вигнера; этот вклад является маргинальным с РГ точки зрения и приводит к логарифмическим поправкам к термодинамическим величинам [33,121-123]. Численные оценки (см. [33,121]) приводят к значению взаимодействия  $g_u/(2\pi) \approx 0.25$ . Вторая строка в (2.3.4) описывает взаимодействие между цепочками.

## 2.4. Приближение среднего поля для бозонизированного гамильтониана

Простейший способ рассмотрения межцепочечного обменного взаимодействия – так называемое межцепочечное приближение среднего поля [33]. Расцепляя член взаимодействия согласно

$$\cos(\beta\varphi_i) \cos(\beta\varphi_{i+\delta_{\perp}}) \rightarrow 2 \langle \cos(\beta\varphi_{i+\delta_{\perp}}) \rangle \cos(\beta\varphi_i), \quad (2.4.1)$$

находим

$$H_{MF} = \frac{v}{2} \sum_i \int dx \left[ \Pi_i^2 + (\partial_x \varphi_i)^2 \right] + g_u \sum_i \int dx \cos 2\beta\varphi_i - \frac{\lambda}{\pi} h_{MF} \sum_i \int dx \cos(\beta\varphi_i) \quad (2.4.2)$$

где

$$h_{MF} = z_{\perp} J' \lambda \langle \cos(\beta\varphi_i) \rangle / \pi, \quad (2.4.3)$$

$z_{\perp}$  есть число ближайших соседей в поперечном к цепочке направлении ( $z_{\perp} = 4$  для простой кубической решетки). Приближение (2.4.1) дает

возможность свести проблему многих цепочек к проблеме одной цепочки в эффективном подрешеточном магнитном поле. Вводя функцию

$$B(h;T) = \frac{\lambda}{\pi} \langle \cos(\beta\varphi_i) \rangle_h, \quad (2.4.4)$$

вычисляемую в присутствии магнитного поля (последний член в (2.4.2)), получаем самосогласованное уравнение для намагниченности  $\bar{S}$  подрешетки в приближении межцепочечного среднего поля

$$\bar{S}_{MF} = B(z_{\perp} J' \bar{S}_{MF}; T) \quad (2.4.5)$$

Несмотря на то, что гамильтониан  $H_{MF}$  имеет одноцепочечную форму, вычисление функции  $B(h;T)$  (являющейся аналогом функции Бриллюэна в обычной теории среднего поля гейзенберговских магнетиков) при произвольных температурах - достаточно сложная задача. Учет размерности входящих величин приводит к  $B(h;T) = h^{1/3} f(h^{2/3}/T)$  с некоторой функцией  $f(x)$ . Для  $g_u = 0$  (в этом случае имеем стандартную модель синус-Гордона или, эквивалентно, массивную модель Тирринга)  $B(h;T)$  была определена с помощью Бете-анзаца [124]. В двух случаях вычисление может быть выполнено аналитически:

(а) при  $T = 0$  мы имеем [33,34]

$$B(h;0) \simeq 0.677(h/v)^{1/3} [1 + (g_u/2\pi) \ln(v/\Delta)]^{1/2}, \quad (2.4.6)$$

где

$$\Delta \simeq 2.085v^{1/3}h^{2/3};$$

(б) при  $h \rightarrow 0$

$$B(h,T) = h\chi_0(T), \quad (2.4.7)$$

где  $\chi_0(T)$  - подрешеточная восприимчивость системы в отсутствии поля  $h$  [33,123],

$$\chi_0(T) = \frac{\chi_0}{T} L\left(\frac{\Lambda J}{T}\right), \quad \chi_0 = \frac{\Gamma^2(1/4)}{4\Gamma^2(3/4)} \simeq 2.1884, \quad (2.4.8)$$

$$L(\Lambda J/T) = C \left[ \ln \frac{\Lambda J}{T} + \frac{1}{2} \ln \ln \frac{\Lambda J}{T} + O(1) \right]^{1/2}. \quad (2.4.9)$$

Константы  $C$  и  $\Lambda$  могут быть определены на основании численных расчетов [125]:  $C \approx 0.137$ ,  $\Lambda \approx 5.8$ . Таким образом, вышеупомянутая функция  $f(x)$  удовлетворяет  $f(x) \sim x$  при  $x \rightarrow 0$  и  $f(\infty) = \text{const}$ .

Результат (2.4.7) дает возможность вычислить значение  $T_N$  в теории среднего поля, поскольку при  $T \rightarrow T_N$  выполняется  $h_{MF} \rightarrow 0$ . Уравнение для температуры Нееля имеет вид [33]

$$T_N^{MF} = z_{\perp} J' \tilde{\chi}_0 L(\Lambda J / T_N^{MF}). \quad (2.4.10)$$

Как обсуждалось во Введении, среднее-полевое приближение (2.4.10) не удовлетворительно при описании экспериментальных данных, в частности, значения температур Нееля значительно завышены.

Причина этого состоит в том, что межцепочечное приближение среднего поля не принимает во внимание коллективные возбуждения, которые вносят вклад в термодинамические свойства. Такие возбуждения могут быть рассмотрены в рамках приближения случайных фаз (ПСФ). В этом приближении коллективные возбуждения определяются полюсами спиновых восприимчивостей [33,34]

$$\chi^{+-}(q_z, \omega) = \frac{\chi_0^{+-}(q_z, \omega)}{1 - J'(q_x, q_y) \chi_0^{+-}(q_z, \omega)/2}, \quad (2.4.11)$$

$$\chi^{zz}(q_z, \omega) = \frac{\chi_0^{zz}(q_z, \omega)}{1 - J'(q_x, q_y) \chi_0^{zz}(q_z, \omega)}, \quad (2.4.12)$$

где, для квадратной решетки в направлении, поперечном к цепочкам,

$$J'(q_x, q_y) = 2J'(\cos q_x + \cos q_y), \quad (2.4.13)$$

$\chi_0(q, \omega)$  - динамической подрешеточная восприимчивость модели (2.4.2).

$\chi_0(q, \omega)$  также определяется простыми аналитическими выражениями только в двух случаях:  $T = 0$  (см. [34] и параграф 2.6), и  $h \rightarrow 0$  где [126,123]

$$\chi_0(q_z, \omega) = \frac{1}{T} L\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \tilde{\chi}_0(q_z / T, \omega / T)$$

$$\chi_0(k, \nu) = \frac{1}{4} \frac{\Gamma(1/4 + ik_+) \Gamma(1/4 + ik_-)}{\Gamma(3/4 + ik_+) \Gamma(3/4 + ik_-)}, k_{\pm} = \frac{\nu \pm k}{4\pi} \quad (2.4.14)$$

Как и должно быть,  $\chi_0(0, 0) = \chi_0(T)$ .



где  $x = x + iv\tau$ . Далее используется система единиц с  $v=1$ . Рассмотрим подрешеточную намагниченность

$$\bar{S} = \lambda \langle \cos(\beta\varphi_i) \rangle_h / \pi \quad (2.5.2)$$

Для разложения намагниченности (2.5.2) в ряд по  $J'$ , запишем выражение для  $\bar{S}$  в формализме континуального интеграла

$$\bar{S} = \frac{\lambda}{\pi} \frac{\int D\varphi \cos(\beta\varphi_i(0)) \exp(-L[\varphi])}{\int D\varphi \exp(-L[\varphi])} \quad (2.5.3)$$

В нулевом порядке по  $J'$  (то есть при  $J' = 0$ ) имеем  $L = L_0$  и

$$\bar{S}_0 = B(h; T) \quad (2.5.4)$$

где функция  $B$  определена в (2.4.4). Разлагая (2.5.3) в ряд по  $J'$ , получаем

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{\lambda}{\pi} \frac{\int D\varphi \cos(\beta\varphi_i(0)) \exp(-L_0[\varphi]) (1 - L_{int} + L_{int}^2 / 2 + \dots)}{\int D\varphi \exp(-L_0[\varphi]) (1 - L_{int} + L_{int}^2 / 2 + \dots)} \\ &= \frac{\lambda}{\pi} \langle \cos(\beta\varphi_i(0)) (1 - L_{int} + L_{int}^2 / 2 + \dots) \rangle_{0, \text{conn}} \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

где  $\langle \dots \rangle_0 = \int D\varphi \dots \exp(-L_0[\varphi]) / \int D\varphi \exp(-L_0[\varphi])$  и

$$\begin{aligned} \langle \cos(\beta\varphi_i(0)) L_{int}^n \rangle_{0, \text{conn}} &= \langle \cos(\beta\varphi_i(0)) L_{int}^n \rangle_0 \\ &- \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(n!)^2}{m!(n-m)!} \langle \cos(\beta\varphi_i(0)) L_{int}^m \rangle_0 \langle L_{int}^{n-m} \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.5.6)$$

Каждый член в сумме входящей в (2.5.6) может быть представлен определенной диаграммой; диаграммная техника при этом совпадает с диаграммной техникой для спиновых операторов [39-41] (некоторые элементы диаграммной техники показаны на Рис. I-7). Все диаграммы классифицируются согласно их порядку по  $J' / \max(h_{MF}, T) \sim 1/z_{\perp}$ . Диаграммы рис. I-8, имеют нулевой порядок по  $1/z_{\perp}$ .

Суммирование этих диаграмм приводит к сдвигу внешнего магнитного поля на величину среднего поля:

$$h \rightarrow h = h + h_{MF}, h_{MF} = z_{\perp} J' \bar{S} \quad (2.5.7)$$

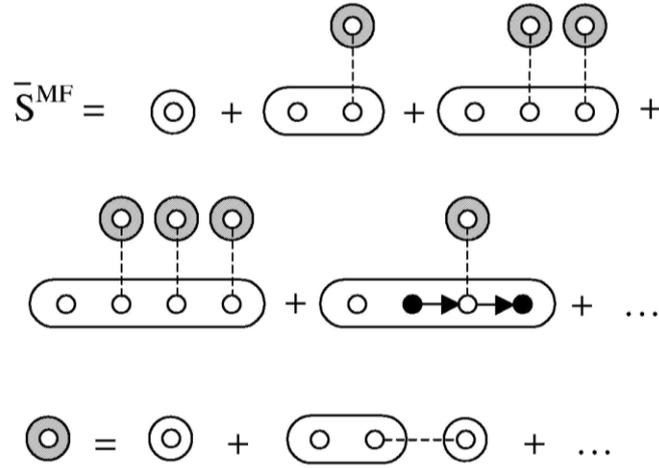


Рис. I-8. Диаграммы для подрешеточной намагниченности в нулевом порядке по  $1/z_{\perp}$  (приближение среднего поля).

(Тот же самый результат мог быть получен исключением средне-полевого вклада непосредственно в (2.5.6)). Диаграммы первого порядка по  $1/z_{\perp}$  (см. рис. I-9а) содержат одну линию ПСФ-взаимодействия, являющегося суммой неприводимых диаграмм рис. I-9б. В аналитическом виде это взаимодействие определяется как

$$V^{+,zz}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{J'(q_x, q_y)}{1 + \delta - J'(q_x, q_y)\chi_0^{+,zz}(q_z, \omega)} \quad (2.5.8)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_0^{zz}(q_z, \omega) &= \frac{\lambda^2}{\pi^2} \int d^2x \langle \cos \beta \varphi_i(0) \cos \beta \varphi_i(x) \rangle_{0,ir} \exp(-iq_z x + i\omega_n \tau), \\ \chi_0^{+-}(q_z, \omega) &= \frac{\lambda^2}{\pi^2} \int d^2x \langle e^{i\beta[\theta_i(0) - \theta_i(x)]} \rangle_0 \exp(-iq_z x + i\omega_n \tau). \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

Неприводимое среднее двух операторов определено с помощью

$$\langle AB \rangle_{ir} = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (2.5.10)$$

Следуя [42], в знаменатель (2.5.8) введена поправка  $\delta$  для того, чтобы удовлетворить требованию самосогласованности. При  $T \leq T_N$  она определяется условием  $[\chi^{+-}(0,0)]^{-1} = 0$ , то есть  $\delta = z_{\perp} J' \chi_0^{+-}(0,0) - 1$ .

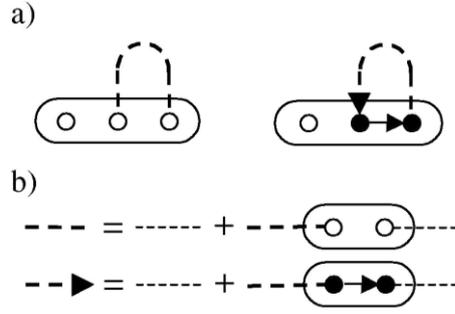


Рис. I-9. (а) Диаграммы первого порядка по  $1/z_{\perp}$  для подрешеточной намагниченности (б) уравнения для ПСФ линий взаимодействия.

Преобразуя (2.5.8) в координатно-временное пространство, имеем

$$V^{+,zz}(\mathbf{x}) = T \sum_{i\omega_n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_z}{2\pi} \sum_{q_x, q_y} V^{+,zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) \exp(iq_z x - i\omega_n \tau) \quad (2.5.11)$$

Для намагниченности подрешетки при этом находим (см. диаграммы Рис. I-9а)

$$\bar{S} = B(h; T) + \frac{\lambda^3}{2\pi^3} \int d^2x d^2y \left[ V^{zz}(x-y) \langle \cos \beta\varphi_i(0) \cos \beta\varphi_i(x) \cos \beta\varphi_i(y) \rangle_{0,ir} \right. \\ \left. V^{+-}(x-y) \langle \cos \beta\varphi_i(0) e^{i\beta\theta_i(x)} e^{-i\beta\theta_i(y)} \rangle_{0,ir} \right] \quad (2.5.12)$$

где

$$\langle ABC \rangle_{ir} = \langle ABC \rangle - \langle A \rangle \langle BC \rangle_{ir} - \langle B \rangle \langle AC \rangle_{ir} - \langle AB \rangle_{ir} \langle C \rangle \quad (2.5.13)$$

(Все средние вычислены с  $h \rightarrow h$ ).

До этого момента конкретный вид лагранжиана  $L_0$  нигде не использовался. Как уже указывалось, единственный случай, когда средние в (2.5.12) могут быть вычислены аналитически - предел  $h \rightarrow 0$ . В этом пределе имеем

$$\langle \cos \beta\varphi_i(0) \cos \beta\varphi_i(x) \cos \beta\varphi_i(y) \rangle_{0,ir} \\ = \frac{\lambda}{\pi} h \int d^2z \langle \cos \beta\varphi_i(0) \cos \beta\varphi_i(z) \cos \beta\varphi_i(x) \cos \beta\varphi_i(y) \rangle_{0,ir} \quad (2.5.14)$$

где

$$\langle ABCD \rangle_{ir} = \langle ABCD \rangle - \langle AD \rangle_{ir} \langle BC \rangle_{ir} - \langle BD \rangle_{ir} \langle AC \rangle_{ir} - \langle AB \rangle_{ir} \langle CD \rangle_{ir} \quad (2.5.15)$$

и аналогичное выражение для поперечных компонент; средние в правой части (2.5.14) вычислены при  $h = 0$ . Таким образом, находим при  $h = 0, h_{MF} \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{\lambda^2}{\pi^2} h_{MF} \int d^2z \langle \cos \beta \varphi_i(0) \cos \beta \varphi_i(z) \rangle \\ &+ \frac{\lambda^4}{2\pi^4} h_{MF} \int d^2x d^2y d^2z \left[ V^{zz}(x-y) \langle \cos \beta \varphi_i(0) \cos \beta \varphi_i(x) \cos \beta \varphi_i(y) \cos \beta \varphi_i(z) \rangle_{0,ir} \right. \\ &\quad \left. + V^{+-}(x-y) \langle \cos \beta \varphi_i(0) \cos \beta \varphi_i(z) e^{i\beta\theta_i(x) - i\beta\theta_i(y)} \rangle_{0,ir} \right], \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

Вычисляя средние в правой стороне (2.5.16) в присутствии оператора  $g_u \cos 2\beta \varphi_i$  (производящем логарифмические поправки) при  $\beta^2 = 2\pi$ , получаем

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \frac{1}{2} h_{MF} L\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \int d^2z \frac{1}{|\zeta(z)|} + \frac{1}{16} h_{MF} L^2\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \\ &\times \int d^2x d^2y d^2z V^{zz}(x-y) \left[ \frac{|\zeta(z)\zeta(x-y)|}{|\zeta(x)\zeta(y)\zeta(z-x)\zeta(z-y)|} \right. \\ &+ \frac{|\zeta(z)\zeta(z-y)|}{|\zeta(z)\zeta(y)\zeta(z-x)\zeta(x-y)|} + \frac{|\zeta(y)\zeta(z-x)|}{|\zeta(z)\zeta(x)\zeta(z-y)\zeta(x-y)|} \\ &\quad \left. - \frac{2}{|\zeta(z)\zeta(x-y)|} - \frac{2}{|\zeta(x)\zeta(y-z)|} - \frac{2}{|\zeta(y)\zeta(x-z)|} \right] \\ &+ \frac{1}{4} h_{MF} L^2\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \int d^2x d^2y d^2z V^{+-}(x-y) \frac{1}{|\zeta(z)\zeta(x-y)|} \\ &\times \text{Re} \left[ \sqrt{\frac{\zeta(x)\zeta(z-y)\zeta(\bar{z}-\bar{x})\zeta(\bar{y})}{\zeta(\bar{x})\zeta(\bar{z}-\bar{y})\zeta(z-x)\zeta(y)}} - 1 \right] \end{aligned} \quad (2.5.17)$$

где

$$\zeta(x) = \sinh(\pi T x) / (\pi T) \quad (2.5.18)$$

Вводя величину  $r = x - y$  вместо  $x$  и переходя к переменным  $\tilde{r} = rT$  и т.д. получаем результат для подрешеточной намагниченности

$$\bar{S} = \frac{1}{T} h_{MF} \chi_0 L\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{2T \chi_0} L\left(\frac{\Lambda}{T}\right) \int d^2r V(r) \left[ \frac{1}{8} F(r) + \frac{1}{2} G(r) \right] \right\} \quad (2.5.19)$$

где

$$\chi_0 = \frac{\pi}{2} \int d^2z \frac{1}{|\zeta(z)|} \approx 2.1184 \quad (2.5.20)$$

и

$$F(r) = \int d^2y d^2z \left[ \frac{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(r)|}{|\tilde{\zeta}(r+y)\tilde{\zeta}(y)\tilde{\zeta}(z-y-r)\tilde{\zeta}(z-y)|} + \frac{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(z-y)|}{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(y)\tilde{\zeta}(z-y-r)\tilde{\zeta}(r)|} \frac{|\tilde{\zeta}(y)\tilde{\zeta}(z-y-r)|}{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(r+y)\tilde{\zeta}(z-y)\tilde{\zeta}(r)|} - \frac{2}{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(r)|} - \frac{2}{|\tilde{\zeta}(r+y)\tilde{\zeta}(y-z)|} - \frac{2}{|\tilde{\zeta}(y)\tilde{\zeta}(r+y-z)|} \right] \quad (2.5.21)$$

$$G(r) = \int d^2y d^2z \frac{1}{|\tilde{\zeta}(z)\tilde{\zeta}(r)|} \times \text{Re} \left[ \sqrt{\frac{\tilde{\zeta}(r+y)\tilde{\zeta}(z-y)\tilde{\zeta}(\bar{z}-\bar{y}-\bar{r})\tilde{\zeta}(\bar{y})}{\tilde{\zeta}(\bar{r}+\bar{y})\tilde{\zeta}(\bar{z}-\bar{y})\tilde{\zeta}(z-y-r)\tilde{\zeta}(y)}} - 1 \right] \quad (2.5.22)$$

В (2.5.20) - (2.5.22) использована функция

$$\tilde{\zeta}(x) = \sinh(\pi x) \quad (2.5.23)$$

Наконец, используя связь (2.5.7) между средним полем и подрешеточной намагниченностью и собирая все поправки в знаменатель, получаем результат для температуры Нееля в первом порядке по  $1/z_{\perp}$

$$T_N = kJ' z_{\perp} \tilde{\chi}_0 L(\Lambda/T_N) \quad (2.5.24)$$

где

$$k = \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{4\chi_0} \int_{-\infty}^{\infty} dr \int_0^1 d\tau V(r, \tau) \left[ \frac{1}{4} F(r, \tau) + G(r, \tau) \right] \right\}^{-1}$$

$$V(r, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_z}{2\pi} \sum_n \sum_{q_x, q_y} \frac{\cos q_x + \cos q_y}{2\chi_0 - (\cos q_x + \cos q_y)\chi_0(q_z, 2\pi i n)} \times \exp(iq_z r - 2\pi i n \tau) \quad (2.5.25)$$

Результат (2.5.24) отличается от результата теории среднего поля (2.4.10) множителем  $k$ , зависящем от структуры решетки в направлении, перпендикулярном к цепочкам. Численный расчет для  $d=1+2$  случая (простая кубическая решетка) приводит к  $k \approx 0.70$ . Таким образом, уменьшение  $T_N$  благодаря флуктуационным эффектам составляет 25% его

среднего-полевого значения. Для  $d = 1 + 2$  интеграл в (2.5.25) расходится, и мы имеем  $T_N = 0$ .

## 2.6. Поправки к подрешеточной намагниченности основного состояния

В этом параграфе рассматриваются поправки к подрешеточной намагниченности основного состояния. Для этого используем выражение (2.5.12), где при  $T = 0$  [33,34]

$$\chi_0^{+-} = \frac{1}{4|J'|} \frac{\Delta^2}{\omega^2 + v^2 q^2 + \Delta^2} \quad (2.6.1)$$

$$\chi_0^{zz} = \frac{Z'/Z}{4|J'|} \frac{\Delta^2}{\omega^2 + v^2 q^2 + 3\Delta^2} \quad (2.6.2)$$

с

$$\Delta \approx 6.175|J'|, Z'/Z \approx 0.49, \\ \bar{S}_0 \approx 1.017|J'| \quad (2.6.3)$$

и  $h_{MF} = z_{\perp} J' \bar{S}_0$ . Вычисляя средние, получаем после некоторых алгебраических преобразований

$$\bar{S} = \bar{S}_0 - \frac{\Delta}{4\pi} \frac{\partial \Delta}{\partial h} I \\ I = \sum_q \left[ (1 - \Gamma'_q/2) \ln \frac{1}{1 - \Gamma'_q} + (3 - Z'\Gamma'_q/2Z) \ln \frac{1}{1 - Z'\Gamma'_q/(3Z)} \right] \quad (2.6.4)$$

где  $\Gamma'_q = \cos q$  для  $d = 1 + 1$  и  $\Gamma'_q = (\cos q_x + \cos q_y)/2$  для  $d = 1 + 2$ .

Вычисление интегралов приводит к

$$\bar{S}_0 = (0.677 - 0.311I) h_{MF}^{1/3} \quad (2.6.5)$$

Последний член в скобках в (2.6.5) представляет  $1/z_{\perp}$  поправку к намагниченности основного состояния,

$$I = \begin{cases} 0.038 & d = 1 + 2 \\ 0.193 & d = 1 + 1 \end{cases} \quad (2.6.6)$$

Из (2.6.5) следует, что намагниченность основного состояния уменьшается почти на 10% по сравнению с ее значением в теории среднего поля для

$d=1+1$  и только на 2% в  $d=1+2$  случае. Таким образом, флуктуационные поправки для подрешеточной намагниченности основного состояния гораздо менее важны чем для температуры Нееля, и в трехмерном случае ими можно пренебречь.

## 2.7. Сравнение с экспериментальными данными

Полученные результаты позволяют провести количественное сравнение с экспериментальными данными для магнитных квазиодномерных систем.

Рассмотрим сначала соединение  $\text{KCuF}_3$  с  $S=1/2$ . Согласно [127], оно имеет параметр обмена  $J=406$  К,  $\bar{S}_0/S=0.25$ . Как обсуждается в [33], это значение  $\bar{S}_0$  соответствует  $J'/J=0.047$ , так, что  $J'=19.1$  К. Межцепочечное приближение среднего поля (2.4.10) приводит к  $T_N=47$  К. В то же время, из (2.5.24) получаем  $T_N=37.7$  К, что гораздо ближе к экспериментальному результату [127],  $T_N=39$  К. Таким образом, рассматриваемый подход слегка переоценивает флуктуационные эффекты, но значительно улучшает межцепочечное приближение среднего поля. Вклад двойного логарифмического члена в (2.4.9) составляет приблизительно 5% и улучшает согласие с экспериментальными данными.

Другое соединение со спином  $S=1/2$ , широко обсуждаемое в литературе, -  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  имеет следующие параметры [128-130]:  $J=2600$  К,  $T_N=5$  К. Надежные экспериментальные данные для  $J'$ , отсутствуют, но используя (2.5.24), и экспериментальное значение  $T_N$  находим  $J'=1.85$  К. Тогда из (2.6.5) следует  $\bar{S}_0/S=0.042$ , что находится в согласии с экспериментальными данными ( $\bar{S}_0/S \lesssim 0.05$ ).

Для  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  экспериментальные параметры имеют следующие значения [128-130]:  $S=1/2$ ,  $J=2600$  К и  $T_N=11$  К. Принимая во внимание эти значения, находим  $J'=4.3$  К и  $\bar{S}_0/S=0.062$ , что снова находится в

хорошем согласии с экспериментальными данными [130], которые дают  $\bar{S}_0(\text{Ca}_2\text{CuO}_3) / \bar{S}_0(\text{Sr}_2\text{CuO}_3) = 1.5 \pm 0.1$ . Таким образом, результат (2.5.24) достаточен для количественного описания реальных квазиодномерных магнитных систем.

## **Раздел II.**

### **Магнитные и сверхпроводящие флуктуации в зонных магнетиках**

# Глава 3. Магнетизм и сверхпроводимость в однозонной модели Хаббарда в режиме слабой и промежуточной связи

## 3.1. Модель и приближение случайных фаз

В данном разделе рассматривается однозонная  $t - t'$  модель Хаббарда

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - (\mu - 4t')N \quad (3.1.1)$$

на квадратной решетке, где  $t_{ij} = t$  для ближайших соседей  $i$  и  $j$  и  $t_{ij} = -t'$  для следующих за ближайшими соседними узлами ( $t, t' > 0$ ), для дальнейшего удобства химический потенциал  $\mu$  сдвинут на  $4t'$ . В импульсном пространстве гамильтониан (3.1.1) имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2N^2} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \sum_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_3\sigma'} c_{\mathbf{k}_4\sigma} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4} \quad (3.1.2)$$

где  $\delta$  - символ обеспечивает сохранение импульса, дисперсия определяется выражением

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t'(\cos k_x \cos k_y + 1) - \mu \quad (3.1.3)$$

(постоянная решетки положена равной единице).

Информацию о возможных неустойчивостях модели (3.1.1) относительно различных типов упорядочения (магнитных или сверхпроводящих) можно получить, анализируя соответствующие восприимчивости. При  $U = 0$  спиновые восприимчивости на волновых векторах  $\mathbf{q} = 0$  и  $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  определяются выражениями

$$\chi_0^{ph} = - \sum_p \frac{\partial f(\varepsilon_p)}{\partial \varepsilon_p} \quad (3.1.4)$$

$$\chi_{\mathbf{Q}}^{ph} = \sum_p \frac{f(\varepsilon_p) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}})}{\varepsilon_p - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}} \quad (3.1.5)$$

где  $f(\varepsilon)$  - функция Ферми.

Восприимчивости (3.1.4) и (3.1.5) расходятся при так называемых ван-хововских заполнениях зоны, определяемых величиной химического потенциала  $\mu=0$ . Зависимость ВХ заполнения зоны от  $t'/t$  и вид Ферми-поверхностей при различных  $t'/t$  показаны на рис. II-1. При  $t'=0$  соответствующее заполнение  $n_{\text{ВХ}}=1$ , и Ферми-поверхность обладает свойством нестинга  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ , но нестинг исчезает при  $t' \neq 0$ .

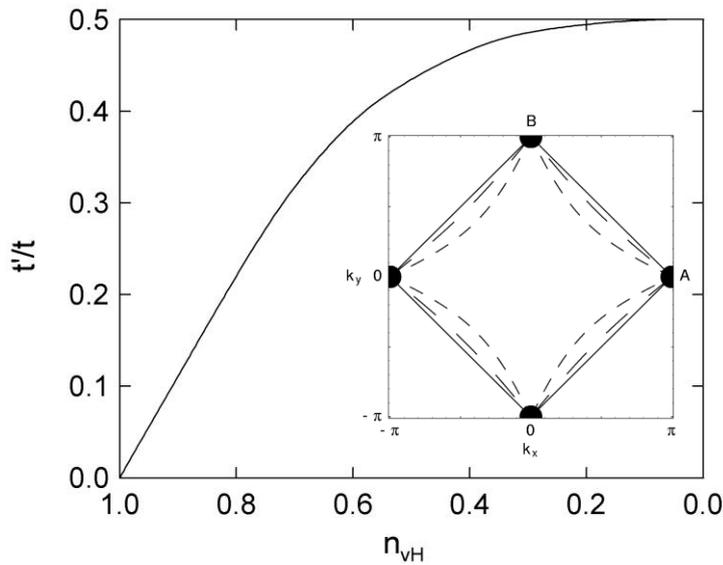


Рис. II-1. Зависимость ван-хововского заполнения от  $t'/t$ . На вставке - Ферми-поверхности при  $t'/t=0, 0.1$  и  $0.3$  и ван-хововском заполнении; А и В – точки особенностей Ван-Хова.

Указанные расходимости восприимчивостей обусловлены вкладом точек  $\mathbf{k}_A = (\pi, 0)$  и  $\mathbf{k}_B = (0, \pi)$ , см. рис. II-1. Спектр (3.1.3), разложенный вблизи ван-хововских точек, имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}}^A &= -2t(\sin^2 \varphi \bar{k}_x^2 - \cos^2 \varphi k_y^2) - \mu = -2tk_+ k_- - \mu \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^B &= 2t(\cos^2 \varphi k_x^2 - \sin^2 \varphi \bar{k}_y^2) - \mu = 2\tilde{t}k_+ \tilde{k}_- - \mu \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

где  $\bar{k}_x = \pi - k_x$ ,  $\bar{k}_y = \pi - k_y$ ,

$$\begin{aligned} k_{\pm} &= \sin \varphi \bar{k}_x \pm \cos \varphi k_y, \\ \tilde{k}_{\pm} &= \cos \varphi k_x \pm \sin \varphi \bar{k}_y, \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

$\varphi$  является половиной угла между асимптотами Ферми-поверхности вблизи точек Ван-Хова,  $2\varphi = \cos^{-1}(2t'/t)$ . Таким образом, в точках Ван-Хова скорость Ферми обращается в ноль, что приводит к выраженным аномалиям физических свойств.

При малых  $|\mu|$ , т.е. вблизи ван-хововских заполнений, восприимчивости (3.1.4) и (3.1.5) принимают вид

$$\chi_0^{ph} = \frac{z_0}{2\pi^2 t} \ln \frac{\Lambda}{\max\{T, |\mu|\}} \quad (3.1.8)$$

$$\chi_Q^{ph} = \frac{1}{4\pi^2 t} \min \left( \ln^2 \frac{\Lambda}{\max\{T, |\mu|\}}, 2z_Q \ln \frac{\Lambda}{\max\{T, |\mu|\}} \right) \quad (3.1.9)$$

где

$$\begin{aligned} z_0 &= 1/\sin(2\varphi) = 1/\sqrt{1-R^2}, \\ z_Q &= \ln[(1+\sqrt{1-R^2})/R], \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

$\Lambda$  - параметр ультрафиолетового обрезания энергий,  $R = 2t'/t$ . Выражения для восприимчивостей (3.1.9) логарифмически расходятся при  $\mu \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$ . Полная импульсная зависимость  $\chi_q$  показана на Рис. II-2а. Функции отклика в частично-частичном (сверхпроводящем) канале имеют вид

$$\Pi_q^{pp} = \sum_p \frac{1-2f(\varepsilon_p)}{2\varepsilon_p} = \frac{c_0}{4\pi^2 t} \ln \frac{\Lambda}{T} \ln \frac{\Lambda}{\max\{T, |\mu|\}}, \quad (3.1.11)$$

$$\Pi_Q^{pp} = \sum_p \frac{1-f(\varepsilon_p)-f(\varepsilon_{p+Q})}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+Q}} = \frac{c_Q}{2\pi^2 t} \ln \frac{\Lambda}{\max\{T, |\mu|\}}, \quad (3.1.12)$$

где  $c_0 = z_0$ ,

$$c_Q = \tan^{-1}(R/\sqrt{1-R^2})/R, \quad (3.1.13)$$

также являются логарифмически расходящимися при  $\mu \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$ , полная импульсная зависимость показана на Рис. II-2б. Поскольку оба типа восприимчивостей расходятся, имеются по крайней мере два конкурирующих параметра порядка.

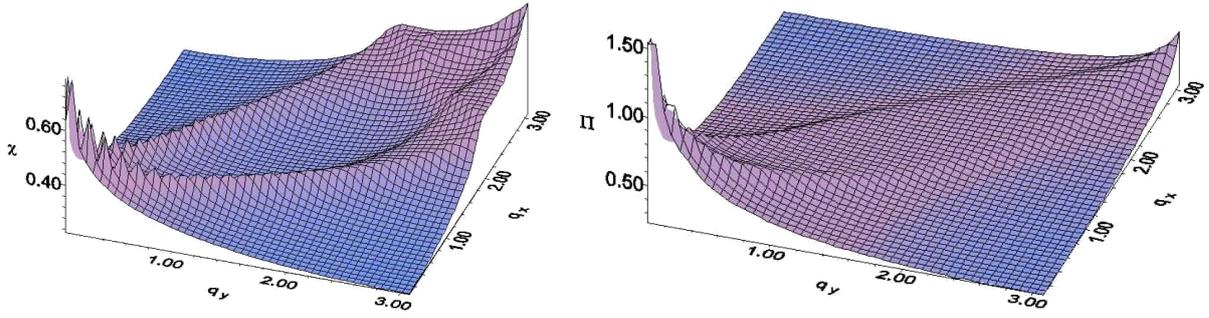


Рис. П-2. Импульсная зависимость магнитной (а) и сверхпроводящей (б) восприимчивостей в невзаимодействующей модели Хаббарда при  $t'/t = 0.3$  и ван-хововском заполнении.

Простейшее приближение, учитывающее влияние взаимодействия - приближение случайных фаз. В этом приближении выражения для магнитных (частично-дырочных) и сверхпроводящих (частично-частичных) восприимчивостей имеют вид

$$\bar{\chi}_q = \frac{\chi_q}{1 - U\chi_q} \quad (3.1.14)$$

$$\bar{\Pi}_q = \frac{\Pi_q}{1 + U\Pi_q} \quad (3.1.15)$$

Величина  $\Pi$  уменьшается кулоновским взаимодействием, в то время как  $\chi$  увеличивается и может расходиться при некотором  $U$ . В частности восприимчивость с  $\mathbf{q}=0$  расходится при выполнении критерия ферромагнетизма Стонера  $U\chi_0 = 1$ , или,

$$\frac{Uz_0}{2\pi^2 t} \ln \frac{\Lambda}{\rho} = 1 \quad (3.1.16)$$

где  $\rho^2 = \max(T/t, |\mu|/t)$ . Решение этого уравнения, имеющее вид

$$\rho_F = \Lambda \exp(-2\pi^2/z_0 U), \quad (3.1.17)$$

определяет температуру или химический потенциал, необходимые для установления дальнего ферромагнитного порядка. Хотя появление ферромагнетизма при конечном  $T$  является артефактом приближения среднего поля, температуру, удовлетворяющую (3.1.16), следует понимать

как температуру перехода в так называемый «перенормированный классический режим», в котором корреляционная длина экспоненциально велика. Как можно видеть из (3.1.17), ферромагнетизм в основном состоянии и ван-хововском заполнении существует при любом  $U$ ; кроме того, при  $U \sim 2\pi^2[t^2 - (2t')^2]^{1/2}$  имеем  $\rho_F \sim \Lambda$ , т. е. можно ожидать, что ферромагнетизм становится насыщенным.

Аналогично рассматривая антиферромагнитную неустойчивость, получаем условие возникновения антиферромагнетизма

$$\frac{U}{2\pi^2 t} \min(\ln^2 \frac{\Lambda}{\rho}, z_Q \ln \frac{\Lambda}{\rho}) = 1 \quad (3.1.18)$$

или

$$\rho_{AF} = \Lambda \begin{cases} \exp(-\sqrt{2\pi^2 t/U}), & U/(2\pi^2 t) > 1/z_Q^2 \\ \exp(-2\pi^2 t/z_Q U), & U/(2\pi^2 t) < 1/z_Q^2 \end{cases} \quad (3.1.19)$$

Как и ферромагнетизм, антиферромагнетизм в основном состоянии возможен при любом значении  $U$ .

Доминирующая неустойчивость определяется соотношением  $\rho_{AF}$  и  $\rho_F$ , т.е. фактически соотношением  $z_0$  и  $z_Q$ . Сравнивая указанные функции, находим границу ферро- и антиферромагнитной фазы в приближении случайных фаз,

$$(t'/t)_c \approx 0.27 \quad (3.1.20)$$

независимо от значения  $U$ . Поскольку границы фаз, определенные из ПСФ восприимчивостей, определяют также границы фаз в приближении среднего поля, результат (3.1.20) является также результатом приближения среднего поля для модели (3.1.1). Таким образом, в приближении среднего поля при ВХ заполнениях фазовая диаграмма имеет простой вид - имеется лишь ферро- и антиферромагнитная фазы, разделенные критическим значением (3.1.20), сверхпроводимость не реализуется ни при каком значении взаимодействия.

## 3.2. Ренормгрупповой подход

Подход приближения случайных фаз недостаточен даже в пределе слабой связи, за исключением случая когда расходимости имеются только в одном канале электрон-электронного рассеяния. Поскольку в ВХ случае все восприимчивости (3.1.8)-(3.1.12) расходятся, необходимо учитывать вставки петлевых диаграмм одного типа в другой. Возможный подход к проблеме описания магнитных и сверхпроводящих корреляций в режиме слабой и промежуточной связи – метод ренормгруппы.

Стандартная стратегия РГ для фермионных систем [133] состоит в интегрировании шаг за шагом электронных состояний с энергиями  $\Lambda - d\Lambda < \varepsilon_{\mathbf{k}} < \Lambda$ . Эта процедура однако сталкивается с трудностями при применении к Ферми-поверхностям с сингулярными точками  $\mathbf{k}_F^s$ , где скорость Ферми  $\nabla \varepsilon_{\mathbf{k}} |_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F^s} = 0$ , как в точках  $\mathbf{k}_A$  и  $\mathbf{k}_B$  рассматриваемой модели. В этом случае состояния с одной и той же энергией  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  становятся неэквивалентными: возбуждения с импульсами ближе к сингулярным точкам производят более расходящиеся вклады в перенормировку вершин электрон-электронного взаимодействия, чем возбуждения с импульсами, далекими от сингулярных точек. В связи с этим, необходимо дополнительное разделение импульсов помимо стандартного разделения на «медленные» ( $\varepsilon_{\mathbf{k}} < \Lambda$ ) и «быстрые» ( $\varepsilon_{\mathbf{k}} > \Lambda$ ). Подход с двумя патчами, излагаемый ниже в пункте а), рассматривает только наиболее сингулярные вклады от непосредственных окрестностей сингулярных точек, а также предполагает, что импульсная зависимость вершин взаимодействия в направлении вдоль и поперек Ферми поверхности одна и та же. Более сложные функциональные (много-патчевые) подходы [72-75] (см. пункт (б) данного параграфа) принимают во внимание импульсную зависимость взаимодействия более точно путем введением набора областей («патчей»), покрывающих всю зону Бриллюэна.

### а) Двухпатчевый ренормгрупповой подход

Подход с двумя патчами [134] ограничен ВХ заполнениям зоны. При этих заполнениях плотность состояний на уровне Ферми и вершины электрон-электронного взаимодействия содержат логарифмические расходимости, являющиеся результатом интегрирований импульса вблизи точек  $\mathbf{k}_{A,B}$ . Поэтому эти вклады наиболее важны для вычисления перенормировки вершин взаимодействия. Ниже приводится обобщение подхода [134] на случай ненулевого перескока между вторыми по дальности соседями [A9, A15]. Для применения указанного подхода импульсное пространство подразделяется на три типа областей (см. рис. П-3).

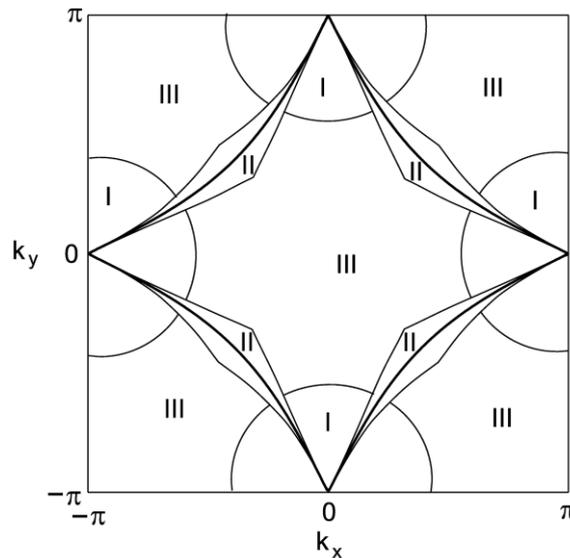


Рис. П-3. Деление импульсного пространства на области в подходе с двумя патчами

Области I с  $\mathbf{k} \in O(A) \vee O(B)$ , где

$$O(A) = \{\mathbf{k} : |\mathbf{k} - \mathbf{k}_A| < \Lambda \wedge |\varepsilon_{\mathbf{k}}/t| > e^{-\Lambda/|\mathbf{k} - \mathbf{k}_A|}\} \quad (3.1.21)$$

и аналогично для  $O(B)$  ( $\Lambda$  – параметр обрезания импульса) производят наиболее сингулярный вклад в перенормировку вершин. Области II содержат электронные состояния, которые расположены близко к Ферми-поверхности, но далеки от ВХ точек. Вклады областей II в перенормировку вершин являются субведущими по сравнению с вкладами областей I при

условии, что  $t'/t$  не мало, то есть если эффекты нестинга не важны. Наконец, области III содержат состояния, которые далеки от обоих, Ферми-поверхности и точек ВХ и не производят расходящихся вкладов. Поэтому, в самом простом приближении можно пренебречь вкладами областей II и III. Более точный анализ в рамках функционального (многопатчевого) РГ подхода рассматривается в следующем параграфе.

Чтобы рассмотреть возбуждения с импульсами в областях I, удобно ввести новые электронные операторы  $a_{\mathbf{k}}$  и  $b_{\mathbf{k}}$

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_A, \sigma} & \mathbf{k} \in O(A) \\ b_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_B, \sigma} & \mathbf{k} \in O(B) \end{cases} \quad (3.1.22)$$

В терминах этих операторов,

$$H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^A a_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^B b_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{p}\sigma} + \frac{2\pi^2 t}{N^2} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma\sigma'} [g_1(\lambda) a_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger b_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}_3\sigma} b_{\mathbf{p}_4\sigma'} + g_2(\lambda) a_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger b_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{p}_3\sigma} a_{\mathbf{p}_4\sigma'}] \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4} \quad (3.1.23)$$

$$+ \frac{\pi^2 t}{N^2} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma\sigma'} [g_3(\lambda) a_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{p}_3\sigma} b_{\mathbf{p}_4\sigma'} + g_4(\lambda) a_{\mathbf{p}_1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}_2\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}_3\sigma} a_{\mathbf{p}_4\sigma'} + a \leftrightarrow b] \delta_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4}$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{p}}^A, \varepsilon_{\mathbf{p}}^B$  определены в (3.1.6),

$$\lambda = \ln(\Lambda / \max(p_{i+}, p_{i-}, p_{i+}, p_{i-}, T/t)); \quad (3.1.24)$$

суммирование в (3.1.23) ограничено импульсами  $\mathbf{p}_i$  с  $|\mathbf{p}_i| < \Lambda$ , и  $|\varepsilon_{\mathbf{k}_A, \mathbf{B}+\mathbf{p}_i}/t| > e^{-\Lambda/|\mathbf{p}_i|}$ .

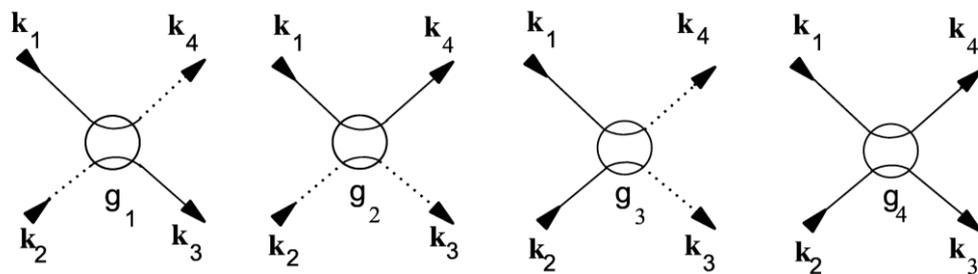


Рис. II-4. Четыре типа вершин, рассматриваемых в двухпатчевом ренормгрупповом подходе:  $g_1$  и  $g_2$  соответствуют обменно и прямому рассеянию между ВХ особенностями,  $g_3$  – рассеяние с процессом переброса,  $g_4$  – рассеяние в пределах одной особенности. Сплошные линии внутри вершин показывают направление сохранения спина.

Вершины  $g_1 - g_4$  представляют различные типы процессов рассеяния электронов с импульсами близкими к точкам ВХ (рис. П-4). Затравочное значение для все четырех вершин  $g_i^0 = U/(4\pi^2 t)$ . Импульсная зависимость вершин внутри области I учитывается через переменную  $\lambda$ . При этом предполагается что тип импульсной зависимости вершин в обоих направлениях одинаков.

Чтобы определить зависимость вершин  $g_i$  от  $\lambda$ , на каждом шаге РГ интегрируются фермионы  $a_p$  и  $b_p$  с импульсами  $\Lambda e^{-\lambda} < p_{\pm} < \Lambda e^{-\lambda-d\lambda}$ . Как обсуждалось выше, при этом пренебрегается перенормировкой вершин  $g_i$ , являющейся результатом вкладов областей II и III из рис. П-3, так как они приводят к субведущим поправкам в режиме слабой связи.

Рассмотрим сначала однопетлевые поправки, содержащие частично-дырочные ( $ph$ ) и частично-частичные ( $pp$ ) вклады на маленьких импульсах и импульсах близких к  $Q$ . Указанные вклады в рассматриваемой системе обрезания имеют вид:

$$\Pi_q^{pp} = \sum_{\Lambda e^{-\lambda} < p_{\pm} < \Lambda} \frac{1 - f(\varepsilon_p^A) - f(\varepsilon_{p+q}^A)}{\varepsilon_p^A + \varepsilon_{p+q}^A} = \frac{c_0}{4\pi^2 t} \lambda^2, \quad (3.1.25)$$

$$\Pi_{q+Q}^{ph} = \sum_{\Lambda e^{-\lambda} < p_{\pm} < \Lambda} \frac{f(\varepsilon_p^A) - f(\varepsilon_{p+q}^B)}{\varepsilon_p^A - \varepsilon_{p+q}^B} = \frac{1}{4\pi^2 t} \min(\lambda^2, 2z_Q), \quad (3.1.26)$$

$$\Pi_{q+Q}^{pp} = \sum_{\Lambda e^{-\lambda} < p_{\pm} < \Lambda} \frac{1 - f(\varepsilon_p^A) - f(\varepsilon_{p+q}^B)}{\varepsilon_p^A + \varepsilon_{p+q}^B} = \frac{c_Q}{2\pi^2 t} \lambda, \quad (3.1.27)$$

где  $c_0$ ,  $c_Q$  и  $z_Q$  определены в (3.1.10), (3.1.13). Вклад частично-дырочного канала ( $\Pi_q^{ph}$ ) сконцентрирован около Ферми поверхности, поэтому для него используем более слабое условие обрезания  $\Lambda e^{-\lambda} < p_+ < \Lambda$  или  $\Lambda e^{-\lambda} < p_- < \Lambda$ , что дает

$$\Pi_q^{ph} = \sum_{\Lambda e^{-\lambda} < p_+ < \Lambda \cup \Lambda e^{-\lambda} < p_- < \Lambda} \frac{f(\varepsilon_p^A) - f(\varepsilon_{p+q}^A)}{\varepsilon_p^A - \varepsilon_{p+q}^A} = \frac{z_0 \lambda}{2\pi^2 t} \quad (3.1.28)$$

с  $z_0 = c_0$ . Вклад слоев  $\Lambda e^{-\lambda} < p_{\pm}, p_{\pm} < \Lambda e^{-\lambda-d\lambda}$  определяется производными  $d\Pi_i/d\lambda$ .

РГ уравнения для вершин  $g_i(\lambda)$  имеют вид

$$\begin{aligned} dg_1/d\lambda &= 2d_1(\lambda)g_1(g_2 - g_1) + 2d_2g_1g_4 - 2d_3g_1g_2, \\ dg_2/d\lambda &= d_1(\lambda)(g_2^2 + g_3^2) + 2d_2(g_1 - g_2)g_4 - d_3(g_1^2 + g_2^2), \\ dg_3/d\lambda &= -2d_0(\lambda)g_3g_4 + 2d_1(\lambda)g_3(2g_2 - g_1), \\ dg_4/d\lambda &= -d_0(\lambda)(g_3^2 + g_4^2) + d_2(g_1^2 + 2g_1g_2 - 2g_2^2 + g_4^2), \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

где

$$\begin{aligned} d_0(\lambda) &= 2\lambda/\sqrt{1-R^2}, \quad d_2 = 2/\sqrt{1-R^2}; \\ d_3 &= 2 \tan^{-1}(R/\sqrt{1-R^2})/R; \\ d_1(\lambda) &= 2 \min\{\lambda, \ln[(1+\sqrt{1-R^2})/R]\}. \end{aligned} \quad (3.1.30)$$

Уравнения (3.1.29) должны быть решены с начальными условиями  $g_i(0) = g_0$ .

Чтобы исследовать возможные неустойчивости системы, рассмотрим поведение восприимчивостей (функций отклика)

$$\chi_m = \int_0^{1/T} d\tau \langle T[\hat{O}_m^\dagger(\tau)\hat{O}_m(0)] \rangle \quad (3.1.31)$$

в представлении Гейзенберга,  $T$  является упорядочением в мнимом времени,  $\hat{O}_m(\tau)$  - следующие операторы

$$\begin{aligned} O_{AF} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sigma c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}, \\ O_{dSC} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}} \sigma c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k},-\sigma}^\dagger, \\ O_F &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (3.1.32)$$

соответствующие ферро-, антиферромагнитным неустойчивостям и сверхпроводимости d- типа. Параметр, соответствующий сверхпроводимости p-типа

$$O_{\text{pSC}}^{x,y} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} h_{\mathbf{k}}^{x,y} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}$$

с  $h_{\mathbf{k}}^{x,y} = \sin k_{x,y}$  обращается в ноль вблизи ВХ точек и поэтому возможность триплетного спаривания не может быть рассмотрена в рамках подхода с двумя патчами.

Выделяя логарифмические расходимости по  $\lambda$ , получаем РГ уравнения для безразмерных восприимчивостей  $\bar{\chi}_m = 2\pi^2 t \chi_m$  в приближениях, аналогичных обсуждавшимся выше:

$$d\bar{\chi}_m(\lambda)/d\lambda = d_{a_m}(\lambda) R_m^2(\lambda), \quad (3.1.33)$$

$$d \ln R_m(\lambda)/d\lambda = d_{a_m}(\lambda) \Gamma_m(\lambda),$$

где коэффициенты  $\Gamma_m$  ( $m = \text{AF}, \text{dSC}, \text{или F}$ ) определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{AF}} &= g_2 + g_3; & \Gamma_{\text{F}} &= g_1 + g_4; \\ \Gamma_{\text{dSC}} &= g_3 - g_4. \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

В уравнениях (3.1.33)  $a_{\text{dSC}} = 0$ ,  $a_{\text{AF}} = 1$ , и  $a_{\text{F}} = 2$ , начальное условие для восприимчивостей имеет вид  $R_m(0) = 1$ ,  $\chi_m(0) = 0$ .

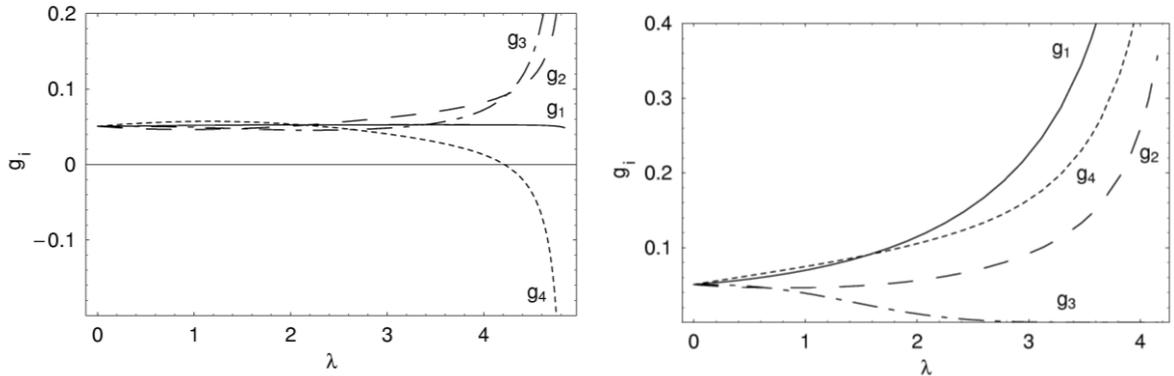


Рис. II-5. Константы связи при  $t'/t = 0.1$  и  $t'/t = 0.45$  в двух-патчевом подходе.

На Рис. II-5 показан результат численного решения уравнений (3.1.29) при  $U = 2t$  для двух различных значений  $t'/t = 0.1$  и  $t'/t = 0.45$ . Поведение констант связи качественно отличается в этих двух случаях. В то время как в первом случае  $g_{2,3}$  стремится к  $+\infty$ ,  $g_4$  к  $-\infty$ ,  $g_1$  почти не

изменяется в процессе РГ преобразования (соответствующая комбинация обозначается  $(m++-)$ , знаки соответствуют поведению констант связи  $g_1 - g_4$ ,  $m$  обозначает «маргинальный», т.е. неизменный). Во втором случае  $g_{1,2,4}$  растут к  $+\infty$ , в то время как  $g_3$  стремится к нулю, то есть имеем поведение констант связи  $(++0+)$ . Сравнение соответствующих восприимчивостей показывает, что для  $t'/t = 0.1$  антиферромагнитная восприимчивость является наиболее расходящейся, в то время как в случае  $t'/t = 0.45$  ферромагнитная восприимчивость доминирует, так что различное поведение констант связи соответствует различным неустойчивостям системы. Этот результат согласуется с результатом теории среднего поля о наличии критического отношения  $t'/t$ , разделяющего ферро- и антиферромагнитную фазы. Величина этого критического значения однако несколько отличается от результата приближения среднего поля (3.1.20) и обсуждается вместе с полной фазовой диаграммой при ВХ заполнениях ниже, в параграфе 3.3.

### ***б) Функциональный ренормгрупповой анализ***

Несмотря на то, что двухпатчевый подход позволяют качественно правильно описать фазовую диаграмму модели (3.1.1), он неприменим при заполнениях значительно отклоняющихся от ВХ. Кроме того, представляет интерес учет вкладов частей Ферми-поверхности, далеких от ВХ точек, что необходимо для построения количественно-правильных фазовых диаграмм. Для этой цели может быть применен метод функциональной ренормгруппы [72-75]. Этот метод рассматривает эволюцию вершин электрон - электронного взаимодействия, рассматриваемых как функции 4-х импульсов, с изменением выбранного параметра обрезания  $\Lambda$ .

В однопетлевом приближении уравнение РГ для эволюции зависящего от импульсов и частот электрон-электронного взаимодействия имеет вид (см. рис. II-6)

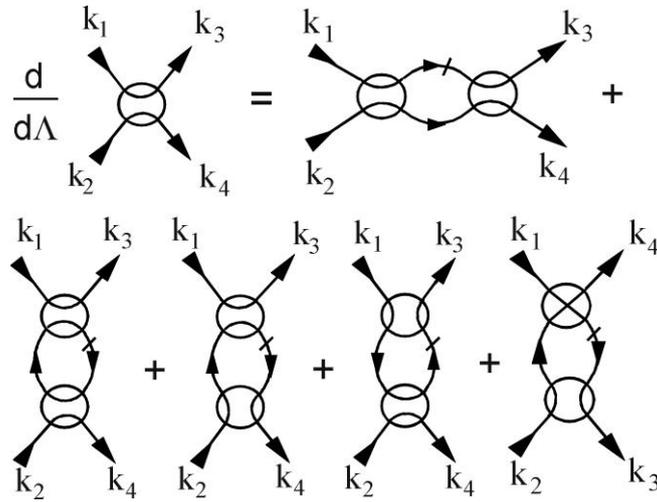


Рис. П-6. Схематическое представление уравнений функциональной РГ. Линии, проходящие через вершины показывают направление сохранения спина. Диаграммы расположены в том же самом порядке, что и соответствующие вклады в уравнении (3.1.35). Черта на линиях пропагаторов означает производную относительно  $\Lambda$  (для краткости указана только производная одного из пропагаторов, рассматриваются также те же самые диаграммы с производными другого пропагатора).

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\Lambda} V_{\Lambda}(k_1, k_2, k_3) = & - \sum_p V_{\Lambda}(k_1, k_2, p) L(p, -p + k_1 + k_2) V_{\Lambda}(p, -p + k_1 + k_2, k_3) \\
& + \sum_p [-2V_{\Lambda}(k_1, p, k_3) V_{\Lambda}(p + k_1 - k_3, k_2, p) + V_{\Lambda}(k_1, p, k_3) V_{\Lambda}(k_2, p + k_1 - k_3, p) \\
& \quad + V_{\Lambda}(k_1, p, p + k_1 - k_3) V_{\Lambda}(p + k_1 - k_3, k_2, p)] L(p, p + k_1 - k_3) \\
& + \sum_p V_{\Lambda}(k_1, p + k_2 - k_3, p) L(p, p + k_2 - k_3) V_{\Lambda}(p, k_2, k_3) \quad (3.1.35)
\end{aligned}$$

где  $p_i = (\mathbf{p}_i, i\omega_i)$ ,

$$L_{\Lambda}(p_1, p_2) = G_{\Lambda}(p_1) S_{\Lambda}(p_2) + S_{\Lambda}(p_1) G_{\Lambda}(p_2)$$

$G_{\Lambda}(p_1)$  - функция Грина на масштабе  $\Lambda$ ,  $S_{\Lambda}(p) = dG_{\Lambda}(p)/d\Lambda$ . На практике используются две схемы обрезания: импульсное обрезание с

$$\left\{ \begin{array}{l} G_{\Lambda} \\ S_{\Lambda} \end{array} \right\} (\mathbf{k}, i\omega_n) = \left\{ \begin{array}{l} \theta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \\ \delta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \end{array} \right\} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (3.1.36)$$

( $0 < \Lambda < \Lambda_0 = \max |\varepsilon_{\mathbf{k}}|$ ) и температурное обрезание с  $\Lambda = T$ ,

$$G_{\Lambda} = \frac{T^{1/2}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}; S_{\Lambda} = -\frac{1}{2T^{1/2}} \frac{i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{(i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2}, \quad (3.1.37)$$

где множители  $T^{1/2}$  возникают из-за переопределения ферми-полей с целью исключения температурной зависимости из члена взаимодействия [75]. В то время как в первой схеме введено явная обрезание энергий промежуточных состояний, вторая схема использует температуру в качестве естественного параметра обрезания, позволяя тем самым учесть возбуждения как с импульсами близкими к Ферми-поверхности, так и далекими от нее. Достоинством первой схемы обрезания является простота численных расчетов, поскольку дельта-функция в (3.1.36) снимает одно интегрирование по импульсам, в то время как достоинством второго вида обрезания является отсутствие искусственного ограничения степеней свободы в импульсном пространстве.

Уравнение (3.1.35) в дальнейшем будем коротко записывать в виде

$$\frac{dV_{\Lambda}}{d\Lambda} = V_{\Lambda} \circ (G_{\Lambda} \circ S_{\Lambda} + S_{\Lambda} \circ G_{\Lambda}) \circ V_{\Lambda}. \quad (3.1.38)$$

где  $\circ$  обозначает суммирование по импульсам, частотам и спинам. В пренебрежении частотной зависимостью взаимодействия после суммирования по мацубаровским частотам, уравнение (3.1.35) может быть приведено к виду

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\Lambda} V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = & - \sum_{\mathbf{p}} V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{p}) L_{pp}(\mathbf{p}, -\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) V_{\Lambda}(\mathbf{p}, -\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \\ & + \sum_{\mathbf{p}} [-2V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{p}, \mathbf{k}_3) V_{\Lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{p}) + V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{p}, \mathbf{k}_3) V_{\Lambda}(\mathbf{k}_2, \mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3, \mathbf{p}) \\ & \quad + V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) V_{\Lambda}(\mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{p})] L_{ph}(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \\ & + \sum_{\mathbf{p}} V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{p} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3, \mathbf{p}) L_{ph}(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) V_{\Lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \end{aligned} \quad (3.1.39)$$

где

$$\begin{aligned} L_{pp}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = & [\theta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \delta(|\varepsilon_{\mathbf{k}'}| - \Lambda) + \delta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \theta(|\varepsilon_{\mathbf{k}'}| - \Lambda)] \\ & \times (1 - f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'}) / (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \\ L_{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = & [\theta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \delta(|\varepsilon_{\mathbf{k}'}| - \Lambda) + \delta(|\varepsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \theta(|\varepsilon_{\mathbf{k}'}| - \Lambda)] \\ & \times (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}'}) / (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \end{aligned} \quad (3.1.40)$$

для импульсного обрезания и

$$\begin{aligned} L_{ph}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{f'_T(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f'_T(\varepsilon_{\mathbf{k}'})}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}} , \\ L_{pp}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{f'_T(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f'_T(\varepsilon_{\mathbf{k}'})}{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'}} , \end{aligned} \quad (3.1.41)$$

для температурного обрезания,  $f'_T(\varepsilon) = df(\varepsilon)/dT$ .

Уравнение (3.1.39) должно быть решено с начальным условием  $V_{\Lambda_0}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = U$ , где  $\Lambda_0 = \max\{|\varepsilon_{\mathbf{k}}|\}$  для импульсного обрезания и  $\Lambda_0 = T_0 \gg \max\{|\varepsilon_{\mathbf{k}}|\}$  для температурного обрезания. Эволюция вершин с уменьшением температуры определяет температурную зависимость обобщенных восприимчивостей согласно уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \chi_{mT}(\mathbf{q}_m) &= \sum_{\mathbf{k}} R_{mT}(\mathbf{k}') R_{mT}(\mp \mathbf{k}' + \mathbf{q}_m) L_{pp,ph}(\mathbf{k}', \mp \mathbf{k}' + \mathbf{q}_m), \\ \frac{d}{dT} R_{mT}(\mathbf{k}) &= \mp \sum_{\mathbf{k}'} R_{mT}(\mathbf{k}') \Gamma_{mT}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') L_{pp,ph}(\mathbf{k}', \mp \mathbf{k}' + \mathbf{q}_m) \end{aligned} \quad (3.1.42)$$

где

$$\Gamma_{mT}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \begin{cases} V_T(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}' + \mathbf{q}_m) & \text{для } m = \text{АФМ или ФМ} \\ V_T(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}') & \text{для } m = \text{dSC или pSC} \end{cases}. \quad (3.1.43)$$

$\mathbf{q}_m = \mathbf{Q}$  для АФМ восприимчивости, иначе  $\mathbf{q}_m = 0$ . Верхние знаки и  $pp$  индексы в уравнении (3.1.42) относятся к сверхпроводящим неустойчивостям синглетного (dSC) и триплетного (pSC) вида, нижние знаки и  $ph$  индексы - к другим неустойчивостям. Начальные условия для уравнения (3.1.42) имеют вид

$$R_{m,T_0}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \cos k_x - \cos k_y & \text{для dSC} \\ \sin k_{x,y} & \text{для pSC,} \\ 1 & \text{иначе} \end{cases} \quad (3.1.44)$$

и  $\chi_{m,T_0} = 0$ .

Уравнения (3.1.39), (3.1.42) являются обобщением уравнений двух-патчевого подхода (3.1.29), (3.1.33), учитывающем полную импульсную зависимость электрон-электронного взаимодействия. Для их численного

решения используем дискретизацию импульсного пространства на  $N_p = 48$  частей (патчей) [134], см. рис. II-7.

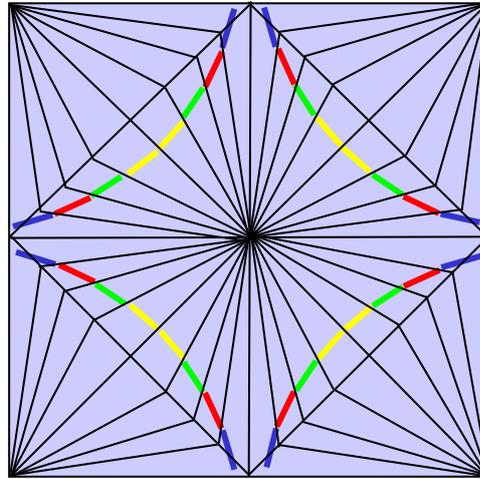


Рис. II-7. Деление импульсного пространства на части (патчи)

Это позволяет свести вышеупомянутые интегро-дифференциальные уравнения (3.1.39) и (3.1.42) к набору дифференциальных уравнений, которые решаются численно. РГ преобразование останавливается при температуре  $T_{RG}^{\min}$ , при которой максимальное взаимодействие  $V_{\Lambda}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$  достигает значения порядка ширины зоны (на практике это значение было выбрано равным  $18t$ ). Чтобы извлечь более детальную информацию о различных неустойчивостях, необходимо экстраполировать обратные восприимчивости  $\chi_{mT}^{-1}$  на температуры, меньшие  $T_{RG}^{\min}$ . Для магнитно-упорядоченного или сверхпроводящего основного состояния экстраполируемые обратные восприимчивости  $\chi_{mT}^{-1}$  исчезают при некоторой температуре  $T_m^* < T_{RG}^{\min}$ . Как и в приближении среднего поля, обращение в ноль обратных восприимчивостей при конечной температуре – артефакт однопетлевой РГ, и должен быть интерпретирован, как определяющий температуру перехода в перенормированный классический режим с сильными магнитными или сверхпроводящими корреляциями и экспоненциально-большой корреляционной длиной  $\xi \propto \exp(A/T)$  для ФМ

и АФМ неустойчивостей и  $\xi \propto \exp(A/\sqrt{T - T_{KT}})$  для сверхпроводящей неустойчивости ( $T_{KT}$  - температура перехода Костерлица-Таулеса, возникающая, поскольку сверхпроводящий переход в двумерных системах относится к тому же классу симметрии, что и классическая двумерная ХУ модель). При этом значение физических восприимчивостей при  $T < T_{F,AF}^*$  экспоненциально мало,  $\chi_{F,AF}^{-1} \propto \xi^{-2}$ , по аналогии со случаем локализованных систем [12,13,85]. То же самое относится к восприимчивостям, соответствующим сверхпроводящим корреляциям, в температурном диапазоне  $T_{KT} < T < T_{dsc,pSC}^*$ , где имеет место критическое поведение  $\chi_{dsc,pSC}^{-1} \propto \xi^{-2+\eta}$  ( $\eta \approx 1/4$  - критический индекс восприимчивости в двумерной ХУ модели [28]). При  $T < T_{KT}$  корреляционные функции сверхпроводящего параметра порядка спадают степенным образом на больших расстояниях, так что соответствующая обратная статическая однородная восприимчивость действительно равна нулю.

### 3.3. Фазовые диаграммы в РГ подходе

В данном параграфе рассматривается применение метода функциональной ренормгруппы к вычислению фазовых диаграмм двумерной модели Хаббарда [A14, A15, A28].

#### а) Ван-хововское заполнение зоны

Рассмотрим сначала ван-хововское заполнения зоны, определенные условием  $\mu = 0$ . Соответствующая фазовая диаграмма в  $t' - U$  координатах показана на рис. II-8. Линии соответствуют границам фаз, полученным в рамках подхода с двумя патчами, в то время как символы показывают различные типы неустойчивостей, полученных в пределах функционального (много-патчевого) РГ метода.

В согласии с результатами двухпатчевого подхода, антиферромагнетизм существует при малых  $t'$ , ферромагнетизм для  $t'$  близких к  $1/2$  и сверхпроводимость  $d$ -типа в промежуточной области  $t'/t$ ; при этом диапазон  $t'$  с тенденцией к сверхпроводимости уменьшается с увеличением  $U$ . Для не слишком малых  $t'/t$ , восприимчивости на векторе  $\mathbf{Q}=(\pi-\delta,\pi)$  больше антиферромагнитной восприимчивости с  $\mathbf{Q}=(\pi,\pi)$ , что означает тенденцию к формирования несоизмеримой волны спиновой плотности.

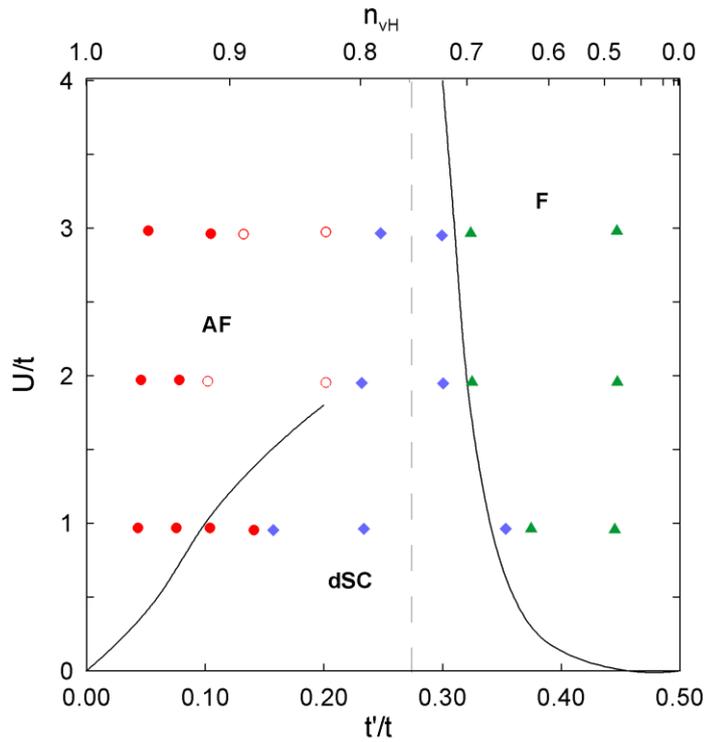


Рис. II-8. Фазовая диаграмма при ВХ заполнениях в двух- и много-патчевом РГ подходах. Сплошные линии соответствуют границам фаз, полученным в рамках РГ анализа с двумя патчами. Символы показывают результаты много-патчевого РГ подхода: сплошные круги соответствуют АФМ порядку, открытые круги - несоизмеримому  $(\pi, \pi - \delta)$  порядку, ромбы - сверхпроводимости  $d$ -типа, треугольники - ФМ фазе. Пунктирная линия - граница ферромагнитной фазы, определенная в приближении среднего поля (параграф 4.1).

В области  $t'/t \sim 0.3$  поведение констант связи в подходе с двумя патчами становится "фрустрированным", а именно все  $g_i \rightarrow 0$  с уменьшением температуры. Эта фрустрация есть результат конкуренции между антиферромагнетизмом и сверхпроводимостью с одной стороны, и ферромагнитной неустойчивостью с другой стороны. Поэтому при  $t'/t > 0.2$  ни антиферромагнетизм, ни сверхпроводимость не наблюдается в подходе с двумя патчами. Это поведение менее выражено в много-патчевом подходе; фрустрированное поведение вершин наблюдается только очень близко к границе ферромагнитной и сверхпроводящей или антиферромагнитной фаз.

Граница ферромагнитной фазы оказывается почти идентичной в двух - и много-патчевом подходах, но подход с двумя патчами не воспроизводит правильно границу между антиферромагнитной и сверхпроводящей фазами. Это различие может быть связано с тем, что поведение констант связи при приближении к АФМ и dSC неустойчивостям ( $m + \text{---}$ ) является общим для обоих фаз, в то время как ферромагнитная фаза характеризуется отличным поведением констант связи ( $++0+$ ). Кроме того, эффект нестинга, не учитываемый в РГ подходе с двумя патчами, становится важным при малых  $t'/t$ .

Результат приближения среднего поля (разд. 3.1) для границы ферромагнитной фазы также показан на рис. II-8. Главное отличие результатов РГ подходов от приближения среднего поля - появление  $U$ -зависимости критического значения  $(t'/t)_c$  появления ферромагнетизма, так что  $(t'/t)_c \rightarrow 1/2$  при  $U \rightarrow 0$ . Этот результат находится в качественном согласии с результатами приближения  $T$ -матрицы [64-66].

### ***б) Антиферромагнетизм при половинном заполнении***

На рис. II-9 показана фазовая диаграмма при половинном заполнении при различных  $t'$ , полученная с помощью много-патечевого РГ анализа;

сплошная линия соответствует критическому взаимодействию  $U_c$ , необходимому для установления антиферромагнетизма.

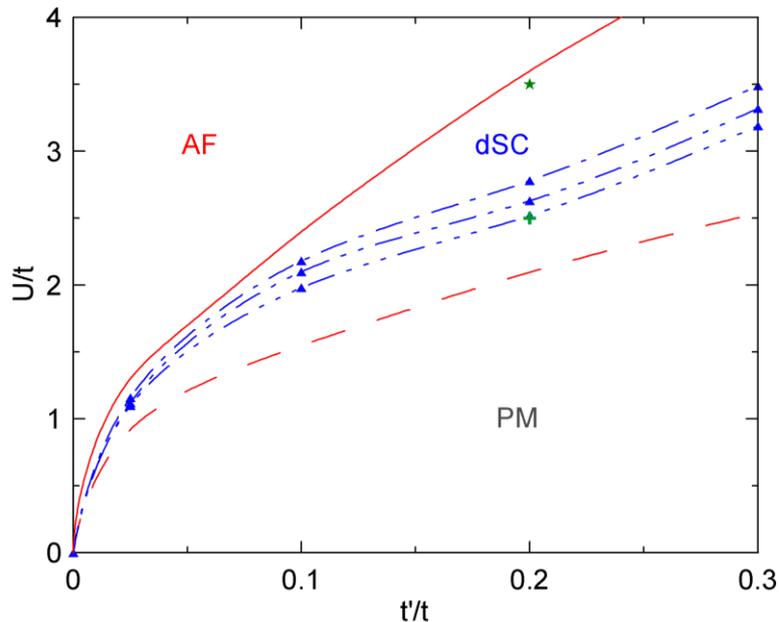


Рис. II-9. Фазовая диаграмма двумерной модели Хаббарда при  $n = 1$  (половинное заполнение). Пунктирная линия - граница между антиферромагнитными и парамагнитными фазами в приближении среднего поля, сплошная линия - граница антиферромагнитной фазы, полученная в много-патчевом РГ подходе с температурным обрезанием. Штрих-пунктирные линии соответствуют температурам кроссовера в режим с сильными сверхпроводящими корреляциями  $d$ -типа  $T_{\text{dSC}}^* = e^{-5}t$  (точка-пунктир),  $e^{-6}t$  (две точки-пунктир),  $e^{-7}t$  (три точки-пунктир). Крестиком отмечено критическое  $U_c$  для стабильности антиферромагнитной фазы при  $t'/t = 0.2$ , найденное квантовым методом Монте-Карло [61], звездочкой отмечает результат  $U_c$  континуально-интегрального РГ подхода [138].

Область существования антиферромагнетизма при половинном заполнении была ранее исследована в рамках теории среднего поля [135-137], квантового метода Монте-Карло [61,136], и континуально-интегральной РГ [138]. Последний подход принципиально отличается от

рассматриваемой функциональной ренормгруппы, поскольку, в частности, не учитывает систематически диаграммы в рядах по электрон-электронному взаимодействию. Различные методы предсказывают различные значения критического взаимодействия  $U_c$ , при котором устанавливается антиферромагнетизм при данном  $t'$ . Найденное критическое  $U_c$  больше чем его значение в приближении среднего поля для всех  $t'$ , а при  $t'/t=0.2$  согласуются с результатами континуально-интегральной РГ.

Вне АФМ области в РГ подходе существует отчетливая тенденция к сверхпроводимости  $d$ -типа; на рис. II-9 показаны «линии уровня», соответствующие  $\ln(t/T_{\text{dsc}}^*) = 5, 6, 7$ . Экстраполяции этих данных на большие  $U$  в парамагнитной фазе ( $U < U_c$ ) приводит к  $\ln(t/T_{\text{dsc}}^*) > 3$  в режиме слабой связи, то есть сверхпроводящие корреляции становятся существенными в температурном режиме, находящемся за пределом доступного температурного диапазона для моделирования квантовым методом Монте-Карло.

### ***в) Квантовые фазовые переходы и температурные кроссоверы при неполновинном заполнении***

Использованный в предыдущем разделе подход может быть обобщен на случай неполновинного заполнения. При этом, однако, следует иметь в виду, что при неполновинном (и не ван-хововском) заполнении вероятно формирование несоизмеримых структур, а также характерные температуры формирования сильных магнитных корреляций существенно ниже, чем при ван-хововских заполнениях. Для нахождения набора магнитных и сверхпроводящих структур, которые реализуются в этом случае, используем следующий метод [A28]. Остановив ренормгрупповой поток при некоторой минимальной температуре  $T_{\text{RG}}^{\text{min}}$  продолжим аналитически полученную температурную зависимость обратных

восприимчивостей в область  $T < T_{RG}^{\min}$ , аппроксимируя эту зависимость выше  $T_{RG}^{\min}$  полиномами 5-7 порядка. Температуру кроссовера  $T_m^*$  в режим экспоненциально сильных корреляций параметра порядка  $m$  определим из условия, что экстраполируемая  $\chi_m^{-1}(T_m^*) = 0$ .

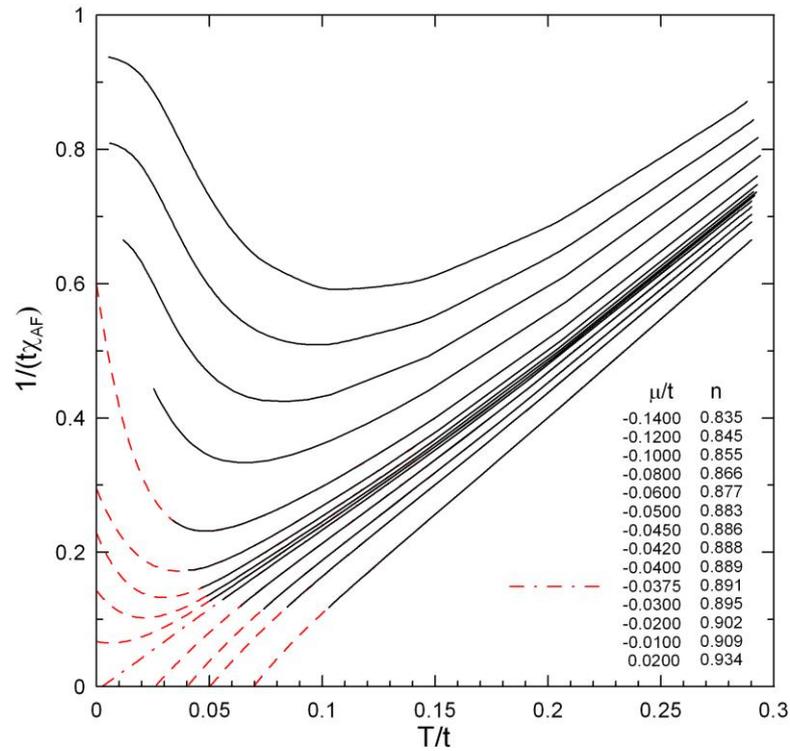


Рис. II-10. Температурные зависимости обратной антиферромагнитной восприимчивости при  $t'/t = 0.1t$  и  $U = 2.5t$ , и различных значениях химического потенциала (список химических потенциалов и заполнений соответствует кривым сверху в низ). Пунктирные линии показывают экстраполяцию обратных восприимчивостей к температурной области  $T < T_{RG}^{\min}$  полиномами 6-го порядка

При этом полученная температура  $T_m^*$  крайне слабо зависит как от порядка полинома, используемого для экстраполяции, так и от использованного диапазона экстраполяции. Изучая поведение  $T_m^*$  как функцию электронной плотности, сила взаимодействия и т.д. позволяет получить фазовые диаграммы.

Рассмотрим сначала относительно малую величину взаимодействия  $U = 2.5t$  и  $t' = 0.1t$ . Как обсуждалось в разделах а) и б) при этом значении  $t'$  основное состояние ожидается неустойчивым относительно антиферромагнитного порядка и/или сверхпроводимости при заполнениях близких к половинному или ван-хововскому. Температурные зависимости обратной антиферромагнитной восприимчивости с  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , полученной для различных химических потенциалов, показаны на рис. II-10.

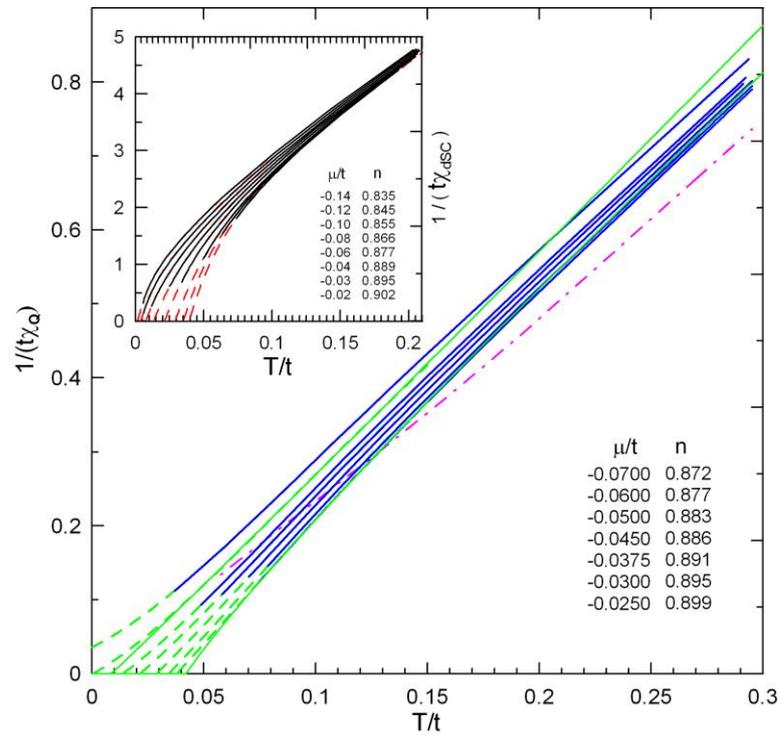


Рис. II-11. Температурные зависимости обратной магнитной восприимчивости при  $t'/t = 0.1t$  и  $U = 2.5t$  несоизмеримых волновых векторах, определенных из максимума  $T_Q^*$  пунктирные линии показывают экстраполяцию в область  $T < T_{RG}^{min}$ . Штрих-пунктирная линия показывает обратную соизмеримую восприимчивость при  $\mu = \mu_c^{AF} \approx -0.0375t$ . На вставке показаны температурные зависимости обратной восприимчивости по отношению к сверхпроводящей d-волновой неустойчивости при различных значениях химического потенциала.

Можно видеть, что для достаточно большого химического потенциала  $\mu > \mu_c^{\text{AF}} \approx -0.0375t$  ( $\mu = 0$  соответствует ван-хововскому заполнению), обратная антиферромагнитная восприимчивость монотонно уменьшается с уменьшением температуры и обращается в ноль при определенной температуре  $T_{\text{AF}}^*$ , значение которой возрастает с увеличением  $\mu$ . Исследование восприимчивостей при несоизмеримых волновых векторах (см. рис. II-11) показывает, что близко к  $\mu_c^{\text{AF}}$  (в диапазоне  $-0.06t < \mu < -0.02t$ )  $T_c^{\text{Q}} > T_c^{\text{AF}}$  для некоторого  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi - \delta)$ . Это указывает на неустойчивость парамагнитного основного состояния относительно несоизмеримого магнитного порядка в этом интервале  $\mu$ .

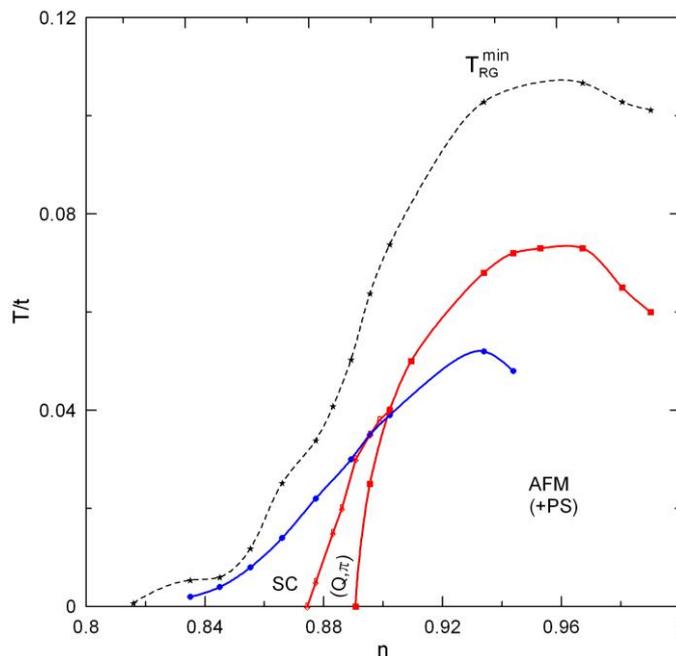


Рис. II-12. Фазовая диаграмма при  $t'/t = 0.1$  и  $U = 2.5t$ . Температура кроссовера в режим сильных антиферромагнитных, несоизмеримых магнитных и сверхпроводящих корреляций отмечена соответственно квадратами, треугольниками и кругами, PS обозначает возможность фазового расслоения в области сильных антиферромагнитных корреляций. Пунктирная линия (звездочки) показывает температуру  $T_{\text{RG}}^{\text{min}}$ , при которой остановлено преобразование ренормгруппы.

При  $\mu = \mu_c^Q = -0.06t$  находим  $T_c^Q = 0$ , что соответствует квантовому фазовому переходу с исчезновением магнитного порядка ниже половинного заполнения. Вблизи квантовой критической точки имеем  $\chi_Q^{-1} \sim T - T_c^Q$ , что совпадает с результатом теории Герца-Мории-Миллиса [139-141].

Поведение обратной восприимчивости соответствующей  $d$ -волновой сверхпроводящей неустойчивости показаны на вставке рис. П-11. Так же как и обратная антиферромагнитная восприимчивость, она монотонно убывает с уменьшением температуры.

Результирующая фазовая диаграмма изображена на рис. П-12 и показывает концентрационную зависимость температур кроссовера в области сильных антиферромагнитных, несоизмеримых и сверхпроводящих корреляций. Величина  $T_{dsc}^*$  монотонно увеличивается с увеличением концентрации при  $n < 0.94$ . Глубже в антиферромагнитной фазе температура сверхпроводящего перехода несколько подавлена. Это подавление возникает из-за конкуренции между антиферромагнитными и сверхпроводящими флуктуациями. Сосуществование значительных сверхпроводящих и антиферромагнитных корреляций наблюдается в интервале  $0.87 < n < 0.94$ .

Область несоизмеримой фазы, полученная на рис. П-12, является намного более узкой, чем ожидаемая в подходе среднего поля [143, 144], предсказывающим несоизмеримую неустойчивость в большей части фазовой диаграммы. Уточненное исследование решений средней теории поля показывает, однако, что существенная часть несоизмеримого порядка в этом подходе также неустойчива по отношению к фазовому расслоению соизмеримой и несоизмеримых фаз [A27,143], что качественно согласуется с результатами ренормгруппового подхода. При  $U = 3.5t$  поведение магнитной и сверхпроводящей восприимчивостей около квантовой критической точки аналогично рассмотренному выше; результирующая

фазовая диаграмма показана на рис. II-13. По сравнению со случаем  $U = 2.5t$ , диаграмма содержит более широкую область несоизмеримой фазы. Температура кроссовера в режим сильных сверхпроводящих корреляций приблизительно следует за температурой несоизмеримой фазы, показывая, что сверхпроводимость в этом случае возможно вызвана несоизмеримыми спиновыми флуктуациями.

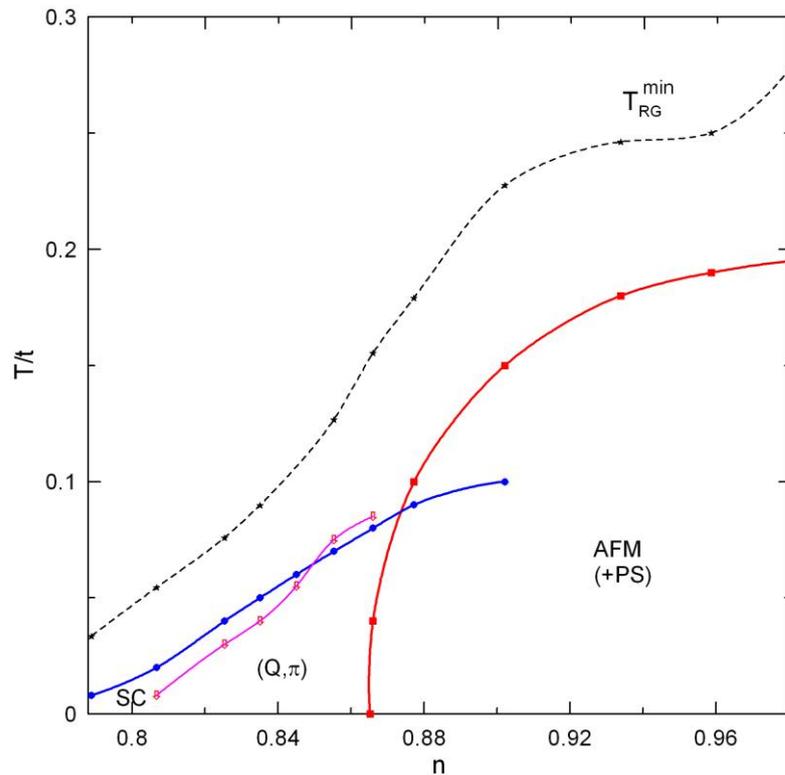


Рис. II-13. Фазовая диаграмма при  $t'/t=0.1$  и  $U = 3.5t$ . Обозначения те же, что и на рис. II-12.

Таким образом, рассмотренный метод позволяет получить фазовые диаграммы модели Хаббарда при заполнениях, отличных от половинного. Мы получаем промежуточную несоизмеримую фазу между соизмеримой и парамагнитной фазами, характеризующуюся волновым вектором  $Q = (\pi, \pi - \delta)$ . Размер несоизмеримых увеличений фазы с увеличивающейся силой взаимодействия.

### г) Ферромагнитная неустойчивость

Рассмотрим теперь ферромагнитную неустойчивость, возникающую при  $t'/t$  близких к  $1/2$ . Рассмотрим вначале случай  $t'/t = 0.45$ , когда имеет место логарифмическая расходямость плотности состояний при энергии ВХ сингулярностей  $\rho(\varepsilon) \propto \ln(t/\varepsilon)$  (см. рис. II-14) вблизи дна зоны.

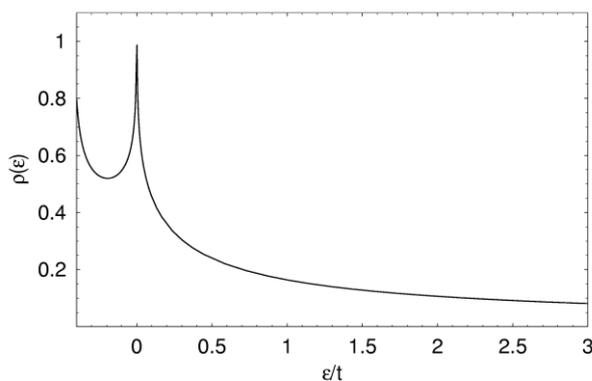


Рис. II-14. Невзаимодействующая плотность состояний при  $t'/t = 0.45$ .

Температурные зависимости восприимчивостей при  $U=4t$  приведены на рис. II-15. В отличие от рассмотренного выше случая антиферромагнитной неустойчивости, помимо минимумов обратной восприимчивости вдали от ВХ заполнений, обусловленных температурным возбуждением состояний вблизи энергии особенностей ВХ, выше ВХ заполнения при значении  $t'/t = 0.45$  появляются также максимумы обратных восприимчивостей, которые могут приводить к «повторному» возникновению магнитного порядка вдали от ван-хововского заполнения, обсуждающемуся ниже. Ниже ВХ заполнения температурная зависимость обратных восприимчивостей (рис. II-15б) имеет больший изгиб чем, для уровня Ферми выше ВХ заполнения, а обратные восприимчивости отклоняются от закона Кюри-Вейса уже при  $T > T_{\text{FM}}^*$ . Кроме того, полученная температура кроссовера  $T_{\text{FM}}^*$  резко спадает до нуля при определенном значении химического потенциала ( $\mu \approx -0.065t$  при  $U=4t$ ).

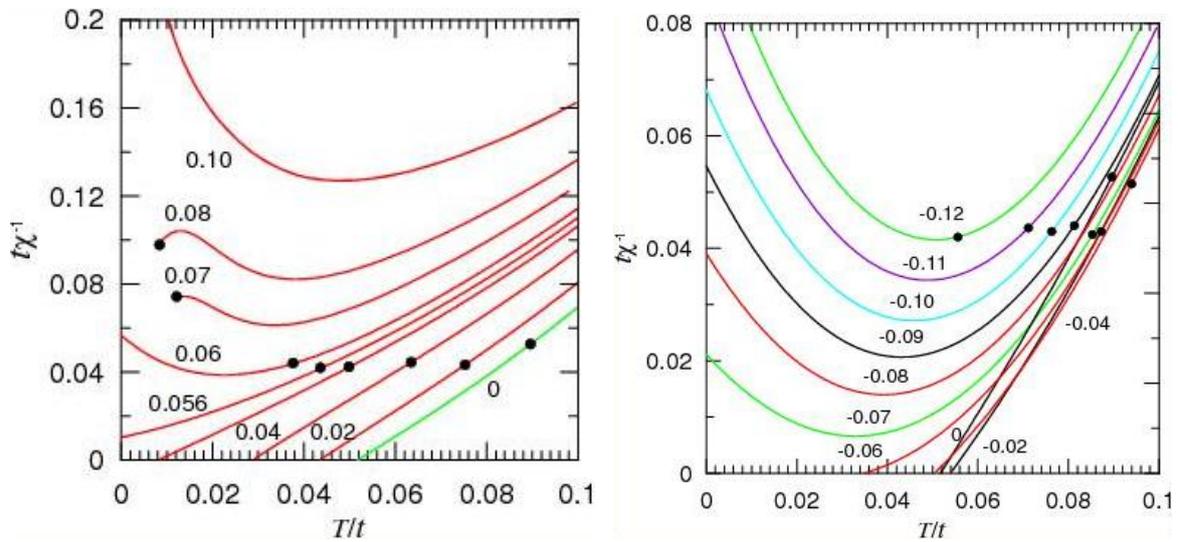


Рис. П-15. Обратные восприимчивости модели Хаббарда при  $t'/t = 0.45$ ,  $U = 4t$  и различных химических потенциалах, соответствующим заполнениям выше (а) и ниже (б) ван хововского заполнения  $n \approx 0.47$ .

Результирующая фазовая диаграмма представлена на рис. П-16 в координатах  $n - T$ , где также показан результат приближения  $T$  - матрицы [64-66]. Ферромагнитная область в этом случае занимает узкий диапазон плотностей вокруг ВХ заполнения  $n_{VH} = 0.465$ , при этом можно видеть, что температура перехода (кроссовера) в режим сильных ферромагнитных корреляций  $T_{FM}^*$  асимметрична относительно ВХ заполнения. Тенденция к несоизмеримому магнетизму возникает выше ВХ заполнения. Используя процедуру экстраполяции для немонотонной зависимости обратных восприимчивостей при  $\mu \approx 0.07t$ , можно получить производит 'вторую', меньшую, ферромагнитную область. Как отмечалось выше, ниже ВХ заполнения наблюдается резкое падение  $T_{FM}^*$ . Указанное поведение  $T_{FM}^*$  может быть интерпретировано как возможность перехода *первого рода* из ферромагнитного в парамагнитное состояние ниже ВХ заполнения, приводящему к фазовому расслоению между ферромагнитной и парамагнитной фазами.

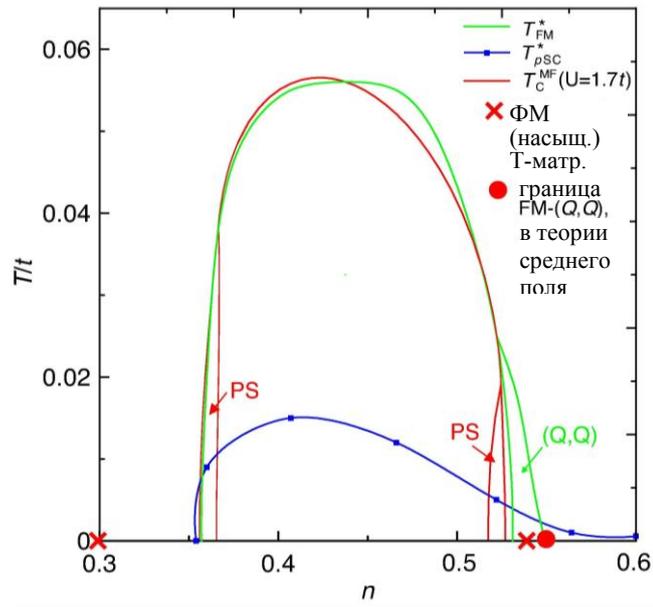


Рис. II-16. Фазовая диаграмма модели Хаббарда при  $t'/t=0.45$ ,  $U=4t$  в координатах  $n-T$  в сравнении с результатом для температуры магнитного перехода  $T_C^{MF}$  в теории среднего поля для  $U=1.7t$ .  $T^*$  соответствуют температуре перехода в режим сильных магнитных и сверхпроводящих корреляций.

Указанная возможность согласуется с результатом теории Стонера, которая рассматривает только (соизмеримую) ферромагнитную неустойчивость. Так как теория Стонера предсказывает намного более высокие температуры перехода  $T_C^{MF}$  и более широкий диапазон концентраций существования ферромагнетизма, для целей сравнения с РГ подходом удобно выбрать меньшее  $U=U^{eff}$ , определенное таким образом, что  $\max_{\mu} T_C^{MF}(\mu; U^{eff}) = \max_{\mu} T_{FM}^*(\mu; U)$ . Для  $U=4t$  соответствующее значение есть  $U^{eff} \approx 1.7t$ . Как видно из рис. II-16, не только высота, но также и положение и ширина ферромагнитной области находятся в хорошем соглашении с их значениями в РГ подходе. При этом теория Стонера приводит к переходу первого рода по  $\mu$  как выше, так и ниже ВХ заполнения. Переход первого рода с изменением химического потенциала соответствует в терминах электронной концентрации  $n$  фазовому расслоению между ферромагнитной и парамагнитной фазами. Из

сравнения результатов теории Стонера и ренормгруппового подхода можно заключить, что наличие области фазового расслоения выше ВХ заполнения в теории Стонера связано с отсутствием возможности несоизмеримого упорядочения в этой теории. За исключением этой особенности, область сильных ферромагнитных корреляций при конечных температурах и ферромагнетизма в основном состоянии, полученная в РГ подходе, с успехом описывается «перенормированной» теорией Стонера.

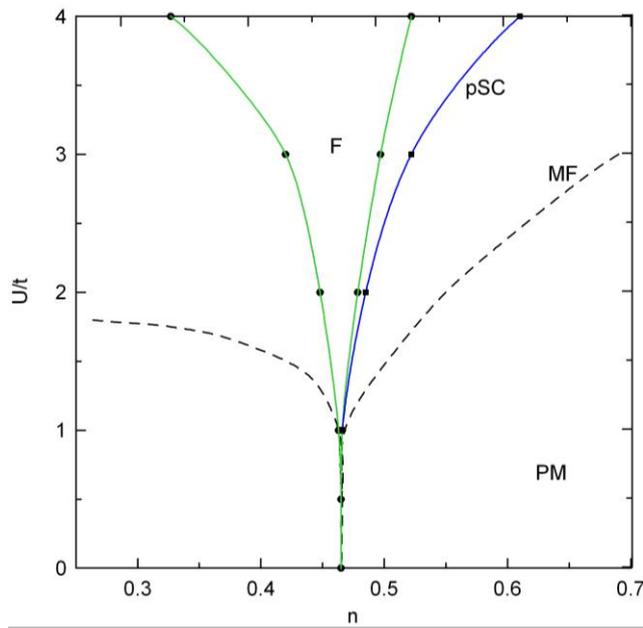


Рис. II-17. Фазовая диаграмма основного состояния для  $t'/t = 0.45$ . Пунктирная линия MF – результат теории среднего поля для границы между ферромагнитной и парамагнитной фазами. Сплошная линия - граница ферромагнитной фазы, полученная в много-патчевом РГ подходе с температурной обрезкой. Выше штриховой линии максимальная вершина достигает  $V_{\max} = 18t$  при температуре  $T_{\min}^{RG} > e^{-8}t$ . Граница ферромагнитной фазы в приближении  $T$ - матрицы [65] при  $U = 4t$  отмечена крестом. Вставка показывает фазовую диаграмму в  $\mu$ -  $U$  координатах, pSC отмечает область, где доминируют корреляции триплетного сверхпроводящего параметра порядка.

Результирующая фазовая диаграмма основного состояния приведена на рис. II-17, где также указана область с  $\ln(t/T_{pSC}^*) < 8$  выше ВХ

заполнения (узкая область несоизмеримого магнитного порядка выше ВХ заполнения не показана). Для сравнения, приведены также результаты теории Стонера с «неперенормированным»  $U$ , дающей более широкую область существования ферромагнетизма.

Случай  $t'/t = 1/2$  принципиально отличается от случая  $t'/t < 1/2$ . В этом случае дисперсия вблизи дна зоны при малых  $k_x$  или  $k_y$  может быть представлена как

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \begin{cases} tk_x^2(1 - \cos k_y) - \mu, & k_x \ll 1 \\ tk_y^2(1 - \cos k_x) - \mu, & k_y \ll 1 \end{cases} \quad (3.1.45)$$

и имеет минимумы вдоль линий  $k_x = 0$  и  $k_y = 0$  (см. рис. П-18), а не единственный минимум в начале координат, как для случая  $t'/t < 1/2$ . Эта специфическая особенность спектра приводит к корневой расходимости плотности состояний  $\rho(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1/2}$  на дне зоны. Поэтому в пределе низкой плотности (которые являются близкими к ВХ заполнению  $n_{VH} = 0$ ), можно ожидать формирования насыщенного ферромагнетизма [64-66].

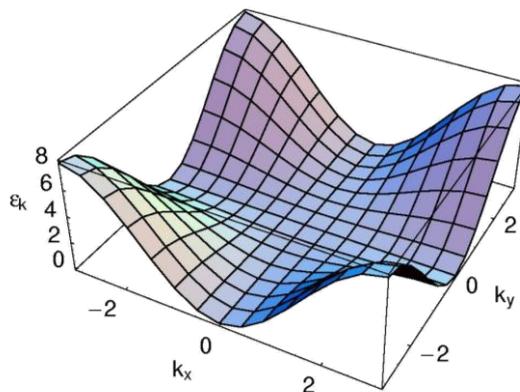


Рис. П-18. Электронная дисперсия при  $t'/t = 1/2$ .

Фазовая диаграмма, полученная в рамках РГ подхода для  $t'/t = 1/2$  показана на рис. П-19. Подобно антиферромагнитной неустойчивости, теория среднего поля переоценивает тенденцию к магнитному порядку. Результат приближения  $T$ - матрицы [65] для критической концентрации стабильности ферромагнетизма при  $U = 4t$  также отмечен на рис. П-19, и

близок к результату РГ подхода. Также как для случая  $t'/t < 1/2$ , возможные соответствующие характерные температуры  $T_{\text{pSC}}^*$  перехода в режим сильных сверхпроводящих корреляций крайне малы.

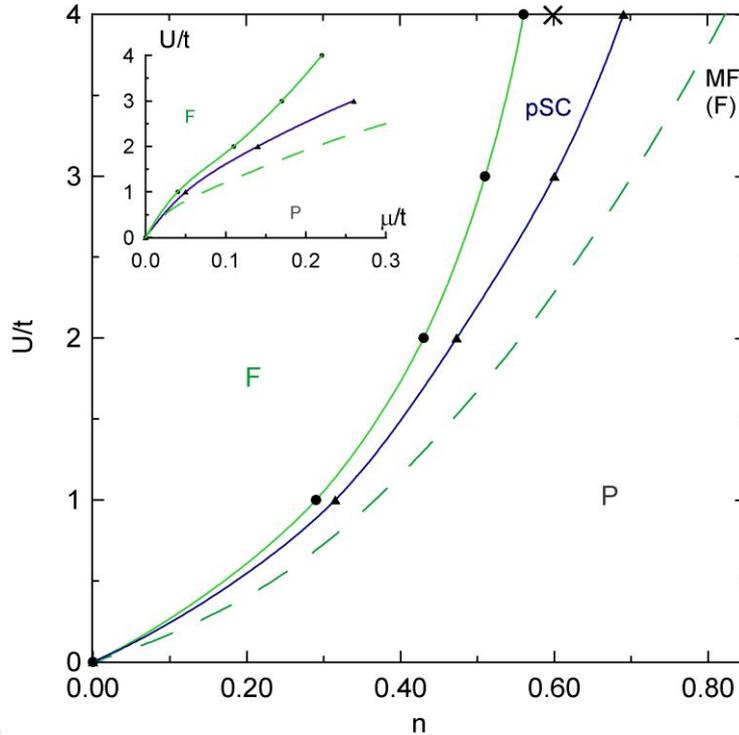


Рис. II-19. Фазовая диаграмма для  $t'/t = 1/2$ . Обозначения те же самые, как на рис. II-17.

#### д) Влияние взаимодействий между ближайшими соседями

Для того чтобы изучить влияние взаимодействий между ближайшими соседями, рассмотрим обобщенную  $U-V-J$  модель Хаббарда на квадратной решетке, описываемую гамильтонианом

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu N_e \quad (3.1.46)$$

где  $V$  соответствует зарядовому взаимодействию на соседних узлах,  $J$  - обмен гейзенберговского типа (без ограничения на двойное заполнение на узле),

$$n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad \mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}; \quad (3.1.47)$$

$\sigma_{\sigma\sigma'}$  - матрицы Паули. Для модели (3.1.46) возможны дополнительные типы упорядочения, описываемые операторами

$$\begin{aligned} O_{\text{CDW}}(i) &= \frac{1}{2}(-1)^i \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} - n/2), \\ O_{\text{CF}}(i) &= -\frac{i}{2z}(-1)^i \sum_{j\sigma} \lambda_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, \\ O_{\text{SF}}(i) &= -\frac{i}{2z}(-1)^i \sum_{j\sigma} \lambda_{ij} \sigma c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, \end{aligned} \quad (3.1.48)$$

где  $z=4$  - число ближайших соседей,  $n$  - электронная плотность. Отличное от нуля среднее значения оператора  $\hat{O}_{\text{CDW}}$  соответствуют дальнему порядку с волной зарядовой плотности,  $\hat{O}_{\text{CF}}$  и  $\hat{O}_{\text{SF}}$  соответствуют состояниям с зарядовыми [145-147] или спиновыми [148-151] орбитальными токами, циркулирующими в пределах плакетов. Хотя последние два состояния являются в определенной мере «экзотическими», представляет интерес исследование возможности их реализации в рамках модели (3.1.46).

Уравнения ренормгруппы имеют тот же самый вид (3.1.39) что и для стандартной модели Хаббарда, за исключением начального условия, которое имеет вид

$$V_{T_0}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) = U + (V - J/4)\gamma_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} - (J/2)\gamma_{\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1} \quad (3.1.49)$$

с  $\gamma_{\mathbf{k}} = 2(\cos k_x + \cos k_y)$ .

Фазовые диаграммы при  $U=2t$  и значениях  $t'/t=0.1$  и  $0.3$  и соответствующих заполнениях Ван-Хова представлены на Рис. II-20, II-21 [A14]. Границы фаз, определенные в подходе с двумя патчами показаны сплошными и пунктирными линиями. Сплошные линии отделяют фазы с различным поведением констант связи, в то время как пунктирные линии отделяют фазы с одним и тем же поведением констант, и определены от условия равенства соответствующих критических значений  $\lambda = \lambda_c^m$ , где линейно экстраполированные восприимчивости исчезают.

При  $t' = 0.1t$ , положительных  $J$  и не слишком больших значениях  $|V|$  ведущей неустойчивостью является антиферромагнетизм (волна спиновой плотности, SDW). При достаточно больших  $V > 0$  эта неустойчивость сменяется волной зарядовой плотности, при больших отрицательных  $V$  – сверхпроводимостью d-типа. При еще больших отрицательных  $V$  возникает вызванное взаимодействием расслоение на фазы. При  $J < 0$  возникает тенденция к образованию орбитальных спиновых токов. С уменьшением  $V$  эта фаза заменяется (частично фрустрированным) ферромагнетизмом, который заполняет большинство области, где фрустрированный антиферромагнитный порядок ожидался в подходе с двумя патчами.

Для значений  $J$  в области фазовой диаграммы, обозначенной «CF», подход с двумя патчами предсказывает, что фаза с орбитальными токами является ведущей неустойчивостью. Этот вывод, однако, не подтверждается исследованиями в рамках много-патчевого подхода, в котором эта область заменяется антиферромагнитной. Корреляции, связанные с орбитальными токами, тем не менее сильны выше линии на фазовой диаграмме, отмеченной ромбами. Также, двух-патчевый подход приводит к двум различным фазам - CDW и CDW', в первой из которых сильны корреляции орбитальных токов, но этот вывод также не подтверждается в рамках многопатчевого подхода. Заштрихованная область соответствует фрустрированному режиму в двух-патчевом подходе, где критическое значение параметра РГ преобразования  $\lambda_c > 20$  и неустойчивость относительно образования волны спиновой плотности подавлена отрицательным  $J$ . Такое поведение является результатом конкуренции между антиферромагнитными и сверхпроводящими флуктуациями с одной стороны и ферромагнитными флуктуациями с другой стороны. Как и в вышеисследованном случае стандартной модели Хаббарда, фрустрация гораздо менее выражена в много-патчевом подходе.

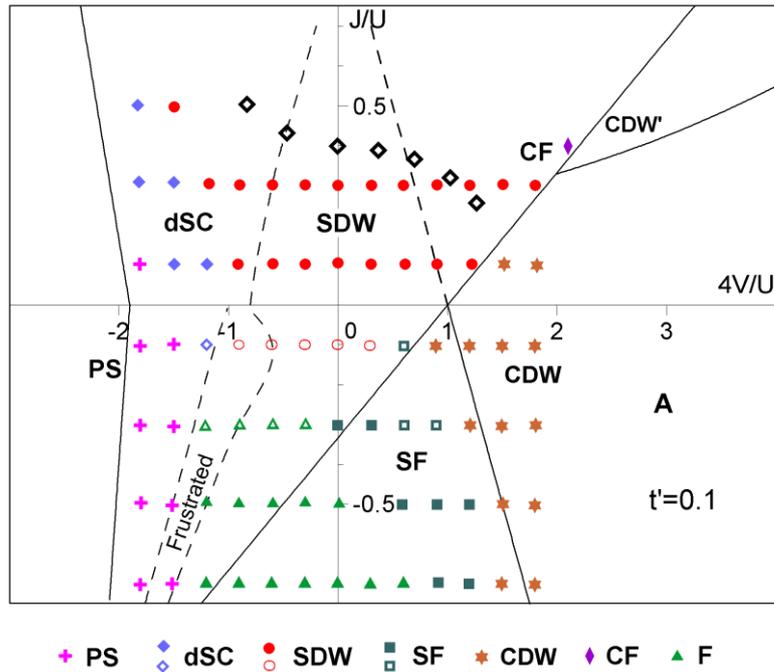


Рис. П-20. Фазовая диаграмма модели (3.1.46), полученная в РГ подходе для  $U=2t$ ,  $t'/t=0.1$ , и  $n=0.92$ . Сплошные и пунктирные линии соответствуют границам фаз, полученным в двух- и много-патчевом анализе. Кружки отмечают антиферромагнитную фазу, ромбы – сверхпроводящую, треугольники – ферромагнитную, квадраты – фазу спиновых токов, звездочки – фазу с волной зарядовой плотности. Открытые символы обозначают фрустрированный режим в много-патчевом подходе, когда расходимость вершин не была достигнута для  $\lambda_T = \ln(t/T) < 8$ . Темные ромбы ограничивают область, выше которой корреляции орбитальных токов становятся существенными,  $\chi_{CF} > (2/3)\chi_{AF}$ . Область «frustrated» - фрустрированная область с критическим параметром в двух-патчевом подходе  $\lambda_c > 20$ . Тип соответствующего порядка был определен в этом случае самой большой восприимчивостью при  $\lambda_T = 8$ .

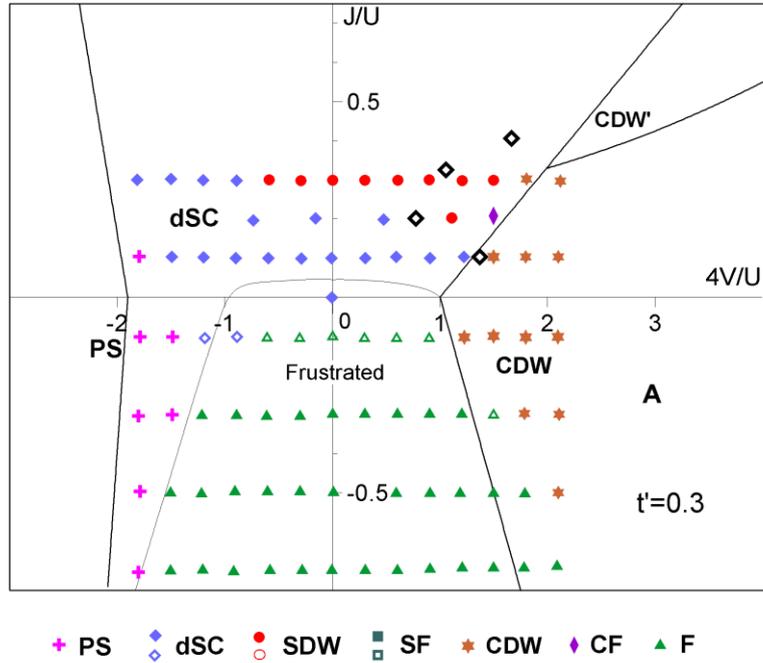


Рис. II-21. Фазовая диаграмма полученная в РГ подходе для  $U=2t$ ,  $t'/t=0.3$ , и  $n=0.7$ . Обозначения те же, что и на рис. II-20.

С увеличением  $t'$  до  $t' = 0.3t$  фазовая диаграмма изменяется (см. рис. II-21). При  $J > 0.05U$  сверхпроводимость  $d$  - типа становится ведущей неустойчивостью. Для больших  $V$  возникает CDW неустойчивость. Для больших отрицательных  $V$  снова находим расслоение фаз, вызванное взаимодействием. Большую часть области с  $J < 0.05U$  и умеренными  $|V|$  занимает ферромагнитный порядок. Последний становится фрустрированным при малых отрицательных  $J$  вследствие конкуренции тенденции к ферромагнетизму, вызванной межузельным обменным взаимодействием и тенденции к антиферромагнетизму, обусловленной перескоками электронов между ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Второй тип перескоков также фрустрирует тенденцию к антиферромагнетизму, наблюдавшуюся при меньших  $t'$ .

Вдали от половинного заполнения ожидается расслоение на фазы или формирование неоднородных структур всех упорядоченных фаз с волновым вектором  $\mathbf{Q}$  (CDW, AF, CF и SF). Это индуцированное неполонным заполнением расслоение на фазы должно, однако, быть противопоставлено вызванному взаимодействием расслоению, которое

присутствует даже при половинном заполнении ( $t' = 0$ ) и не является магнитно упорядоченной или сверхпроводящей.

Таким образом, ренормгрупповые подходы позволяют провести анализ фазовых диаграмм модели как при ван-хововских, так и при других заполнениях и исследовать возможность образования различных типов упорядочения.

## Глава 4. Спектральные свойства вблизи магнитных неустойчивостей

Анализ предыдущей главы рассматривал магнитные и сверхпроводящие неустойчивости, предполагая наличие хорошо определенных квазичастиц во всех рассмотренных случаях. Как показывается в данной главе, это предположение оправдано при не слишком низких температурах, больших температуры перехода в перенормированный классический режим. Ниже рассматриваются спектральные свойства парамагнитного состояния при достаточно низких температурах, при условии, что основное состояние обладает дальним магнитным порядком.

### 4.1. Собственная энергия электронов в некоторых простых подходах

#### *а) Теория среднего поля*

Приближение среднего поля позволяет определить собственную энергию и спектральные функции в упорядоченной фазе. Хотя в двумерных системах дальний порядок при конечной температуре отсутствует, как будет показано ниже, сильный ближний магнитный порядок приводит к спектральным свойствам, очень напоминающим их вид в упорядоченной фазе. В связи с этим, приближение среднего поля может служить удобной исходной точкой анализа результатов более сложных подходов.

В ферромагнитном случае переход к приближению среднего поля соответствует введению стонеровского расщепления в модели Хаббарда (3.1.1) с параметром порядка  $\Delta = U \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle / 2$ , соответствующим намагниченности вдоль оси  $z$ . Результирующий гамильтониан имеет вид

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (4.1.1)$$

где  $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - \sigma\Delta$ . Соответствующая запаздывающая электронная функция Грина определяется выражением

$$\ll c_{k\sigma}^\dagger | c_{k\sigma} \gg_\omega = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \Delta\sigma} \quad (4.1.2)$$

Собственная энергия при этом имеет тривиальный вид

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\sigma\Delta. \quad (4.1.3)$$

Спектральная функция  $A(k_F, \omega) = -\text{Im} \ll c_{k\sigma}^\dagger | c_{k\sigma} \gg_{\omega+i0} / \pi$  имеет однопиковую структуру каждой проекции спина с максимумами при  $\omega = \varepsilon_k - \sigma\Delta$ , соответствующими поверхностям Ферми спина вверх и вниз.

При выборе оси квантования поперек направления намагниченности, например выборе намагниченности вдоль оси  $x$  с соответствующим параметром порядка  $\Delta = (U/2)\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle$ , получаем

$$\ll c_{k\sigma}^\dagger | c_{k\sigma} \gg_\omega = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Delta + i0^+} + \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \Delta + i0^+} \right) \quad (4.1.4)$$

В этом случае собственная энергия приобретает более сложный по сравнению с (4.1.3) вид:

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{\Delta^2}{\varepsilon - \varepsilon_k} \quad (4.1.5)$$

и расходится при  $\varepsilon = \varepsilon_k$ . Соответствующая спектральная функция, в противоположность (4.1.2), имеет *двухпиковую* структуру для каждой проекции спина с максимумами при  $\omega = \varepsilon_k \pm \Delta$ . Таким образом, теория среднего поля в ФМ фазе приводит к различным спектральным свойствам электронов с осью квантования спина вдоль и поперек оси намагниченности. В то время как в первом случае имеются хорошо определенные квазичастицы со спином вверх и вниз, во втором случае квазичастицам нельзя приписать определенной проекции спина, и для каждой из проекций одновременно существуют два пика спектральной функции.

Ситуация в антиферромагнитной фазе является сходной с ферромагнитным случаем при выборе оси квантования поперек оси намагниченности. Вводя параметр порядка  $\Delta = U(-1)^i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle / 2$ , находим

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k},\alpha} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k},\beta} \beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma}),$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha,\beta} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \pm \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})^2 / 4 + \Delta^2}$$
(4.1.6)

Электронная функция Грина имеет вид

$$\ll c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | c_{\mathbf{k}\sigma} \gg_\omega = \frac{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0^+)(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + i0^+) + \Delta^2},$$
(4.1.7)

что соответствует

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{\Delta^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}$$
(4.1.8)

Аналогично (4.1.5), собственная энергия (4.1.8) расходится при  $\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ , что приводит к двухпиковой структуре спектральной функции. В противоположность ФМ случаю, однако, при  $\mathbf{k}$  принадлежащем Ферми поверхности, эта расходимость не обязательно возникает при  $\omega = 0$ . Расходимость собственной энергии при  $k = k_F$  и  $\omega = 0$ , приводящая к нарушению квазичастичных свойств, возникает лишь в так называемых «горячих» точках Ферми поверхности с  $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ , где непосредственно открывается антиферромагнитная щель. Эти точки покрывают значительную часть Ферми поверхности лишь при выполнении условия нестинга  $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}}$ . Все остальные точки Ферми поверхности не теряют своих квазичастичных свойств даже в упорядоченной фазе.

### **б) Двухчастично-самосогласованный подход**

Рассмотрим теперь ситуацию в парамагнитной фазе. Удобным подходом, качественно правильно описывающем электронные корреляции в низкоразмерных системах, является двухчастично-самосогласованное TPSC приближение [85]. Это приближение рассматривает динамическую спиновую восприимчивость

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.1.9)$$

имеющую структуру восприимчивости в приближении случайных фаз (3.1.14), но содержащую эффективное взаимодействие  $U_{sp}$  вместо затравочного  $U$ . Невзаимодействующая восприимчивость  $\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)$  определяется выражением

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (4.1.10)$$

где  $\omega_n = 2\pi nT$ . Эффективное взаимодействие  $U_{sp}$  определяется в соответствии с правилом сумм [85]

$$T \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} \chi(\mathbf{q}, i\omega_n) = n/2 - n^2 U_{sp} / (4U). \quad (4.1.11)$$

Учет перенормировки взаимодействия  $U_{sp}/U < 1$  позволяет избежать расходимости восприимчивости при конечной температуре, при которой знаменатель (4.1.9), вычисленный с затравочным взаимодействием  $U$  обращается в ноль. При этом  $U_{sp}$  уменьшается с увеличением  $t'$  и уменьшением температуры. Это приводит к тому, что обратная корреляционная длина в TPSC

$$\xi^{-1} \propto [1 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{Q}, 0)]^{1/2} \quad (4.1.12)$$

монотонно убывает с температурой и становится экспоненциально малой,  $\xi^{-1} = C \exp(-T^*/T)$  ниже характерной температуры  $T^* = 4\pi A U_{sp} \bar{S}_0^2 / (3\bar{\chi}_0)$  перехода в перенормированный классический режим, где

$$\bar{\chi}_0 = \chi_0(\mathbf{Q}, 0), \quad A = \nabla^2 \chi_0(\mathbf{q}, 0)|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}},$$

$C$  - некоторая константа и

$$\bar{S}_0^2 = 3n/4 - 3n^2/(8U\bar{\chi}_0) - \frac{3}{2} \left[ T \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)}{1 - \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)/\bar{\chi}_0} \right]_{T=0} \quad (4.1.13)$$

квадрат (подрешеточной) намагниченности основного состояния в расчете на узел,  $\mathbf{Q}$  - волновой вектор магнитной структуры, определенным максимумом  $\chi_0(\mathbf{Q}, 0)$ .

Собственная энергия вблизи магнитной неустойчивости определяется выражением

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{UU_{sp}T}{2} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} [3\chi(\mathbf{q}, i\omega_n) - \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)] \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (4.1.14)$$

на мнимой частотной оси [ $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$  - фермионные мацубаровские частоты] и

$$\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon + i0^+) = \frac{UU_{sp}}{2} \sum_{\mathbf{q}} \int d\omega [3\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega) - \text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)] \frac{N_B(\omega) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\varepsilon + \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i0^+} \quad (4.1.15)$$

на вещественной оси, где  $N_B(\omega)$  - функция Бозе-распределения. Множитель 3 в первом члене в квадратных скобках (4.1.13) и (4.1.15) является результатом суммирования по трем компонентам спина, второй член в квадратных скобках введен для того, чтобы избежать двойного учета диаграммы второго порядка.

Для вычисления собственной энергии при малых  $\varepsilon$  и  $\mathbf{k}$  около Ферми поверхности, рассмотрим разложение затравочной восприимчивости  $\chi_0$  при малых  $\tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}$  и  $\omega$ . Для модели Хаббарда с  $\mu \neq 0$  спиновая восприимчивость на вещественной частотной оси определяется выражениями [42]

$$\chi(\tilde{\mathbf{q}}, \omega) = \begin{cases} \frac{\chi_0}{A(\tilde{q}^2 + \xi^{-2}) + iB\omega/q} & (\text{ФМ}) \\ \frac{\chi_0}{A(\tilde{q}^2 + \xi^{-2}) + iB\omega} & (\text{АФМ}) \end{cases} \quad (4.1.16)$$

где  $\xi$  - корреляционная длина в TPSC, определяемая уравнением (4.1.11),  $A$  и  $B$  - константы, пропорциональные  $U_{sp}$  с коэффициентом пропорциональности, зависящем от затравочного спектра  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  [42]. В присутствии особенностей Ван-Хова ( $\mu = 0$ ), находим в ФМ случае

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0}{A(q^2 + \xi^{-2}) + i\Gamma(q_{\pm}, \omega)} \quad (4.1.17)$$

где

$$\Gamma(q_{\pm}, \omega) = \frac{U_{sp}}{2\pi t \sin^2 2\varphi} \frac{\omega}{\max[\omega, (Tt |q_+ q_-|)^{1/2}, t |q_+ q_-|]} \quad (4.1.18)$$

есть затухание спиновых возбуждений,  $q_{\pm} = q_x \sin \varphi \pm q_y \cos \varphi$ , и  $\cos 2\varphi = 2t'/t$ .

Рассмотрим сначала обратное время жизни квазичастиц

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k}_F)} = -\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}_F, i0^+) = -\frac{\pi U U_{sp}}{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{3\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}}) - \text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}})}{\sinh(\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}}/T)} \quad (4.1.19)$$

и производную вещественной части собственной энергии

$$\left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = -\frac{U U_{sp}}{2N} P \int d\omega \sum_{\mathbf{q}} [3\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \omega) - \text{Im}\chi_0(\mathbf{q}, \omega)] \frac{N_B(\omega) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}})}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}})^2}. \quad (4.1.20)$$

в точках Ферми-поверхности с  $\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{q}} = 0$ . Результаты для этих величин при  $T \ll t$  вместе с результатами теории возмущений второго порядка (ТВ, получающаяся заменой  $\chi \rightarrow \chi_0$  в уравнениях (4.1.19), (4.1.20)), собраны в Таблице II-1, где опущены температурно-независимые множители, пропорциональные  $U^2/t^2$ .

При  $\xi \ll 1/T$  (не слишком низкие температуры) мнимая часть собственной энергии мала и имеются хорошо определенные квазичастицы. В то же время, мнимая часть собственной энергии  $-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}_F, i0^+)$  аномально велика при  $\xi \gg 1$  вследствие эффектов корреляции. Одновременно,  $[\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F, \varepsilon)/\partial \varepsilon]_{\varepsilon=0}$  становится положительным и большим. Указанные расходимости возникают в интервале энергий  $|\varepsilon| \lesssim t\xi^{-1}$  и являются результатом чисто статических вкладов с нулевой мацубаровской бозонной частотой. При энергиях  $|\varepsilon| \gg t\xi^{-1}$  ( $t\xi^{-2}$  в ВХ случае) вещественная часть собственной энергии ведет себя как  $\Delta_0^2/\varepsilon$ , где  $\Delta_0 = (U U_{sp})^{1/2} \bar{S}_0 \sim T^*$  определяет величину АФМ щели или спинового расщепления в ФМ случае в основном состоянии.

Спектр	$\tau^{-1}(\mathbf{k}_F)$		$[\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F + \mathbf{Q}, \varepsilon)/\partial \varepsilon]_{\varepsilon=0}$	
	ТВ	TPSC	ТВ	TPSC
Линейный ( $\mu \neq 0$ )	$(T^2/t) \ln(1/T)$	$T\xi + tO((T/t)^{1-1/z})$	const < 0	$(T/t)\xi^2 + O((T/t)^{1-2/z})$
ВХ ( $\mu = 0$ ) $\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k}_F = \mathbf{k}_{\text{vH}} \\ \mathbf{k}_F \neq \mathbf{k}_{\text{vH}} \end{array} \right.$	$T \ln(1/T)$	$T\xi^2 + tO((T/t)^{1-1/z})$	$\ln(1/T)$	$(T/t)\xi^4 + O((T/t)^{1-2/z})$
	$(T^2/t) \ln(1/T)$	$T\xi + tO((T/t)^{5/6})$	const < 0	$(T/t)\xi^2 + O((T/t)^{2/3})$

Таблица II-1. Обратное время жизни квазичастиц  $\tau^{-1}(\mathbf{k}_F)$  и производная вещественной части собственной энергии  $[\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F, \varepsilon)/\partial \varepsilon]_{\varepsilon=0}$  в точках Ферми-поверхности с  $\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{Q}} = 0$  в теории возмущений второго порядка (ТВ) и двухчастично-самосогласованном приближении (TPSC) для различных затравочных электронных спектров. Динамический индекс  $z = 2$  для АФМ и  $z = 3$  для ФМ случая.

Указанные особенности приводят к подавлению спектрального веса  $A(\mathbf{k}, \omega) = -(1/\pi) \text{Im} \Sigma / [(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \text{Re}\Sigma)^2 + (\text{Im}\Sigma)^2]$  при  $|\omega| < \Delta_0$  и к формированию двухпиковой структуры спектральной функции в точках Ферми-поверхности с  $\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{Q}} = 0$  и пиками при  $\omega \simeq \pm \Delta_0$ . В то время как в АФМ случае это условие выполняется в так называемых «горячих» точках Ферми поверхности, соединенных вектором  $\mathbf{Q}$ , в ФМ случае двухпиковая структура возникает всюду на Ферми поверхности. Различие между ФМ и АФМ неустойчивостями при этом проявляется только в субведущих членах  $\sim T^\alpha$ , где  $\alpha$  зависит от динамического индекса  $z$ .

Более принципиальное различие между ФМ и АФМ случаем, однако, возникает в точках, не принадлежащих Ферми поверхности. В АФМ случае ввиду конечности вектора  $\mathbf{Q}$  спектральные функции сохраняют свою двухпиковую симметричную структуру вне Ферми поверхности. При этом спектральный вес на уровне Ферми оказывается подавлен в широком диапазоне импульсов  $|\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| < \Delta_0$  вблизи горячих точек. Это подавление

является предпосылкой открытия энергетической щели, связанной с наличием дальнего магнитного порядка в основном состоянии. В то же время, в ферромагнитном случае, спектральные функции зависят только от  $\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ , так что описанная двухпиковая структура сдвигается при смещении от Ферми поверхности. Это приводит к тому, что при  $\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \pm\Delta_0$  (условие, которое определяет Ферми-поверхности электронов спина вверх и вниз в ФМ фазе), один из пиков двухпиковой структуры располагается на уровне Ферми, так что электронные возбуждения в точках зоны Бриллюэна с  $\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \pm\Delta_0$  становятся когерентными. Это может быть интерпретировано, как существование двух «пред-сформировавшихся» Ферми поверхностей уже в парамагнитной фазе при низких температурах  $T \ll T^*$  вблизи ФМ неустойчивости. Соответствующие электронные возбуждения, однако, не имеют никакого предпочтительного направления спина, и симметрия относительно вращения в спиновом пространстве остается ненарушенной при  $T > 0$ .

Описанные результаты двухчастично-самосогласованного приближения в парамагнитной фазе качественно близки к результатам теории среднего поля в упорядоченной фазе, рассмотренной в п. 5.1(а). В парамагнитной фазе эти результаты являются, однако, нетривиальным следствием эффектов корреляции в состоянии с сильным ближним магнитным порядком, а не определяются достаточно простыми средне-полевыми значениями.

## **4.2. Результаты функциональной РГ в окрестности АФМ неустойчивости**

Двухчастично-самосогласованное приближение может быть качественно недостаточно вблизи ван-хововских заполнений, так как оно учитывает правильно только вклад частично-дырочных возбуждений, в то время как другие электронные каналы рассеяния учитываются только «в

среднем» перенормированным взаимодействием  $U_{sp}$ . Более детальное количественное рассмотрение спектральных функций в парамагнитной фазе вблизи ферро- и антиферромагнитных неустойчивостей может быть произведено на основе метода ренормгруппы.

Эволюция собственной энергии  $\Sigma_{\Lambda}(\mathbf{k}, i\omega)$  при РГ преобразовании определяется уравнением

$$\frac{d\Sigma_{\Lambda}}{d\Lambda} = V_{\Lambda} \circ S_{\Lambda}, \quad (4.2.1)$$

Уравнение (4.2.1) должно быть решено с начальным условием  $\Sigma_{\Lambda_0} = 0$ . Согласно этому уравнению, собственная энергия на мнимой частотной оси определяется вершинами электронного взаимодействия, вычисленными в однопетлевом РГ подходе (Глава 4), и затем может быть аналитически продолжена с мнимой на вещественную частотную ось. Ниже пренебрегается обратным влиянием собственной энергии и изменения Ферми поверхности в процессе РГ преобразования, и поэтому собственная энергия не включена в функции Грина в (3.1.35) и (4.2.1). Хотя такое вычисление не самосогласовано относительно собственно-энергетических и двухпетлевых поправок к вершинам, оно представляет наинизшее приближение для собственной энергии в РГ подходе. Поправки за счет самосогласования в предельном случае  $T \rightarrow 0$  будут исследованы в параграфе 4.4.

Удобно подставить вершины определяемые (3.1.35) в уравнение (4.2.1) при этом результирующее уравнение для собственной энергии имеет вид

$$\frac{d\Sigma_{\Lambda}}{d\Lambda} = S_{\Lambda} \circ \int_{\Lambda}^{\Lambda_0} d\Lambda' [V_{\Lambda'} \circ (G_{\Lambda'} \circ S_{\Lambda'} + S_{\Lambda'} \circ G_{\Lambda'}) \circ V_{\Lambda'}]. \quad (4.2.2)$$

Аналогично процедуре, использованной в Главе 4, для численного решения уравнения (4.2.2) импульсное пространство делится на части (патчи). В пренебрежении частотной зависимостью вершин, после аналитического суммирования по внутренним частотам в (4.2.2),

собственная энергия может быть вычислена при произвольных частотах на мнимой оси.

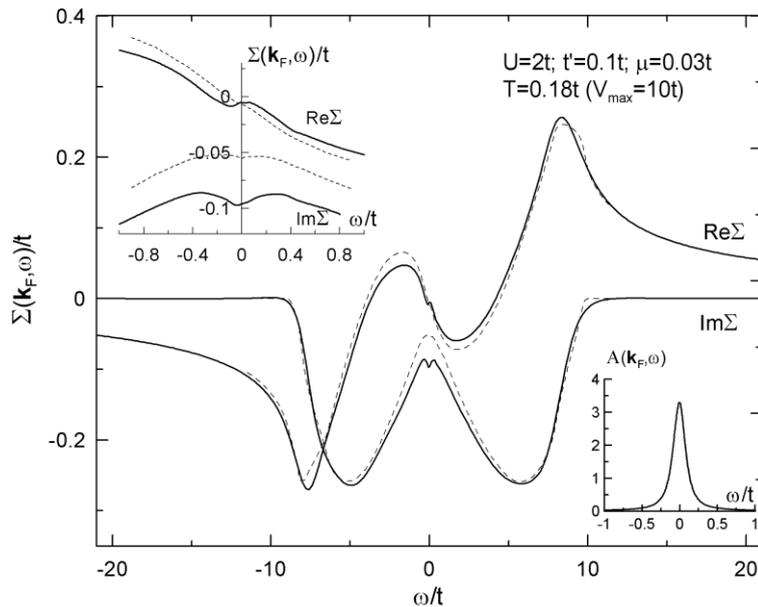


Рис. II-22. Собственная энергия в ТВ (пунктир) и РГ подходе (сплошная линия) при  $U = 2t$ ,  $t'/t = 0.1$ , ВХ заполнении  $n=0.92$  при  $T = 0.17t$  ( $V_{max} = 10t$ ).  $\mathbf{k}_F^1 = (3.1, 3 \cdot 10^{-3})$  выбран в первом, ближайшем к точке ВХ, патче. Вставки показывают собственную энергию и спектральную функцию на малых частотах.

Собственная энергия на вещественной оси при  $t' = 0.1t$ ,  $U = 2t$ , температуре  $T = 0.17t$  и ВХ заполнении зоны ( $\mu = 0$ ), рассчитанная с помощью аналитического продолжения результатов РГ подхода, вместе с собственной энергией в теории возмущений второго порядка (получающейся заменой  $V \rightarrow U$  в уравнении (4.2.2)), показана на рис. II-22. В первом патче, ближайшем к ВХ точке  $(\pi, 0)$ , теория возмущений и РГ приводят к минимуму  $\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)$  на уровне Ферми  $\omega = 0$  вместо максимума, ожидающегося для Ферми-жидкости. Наличие этого минимума напрямую связано с вышеотмеченной немонотонностью мнимой части собственной энергии на мнимой оси. Одновременно,  $\text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)$  имеет положительный наклон при  $\omega = 0$ . Величина  $|\text{Im}\Sigma|$ ,

рассчитанная в РГ подходе гораздо больше, чем в ТВ. Вне первого патча, вещественная часть собственной энергии имеет узкую область с отрицательным наклоном при  $\omega=0$ , в то время как для большего  $|\omega|$  поведение качественно подобно во всех патчах. При  $T \gtrsim 0.5t$  вершины взаимодействия в РГ подходе слабо перенормированы и найденные особенности собственной энергии близки как в РГ подходе, так и в ТВ.

Несмотря на сходство результатов, физическое происхождение особенностей РГ и ТВ совершенно различно. Как показано ниже, особенности собственной энергии в ТВ уменьшаются в размере с уменьшением температуры так, что обычная структура  $\Sigma$  восстанавливается в пределе  $T \rightarrow 0$ . Таким образом, эти особенности могут быть рассмотрены как возникающие исключительно из-за теплового возбуждения электронов около точек ВХ. В то же время, более явные аномалии в собственной энергии РГ подхода увеличиваются с уменьшением температуры и связаны с ростом магнитных корреляций.

Для того чтобы проследить эволюцию вышеописанных результатов с температурой, рассмотрим результаты при температуре  $T = 0.082t$  (см. рис. II-23), более близкой к температуре  $T^*$  кроссовера в режим с сильными антиферромагнитными корреляциями (проявляющем себя в рамках однопетлевого РГ подхода расходимостью вершин взаимодействия; при температуре  $T = 0.082t$  они достигают значения  $V_{\max} = 100t$ ). С уменьшением температуры описанные выше аномалии собственной энергии становятся более выраженными, и в первом патче возникает двухпиковая псевдощелевая структура  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$  с локальным минимумом на уровне Ферми, в то время как в других патчах при отличном от нуля  $t'$  квазичастичный пик существует на уровне Ферми внутри псевдощели.

Этот пик быстро сливается с пиками псевдощели при приближении к диагонали зоны Бриллюэна. Квазичастичный вес  $Z$  на Ферми-поверхности

(см. рис. П-23) постепенно исчезает с приближением к точке  $(\pi, 0)$ . Хотя столь низкая температура находится за пределами применимости однопетлевого подхода, полученные результаты являются прямым следствием аномалий собственной энергии, наблюдавшихся при более высокой температуре  $T = 0.17t$ , лежащей в пределах применимости рассматриваемого подхода. Это позволяет ожидать, что результаты не изменятся качественно в более высоких порядках петлевого разложения.

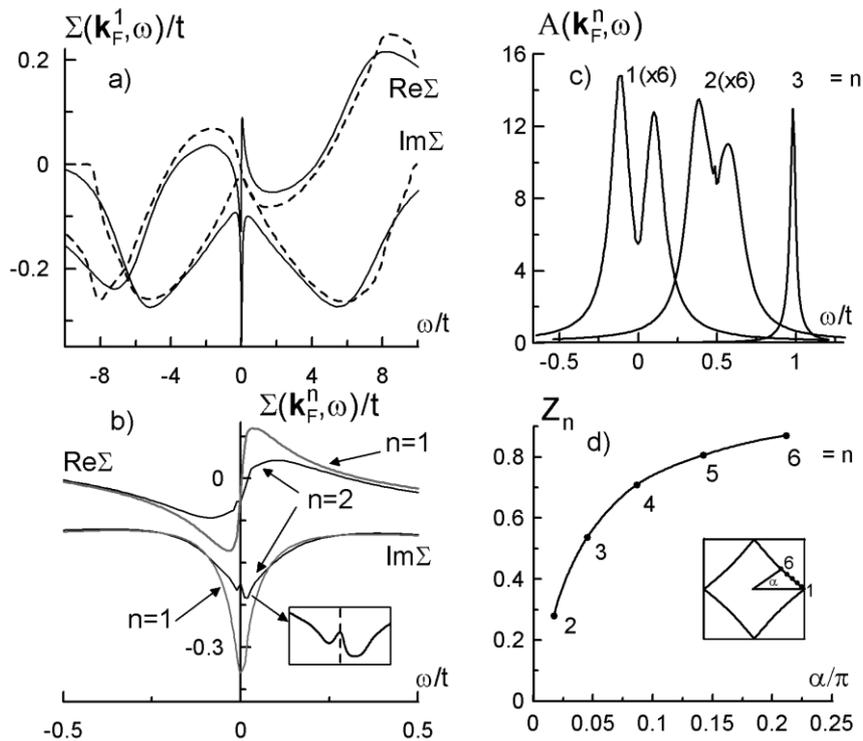


Рис. П-23. То же, что и рис. П-22 для  $T = 0.082t$  ( $V_{max} = 100t$ ). Кроме того, c) и d) показывают спектральные функции и квазичастичный вес для  $\mathbf{k}_F^n$  в различных патчах Ферми-поверхности. Спектральные функции смещены на  $(n-1)0.5t$  для лучшего представления; при  $n = 1, 2$  они умножены на 6.

Суммируя вышеописанные результаты, при ВХ заполнениях зоны, собственная энергия имеет неквазичастичный вид в точках поверхности Ферми  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$ . Квазичастицы с анизотропным спектральным весом существуют всюду в остальных частях Ферми поверхности. При низких температурах  $T$  уменьшение квазичастичного веса на Ферми-поверхности

сопровождается одновременным образованием двух дополнительных пиков в спектральной функции. При этом результаты качественно сходны с результатами подхода среднего поля и двухчастично-самосогласованного подхода параграфа 5.1. В то же время, при заполнениях, отличных от ВХ, квазичастичный пик в точках  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$  восстанавливается, его вес непрерывно увеличивается с увеличением  $|\mu|$ , и для  $|\mu| \gg \Delta$  применима обычная квазичастичная концепция. В противоположность результатам параграфа 5.1, квазичастичная концепция при этом не нарушается даже в горячих точках  $\varepsilon_{\mathbf{k}_F+\mathbf{Q}}=0$ . Поскольку в режиме слабой связи подход функциональной РГ учитывает корреляции количественно правильно, это свидетельствует о необходимости достаточно сильного взаимодействия и/или низких температур для нарушения квазичастичной концепции в горячих точках при заполнениях, отличных от ВХ.

Как уже обсуждалось, нарушение квазичастичной концепции вблизи АФМ неустойчивости связано с предпосылками открытия энергетической щели в основном состоянии в точках Ферми поверхности, определяемых условием  $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}=0$ . Хотя в рассматриваемом случае металлического антиферромагнетизма щель открывается не на всей Ферми поверхности, а лишь в отдельных ее точках, это необходимо приводит к нарушению квазичастичной концепции в окрестности этих точек при достаточно низких температурах.

В согласии с результатами предыдущих исследований [85-87], при  $t' = 0$  и соответствующем ВХ заполнении  $n = 1$  (половинное заполнение), квазичастичный пик отсутствует во всех патчах. Спектральные функции во всех точках Ферми-поверхности имеют в этом случае при низких температурах двухпиковую структуру.

Слабость аномалий собственной энергии как при ван-хововском, так и других заполнениях при температурах  $T \gtrsim 0.2t$  (где  $V_{\max} \sim 20t$ ),

оправдывает использованное в Главе 4 пренебрежение собственно-энергетическими эффектами.

### 4.3. Окрестность ФМ неустойчивости

В данном параграфе рассмотрим поведение собственной энергии вблизи ФМ неустойчивости в РГ схеме с температурной обрезкой [75]. Как отмечалось в Главе 4, этот подход позволяет рассмотреть ферромагнитные флуктуации наряду с остальными типами электронного рассеяния и таким образом может быть применен к описанию собственной энергии вблизи ферромагнитной фазы. Эволюция собственной энергии с температурой может быть наиболее просто определена из уравнения эволюции для величины

$$\Sigma_T(\mathbf{k}, i\omega) = T^{-1/2} \Sigma(\mathbf{k}, i\omega) \quad (4.3.1)$$

где множитель  $T^{-1/2}$  обусловлен перемасштабированием исходных фермионных полей для исключения температуры из члена взаимодействия. Соответствующее уравнение РГ имеет вид, аналогичный (4.2.1)

$$\frac{d\Sigma_T}{dT} = V_T \circ S_T, \quad (4.3.2)$$

Уравнение (4.3.2) должно быть решено с начальными условиями  $\Sigma_{T_0} = 0$  при  $T_0 \gg t$ . Также как и в предыдущем параграфе, в пренебрежении частотной зависимостью вершин, удобно подставить температурную зависимость вершин из уравнения (3.1.35) в (4.3.2), так что уравнение для эволюции собственной энергии принимает вид, аналогичный (4.2.2)

$$\frac{d\Sigma_T}{dT} = S_T \circ \int_T^{T_0} dT' [V_{T'} \circ (G_{T'} \circ S_{T'} + S_{T'} \circ G_{T'}) \circ V_{T'}]. \quad (4.3.3)$$

Чтобы избежать интегрирования по температуре в правой стороне уравнения (4.3.3), удобно дополнительно провести интегрирование по частям, откуда находим

$$\frac{d\Sigma_T}{dT} = (G_T - G_{T_f}) \circ [V_T \circ (G_T \circ S_T + S_T \circ G_T) \circ V_T] \quad (4.3.4)$$

где  $T_f$  - конечная температура, где вычисляется собственная энергия. Хотя уравнение (4.3.4) содержит суммы функций Грина по мацубаровским частотам при различных температурах, эти суммы могут быть вычислены с помощью той же самой процедуры, что и для равно-температурных функций Грина.

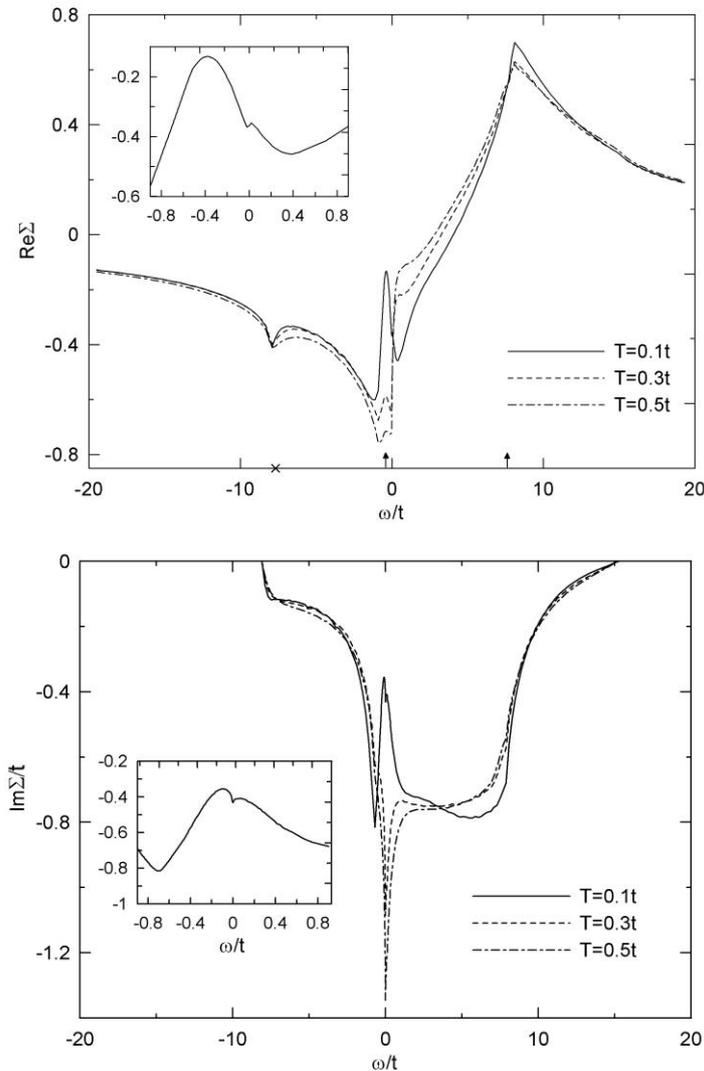


Рис. П-24. Вещественная (а) и мнимая (б) части собственной энергии в теории возмущений второго порядка (ТВ) при  $t'/t = 0.45$ ,  $U = 4t$ ,  $\mu = 0$  (ВХ заполнение зоны), и различных температурах. Стрелки отмечают энергию нижнего и верхнего края зоны ( $\varepsilon_{\min} = -4 + 8t'$  и  $\varepsilon_{\max} = 4 + 8t'$  соответственно), крест отмечает энергию, противоположную энергии верхнего края зоны,  $-\varepsilon_{\max}$ . Вставки показывают поведение  $\text{Re}\Sigma$  и  $\text{Im}\Sigma$  при низких энергиях для  $T = 0.1t$ .

Чтобы вычислить собственную энергию на вещественной частотной оси, вновь используется аналитическое продолжение Паде-аппроксимантами. Рассмотрим результаты при ВХ заполнении зоны ( $\mu = 0$ ) для  $t' = 0.45t$  и  $U = 4t$  где ферромагнетизм ожидается в основном состоянии согласно результатам Главы 4. Собственная энергия во втором порядке теории возмущений, вычисленная при температурах  $T = 0.1t$ ,  $0.3t$  и  $0.5t$  для  $\mathbf{k}_F = (2.83, 0.07)$  (центр первого патча, ближайшего к точке  $(\pi, 0)$ ), показана на рис. П-24, собственная энергия в других точках Ферми-поверхности имеет аналогичный вид. Как и в АФМ случае, рассмотренном в предыдущем параграфе, при высоких температурах  $T > 0.3t$  собственная энергия имеет острый «провал» на уровне Ферми, возникающий из-за влияния ВХ сингулярностей.  $\text{Im } \Sigma^{(TB)}(\mathbf{k}_F, 0)$  уменьшается с уменьшением температуры, так что  $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}_F, 0) = 0$  при  $T = 0$ . Это, однако, не приводит к восстановлению квазичастичной картины всюду на Ферми поверхности поскольку  $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}_F, \varepsilon) \propto \varepsilon \ln(1/\varepsilon)$  для ВХ точек  $\mathbf{k}_F = (\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$  при  $T = 0$  [158], хотя "нормальное" двумерное поведение  $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}_F, \varepsilon) \propto \varepsilon^2 \ln(1/\varepsilon)$  [159] восстанавливается для других точек Ферми поверхности.

Собственная энергия при  $T = 0.1t$  и  $T = 0.3t$ , полученная в рамках РГ подхода, показана на Рис. П-25 - П-27. В отличие от ТВ, при низких температурах (см. рис. П-26, П-27) появляется новая аномалия собственной энергии в узкой области около уровня Ферми. Подобно окрестности АФМ неустойчивости и в согласии с качественным рассмотрением, проведенным в параграфе 5.1, мнимая часть собственной энергии имеет минимум на уровне Ферми вместо максимума ожидающегося для Ферми жидкости. Одновременно,  $\text{Re } \Sigma(\mathbf{k}_F, \omega)$  имеет положительный наклон при  $\omega = 0$ . Как и вблизи АФМ неустойчивости, эти аномалии собственной энергии, найденной в РГ подходе, увеличиваются в размере с уменьшением температуры и

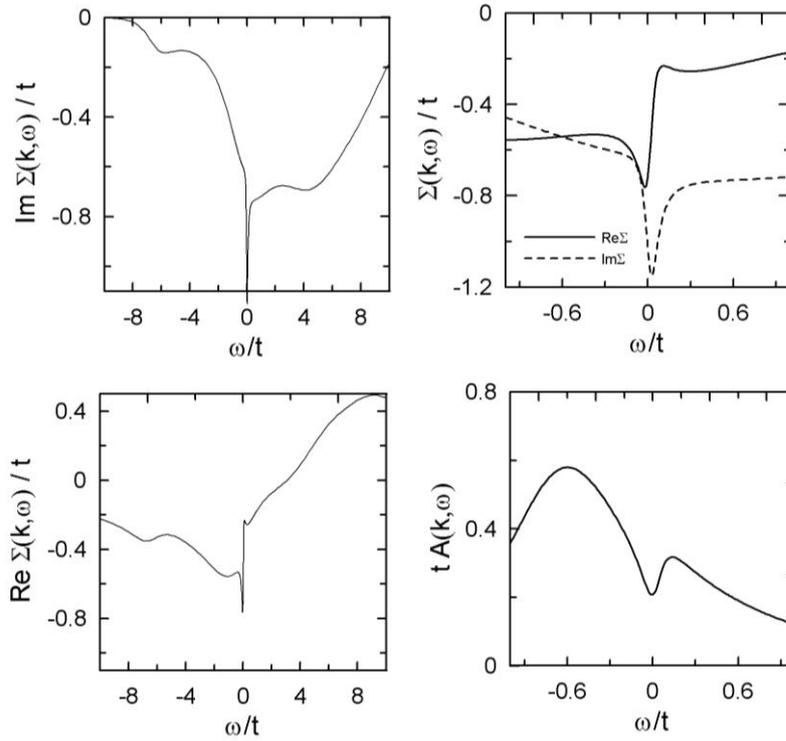


Рис. П-25. Результат функциональной ренормгруппы для собственной энергии (а-с) и спектральной функции (d) в первом патче Ферми-поверхности, ближайшем к точке  $(\pi, 0)$  при  $t'/t = 0.45$ ,  $U = 4t$ ,  $\mu = 0$ , и  $T = 0.3t$ .

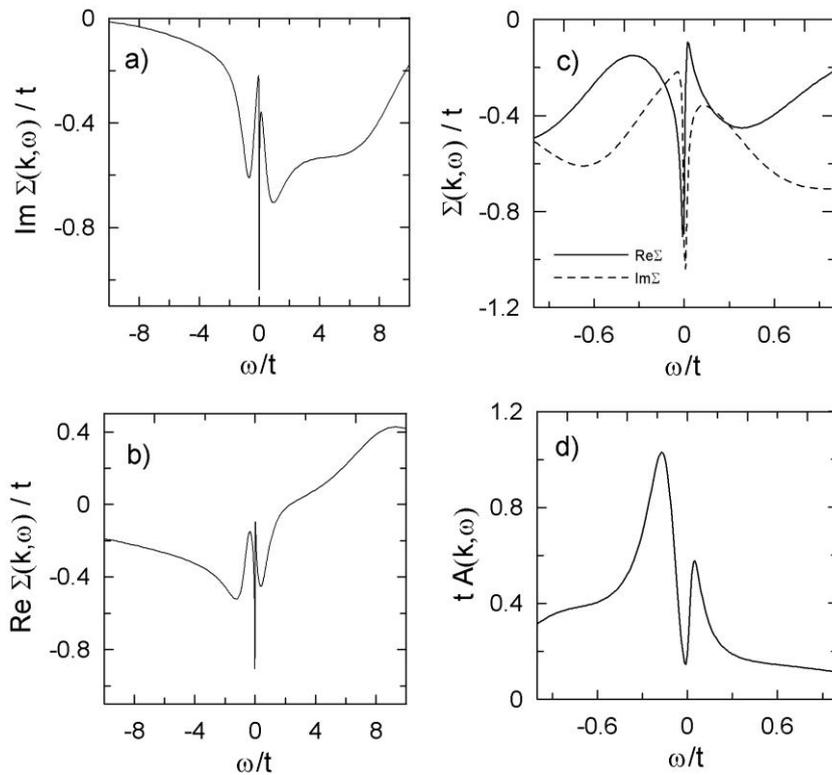


Рис. П-26. То же, что и рис. П-25 для  $T=0.1t$

приводят к подавлению спектрального веса на уровне Ферми. Качественно подобная картина наблюдается в четвертом патче Ферми поверхности с  $\mathbf{k}_F = (1.06, 0.75)$ , ближайшем к диагонали зоны Бриллюэна (рис. II-27). В этой точке Ферми поверхности результат РГ также приводит к двухпиковой структуре спектральной функции.

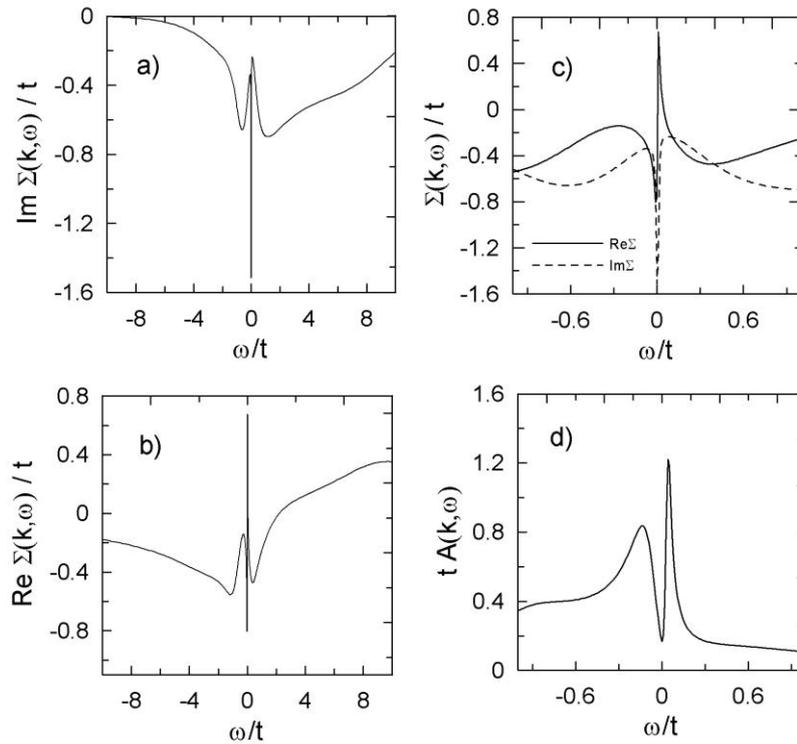


Рис. II-27. То же, что и рис. II-25 для  $T=0.1t$  и 4-го патча Ферми поверхности.

Величина  $\text{Re } \Sigma(\mathbf{k}_F, 0) \simeq -0.4t$  в первом, ближайшем к точке  $(\pi, 0)$ , патче Ферми-поверхности почти одинакова в обоих подходах, ТВ и РГ, и намного больше чем соответствующее значение, найденное около АФМ неустойчивости в предыдущем параграфе. В то же самое время, в четвертом патче Ферми-поверхности, РГ подход приводит к слегка положительной  $\text{Re}\Sigma(\mathbf{k}_F, 0)$ , в то время как  $\text{Re } \Sigma(\mathbf{k}_F, 0)$ . Поэтому ренормгрупповой подход приводит к существенной деформации дисперсии около ФМ неустойчивости при ВХ заполнениях зоны и низких температурах, отражающей тенденцию сужения зоны; в частности, эффективное (перенормированное) значение перескока  $t'$  между соседями

следующими за ближайшими, увеличивается в сторону его значения в случае плоской зоны,  $t'/t=1/2$ , обсуждаемому в параграфе 4.3. Значительная величина  $|\text{Re } \Sigma|$  в Ферми поверхности ведет к асимметричной форме спектральных функций около Ферми энергии, в отличие от аналитического TPSC подхода параграфа 5.1, где это изменение Ферми-поверхности не было принято во внимание.

Таким образом, в согласии с качественным рассмотрением параграфа 5.1, собственная энергия имеет нефермижидкостную форму в узком диапазоне  $|\omega| \lesssim \Delta_0$  вокруг уровня Ферми, и спектральные функции имеют двухпиковую структуру при низких температурах, при этом спектральный вес на уровне Ферми значительно подавлен. Как обсуждалось в параграфе 5.1, двухпиковая структура спектральных функций около ФМ неустойчивости ведет к формированию новых квазичастиц в точках зоны Бриллюэна вблизи Ферми поверхностей спина вверх и вниз ФМ упорядоченного основного состояния основания. Спиновая симметрия остается однако ненарушенной при  $T > 0$  и новые «предсформировавшиеся» квазичастицы не имеют никакого предпочтительного направления спина.

#### **4.4. Самосогласованный подход вблизи ФМ неустойчивости при $T \ll T^*$**

Вопрос о том, сохраняются ли вышеуказанные особенности собственной энергии при самосогласованном учете изменения электронных функций Грина, нетривиален. Эта проблема особенно существенна при низких температурах  $T \ll T^*$ , где согласно полученным результатам ожидается наиболее сильное изменение функций Грина. Спектральная плотность на парамагнитной Ферми поверхности  $A(k_F, 0) \sim \xi^{-2}$  экспоненциально мала в этом случае, поскольку величина магнитной корреляционной длины  $\xi$  экспоненциально велика при  $T < T^*$ .

Чтобы достичь качественного понимания роли флуктуаций ниже  $T^*$ , рассмотрим общую форму спиновых восприимчивостей

$$\begin{aligned}\chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, iv_n} \Gamma_{\uparrow\downarrow}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) G_{\uparrow}(\mathbf{k}, iv_n) G_{\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) \\ \chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, iv_n} \Gamma_{\uparrow\uparrow}^z(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) G_{\uparrow}(\mathbf{k}, iv_n) G_{\uparrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n)\end{aligned}\quad (4.4.1)$$

где

$$\begin{aligned}\Gamma_{\sigma\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}', iv_n, iv_n') &= G_{\sigma}^{-1}(\mathbf{k}, iv_n) G_{\sigma'}^{-1}(\mathbf{k}', iv_n') \\ &\times \int_0^{1/T} \int_0^{1/T} e^{i(v_n\tau + v_n'\tau')} \langle T[S_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^a(0) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}'\sigma'}(\tau')] \rangle d\tau d\tau'\end{aligned}\quad (4.4.2)$$

спиновые вершинные функции и  $S_{\mathbf{q}}^a(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger}(\tau) \sigma_{\alpha\beta}^a c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta}(\tau)$ ,  $h$  - внешнее магнитное поле которое полагается равным нулю в конце вычислений. Вершины (4.4.2) могут быть выражены через неприводимые части

$$\gamma_{\sigma\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}', iv_n, iv_n') = \frac{\Gamma_{\sigma\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}', iv_n, iv_n')}{1 + U \chi_{\sigma,\sigma'}^a(\mathbf{k} - \mathbf{k}', iv_n - iv_n')} \quad (4.4.3)$$

Тогда восприимчивость принимает вид

$$\chi^{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{\phi^{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)}{1 - U \phi^{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)} \quad (4.4.4)$$

где  $a, b = +, -, z$ , и функция  $\phi^{ab}$  имеет ту же самую структуру как  $\chi^{ab}$  (4.4.1) с заменой  $\Gamma \rightarrow \gamma$ . В парамагнитной фазе при  $h = 0$ .

$$\gamma_{\uparrow\downarrow}^+ = \gamma_{\downarrow\uparrow}^- = \gamma_{\uparrow\uparrow}^z = -\gamma_{\downarrow\downarrow}^z; \chi^{+-} = 2\chi^{zz}$$

Выражение для собственной энергии, включая член Хартри-Фока, имеет вид

$$\begin{aligned}\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, iv_n) &= -\frac{TU}{N} \sum_{\mathbf{k}', iv_n'} G_{\sigma}(\mathbf{k}', iv_n') \\ &+ \frac{TU^2}{N} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} [\gamma_{\sigma,\sigma}^z(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) G_{\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) \chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) \\ &+ \gamma_{\sigma,-\sigma}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) G_{-\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) \chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n)]\end{aligned}\quad (4.4.5)$$

здесь пренебрегается вкладом зарядовых возбуждений, являющихся несингулярными около точки магнитного перехода.

Как обсуждалось в параграфе 5.1, главный вклад в уравнение (22) происходит от нулевой мацубаровской частоты  $\omega_n$ . Вершины  $\Gamma_{\sigma,\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n)$  в пределе  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  [обозначаемые в последующем  $\Gamma_{\sigma,\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n)$  и аналогично для  $\gamma$ ] могут быть найдены с помощью тождеств Уорда. Стандартное тождество Уорда (см. например. [160])

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \Gamma_{\sigma\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n + i\omega) = \sigma_{\sigma\sigma'}^a [1 - \partial \Sigma(\mathbf{k}, iv_n + i\omega) / \partial(i\omega)]_{\omega=0} \quad (4.4.6)$$

не применимо в этом случае, так как оно подразумевает порядок пределов для вершины  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \Gamma$ , противоположный тому который требуется для вычислений в рассматриваемой области температур. Вместо этого, используем тождества рассмотренные Эдвардсом и Герцем [99], дающие при  $h \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \Gamma^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n) &= \Gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n) = 1 + \left. \frac{\Sigma_{\uparrow}(\mathbf{k}, iv_n) - \Sigma_{\downarrow}(\mathbf{k}, iv_n)}{h} \right|_{h=0} \\ &\simeq 1 - \frac{TU}{N} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} G^2(\mathbf{k}', iv_n') \Gamma(\mathbf{k}', \mathbf{k}'; iv_n', iv_n') + \frac{TU^2}{N} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} \left\{ \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) \right. \\ &\times \Gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n + i\omega_n, iv_n + i\omega_n) G^2(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) [\chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) - \chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n)] \\ &\left. + \left[ \frac{d}{dh} \gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) \right]_{h=0} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) \chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) \right\} \quad (4.4.7) \end{aligned}$$

где введено обозначение  $\Gamma = \Gamma^+$ ,  $\gamma = \gamma^+$ , и опущены спиновые индексы. Используя соотношения (4.4.3) между  $\Gamma$  и  $\gamma$  и соотношения (4.4.1) между  $\Gamma$  и  $\chi$ , находим из уравнения (4.4.7) следующее интегральное уравнение для вершинной функции  $\gamma$

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n) &\simeq 1 + \\ &\frac{TU^2}{N} \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} \left\{ \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n + i\omega_n, iv_n + i\omega_n) \right. \\ &\times G^2(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) [\chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n) - \chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n)] \\ &\left. + \frac{\chi^{zz}(\mathbf{q}, i\omega_n)}{1 + U \chi(\mathbf{q}, i\omega_n)} \left[ \frac{d}{dh} \gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) \right]_{h=0} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n) \right\} \quad (4.4.8) \end{aligned}$$

Уравнение (28) есть первое уравнение в бесконечной цепочке уравнений, так как вычисление  $d\gamma^z/dh$  содержит  $d^2\gamma^z/dh^2$  и т.д. Чтобы замкнуть систему уравнений, можно рассмотреть разложение, аналогичное  $1/N$  разложению в обобщенной  $O(N)$  модели Гейзенберга для систем с локальными моментами (параграф 2.4). В рассматриваемом случае оно соответствует введению  $N-1$  поперечных спиновых компонент и одной продольной. Тогда член с  $d\gamma^z/dh$  в (4.4.8) имеет порядок  $1/N$ , и поэтому только вклады ведущего порядка по  $1/N$ , являющиеся результатом поперечных спиновых флуктуаций, могут быть учтены при вычислении этой производной. Чтобы вычислить  $d\gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n)/dh$ , продифференцируем уравнение для собственной энергии (4.4.5) дважды по внешнему полю  $h$ . Члены содержащие  $d^2\gamma^\pm/dh^2$  должны быть сохранены в этом случае, так как они не малы по  $1/N$  и не исчезают в пределе  $q \rightarrow 0$ , в противоположность  $d\gamma^\pm/dh$ . После алгебраических преобразований находим

$$\left[\frac{d}{dh}\gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n)\right]_{h=0} = 2[1 + U\chi(0,0)]T \sum_{\mathbf{q}, i\omega_n} \gamma^3(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) \times G^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iv_n)\chi^{+-}(\mathbf{q}, i\omega_n) + O(1/M) \quad (4.4.9)$$

Восприимчивости (4.4.4), входящие в уравнения (4.4.8) и (4.4.9) могут быть представлены в виде, подобном (4.1.16) или (4.1.17) при  $\omega = 0$ ,

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, 0) = 2\chi^{zz}(\mathbf{q}, 0) \simeq \frac{R}{q^2 + \xi^{-2}} + \text{регулярные вклады} \quad (4.4.10)$$

где  $R$  - некоторая константа. Как в двумерных системах с локальным моментом и сильным ближним порядком, рассмотренным в Разделе I, следующее тождество

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle \simeq \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} [\chi^{zz}(\mathbf{q}, 0) + \frac{N-1}{2} \chi^{+-}(\mathbf{q}, 0)] e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \bar{S}_0^2 \exp(-r/\xi), \quad (4.4.11)$$

устанавливающее правильное асимптотического поведения корреляционных спиновых функций на больших расстояниях при  $T \ll T^*$ , полезно для установления соотношения между  $R$  и  $\bar{S}_0$ ,

$$\bar{S}_0^2 = \frac{N}{4\pi} TR \ln \xi. \quad (4.4.12)$$

Так как доминирующий вклад в суммы по импульсам в уравнениях (4.4.5), (4.4.8) и (4.4.9) происходит от длинноволновой области  $q \lesssim \xi^{-1}$ , можно произвести замены

$$\begin{aligned} \gamma_{\sigma,\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n) &\rightarrow \gamma_{\sigma,\sigma'}^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n), \\ \frac{d}{dh} \gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}; iv_n, iv_n + i\omega_n) &\rightarrow \frac{d}{dh} \gamma^z(\mathbf{k}, \mathbf{k}; iv_n, iv_n). \end{aligned} \quad (4.4.13)$$

Уравнения (4.4.5), (4.4.8) и (4.4.9) вместе с заменами (4.4.13) образуют замкнутую систему для  $\gamma$  и  $\Sigma$ , при этом интегралы по  $q$  могут быть вычислены аналитически способом, аналогичным несамосогласованному вычислению в параграфе 5.1. После продолжения на вещественную ось находим следующие алгебраические уравнения для собственной энергии и неприводимой вершины  $\gamma$  при  $t\xi^{-1} \ll |\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}| \ll t$ ,

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{\Delta_0^2 \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega)}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}, \\ \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega) &= 1 - \frac{N-2}{N} \frac{\Delta_0^2 \gamma^2(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega)}{[\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)]^2} + \frac{2}{N} \frac{\Delta_0^4 \gamma^3(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega)}{[\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)]^4}, \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

где введено спиновое расщепление в основном состоянии,  $\Delta_0 = U\bar{S}_0$ . Аналогично TPSC подходу параграфа 5.1, собственная энергия и вершинная часть зависят от  $\mathbf{k}$  только через комбинацию  $\bar{\omega} = \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}$  и определяются выражениями

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{N(\Delta_0^2 + \bar{\omega}^2 - \sqrt{\bar{\omega}^2 - \alpha_1 \Delta_0^2} \sqrt{\bar{\omega}^2 - \alpha_2 \Delta_0^2})}{2(2+N)\bar{\omega}}, \\ \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega) &= \frac{N}{2(2+N)^2 \Delta_0^2 \bar{\omega}^2} [2\bar{\omega}^4 + (6+N)\Delta_0^2 \bar{\omega}^2 - N\Delta_0^4 \\ &\quad + (N\Delta_0^2 - 2\bar{\omega}^2) \sqrt{\bar{\omega}^2 - \alpha_1 \Delta_0^2} \sqrt{\bar{\omega}^2 - \alpha_2 \Delta_0^2}]. \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

где  $\alpha_{1,2} = 1 + 4(1 \pm \sqrt{1 + N/2})/N$ ; ветвь  $\text{Im}\sqrt{z} \geq 0$  квадратных корней выбрана так, чтобы удовлетворить требованию аналитичности для  $\Sigma$  и  $\gamma$ . С другой стороны, в отсутствие перенормировки вершин, то есть при  $\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; i\nu_n, i\nu_n) = 1$ , что является аналогом приближения ФЛЕКС [46], собственная энергия не зависит от  $N$  и имеет вид

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2}(\bar{\omega} - \sqrt{\bar{\omega} - 2\Delta_0} \sqrt{\bar{\omega} + 2\Delta_0}). \quad (4.4.16)$$

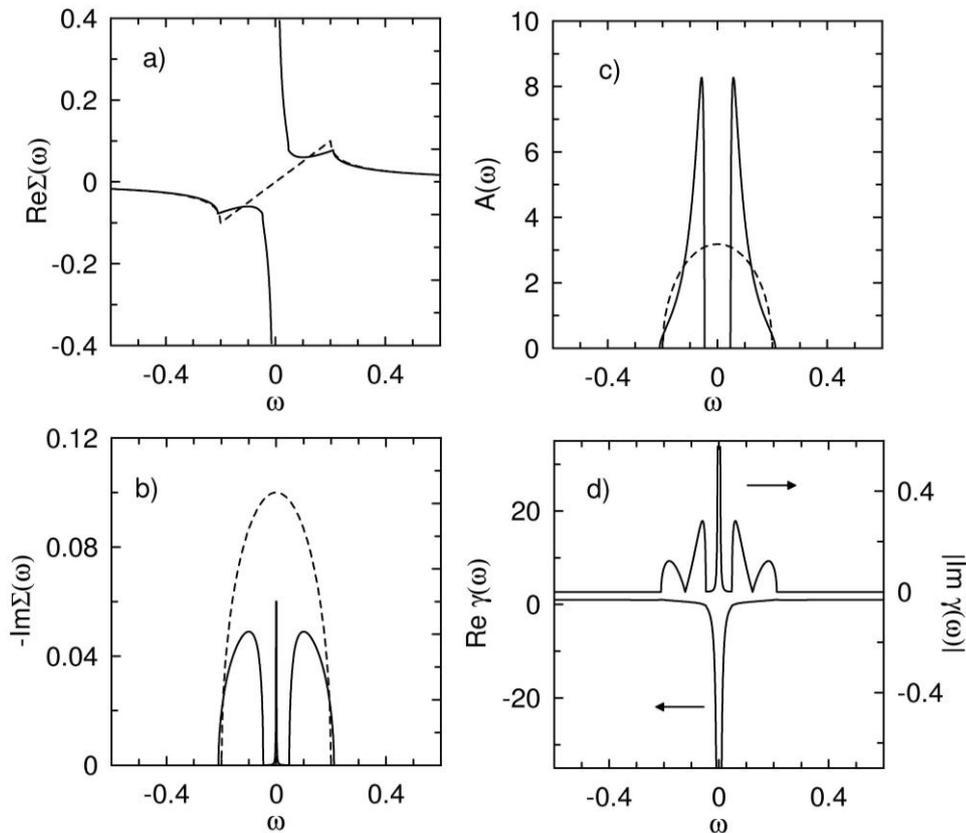


Рис. П-28. Вещественные и мнимые части собственной энергии (a, b), спектральная функция (c), и вершинная часть  $\gamma$  (d) при  $T \ll T^*$  в полностью самосогласованном подходе тождеств Уорда (сплошные линии) и ФЛЕКС-подобном подходе, являющемся самосогласованным только относительно собственной энергии (пунктирные линии) как функции  $\bar{\omega} = \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ .

В нулевом порядке по  $1/N$  (то есть при  $N = \infty$ ) уравнения (4.4.15) сводятся к

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Delta_0^2}{\bar{\omega}}, \quad \gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega, \omega) = 1 - \frac{\Delta_0^2}{\bar{\omega}^2}, \quad (4.4.17)$$

то есть собственно-энергетические и вершинные поправки точно компенсируют друг друга при  $M = \infty$ , и собственная энергия и вершина определяются их несамосогласованными результатами второго порядка теории возмущений по электрон-магنونному взаимодействию.

Чтобы определить, как этот результат изменяется при конечных значениях  $N$ , на рис. II-28 показаны результаты (4.4.15) и (4.4.16) для  $N = 3$  вместе с соответствующими спектральными функциями. Подобно несамосогласованному решению (4.4.17), вещественная часть собственной энергии в самосогласованном решении (4.4.15) расходится при  $\omega = 0$ , в отличие от решения (4.4.16), которое является самосогласованным только относительно собственной энергии, и ведет к конечному положительному наклону реальной части собственной энергии  $\partial \text{Re} \Sigma / \partial \omega = 1/2$  на уровне Ферми. Мнимая часть собственной энергии имеет наибольшее абсолютное значение на уровне Ферми и монотонно уменьшается с  $|\omega|$  в (4.4.16), в то время как она имеет более сложную зависимость энергии с  $\delta$ -функциональной особенностью при  $\omega = 0$  согласно самосогласованному результату (4.4.15).

Решение (4.4.16), которое является самосогласованным лишь относительно собственной энергии, соответствует однопиковой структуре спектральной функции, в то время как решение (4.4.15) приводит к двухпиковой структуре спектральной функции (рис. II-28с), являющейся подобной результату при  $M = \infty$  (4.4.17).

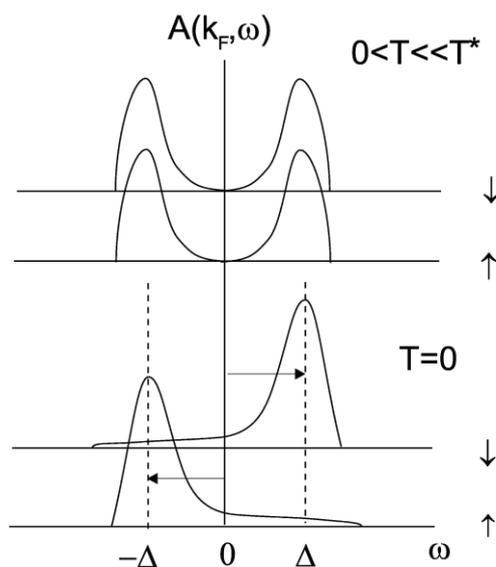


Рис. II-29. Схематическая картина изменения спектральной функции вблизи ферромагнитного перехода. Спектральные функции при  $T = 0$  показаны на парамагнитной Ферми-поверхности. Спектральные функции на Ферми-поверхностях электронов со спином вверх и вниз смещены на  $\pm\Delta$  относительно функций на парамагнитной Ферми поверхности, как обозначено стрелками.

Таким образом, результат (4.4.15), учитывающий как перенормировку собственной энергии, так и вершинные поправки, приводит к результатам, качественно подобным для несамосогласованных подходов (рассмотренных в параграфах 4.1 и 4.4). Причина этого заключается в почти полном сокращении собственно-энергетических и вершинных поправок. Это сокращение является точным при  $M \rightarrow \infty$ , но сохраняется почти неизменным и в физически важном случае  $M = 3$ . Этот факт приводит к неизменности результатов несамосогласованных подходов эффектами самосогласования. Хотя в антиферромагнитном случае применение формализма тождеств Уорда затруднительно, можно ожидать что этот последний результат останется неизменным также и в этом случае.

Во всех исследованных подходах вблизи ФМ фазы, собственная энергия имеет не-фермижидкостной вид в узком диапазоне энергий

$|\omega| \lesssim \Delta_0$  вблизи уровня Ферми, и спектральные функции имеют двухпиковую структуру при низких температурах. Поскольку спектральные функции в парамагнитной фазе инвариантны относительно вращения в спиновом пространстве, на основе сравнения полученных результатов с результатами приближения среднего поля в упорядоченной фазе (параграф 5.1) можно ожидать сильные изменения спектральных функций при ФМ переходе только для выбора оси квантования спина в направлении намагниченности основного состояния  $\mathbf{M}$ , в то время как спектральные функции для электронов с направлением оси квантования спина перпендикулярно  $\mathbf{M}$  изменяются непрерывно с уменьшением температуры до нуля (или температуры Кюри  $T_C \ll t$  для квазидвумерных систем). Полная качественная картина изменения спектральных свойств приведена на рис. П-29.

#### **4.5. Приближение динамической вершины в окрестности АФМ неустойчивости**

При не малых значениях кулоновского взаимодействия удобно использовать в качестве «отправной точки» рассмотрения не теорию возмущений, а динамическую теорию среднего поля (ДТСП) [154-156]. Указанная теория удобна для теоретического моделирования сильно-коррелированных систем, так как она содержит наиболее существенный вклад локальных электронных корреляций и позволяет описать переход металл-изолятор, возникающий при половинном заполнении и достаточно большом кулоновском взаимодействии. С точки зрения диаграммного подхода, ДТСП соответствует всем топологически различным фейнмановским диаграммам, хотя учитывает только их локальную часть.

Для учета нелокальных (в частности магнитных) флуктуаций необходим выход за рамки ДТСП. Так, кластерные обобщения этой теории [87,157] рассматривают вместо единственного узла (локальной

однопримесной модели Андерсона) несколько узлов и учитывают корреляции между этими узлами. Эти расширения однако ограничены корреляциями ближнего порядка, поскольку объем вычислений экспоненциально возрастает с числом узлов.

Для изучения далекодействующих флуктуаций необходимы другие подходы, в частности диаграммные обобщения ДТСП. Одним из таких подходов является приближение динамической вершины (ПДВ) [A24-A26]. Вместо того, чтобы считать локальной полностью неприводимую одно-частичную вершину, то есть, собственную энергию, ПДВ предполагает то же самое для 2-частичной полностью неприводимой вершины  $\Gamma_{ir}$ . Эти локальные вершины связаны нелокальными функциями Грина, приводя к нелокальной приводимой вершине и собственной энергии; см. диаграммы на рис. II-30.

В частности, имея нелокальную приводимую вершину, можно легко получить нелокальную собственную энергию (см. рис. II-30а) через точное уравнение, которое следует из уравнения движения [54,55]:

$$\Sigma_{k,v} = U \frac{n}{2} T^2 U \sum_{v' \omega k' q} \Gamma_{kk'q}^{vv'\omega \uparrow \downarrow} G_{k'+q, v'+\omega} G_{k', v'} G_{k+q, v+\omega}. \quad (4.5.1)$$

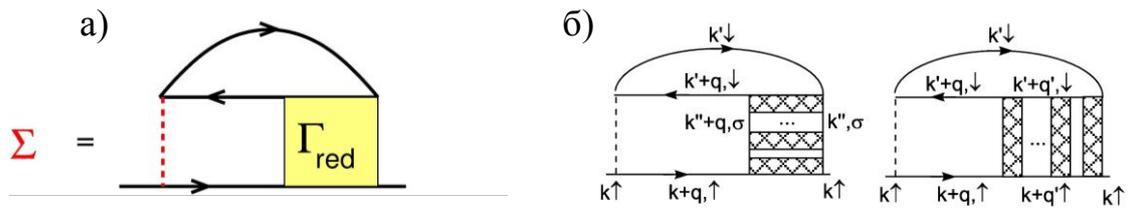


Рис. II-30. (а) Схематическое представление уравнения движения, связывающего полную вершину и собственную энергию; (б) диаграммы для собственной энергии, в которых нелокальная вершина выражена через неприводимые локальные в двух частично-дырочных каналах.

Здесь  $k, k'$  и  $q$  обозначают волновые вектора,  $v, v'$  и  $\omega$  мацубаровские частоты;  $n$  - концентрация электронов,  $\Gamma_{kk'q}^{vv'}$  двух-частичная приводимая

вершина и  $G_{k,\nu}$  - нелокальная функция Грина с *локальной* собственной энергией, определенной в ДТСП,

$$G_{k,\nu} = [i\nu_n - \varepsilon_k + \mu - \Sigma_{\nu}^{\text{DMFT}}]^{-1}. \quad (4.5.2)$$

Для вычисления приводимой вершины с целью описания магнитных явлений можно ограничиться вкладом двух частично-дрочных каналов, соответствующих продольным и поперечным спиновым флуктуациям, см. рис. П-30 б).

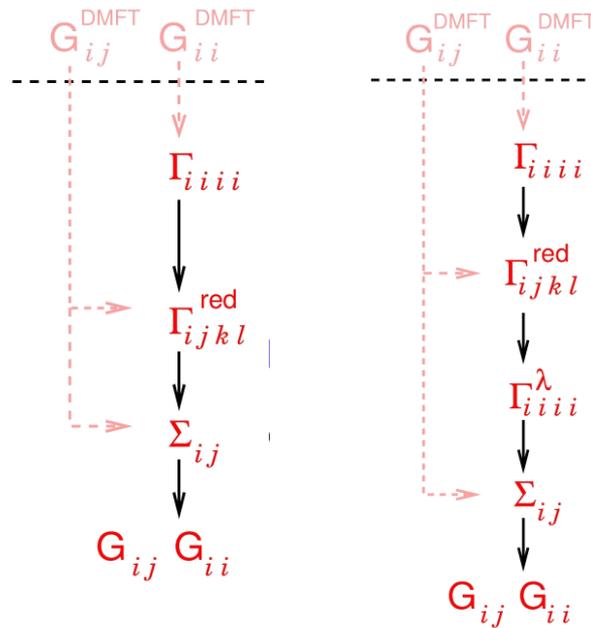


Рис. П-31. Алгоритм приближения динамической вершины (ПДВ) (а) без  $\lambda$  поправки (б) с  $\lambda$  - поправкой.

Алгоритм показан на рис. П-31. Сначала вычисляется неприводимая вершина  $\Gamma_{s(c),ir}$  в частично-дырочном спиновом и зарядовом каналах исходя из динамической восприимчивости модели примеси Андерсона (первый шаг на рис. П-31). Затем вычисляется приводимая вершина  $\Gamma_{s(c),q}^{v\nu'\omega}$  (второй шаг на рис. П-31) как сумма лестничных диаграмм:

$$\Gamma_{s(c),q}^{v\nu'\omega} = [(\Gamma_{s(c),ir}^{v\nu'\omega})^{-1} - \chi_{0q\omega}^{v'} \delta_{v\nu'}]^{-1} \quad (4.5.3)$$

где  $\chi_{0q\omega}^{v'} = -T \sum_k G_{k,\nu'} G_{k+q,\nu'+\omega}$  частично-дырочная петля. На третьем шаге рис. П-31 собственная энергия вычисляется исходя из этих вершин

согласно уравнению (4.5.1), которое принимает вид

$$\Sigma_{\mathbf{k},\nu} = \frac{1}{2}Un + \frac{1}{2}TU \sum_{\nu',\omega,\mathbf{q}} \chi_{0\mathbf{q}\omega}^{\nu'} \left( 3\Gamma_{s,\mathbf{q}}^{\nu\nu'\omega} - \Gamma_{c,\mathbf{q}}^{\nu\nu'\omega} + \Gamma_{c,\text{loc}}^{\nu\nu'\omega} - \Gamma_{s,\text{loc}}^{\nu\nu'\omega} \right) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\nu+\omega}. \quad (4.5.4)$$

где  $\Gamma_{s(c),\text{loc}}$  локальный (просуммированный по  $q$ ) аналог  $\Gamma_{s(c),\mathbf{q}}$ .

Описанная выше теория является несамосогласованной, т.е. не учитывает влияние нелокальности собственной энергии внутренних функций Грина на результат (4.5.4). Предположение о *локальности* собственной энергии промежуточных состояний связано с использованием локальной неприводимой вершины; самосогласованный учет нелокальной собственной энергии в рассматриваемом подходе являлся бы превышением точности. Частичный учет эффектов самосогласования может быть проведен в рассматриваемом подходе аналогично теории Мории для слабых зонных магнетиков, если скорректировать восприимчивость следующим образом

$$\chi_{\mathbf{q}\omega}^s \longrightarrow \left[ (\chi_{\mathbf{q}\omega}^s)^{-1} + \lambda \right]^{-1}, \quad (4.5.5)$$

где  $\chi_{\mathbf{q}\omega}^s = \sum_{\nu\nu'} \chi_{s\mathbf{q}}^{\nu\nu'}$  - динамическая магнитная восприимчивость,  $\lambda$  - некоторая (температурно-зависящая) величина, учитывающая вклад нелокальных флуктуаций. При этом собственную энергию можно переписать как функционал динамической восприимчивости (4.5.5) и неприводимой двухчастичной вершины  $\gamma$ :

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{k},\nu} = \frac{1}{2}Un + \frac{1}{2}TU \sum_{\omega,\mathbf{q}} \left[ 3\gamma_{s,\mathbf{q}}^{\nu\omega} - \gamma_{c,\mathbf{q}}^{\nu\omega} - 2 + 3U\gamma_{s,\mathbf{q}}^{\nu\omega} \chi_{\mathbf{q}\omega}^s + U\gamma_{c,\mathbf{q}}^{\nu\omega} \chi_{\mathbf{q}\omega}^c \right. \\ \left. + \sum_{\nu'} \chi_{0\mathbf{q}\omega}^{\nu'} (\Gamma_{c,\text{loc}}^{\nu\nu'\omega} - \Gamma_{s,\text{loc}}^{\nu\nu'\omega}) \right] G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\nu+\omega} \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

где

$$\gamma_{s(c),\mathbf{q}}^{\nu\omega} = (\chi_{0\mathbf{q}\omega}^{\nu})^{-1} \sum_{\nu'} \left[ (\chi_{0\mathbf{q}\omega}^{\nu'})^{-1} \delta_{\nu\nu'} - \Gamma_{s(c),\text{ir}}^{\nu\nu'\omega} \pm U \right]^{-1},$$

В рассматриваемом подходе значение  $\lambda$  устанавливается правилом сумм

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{\pi} \text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}, \nu} = U^2 n(1 - n/2) / 2. \quad (4.5.7)$$

При этом в алгоритме ПДВ появляется дополнительный шаг – вычисление  $\lambda$  поправки, см. рис. II-31 (б), в остальном алгоритм остается неизменным.

Рассмотрим применение изложенного подхода к двумерной модели Хаббарда на квадратной решетке, где антиферромагнитные флуктуации наиболее сильны. По сравнению с подходом функциональной ренормгруппы подход ПДВ может быть применен при не малых значениях кулоновского взаимодействия, при которых происходит сильная перенормировка квазичастичных свойств.

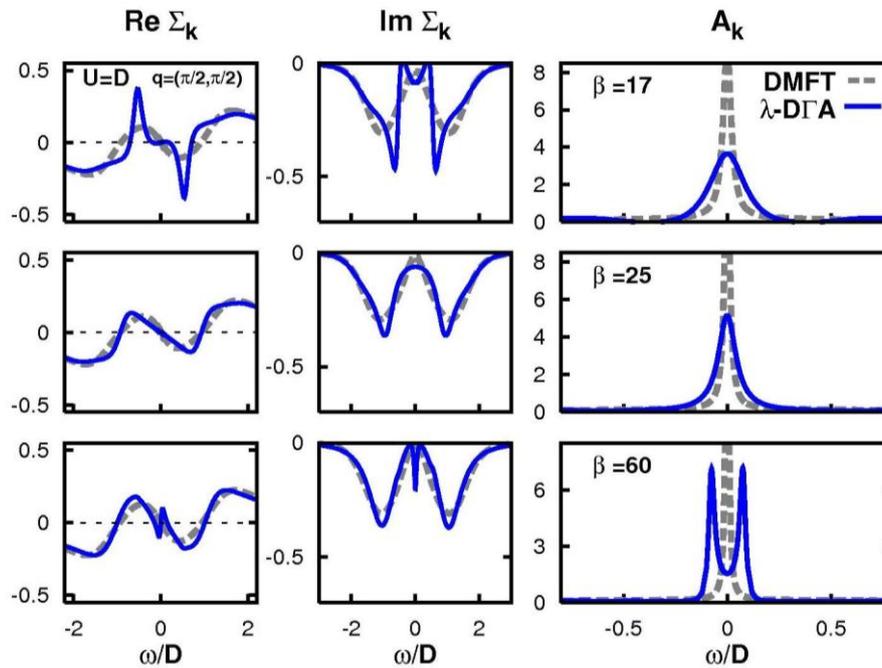


Рис. II-32. Температурная эволюция собственной энергии и спектральных функций в ПДВ (сплошные линии) и ДТСП (пунктирные линии) для полузаполненной двумерной модели Хаббарда при  $U = D = 4t$ .

На рис. II-32 показан результат вычисления собственной энергии и спектральных функций в точке  $\mathbf{q} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  Ферми поверхности для трех различных обратных температур  $\beta = 1/T = 17, 25$  и  $60$ . Можно видеть, что при низких температурах спектры ПДВ, в отличие от ДТСП, воспроизводят черты, обсуждавшиеся выше в методе функциональной

ренормгруппы. В частности, абсолютная величина мнимой части собственной энергии имеет максимум на уровне Ферми вместо минимума в ДТСП, а вещественная часть имеет положительный наклон при  $\omega=0$  вместо отрицательного в ДТСП. Результирующие спектральные функции обладают псевдощелевым поведением на малых частотах, являющимся следствием щели в электронном спектре, открывающейся при  $T=0$  в связи с наличием дальнего порядка в основном состоянии полузаполненной модели Хаббарда.

Необходимо отметить, однако, что температурная эволюция к формированию полностью щелевого спектра при  $T \rightarrow 0$  не является полностью монотонной. Эффекты нелокальных флуктуаций оказываются немного более слабыми при  $\beta = 25$  (второй ряд на рис. II-32). Возможная интерпретация этой особенности связана с конкуренцией между нелокальными и локальными вкладами в собственную энергию, в частности (нелокальные) антиферромагнитные флуктуации ослабевают с увеличением температуры, что делает систему более металлической; в то же время потеря когерентности с увеличением температуры увеличивает затухание квазичастиц ( $\gamma = -\text{Im}\Sigma^{\text{DMFT}}(0) = 0.009, 0.021, 0.034$  для трех рассмотренных температур). Одновременное действие этих двух механизмов приводит к немонотонной зависимости спектральных функций от температуры. Отметим, что рассмотренный выше метод функциональной ренормгруппы предполагает квазичастицы хорошо определенными в отсутствие магнитных флуктуаций, и таким образом, учитывает лишь первый из этих механизмов, что, однако, оправдано при низких температурах.

Результаты ПДВ при более сильном взаимодействии  $U = 2D$  ( $\beta = 40$ ) представлены на рис. II-33. При этом спектральные функции ДТСП модифицируются по сравнению со случаем  $U=D$ , в частности появляются хаббардовские подзоны, а вес квазичастичного пика уменьшается. При рассматриваемой низкой температуре локальные

спектральные функции ДТСП имеют структуру набора пиков, связанную с использованием метода точной диагонализации для решения примесной задачи, который рассматривает только конечное число узлов. Однако, спектральные функции ПДВ непрерывны из-за суммирования по импульсам и частотам в уравнении (4.5.6). Можно видеть, что в нелокальных спектральных функциях вновь происходит расщепление квазичастичного пика из-за влияния магнитных флуктуаций.

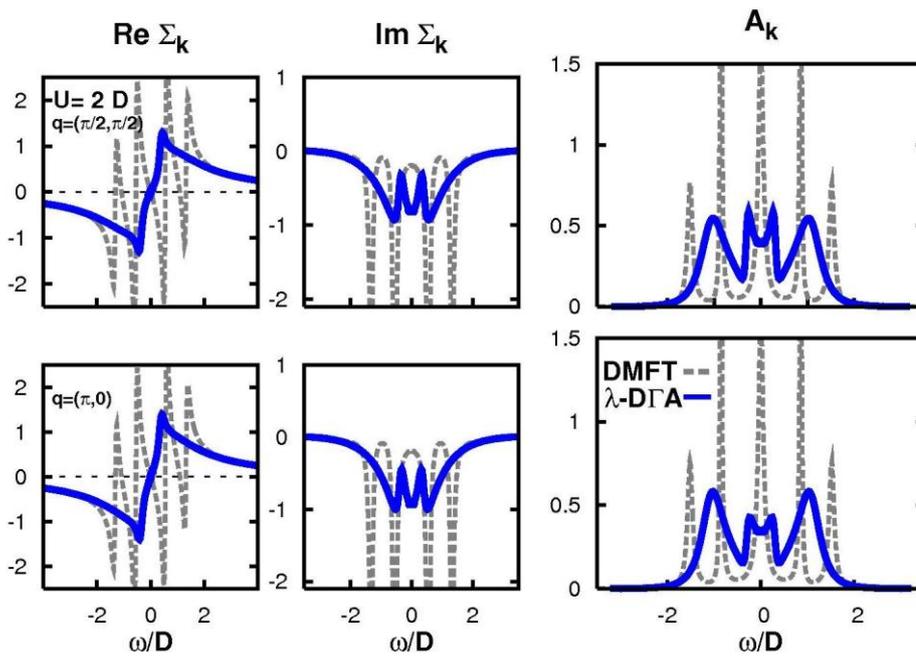


Рис. II-33. Собственная энергия и спектральные функции в ПДВ (сплошные линии) и ДТСП (пунктирные линии) для полузаполненной двумерной модели Хаббарда при  $U = 2D = 8t$  в двух различных точках Ферми-поверхности.

На рис. II-34 представлены результаты для модели Хаббарда с конечным перескоком между следующими за ближайшими соседями  $t' = 0.3t$  и  $\beta = 100$ . В режиме слабой связи ( $U = 1D$ ) квазичастичный пик лишь несколько подавлен антиферромагнитными флуктуациями, в то же время возникает сильная анизотропия между диагональным направлением и направлением вдоль стороны зоны Бриллюэна. Указанная анизотропия

оказывается менее выраженной в режиме сильной связи  $U=3D=12t$ . При дальнейшем увеличении  $U=3D$  квазичастичный вес становится очень маленьким; и соответствующий квазичастичный пик почти одинаково сильно подавлен в обоих рассмотренных направлениях.

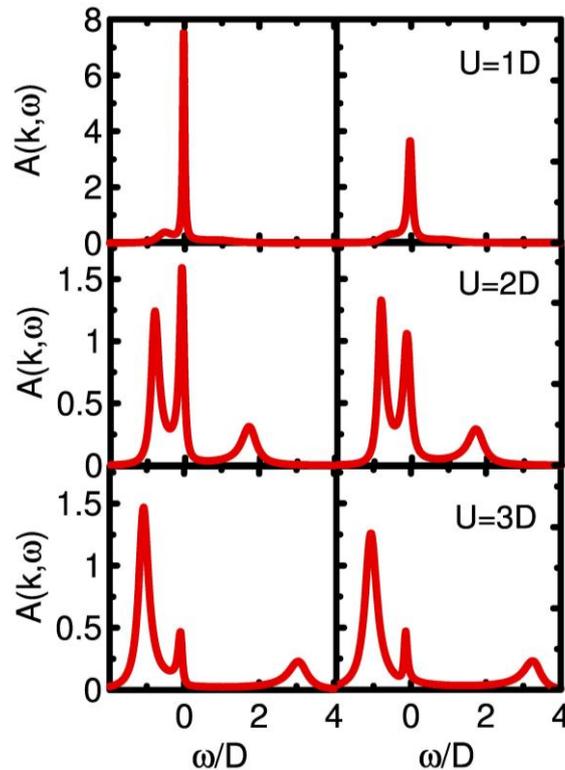


Рис. II-34. Спектральные функции в ПДВ для двумерной модели Хаббарда с перескоком между ближайшими  $t$  и следующими за ближайшими соседями  $-t'$  ( $t'/t=0.3$ ) в двух различных точках Ферми-поверхности при обратной температуре  $\beta = 100$ , заполнении  $n=0.8$  и различных  $U$ .

Таким образом, ПДВ позволяет провести нетривиальный анализ эффектов пространственных флуктуаций в различных областях фазовой диаграммы фермионных систем.

Полученные в этой главе результаты могут дать новую возможность интерпретации ARPES данных слоистых антиферро- и ферромагнитных материалов, а также материалов, находящимся на грани ферро- или антиферромагнитной неустойчивости.

Исследованные собственно-энергетические эффекты вблизи АФМ состояния позволяют построить новую качественную картину разрушения ферми-жидкостного состояния, происходящего лишь в отдельных частях Ферми-поверхности. В этой связи, интересна аналогия с недавними экспериментальными результатами для соединения  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [161], показывающими наличие арок Ферми-поверхности при сверхмалом допировании этого соединения стронцием. Сильная анизотропия квазичастичных свойств, определенная в параграфе 5.2, находится также в качественном согласии с экспериментальными данными по ВТСП соединениям, см., например, [162].

Исследованные эффекты вблизи ФМ состояния могут быть важны при интерпретации результатов ARPES экспериментов на слоистом манганите  $\text{La}_{1+x}\text{Sr}_{2-x}\text{Mn}_2\text{O}_7$  [163, 164]. Псевдощелевые структуры наблюдаются в этом материале как выше, так и ниже  $T_C$ . Хотя эти структуры возможно возникают благодаря наличию зарядового упорядочения [165] или разделения фаз [166], ФМ флуктуации могут быть ответственны за часть сдвига ( $\sim 250$  meV) максимумов спектральных функций от Ферми энергии в точках зоны Бриллюэна около ФМ Ферми поверхности при температуре выше температуры Кюри.

Описанные эффекты могут быть также важны для нормального состояния некоторых сверхпроводников, где, как ожидается, важны ферромагнитные флуктуации (например  $\text{UGe}_2$ ,  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ ).  $\text{UGe}_2$  имеет дальний магнитный порядок в основном состоянии, что может также приводить к квазирасщеплению Ферми-поверхности выше  $T_C$ . Хотя дальний ФМ порядок отсутствует в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , ФМ порядок возникает при допировании этого соединения малым количеством лантана [56], и описанные выше эффекты могут быть также наблюдаемы и в этом соединении.

## Заключение

Данная работа посвящена исследованию флуктуационных эффектов в магнетиках с локализованными и коллективизированными электронами, не описываемых в рамках приближения среднего поля и низших порядков теории возмущений.

Содержание и основные результаты работы могут быть суммированы следующим образом.

В первом разделе рассмотрены флуктуационные поправки к температурам Кюри (Нееля) и намагниченности слоистых магнетиков. Основные результаты первого раздела состоят в следующем.

1. С помощью ренормгруппового подхода и  $1/N$  разложения определены температуры Кюри (Нееля) слоистых магнетиков с анизотропией типа «легкая ось», а также описана намагниченность этих систем в широком интервале температур. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. При этом удается выйти за рамки ведущего логарифмического приближения, точность которого недостаточна для количественного описания экспериментальной ситуации в указанных системах.

2. С помощью ренормгруппового подхода определены температуры Костерлица-Таулеса и Кюри (Нееля) слоистых магнетиков с анизотропией типа «легкая плоскость». Как и для систем с анизотропией типа «легкая ось», результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

3. Определены температуры Нееля квазиодномерных изотропных магнетиков с помощью комбинации бозонизационного подхода и  $1/z_{\perp}$  разложения, позволяющих выйти за рамки межцепочечного приближения

среднего поля и приводящих к результатам для температур упорядочения и намагниченности основного состояния, согласующимся с их экспериментальными значениями.

Во втором разделе рассмотрены фазовые диаграммы и спектральные свойства двумерных зонных магнетиков. Основные результаты второго раздела суммированы ниже.

1. Определены фазовые диаграммы однозонной модели Хаббарда с использованием метода ренормгруппы. При ван-хововских заполнениях и малых значениях перескока между вторыми соседями  $t'$  доминирует АФМ неустойчивость, при промежуточных  $t'$  возникает сверхпроводимость d-типа, при  $t'/t$  близких к  $1/2$  (предел плоской зоны) – ферромагнетизм. Концентрационная область стабильности антиферромагнетизма достаточно широка, в то время как область стабильности ферромагнетизма узка, за исключением предельного случая  $t'/t=1/2$ . Определена также фазовая диаграмма модели при половинном заполнении и проведено сравнение результатов с другими подходами.

2. Определены фазовые диаграммы обобщенной модели Хаббарда, включающей зарядовое и спиновое взаимодействие между соседними узлами. Показано, что обобщенная модель допускает гораздо большее количество различных типов упорядочения, в числе которых – состояния с волной зарядовой плотности и с орбитальными спиновыми токами, а также состояние с индуцированным взаимодействием расслоением на фазы. Согласно РГ результатам, состояние с орбитальными зарядовыми токами не реализуется в рамках указанной модели.

3. Вычислены собственная энергия и спектральные функции однозонной модели Хаббарда вблизи ферро- и антиферромагнитных неустойчивостей. Показано, что в антиферромагнитном случае собственная энергия и спектральные функции имеют неквазичастичный

вид в точках Ферми поверхности, близких к ВХ точкам  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$ . При этом квазичастичный вес на Ферми поверхности сильно анизотропен и минимален в окрестности точек  $(\pi, 0)$  и  $(0, \pi)$ . В ферромагнитном случае при достаточно низких температурах собственная энергия и спектральные функции имеют неквазичастичный вид на всей Ферми-поверхности, что приводит к квази-расщеплению Ферми-поверхности вблизи ФМ неустойчивости.

**Основные выводы работы** состоят в том, что учет магнитных и сверхпроводящих флуктуаций в низкоразмерных системах является существенным для количественного, а в ряде случаев и качественного описания их свойств. При этом как в локализованных, так и в зонных магнетиках флуктуации приводят к существенной перенормировке наблюдаемых величин. В частности, область существования фаз с дальним магнитным порядком существенно (в несколько раз) сужается по сравнению с простейшими подходами типа теории среднего поля и спин-волновыми теориями.

В локализованных магнетиках продольные спиновые флуктуации, не учитываемые в рамках теории спиновых волн, приводят к логарифмическим поправкам в температурной зависимости (подрешеточной) намагниченности. Хотя указанные поправки и являются субведущими по отношению к «главным» логарифмам в спин-волновой теории, они приводят к существенной перенормировке подрешеточной намагниченности и температуры магнитного фазового перехода, приводя к успешному сравнению результатов с экспериментальными данными.

В зонных магнетиках оказывается существенным взаимное влияние магнитных, сверхпроводящих и зарядовых флуктуаций, приводящее к сужению областей магнитно-упорядоченного основного состояния. Указанное сужение является наиболее сильным вдали от половинного заполнения и предела плоской зоны. При конечных температурах

магнитные и сверхпроводящие флуктуации в зонных системах приводят к подавлению квазичастичных состояний вблизи уровня Ферми и открытию псевдощели или пред-расщеплению Ферми-поверхностей ниже температуры перехода  $T^*$  в режим с сильным ближним порядком, характеризующимся экспоненциально-большой корреляционной длиной.

Таким образом, применение теоретико-полевых методов к исследованию флуктуационных эффектов позволяет адекватно описать указанные явления и достичь хорошего качественного и количественного согласия с экспериментальными данными. При этом принципиально важным является учет перенормировок магнитных и электронных свойств, возникающих благодаря наличию флуктуаций, которые также необходимо учитывать при анализе экспериментальных данных. Для количественного анализа этих эффектов могут быть применены теоретические подходы, разработанные в данной работе.

## **Благодарности**

Автор выражает свою признательность Валентину Юрьевичу Ирхину за долговременное сотрудничество, Михаилу Иосифовичу Кацнельсону – за научное руководство на начальном этапе работы, многократные обсуждения и длительное сотрудничество, Арно Кампфу за сотрудничество и многочисленные обсуждения, Дитеру Волльхарду и Вальтеру Мецнеру за возможность выполнения части научной работы и обсуждения результатов в Институте Физики Университета г. Аугсбург и Макс-Планк Институте г. Штутгарт (Германия), дискуссии в которых позволили улучшить качество многих опубликованных работ, К. Хонеркампу, Т. Энсу и А. Анохину за ценные обсуждения по проблемам применения функциональной ренормгруппы, а также В. Анисимову, Д. Роз, Ю. Райсу, И. Леонову, М. Зекания, Д. Лобаскину, И. Некрасову, З.

Пчелкиной за поддержку и обсуждения. Работа автора частично поддержана грантом партнерского сотрудничества с Макс-Планк Институтом Исследований Твердого Тела, г. Штутгарт, Федеративная Республика Германия и грантом Министерства образования и науки Российской Федерации № 02.740.11.0217.

## Список литературы

1. Allenspach A. Ultrathin films: magnetism on the microscopic scale // J. Magn. Mater. 1994. vol. 129. p. 160.
2. Birgeneau R. J., Gabbe D. R., Jenssen H. P., Kastner M. A., Picone P. J., Thurston T. R., Shirane G., Endoh Y., Sato M., Yamada K., Hidaka Y., Oda M., Enomoto Y., Suzuki M., Murakami T. Antiferromagnetic spin correlations in insulating, metallic, superconducting  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  // Phys. Rev. B. vol. 38, p. 6614 (1988).
3. Birgeneau R. J., Guggenheim H. J., Shirane G. Neutron scattering investigation of phase transitions and magnetic correlations in the two-dimensional antiferromagnets  $\text{K}_2\text{NiF}_4$ ,  $\text{Rb}_2\text{MnF}_4$ ,  $\text{Rb}_2\text{FeF}_4$  // Phys. Rev. B. 1970. vol. 1. p. 2211.
4. Birgeneau R. J., Guggenheim H. J., Shirane G. Spin Waves and Magnetic Ordering in  $\text{K}_2\text{MnF}_4$  // Phys. Rev. B. 1973. vol. 8. p. 304.
5. Loly P. D. The Heisenberg ferromagnet in the self-consistent renormalized spin-wave approximation // J. Phys. C. 1971. vol. 1. p. 1365.
6. Bloch M. Magnon Renormalization in Ferromagnets Near the Curie Point // Phys. Rev. Lett. 1962. vol. 9. p. 286.
7. Rastelli E., Tassi A., Reatto L. Selfconsistently renormalized spin-wave approximation for some two-dimensional magnetic systems // J. Phys. C. 1974. vol. 7. p. 1735 (1974).
8. Arovas D. P., Auerbach A. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models // Phys. Rev. B. 1988. vol. 38. p. 316.
9. Yoshioka D. J. Boson mean field theory of the square lattice Heisenberg model // J. Phys. Soc. Jpn. 1989. vol. 58. p. 3733.

10. Sarker S. Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order // Phys. Rev. B. 1989. vol. 40. p. 5028.
11. Takahashi M. Modified spin-wave theory of a square lattice antiferromagnet // Phys. Rev. B. 1989. vol. 40. p. 2494.
12. Chakravarty S., Halperin B. I., Nelson D. R. Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets at low temperatures // Phys. Rev. B. 1989. vol. 39. p. 2344.
13. Kopietz P., Chakravarty S. Low-temperature behavior of the correlation length and the susceptibility of a quantum Heisenberg ferromagnet in two dimensions // Phys. Rev. B. 1989. vol. 40. p. 4858.
14. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I. Short range order above  $T_N$  in quasi-two-dimensional Heisenberg antiferromagnets Phys. Lett. A. 1991. vol. 157. p. 295
15. Ирхин В. Ю., Катанин А. А., Кацнельсон М. И. Самосогласованные спин-волновые теории квазидвумерных гейзенберговских магнетиков // ФММ 1995. т. 79. №1. стр. 65.
16. Kopietz P. Magnetization and spin-wave velocities in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // Phys. Rev. Lett. 1992. vol. 68. p. 3480.
17. Liu Bang-Gui A nonlinear spin-wave theory of quasi-2D quantum Heisenberg antiferromagnets // J. Phys. Cond. Matt. 1992. vol. 4. p 8339.
18. Барабанов А. Ф., Старых О. А. К вопросу о дальнем порядке в двумерной модели Гейзенберга с фрустрацией // Письма в ЖЭТФ. 1991. т. 51. стр. 271.
19. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I. On the self-consistent spin-wave theory of frustrated Heisenberg antiferromagnets // J. Phys. Cond. Matt. 1992. vol. 4. p. 5227.
20. Xu J. H., Ting C. S. Phase diagrams of the frustrated square Heisenberg lattice based upon a modified spin-wave theory // Phys. Rev. B. 1990. vol. 42. p. 6861.

21. Oguchi T., Kitatani H. Spin-wave theory for a frustrated antiferromagnetic Heisenberg Model on a square lattice // J. Phys. Soc. Jpn. 1990. vol. 59. p. 3322.
22. Nishimori H., Saika Y. Modified spin-wave theory of the two-dimensional frustrated Heisenberg model // J. Phys. Soc. Jpn. 1990. vol. 59. p. 4454.
23. Polyakov A. M. Interaction of Goldstone particles in two dimensions // Phys. Lett. B. 1975. vol. 59. p. 79.
24. Brezin E., Zinn-Justin J. Spontaneous breakdown of continuous symmetries near two dimensions // Phys. Rev. B. 1976. vol. 14 p. 3110 (1976).
25. Nelson D. R., Pelkovitz R. A. Momentum-shell recursion relations, anisotropic spins, and liquid crystals in  $2+\epsilon$  dimensions // Phys. Rev. B. 1977. vol. 16 p. 2191 (1977).
26. Нагаев Э. Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями, М., Наука, 1988.
27. *Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds*, ed. L.J. de Jongh, Cluwer, Dordrecht, 1989.
28. Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems // J. Phys. C. 1973. vol. 6. p. 1181.
29. Jose J. V., Kadanoff L. P., Kirpatrick S., Nelson D. R. Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model // Phys. Rev. B. 1977. vol. 16. p. 1217.
30. Hikami S., Tsuneto T. Phase Transition of Quasi-Two Dimensional Planar System // Progr. Theor. Phys. 1980. vol. 63. p. 387.
31. Haldane F. D. M. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the  $O(3)$  nonlinear sigma model // Phys. Lett. A. 1983. vol. 93 p. 464.

32. Scalapino D. J., Imry Y., Pincus P. Generalized Ginzburg-Landau theory of pseudo-one-dimensional systems // *Phys. Rev. B.* 1975. vol. 11. p. 2042.
33. Schulz H. Dynamics of Coupled Quantum Spin Chains // *Phys. Rev. Lett.* 1996. vol. 77. p. 2790.
34. Essler F. H. L., Tselik A. M., Delfino G. Quasi-one-dimensional spin-1/2 Heisenberg magnets in their ordered phase: correlation functions // *Phys. Rev. B.* 1997. vol. 56. p. 11001.
35. Affleck I. Quantum spin chains and the Haldane gap // *J. Phys.: Cond. Matt.* 1989. vol. 1. p. 3047.
36. Affleck I., Gelfand M. P., Singh R. R. P. A plane of weakly coupled Heisenberg chains: theoretical arguments and numerical calculations // *J. Phys. A.* 1994. vol. 27. p. 7313.
37. Affleck I., Halperin B. I. On a renormalization group approach to dimensional crossover // *J. Phys. A.* vol. 29. p. 2627.
38. Wang Z. Weakly Coupled Antiferromagnetic Quantum Spin Chains // *Phys. Rev. Lett.* 1997. vol. 78. p. 126.
39. Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А. Термодинамика идеального ферромагнетика // *ЖЭТФ* 1967. т. 53. стр. 281.
40. Изюмов Ю. А., Кассан-Оглы Ф. А., Скрыбин Ю. Н. Полевые методы в теории ферромагнетизма, М., Наука, 1974.
41. Изюмов Ю. А., Скрыбин Ю. Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, М., Наука, 1987.
42. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами, М., Мир, 1988.
43. Ирхин В. Ю., Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. Аномалии решеточных свойств зонных магнетиков, обусловленные особенностями электронной структуры // *Письма ЖЭТФ.* 1992. т. 56. стр. 317.

44. Solyom J. The Fermi gas model of one dimensional conductors // Adv. Phys. 1979. vol. 28. p. 201.
45. Scalapino D. J. The case for  $d_{x^2-y^2}$  pairing in the cuprate superconductors // Phys. Rep. 1995. vol. 250. p. 329.
46. Bickers N. E., Scalapino D. J., White S. R. Conserving Approximations for Strongly Correlated Electron Systems: Bethe-Salpeter Equation and Dynamics for the Two-Dimensional Hubbard Model // Phys. Rev. Lett. 1989. vol. 62. p. 961.
47. Zhang S. C. A Unified Theory Based on SO(5) Symmetry of Superconductivity and Antiferromagnetism // Science 1997. vol. 275. p.1089.
48. Schmalian J., Pines D., Stojkovic B. Weak Pseudogap Behavior in the Underdoped Cuprate Superconductors // Phys. Rev. Lett. 1998. vol. 80. p. 3839.
49. Chubukov A., Pines D., and Stojkovic B. Temperature crossovers in cuprates // J. Phys.: Cond. Matt. 1996. vol. 8. p. 10017.
50. Chubukov A., Morr D. Electronic structure of underdoped cuprates // Phys. Rep. 1997. vol. 288. p. 355.
51. Abanov A., Chubukov A. Spin-Fermion Model near the Quantum Critical Point: One-Loop Renormalization Group Results // Phys. Rev. Lett. 2000. vol. 84. p. 5608.
52. Maeno Y., Rice T. M., Sigrist M. The Intriguing Superconductivity of Strontium Ruthenate // Physics Today 2001. vol. 54. p. 42.
53. Mazin I. I., Singh D. J. Ferromagnetic Spin Fluctuation Induced Superconductivity in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  // Phys. Rev. Lett. 1997. vol. 79. p. 733.
54. Murakami S., Nagaosa N., Sigrist M. SO(5) Model of p-wave Superconductivity and Ferromagnetism // Phys. Rev. Lett. 1999. vol. 82. p. 2939.

55. Sidis Y., Braden M., Bourges P., Hennion B., Nishizaki S., Maeno Y., Mori Y. Evidence for Incommensurate Spin Fluctuations in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  // Phys. Rev. Lett. 1999. vol. 83. p. 3320.
56. Kikugawa N., Bergemann C., Mackenzie A. P., Maeno Y. Band-Selective Modification of the Magnetic Fluctuations in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ : Study of Substitution Effects // Phys. Rev. B. 2004. vol. 70. p. 134520.
57. Ino A., Kim C., Nakamura M., Yoshida T., Mizokawa T., Fujimori A., Shen Z.-X., Kakeshita T., Eisaki H., Uchida S. Doping-dependent evolution of the electronic structure of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  in the superconducting and metallic phases // Phys. Rev. B. 2002. vol. 65. p. 094504.
58. Bogdanov P.V., Lanzara A., Zhou X. J., Kellar S.A., Feng D.L., Lu E. D., Eisaki H., Shimoyama J.-I., Kishio K., Hussain Z., Shen Z. X. Photoemission study of Pb doped  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ : A Fermi surface picture // Phys. Rev. B. 2001. vol. 64. p. 180505.
59. Feng D. L., Kim C., Eisaki H., Lu D.H., Damascelli A., Shen K.M., Ronning F., N.P. Armitage, N. Kaneko, M. Greven, J. Shimoyama, K. Kishio, R. Yoshizaki, G.D. Gu, and Z.-X. Shen Electronic excitations near the Brillouin zone boundary of  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  // Phys. Rev. B 2002. vol. 65. p. 220501.
60. Damascelli A., Lu D. H., Shen K. M., Armitage N. P., Ronning F., Feng D. L., Kim C., Shen Z.-X., Kimura T., Tokura Y., Tsukuba T., Mao Q., Maeno Y. Fermi Surface, Surface States, and Surface Reconstruction in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  // Phys. Rev. Lett. 2000. vol. 85. p. 5194.
61. Lin H. Q. and Hirsch J. E. Two-dimensional Hubbard model with nearest- and next-nearest-neighbor hopping // Phys. Rev. B. 1987. vol. 35. p. 3359.
62. Santos R. R. Enhanced pairing in the repulsive Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping // Phys. Rev. B 39, 7259 (1989).

63. Tasaki H. Ferromagnetism in the Hubbard models with degenerate single-electron ground states // *Phys. Rev. Lett.* 1992. vol. 69. p. 1608.
64. Fleck M., Oles A., Hedin L. Magnetic phases near the Van Hove singularity in s- and d-band Hubbard models // *Phys. Rev. B.* 1997. vol. 56. p. 3159.
65. Hlubina R. Phase diagram of the weak-coupling two-dimensional  $t-t'$  Hubbard model at low and intermediate electron density // *Phys. Rev. B.* 1999. vol. 59. p. 9600.
66. Hlubina R., Sorella S., Guinea F. Ferromagnetism in the two dimensional  $t-t'$  Hubbard model at the Van Hove density // *Phys. Rev. Lett.* 1997. vol. 78. p. 1343.
67. Бычков Ю. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. О возможности явлений типа сверхпроводимости в одномерной системе // *ЖЭТФ* 1966. т. 50. стр. 738.
68. Дзялошинский И. Е., Кац Е. И. К теории антиферромагнетизма хрома // *ЖЭТФ* 1972. т. 62. стр. 1104.
69. Дзялошинский И. Е. О сверхпроводимости соединений на основе  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Письма в ЖЭТФ.* 1987. т. 46 (приложение). стр. 110.
70. Дзялошинский И. Е. О сверхпроводящих переходах за счет ван-хововских сингулярностей электронного спектра // *ЖЭТФ.* 1987. т. 93. стр. 1487.
71. Дзялошинский И. Е., Яковенко В. М. Теория слабой связи для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *ЖЭТФ.* 1988. т. 94. стр. 344.
72. Zanchi D., Schulz H. J. Superconducting instabilities of the non-half-filled Hubbard model in two dimensions // *Phys. Rev. B.* 1996. vol. 54. p. 9509.
73. Halboth C. J., Metzner W. Renormalization-group analysis of the two-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. B.* 2000. vol. 61. p. 7364.

74. Honerkamp C., Salmhofer M., Furukawa N., Rice T. M. Breakdown of the Landau-Fermi liquid in two dimensions due to umklapp scattering // Phys. Rev. B. 2001. vol. 63. p. 035109.
75. Honerkamp C., Salmhofer M. Magnetic and superconducting instabilities of the Hubbard model at the Van Hove filling // Phys. Rev. Lett. 2001. vol. 87. p. 187004.
76. Kampf A. P., Schrieffer J. R. Pseudogaps and the spin-bag approach to high-Tc superconductivity // Phys. Rev. B. 1990. vol. 41. p. 6399.
77. Schmalian J., Pines D., Stojkovic B. Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors: General theory and quasiparticle properties // Phys. Rev. B. 1999. vol. 60. p. 667.
78. Chubukov A. V., Schmalian J. Temperature variation of the pseudogap in underdoped cuprates // Phys. Rev. B. 1998. vol. 57. p. 11085;
79. Abanov Ar., Chubukov A. V., Schmalian J. Quantum-critical theory of spin-fermion model // Adv. Phys. 2003. vol. 52. p. 119.
80. Emery V., Kivelson S. Superconductivity in Bad Metals // Phys. Rev. Lett. 1995. vol. 74. p. 3253.
81. Wen X.-G., Lee P. A. Theory of Underdoped Cuprates // Phys. Rev. Lett. 1996. vol. 76. p. 503.
82. Varma C. M. Non-Fermi-liquid states and pairing instability of a general model of copper oxide metals // Phys. Rev. B. 1997. vol. 55. p. 14554.
83. Deisz J., Hess D.W., Serene J.W. Incipient Antiferromagnetism and Low-Energy Excitations in the Half-Filled Two-Dimensional Hubbard Model // Phys. Rev. Lett. 1996. vol. 76. p. 1312.
84. Altmann J., Brening W., Kampf A. P. Anisotropic scattering rates and antiferromagnetic precursor effects in the t-t'-U Hubbard model // Eur. Phys. J. B. 2000. vol. 18. p. 429.

85. Vilk J., Tremblay A.-M. S. Non-perturbative many-body approach to the Hubbard model and single-particle pseudogap // J. Phys. I. 1997. vol. 7. p. 1309;
86. Moukouri S., Allen S., Lemaz F., Kzung B., Pollin D., Vilk J., Tremblay A.M.-S. Many-body theory versus simulations for the pseudogap in the Hubbard model // Phys. Rev. B. 2000. vol. 61. p. 7887.
87. Huscroft C., Jarrell M., Maier T., Tavildarzadeh A. N. Pseudogaps in the 2D Hubbard Model // Phys. Rev. Lett. 2001. vol. 86. p. 139.
88. Vekic M., White S. R. Pseudogap formation in the half-filled Hubbard model // Phys. Rev. B. 1993. vol. 47. p. 1160.
89. Brinkman W. F., Engelsberg S. Spin-Fluctuation Contributions to the Specific Heat // Phys. Rev. 1968. vol. 169. p. 417.
90. Дзялошинский И. Е., Кондратенко П. С. К теории слабого ферромагнетизма ферми-жидкости // ЖЭТФ 1976. т. 70. стр. 1987.
91. Stamp P. C. E. Spin fluctuation theory in condensed quantum system // J. Phys. F. vol. 15. p. 1829.
92. Doniach S., Engelsberg S. Low-Temperature Properties of Nearly Ferromagnetic Fermi Liquids // Phys. Rev. Lett. 1966. vol. 17. p. 750.
93. Nagaosa N., Lee P. A. Normal-state properties of the uniform resonating-valence-bond state // Phys. Rev. Lett. 1990. vol. 64. p. 2450.
94. Sachdev S. *Quantum phase transitions*, Cambridge University Press, 1999.
95. Hankevych V., Kyung B., Tremblay A.-M.S. Weak ferromagnetism and other instabilities of the two-dimensional t-t' Hubbard model at van Hove fillings // Phys. Rev. B. 2003. vol. 68. p. 214405.
96. Monthoux P. Migdal's theorem and the pseudogap // Phys. Rev. B. 2003. vol. 68. p. 064408.
97. Bickers N. E., White S. R. Conserving approximations for strongly fluctuating electron systems. II. Numerical results and parquet extension // Phys. Rev. B. 1991. vol. 43. p. 8044.

98. Janis V. The Hubbard model at intermediate coupling: renormalization of the interaction strength // *J. Phys.: Cond. Mat.* 1998. vol. 10. p. 2915.
99. Hertz J. A., Edwards D. M. Electron-magnon interactions // *J. Phys. F.* 1973. vol. 3. p. 2174.
100. Dyson F. General theory of spin-wave interactions // *Phys. Rev.* 1956. vol. 102. p.1217.
101. Малеев С. В. Рассеяние медленных нейтронов в ферромагнетиках // *ЖЭТФ.* 1957. т. 33. стр. 1010.
102. Anderson P.W. An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State // *Phys. Rev.* 1952. vol. 86. p. 694.
103. Тябликов С. В. *Методы квантовой теории магнетизма*, М. Наука, 1975.
104. Каганов М. И., Чубуков А. Взаимодействующие магноны // *УФН* 1987. т. 153. стр. 537.
105. Baxter R. J. *Точно решаемые модели в статистической механике*, Academic Press, New York, 1982.
106. Tyc S., Halperin B. I. Damping of spin waves in a two-dimensional Heisenberg antiferromagnet at low temperatures// *Phys. Rev. B* 1990. vol. 42. p. 2096.
107. Kopietz P., Castilla G. Magnon damping, spin stiffness, and dynamic scaling in the two-dimensional quantum Heisenberg ferromagnet at low temperatures // *Phys. Rev. B* 43, 11100 (1991).
108. Klauder J. R. Path integrals and stationary-phase approximations // *Phys. Rev. D.* 1979. vol. 19. p. 2349.
109. Auerbach A., *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York, 1994
110. Chubukov A. V., Sachdev S., Ye J. Theory of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets with a nearly critical ground state // *Phys. Rev. B.* 1994. vol. 49. p. 11919.

111. Amit D. *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore, 1984.
112. Ма S.-К. *Современная теория критических явлений*, М., Мир, 1980.
113. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., *Электродинамика сплошных сред*, М. Наука, 1982.
114. Keimer B., Aharony A., Auerbach A., Birgeneau R. J., Cassanho A., Endoh Y., Erwin R. W., Kastner M. A., Shirane G. Néel transition and sublattice magnetization of pure and doped  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. B*. 1992. vol. 45. p. 7430.
115. Aeppli G., Hayden S. M., Mook H. A., Fisk Z., Cheong S.-W., Rytz D., Remeika J. P., Espinosa G. P., Cooper A. S. Magnetic dynamics of  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. Lett.* 1989. vol. 62. p. 2052.
116. Peters C. J., Birgeneau R. J., Kastner M. A., Yoshizawa H., Endoh Y., Tranquada J., Shirane G., Hidaka Y., Oda M., Suzuki M., Murakami T. Two-dimensional zone-center spin-wave excitations in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // *Phys. Rev. B*. 1988. vol. 37. p. 9761.
117. Levanjuk A., Garcia N. The two-dimensional Heisenberg ferromagnet with various types of interactions: temperature dependence of magnetic parameters // *J. Phys.: Cond. Matt.* 1992. vol. 4. p. 10277.
118. Affleck I. Model for Quasi-One-Dimensional Antiferromagnets: Application to  $\text{CsNiCl}_3$  // *Phys. Rev. Lett.* 1989. vol. 62. p. 474.
119. Sachdev S. *Low Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists*, World Scientific, Singapore, 1995.
120. Tsvetlik A. M. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
121. Affleck I., Gepner D., Schulz H. J., Ziman T. Critical behaviour of spin-s Heisenberg antiferromagnetic chains: analytic and numerical results // *J. Phys. A*. 1989. vol. 22. p. 511.

122. Barzykin V., Affleck I. Finite-size scaling for the spin- Heisenberg antiferromagnetic chain // *J. Phys. A.* 1999. vol. 32. p. 867.
123. Barzykin V. Temperature-dependent logarithmic corrections in the spin-1/2 Heisenberg chain // *J. Phys.: Cond. Matt.* 2000. vol. 12. p. 2053.
124. Chung S. G., Chang Y. C. Thermodynamics of the massive Thirring-sine-Gordon model: the Bethe ansatz variational method // *J. Phys. A.* 1987. vol. 20. p. 2875.
125. Starykh O. A., Sandvik A. W., Singh R. R. P. Dynamics of the spin-Heisenberg chain at intermediate temperatures // *Phys. Rev. B.* 1997. vol. 55. p. 14953.
126. Schulz H. J. Phase diagrams and correlation exponents for quantum spin chains of arbitrary spin quantum number // *Phys. Rev. B.* 1986. vol. 34. p. 6372.
127. Satija S. K., Axe J. D., Shirane G., Yoshizawa H., Hirakawa K. Neutron scattering study of spin waves in one-dimensional antiferromagnet  $\text{KCuF}_3$  // *Phys. Rev. B.* 1980. vol. 21. p. 2001.
128. Keren A., Le L. P., Luke G. M., Sternlieb B. J., Wu W. D., Uemura Y. J., Tajima S., Uchida S. Muon-spin-rotation measurements in infinite-layer and infinite-chain cuprate antiferromagnets:  $\text{Ca}_{0.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_2$  and  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  // *Phys. Rev. B.* 1993. vol. 48. p. 12926.
129. Ami T., Crawford M. K., Harlow R. L., Wang Z. R., Johnston D. C., Huang Q., Erwin R. W. Magnetic susceptibility and low-temperature structure of the linear chain cuprate  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  // *Phys. Rev. B.* 1995. vol. 51. p. 5994.
130. Kojima K. M., Fudamoto Y., Larkin M., Luke G. M., Merrin J., Nachumi B., Uemura Y. J., Motoyama N., Eisaki H., Uchida S., Yamada K., Endoh Y., Hosoya S., Sternlieb B. J., Shirane G. Reduction of Ordered Moment and Néel Temperature of Quasi-One-Dimensional Antiferromagnets  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  and  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  // *Phys. Rev. Lett.* 1997. vol. 78. p. 1787.

131. Zinn-Justin J. Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1989.
132. Судаков В. В. Рассеяние мезона на мезоне в квантовой мезонной теории поля // ДАН СССР. 1956. т. 111. стр. 338.
133. Shankar R. Renormalization-group approach to interacting fermions // Rev. Mod. Phys. 1994. vol. 66. p. 129.
134. Furukawa N., Rice T.M., Salmhofer M. Truncation of a Two-Dimensional Fermi Surface due to Quasiparticle Gap Formation at the Saddle Points // Phys. Rev. Lett. 1998. vol. 81. p. 3195.
135. Kondo H., Moriya T. On the Metal-Insulator Transition in a Two-Dimensional Hubbard Model // J. Phys. Soc. Jpn. 1996. vol. 65. p. 2559.
136. Duffy D., Moreo A. Indications of a metallic antiferromagnetic phase in the two-dimensional U-t-t' model // Phys. Rev. B. 1997. vol. 55. p. R676.
137. Hofstetter W., Vollhardt D. Frustration of antiferromagnetism in the t-t'-Hubbard model at weak coupling // Ann. Physik. 1998. vol. 7. p. 48.
138. Kashima T., Imada M. Magnetic and Metal-Insulator Transitions through Bandwidth Control in Two-Dimensional Hubbard Models with Nearest and Next-Nearest Neighbor Transfers // J. Phys. Soc. Jpn. 2001. vol. 70. p. 3052.
139. Hertz J. A. Quantum-critical phenomena // Phys. Rev. B. 1976. vol. 14. p. 1165.
140. Millis A. J. Effect of a nonzero temperature on quantum critical points in itinerant fermion systems // Phys. Rev. B. 1993. vol. 48. p. 7183.
141. Mishra S. G., Sreeram P. A. Fluctuation-induced non-Fermi-liquid behavior near a quantum phase transition in itinerant systems // Phys. Rev. B. 1998. vol. 57. p. 2188.
142. Guinea F., Gomez-Santos G., Arovas D. P. Phase separation and enhanced charge-spin coupling near magnetic transitions // Phys. Rev. B. 2000. vol. 62. p. 91.

143. Arrigoni E., Strinati G. C. Doping induced incommensurate antiferromagnetism in a Mott-Hubbard insulator // Phys. Rev. B. 1991. vol. 44. p. 7455.
144. Timirgazin M. A., Arzhnikov A. K. Conditions for the spiral state in itinerant magnets // Solid State Phenom. 2009. vol. 152. p. 559.
145. Halperin B. I., Rice T. M. The excitonic state at the semiconductor-semimetal transition // Solid State Phys. 1968. vol. 21. p. 115.
146. Nersesyan A. A., Vacnadze G. E. Low temperature termodynamics of the twoorbital antiferromagnet // J. Low Temp. Phys. 1989. vol. 77. p. 293.
147. Nayak C. Density-wave states of nonzero angular momentum // Phys. Rev. B. 2000. vol. 62. p. 4880.
148. Nersesyan A. A., Japaridze G. I., Kimeridze I. G. Low-temperature magnetic properties of a two-dimensional spin nematic state // J. Phys. Cond. Matt. 1991. vol. 3. p. 3353.
149. Андреев А. Ф., Гришук И. А. Спиновые нематики // ЖЭТФ. 1984. т. 87. стр. 467.
150. Chandra P., Coleman P., Larkin A. I. A quantum fluids approach to frustrated Heisenberg models // J. Phys. Cond. Matt. 1990. vol. 2. p. 7933.
151. Chandra P., Coleman P. Quantum spin nematics: Moment-free magnetism // Phys. Rev. Lett. 1991. vol. 66. p. 100.
152. Markiewicz R. S., Vaughn M. T. Classification of the Van Hove scenario as an SO(8) spectrum-generating algebra // Phys. Rev. B. 1998. vol. 57. p. R14052.
153. Vidberg H. J., Serene J. W. Solving the Eliashberg equations by means of N-point Pade approximants // J. Low Temp. Phys. 1977. vol. 29. p. 179.
154. Metzner W., Vollhardt D. Correlated Lattice Fermions in  $d=\infty$  Dimensions // Phys. Rev. Lett. 1989. vol. 62. p. 324;

155. Georges A., Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions // Phys. Rev. B. 1992. vol. 45. p. 6479;
156. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys. 1996. vol. 68. p. 13.
157. Hettler M. H., Tahvildar-Zadeh A. N., Jarrell M., Pruschke T., Krishnamurthy H. R. Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems // Phys. Rev. B. 1998. vol. 58. p. 7475.
158. Gonzalez J., Guinea F., Vozmediano M. A. H. Renormalization-group approach to the normal state of copper-oxide superconductors // Nucl. Phys. B. 1997. vol. 485. p. 694.
159. Bloom P. Two-dimensional Fermi gas // Phys. Rev. B. 1975. vol. 12. p. 125.
160. Metzner W., Castellani C., di Castro C. Fermi systems with strong forward scattering // Adv. Phys. 1998. vol. 47. p. 317.
161. Yoshida T., Zhou X. J., Sasagawa T., Yang W. L., Bogdanov P. V., Lanzara A., Hussain Z., Mizokawa T., Fujimori A., Eisaki H., Shen Z.-X., Kakeshita T., Uchida S. Metallic Behavior of Lightly Doped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  with a Fermi Surface Forming an Arc // Phys. Rev. Lett. 2003. vol. 91. p. 027001.
162. Kaminski A., Fretwell H. M., Norman M. R., Randeria M., Rosenkranz S., Chatterjee U., Campuzano J. C., Mesot J., Sato T., Takahashi T., Terashima T., Takano M., Kadowaki K., Li Z. Z., Raffy H. Momentum anisotropy of the scattering rate in cuprate superconductors // Phys. Rev. B. 2005. vol. 71. p. 014517.
163. Dessau D. S., Saitoh T., Park C.-H., Shen Z.-X., Villeda P., Hamada N., Moritomo Y., Tokura Y.  $k$ -Dependent Electronic Structure, a Large "Ghost" Fermi Surface, and a Pseudogap in a Layered Magnetoresistive Oxide // Phys. Rev. Lett. 1998. vol. 81. p. 192.

164. Saitoh T., Dessau D. S., Moritomo Y., Kimura T., Tokura Y., Hamada N. Temperature-dependent pseudogaps in colossal magnetoresistive oxides // *Phys. Rev. B.* 2000. vol. 62. p. 1039.
165. Aliaga H., Magnoux D., Moreo A., Poilblanc D., Yunoki S., Dagotto E. Theoretical study of half-doped models for manganites: Fragility of CE phase with disorder, two types of colossal magnetoresistance, and charge-ordered states for electron-doped materials // *Phys. Rev. B.* 2003. vol. 68. p. 104405.
166. Moreo A., Yunoki S., Dagotto E. Pseudogap Formation in Models for Manganites // *Phys. Rev. Lett.* 1999. vol. 83. p. 2773.

## **Список публикаций по теме диссертации**

- A1. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I.  $1/N$  expansion for critical exponents of magnetic phase transitions in the  $CP^{N-1}$  model for  $2 < d < 4$  // *Phys. Rev. B.* 1996. vol. 54. p. 11953.
- A2. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Critical behavior and the Néel temperature of quantum quasi-two-dimensional Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* 1997. vol. 55. p. 12318.
- A3. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Thermodynamics of quantum layered magnets with a weak easy-axis anisotropy // *Phys. Lett. A.* 1997. vol. 232. p. 143.
- A4. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Thermodynamics of isotropic and anisotropic layered magnets: Renormalization-group approach and  $1/N$  expansion // *Phys. Rev. B.* 1998. vol. 57. p. 379.
- A5. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Quantum phase transitions and thermodynamic properties in highly anisotropic magnets // *Phys. Rev. B.* 1998. vol. 58. p. 5509.

- A6. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I. Self-consistent spin-wave theory of layered Heisenberg magnets // *Phys. Rev. B.* 1999. vol. 60. p. 1082.
- A7. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Kosterlitz-Thouless and magnetic transition temperatures in layered magnets with a weak easy-plane anisotropy // *Phys. Rev. B.* 1999. vol. 60. p. 2990.
- A8. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Calculation of Neel temperature for  $S=1/2$  Heisenberg quasi-one-dimensional antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* 2000. vol. 61. p. 6757-6764.
- A9. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I. Effects of van Hove singularities on magnetism and superconductivity in the t-t' Hubbard model: A parquet approach // *Phys. Rev. B.* 2001. vol. 64. p. 165107.
- A10. Irkhin V. Yu., Katanin A. A. Violation of the Fermi-liquid picture in two-dimensional systems owing to Van Hove singularities // *Phys. Rev. B.* 2001. vol. 64. p. 205105.
- A11. Irkhin V. Yu., Katanin A. A., Katsnelson M. I. Robustness of the Van Hove Scenario for High-Tc Superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 2002. vol. 89. p. 076401
- A12. Katanin A. A., Kampf A. P. Spin excitations in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ : Consistent description by inclusion of ring exchange // *Phys. Rev. B.* 2002. vol. 66. p. 100403.
- A13. Katanin A. A., Kampf A. P. Theoretical analysis of magnetic Raman scattering in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ : Two-magnon intensity with the inclusion of ring exchange // *Phys. Rev. B.* 2003. vol. 68. p. 195101.
- A14. Kampf A. P., Katanin A. A., Competing phases in the extended U-V-J Hubbard model near the Van Hove fillings // *Phys. Rev. B.* 2003. vol. 67. p. 125104.
- A15. Katanin A. A., Kampf A. P. Renormalization group analysis of magnetic and superconducting instabilities near van Hove band fillings // *Phys. Rev. B.* 2003. vol. 68. p. 195101.

- A16. Kampf A. P., Katanin A. A. Spin dynamics in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ : consistent description by the inclusion of ring exchange // *Physica C*. 2004. vol. 408. p. 311.
- A17. Katanin A. A. Fulfillment of Ward identities in the functional renormalization group approach // *Phys. Rev. B*. 2004. vol. 70. p. 115109 (2004).
- A18. Katanin A. A., Kampf A. P. Quasiparticle Anisotropy and Pseudogap Formation from the Weak-Coupling Renormalization Group Point of View // *Phys. Rev. Lett.* 2004. vol. 93. p. 106406.
- A19. Katanin A. A., Kampf A. P., Irkhin V. Yu. Anomalous self-energy and fermi surface quasisplitting in the vicinity of a ferromagnetic instability // *Phys. Rev. B*. 2005. vol. 71. p. 085105.
- A20. Katanin A. A., Kampf A. P. Order parameter symmetries for magnetic and superconducting instabilities: Bethe-Salpeter analysis of functional renormalization-group solutions // *Phys. Rev. B*. 2005. vol. 72. p. 205128.
- A21. Katanin A. A. Electronic self-energy and triplet pairing fluctuations in the vicinity of a ferromagnetic instability in 2D systems: the quasistatic approach // *Phys. Rev. B*. 2005. vol. 72. p. 035111.
- A22. Катанин А. А., Ирхин В. Ю. Магнитный порядок и спиновые флуктуации в низкоразмерных системах УФН. 2007. т. 177. стр. 639.
- A23. Pardini T., Singh R. R. P., Katanin A., Sushkov O. P. Spin-stiffness of anisotropic Heisenberg model on square lattice and possible mechanism for pinning of the electronic liquid crystal direction in YBCO *Phys. Rev. B*. 2008. vol. 78. p. 024439.
- A24. Toschi A., Katanin A. A., Held K. Dynamical vertex approximation - a step beyond dynamical mean field theory // *Phys. Rev. B*. 2007. vol. 75. p. 045118.
- A25. Held K., Toschi A., Katanin A. A. Dynamical vertex approximation – an introduction // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 2008. vol. 176. p. 117.

- A26. Katanin A. A., Toschi A., Held K. Comparing pertinent effects of antiferromagnetic fluctuations in the two and three dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B. 2009. vol. 80. p. 075104.
- A27. Igoshev P. A., Katanin A. A., Yamase H., Irkhin V. Yu. Spin fluctuations and ferromagnetic order in two-dimensional itinerant systems with Van Hove singularities // Journ. Magn. Mater. 2009. vol. 321. p. 899.
- A28. Katanin A. A. The quantum critical behavior of antiferromagnetic itinerant systems with van Hove singularities of electronic spectrum // Phys. Rev. B 2010. vol. 81. p. 165118.