

Особенности термодинамики двумерных гейзенберговских магнетиков на треугольной решетке

Т. Н. Анцыгина

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: antsygina@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 5 февраля 1999 г.

Теоретически исследованы термодинамические и магнитные свойства двумерных гейзенберговских ферро- и антиферромагнетиков со спином $1/2$ на треугольной решетке. Использован формализм двухвременных функций Грина и процедура расщепления, явно учитывающая наличие ближнего порядка и не предполагающая существование дальнего порядка в системе. Энергия, теплоемкость и восприимчивость магнетиков выражаются через корреляционные функции, для которых получена самосогласованная система уравнений. Система решена численно во всей области температур. В пределе высоких и низких температур для перечисленных величин построены аналитические асимптотики. Проведено сопоставление результатов работы с аналогичными данными для квадратных решеток, а также с известными в литературе высокотемпературными разложениями.

Теоретично досліджено термодинамічні та магнітні властивості двовимірних гейзенберґівських феро- та антиферромагнетиків із спіном $1/2$ на трикутній ґратці. Використовано формалізм двочасових функцій Гріна та процедуру розщеплення, що явно ураховує наявність близького порядку та не припускає існування дальнього порядку у системі. Енергія, теплоємність та сприйнятливість магнетиків виражаються через кореляційні функції, для яких отримано самоузгоджену систему рівнянь. Систему розв'язано чисельно в усій області температур. В границі високих та низьких температур для перелічених величин побудовано аналітичні асимптотики. Проведено порівнювання результатів роботи з аналогічними даними для квадратних ґраток, а також з відомими у літературі високотемпературними розкладами.

PACS: 75.10.Jm

1. Введение

Теория низкоразмерных магнитных систем является на сегодняшний день весьма обширным и детально разработанным разделом физики твердого тела [1,2]. Тем не менее теоретические исследования в этой области сохраняют неизменную актуальность как в связи с наличием ряда нерешенных принципиальных проблем, так и с появлением в последние годы новых экспериментальных результатов, относящихся к термодинамике таких систем. В большинстве практически важных случаев описание наблюдаемой физической картины может быть с успехом выполнено в рамках традиционной модели Гейзенберга. Наиболее полно исследован одномерный случай (см., например, [2]). При анализе двумерных (2D) сис-

тем основное внимание уделялось квадратным решеткам [1–5] в связи с описанием свойств высокотемпературных сверхпроводников, которые в нелегированном состоянии представляют собой двумерные антиферромагнитные изоляторы. Термодинамика двумерных магнетиков на треугольной решетке изучена в меньшей степени. В последние годы, однако, возник повышенный интерес к системам такого рода в связи с активными экспериментальными исследованиями пленок ^3He на графите [6–10], физические свойства которых в милликельвиновой области температур целиком определяются динамикой подсистемы ядерных спинов на треугольной решетке.

Для адекватной интерпретации упомянутых экспериментальных результатов необходимо знание термодинамических функций магнетика во

всей области температур. В то же время для спиновых систем на треугольной решетке известны лишь высокотемпературные разложения [11] и асимптотики при $T \rightarrow 0$ для ферромагнитного случая [5]. Таким образом, представляется актуальным получение теоретических результатов, описывающих с единой точки зрения поведение обсуждаемых систем во всей области температур.

В настоящей работе теоретически рассчитана теплоемкость и магнитная восприимчивость $2D$ спиновых ферро- и антиферромагнитных (ФМ и АФМ) систем со спином $1/2$ на треугольной решетке в рамках модели Гейзенберга. Построены аналитические асимптотики для внутренней энергии, теплоемкости и магнитной восприимчивости в пределе низких и высоких температур. Проведено сопоставление полученных результатов с аналогичными данными для квадратных решеток.

2. Постановка задачи и основные уравнения

Рассмотрим гейзенберговскую систему со спином $S = 1/2$, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{f}, \delta} \mathbf{S}_{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{f}+\delta}, \quad (1)$$

где J — обменная константа ($J > 0$ в ферромагнитном и $J < 0$ в антиферромагнитном случае); $\mathbf{S}_{\mathbf{f}}$ — оператор спина на узле \mathbf{f} , а δ — вектор,

задающий координаты ближайших соседей. Специфика низкоразмерных изотропных магнитных систем состоит в том, что в них при любых конечных температурах отсутствует дальний порядок (теорема Мермина — Вагнера [12]), так что термодинамическое среднее $\langle S^z \rangle = 0$. Таким образом, теория должна быть построена в терминах величин, описывающих ближний порядок, т.е. в терминах корреляционных функций. Такая схема расчета для одномерных систем была предложена в [13] и обобщена в [3] на случай $2D$ магнетиков на квадратных решетках. Ей же мы будем следовать здесь при рассмотрении треугольной решетки.

Метод расчета основан на формализме двухвременных функций Грина [14] и состоит в следующем. Уравнение движения для фурье-трансформант по времени функции Грина $\langle\langle S_{\mathbf{f}}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega}$ имеет вид

$$\omega \langle\langle S_{\mathbf{f}}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} = iJ \sum_{\delta} \left(\langle\langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^y | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} - \langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^x | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} \right). \quad (2)$$

Уравнения для $\langle\langle S_{\mathbf{f}}^x | S_{\mathbf{f}'}^x \rangle\rangle_{\omega}$ и $\langle\langle S_{\mathbf{f}}^y | S_{\mathbf{f}'}^y \rangle\rangle_{\omega}$ получаются из (2) циклической перестановкой. Далее необходимо выписать уравнения для функций, входящих в правую часть (2) (здесь мы приведем для краткости только одно из них):

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^y | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} = & \frac{i}{2\pi} \left(\Delta_{\mathbf{f}+\delta, \mathbf{f}'} \langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^x \rangle - \Delta_{\mathbf{f}, \mathbf{f}'} \langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^y \rangle \right) + iJ \sum_{\delta'} \left(\langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} - \right. \\ & \left. - \langle\langle S_{\mathbf{f}}^z S_{\mathbf{f}+\delta}^y | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} + \langle\langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} - \langle\langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'+\delta}^z \rangle\rangle_{\omega} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

($\Delta_{\mathbf{f}, \mathbf{f}'}$ — символ Кронекера). На этом втором шаге произведем расщепление высших функций в правой части (3). Для иллюстрации процедуры расщепления рассмотрим, например, первое слагаемое под знаком суммы по δ' . Перепишем это слагаемое в тождественном виде,

$$\begin{aligned} \langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} = & \Delta_{\delta, \delta'} \langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} + \\ & + (1 - \Delta_{\delta, \delta'}) \langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega}, \end{aligned} \quad (4)$$

явно выделив его значения при совпадающих ($\delta = \delta'$) и несовпадающих ($\delta \neq \delta'$) значениях δ и δ' . Поскольку для спина $1/2$ справедливо равенство $S^z S^y = -\frac{i}{2} S^x$, первое слагаемое в правой части (4) равно

$$\Delta_{\delta, \delta'} \langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} = -\frac{i}{2} \Delta_{\delta, \delta'} \langle\langle S_{\mathbf{f}}^x S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} \quad (5)$$

и, таким образом, сводится к функции того же типа, что и функция в левой части (3). Во втором же слагаемом правой части (4) понижение порядка функций Грина может быть достигнуто только в результате расщепления. Следуя методу, предложенному в [13], мы произведем расщепление по схеме

$$\langle\langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega} \rightarrow \alpha \langle S_{\mathbf{f}}^y S_{\mathbf{f}+\delta}^y \rangle \langle\langle S_{\mathbf{f}+\delta}^z | S_{\mathbf{f}'}^z \rangle\rangle_{\omega}. \quad (6)$$

Здесь, в отличие от стандартного способа расщепления, вводится коэффициент α , который подбирается таким образом, чтобы удовлетворялось кинематическое соотношение

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle = S(S + 1) = 3/4 . \quad (7)$$

Отметим, что этот нестандартный прием расцепления оказывается весьма эффективным по сравнению с общепринятым способом, при котором $\alpha \equiv 1$. В частности, выполнение условия (7) автоматически приводит к такой температурной зависимости корреляционных функций [13,3], которая следует из прямого высокотемпературного разложения.

Применяя описанную выше процедуру расцепления ко всем высшим функциям Грина, фигурирующим в правой части (3), мы получим замкнутую систему уравнений, в которую войдут корреляторы (ν пробегает значения x, y, z)

$$c_1 = 4 \langle S_f^{\nu} S_{f+\delta}^{\nu} \rangle ; \quad (8)$$

$$c_2 = 4 \langle S_f^{\nu} S_{f+\delta+\delta'}^{\nu} \rangle ; \quad \delta \neq -\delta' , \quad (9)$$

возникающие в процессе расцепления. Функция c_1 , как следует из определения (8), учитывает корреляции спина в узле f с соседями, расположенными в первой координационной сфере. Вторая корреляционная функция c_2 описывает корреляции между спинами, находящимися на расстоянии двух шагов вдоль векторов трансляции δ . Начиная с этого момента тип рассматриваемой решетки играет принципиальную роль. Так, в случае квадратной решетки условие $\delta \neq -\delta'$ оказывается необходимым и достаточным для однозначного определения коррелятора (9), поскольку при таком условии после двух шагов в этой решетке мы обязательно выйдем за пределы первой координационной сферы. В случае же треугольной решетки имеются пути, состоящие из двух шагов, которые могут привести к спину в первой координационной сфере, что соответствует корреляциям между ближайшими соседями, уже учтенным при записи c_1 . Таким образом, при определении c_2 на треугольной решетке в дополнение к (9) необходимо потребовать выполнения также условия

$$\delta + \delta' \neq \delta'' . \quad (10)$$

Отметим, что в случае как квадратной, так и треугольной решетки функция (9) описывает корреляции со всеми соседями, расположенными как во второй, так и в третьей координационных сферах. Условие (10) должно быть корректно учтено при вычислении соответствующих сумм по δ' , возникающих в правой части (3) после расцепления.

Выполним преобразование Фурье по координатам для $\langle \langle S_f^z | S_f^z \rangle \rangle_{\omega}$ и определим фурье-трансформанты функции Грина:

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \sum_f \langle \langle S_f^z | S_f^z \rangle \rangle_{\omega} \exp(i\mathbf{k}f) . \quad (11)$$

В результате решения системы уравнений для функций Грина получаем

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Jz c_1}{4\pi} \frac{1 - \gamma_{\mathbf{k}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2} . \quad (12)$$

Здесь

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} \exp(i\mathbf{k}\delta) \quad (13)$$

(z — координационное число, $z = 6$ для треугольной и $z = 4$ для квадратной решеток),

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = \frac{J^2 z}{2} (1 - \gamma_{\mathbf{k}}) [\Delta + \tilde{c}_1 z (1 - \gamma_{\mathbf{k}})] , \quad (14)$$

$$\Delta = 1 - 5\tilde{c}_1 + 3\tilde{c}_2 , \quad (15)$$

а также $\tilde{c}_i = \alpha c_i$ ($i = 1, 2$). Воспользовавшись спектральными соотношениями для функций Грина [14], приходим к следующей системе уравнений для определения функций α , \tilde{c}_1 и \tilde{c}_2 :

$$\alpha = \frac{Jz\tilde{c}_1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) ; \quad (16)$$

$$1 = \frac{Jz}{N} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) ; \quad (17)$$

$$\tilde{c}_2 = \frac{Jz\tilde{c}_1}{3N} \sum_{\mathbf{k}} f(\gamma_{\mathbf{k}}) g(\mathbf{k}) , \quad (18)$$

где N — полное число узлов,

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1 - \gamma_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \operatorname{cth} \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2T} ; \quad (19)$$

а функция $f(\gamma_{\mathbf{k}})$ в случае треугольной решетки имеет вид

$$f(\gamma_{\mathbf{k}}) = 6\gamma_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}} - 1 . \quad (20)$$

Система уравнений (16)–(18) для двумерного магнетика на треугольной решетке имеет ту же структуру, что и уравнения для α , \tilde{c}_1 и \tilde{c}_2 в случае квадратной решетки [3]. Это сходство, однако, оказывается лишь формальным. Принципиальное различие между этими двумя системами состоит не только в различных значениях координационных чисел, но прежде всего в характере структурного фактора $\gamma_{\mathbf{k}}$, а также в виде функции $f(\gamma_{\mathbf{k}})$,

которая для квадратной решетки определяется как [3]

$$f(\gamma_{\mathbf{k}}) = 4\gamma_{\mathbf{k}}^2 - 1. \quad (21)$$

Как будет видно ниже, указанные различия приводят к существенно разному поведению термодинамических функций для решеток двух типов.

3. Асимптотическое поведение корреляционных функций в пределе высоких и низких температур

Система уравнений (16)–(18) для функций α , \tilde{c}_1 и \tilde{c}_2 имеет формально одинаковый вид для ФМ и АФМ случаев, однако ее конкретный анализ оказывается существенно различным в зависимости от знака обменной константы J , в частности, знаком J определяется знак корреляционной функции \tilde{c}_1 . Решение указанной системы при произвольных температурах может быть получено только численными методами. Аналитическое решение удастся получить лишь в пределе высоких и низких температур. Ниже будут найдены асимптотики решений при $T \gg |J|$ и $T \rightarrow 0$ для обоих типов решеток. Удобно ввести параметр $\theta = T/J$, который может быть как положительным, так и отрицательным в зависимости от знака J .

В области высоких температур ($|\theta| \gg 1$) система уравнений решается разложением по обратным степеням параметра θ . При этом все вычисления для обоих типов решеток, а также для ФМ и АФМ систем, полностью аналогичны. Ограничиваясь членами порядка θ^{-2} , приходим к следующему результату:

$$\alpha = 1 + \frac{A}{\theta}; \quad \tilde{c}_1 = \frac{1}{4\theta} \left(1 + \frac{2A}{\theta} \right); \quad \tilde{c}_2 = \frac{5}{48\theta^2}, \quad (22)$$

где введено обозначение

$$A = \frac{z-5}{4}. \quad (23)$$

Как видно из (22), выражения для ФМ и АФМ отличаются знаком обменной константы J , а результаты для треугольной и квадратной решеток в указанном приближении различаются значением параметра A , содержащим координационное число z .

Расчет асимптотик в низкотемпературном пределе в отличие от высокотемпературного гораздо более сложен и имеет специфические особенности как для ФМ или АФМ систем, так и для треугольной и квадратной решеток. По этой причине

каждый из перечисленных случаев должен быть проанализирован отдельно.

Прежде всего рассмотрим входящую во все уравнения системы (16)–(18) функцию $g(\mathbf{k})$, которая с точностью до множителя представляет собой фурье-образ коррелятора $\langle S_0^z S_{\mathbf{k}}^z \rangle$:

$$\langle S_{\mathbf{k}-\mathbf{k}}^z S_{\mathbf{k}}^z \rangle = \frac{Jz\tilde{c}_1}{4} g(\mathbf{k}). \quad (24)$$

Аналогично тому, как это делалось в [3], можно показать, что функция $g(\mathbf{k})$ при $T \rightarrow 0$ для \mathbf{k} близких к \mathbf{k}_0 принимает орнштейн-церниковский вид:

$$g(\mathbf{k}) \simeq \frac{26T}{(Jz)^2 |\tilde{c}_1|} \frac{1}{(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})^2 + \xi^{-2}}, \quad (25)$$

где параметр ξ играет роль корреляционной длины. В каждом из перечисленных ниже случаев входящие в соотношение (25) параметры соответственно равны: для ФМ на квадратной и треугольной решетках

$$\mathbf{k}_0 = 0; \quad \xi = \sqrt{2z\tilde{c}_1/4\Delta}, \quad (26)$$

где Δ определяется соотношением (15); для АФМ на квадратной решетке

$$\mathbf{k}_0 = (\pi, \pi); \quad \xi = \sqrt{|\tilde{c}_1|/\Delta_1}; \quad \Delta_1 = 1 - 3|\tilde{c}_1| + 3\tilde{c}_2 \quad (27)$$

и, наконец, для АФМ на треугольной решетке

$$\mathbf{k}_0 = (0, 2\pi/3); \quad \xi = \sqrt{3|\tilde{c}_1|/4\Delta_2}; \quad \Delta_2 = 1 - 4|\tilde{c}_1| + 3\tilde{c}_2. \quad (28)$$

Вернемся теперь к системе уравнений (16)–(18). Очевидно, что два последних уравнения, (17) и (18), представляют собой замкнутую систему для корреляционных функций \tilde{c}_1 и \tilde{c}_2 , определив которые, можно найти параметр α с помощью уравнения (16). Для построения асимптотик при $T \rightarrow 0$, а также для выполнения в дальнейшем численных расчетов при произвольных температурах, в системе уравнений (16)–(18) удобно вместо неизвестной \tilde{c}_2 использовать в каждом из перечисленных выше случаев (26)–(28) функции Δ , Δ_1 или Δ_2 .

Рассмотрим сначала ферромагнетик ($J > 0$). Приведенные ниже расчеты справедливы для обоих типов решеток. После перехода от переменной \tilde{c}_2 к величине Δ уравнения (16) и (17) сохраняют свой вид, а уравнение (18) с учетом определения (15) переходит в

$$\Delta = 1 - 2\tilde{c}_1 - \frac{Jz\tilde{c}_1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (z\gamma_{\mathbf{k}} + 1)(1 - \gamma_{\mathbf{k}})g(\mathbf{k}). \quad (29)$$

Для дальнейшего анализа удобно ввести плотность состояний

$$w(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x - \gamma_{\mathbf{k}}), \quad (30)$$

с помощью которой система уравнений (17), (29) преобразуется к виду

$$y = 2 \int_{-1}^1 dx x w(x) \frac{1-x}{\Omega(x)} \operatorname{cth} \frac{\Omega(x)}{\lambda}, \quad (31)$$

$$\eta y^2 z = 1 - y^2 - y \int_{-1}^1 dx x w(x) \frac{(1-x)^2(zx+1)}{\Omega(x)} \operatorname{cth} \frac{\Omega(x)}{\lambda}. \quad (32)$$

Здесь введены новые переменные y и η (вместо \tilde{c}_1 и Δ)

$$y = \sqrt{2\tilde{c}_1}; \quad \eta = \Delta/y^2 z, \quad (33)$$

а также следующие обозначения:

$$\Omega(x) = \sqrt{(1-x)(1-x+2\eta)}; \quad \lambda = \frac{4\theta}{zy}. \quad (34)$$

Анализ показывает, что при $T \rightarrow 0$ функция y остается конечной $y \rightarrow 1$, в то время как $\eta \rightarrow 0$. Далее, поскольку подинтегральное выражение в (32) не содержит никаких особенностей при $\eta \rightarrow 0$, в обеих частях (32) можно положить $\eta = 0$, и оно превращается в уравнение для определения y :

$$1 - y^2 = y \int_{-1}^1 dx w(x) (1-x)(zx+1) \operatorname{cth} \frac{(1-x)}{\lambda}. \quad (35)$$

После ряда преобразований в нижайшем по θ приближении уравнение (35) сводится к виду

$$1 - y^2 = y \lambda^2 (1+z) w(1) \int_0^{\infty} du u (\operatorname{cth} u - 1).$$

Вычисляя интеграл и учитывая первое из соотношений (33), для \tilde{c}_1 получаем

$$\tilde{c}_1 \approx \frac{1}{2} - \frac{2\pi^2}{3} \frac{1+z}{z^2} w(1)\theta^2. \quad (36)$$

Воспользовавшись уравнениями (16), (31) и вторым из соотношений (33), для α и Δ находим

$$\alpha \approx \frac{3}{2} - \frac{4\pi^2}{3z} w(1)\theta^2, \quad (37)$$

$$\Delta \approx \theta \exp\left(-\frac{z}{8w(1)\theta}\right). \quad (38)$$

Выражения (36)–(38) справедливы и для квадратной, и для треугольной решеток и отличаются лишь значениями параметров z и $w(1)$ (для квадратной решетки $z = 4$, $w(1) = 1/\pi$; для треугольной $z = 6$, $w(1) = \sqrt{3}/2\pi$).

Перейдем теперь к построению низкотемпературных асимптотик для антиферромагнетика ($J < 0$, $\theta < 0$). В этом случае корреляционная функция \tilde{c}_1 отрицательна, и далее для удобства будем рассматривать $|\tilde{c}_1|$. Кроме того, как было отмечено выше, в уравнении (18) вместо функции \tilde{c}_2 следует ввести функции Δ_1 (для квадратной решетки) и Δ_2 (для треугольной решетки), определяющие температурную зависимость корреляционной длины (см. (27), (28)). Отметим, что в отличие от ФМ в случае АФМ квадратную и треугольную решетки нужно рассматривать отдельно. Это связано прежде всего с существенно различным температурным поведением величин Δ_1 и Δ_2 . Действительно, если при $T \rightarrow 0$ для квадратной решетки $\Delta_1 \rightarrow 0$, то для треугольной решетки соответствующая величина Δ_2 остается конечной при любой температуре. Схема расчета низкотемпературных асимптотик $|\tilde{c}_1|$ и Δ_1 на квадратной решетке в общих чертах аналогична использованной при анализе ФМ, хотя исходные уравнения в этом случае оказываются более сложными. Окончательный результат в первом неисчезающем по θ приближении имеет вид

$$|\tilde{c}_1| \approx \frac{1}{2a_1^2} - \frac{\zeta(3)}{\pi} |\theta|^3, \quad (39)$$

$$\alpha \approx 1 + \frac{1}{2a_1^2} - \frac{\zeta(3)}{\pi} |\theta|^3, \quad (40)$$

$$\Delta_1 \approx \frac{\theta^2}{2} \exp\left(-\pi \frac{1 - 2a_1 a_2}{2a_1^2 |\theta|}\right). \quad (41)$$

Здесь

$$a_1 = \int_{-1}^1 dx w(x) \sqrt{1-x^2} \approx 0,842; \quad (42)$$

$$a_2 = \int_{-1}^1 dx w(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} \approx 0,551,$$

а $\zeta(3) \simeq 1,202$ — частное значение дзета-функции.

При анализе АФМ на треугольной решетке удобно переписать систему уравнений (17), (18), используя равенство $\text{cth}(x/2) = 1 + 2n(x)$, где $n(x) = (e^x - 1)^{-1}$ — бозевская функция распределения. В результате получим

$$|\tilde{c}_1| = -\frac{6|J|\tilde{c}_1|}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}(1-\gamma_{\mathbf{k}})}{\omega_{\mathbf{k}}} \left[1 + n\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{T}\right) \right], \quad (43)$$

$$\Delta_2 = 1 + \frac{6|J|\tilde{c}_1|}{N} \sum_{\mathbf{k}} (6\gamma_{\mathbf{k}}^2 + 2\gamma_{\mathbf{k}} - 1) \frac{1-\gamma_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \left[1 + n\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{T}\right) \right]. \quad (44)$$

Поскольку Δ_2 остается конечной при всех температурах, слагаемое, содержащее $n(\omega_{\mathbf{k}}/T)$, исчезает при $T \rightarrow 0$. Получающаяся при этом система трансцендентных уравнений определяет $|\tilde{c}_1|$ и Δ_2 в нулевом приближении и может быть решена только численно. Ведущий член от слагаемых, содержащих $n(\omega_{\mathbf{k}}/T)$, оказывается порядка $|\theta|^3$. Действительно, эти слагаемые могут быть записаны в виде

$$Q \equiv \frac{12|J|\tilde{c}_1|}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\gamma_{\mathbf{k}}) \frac{1-\gamma_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} n\left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{T}\right), \quad (45)$$

где $F(\gamma_{\mathbf{k}}) = -\gamma_{\mathbf{k}}$ для (43) и $F(\gamma_{\mathbf{k}}) = 6\gamma_{\mathbf{k}}^2 + 2\gamma_{\mathbf{k}} - 1$ для (44). Используя выражение (30) для плотности состояний, перейдем в (45) от суммы по \mathbf{k} к интегралу по x и после ряда преобразований получим

$$Q \simeq \frac{8\zeta(3)|\tilde{c}_1|F(1)}{\pi\sqrt{3}(\Delta_2 + 9|\tilde{c}_1|)^2} |\theta|^3. \quad (46)$$

Подставляя (46) в (43) ($F(1) = -1$) и в (44) ($F(1) = 7$) и решая возникающую при этом систему уравнений по теории возмущений, находим

$$|\tilde{c}_1| \simeq 0,289 + 0,194 |\theta|^3, \quad (47)$$

$$\alpha \simeq 1,347 + 0,986 |\theta|^3, \quad (48)$$

$$\Delta_2 \simeq 0,102 - 0,168 |\theta|^3. \quad (49)$$

Отметим, как и в одномерном случае [13], для двумерных антиферромагнетиков область применимости асимптотик (47)–(49) весьма узка.

На основании приведенных здесь низкотемпературных асимптотик можно сделать вывод о существенно различном поведении $2D$ гейзенберговских систем в зависимости от типа решетки, на которой они рассматриваются. Для квадратной

решетки при $T = 0$ корреляционная длина $\xi \rightarrow \infty$ и для ФМ, и для АФМ и соответственно дальний порядок в системе имеет место всегда, независимо от знака J . В то же время для треугольной решетки в АФМ в отличие от ФМ дальний порядок при $T = 0$ отсутствует ($\xi \rightarrow \text{const}$).

4. Теплоемкость и восприимчивость двумерных магнетиков

Интересующие нас термодинамические характеристики системы выражаются через функции \tilde{c}_1 , \tilde{c}_2 и α . Все приводимые ниже экстенсивные величины будут даны в расчете на один узел. Внутренняя энергия E есть среднее значение гамильтониана (1):

$$E = -\frac{3}{8} Jz c_1, \quad (50)$$

теплоемкость при постоянном объеме равна

$$C = \frac{\partial E}{\partial T}, \quad (51)$$

а магнитная восприимчивость системы определяется как

$$\chi \simeq \frac{1}{T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \langle S_{\mathbf{k}}^z S_{-\mathbf{k}}^z \rangle = \frac{c_1}{J\Delta}. \quad (52)$$

Перед тем как обсуждать результаты численного счета, выпишем асимптотические выражения для внутренней энергии, теплоемкости и восприимчивости $2D$ гейзенберговских магнетиков. В пределе высоких температур перечисленные величины имеют формально одинаковый вид для ФМ и АФМ на треугольной и квадратной решетках и отличаются лишь знаком J и величиной z . С учетом (22) получаем

$$E \simeq -\frac{3Jz}{32\theta} \left(1 + \frac{A}{\theta} \right), \quad (53)$$

$$C \simeq \frac{3z}{32\theta^2} \left(1 + 2\frac{A}{\theta} \right), \quad (54)$$

$$\chi \simeq \frac{1}{4T(1 - z/4\theta)}. \quad (55)$$

Отметим, что выражения (53)–(55) в точности совпадают с соответствующими результатами, полученными прямым высокотемпературным разложением (см., например, [11,15]). При низких температурах, учитывая (36)–(38), для ферромагнетиков с решетками обоих типов имеем

$$E \approx -\frac{Jz}{8} \left[1 - \frac{4\pi^2(z+3)}{9z^2} w(1)\theta^2 \right], \quad (56)$$

$$C \approx \frac{\pi^2(z+3)}{9z} w(1)\theta, \quad (57)$$

$$\chi \approx \frac{1}{3T} \exp\left(\frac{z}{80w(1)}\right). \quad (58)$$

Отметим, что выражение (57) совпадает с аналогичной формулой, приведенной в [5]. Таким образом, при $T \rightarrow 0$ теплоемкость для ферромагнетиков оказывается линейной функцией температуры, что согласуется с теорией спиновых волн.

Для АФМ на квадратной решетке при $T \rightarrow 0$ получаем

$$E \approx -\frac{3}{2}|J| \left(1 - A_1 - \frac{\zeta(3)}{\pi} A_1^2 |\theta|^3 \right), \quad (59)$$

$$C \approx \frac{9}{2\pi} \zeta(3) A_1^2 \theta^2, \quad (60)$$

$$\chi|J| \approx \frac{A_1}{8} \left(1 + \frac{\zeta(3)}{\pi} A_1 |\theta|^3 \right). \quad (61)$$

Здесь $A_1 = 2a_1^2/(1+2a_1^2) \approx 0,586$, а a_1 определяется согласно (43).

И, наконец, для антиферромагнетиков на треугольной решетке, учитывая (47)–(49), имеем

$$E \approx -0,482 + 0,029 |\theta|^3, \quad (62)$$

$$C \approx 0,087 \theta^2, \quad (63)$$

$$\chi|J| \approx 0,0794 - 0,052 |\theta|^3. \quad (64)$$

Приведенные выше асимптотики позволяют увидеть определенные качественные особенности температурных зависимостей термодинамических характеристик $2D$ магнетиков на различных решетках. В частности, в случае треугольной решетки как при высоких, так и при низких температурах теплоемкость ФМ должна быть выше теплоемкости АФМ, в то время как для квадратной решетки имеет место обратное соотношение.

Для получения количественных температурных зависимостей интересующих нас величин во всей области температур необходимо численно решить систему трансцендентных уравнений (16)–(18) и определить величины α , \tilde{c}_1 и \tilde{c}_2 как функции температуры. Затем с помощью соотношений (50)–(52) вычислить внутреннюю энергию магнетика, теплоемкость и восприимчивость.

На рис. 1 приведены температурные зависимости теплоемкости ФМ и АФМ на треугольной

решетке, рассчитанные в настоящей работе. Для сравнения штриховой линией показаны результаты, полученные прямым высокотемпературным разложением [11]. Видно, что для треугольной решетки во всей области температур теплоемкость ФМ лежит выше теплоемкости АФМ. Температурное поведение магнитной восприимчивости для ФМ и АФМ на треугольной решетке показаны на рис. 2, где также представлены соответствующие кривые, полученные на основе высокотемпературного разложения [11].

В заключение отметим, что достоинство использованного подхода состоит в том, что он не только позволяет вычислить единым образом термодинамические характеристики двумерных изотропных гейзенберговских магнетиков во всей области температур, но и дает прекрасное совпадение с результатами высокотемпературного разложения. Укажем также, что в работе [7] приведены результаты экспериментальных измерений теплоемкости пленок ^3He при различных плотностях покрытий, отвечающих как ферро-, так и антиферромагнитному обмену в спиновой подсистеме. При этом значение C в пике теплоемкости для ФМ в два раза превышает соответствующее значение для АФМ. Как видно на рис. 1, предложенная теория приводит к такому же соотношению. Таким образом, можно заключить, что результаты настоящей работы правильно отражают физическую картину рассматриваемых в ней явлений.

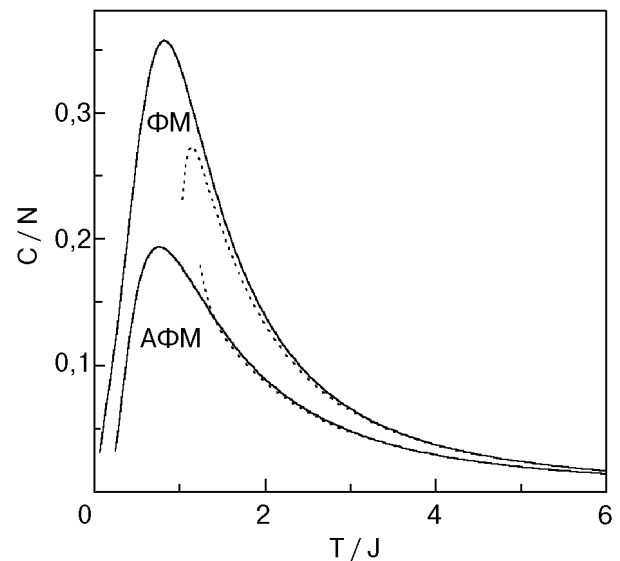


Рис. 1. Теплоемкости ФМ и АФМ на треугольной решетке. Штриховой линией показаны кривые, относящиеся к соответствующим высокотемпературным разложениям [11].

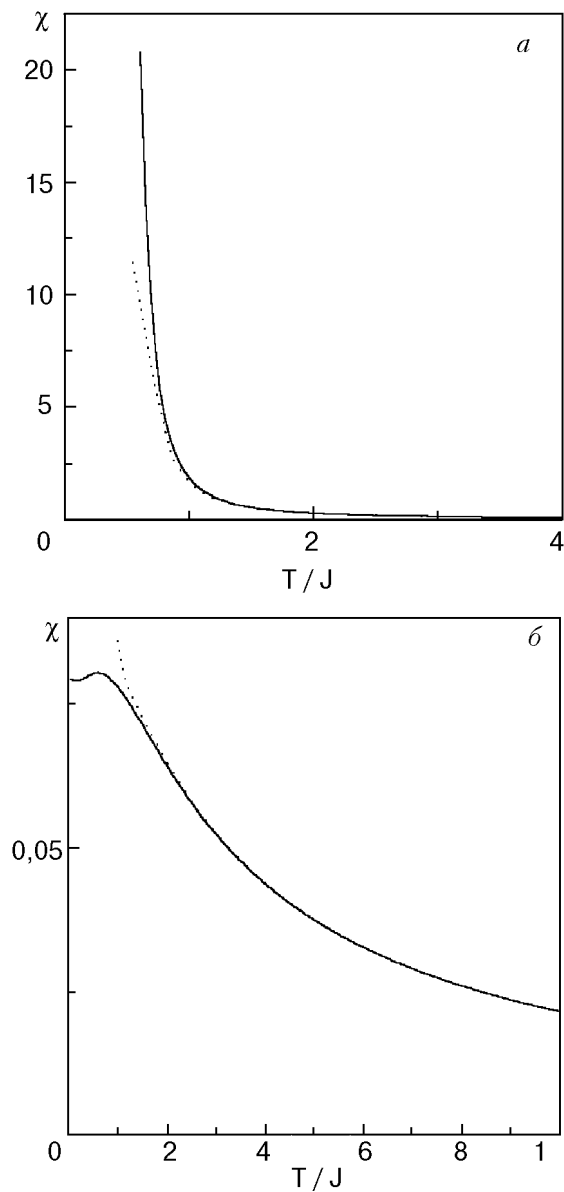


Рис. 2. Магнитные восприимчивости для ФМ (а) и АФМ (б) на треугольной решетке. Штриховой линией показаны кривые, относящиеся к соответствующим высокотемпературным разложениям [11].

12. H. Mermin and N. D. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
13. J. Kondo and K. Yamaji, *Progr. Theor. Phys.* **47**, 807 (1972).
14. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
15. G. S. Rushbrooke, G. A. Baker, Jr., and P. J. Wood, *Phase Transition and Critical Phenomena*, C. Domb and M. S. Green (eds.), NY, *Academic* (1974), v. **3**, chap. 5.

Specific features of thermodynamics of two-dimensional Heisenberg magnets on a triangular lattice

T. N. Antsygina

Thermodynamic and magnetic properties of two-dimensional Heisenberg ferro- and antiferromagnets with spin $1/2$ on a triangular lattice are investigated theoretically. The models are treated with the use of two-time Green's functions and the decoupling procedure that takes into account explicitly a short-range order and does not require the existence of a long-range order in the system. The internal energy, heat capacity and susceptibility of the magnets are expressed in terms of the correlation functions which satisfy a system of self-consistent equations. The system is solved numerically in the whole temperature range. At high- and low-temperature limits analytical asymptotes are found for the above thermodynamic quantities and correlation functions. The results obtained are correlated with similar data for square lattices and with the available literature results of high-temperature expansions.

1. M. Roger and J. H. Hetherington, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 1 (1983).
2. Т. Н. Анцыгина, В. А. Слюсарев, *ФНТ* **21**, 127 (1995).
3. Т. Н. Анцыгина, В. А. Слюсарев, *ФНТ* **19**, 67 (1993).
4. Т. Н. Анцыгина, В. А. Слюсарев, *ФНТ* **18**, 261 (1992).
5. K. Yamaji and J. Kondo, *Phys. Lett.* **45**, 317 (1973).
6. D. S. Greywall, *Phys. Rev.* **B41**, 1842 (1990).
7. M. Siqueira, J. Niéki, B. Cowan, and J. Saunders, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2600 (1997).
8. K. Ishida, M. Morishita, K. Yawata, and H. Fukuyama, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3451 (1997).
9. C. Bauerle, J. Bossy, Yu. M. Bunkov, A.-S. Chen, and H. Gogfrin, *J. Low Temp. Phys.* **110**, 345 (1998).
10. M. Roger, C. Bauerle, Yu. M. Bunkov, A.-S. Chen, and H. Gogfrin, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1308 (1998).
11. N. Eltner, R. Singh, and A. P. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1629 (1993).