

На правах рукописи

Козлов Николай Александрович

**Магнитные свойства  
2D фрустрированных антиферромагнетиков  
в ВТСП купратах**

01.04.07 - физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Троицк - 2010

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Институте физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор Барабанов Александр Федорович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН,  
профессор Максимов Евгений Григорьевич

доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН,  
профессор Максимов Леонид Александрович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук  
Институт спектроскопии РАН

Защита состоится 15 февраля 2010 года в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 002.97.01 при Учреждении Российской академии наук Институте физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН по адресу: 142190, г.Троицк, Мос. обл., Калужское ш., стр. 14.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФВД РАН.

Автореферат разослан <\_\_\_> января 2010 г.

Ученый секретарь  
Диссертационного совета Д 002.97.01  
кандидат физико-математических наук

Валянская Т.В.

# Общая характеристика работы

## Актуальность работы.

Решающим структурным элементом ВТСП купратов является плоскость  $CuO_2$  (с большой величиной антиферромагнитного спинового обмена  $J \sim 100 \div 150$ ) мэВ. Нейтронные эксперименты это подтверждают: например, спиновые свойства наиболее хорошо изученных  $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$  и  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  подобны, за исключением различий, вызванных наличием двух близко лежащих  $CuO_2$  плоскостей в  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ .

Интенсивный и уже многолетний теоретический анализ свойств плоскости  $CuO_2$  пока не привел к однозначному и общепризнанному пониманию проблемы. Для такого анализа привлекается несколько различных моделей.

Перечислим важнейшие из них. Это во-первых исходная, предложенная сразу после открытия ВТСП, трехзонная модель Хаббарда, которая детально описывает все существенные взаимодействия медь-кислородной плоскости (мы не будем приводить громоздкий гамильтониан модели).

Нередко для упрощения рассматривают однозонный вариант модели Хаббарда, то есть стандартную классическую модель Хаббарда [1, 2] с гамильтонианом

$$\hat{H}_{Hubbard} = t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + b_i^+ b_j) + U \sum_i a_i^+ a_i b_i^+ b_i \quad (1)$$

здесь  $a_i^+$  и  $b_i^+$  рождает на узле  $i$  электрон со спином вверх и вниз,  $t$  и  $U$  – перескоковый интеграл и внутриузельное кулоновское отталкивание,  $\langle ij \rangle$  обозначает пары узлов. Ситуация в купратах отвечает пределу сильной корреляции  $t \ll U$ .

Широко используется также производная от модели Хаббарда  $t - J$  модель

$$\hat{H}_{t-J} = t \sum_{\langle ij \rangle} (\tilde{a}_i^+ \tilde{a}_j + \tilde{b}_i^+ \tilde{b}_j) + J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (2)$$

Первая сумма в  $t - J$  гамильтониане описывает движение скоррелированных электронов (прыжок возможен только на свободный узел), вторая – обменное взаимодействие электронных спинов ( $J \sim t^2/U$ ). Вопрос о корректности перехода от (1) к (2) и возможности отбросить при этом трехузельные члены посвящена обширная литература, не будем на нем останавливаться, стандартные преобразования выполнены в [3, 4, 5, 6].

Некоторые авторы считают, что вся основная физика медь-кислородной плоскости может быть описана в рамках  $s - d$  модели (она же  $s - f$  модель, регулярная модель Кондо, спин-фермионная модель), описывающей взаимодействие спинов локализованных и зонных электронов ( $\mathbf{S}_i$  и  $\mathbf{s}$ , соответственно)

$$\hat{H}_{s-d} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{s} \quad (3)$$

здесь  $c_{i+}^+ = a_i^+$ ,  $c_{i-}^+ = b_i^+$ ; обменный член записан в гейзенберговском виде.

Все эти модели довольно сложны, и все они содержат как свободные носителя, так и взаимодействие свободных носителей с магнитным фоном (в одно- и трехзонной модели Хаббарда выраженное неявно).

Простейшая модель без свободных носителей, то есть описывающая только спиновую подсистему – изотропная двумерная фрустрированная модель Гейзенберга на квадратной решетке:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}} \vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}} \quad (4)$$

Он описывает локализованные на квадратной решетке  $S = 1/2$  спины,  $J_1$  – антиферромагнитная обменная константа для первых ближайших соседей,  $J_2$  – для вторых ближайших,  $\mathbf{g}$ ,  $\mathbf{d}$  – вектора первых и вторых ближайших соседей.

Исследованию некоторых свойств именно этой модели посвящена данная работа.

Везде далее употребляется стандартная переменная  $p$  ("параметр фрустрации")  $p = J_2/(J_1 + J_2)$ ,  $J_1 = (1 - p)J$ ,  $J_2 = pJ$ , все энергетические величины измеряются в единицах  $J$  и считается  $J = 1$ .

Решающее предположение при использовании данной модели для описания свойств слабодопированной  $\text{CuO}_2$  плоскости состоит в соответствии между допированием в моделях со свободными носителями и фрустрацией в чисто спиновой модели, которое впервые предложено в [7]. Это предположение физически естественно: движущаяся дырка разрушает магнитный порядок, в чисто спиновой модели то же происходит с ростом  $p$ . Кроме того, оно основано на сходном характере изменения спиновых корреляторов в зависимости от допирования  $x$  и фрустрации  $p$ . Строгих утверждений относительно соответствия  $x \longleftrightarrow p$  не существует. Однако оказывается, что чисто спиновая фрустрированная модель позволяет воспроизвести основные

свойства спиновой подсистемы купратов в диапазоне допирования от нулевого до оптимального.

Отметим, что фрустрация всегда присутствует в спиновой подсистеме допированной плоскости  $CuO_2$ . Даже в диэлектрическом пределе отношение обмена на вторых соседях к обмену на первых оценивается примерно в  $J_2/J_1 \approx 0.1$  [8].

Итак, фрустрированная 2D модель Гейзенберга непосредственно связана с экспериментом, с другой стороны эта модель представляет существенный общетеоретический интерес. Она занимает важнейшее место в общей задаче об основном состоянии и спектре возбуждений антиферромагнетика (АФМ). В соответствии с теоремой Маршалла, основное состояние антиферромагнетика есть синглет [9]. Считается, однако, что в трехмерном случае двухподрешеточное описание вполне адекватно [10].

Точное решение одномерной модели, в абсолютном соответствии с теоремой Маршалла, показывает, что основное состояние - синглет и подрешетки отсутствуют.

Двумерный случай занимает промежуточное положение. Точное решение здесь отсутствует, есть лишь теорема Мермина-Вагнера [11], которая запрещает дальний порядок при  $p = 0$ , и отличной от нуля температуре. Естественно предположить, что дальнего порядка нет и при  $p > 0, T > 0$  (строгое доказательство отсутствует).

При нулевой же температуре ситуация следующая. Альтернативные вычисления различными методами [12] показывают, что при  $p = 0, T = 0$  дальний порядок существует. Однако, общепризнано, что с ростом фрустрации в области  $J_2/J_1 \approx 0.5$  ( $p \approx 0.3$ ) дальний порядок исчезает с образованием спиновой жидкости.

Этот переход шахматное упорядочение  $\leftrightarrow$  спиновая жидкость является одним из самых ярких и широко обсуждаемых примеров квантового фазового перехода [13, 14, 15, 16], представляющего фундаментальный теоретический интерес.

Таким образом, исследуемая в настоящей работе модель, актуальна как с экспериментальной (свойства спиновой подсистемы ВТСП), так и с теоретической (проблема основного состояния антиферромагнетика и квантовый фазовый переход) точек зрения.

## **Цель и задачи исследований.**

Развитие сферически-симметричного самосогласованного подхода для 2D фрустрированной модели Гейзенберга с учетом затухания спиновых возбуждений, выход за рамки обычно используемых приближений (например, приближение линейных спиновых волн).

Изучение влияния затухания спиновых флуктуаций на динамическую спиновую восприимчивость двумерного фрустрированного (допированного)  $S = \frac{1}{2}$  антиферромагнетика в широком диапазоне по температуре и фрустрации. Описание свойств спиновой подсистемы допированных высокотемпературных сверхпроводников, интерпретация нейтронных экспериментов в купратах. Отметим, что вплоть до настоящего времени не существует регулярного рассмотрения затухания в зависимости от температуры и фрустрации.

Исследование в рамках развитого подхода различий между одно- и двухплоскостными купратами.

Исследование фрустрированной спиновой системы при больших затуханиях спиновых возбуждений вблизи точки квантового фазового перехода. Изучение возможных состояний системы в данной области.

## **Научная новизна работы.**

Впервые изучено влияние температурно-зависящего затухания спиновых возбуждений двумерного антиферромагнетика (2D АФМ) в широком диапазоне по температуре и фрустрации. Это позволило объяснить экспериментально наблюдаемую скейлинговую зависимость динамической магнитной восприимчивости 2D АФМ в широком диапазоне по допированию в сверхпроводящих купратах.

Учет затухания спиновых возбуждений впервые позволил воспроизвести особенности спиновой восприимчивости двухплоскостных купратов относительно случая одноплоскостных купратов.

Вблизи точки квантового фазового перехода для 2D АФМ изучены особенности трансформации из состояния с дальним порядком в состояние спиновой жидкости. При  $T=0$  построена фазовая диаграмма по параметрам фрустрация-затухание (в доступной для сравнения области результаты согласуются с численным моделированием).

Впервые в области точки квантового фазового перехода обнаружено и исследовано нетривиальное состояние с двумя сосуществующими типами дальнего порядка (дальний порядок неелевского типа и дальний порядок

квантовой страйп фазы). Работа содержит существенный методический вклад в развитие сферически-симметричного самосогласованного подхода для спиновых низкоразмерных систем.

### **Практическая и научная значимость работы.**

Полученные результаты являются качественно новыми. Они вносят существенный вклад в понимание физических свойств допированных купратов. Разработанная теория спиновой восприимчивости может быть использована при анализе экспериментальных данных и при теоретических исследованиях физических свойств новых материалов, при постановке дипломных и аспирантских работ. Достоверность результатов обеспечена комплексным характером исследований, использованием хорошо зарекомендовавших себя методов в теории сильнокоррелированных электронных систем, непротиворечивостью с результатами полученными другими авторами для частных предельных случаев, результаты расчетов позволяют понять целый ряд имеющихся экспериментальных данных.

**Личное участие соискателя** в проведении исследований состоит как в постановке задач и развитии методических подходов, так и в определении стратегии самосогласования при разработке и реализации компьютерных программ.

### **Апробация работы.**

В диссертацию вошли материалы, полученные в период с 2005 по 2009 год. Результаты работы докладывались на следующих конференциях: Международная Конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"(Сочи, 2006; Сочи, 2008), Научная конференция МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук"(Москва, 2005; Москва, 2006; Москва, 2007; Москва, 2008; Москва, 2009), Конференция Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления (ИФВД, 2007; ИФВД, 2008; ИФВД, 2009). Работа также докладывалась на семинаре в ИФВД РАН.

### **Публикации.**

По результатам работы опубликовано 4 статьи, 5 тезисов докладов на конференциях и 2 статьи в сборниках ИФВД. Список публикаций приведен в конце автореферата.

### **Структура и объем диссертации.**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Принята сквозная нумерация литературных ссылок

и рисунков. Диссертация содержит 98 страниц текста, включающего 33 рисунка. Список цитируемой литературы содержит 92 наименования.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ.

**Во введении** обоснована актуальность диссертации, сформулированы основные цели и результаты исследования.

**Первая глава** посвящена обзору экспериментальных данных по ВТСП купратам (в первую очередь данные, полученные неупругим рассеянием нейтронов) и некоторых теорий по их трактованию.

Излагаются основные особенности спиновой восприимчивости купратов в зависимости от допирования, температуры и одно-, либо двух- плоскостной ( $CuO_2$ ) структуры.

**Во второй главе** выводится выражение для магнитной восприимчивости в модели одной плоскости с учетом затухания спиновых волн:

$$\chi_{mf}^{\gamma \neq 0}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}, mfs}^2 + i\omega\gamma} \quad (5)$$

Обсуждается экспериментально наблюдаемый скейлинг, и роль затухания в его формировании. Показано, что в рамках используемой модели, для воспроизведения скейлинга мнимой части спиновой восприимчивости, проинтегрированной по квазиимпульсу  $\mathbf{q}$ ,

$$\chi''_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} Im\chi(\mathbf{q}, \omega, T) \quad (6)$$

достаточно постулировать линейную зависимость затухания спиновых возбуждений от температуры  $\gamma \sim T$ .

Скейлинг для нескольких температур  $0.1J \leq T \leq 0.4J$  изображен на Рис.1 (с температурной зависимостью затухания  $\gamma$  и щели  $\Delta$  во вставке). Экспериментальные результаты по скейлингу обычно аппроксимируются функциями  $(2/\pi) \arctan(1.3x)$  или  $1/(n_B(x) + 1)$ .

Рис.2 демонстрирует нарушение скейлингового закона в случаях, когда величина затухания не укладывается в линейный закон  $\gamma = T$ .

В среднем поле магнитную восприимчивость можно представить в следующем виде:

$$Im\chi^{mf}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}} [\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}})]. \quad (7)$$



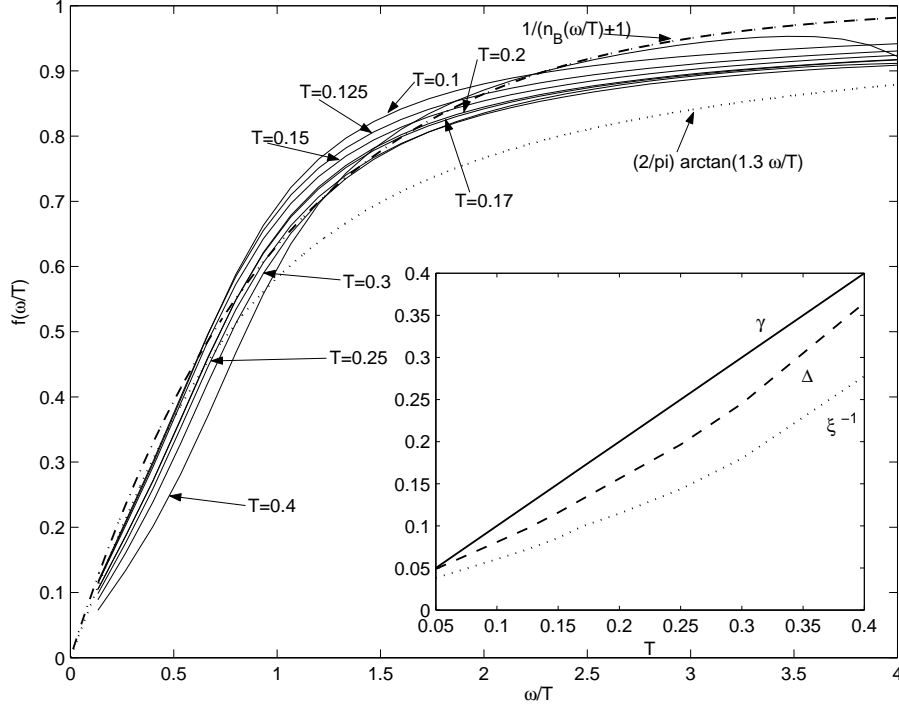


Рис. 1: Скейлинговые кривые  $f = \frac{\chi_{2D}(\omega, T)}{\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0)}$  ( $\chi_{2D}(\omega, T) = \int d\mathbf{q} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega, T)$ ) для набора температур  $0.1J \leq T \leq 0.4J$  как функции  $\omega/T$ . Пунктирная линия -  $(2/\pi) \arctan(1.3x)$ , точка-пунктир -  $1/(n_B(\omega/T) + 1)$  две этих функции используются для аппроксимации экспериментальных результатов по скейлингу. Во вставке щель  $\Delta$  в АФМ точке  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , затухание  $\gamma$  и обратная корреляционная длина  $\xi^{-1}$ , как функции температуры (в единицах  $J = 1$  и постоянная решетки  $a = 1$ ).

Кроме того, в области малых фрустраций аналитически получено, что скейлинговый закон выполняется при линейной температурной зависимости затухания и спиновой щели.

Основной вклад в  $\chi_{2D}(\omega)$  при не слишком больших частотах дает область вблизи точки  $\mathbf{Q}$ :  $\tilde{q} = |\mathbf{q} - \mathbf{Q}| \leq \tilde{q}_0$ , где  $c\tilde{q}_0 \sim J$  - наибольший энергетический параметр задачи (вклад от окрестности  $q = 0$  подавляется числителем  $F_{\mathbf{q}}$  (5)). Тогда разложение спектра  $\tilde{\omega}^2(q) \approx \Delta^2 + c^2\tilde{q}^2$  ( $\Delta \equiv \Delta_{\mathbf{Q}}$ ), и простое интегрирование (6), (7) дает для  $\omega < \omega_0 = c\tilde{q}_0$

$$\begin{aligned} \chi_{2D}(\omega) &= \frac{\overline{F_{\mathbf{q}}}}{4\pi c^2} \left\{ \text{arctg} \left( \frac{c^2\tilde{q}_0^2 + \Delta^2 - \omega^2}{\gamma\omega} \right) - \text{arctg} \left( \frac{\Delta^2 - \omega^2}{\gamma\omega} \right) \right\} = \\ &= \frac{\overline{F_{\mathbf{q}}}}{4\pi c^2} \left[ \begin{array}{ll} \Phi(\omega, \Delta, \gamma); & \theta < 1 \\ \pi + \Phi(\omega, \Delta, \gamma); & \theta > 1 \end{array} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

$$\Phi(\omega, \Delta, \gamma) = \text{arctg} \left\{ \frac{c^2\tilde{q}_0^2\gamma\omega}{\gamma^2\omega^2 + (c^2\tilde{q}_0^2 + \Delta^2 - \omega^2)(\Delta^2 - \omega^2)} \right\} \quad (9)$$

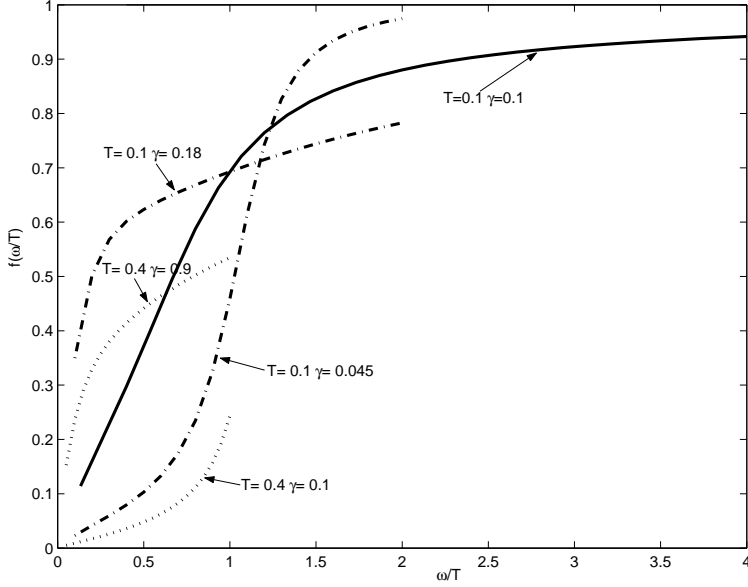


Рис. 2: Отклонения от оптимального скейлинга, когда  $\gamma \neq T$ . Сплошная линия - оптимальный скейлинг.

$$\theta = \frac{(c^2 \tilde{q}_0^2 + \Delta^2 - \omega^2)(\omega^2 - \Delta^2)}{\gamma^2 \omega^2}. \quad (10)$$

Здесь  $\overline{F_{\mathbf{q}}}$  – среднее от медленно меняющейся в рассматриваемой области функции  $F_{\mathbf{q}}$ .

Из эксперимента известно, что скейлинговый знаменатель  $\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0)$  постоянен в широком диапазоне частот. Это же видно из (8) – так как при  $T \rightarrow 0$  в диэлектрическом пределе  $\Delta, \gamma \rightarrow 0$ , то  $\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0) = \frac{\overline{F_{\mathbf{q}}}}{4c^2}$ . Таким образом, скейлинг фактически управляется числителем  $\chi_{2D}(\omega, T)$ , то есть функцией  $\Phi(\omega, \Delta, \gamma)$ , которая при  $\Delta^2, \omega^2, \gamma^2 \ll c^2 \tilde{q}_0^2$  приобретает вид

$$\Phi(\omega, \Delta, \gamma) \approx \arctg \left\{ \frac{\gamma \omega}{(\Delta^2 - \omega^2)} \right\} = \arctg \left\{ \frac{(\frac{\gamma}{T}) \frac{\omega}{T}}{((\frac{\Delta}{T})^2 - (\frac{\omega}{T})^2)} \right\}. \quad (11)$$

Выражение (8) доказывает, что линейности щели и затухания по температуре  $\gamma = \alpha T$  и  $\Delta = \beta T$  являются необходимым условием скейлинга.

В рассматриваемом пределе переключение режимов (8), (10) определяется  $\Theta$ -функцией  $\Theta(\theta) \simeq \Theta(\omega^2 - \Delta^2) = \Theta((\frac{\omega}{T})^2 - \beta^2)$ . Тогда скейлинговая функция приобретает вид

$$\tilde{f}(\frac{\omega}{T}) = \pi \Theta((\frac{\omega}{T})^2 - \beta^2) + \arctg \left\{ \frac{\alpha \omega / T}{(\beta^2 - (\omega / T)^2)} \right\}. \quad (12)$$

В **третьей главе** представлен вывод выражений для акустической и оптической магнитных восприимчивостей в модели двух взаимодействующих  $CuO_2$  плоскостей.

$$\chi_{ac}(q, \omega) = \frac{-2F_{ac}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{ac}^2(\mathbf{q}) - i\omega\gamma}; \quad (13)$$

$$\chi_{opt}(q, \omega) = \frac{-2F_{opt}(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{opt}^2(\mathbf{q}) - i\omega\gamma}. \quad (14)$$

Мнимые части спиновых восприимчивостей имеют вид:

$$\chi''_{ac,opt}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2F_{ac,opt}(\mathbf{q}) \omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_{ac,opt}^2(\mathbf{q}))^2 + \omega^2\gamma^2}. \quad (15)$$

Обсуждаются экспериментальные результаты для  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ .

Мы рассматриваем случаи фрустрации  $p = 0.15$  (относим его к сильно недодопированному режиму  $x = 0.15$ ) и  $p = 0.28$  (режим большого и оптимального допирования  $x \geq 0.5$ ). Везде выбираются фиксированные реалистические значения обменных констант  $J_1 = 120meV$  и  $J_3 = 0.1J_1 = 12meV$ . В случае режима  $p = 0.15$  предполагается сравнительно малое затухание  $\gamma_{p=0.15} \approx 0.1J_1$  и высокая температура  $T_{p=0.15} = 0.25J_1 \approx 300K$  (сравнивать с экспериментом для диэлектрика  $YBa_2Cu_3O_{6.15}$  при  $T = 296K$ ), а для  $p = 0.28$  выбирается  $\gamma_{p=0.28} = J_1$  и  $T_{p=0.28} = 0.07J_1 \approx 90K$  (сравнивать с экспериментом для  $YBa_2Cu_3O_{6.5-6.7}$  при низких  $T$ ).

В качестве спектра, который надо сравнивать с экспериментом (Рис.3а) следует принимать значение частоты  $\tilde{\omega}(\mathbf{q})$ , при которой для фиксированного  $\mathbf{q}$  восприимчивость  $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$  (15) достигает максимума. Для  $p = 0.15$  благодаря малому затуханию  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  практически совпадают с  $\omega_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  (Рис.3б, пунктирные линии). Как видно из сравнения пунктирных линий на Рис.3а и Рис.3б, представленный спектр  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  количественно отражает экспериментальный спектр для диэлектрика.

Для  $p = 0.28$  перенормированный затуханием спектр  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$  представлен на Рис.3б сплошными линиями, положение которых относительно диэлектрического спектра  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  такое же, как у  $\omega_{ac,opt}^{x=0.5}(\mathbf{q})$  относительно  $\omega_{ac,opt}^{x=0.15}(\mathbf{q})$ : на эксперименте  $\omega_{opt}^{x=0.5}(\mathbf{Q}) < \omega_{opt}^{x=0.15}(\mathbf{Q})$ . Сравнение перенормированных  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$  и неперенормированных  $\omega_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$  (Рис.3б, - штрих-пунктир) показывает, что в случае существенного затухания ( $\gamma_{p=0.28} \sim 100meV$ ) эти спектры в точке  $\mathbf{Q}$  могут отличаться на величину

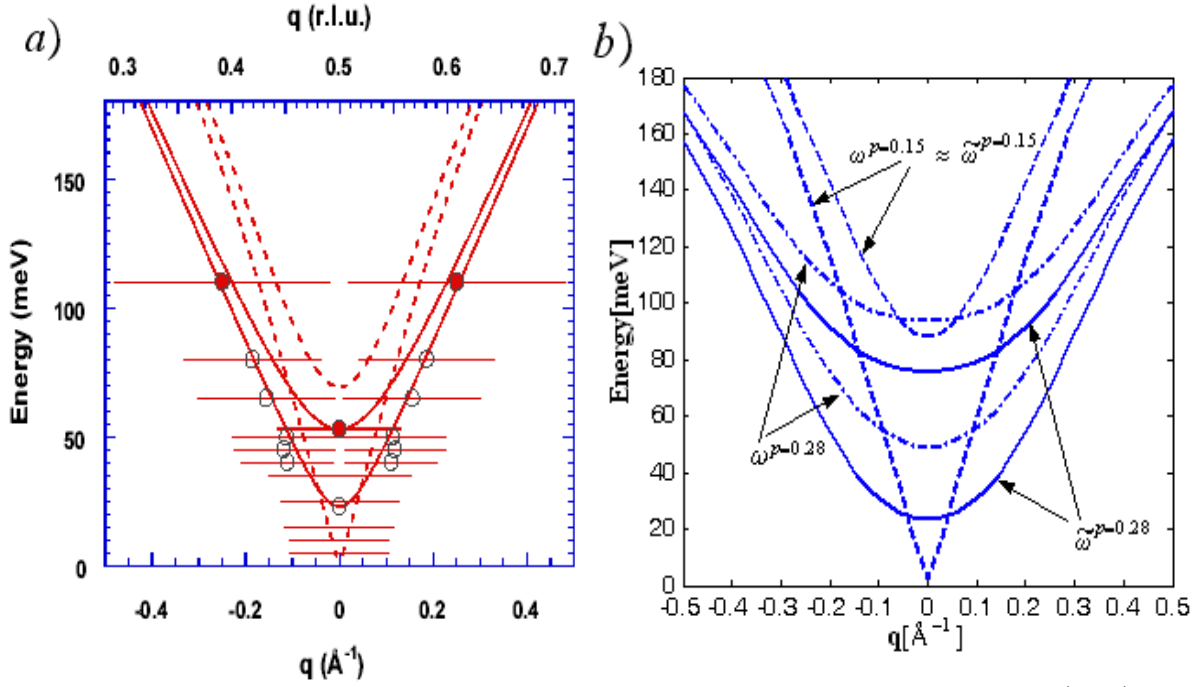


Рис. 3: Спектр акустических и оптических мод относительно точки  $\mathbf{Q} = (\pi; \pi)$ .

a) Данные из нейтронных экспериментов [17]. Пунктирные линии отвечают спектрам  $\omega_{ac,opt}^{x=0.15}(\mathbf{q})$  диэлектрика  $YBa_2Cu_3O_{6.15}$  при  $T = 296K$  [18]. Пустые и полные кружки отвечают соответственно  $\omega_{ac}^{x=0.5}(\mathbf{q})$  и  $\omega_{opt}^{x=0.5}(\mathbf{q})$  для допированного  $YBa_2Cu_3O_{6.5}$  при  $T = 5K$ , сплошные линии - квадратичная подгонка  $\omega^2 = \omega_0^2 + 2q^2$ .

b) Вычисленные спектры для двух фрустраций  $p = 0.15$  ( $T_{p=0.15} = 0.25J_1$ ;  $\gamma_{p=0.15} \approx 0.1J_1$ ) и  $p = 0.28$  ( $T_{p=0.28} = 0.07J_1$ ;  $\gamma_{p=0.28} = J_1$ ) при фиксированных значениях  $J_1 = 120\text{мэВ}$ ,  $J_3 = 12\text{мэВ}$ . Пунктирные линии отвечают спектрам  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  при  $p = 0.15$  (соответствуют пунктирным линиям на Рис.3а). В случае  $p = 0.28$ : штрих-пунктирные линии -  $\omega_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$ ; сплошные линии - спектры  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$ , определяемые по положениям пиков у  $\chi''_{ac,opt}(\mathbf{q}, \omega)$  (сравни со сплошными линиями в Рис.3а.)

порядка 30мэВ. Отметим, что  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$  и  $\omega_{ac,opt}^{p=0.28}(\mathbf{q})$  качественно отличаются:  $\omega_{opt}^{p=0.28}(\mathbf{Q}) > \omega_{opt}^{p=0.15}(\mathbf{Q})$ , а  $\tilde{\omega}_{opt}^{p=0.28}(\mathbf{Q}) < \tilde{\omega}_{opt}^{p=0.15}(\mathbf{Q})$ .

На Рис.4 и Рис.5 представлены  $q$ -проинтегрированные восприимчивости  $\chi''_{2D}{}^{ac,opt}(\omega)$  для  $p = 0.15$  и  $p = 0.28$  соответственно. Результаты качественно согласуются с экспериментальными данными для диэлектрического и сильно допированного (вставка на Рис.5) случаев. Напомним, что вычисленные  $\chi''_{2D}{}^{ac,opt}(\omega)$  строго удовлетворяют правилу сумм, нарушение которого может приводить к некорректным результатам. Рис.4 и Рис.5 так же демонстрируют, что увеличение фрустрации и затухания сдвигает пик  $\chi''_{2D}{}^{ac}(\omega)$  из области  $\omega \approx 250\text{мэВ}$  в область  $\omega \approx 50\text{мэВ}$ , как это и наблюдается на эксперименте при росте допирования.

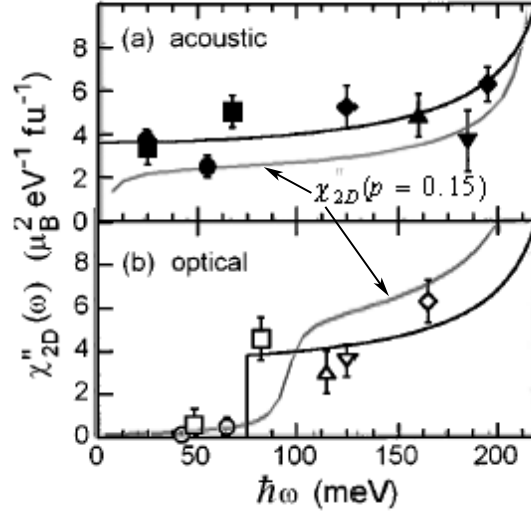


Рис. 4: Экспериментальные (диэлектрик  $YBa_2Cu_3O_{6.15}$ ,  $T = 296K$  [18]) и вычисленные для  $p = 0.15$  (кривые показанны стрелками)  $q$ -проинтегрированные восприимчивости  $\chi''_{2D}{}^{ac}(\omega)$  и  $\chi''_{2D}{}^{opt}(\omega)$ . Вычисленные  $\chi''_{2D}{}^{ac,opt}(\omega)$  отвечают спектрам  $\tilde{\omega}_{ac,opt}^{p=0.15}(\mathbf{q})$  на Рис.3б.

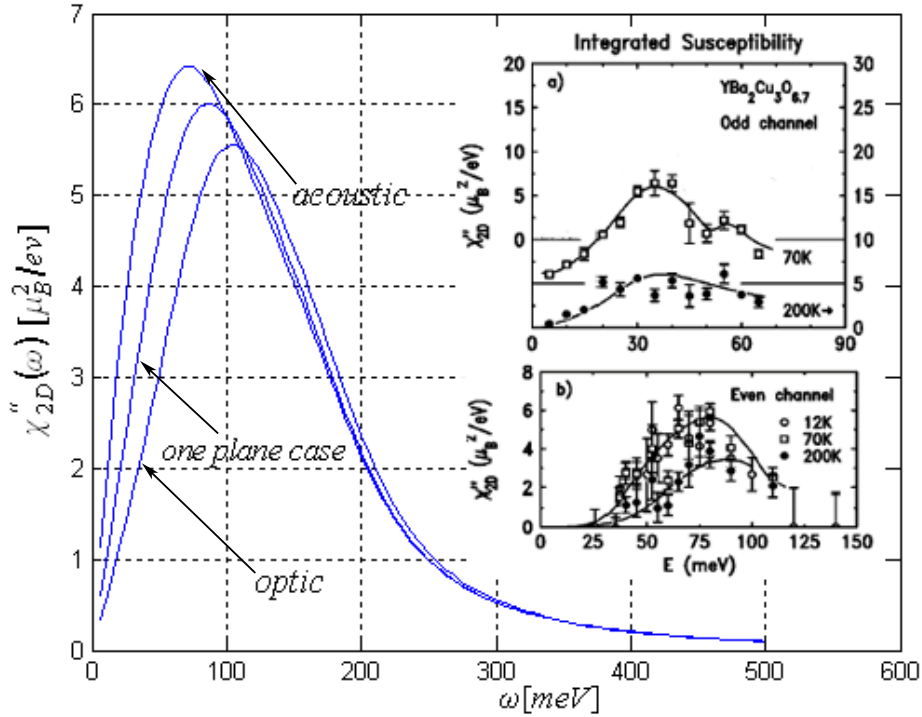


Рис. 5: Вычисленная  $q$ -проинтегрированная восприимчивость  $\chi''_{2D}{}^{ac}(\omega)$  и  $\chi''_{2D}{}^{opt}(\omega)$  для случая  $p = 0.28$ , а так же  $\chi''_{2D}(\omega)$  для одной  $CuO_2$  плоскости ( $J_3 = 0$ ). Параметры те же, что и для Рис.3б. На вставке экспериментальные результаты [19] для сильно допированного  $YBa_2Cu_3O_{6.7}$ : а)  $\chi''_{2D}{}^{ac}(\omega)$ ; б)  $\chi''_{2D}{}^{opt}(\omega)$ .

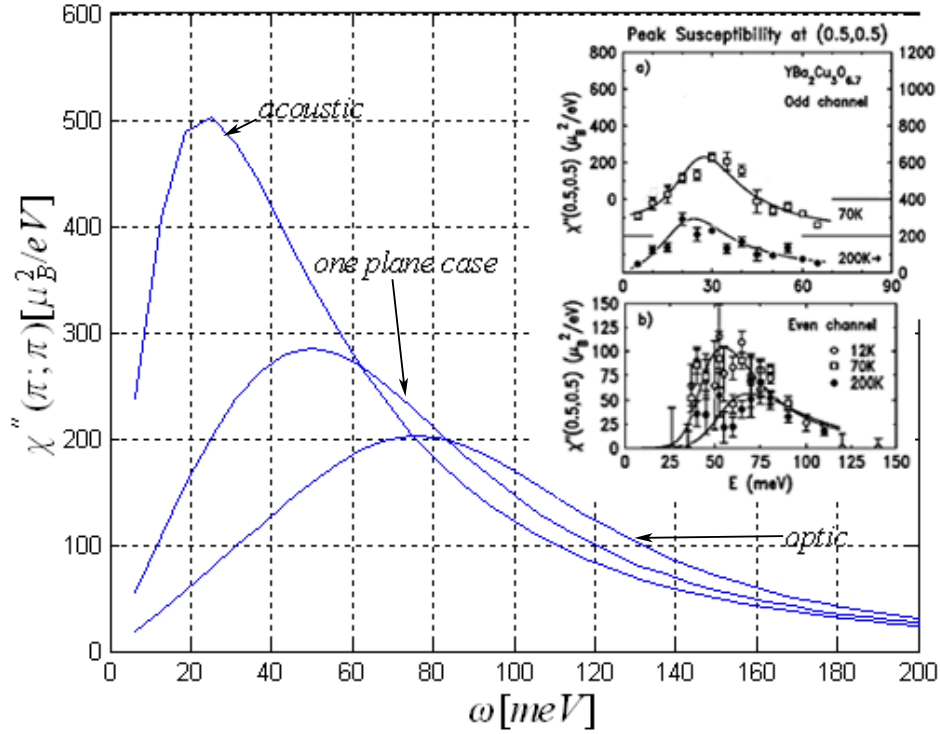


Рис. 6:  $\mathbf{Q}$ -пики ( $\chi''(\mathbf{Q}, \omega)$ ) для случая фрустрации  $p = 0.28$  (параметры те же, что и для Рис.3b). На вставке экспериментальные результаты [19] для сильно допированного  $YBa_2Cu_3O_{6.7}$ .

На Рис.6 приведены экспериментальные и вычисленные  $\mathbf{Q}$ -пики  $\chi''_{p=0.28}(\mathbf{Q}, \omega)$ . Сравнение показывает, что для  $\chi''^{ac}(\mathbf{Q}, \omega)$  высоты и положения пиков качественно совпадают. Ширина  $\mathbf{Q}$ -пика  $\chi''^{ac}_{p=0.28}(\mathbf{Q}, \omega)$  естественно определяется затуханием  $\gamma_{p=0.28}$  и такого же порядка ( $40 \div 50$ мэВ), как на экспериментальных кривых. Поэтому выбранное нами затухание  $\gamma_{p=0.28} = 100$ мэВ представляется реалистичным.

На Рис.7 представлены акустические ветви спектра  $\tilde{\omega}_{ac}(\mathbf{q})$  для  $p = 0.15$  и  $p = 0.28$  в четверти зоны Бриллюэна. Явно видно, что увеличение фрустрации приводит к уменьшению щели в точках  $\mathbf{X} = (0; \pi), (\pi; 0)$  и к возникновению седловой точки в области  $\mathbf{q} = (\pi/2; \pi/2)$ , то есть реализуется страйп сценарий перестройки спиновой системы (при формальном увеличении  $p \rightarrow 1$  щель в точках  $\mathbf{X}$  закрывается и при низких  $T$  состояние системы отвечает когерентной суперпозиции двух классических страйп фаз [20, 21]). Следствием этого является упомянутый сдвиг пика  $\chi''^{ac}_{2D}(\omega)$  в область  $\omega \approx 50$ мэВ.

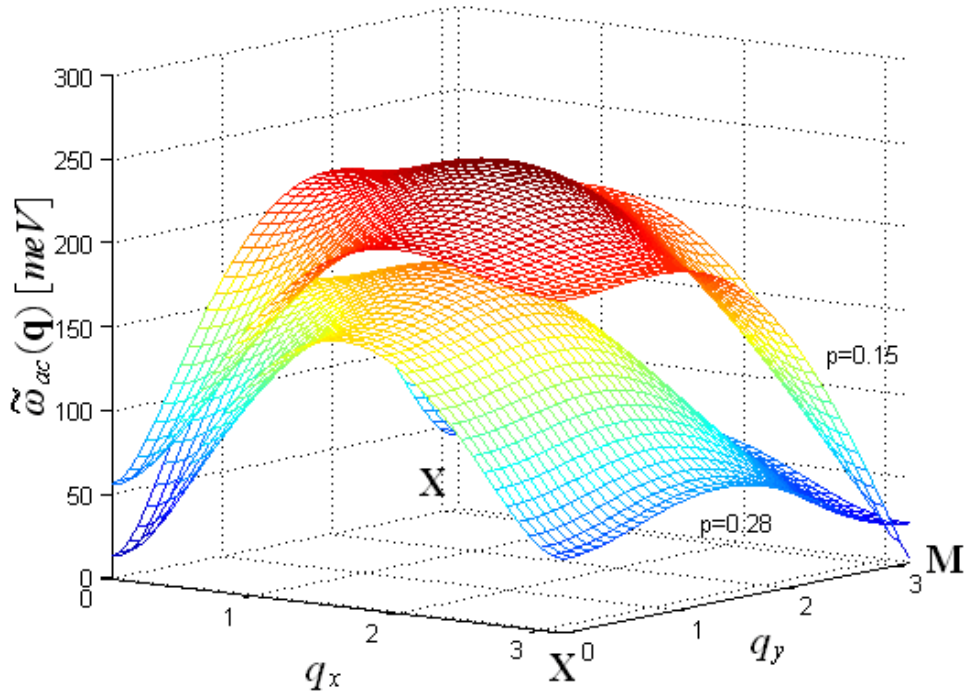


Рис. 7: Акустические ветви перенормированного спектра спиновых возбуждений  $\tilde{\omega}_{ac}(\mathbf{q})$  для  $p = 0.15$  и  $p = 0.28$  (параметры те же, что и для Рис.3b). Показана четверть зоны Бриллюэна,  $\mathbf{M} \equiv \mathbf{Q} = (\pi; \pi)$ ,  $\mathbf{X} = (0; \pi)$ ,  $(\pi; 0)$ .

В **четвертой** главе при  $T = 0$  изучается вопрос влияния затухания спиновых флуктуаций на спиновую корреляционную функцию, определяющую дальний порядок в 2D фрустрированной модели Гейзенберга.

Показано, что для объяснения свойств модели, полученных ранее численными методами важным является введение затухания. В (5) в выражения для  $F_{\mathbf{q}}$  и  $\omega_{\mathbf{q}, mfs}$  входят корреляторы  $c_{\mathbf{r}}$  для первых пяти координационных сфер. Они могут быть выражены через функцию Грина (ФГ)  $G_{\mathbf{q}}^{zz}$ :

$$c_{\mathbf{q}}^z = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega m(\omega) \text{Im} G_{\mathbf{q}}^z; \quad m(\omega) = (e^{\frac{\omega}{T}} - 1)^{-1} \quad (16)$$

В результате для корреляторов получаем систему самосогласованных уравнений, которая решается численно:

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dq c_{\mathbf{q}}^z \gamma_{n,m}(q); \quad r = n g_x + m g_y \quad (17)$$

$$\gamma_{n,m}(q) = \frac{1}{z} \sum e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{1}{2} (\cos(nk_x) \cos(mk_y) + \cos(mk_x) \cos(nk_y)).$$

Определив отсюда  $c_{\mathbf{q}}^z$ , можно найти коррелятор  $c_{\mathbf{r}}$  для любого  $r$ .

При нуле температуры (далее мы рассматриваем только этот предел) структурный фактор  $c_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle$  является суперпозицией обычного члена  $c_{0\mathbf{q}}$  и конденсатных  $\delta$ -членов  $c_0^\nu \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0^\nu)$  в симметричных точках зоны Бриллюэна  $\mathbf{q}_0^\nu$ , отвечающего за дальний порядок. Это соответствует тому, что спин-спиновая корреляционная функция в прямом пространстве принимает форму:

$$c_{\mathbf{r}} = \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{r}}^z | S_{\mathbf{n}}^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{0\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \sum_{\nu} c_0^\nu e^{i\mathbf{q}_0^\nu \mathbf{r}} \quad (18)$$

Первый член в правой части (18) определяет локальные корреляции и исчезает на бесконечных расстояниях  $r \rightarrow \infty$ , второй член (конденсат - модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности) контролирует наличие дальнего порядка. Существование ненулевого конденсатного члена эквивалентно равенству нулю щели спиновго спектра в соответствующих точках  $\mathbf{q}_0^\nu$  зоны Бриллюэна. В частности, для сферически-симметричного неелевского состояния (ССТ-Неель)  $\mathbf{q}_0^{\nu=1} = \mathbf{Q} = (\pi; \pi)$  и дальний порядок имеет вид шахматной структуры

$$\langle S_{\mathbf{r}}^z | S_{\mathbf{0}}^z \rangle_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = c_0^{Neel} (-1)^{n_x + n_y} \quad (19)$$

где  $\mathbf{r} = n_x \mathbf{g}_x + n_y \mathbf{g}_y$ , и  $\mathbf{g}_x = (1, 0)$ ,  $\mathbf{g}_y = (0, 1)$  вектора решетки.

Эффективная намагниченность  $m^{Neel} = \sqrt{c_0^{Neel}}$  зависит от параметра фрустрации  $p$ .

ССТ-Неель состояние реализуется при малых значениях фрустрации.  $m^{Neel}$  убывает от своего максимального значения при  $p = 0$  до нуля в точке  $p_N^*$ , где пропадает дальний порядок ( $p_N^* \sim 0.2$ , [22, 23]). Напомним, что в ССТ  $\langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = 0$  в любой фазе.

При  $T = 0$  в зависимости от фрустрации возникают как решения с конденсатом, так и бесконденсатные спин-жидкостные решения [20, 21].

На Рис.8 представлена полученная в рамках изложенного метода зависимость конденсата  $c_0$  (отвечающего шахматной фазе) от фрустрации  $p$  и затухания  $\gamma$  для значения параметра  $r_\alpha = 1$ , который определяет вершинные поправки:  $r_\alpha = \frac{\alpha_1 - 1}{\alpha_2 - 1}$ , где  $\alpha_{\mathbf{r}}$  - вершинные поправки, входящие в выражение  $\tilde{C}_{\mathbf{r}} = \alpha_{\mathbf{r}} C_{\mathbf{r}}$  (приближение, отвечающее проекционному методу, для трехузельных членов ФГ, возникающих при написании второго уравнения



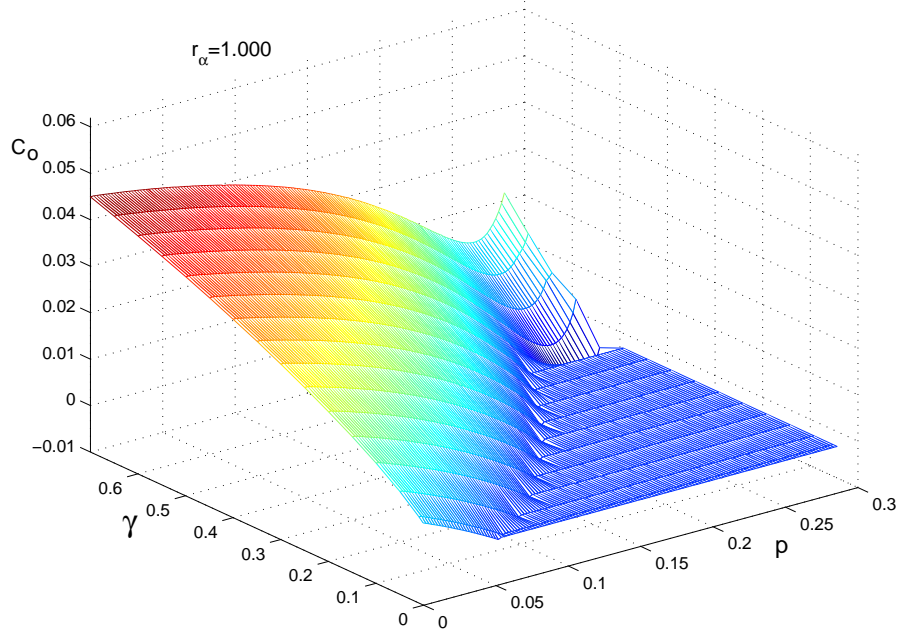


Рис. 8: Зависимость конденсата  $c_0$  (отвечающего шахматной фазе) от фрустрации  $p$  и затухания  $\gamma$  для значения параметра  $r_\alpha = 1.0$ . Линия  $c_0 = 0$  отвечает потере дальнего шахматного порядка (ее пилообразность есть артефакт, вызванный линейной экстраполяцией значений, промежуточных между расчетными).

движения для ФГ). Линия нулевого конденсата отвечает потере дальнего шахматного порядка.

Можно заметить, что при нулевом и малом затухании величина фрустрации в точке перехода очень чувствительна к  $r_\alpha$ , а с ростом затухания эта зависимость ослабевает. Это можно увидеть на Рис.9, на котором показана фрустрация  $p^*$  в точке перехода при  $\gamma = 0.01$  и  $\gamma = 0.5$  в широком диапазоне значений параметра  $r_\alpha$ . Хорошо видно, что при затухании  $\gamma \gtrsim 0.5$  величина фрустрации  $p^*$  в точке перехода почти не зависит от  $r_\alpha$ .

Из Рис.8 видно, что при любом фиксированном значении  $p$  с ростом затухания растет и конденсат, то есть усиливается дальний порядок (так, например, при  $r_\alpha = 1.0$  и  $p = 0.01$  для малого затухания  $\gamma = 0.001$  конденсат  $c_0 = 0.006$ , а для  $\gamma = 0.5$   $c_0 = 0.037$ ). Это можно пояснить следующим образом.

Усиление дальнего порядка связано с наличием в системе спинового констрейнта  $c_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{0\mathbf{q}} + c_0 = 1/4$ , где без затухания, то есть в случае  $c_{0\mathbf{q}}^{\gamma=0} = \frac{F_{\mathbf{q}}}{2\omega_{\mathbf{q}}}$ .

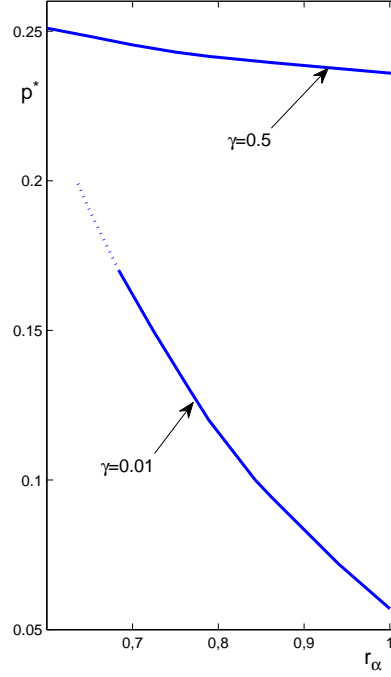


Рис. 9: Фрустрация  $p^*$  в точке потери дальнего шахматного порядка при  $\gamma = 0.01$  и  $\gamma = 0.5$  в зависимости от значения  $r_\alpha$ . Пунктир – экстраполяция в область значений параметров, где самосогласование затруднено.

При ненулевом затухании  $\gamma > 0$  функция Грина имеет вид (5)  $G^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma}$ , и тогда

$$c_{0\mathbf{q}}^{\gamma>0} = F_{\mathbf{q}} I; \quad I = \pi^{-1} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\omega\gamma}{[(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2)^2 + \omega^2\gamma^2];}$$

$$I = \frac{b^{-\frac{1}{2}}}{2\pi} \left[ \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2/2}{\gamma\sqrt{b}}\right) \right]; \quad b = \omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2/4 > 0 \quad (20)$$

$$I = \frac{(-b)^{-\frac{1}{2}}}{4\pi} \ln \left[ \frac{(\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2/2) - (-b)^{-\frac{1}{2}}\gamma}{(\omega_{\mathbf{q}}^2 - \gamma^2/2) + (-b)^{-\frac{1}{2}}\gamma} \right]; \quad b < 0;$$

$$I = \frac{1}{\pi\omega_{\mathbf{q}}}; \quad b = 0.$$

Из (20) легко видеть, что при любом  $\omega_{\mathbf{q}}$  всегда справедливо  $c_{0\mathbf{q}}^{\gamma>0} < c_{0\mathbf{q}}^{\gamma=0}$  из-за переноса спектрального веса в область меньших  $\omega$  при  $\gamma > 0$ . Это означает,

что для выполнения констрейнта при конечном затухании система должна перестроится таким образом, чтобы увеличилась величина конденсата  $c_0$ .

Отметим, что вывод сохраняется в том числе и в пределе  $p = 0$ , то есть для стандартной двумерной модели Гейзенберга.

В области  $p = 0, T = 0$  для 2D модели Гейзенберга существует результаты нескольких альтернативных подходов [12], в том числе расчетов методом Монте-Карло. Последние дают для спин-спинового коррелятора на ближайших соседях оценку  $C_{\mathbf{g}} = 2c_{\mathbf{g}} = -0.223 \pm 0.003$  и для определяемой конденсатом эффективной намагниченности  $m = \sqrt{3c_0} = 0.304 \pm 0.004$  (использована нормировка из [12, 24]).

При  $p = 0$  сферически симметричный подход в приближении среднего поля ( $\gamma = 0$ ) позволяет воспроизвести только одну из указанных величин (при  $r_\alpha = 0.852$   $C_{\mathbf{g}} = -0.223$ , но  $m = 0.253$ , при  $r_\alpha = 0.826$   $m = 0.300$ , но  $C_{\mathbf{g}} = 0.234$  [24]).

В рамках данного подхода, чтобы удовлетворить этим условиям необходимо конечное затухание  $\gamma^* = 0.252$  и  $r_\alpha^* = 0.915$ .

Таким образом, сопоставление результатов самосогласованной ССТ, учитывающей затухания спиновых возбуждений, с данными альтернативных вычислений позволяет получить оценку для величины затухания в двух точках – при нулевой фрустрации  $p = 0$  и в точке потери дальнего шахматного порядка ( $p \simeq 0.275$ ). В обоих пределах затухание оказывается значительным, в первом случае  $\gamma^* \simeq 0.25$ , во втором  $\gamma \simeq 0.55$ . В промежуточном диапазоне фрустраций естественно предположить монотонную, близкую к линейной зависимость затухания от фрустрации, делать количественные оценки такой зависимости пока не представляется возможным.

В **пятой главе** было получено состояние с двумя типами дальнего порядка вблизи точки квантового фазового перехода.

Вблизи точки квантового фазового перехода,  $p \approx 0.3$  обычно рассматривается класс основных состояний 2D АФМ, нарушающие как трансляционную  $\hat{T}_1$  ( $\mathbf{1}$  –вектор решетки), так и спиновую  $SU(2)$  симметрию Гамильтониана. Это состояния полуклассического Нееля с шахматным порядком ( $p < 0.3$ ) и полуклассической страйп фазы ( $p > 0.3$ ). Кроме того существует класс синглетных состояний  $\langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = 0$  valence bond crystal (VBC) ( $p \simeq 0.3$ ,  $\hat{T}_1$  симметрия нарушена,  $SU(2)$  симметрия выполняется). В VBC состояниях спины группируются в пары и образуют синглетные связи,

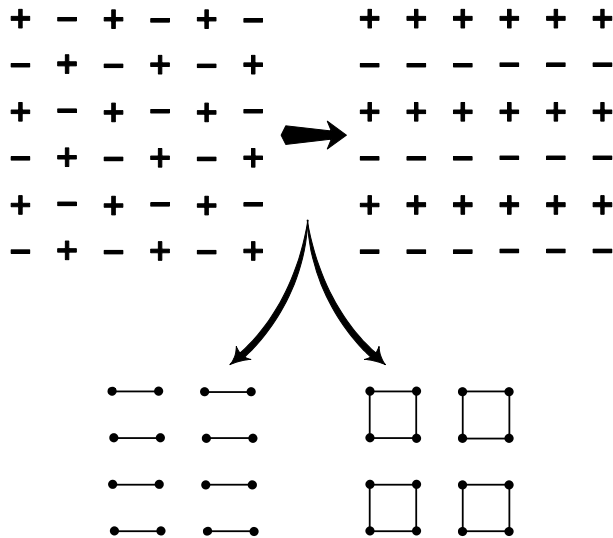


Рис. 10: Чаще всего рассматриваемые состояния для 2D модели Гейзенберга. Вверху слева – квазиклассическое неелевское шахматное состояние, вверху справа – квазиклассическое страйп-состояние, жирная стрелка указывает на переход между ними. Внизу слева columnar VBS, внизу справа – plaquette VBS.

которые в свою очередь образуют периодическую картину. Простейшие VBS состояния - columnar и plaquette изображены на Рис.10.

Мы рассматриваем другой класс возможных состояний - синглетные состояния, отличные от квазиклассических, не нарушающих ни  $\hat{T}_1$ , ни  $SU(2)$ -симметрию. Простейшие состояния такого типа возможно построить в рамках уже упомянутого подхода синглетных связей для ближайших соседей (nearest neighbour valence bond). Волновая функция такого состояния складывается из суммы членов, представленных на Рис.11а. Каждый член задается беспорядочно расположенными синглетными связями, но общее спин-жидкостное состояние является периодическим.

Обобщая подход синглетных связей для ближайших соседей можно рассмотреть подход синглетных связей для синглетных пар на узлах, между которыми расстояния являются произвольными (arbitrary range valence bonds) (Рис.11b). На Рис.11b спин-спиновые корреляционные функции  $\langle S_{\mathbf{r}}^z | S_{\mathbf{0}}^z \rangle_{r \rightarrow \infty}$  на бесконечности в некоторых случаях вообще могут быть отличными от нуля. Это позволяет рассматривать переход из спин-жидкостного синглетного состояния без дальнего порядка в синглетное состояние с дальним порядком.

Сферически-симметричное страйп состояние (ССТ-Страйп) отличается от изображенной на Рис.10 квазиклассической картины в том смысле, что оно является когерентной суперпозицией горизонтальных (как на Рис.10) и

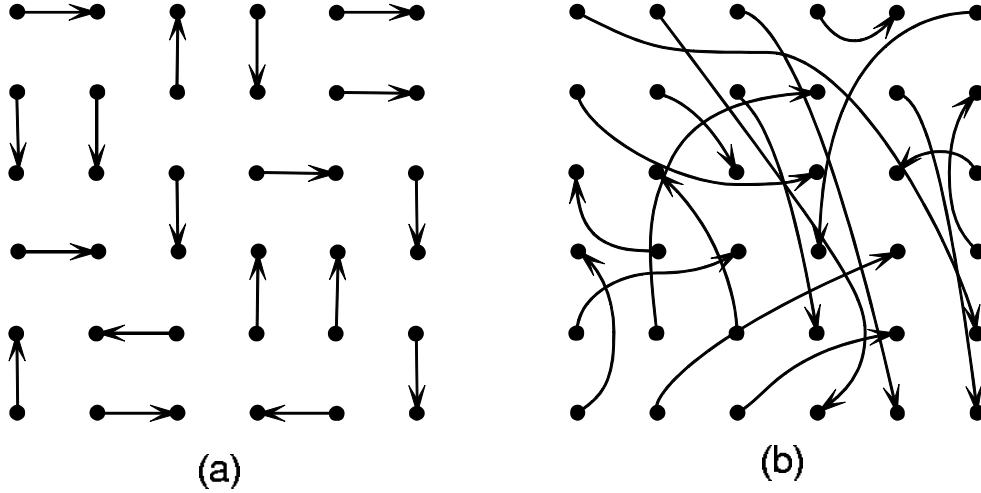


Рис. 11: а) Спиновая жидкость синглетных связей ближайших соседей (nearest neighbour valence bond). б) Спиновая жидкость синглетных связей произвольной длины (arbitrary range valence bond). Стрелка, соединяющая узлы  $i$  и  $j$ , отвечает синглетной связи  $(1/\sqrt{2})(|\uparrow_i\downarrow_j\rangle - |\downarrow_i\uparrow_j\rangle)$ .

вертикальных страйп состояний. Для этого состояния  $\mathbf{q}_0^{\nu=2,3} = \mathbf{X} = (0; \pi)$ ,  $(\pi; 0)$  в (18) и дальний порядок имеет следующий вид:

$$\langle S_{\mathbf{r}}^z | S_{\mathbf{0}}^z \rangle_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = \frac{c_0^{Stripe}}{2} [(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y}] \quad (21)$$

ССТ-Страйп состояния реализуются для больших значений  $p$ . Эффективная намагниченность  $m^{Stripe} = \sqrt{c_0^{Stripe}}$  возрастает от нуля при  $p_S^* \sim 0.5$  [25] до максимального значений при  $p = 1$ .

Бесконденсатное решение с  $c_0^{Neel} = c_0^{Stripe} = 0$  отвечает состоянию спиновой жидкости. В таком случае щели спектра спиновых возбуждений в симметричных точках зоны Бриллюэна открыты, и их значение зависит от параметра фрустрации  $p$ . Корреляционная длина определяется через наименьшее значение щели и так же зависит от фрустрации. В этом смысле это решение является спиновой жидкостью с произвольными связями (Рис.11b). Самосогласованное спин-жидкостное решение реализуется в области средней фрустрации  $p \sim 0.3$  [25, 22, 23].

На Рис.12 представлена энергия для всех типов самосогласованных решений во всем диапазоне по параметру фрустрации  $p$  для различных значений величины затухания  $\gamma$ . Как видно, при малых  $\gamma$  ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) картина качественно не меняется: для различных значений  $\gamma$  реализуются только три типа решений.

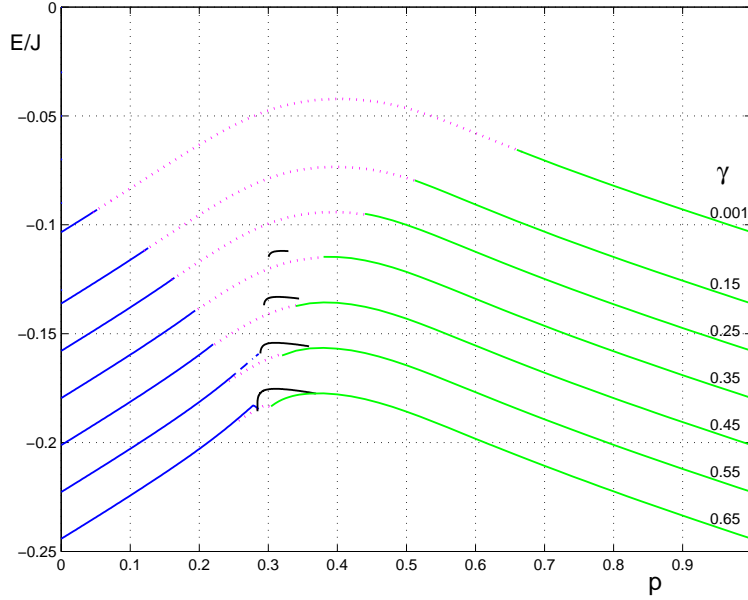


Рис. 12: Энергия всех рассмотренных типов самосогласованных решений для  $0 \leq p \leq 1$  и различных значений затухания  $\gamma$ . Сплошные линии в левой части – ССТ-неелевское решение, сплошные линии справа – ССТ-страйп решение, точки в центре – спин-жидкостное решение, а сплошные линии над последними – при  $p \sim 0.3$  соответствуют двухпорядоченному состоянию. Разметка оси ординат отвечает кривым с  $\gamma = 0.001$ , остальные графики последовательно сдвинуты вниз на  $0.2\gamma$ .

С ростом затухания  $\gamma$  точки перехода  $p_N^*$  (Неель  $\longleftrightarrow$  Спиновая жидкость) и  $p_S^*$  (Спиновая жидкость  $\longleftrightarrow$  Страйп) сдвигаются друг к другу. Область фрустраций для решения спиновой жидкости уменьшается слева с ростом  $\gamma$ , то есть величина  $p_N^*$  растет. Настоящие результаты демонстрируют, что то же верно и для правой части спин-жидкостной области, отвечающей переходам спиновая жидкость  $\longleftrightarrow$  страйп.

Но при  $\gamma \gtrsim 0.3$  для промежуточной области фрустраций  $p \approx 0.3$  появляется новое самосогласованное решение – с двумя сосуществующими типами дальнего порядка. Для значений затухания  $0.3 \lesssim \gamma \lesssim 0.6$  это решение является метастабильным во всей области существования и отделено по энергии от остальных решений.

При  $\gamma \gtrsim 0.6$  рассматриваемое двухконденсатное решение энергетически вырождено со спин-жидкостным решением при  $p \lesssim 0.3$  со страйп решением при  $p \gtrsim 0.3$ , в промежуточном интервале по фрустрации решение остается метастабильным.

Для обнаружения решений, которые могут быть энергетически связанными с двухконденсатным решением, по-видимому, необходимо рассматривать геликоидальное решение с  $\mathbf{q}_0^\nu = (q, \pi), (\pi, q)$ . Его прототипом

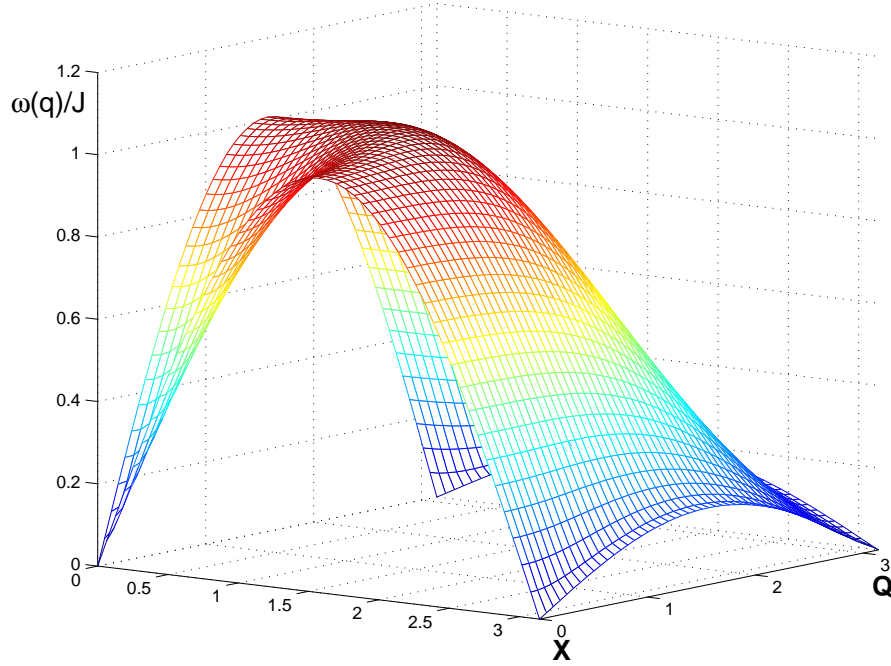


Рис. 13: Спектр спиновых возбуждений  $\omega_{\mathbf{q}}$  для состояния с двумя взаимопроникающими дальними порядками. Параметры фрустрации и затухания  $p = 0.285$  и  $\gamma = 0.65$ . Спектр является бесщелевым в точках  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Q}$ .

в полуклассическом рассмотрении является геликоидальное состояние, возникающее в  $J_1 - J_2 - J_3$  модели Гейзенберга [26, 27]. Изучение подобных решений является нашей дальнейшей задачей.

В **Заключении** перечислены

### Основные положения, выносимые на защиту

**1.** Впервые в широком диапазоне по температуре и фрустрации изучено влияние затухания спиновых флуктуаций на динамическую спиновую восприимчивость двумерного фрустрированного (допированного)  $S = \frac{1}{2}$  антиферромагнетика. Развитый, с учетом затухания, сферически-симметричный самосогласованный подход для модели Гейзенберга позволил выйти за рамки обычно используемых приближений.

**2.** Установлено, что известный экспериментально-феноменологический скейлинговый закон восприимчивости купратов

$$\frac{\chi_{2D}(\omega, T)}{\chi_{2D}(\omega, T \rightarrow 0)} = f\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (22)$$

определяется линейной температурной зависимостью затухания. В области

малых фрустраций аналитически получено, что закон выполняется при линейной температурной зависимости затухания и спиновой щели.

**3.** Для двухплоскостных (иттриевых) купратов теория позволяет описать результаты нейтронных экспериментов для акустической  $\chi_{ac}(q, \omega)$  и оптической  $\chi_{opt}(q, \omega)$  ветвей восприимчивости в широком интервале по допированию. Рассмотрена проблема восстановления значений обменных констант, страйп сценарий формирования пика в области 40 мЭВ у  $q$ -проинтегрированной восприимчивости  $\chi''_{2D}(\omega)$ , сильная перенормировка спектра спиновых возбуждений (обусловленная конечным затуханием).

**4.** Показано, что уже простейший полуфеноменологический учет затухания является принципиальным и заметно изменяет среднеполевые результаты, в частности, приводит к существенному сдвигу точки потери дальнего шахматного порядка в область больших фрустраций. Восстановленная, на базе доступных численных данных, величина затухания оказывается значительной ( $\gamma \sim 0.2 \div 0.5J$ ) во всей области существования шахматного дальнего порядка.

**5.** Найдено нетривиальное состояние с двумя взаимопроникающими типами дальнего порядка около точки квантового фазового перехода  $p^{QPT} \approx 0.28$ . В области затухания  $0.3 \lesssim \gamma \lesssim 0.6$  двуконденсатное решение метостабильно и отделено по энергии с другими решениями. В области  $\gamma \geq 0.6$  в точке квантового фазового перехода двуконденсатное решение вырождено по энергии с шахматной и спин-жидкостной фазами.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

### Статьи

1. Mikheenkov A.V., Varabanov A.F., Kozlov N.A. Self-consistent spin susceptibility in 2D frustrated antiferromagnet // Phys.Lett A. - 2006. - V.354. - pp.320-324.

2. Козлов Н.А., Барабанов А.Ф. К теории спиновой восприимчивости иттриевых купратов в рамках двухплоскостной модели фрустрированного антиферромагнетика // Письма в ЖЭТФ - 2007. - Т.85. - В.11. - с.673-678.

3. Mikheenkov A.V., Kozlov N.A., Varabanov A.F. On the damping in the two-dimensional frustrated Heisenberg model // Physics Letters A. - 2009. - V.373. - p.693.

4. Mikheenkov A.V., Kozlov N.A., Varabanov A.F. Unconventional state with two coexisting long-range orders for frustrated Heisenberg model at quantum



phase transition // статья принята в печать в Phys.Lett.A (2010), Ag5479 accepted; arXiv:0912.4008v1 [cond-mat.str-el] 20 Dec 2009.

## **Тезисы конференций и публикации в сборниках**

1. Козлов Н.А., Михеенков А.В. Роль затухания в спиновой динамике двухмерного фрустрированного антиферромагнетика // В сб.: Труды 48-й научной конференции МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук", Часть VIII. - 2005. - Москва-Долгопрудный, МФТИ. - с.215.

2. Mikheenkov A.V., Barabanov A.F., Kozlov N.A. Scaling in spin subsystem of HTSC // ИФВД, Ежегодник. - 2005. - т.12 с.67.

3. Козлов Н.А. К теории магнитной системы в высокотемпературных сверхпроводниках с учетом квазитрехмерности // В сб.: Труды 49-й научной конференции МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук", Часть VIII. - 2006. - Москва-Долгопрудный, МФТИ. - с.19.

4. Барабанов А.Ф., Михеенков А.В., Козлов Н.А. Роль затухания в спиновой восприимчивости двумерного допированного антиферромагнетика // В сб.: Труды 50-й научной конференции МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук", Часть VIII. - 2007. - Москва-Долгопрудный, МФТИ. - с.135.

5. Козлов Н.А. О влиянии затухания в двумерной фрустрированной модели Гейзенберга // В сб.: Труды 51-й научной конференции МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук", Часть VI-II. - 2008. - Москва-Долгопрудный, МФТИ. - с.114.

6. Михеенков А.В., Козлов Н.А., Барабанов А.Ф., Шварцберг А.В. Оценка затухания в 2D фрустрированной модели Гейзенберга // ИФВД, Ежегодник. - 2008. - т.15. - с.132.

7. Козлов Н.А., Михеенков А.В. К вопросу о состоянии с двумя сосуществующими дальними порядками вблизи точки квантового фазового перехода // В сб.: Труды 52-й научной конференции МФТИ "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук", Часть VIII. - 2009. - Москва-Долгопрудный, МФТИ. - с.83.

# Литература

- [1] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proc. Roy. Soc. A. - 1963. - V.276. - pp.238-257.
- [2] Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution // Proc. Roy. Soc. A. - 1964. - V.281. - pp.401-419.
- [3] Chao K.A. Spalek J., Oles A.M. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band // J. Phys. - 1977. - V.C10. - pp.271-276.
- [4] Harris A.B. Lange R.V. Single Particle Excitations in Narrow Energy Bands // Phys. Rev. - 1967. - V.157. - pp.279-314.
- [5] Brinkman W.F. Rice T.M. Single-Particle Excitations in Magnetic Insulators // Phys. Rev. - 1970. - V.B2. - p.1324.
- [6] Ерёмин М.В. Андреев А.И., Ерёмин И.М. К теории неупругого рассеяния нейтронов в сверхпроводнике  $\text{Pr}_{0.88}\text{LaCe}_{0.12}\text{CuO}_{4-x}$  // Письма в ЖЭТФ. - 2007. - Т.86. - С.386.
- [7] Inui M. Doniach S. and Gabay M. Doping dependence of antiferromagnetic correlations in high-temperature superconductors // Phys. Rev. - 1988. - V.B38. - pp.6631-6635.
- [8] Annet J.F. Martin R. M., McMahan A. K. *et. al.* Electronic Hamiltonian and antiferromagnetic interactions in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  // Phys. Rev. - 1989. - V.B40. - pp.2620-2623.
- [9] Lieb E. Mattis D.C. Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems // J. Math. Phys. - 1962. - V.3. - pp.749-751.
- [10] Auerbach A. Interacting Electrons And Quantum Magnetism / A. Auerbach - New York: Springer - Verlag, LLC, 1994.

- [11] Mermin N.D. and Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // Phys. Rev. Lett. - 1966. - V.17. - pp.1133-1136.
- [12] Manousakis E. The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides // Rev. Mod. Phys. - 1991. - V.63. - pp.1-62.
- [13] Lee P.A. Nagaosa N. and Wen X.-G. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity // Rev. Mod. Phys. - 2006. - V.78. - pp.17-85.
- [14] Sachdev S. Quantum Phase Transitions / S. Sachdev - London: Cambridge Univ. Press, 1999.
- [15] Sachdev S. Quantum magnetism and criticality // Nature Physics. - 2008. - V.4. - pp.173-212.
- [16] Fulde P., Thalmeier P. and Zwicknagl G. Strongly Correlated Electrons // Solid State Physics, Advances in Research and Applications. - 2006. - V.60. - p.1. - cond-mat/0607165 v1.
- [17] Bourges P. The Gap Symmetry and Fluctuations in High Temperature Superconductors ed. by J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna, and S. A. Wolf / P. Bourges - New York: Plenum, 1998. - p.349.
- [18] Hayden S.M., Aeppli G., Perring T.G. *et. al.* High-frequency spin waves in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.15</sub> // Phys. Rev. - 1996. V.B54. - pp.R6905-R6908.
- [19] Fong H.F., Bourges P., Sidis Y. *et. al.* Spin susceptibility in underdoped YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.x</sub> // Phys. Rev. B. - 2000. - V.61. - p.14773.
- [20] Барабанов А.Ф., Березовский В.М. Фазовые переходы второго рода в сферически симметричной теории 2D гейзенберговского фрустрированного антиферромагнетика // ЖЭТФ. - 1994. - В. 106. с.1156. [JETP - 1994. - V.79. p.627].
- [21] Barabanov A.F., Berezovsky V.M. On the Theory of the Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet with Frustration on a Square Lattice // J. Phys. Soc Jpn. - 1994. - V.63. - p.3974.

- [22] Mikheyenkov A.V., Kozlov N.A., Barabanov A.F. On the damping in the two-dimensional frustrated Heisenberg model // Phys. Lett. A. - 2009. - V.373. - p.693.
- [23] Schmalfuss D., Darradi R., Richter J. *et. al.* Quantum J1–J2 antiferromagnet on the stacked square lattice: Influence of the interlayer coupling on the ground-state magnetic ordering // Phys. Rev. Lett. - 2006. - V.97. - p.157201.
- [24] Shimahara H., Takada S. Green's Function Theory of the Two-Dimensional Heisenberg Model–Spin Wave in Short Range Order // J. Phys. Soc. Jpn. - 1991. - V.60. - p.2394.
- [25] Barabanov A.F., Maksimov L.A., Mikheenkov A.V. Spin Polaron in the Cuprate Superconductor: Interpretation of the ARPES Results *Spectroscopy of High- $T_c$  Superconductors. A theoretical View*, ed. N.M. Plakida / A.F. Barabanov, L.A. Maksimov, A.V. Mikheenkov: Taylor&Francis, 2003. - p.1.
- [26] Mambrini M. *et. al.* Plaquette valence-bond crystal in the frustrated Heisenberg quantum antiferromagnet on the square lattice / Phys. Rev. - 2006. - V.B74. - p.144422.
- [27] Moreo A. *et. al.* Incommensurate correlations in the t-J and frustrated spin-1/2 Heisenberg models // Phys. Rev. B. - 1990. V.42. - p.6283.