

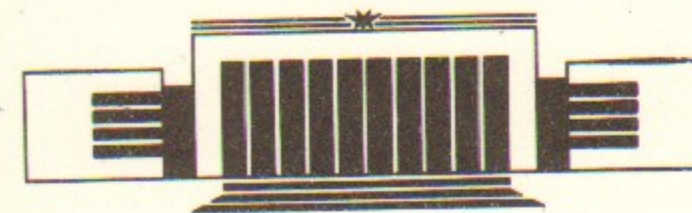


7
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

И.В. Колоколов

О НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ДИНАМИКЕ
ТРЕХМЕРНОГО КВАНТОВОГО
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

ПРЕПРИНТ 89-98



НОВОСИБИРСК

О низкотемпературной динамике
трехмерного квантового антиферромагнетика

И.В. Колоколов

Институт ядерной физики
630090, Новосибирск 90, СССР

АННОТАЦИЯ

В работе изучается низкотемпературная динамика продольных спиновых флуктуаций в квантовом гайзенберговском антиферромагнетике. Вычислены асимптотики на больших временах соответствующих спиновых корреляторов.

1. В настоящей работе изучаются разновременные корреляции продольных спиновых флуктуаций в трехмерном квантовом антиферромагнетике. Она является в значительной степени продолжением статьи [1], однако используемый метод — менее общий и более простой.

2. Теория одно- и двумерных квантовых антиферромагнетиков нетривиальна уже на уровне основного состояния (см. недавний обзор [2]). В трехмерном случае возникает малый параметр $1/Z$ — обратное число ближайших соседей.

Легко показать (см. [3]), что минимальное собственное значение E_0 гамильтониана

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

где J_{ij} — положительно определенная обменная матрица и \bar{S}_i — оператор спина на узле \vec{r}_i , заключено в пределах:

$$E_{\text{кл}} \left(1 + \frac{1}{SZ} \right) < E_0 < E_{\text{кл}}. \quad (2)$$

Здесь $E_{\text{кл}} < 0$ — среднее значение H по классическому вакууму (чередование положительно и отрицательно ориентированных вдоль оси z спинов) и S — максимальная проекция спина ($S = 1/2$ в данной работе). Значит, флуктуации над классическим вакуумом при низких температурах малы либо по параметру $1/Z$, либо по температуре и, изучая их, можно пользоваться теорией возмущений.

В этой работе мы, как и в [1], ограничимся рассмотрением

медленно релаксирующей части связного одновременного продольного спинового коррелятора $\langle S_i^z(0) S_j^z(t) \rangle$. Вместо параметра $1/Z$ более удобен его эрзац-обратный радиус взаимодействия $1/R$, впервые для магнетиков использованный в работах [4]. Именно: мы считаем обменную функцию $J(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ отличной от нуля только между подрешетками с разной ориентацией спинов и для Фурье-образа $J_{\vec{k}}$

$$J_{\vec{k}} = \begin{cases} J_0, & ka < a/R \\ B, & ka > a/R, \end{cases} \quad |B| \approx J_0 \left(\frac{a}{R}\right)^{3/2} \ll J_0 \quad (3)$$

(a — шаг решетки).

3. Мы не будем выписывать, как в [1], точного функционального представления для производящего функционала $G(h)$:

$$G(\vec{h}) = \text{Tr} T \exp \left(-\beta H + \int_0^\beta dt \vec{h}_i(t) \vec{S}_i \right) \quad (4)$$

(здесь и ниже подразумевается суммирование по повторяющимся индексам) из-за его громоздкости, связанной с наличием двух подрешеток. Вместо этого, используя малость поперечных флуктуаций, мы получим для $G(\vec{h})$ приближенное представление и, затем, выражение для $G(h_z)$, содержащее в первом исчезающем порядке интересующие нас эффекты ($G(h_z) = G(\vec{h} = (0, 0, h_z))$). Наша конструкция имеет сходство с построениями работы [5а].

Функционал $G(\vec{h})$ можно записать в виде ([5, 6]; см. также [1]):

$$G(\vec{h}) = \int D\vec{\varphi}(t) \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^\beta dt \vec{\varphi}_k \vec{\varphi}_j J_{kj}^{-1} + \int_0^\beta dt \vec{h}_k J_{kj}^{-1} \vec{\varphi}_j \right) \times \\ \times \prod_l \text{Tr} T \exp \left(i \int_0^\beta dt \vec{\varphi}_l(t) \vec{S}_l \right) \quad (5)$$

Далее мы будем приближенно вычислять след упорядоченной экспоненты как функционал от $\varphi(t)$. (Индекс узла временно опустим).

$$\text{Tr} T \exp \left(i \int_0^\beta dt \vec{\varphi}(t) \vec{S} \right) = \sum_{\sigma=\pm 1} \langle \sigma | T \exp \left(i \int_0^\beta dt \vec{\varphi}(t) \vec{S} \right) | \sigma \rangle =$$

$$= \sum_{\sigma=\pm 1} \exp \left(\frac{i}{2} \sigma \int_0^\beta \rho^\sigma(\tau) dt \right) \quad (6)$$

Здесь $S^z |\sigma\rangle = \frac{1}{2} \sigma |\sigma\rangle$, и

$$\rho^\sigma(t) = \varphi^z(t) + 2\sigma \Psi^+(t) \Psi^-(t) \quad (7)$$

где функции $\Psi^\pm(t)$ определяются из уравнений (см. [1]): для $\sigma = +1$

$$\Psi^- = \varphi^-, \quad -i\dot{\Psi}^+ + \varphi^z \Psi^+ + \Psi^-(\Psi^+)^2 = \varphi^+, \quad \Psi^+(0) = 0, \quad (8)$$

для $\sigma = -1$

$$\Psi^+ = \varphi^+, \quad -i\dot{\Psi}^- - \varphi^z \Psi^- + \Psi^+(\Psi^-)^2 = \varphi^-, \quad \Psi^-(0) = 0 \quad (9)$$

$$\varphi^\pm = \frac{1}{2}(\varphi^x \pm i\varphi^y).$$

Считая $\varphi^+ \varphi^- \ll (\varphi^z)^2$, уравнения (8) и (9) можно решать итерациями. В первом исчезающем порядке получим:

$$\frac{i}{2} \int_0^\beta \rho^\sigma(t) dt = \frac{i}{2} \sigma \int_0^\beta \varphi^z(t) dt - \\ - \int_0^\beta dt \int_0^\beta dt' \theta(\sigma(t-t')) \varphi^-(t) \varphi^+(t') \exp \left(-i \int_t^{t'} d\tau \varphi^z(\tau) \right) \quad (10)$$

Пусть σ_k — функция узла \vec{r}_k , принимающая значение $+1$ на положительной подрешетке, -1 на отрицательной. При низких температурах перевальная конфигурация φ_j^z соответствует классическому вакууму:

$$(\varphi_j^z)_0 = \frac{i}{2} J_{jl} \sigma_l = -\frac{i}{2} J_0 \sigma_j \quad (11)$$

Затравочное квадратичное действие для поперечных мод:

$$S_{tr}^{(2)} = -2 \int_0^\beta dt \varphi_j^+(t) J_{jl}^{-1} \varphi_l^-(t) -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\beta} \int_0^{\beta} dt \int_0^{\beta} dt' \theta(\sigma_l(t-t')) \varphi_l^-(t) \varphi_l^+(t') \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma_l J_0(t-t')\right) \quad (12)$$

описывает обычные магنونные возбуждения под классическим вакуумом. Диагонализация (12) по пространственным индексам достигается введением внутриподрешеточных Фурье-компонент $\varphi_b^{\pm}(\vec{k})$; $b=1, 2$, так, что на подрешетке b : $\sigma_l = (-l)^{b+1} \equiv \sigma^b$, и

$$\varphi_b^{\pm}(\vec{r}_j) = a^3 \int_{\omega} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \varphi_b^{\pm}(\vec{k}) e^{\pm i \vec{k} \vec{r}_j}. \quad (13)$$

где ω — зона Бриллюэна, соответствующая удвоенному периоду исходной решетки. Вычисление пропагаторов полей $\varphi_b^{\pm}(\vec{k})$ сводится к решению системы двух дифференциальных по времени уравнений первого порядка. Нам достаточно знать ответ при $\beta \rightarrow \infty$, $|\vec{k}| > 1/R$:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b^-(t_1, \vec{k}) \varphi_b^+(t_2, \vec{k}) \rangle &= -\frac{1}{2} |B|^2 \theta(\sigma^b(t_1 - t_2)) \exp(-\sigma^b \Omega(t_1 - t_2)) + \\ &+ \frac{1}{8} \left(\frac{|B|^2}{J_0}\right)^2 \theta(\sigma^b(t_2 - t_1)) \exp(\sigma^b \Omega(t_1 - t_2)), \quad (14) \\ \Omega &= \frac{1}{2} J_0 \left(1 - \frac{|B|^2}{2J_0^2}\right). \end{aligned}$$

4. Следующий шаг — вычисление в эффективном действии W для флуктуаций $\eta_j^b(t)$ продольной компоненты:

$$\varphi_b^{\pm}(\vec{r}_j, t) = -\frac{i}{2} J_0 \sigma^b + \eta_j^b(t) \quad (15)$$

квадратичных членов первого порядка по $1/R$, доминантных на низких частотах. Отбор начинается просто: чем больше интегрирований по времени содержит данное слагаемое, тем более оно может оказаться существенным в определении инфракрасного поведения. Из двух членов в $W(\eta)$:

$$\frac{1}{2} (1 + e^{-\beta J_0}) \sum_{j,b} \int_0^{\beta} dt \int_0^{\beta} dt' \theta(\sigma^b(t-t')) \times$$

$$\begin{aligned} &\times \langle \varphi_b^-(t, \vec{r}_j) \varphi_b^+(t', \vec{r}_j) \rangle \exp\left(-\frac{1}{2} J_0 \sigma^b(t-t')\right) \left(\int_{t'}^t \eta_j^b d\tau\right)^2 + \\ &+ \frac{1}{2} e^{-\beta J_0} \sum_{j,b} \int_0^{\beta} dt \int_0^{\beta} dt' \theta(\sigma^b(t'-t)) \langle \varphi_b^-(t, \vec{r}_j) \varphi_b^+(t', \vec{r}_j) \rangle \times \\ &\times \exp\left(-\frac{1}{2} J_0 \sigma^b(t-t')\right) \left(\int_{t'}^t \eta_j^b d\tau\right)^2 \quad (16) \end{aligned}$$

первое, не обращающееся в нуль и при $\beta \rightarrow \infty$, оказывается «нерезонансным». Действительно, в пропагаторе (14) знаки аргументов ступенчатых θ — функций и показателей экспонент взаимно противоположны, и первое слагаемое в (16), имеющее таким образом структуру типа

$$\sim \int_0^{\beta} dt \int_0^t dt' \exp(-J_0(t-t')) \left(\int_{t'}^t \eta_j^b d\tau\right)^2$$

дает вклад в η — η коррелятор, быстро релаксирующий за время $\sim 1/J_0$. Можно проверить, что это утверждение не изменится, если учесть в пропагаторе (14) конечно-температурные поправки (в удерживаемом порядке по $1/R$). Второй же член в (16) вместе со вторым слагаемым в (14) приводят к появлению в эффективном действии для поля η инфракрасно-сингулярной части, а именно:

$$e^{-\beta J_0} \left(\frac{|B|^2}{4J_0}\right)^2 \sum_{j,b} \int_0^{\beta} dt \int_0^t dt' \exp\left(\frac{|B|^2}{4J_0}(t-t')\right) \left(\int_{t'}^t \eta_j^b d\tau\right)^2 \quad (17)$$

В частотно-импульсном представлении, при больших β и с точностью до первого неисчезающего порядка по B/J_0 , слагаемое (17) имеет вид:

$$e^{-\beta J_0} \frac{|B|^2}{2J_0} \sum_{kb} \int \frac{d\omega}{2\pi\omega^2} |\eta_k^b(\omega)|^2. \quad (18)$$

Вспоминая также затравочную часть действия для η :

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{1}{J_{\vec{k}}} \eta_{\vec{k}}^1(\omega) \eta_{\vec{k}}^{2*}(\omega) + \text{к.с.}\right) \quad (19)$$

мы можем вычислить низкочастотную асимптотику $\langle \eta_{\vec{k}}^b(\omega) \eta_{\vec{k}}^{c*}(\omega) \rangle$. Приведем сразу результат продолжения в реальное время и взятия обратного Фурье-образа:

$$\begin{aligned} ka > a/R, \quad t > 0 \\ \langle S_{b=1}^z(t, \vec{k}) S_{b=1}^z(0, -\vec{k}) \rangle &= \langle S_{b=2}^z(t, \vec{k}) S_{b=2}^z(0, -\vec{k}) \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{|B|}{2J_0}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta J_0\right) e^{-mt}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$m^2 = e^{-\beta J_0} |B|^2 / 2J_0,$$

$$\langle S_{b=1}^z(t, \vec{k}) S_{b=2}^z(0, -\vec{k}) \rangle = -\frac{1}{4} \frac{B}{|B|} \sqrt{\frac{|B|}{2J_0}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta J_0\right) e^{-mt}.$$

При переходе в t — представление линия интегрирования по частотам проходила на $+0$ выше вещественной прямой, что соответствует адиабатическому выключению взаимодействия при $t \rightarrow +\infty$.

5. Появление инфракрасно-сингулярных членов при описании продольной динамики имеет простое объяснение — перевернувшийся в результате флуктуации «изинговского типа» (вес $\sim e^{-\beta J_0}$) спин попадает в резонанс с магнонами, имеющими частоту, близкую к величине среднего поля $\frac{1}{2}J_0$. При $a/R \rightarrow 0$ магноны с частотой

$\Omega = \frac{1}{2}J_0 - O\left(\frac{aJ_0}{R}\right)$ занимают большую часть зоны Бриллюэна.

(Важную роль таких магнонов отмечали также авторы работы [7]). При взаимодействии ближайших соседей легко проверить, что средняя по углам частота магнонов в конечной части зоны Бриллюэна $\omega = 1/2J_0 - O(J_0/Z)$, где Z — число этих соседей, и, например, при $Z=8$ наши формулы могут претендовать на полуколичественное описание продольной динамики в реальных кристаллах.

6. В последнее время, в связи с гипотезой [8] об эквивалентности $2D$ — квантового антиферромагнетика $(2+1)$ — мерной сигма — модели с инвариантом Хопфа в действии, появилось несколько работ, посвященных функциональному описанию квантовых магнетиков [9—11]. В качестве функциональной переменной, описывающей спиновые степени свободы, в них предлагается поле единичного вектора $\vec{n}(\vec{r}, t)$, $\vec{n}^2 = 1$. В формальном функциональном интеграле:

$$\int D\vec{n} \exp(-S[\vec{n}]) \quad (21)$$

действие $S[\vec{n}]$ содержит только первую производную по времени поля $\vec{n}(\vec{r}, t)$, причем только в члене типа фазы Берри (площадь, заматаемая при эволюции вектором \vec{n} на единичной сфере). Вместе с компактностью переменной \vec{n} это приводит к бессмысленности формального непрерывного предела (21): при вычислении корреляционных функций поля \vec{n} в действии необходимо учитывать члены $\sim \varepsilon \vec{n}^2$, $\sim \varepsilon^3 \vec{n}^2$, $\sim \varepsilon^3 \vec{n}^4$ и т. д. (Здесь ε — шаг дискретизации. См. также замечание в работе [11]). Если действие S является ограниченным функционалом от компактной динамической переменной, то для функционального интеграла (21) в принципе неприменим метод перевала, являющийся отправной точкой всех приближенных вычислений. Можно привести явный и до конца исследуемый пример, подтверждающий это. Рассмотрим переменную $\vec{n}(t)$, $\vec{n}^2 = 1$, и интеграл по траекториям:

$$\Phi(\lambda) = \int D\vec{n}(t) \exp\left(\lambda \int_0^1 n_z^2(t) dt\right). \quad (22)$$

Нас будет интересовать ведущая экспоненциальная часть асимптотики $\Phi(\lambda \rightarrow +\infty)$. Наивное применение метода перевала дает $\Phi(\lambda) \sim e^\lambda$, поскольку действие имеет максимум, равный λ на траектории $n_z = 1$, $n_{x,y} = 0$.

Точное вычисление интеграла (2,2):

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda) &\stackrel{N \rightarrow \infty}{\approx} \prod_{i=1}^N \int d\vec{n}(t_i) \left(1 + \frac{\lambda}{N} n_z^2(t_i)\right) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\int d\vec{n} \left(1 + \frac{\lambda}{N} n_z^2\right)\right)^N \approx e^{\lambda/3}, \end{aligned} \quad (23)$$

свидетельствует об экспоненциально большом вкладе околореверальных флуктуаций. Компактность поля \vec{n} в нашем примере принципиальна. В книге [12] рассмотрены примеры функциональных интегралов по неограниченным полям с действием, также неограниченным, но, вообще от производных этих полей не зависящим. Подробный анализ показывает несущественность флуктуаций вокруг перевальных точек. С этой точки зрения практическая ценность представления [1] основывается на неограниченности переменных интегрирования.

7. В заключение я хотел бы поблагодарить В.И. Белиничера и О.П. Сушкова за многочисленные обсуждения физических вопро-

сов, относящихся к данной работе. Я благодарен Д.И. Дьяконову и А.В. Родишевскому за стимуляцию написания п. 6.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колоколов И.В., Подивилов Е.В. ЖЭТФ, 1989, т.95, с.211.
2. Affleck I., Univ. of British Columbia Preprint, 1988.
3. Марч Н., Паринелло М. Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях. М.: Мир, 1986.
4. Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. ЖЭТФ, 1967, т.53, с.281; ЖЭТФ, 1967, т.53, 1089.
- 5а. Micnas R. Physica, 1979, т.98А, с.403;
- 5б. Leibler S., Orland H. Ann. of Phys. (NY), 1981, v.132, p.277.
6. Hubbard J. Phys. Lett., 1959, v.3, p.77.
7. Белиничер В.И., Львов В.С. ЖЭТФ, 1984, т.86, с.967.
8. Wiegmann P.B. Phys. Rev. Lett., 1988, v.60, p.821.
9. Fradkin E., Stone M. Illinois prep., ILL-(TH)-88-12, 1988.
10. Jacobson T. Boston Univ. preprint BU-88-12a, 1988.
Johnson K. MIT-preprint CTC-1656, 1988.
11. Orland P. Virginia PI-preprint VPI-IPHEP-88/6, 1988
12. Polyakov A.M. Gauge fields and Strings. Harwood Acad. Publ., 1987.

И.В. Колоколов

О низкотемпературной динамике трехмерного квантового антиферромагнетика

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 24 марта 1989 г.
Подписано в печать 26.06.1989 г. МН 10295
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 0,8 печ.л., 0,7 уч.-изд.л.
Тираж 150 экз. Бесплатно. Заказ № 98

Набрано в автоматизированной системе на базе фото-
наборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» и
отпечатано на ротапинтере Института ядерной физики
СО АН СССР,
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.