

# Квантовая спиновая жидкость в $2D$ анизотропной модели Гейзенберга с фрустрированным обменом во 2-ой координационной сфере

С. С. Аплеснин

*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Россия, 660036, г. Красноярск, Академгородок*  
E-mail: gap@iph.krasnoyarsk.su

Статья поступила в редакцию 22 апреля 1997 г., после переработки 17 ноября 1997 г.

Квантовым методом Монте-Карло исследуется двумерная модель Гейзенберга с анизотропией обмена ( $\Delta = 1 - J_x/J_z$ ) и отрицательным обменом во 2-ой координационной сфере ( $J_2$ ) с  $S = 1/2$ . Вычислены энергия, магнитный момент на узле, теплоемкость, спин-спиновые корреляционные функции. Определена область устойчивости нееевского упорядочения спинов, стрип-фазы и бесщелевой квантовой спиновой жидкости в области  $\Delta/2 \leq J_2/J_1 \leq 1/(2\Delta)$ .

Квантовим методом Монте-Карло досліджено двовимірну модель Гейзенберга з анізотропією обміну ( $\Delta = 1 - J_x/J_z$ ) і від'ємним обміном у 2-й координаційній сфері ( $J_2$ ) з  $S = 1/2$ . Обчислено енергію, магнітний момент на вузлі, теплоємність, спин-спінові кореляційні функції. Визначено область стійкості неєлівського упорядкування спінів, стріп-фази і бесщілинної квантової спінової рідини у області  $\Delta/2 \leq J_2/J_1 \leq 1/(2\Delta)$ .

PACS: 75.10.Jm

В последние годы целый ряд работ посвящен теоретическому и экспериментальному исследованию двумерного ( $2D$ ) гейзенберговского антиферромагнетика (АФ) на квадратной решетке со спином  $S = 1/2$ . В связи с открытием высокотемпературной сверхпроводимости в металлооксидных соединениях большое внимание уделяется исследованию фрустрированных антиферромагнетиков с отрицательным взаимодействием во 2-ой координационной сфере. Предложен ряд изящных теорий, оперирующих с новыми типами магнитных состояний. Это состояние резонирующих валентных связей (RVB), предложенное Андерсеном [1], представляющих суперпозицию по всем реализациям синглетных пар. Вычисления на решетке  $4 \times 4$  [2] подтверждают близость энергий  $E_{RVB}$  к точному значению.  $N$ -фермиевский подход, когда вместо двух проекций электронного спина  $S$  вводится  $N$  различных флейворов [3,4], дает потоковую фазу ( $1/2$ -flux state) с бесщелевым спиновым возбуждением и степенным затуханием спин-спиновой корреляционной функции. В области сильных фрустраций ( $J_2/J_1 \sim 0,6$ , где  $J_\alpha$  — энергия антиферромагнитного обменного

взаимодействия между соседями в  $\alpha$ -й координационной сфере) предполагается существование щелевых магнитных состояний с величиной энергетической щели  $\sim (0,1-0,2)J$  — это квантовая спиновая жидкость (СЖ) со скалярным и векторным киральным упорядочением [4,5], упорядоченное димерное (спин-пайерлсовское) [6,7] состояние. В приближении  $1/N$  ( $N$  — число флейворов) [6] энергия димерного состояния немного ниже энергии кирального спинового состояния  $E_{\text{chiral}}/E_{\text{dimer}} = 0.994$ . Точная диагонализация на малых решетках [8] дает противоположные результаты: параметр векторного кирального порядка в два раза превышает димерный параметр. Последние состояния описываются дробной статистикой и имеют специфический спектр возбуждений спинов, голонов, анионов, детально описанных в монографии [9].

В большинстве работ, посвященных исследованию модели Гейзенберга с фрустрациями, предполагается дальний АФ порядок при  $T = 0$  и  $J_2 = 0$ . Критическая величина  $J_2/J_1$  для разрушения дальнего магнитного порядка зависит от методов и

приближений, используемых в аналитических расчетах, и изменяется в интервале 0,1–0,4 [7,10–12]. Чем точнее учитывается расщепление спиновых корреляционных функций, тем меньше критическая величина фрустрированной связи. В области значений  $J_2/J_1 = 0,6–0,8$  образуется четырехподрешеточный АФ [7,11]. Все эти исследования оперируют с изотропной моделью Гейзенберга, хотя квазидвумерные соединения имеют анизотропию обмена  $\sim (10^{-4}–10^{-2})J$ , например,  $\text{CaV}_3\text{O}_7$  с обменом  $J_2/J_1 \approx 1,3$  выше температуры Нееля имеет температурно независимый статический структурный фактор  $s(q)$  [13]. Анизотропия уменьшает квантовые флуктуации и сводит к минимуму погрешность вычислений, обусловленную конечными размерами решетки.

Ранее автором [14] исследовалось димерное состояние в антиферромагнитной цепочке Гейзенберга с четырехспиновым взаимодействием и со спином  $S = 1/2$ . Четырехспиновый обмен может образоваться в результате взаимодействия спинов с колебаниями решетки (фононами). Разлагая обменный интеграл по степеням смещений атомов, в первом порядке теории возмущений получаем спин-фононное взаимодействие. Преобразуя фононные операторы путем сдвига на некоторую константу [15], определяемую из условия исчезновения линейных по фононным операторам членов, получаем четырехспиновый обмен. Таким образом, билинейный и четырехспиновый обмен эффективно соответствуют спин-пайерлсовской системе, в которой существует спин-пайерлсовский фазовый переход в одномерной модели Гейзенберга [16]. Такой переход соответствует образованию пар спинов, находящихся по отношению друг к другу в синглетном состоянии, центры масс которых упорядочены. В этой работе были исследованы свойства димерного состояния, вычислены

температуры фазового перехода «димерное состояние — парамагнетик» в зависимости от величины четырехспинового взаимодействия. Переход исчезает, когда четырехспиновый обмен отсутствует и рассчитанные свойства антиферромагнитной цепочки хорошо согласуются с результатами вычислений, например, радиус корреляции изменяется по степенному закону  $\xi = A/T$  во всей области температур  $T$ .

Итак, можно выделить две проблемы. Первая рассматривает возможность существования квантовой спиновой жидкости в анизотропном фрустрированном АФ и влияние анизотропии обмена на область устойчивости дальнего антиферромагнитного порядка и квантовой спиновой жидкости. Вторая проблема — существует ли энергетическая щель в спектре возбуждений в квантовой спиновой жидкости. Величину щели в СЖ можно определить по температурному поведению теплоемкости, восприимчивости и по зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля. В работе применяется квантовый метод Монте-Карло (МК), использующий траекторный алгоритм [17]. Основная идея алгоритма — преобразование квантовой  $D$ -мерной задачи в классическую  $(D+1)$ -мерную путем введения «временных срезов» в пространстве мнимого времени  $0 < \tau < 1/T$  и реализация МК процедуры в пространстве «мнимое время — координата».

## 1. Модель и метод

Рассмотрим гейзенберговский анизотропный АФ с антиферромагнитным взаимодействием во 2-ой координационной сфере на квадратной решетке, в узлах которой локализованы спины  $S = 1/2$ , направленные вдоль оси  $OZ$  по направлению внешнего поля. Гамильтониан имеет вид

$$H = - \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{h_a=1}^4 \sum_{i=1}^N \left\{ J_{\alpha}^{zz}(h_{\alpha}) S_i^z S_{i+h_{\alpha}}^z + J_{\alpha}^{x,y}(h_{\alpha}) (S_i^x S_{i+h_{\alpha}}^x + S_i^y S_{i+h_{\alpha}}^y) \right\} - H^z \sum_{i=1}^{N/2} (S_i^z + S_{i+h_{\alpha}}^z), \quad (1)$$

где  $J_{\alpha} < 0$ , суммирование по  $h_{\alpha}$  проводится по всем соседям  $\alpha$ -й координационной сферы;  $\Delta = 1 - J^{x,y}/J^z$  — анизотропия обмена типа «легкая ось»;  $H^z$  — внешнее магнитное поле;  $N$  — общее число спинов.

Алгоритм и метод МК подробно изложены ранее [18]. Гамильтониан разбивается на кластеры из четырех спинов на плакете, коммутация между которыми учитывается с помощью формулы Троттера. В данной работе в

МК процедуре используются периодические граничные условия по троттеровскому направлению и по решетке. Линейный размер решетки  $L = 40, 48, 64$  и  $80$  и  $m = 16, 32, 48$  ( $m$  — целое положительное число, называемое числом Троттера). Количество МК шагов на один спин изменялось от 3000 до 10 000. Один МК шаг определяется поворотом всех спинов на решетке размером  $L \times L \times 4m$ . Энергия  $E$  и теплоемкость  $C$  вычислялись по формулам

$$E = \langle \frac{1}{2} \sum_{i,j,r} F_{i,j}^r \rangle, \quad F_i^r = -\partial/\partial\beta(\ln \rho_i^r), \quad C = dE/dT. \quad (2)$$

Здесь  $\rho_{i,j}^r$  — матричные элементы локальной матрицы плотности ( $i, j = 1 \dots L$ ;  $r = 1 \dots m$ );  $\beta = 1/(k_B T)$ . Сумма берется по  $L \times L \times m$  восьми спиновым кластерам, скобки обозначают термодинамическое среднее. Намагниченность  $M$  и продольная восприимчивость  $\chi$  определяются как

$$M = \langle \sum_{i,j,r} M_{i,j}^r \rangle, \quad M_{i,j}^r = \frac{1}{4m} \sum_{h_x, h_y=0}^1 \left( S_{i+h_x, j+h_y}^r + S_{i+h_x, j+h_y}^{r+1} \right), \quad (3)$$

$$(S_i = \pm 1/2), \quad \chi = M/H.$$

Вычислены продольная  $R(r) = \langle S_0^z S_r^z \rangle$  спин-спиновая и четырехспиновая  $\langle S_0^z S_1^z S_r^z S_{r+1}^z \rangle$  корреляционные функции и их фурье-образ по сторонам и диагонали квадратной решетки. Термодинамическое среднее спина на узле определим как  $\sigma = \lim_{r \rightarrow \infty} [\text{abs}(\langle S_0^z S_r^z \rangle)]^{1/2}$ . Корреляционный радиус взаимодействия спинов  $\xi$  и предэкспоненциальный показатель степени  $\eta$  определяются соотношением

$$R(r) = A/r^\eta \exp(-r/\xi), \quad (4)$$

где  $R(r)$  — нормированная корреляционная функция  $R(r) = \langle S^z(0)S^z(r) \rangle - \langle S^z \rangle^2$ . В модели с конкурирующими взаимодействиями в отсутствие параметра порядка типа намагниченности возможной характеристикой системы может быть корреляционная функция локально калибровочного оператора по элементарному плакету. Возможно, эти плакеты упорядочены, тип этого порядка можно определить из восьмиспиновой корреляционной функции

$$\langle S^z(0)S^z(h_x)S^z(h_y)S^z(h_x + h_y)S^z(r) \times$$

$$\times S^z(r + h_x)S^z(r + h_y)S^z(r + h_x + h_y) \rangle. \quad (5)$$

В области сильных фрустраций ( $J_2 \sim 0,5J_1$ ) возможен киральный порядок. Определим векторный параметр киральности по наименьшему треугольнику

$$\mathbf{F}_{ijk} = (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_k \times \mathbf{S}_i) \quad (6)$$

и вычислим его  $z$ -проекцию  $F^z$

$$F_{ijk}^z = i \left[ (S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+) + (S_j^+ S_k^- - S_j^- S_k^+) + (S_k^+ S_i^- - S_k^- S_i^+) \right]. \quad (7)$$

Вычислим корреляционные функции нормального и аномального типов спиновых операторов  $\langle S^+(0)S^-(r) \rangle$ ,  $\langle S^+(0)S^+(r) + S^-(0)S^-(r) \rangle$ , используя метод Хирша [19]. Идея этого метода в том, что мировые линии разрываются в троттеровском направлении на расстоянии  $r = m$  и на этом расстоянии сравниваются волновые функции в  $S^z$ -представлении. Вычисление этих корреляций требует проведения новой МК процедуры со свободными граничными условиями в троттеровском направлении и увеличения времени счета в два раза.

Статистическая погрешность при МК расчете оценивалась стандартным методом. Вычислялось среднее значение, мгновенное значение запоминалось и после окончания МК процедуры вычислялось среднеквадратичное отклонение. Величина этой погрешности лежит в интервале (0,1–2)%. Системная ошибка образуется за счет конечного числа  $m$  и пропорциональна  $\sim A/(mT)^2$ .

В фрустрированном АФ матричные элементы в матрице размером  $16 \times 16$ , соответствующие кластеру четырех спинов на плакете, могут принимать отрицательные значения. Но вероятность локальных и замкнутых поворотов — четная функция отрицательных матричных элементов. Вероятность глобальных поворотов равна произведению матричных элементов от 1 до  $m$ , которое может быть отрицательным. Статистический вес этих конфигураций мал и определяется следующим образом. В процедуре МК определяется число конфигураций в пространстве отрицательных (положительных) весов  $Z_-(Z_+)$ , величина  $Z_/(Z_+ + Z_-) = 0,02-0,044$  с ростом температуры уменьшается. Это приводит к систематической ошибке вычисляемых величин того же порядка

$$\langle A \rangle \approx A_+ \{1 + Z_/(Z_+ - Z_-)\}, \quad (8)$$

$A_+$  — сумма физических величин в пространстве положительных весов. Для ускорения сходимости термодинамических средних знак статистического веса конфигурации не учитывался. Это справедливо, если отношение  $(Z_+ - Z_-)/(Z_+ + Z_-)$  стремится к постоянному значению при  $T \rightarrow 0$  [20]. В области сильных фрустраций ( $J_2/J_1 = 0,5$ ) разница в энергии, вычисленной с учетом знака вероятности переходов  $W > 0$  и без него  $\text{abs}(W)$ , составила  $\sim 5\%$ .

## 2. Обсуждение результатов

При вычислении термодинамических характеристик анизотропного АФ с фрустрированными взаимодействиями во 2-ой координационной сфере в основном состоянии будем использовать методику асимптотического продолжения этих величин, вычисленных при конечных температурах, до  $T = 0$ . Для ряда значений анизотропий обмена  $\Delta = 0,05, 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,6, 0,75$  и  $0,8$  вычислены зависимости энергии, намагниченности на узле, спиновых корреляционных функций от величины обмена во 2-ой сфере. Критические значения  $\lambda_{c1,2}$ , соответствующие исчезновению (появлению) дальнего порядка, определим по изломам

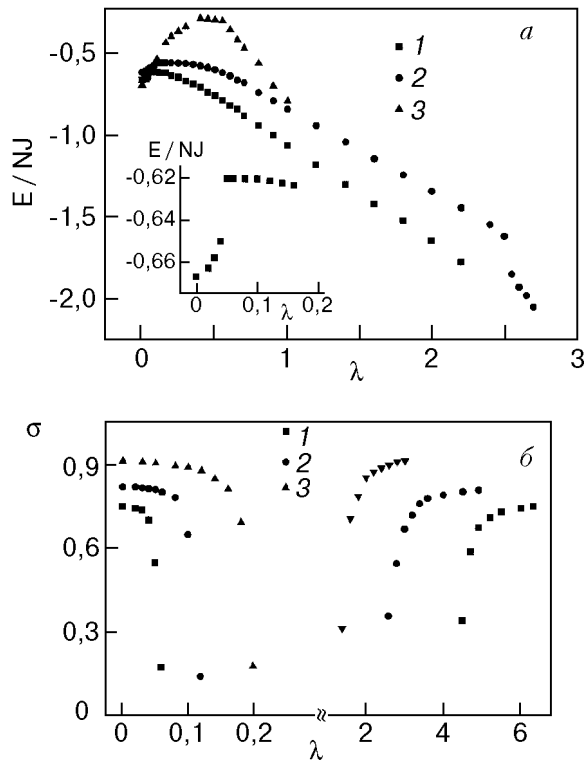


Рис. 1. Зависимости энергии  $E/NJ$  анизотропного АФ с  $\Delta = 0,05$  (1),  $0,2$  (2) и изотропного АФ [11] (3) (на вставке  $\Delta = 0,1$ ) (а); намагниченности на узле  $\sigma$  АФ с  $\Delta = 0,1$  (1),  $0,2$  (2),  $0,4$  (3) (б) от нормированного обмена во 2-ой сфере  $\lambda = J_2/J_1$ .

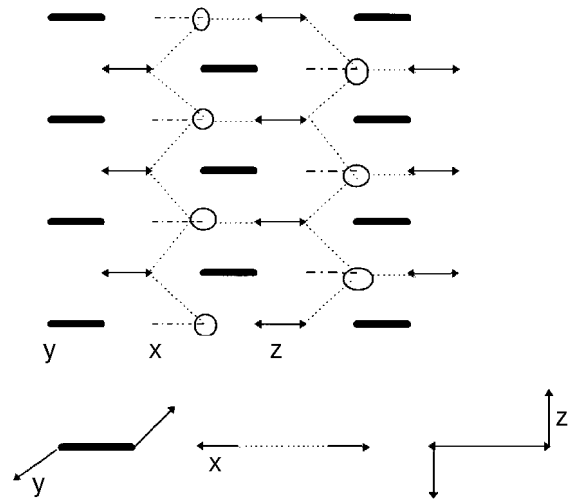


Рис. 2. Магнитная структура спиновой жидкости: пары спинов, соответственно направленных по  $OX$  — пунктирная линия,  $OY$  — сплошная линия,  $OZ$  — линия со стрелками. Точечной линией обозначены корреляции по продольным компонентам спина.

зависимости энергии  $E(\lambda)$  и исчезновению намагниченности на узле (рис. 1). Фрустрация уменьшает энергию АФ по абсолютной величине на 5–8%. Для  $\lambda > \lambda_{c1}$  образуется димерное состояние, в котором димеры располагаются в определенном порядке. Схематично такую структуру можно представить в виде трех типов димеров, расположенных ортогонально друг другу. На рис. 2 тонкими линиями изображены пары спинов, направленных по оси  $OX$ , жирными линиями — по  $OY$  и линией с двумя стрелками — по  $OZ$ . Спины, направленные по  $OZ$ , наводят поляризацию по продольным компонентам спина на ближайших соседей, обозначенных на рис. 2 кружками. Спин-спиновые корреляции по продольным компонентам изображены пунктирной линией. В этой области корреляционные функции по диагонали квадрата  $[110]$  на расстоянии  $r = \sqrt{2} a$  по продольным компонентам отрицательны, а по поперечным компонентам равны нулю, как изображено на рис. 2.

На рис. 3,а приведены спиновые корреляционные функции, изменяющиеся от величины обмена  $J_2$  в соответствии с представленной на рис. 2 магнитной структурой. При критическом значении  $\lambda_1 = (1 + \Delta)/4$  изменяется знак с положительного на отрицательный  $\langle S^z(0)S^z(r = \sqrt{2} a) \rangle$  и знаки спиновых корреляционных функций в 1-ой, 2-ой координационных сферах совпадают со знаками обменов, и фрустрация исчезает. Это приводит к увеличению энергии по абсолютной величине.

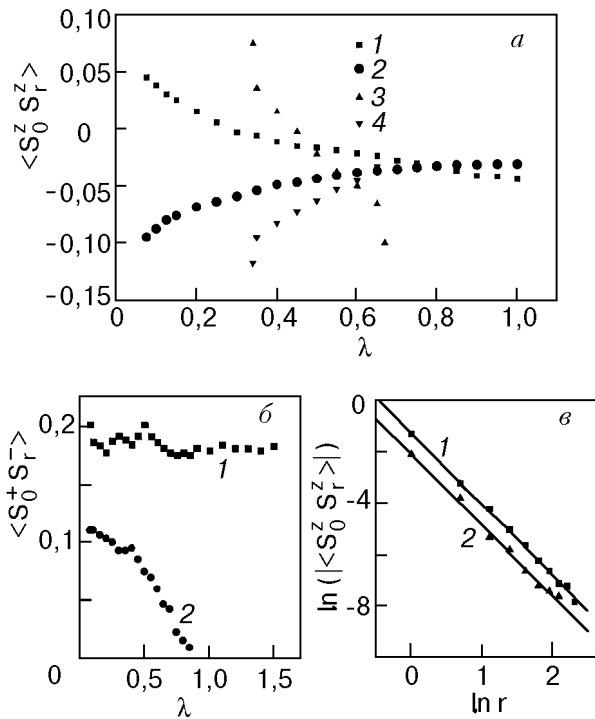


Рис. 3. Зависимости спин-спиновых корреляционных функций от  $\lambda = J_2/J_1$  по продольным компонентам спина  $\langle S_0^z S_r^z \rangle$  в спиновой жидкости с  $\Delta = 0,1$  (1, 2), 0,75 (3, 4) на  $r = 1$  (2, 4),  $\sqrt{2}$  (1, 3) (а), по поперечным  $\langle S_0^+ S_r^- \rangle$  с  $\Delta = 0,1$ ,  $r = 1$  (1),  $r = \sqrt{2}$  (2) (б), корреляционной функции спиновой жидкости с  $\Delta = 0,05$ ,  $\lambda = 0,25$  (1), 0,8 (2) от расстояния в логарифмическом масштабе (в).

Вычисленная энергия неупорядоченного состояния превышает все значения энергий, полученных другими методами. Так, для  $\lambda = 1/2$  точная диагонализация дает  $E/J = -0,53$  [21], сферически симметричная спин-волновая теория —  $E/J = -0,26$  [11], фермионное  $1/N$ -представление —  $E/J = -0,23$  [4].

При дальнейшем увеличении обмена  $J_2$  ближний порядок по поперечным компонентам

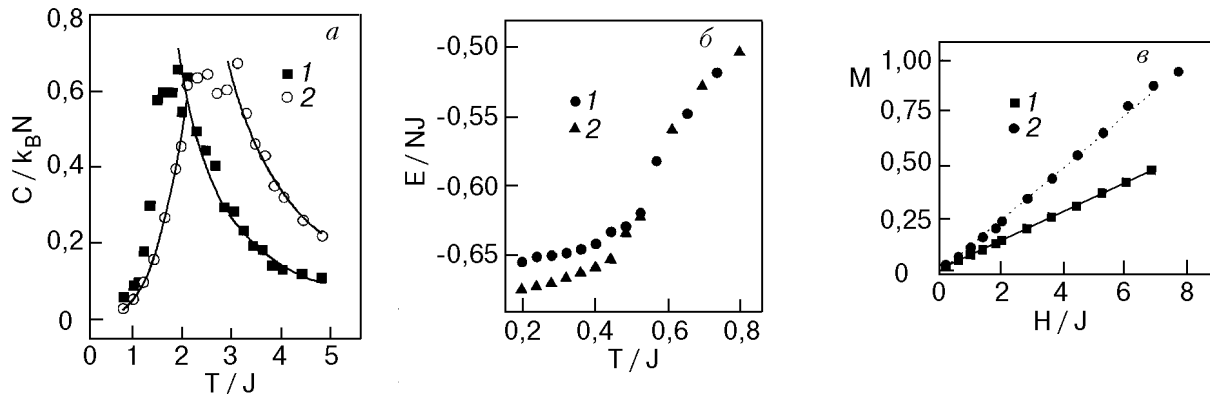


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости  $C/k_B N$  спиновой жидкости для  $\Delta = 0,05$ ,  $\lambda = 2$  (1) 3 (2) (а); энергии  $E/NJ$ , вычисленной без учета знака вероятности переходов (2) и с учетом знака (1) для  $\Delta = 0,05$ ,  $\lambda = 0,3$  (б), зависимость намагниченности  $M$  от внешнего поля в спиновой жидкости с  $\Delta = 0,05$ ,  $\lambda = 1$  (1), 2 (2) (в).

спина по диагонали на  $r = \sqrt{2} a$  уменьшается и  $\langle S^+(0)S^-(r = \sqrt{2} a) \rangle \approx 0$  (рис. 3,б) при  $\lambda = \lambda_2$ . Зависимость спиновых корреляционных функций от расстояния является степенной:  $\langle S^z(0)S^z(r) \rangle \sim 1/r^\eta$  и в логарифмическом масштабе хорошо аппроксимируется прямой линией (рис. 3,в), где показатель  $\eta$  изменяется в интервале  $\eta = 2,5-3,5$  в области значений  $\lambda_1 < \lambda < \lambda_2$ . Параметр киральности, вычисленный по всей решетке по формуле (8), равен нулю ( $F = 0$ ), т.е. киральный порядок отсутствует. Предложенное ранее [7] упорядочение димеров по подрешеткам, вставленным одна в другую по типу шахматного упорядочения, вычислим из четырехспиновой корреляционной функции, определенной в этих подрешетках. Монте-Карло процедура вычисления четырехспиновой корреляционной функции по сторонам, диагонали и по подрешеткам  $\langle S_0 S_1 S_r S_{r+1} \rangle \approx 0$  для  $r = L/2$  и не приводит к дальнему порядку синглетных пар. Отсутствует корреляция между плакетками спинов, определяемых выражением (5). На расстоянии  $r > a$  функция (5) стремится к нулю. Итак, параметр дальнего порядка по киральному и синглетному упорядочению пар в данном состоянии отсутствует.

Зависимость намагниченности от внешнего магнитного поля линейна (рис. 4,в). Критическое поле  $H_c = 0$ , соответственно энергетическая щель между основным и триплетным возбужденным состоянием отсутствует. В спиновой жидкости восприимчивость не зависит от температуры и величины внешнего магнитного поля. Температурное поведение теплоемкости хорошо аппроксимируется степенным законом  $C(T) \sim AT^n$ , где показатель степени  $n$  изменяется в интервале  $n = 2-3$  в зависимости от величины обмена  $J_2$ . На рис. 4,а для анизотропии обмена

$\Delta = 0,05$ ,  $J_2/J_1 = 3$  в спиновой жидкости МК результаты хорошо аппроксимируются степенной зависимостью  $C(T) \sim AT^{2,7(2)}$ . Отрицательный знак матричных элементов вероятности переходов, как указывалось ранее, дает небольшую погрешность энергии  $\sim 3\%$  для  $\lambda = 0,3$ . На рис. 4,б изображены величины энергии, вычисленные без учета знака вероятности переходов (2) и с учетом знака (1). С ростом температуры эта погрешность уменьшается.

Подчеркнем основные характеристики данного состояния. Термодинамическое среднее значение спина равно нулю, существует ближний порядок с резким затуханием спиновых корреляционных функций по степенному закону, энергетическая щель между основным и возбужденным состоянием равна нулю, что соответствует определению бесщелевой квантовой спиновой жидкости [22]. По магнитным свойствам квантовая спиновая жидкость аналогична «томографической» лаггинджеровской жидкости для двумерного случая [23]. Существование бесщелевой спиновой жидкости в 2D модели Гейзенберга с фрустрациями согласуется с общей теоремой Либу, Шульца и Маттиса [24], распространенной на двумерный случай [25], которая утверждает, что разупорядоченная фаза

антиферромагнетика, содержащего произвольный полувещный спин на единичную ячейку, должна иметь либо нарушенную симметрию, либо бесщелевые возбуждения.

Энергию спиновой жидкости в изотропном случае можно представить в виде энергии синглетов по  $J_1$  и энергии по продольным компонентам спинов с  $J_2$  (изинговская часть  $\sim 2S^2 J_2$ ):  $E = -0,687 - 0,5\lambda$ , что хорошо согласуется с МК результатами для  $\lambda > \lambda_2$ , где корреляционные функции по продольным компонентам на расстоянии  $r=1$  и  $r=\sqrt{2}$  становятся равными по величине (рис. 3,а). Показатель степени  $\eta$  начинает уменьшаться с увеличением обмена  $J_2$  до  $\eta \approx 1$  при  $\lambda = \lambda_{c2}$ . В пределах нескольких координационных сфер можно выделить четырехподрешеточную АФ структуру, которую получают методами точной диагонализации [12,21] и в аналитических расчетах [11,26]. Это две подрешетки спинов с шахматным упорядочением и размером ячейки  $\sqrt{2} a$ , вставленных одна в другую. Недостаточный учет спиновых корреляций в аналитических расчетах и небольшой размер решеток при точной диагонализации приводят к тому, что изменение ближнего порядка при  $\lambda_1 = (1 + \Delta)/4$  и  $\lambda_2$  соответственно связывают с разрушением неелевского состояния и появлением стрип-фазы (АФ2) с ферромагнитным упорядочением спинов вдоль одной из сторон квадрата и антиферромагнитным по другой. Стрип-фаза, определенная в МК вычислениях из фурье-спектра  $\langle S_{-q} S_q \rangle$ , вырождена для двух векторов  $\mathbf{Q}(0, \pi/a)$  и  $\mathbf{Q}(\pi/a, 0)$ , и при  $\lambda \geq \lambda_{c2}$  происходит спонтанное нарушение симметрии на одном из этих векторов. Интерполяция критических значений  $\lambda_{c1}$  и  $\lambda_{c2}$ , вычисленных методом МК, дает соответственно линейную  $\lambda_{c1} = \Delta/2$  и обратно пропорциональную зависимость от анизотропии обмена  $\lambda_{c2} = 1/2\Delta$ . Асимптотическое продолжение для изотропного случая дает отсутствие дальнего порядка типа стрип-фазы. Фазовая диаграмма основного состояния анизотропного неелевского антиферромагнетика (АФ1), стрип-фазы (АФ2) и квантовой спиновой жидкости изображена на рис. 5,а. Ранее исследовалась только одна линия на этой диаграмме — изотропный случай  $\Delta = 0$ . Наши расчеты дают отсутствие дальнего порядка для всех величин обмена  $J_2 < 0$  и два типа ближнего порядка для  $\lambda < 0,25$  и  $\lambda > 0,75$  со степенной зависимостью спиновых корреляционных функций от расстояния. В области  $0,25 < \lambda < 0,75$

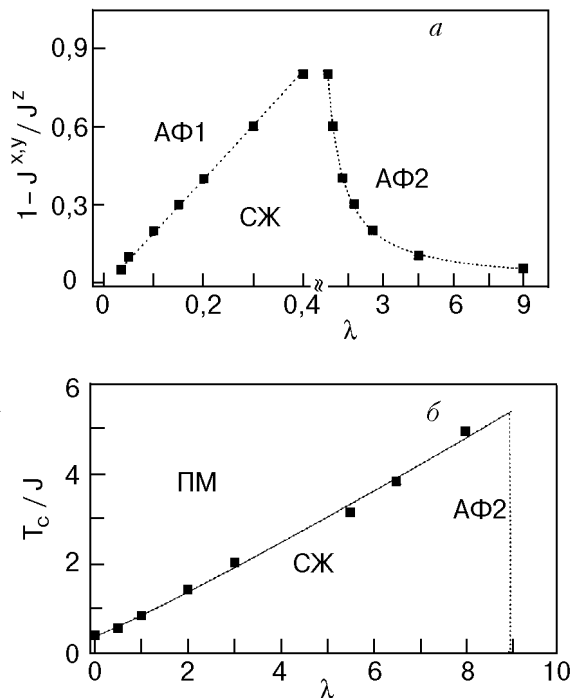


Рис. 5. Фазовая диаграмма основного состояния неелевского антиферромагнетика (АФ1), стрип-фазы (АФ2) и квантовой спиновой жидкости (СЖ) на плоскости анизотропия обмена — нормированный обмен во 2-ой сфере (а); парамагнетик (ПМ), АФ2 и СЖ на плоскости температура —  $\lambda$  для  $\Delta = 0,05$  (б).

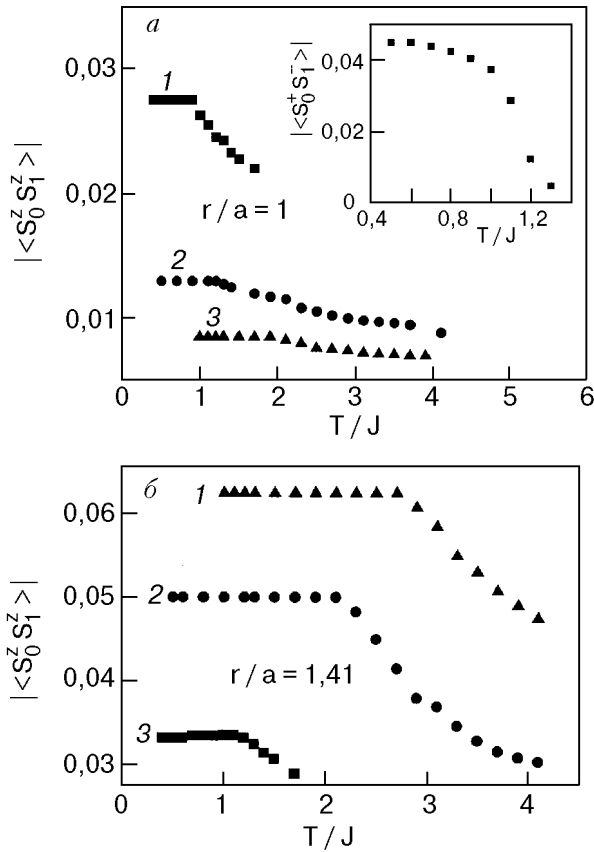


Рис. 6. Зависимость спиновых корреляционных функций по продольным компонентам в спиновой жидкости от температуры с  $\Delta = 0,05$ ,  $\lambda = 1$  (1), 2 (2) 3 (3) на расстоянии  $r/a = 1$  (а),  $\sqrt{2}$  (б), на вставке та же зависимость по поперечным компонентам  $r/a = 1$  с  $\lambda = 2$ .

спин-спиновая корреляционная функция резко уменьшается с расстоянием  $\langle S^z(0)S^z(r) \rangle \sim 1/r^{3,5(3)}$ .

Параметрами порядка в квантовой спиновой жидкости можно взять корреляционные функции на расстояниях  $r = 1, \sqrt{2}$ . Корреляционные функции по продольным компонентам не зависят от температуры в отличие от корреляционных функций по поперечным компонентам. Поскольку возбуждения в СЖ являются спины, синглетная пара переходит в триплет с  $S^z = 0$ . Статический структурный фактор  $s(Q)$  и фурье-гармоника парной корреляционной функции на  $Q = \pi/a$  для  $\lambda < \lambda_2$  и на  $Q = \pi/(\sqrt{2} a)$  для  $\lambda > \lambda_2$  имеют температурную зависимость, аналогичную  $\langle S^z(0)S^z(r = 1, \sqrt{2} a) \rangle$ , изображенной на рис. 6. Для  $\lambda > \lambda_2$  в спиновой жидкости существует два перехода по температуре. Первый связан с разрушением димерного порядка при  $T = T_{1c}$ , при этой температуре выполняется соотношение  $\langle S^+(0)S^-(r = 1) \rangle \sim \langle S^z(0)S^z(r = 1) \rangle$ , характерное для  $\Lambda\Phi$  с неелевским упорядочением спинов. При  $T > T_{1c}$  сохраняется развитый ближний

магнитный порядок по продольным компонентам, показанный на рис. 2 пунктирной линией, который переходит в парафазу при  $T = T_{2c}$ . Спиновая корреляционная функция  $\langle S^z(0)S^z(r = \sqrt{2} a) \rangle$  имеет особенность при этой температуре (рис. 6,б), зависимость спин-спиновой корреляционной функции от расстояния изменяется со степенной на экспоненциальную. В интервале температур  $T_{1c} < T < T_{2c}$  теплоемкость (рис. 4) и восприимчивость имеют максимальные значения. Для  $T > T_{2c}$  зависимость теплоемкости от температуры аналогична зависимости парамагнетика  $C(T) \sim A/T^2$  (рис. 4). На рис. 5,б приведена область существования спиновой жидкости на плоскости температура — нормированный обмен во 2-ой сфере. В  $\text{CaV}_3\text{O}_7$  [13] дальний магнитный порядок формируется за счет слабого межплоскостного обмена. Выше  $T_N = 23$  К магнитный статический структурный фактор  $s(Q)$  не зависит от температуры до  $T = 40$  К и имеет несоизмеримый вектор  $Q \sim 0,7\pi(1,1)$  в базисной плоскости. Возможно, в этой области температур реализуется квантовая спиновая жидкость.

Итак, суммируя результаты работы, можно сделать следующие выводы. В анизотропной фрустрированной 2D модели Гейзенберга с антиферромагнитными взаимодействиями в области  $\Delta/2 < \lambda < 1/2\Delta$  существует бесщелевая спиновая жидкость. Для  $\lambda > (1 + \Delta)/4$  спин-спиновые корреляционные функции в 1-ой и 2-ой координационных сферах отрицательны и фрустрация исчезает. Дальний киральный и димерный порядок отсутствуют в квантовой спиновой жидкости. Зависимость спин-спиновой корреляционной функции от расстояния в СЖ является степенной.

1. P. W. Anderson, *Mater. Res. Bull.* **8**, 153 (1973).
2. J. Richter, *Phys. Lett.* **A140**, 81 (1989).
3. I. Affleck and J. B. Marston, *Phys. Rev.* **B37**, 3774 (1988).
4. D. Poilblanc, *Phys. Rev.* **B42**, 4049 (1990).
5. S. Spielman, K. Fesler, C. B. Eom, T. H. Geballe, M. M. Fejer, and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 123 (1990).
6. X. G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee, *Phys. Rev.* **B39**, 11413 (1989).
7. M. P. Gelfand, R. P. Singh, and D. A. Huse, *Phys. Rev.* **B40**, 10801 (1989).
8. J. Richter, *Z. Phys.* **B79**, 403 (1990).
9. Ю. А. Изюмов, М. И. Качнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Изд-во физ.-мат. лит., Москва (1994).
10. A. V. Mikheev, E. L. Nagaev, and E. V. Zhasinos, *Phys. Lett.* **A205**, 101 (1995).
11. A. F. Barabanov and V. M. Beresovsky, *Phys. Lett.* **A186**, 175 (1994).

- 
12. H. J. Schulz, T. A. L. Ziman, and D. Poilblang, *J. Phys.* (Paris) **6**, 675 (1996).
  13. H. Harashina, K. Kodama, S. Shamoto, S. Taniguchi, T. Nishikawa, M. Sato, K. Kakurai, and M. Nishi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1570 (1996).
  14. С.С. Аплеснин, *ФТТ* **38**, 1868 (1996).
  15. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Изд-во физ.-мат. лит., Москва (1988), с.21-23.
  16. L. N. Bulaevskii, A. I. Buzdin, and D. I. Khomskii, *Solid State Commun.* **27**, 5 (1978).
  17. H. Raedt and A. Lagendijk, *Phys. Rep.* **127**, 233 (1985).
  18. С. С. Аплеснин, *ЖЭТФ* **112**, 2184 (1997).
  19. J. E. Hirsch and R. L. Sugar, *Phys. Rev.* **B26**, 5033 (1982).
  20. J. E. Hirsch, P. J. Scalapino, R. L. Sugar, and R. Blankenbecler, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1628 (1981).
  21. J. Richter, *Phys. Rev.* **B47**, 5794 (1993).
  22. F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
  23. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **B42**, 2624 (1990).
  24. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).
  25. I. Affleck, *Phys. Rev.* **B37**, 5186 (1988).
  26. H. A. Schulz and T. A. Ziman, *Europhys. Lett.* **18**, 355 (1992).



---

Quantum spin liquid in 2D anisotropic  
Heisenberg model with frustrated next nearest  
neighbor exchange

S. S. Aplešnin

The two-dimensional Heisenberg model with anisotropic exchange ( $\Delta = 1 - J_x/J_z$ ) and negative next nearest neighbor exchange ( $J_2$ ) with  $S = 1/2$  is

investigated by a quantum Monte-Carlo method. Energy, magnetization on site, heat capacity, spins correlation functions are calculated. The stability regions of the Neel order of spins, strip-phase and gapless quantum spin liquid in the range of  $\Delta/2 \leq J_2/J_1 \leq 1/(2\Delta)$  are determined.