На правах рукописи

Валиулин Валерий Эрижанович

ФРУСТРИРОВАННЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ СО СЛОЖНЫМ ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Специальность: 01.04.02 — Теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук Работа выполнена на кафедре теоретической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор Михеенков Андрей Витальевич
Научный консультант:	кандидат физико-математических наук, Щелкачев Николай Михайлович
Ведущая организация:	федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт физики высоких давлений Российской академии наук".

Защита состоится 30.08.2019 в 10:00 на заседании диссертационного совета ЛФИ.01.04.02.001 по адресу: 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Московского физико-технического института (национального исследовательского университета) https://mipt.ru/education/post-graduate/soiskateli-fiziko-matematicheskie-nauki.php

Работа представлена «19» июня 2019 г. в Аттестационную комиссию федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национального исследовательского университет)» для рассмотрения советом по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, доктора наук в соответствии с п.3.1 ст. 4 Федерального закона «О науке и государственной научно-технической политике».

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Магнитные системы со сложным обменным взаимодействием представляют собой широкую область теоретических и экспериментальных исследований, на протяжении многих лет привлекающую значительное внимание. Низкоразмерные, в частности, двумерные соединения особенно интересны из-за значительной, а иногда определяющей роли квантовых флуктуаций. Взрывной рост в изучении двумерных фрустрированных магнетиков был вызван открытием в конце 1980-х годов ВТСП купратов. Однако с тех пор экспериментально обнаружены уже несколько десятков новых квазидвумерных соединений с фрустрированной спиновой подсистемой, одновременно появились новые направления теории.

Еще один важный класс сложных межспиновых взаимодействий образует взаимодействие Дзалошинского-Мории, приводящее к формированию спиновых спиральных структур. Оказывается, однако, что в двумерных моделях спиральные структуры могут инициироваться и другим видом сложного взаимодействия — гейзенберговским обменом с заближайшими соседями.

Третьим примером интенсивно изучаемой системы со сложным обменным взаимодействием является спин-орбитальная модель Кугеля-Хомского. Эта модель, известная уже давно, в последние годы получила новый импульс к развитию после экспериментального обнаружения орбитальных волн. Сейчас модель интенсивно исследуется. Одним из новейших направлений ее изучения является поиск спин-псевдоспиновой квантовой запутанности.

Низкоразмерные спиновые системы, в силу из специфики, плохо поддаются исследованию стандартными методами, такими как хрестоматийный спин-волновой подход. Здесь, как правило, используются специально разработанные либо модифицированные под это класс задач методы. Это, например, модифицированный метод спиновых волн, метод вспомогательных (швингеровских) бозонов, сферически симметричный самосогласованный подход. Отдельная большая область — RVB-теории, то есть подходы, основанные на идее резонансных валентных связей. Сюда же следует добавить широкий спектр современных численных методов. У каждого метода есть свои сильные и слабые стороны, и насколько можно судить, "единоличный лидер" пока не определился. Все это делает задачу исследования низкоразмерных спиновых систем со сложным обменным взаимодействием актуальной, интересной, теоретически и практически значимой.

Целью данной работы является теоретическое изучение низкоразмерных спиновых систем со сложным обменным взаимодействием, определение структу-

ры спинового порядка, спектров спиновых возбуждений и термодинамических свойств.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Определение, а при необходимости модификация и развитие теоретического подхода, адекватного поставленным целям.

2. Исследование структуры спинового порядка, спектров спиновых возбуждений и термодинамических свойств низкоразмерной сильно фрустрированной модели Гейзенберга.

3. Сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными по фрустрированным спиновым системам.

4. Развитие принятого подхода на модели с двумя спиновыми степенями свободы на узле и применение к спин-псевдоспиновой (спи-орбитальной) модели.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Для квантовой $S = 1/2 J_1 - J_2$ модели Гейзенберга на квадратной решетке (в полном диапазоне параметров обмена) при $T \neq 0$ реализуется три структуры ближнего порядка: АФМ, ФМ и полосатая, ближний порядок определяется положением максимума структурного фактора и минимума спектра спиновых возбуждений. Почти везде температурный ход теплоемкости демонстрирует единственный максимум, однако вблизи ФМ ближнего порядка существует область с двухпиковым температурным поведением.

2. Для квантовой $S = 1/2 J_1 - J_2 - J_3$ модели Гейзенберга на квадратной решетке в наиболее интересной — фрустрированной — области параметров обмена при $T \neq 0$ спиновый ближний порядок демонстрирует шесть качественно различных структур. В дополнение к АФМ, ФМ и полосатой возникают три вида геликоидов.

3. Для лантановых ВТСП купратов в области температур 50°К $\lesssim T \lesssim 100$ °К и допирований 0.1 $\lesssim x \lesssim 0.25$ фрустрированная J_1-J_2 модель Гейзенберга дает адекватные значениям спин-спиновой корреляционной длины. Закон соответствия допирования в моделях с носителями и фрустрации в число спиновых моделях – с высокой точностью линейный.

4. При ненулевом третьем обмене J_3 существуют изотропные квантовые геликоиды — структурный фактор имеет максимум, а спиновая щель мала не в точке, а вдоль линии в зоне Бриллюэна. Последнее принципиально невозможно в классическом пределе.

5. Для квантовой $S = 1/2 J_1 - J_2 - J_3$ спиновая восприимчивость (вычисленная в симметричной точке зоны Бриллюэна) максимальна в области ближнего порядка, определяемого этой точкой и резко спадает вне этой области. Для диагонального спирального существуют две сопряженные области с максимальной восприимчивостью. Включение J_3 расширяет область с двухпиковым температурным поведением теплоемкости.

6. $J_1-J_2-J_3$ модель адекватно описывает квазидвумерные соединения с геликоидальным спиновым порядком, без привлечения взаимодействия Дзялошинского-Мории. Для экспериментально изученного соединения (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀ теоретические результаты по структуре спинового порядка, теплоемкости и магнитной восприимчивости хорошо согласуются с экспериментом.

7. В симметричной спин-орбитальной модели в 2D и 1D спин-орбитальные корреляции степенным образом обращаются в нуль при пороговых значениях температуры или параметров обмена. Одновременно — несмотря на отсутствие дальнего порядка — проявляются особенности термодинамических величин, напоминающие фазовый переход. Появление этих особенностей интерпретируется как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния.

Научная новизна:

Впервые исследована квантовая J_1-J_2 модель Гейзенберга в полном диапазоне параметров в рамках единого подхода. Определены спектры спиновых возбуждений и теплоемкость. Продемонстрировано появление двухпикового температурного поведения теплоемкости. Показано, что для ВТСП купратов в области температур 50 °K $\leq T \leq 100$ °K и допирований $0.1 \leq x \leq 0.25 J_1-J_2$ модель приводит к адекватным значениям корреляционной длины. Впервые установлен закон соответствия допирования в моделях с носителями и фрустрации в спиновых моделях.

Впервые $J_1-J_2-J_3$ модель изучена в наиболее интересной — фрустрированной — области параметров обмена. При $T \neq 0$ детектированы шесть типов ближнего порядка. Исследованы спектры спиновых возбуждений и теплоемкость. Впервые показано, что при ненулевом третьем обмене J_3 появляются изотропные квантовые геликоиды — структурный фактор имеет максимум, а спиновая щель мала не в точке, а вдоль линии в зоне Бриллюэна. Последнее принципиально невозможно в классическом пределе.

Показано, что $J_1 - J_2 - J_3$ модель может быть использована для описания квазидвумерных соединений с геликоидальным спиновым порядком. Для $(CuBr)Sr_2Nb_3O_{10}$ получено согласие экспериментальных и теоретических данных.

Впервые показано, что в симметричной спин-орбитальной модели в 2D и 1D спин-орбитальные корреляции степенным образом обращаются в нуль при пороговых значениях температуры или обмена. Одновременно проявляются особенности термодинамических величин. Появление этих особенностей интерпретируется как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния.

Практическая значимость: Результаты, полученные в диссертации, являются существенными для теоретического описания фрустрированных квантовых систем со сложными обменным взаимодействием и играют важную роль при анализе актуальных на сегодняшний день экспериментальных данных по соединениям с нетривиальной магнитной структурой.

Достоверность: Результаты, полученные в рамках диссертационной работы, неоднократно обсуждались и докладывались на специализированных семинарах и конференциях, а также сравнивались с имеющимися численными работами, альтернативными подходами и различными предельными случаями. Основные результаты были опубликованы в российских и международных научных журналах в области темы диссертации. Таким образом, результаты диссертационной работы являются достоверными и отвечают мировому уровню научных исследований. Некоторые из результатов получены автором впервые.

Апробация работы: Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. «Корреляционный портрет двумерного фрустрированного гейзенберговского магнетика», устный, XXXVI Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-XXXVI», 21 – 27 февраля 2016 г., Верхняя Сысерть, Свердловск

2. «Фрустрация и корреляции в двумерной модели Гейзенберга с неближайшими соседями», устный, XXI Международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника», 14 – 18 марта 2016 г., Нижний Новгород

3. «Влияние неближайших соседей на термодинамические свойства двумерного гейзенберговского магнетика», устный, XIV Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», 3 июня 2016 г., Москва

4. «Frustrated and incommensurate states in 2D $J_1 – J_2 – J_3$ Heisenberg model», oral, EASTMAG VI Euro-Asian symposiym «Trends in MAGnetism», August 15-19, 2016 y., Krasnoyarsk, Russia

5. «Обменные спирали в двумерной $J_1 - J_2 - J_3$ -модели Гейзенберга», устный+стендовый, 59 научная конференция МФТИ с международным участием, 21–26 ноября 2016 г., Долгопрудный

6. «Роль фрустрации в формировании двумерных спиральных состояний», стендовый, XXI Международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника», 13–16 марта 2017 г., Нижний Новгород

7. «Описание сложных спиновых систем без взаимодействия Дзялошинского-Мории», устный, XVI конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», 15-25 сентября 2017 г., Сочи

8. «Термодинамические свойства $J_1 - J_2 - J_3$ двумерной модели Гейзенберга», устный, 60-я научная конференция МФТИ, 20-25 ноября 2017 г., Долгопрудный

9. «Квантовые спиральные состояния в сильно фрустрированном двумерном магнетике», устный, XXII Международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника», 12–15 марта 2018 г., Нижний Новгород

10. «Isotropic helical states in frustrated magnetism: continuous transitions on the $J_1-J_2-J_3$ globe», oral, VI International Symposium on Strong Nonlinear Vibronic and Electronic Interactions in Solids, April 28 - May 1, 2018 y., Tartu, Estonia

11. «Квантовые изотропные спирали в двумерном фрустрированном магнетике», устный, XVI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», 7 июня 2018 г., Москва

12. «Перепутанные состояния в одномерной и двумерной модели Кугеля-Хомского», устный, 61-я научная конференция МФТИ, 19-25 ноября 2018 г., Долгопрудный

<u>Личный вклад</u>. Содержание диссертации и ее основные результаты отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Все представленные результаты диссертационной работы были получены диссертантом лично, а его вклад в работы с соавторами являлся определяющим.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 4 научных журналах, состоящих в международной базе цитирования Web of Science.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, трех приложений, заключения и списка использованных источников. Объем работы составляет 131 страницу, содержащую 64 рисунка. Список использованных источников содержит 160 наименований.

Содержание работы

Во **введении** рассматривается общая характеристика диссертационной работы: обосновывается актуальность темы исследований, определяется цель, устанавливаются задачи работы, определяется научная новизна и практическая значимость диссертации, приводятся сведения об апробации результатов и перечисляются положения, выносимые на защиту.

В <u>первой главе</u> приведен краткий обзор современного состояния литературы по системам со сложным обменным взаимодействием. Обсуждается, в частности, роль RVB-связей для описания спиновой жидкости, роль фрустрированных моделей в описании высокотемпературной сверхпроводимости и квантового фазового перехода.

Далее рассматривается современное состояние эксперимента в области систем со сложным взаимодействием, необходимость введение обменов более высокого порядка для теоретического описания экспериментальных данных, а также многообразие экзотических состояний в актуальных на сегодняшний день магнитных соединениях.

Следующий раздел посвящен спин-орбитальной модели, иногда называемой моделью Кугеля-Хомского. Кратко изложена история модели, наиболее любопытные эффекты, описываемые с её помощью, и, в частности, возможность возникновения запутанных состояний в рамках этой модели.

В заключении рассматриваются основные методы изучения фрустрированных моделей как теоретические (полуаналитические), так и численные.

Вторая глава посвящена исследованию основных свойств $J_1 - J_3 - J_3$ модели Гейзенберга на квадратной решетке.

В Разделе 2.1 рассматривается классический предел $S \gg 1$ и все возможные типы дальнего порядка, а также соответствующие им положения управляющей точки. В диссертации обмены J_1 , J_2 и J_3 параметризуются углами φ и ψ : $J_1 = \cos \psi \cos \varphi$, $J_2 = \cos \psi \sin \varphi$, $J_3 = \sin \psi$, $(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2) = 1$

В классическом пределе в модели с одним обменом J_1 возможны только две фазы — ферромагнитная (ФМ) и антиферромагнитная (АФМ). В модели J_1-J_2 между ФМ и АФМ появляется полосатая (страйп) фаза. А в модели $J_1-J_2-J_3$ возникают еще три различных вида спиновых спиралей (геликоидов).

Отмечается, что для мультиобменной модели положению управляющей точки \mathbf{q}_0 соответствует целая линия на плоскости $\varphi - \psi$. То есть интерпретация нейтронного эксперимента лишь по положению брэгговского пика неоднозначна.

В Разделе 2.2 подробно изучается метод, в рамках которого происходят исследования — сферически симметричный самосогласованный подход (СССП). Отмечаются достоинства и недостатки метода, проводится сравнение с альтернативными подходами.

Приведены основные предположения, лежащие в основе метода:

1. в каждом узле решетки локализован спин S = 1/2;

2. симметрия гамильтониана сохраняется — спонтанного нарушения симметрии в спиновом пространстве нет;

3. трансляционная инвариантность и симметрия решетки не нарушены — все узлы равноправны;

8



Рисунок 1 — (Слева) Фазовая диаграмма $J_1 - J_2 - J_3$ модели Гейзенберга на 2D квадратной решетке в классическом пределе. Обмены J_1 , J_2 и J_3 параметризуются углами φ и ψ (показаны в градусах): $J_1 = \cos \psi \cos \varphi$, $J_2 = \cos \psi \sin \varphi$, $J_3 = \sin \psi$. Возможные фазы маркированы положением управляющей точки (или одной из двух эквивалентных) на четверти зоны Бриллюэна: (π,π) — антиферромагнитной (АФМ), $(\pi,0)$ — страйп (полосатая), (0,0) — ферромагнитной (ФМ), (q,q), (π,q) , (q,0) — три вида геликоидальных (спиральных) структур. Фазовая диаграмма не меняется в диапазоне углов $\psi > 40^\circ$, $\psi < -30^\circ$, не показанных на рисунке. (Справа) Для наглядности приведена $J_1 - J_2 - J_3$ -сфера с аналогичной рисунку слева маркировкой фаз.

4. дальний спиновый порядок при $T \neq 0$ отсутствует.

В рамках этих предположений вычисляется спин-спиновая функция Грина:

$$G_{\mathbf{nm}}^{zz} = \langle S_{\mathbf{n}}^{z} | S_{\mathbf{m}}^{z} \rangle_{\omega + i\delta} = -i \int_{0}^{\infty} dt \, e^{i\omega t} \langle [S_{\mathbf{n}}^{z}(t), S_{\mathbf{m}}^{z}] \rangle \tag{1}$$

После замыкания цепочки уравнений движения на втором шаге фурьеобраз функции Грина

$$G(\mathbf{q},\omega,T) = \langle S_{\mathbf{q}}^{z} | S_{-\mathbf{q}}^{z} \rangle_{\omega}, \quad S_{\mathbf{q}}^{z} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^{z}$$
(2)

принимает вид:

$$G(\mathbf{q},\omega,T) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{(\omega+i0)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2},\tag{3}$$

Числитель $F_{\mathbf{q}}$ и спектр спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ зависят от обменных параметров и спин-спиновых корреляционных функций. Эти корреляционные функции выражаются обратно через функцию Грина

$$c_{\mathbf{q}} = \left\langle S_{\mathbf{q}}^{z} S_{-\mathbf{q}}^{z} \right\rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} d\omega \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \operatorname{Im} G(\mathbf{q}, \omega, T).$$
(4)

$$c_{\mathbf{r}_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\mathbf{k}}};\tag{5}$$

где $\mathbf{r_0} = 0$, $\mathbf{r_i}$ (i = 1, ..., 8) принадлежит *i*-й координационной сфере, структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ Таким образом, возникает система девяти самосогласованных уравнений, которая затем решается численно (для $J_1 - J_2$ модели уравнений пять, для J_1 модели — три).



Рисунок 2 — Области фазовой плоскости, отвечающие различным положениям \mathbf{q}_0 максимума структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$, то есть различным структурам ближнего порядка. Сплошные границы отвечают T = 0.4, пунктирные линии — T = 0.2. Различные цвета соответствуют разным структурам ближнего порядка (в исследованном диапазоне параметров обнаружены все возможные в модели структуры). Обозначены положения максимума структурного фактора. Углы φ и ψ показаны в градусах.

В Разделе 2.3 рассматривается уже квантовый предел $S = 1/2 J_1 - J_2 - J_3$ модели Гейзенберга в рамках описанного метода СССП. Фаза здесь при $T \neq 0$ и

любых значениях обменных параметров одна — спиновая жидкость, или, иными словами, парамагнетик с сильными межузельными корреляциями. Реализуются шесть различных структур ближнего порядка: антиферромагнитная, страйп (полосатая), ферромагнитная и три вида геликоидов Рис. 2.

Далее детально рассматривается движение максимума пика структурного фактора при изменении φ от 0° до 180° для двух значений ψ : $\psi = 0°$ ($J_3 = 0$) и $\psi = 10°$ ($J_3 = 0.174$), соответствующие наиболее интересной области Рис. 1 и конечной температуре T = 0.4. Изменение положения пика соответствует смене структуры ближнего порядка, при этом "прыжки" управляющей точки \mathbf{q}_0 сопровождаются непрерывным изменением вида структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$.

Рассмотренные переходы между областями с различной структурой ближнего порядка аналогичны переходам в жидкости [1–6], когда ближний порядок резко меняется в узком диапазоне температур и давлений.

В Разделе 2.4 приводится пример геликоидального ближнего порядка острый пик структурного фактора c_q на диагонали зоны Бриллюэна. Обсуждается интерпретация полученных в СССП подходе результатов в терминах спин-спиновых корреляторов. Симметрия решетки и сферическая симметрия в спиновом пространстве в подходе СССП сохраняются, поэтому привычная интерпретация с помощью спинов-стрелок здесь невозможна.

В Разделе 2.5 обсуждаются результаты, полученные во второй главе.

Третья глава посвящена исследованию важного частного случая — J_1 – J_2 модели с двумя обменами. J_1 – J_2 модель широко используется для изучения эффектов фрустрации в низкоразмерных системах, при исследовании квантового фазового перехода [7], модель адекватно описывает спиновую подсистему ВТСП [8,9].

В Разделе 3.1 описывается экспериментальные соединения и теоретические подходы на J_1-J_2 круге (см. Рис. 3). Существует весомое количество экспериментально исследованных соединений с АФМ знакам как ближайшего, так и следующего обменов: $J_1 > 0$, $J_2 > 0$, множество соединений с ФМ ближайшим обменом и фрустрирующим АФМ вторым обменом: Pb₂VO(PO₄)₂, (CuCl)LaNb₂O₇, SrZnVO(PO₄)₂, BaCdVO(PO₄)₂, a также соединения со слабым фрустрирующим АФМ обменом: K₂CuF₄, Cs₂CuF₄, Cs₂AgF₄, La₂BaCuO₅, и Rb₂CrCl₄.

На Рис. 3 представлена фазовая диаграмма модели S = 1/2 и положения на ней некоторых квазидвумерных соединений. На "глобусе" Рис. 1 эта диаграмма соответствует экватору.

Общепринятая теоретическая картина здесь состоит в следующем. При T=0с ростом φ в системе происходят два последовательных фазовых пере-



Рисунок 3 — Фазовая диаграмма J_1 – J_2 модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в классическом пределе. Точки отвечают соотношению обменов J_1 и J_2 для некоторых слоистых соединений. Обмены J_1 и J_2 параметризуются углом φ : $J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$

хода — из АФМ в неупорядоченную фазу и далее из неупорядоченной фазы в страйп фазу. Вопрос о структуре и границах неупорядоченной фазы, а также о характере обоих переходов остается дискуссионным [10]. При T > 0 в 2D дальний порядок невозможен (теорема Мермина-Вагнера). В реальных соединениях квазидвумерность может приводить к нарушению этого жесткого условия.

Поначалу значительная часть теоретических работ была сосредоточена в первой четверти круга. В 2D в рамках исследовался также чисто ФМ случай $\varphi = \pi \ (J_1 = -1, J_2 = 0)$. Но появление экспериментов во второй четверти круга $\pi/2 < \varphi < \pi$ стимулировало и теоретические работы в этой области.

Таким образом, в верхней половине J_1-J_2 -круга имеется набор экспериментальных точек, а также ряд аналитических и численных работ, выполненных в рамках различных походов в локальных областях параметров. Представляется целесообразным описание общей картины в рамках единого подхода и расширение ее на полный круг параметров.

В Разделе 3.2 обсуждается соотношение между ближним порядком при $T \neq 0$ и возможным дальним порядком при T = 0.

В Разделе 3.3 описывается эволюция основного состояния при T=0.С изменением φ от 0 до 2π система проходит следующую последовательность



Рисунок 4 — Трансформация основного состояния с ростом φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$). Показаны конденсат c_{cond} (модуль спин-спинового коррелятора на бесконечности) и корреляторы на первых трех координационных сферах — c_g , c_d и c_{2q} , соответственно.

фазовых переходов АФМ->страйп->ФМ->АФМ. На Рис. 4 показана зависимость спин-спиновых корреляторов от φ на первых трех координационных сферах и конденсата.

В Разделе 3.4 основное состояние "размораживается" $T \neq 0$ дальний порядок при этом отсутствует для любого φ , а ближний порядок сохраняет память о родительской нультемпературной фазе. Подробно исследуется температурная зависимость корреляционных функция на первых трех координационных сферах и спиновых щелей $\Delta_{\mathbf{Q}}$ и $\Delta_{\mathbf{X}}$ в двух симметричных точках — АФМ ($\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$) и страйп ($\mathbf{Q} = (\pi, 0)$) (щель в точке $\Gamma = (\mathbf{0}, \mathbf{0})$ закрыта при любой температуре и любых значениях φ).

В Разделе 3.5 представлены наиболее интересные виды спектров для верхней и нижней частей J_1-J_2 круга (см. Рис. 3). Детально обсуждается эволюция спектра при полном обходе J_1-J_2 круга.

В Разделе 3.6 представлена зависимость теплоемкости от температуры и параметрического угла φ . Температурная зависимость теплоемкости от имеет максимум для любого значения φ , а при $T \to 0$ теплоемкость стремится к нулю. Наиболее интересным здесь является Рис. 5, соответствующий сильно фрустрированной области φ , где различные типы ближнего порядка конкурируют.



Рисунок 5 — Теплоемкость $C_V(T)$ вблизи значений параметра φ ($J_1 = \cos \varphi$, $J_2 = \sin \varphi$). В точке $\varphi = 155^\circ, C_V(T)$ проявляет двухликовую структуру.

Теплоемкость $c(\varphi,T)$ симметрична по φ относительно минимума $c(\varphi)$ и максимума $E(\varphi)$. Выделяется случай $\varphi = 155^{\circ} \pm 5^{\circ}$ (ФМ область). Здесь, в дополнение к указанной симметричности центральная по φ линия $c(\varphi = 155^{\circ},T)$ демонстрирует второй максимум на низких температурах T. Этот максимум обусловлен фрустрацией. В модели с включенным взаимодействием J_3 дополнительный максимум существует в целой области параметров J_2, J_2, J_3 (см. Главу 4).

В Разделе 3.7 анализируется корреляционная длина в 2D J_1-J_2 S = 1/2 модели Гейзенберга при изменении параметров обмена и температуры. Для вычисления корреляционной длины используется принятая на эксперименте аппроксимация пика $c_{\mathbf{q}}$ лоренцианом

$$c_{\mathbf{q}} \sim \frac{1}{q^2 + \varkappa^2} \tag{6}$$

где q отсчитано от соответствующей симметричной точки, и корреляционная длина принимается равной обратной полуширине на полувысоте $\xi = \varkappa^{-1}$.

(Хотя, строго говоря, в двумерном случае фурье-образ лоренциана $c_{\mathbf{q}}$ — коррелятор в прямом пространстве $c_{\mathbf{R}} = \int d\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} c_{\mathbf{q}}$ — представляет собой функцию МакДональда $c_R = \frac{\pi}{2} K_0(\varkappa R)$, которая даже асимптотически содержит предэкспоненту $c_{R\to\infty} \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} \frac{e^{-\varkappa R}}{\sqrt{\varkappa R}}$.)

Показано качественное различие поведения корреляционной длины на верхней — фрустрированной и нижней — нефрустрированной половинах круга. В Разделе 3.7 установлено количественное соответствие между допированием и фрустрацией, используя экспериментальные данные по температурной зависимости спиновой корреляционной длины при различных значениях допирования в ВТСП. Существенно, что в этом разделе за основу взята усложненная модель с феноменологическим учетом затухания спиновых возбуждений. Соответствующая функция Грина имеет вид [11–13]

$$G_{\gamma}\left(\omega,\mathbf{q}\right) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^{2} - \omega_{\mathbf{q}}^{2} + i\omega\gamma} \tag{7}$$

где γ — параметр затухания, определяемый из дополнительных условий и качественно не меняющий процедуру самосогласования.

Далее производится сравнение полученной в рамках описанной модели корреляционной длины с данными нейтронных экспериментов [14–16] и пересчета $\xi(x,T)$ по ЯМР [17] (см. также обзорные работы [8,18]).

Оказывается, что для лантановых купратов в области температур 50° K $\leq T \leq 100^{\circ}$ K и допирований $0.1 \leq x \leq 0.25$ фрустрированная J_1-J_2 модель Гейзенберга приводит к адекватным значениям спин-спиновой корреляционной длины. Закон соответствия допированием в моделях с носителями и фрустрации в чисто спиновой модели оказывается с высокой точностью линейным:

$$x = k(T)p + b(T) \tag{8}$$

$$k(T) = 1.32 \times 10^{-2} T^{\circ} K - 0.34; \quad b(T) \simeq -0.03$$
 (9)

В Разделе 3.8 обсуждаются результаты, полученные в третьей главе.

Четвертая глава посвящена подробному исследованию влияния третьего обмена J_3 на ближний порядок и спектр спиновых возбуждений. В широком диапазоне температур и обменных параметров приводятся термодинамические характеристики $J_1-J_2-J_3$ модели — теплоемкости и спиновая восприимчивость, обсуждается влияние на них наличия обмена J_3 .

В Разделе 4.1 расширение класса возможных типов ближнего порядка при $J_3 > 0$ и T = 0. В дополнение АФМ, страйп-фазе и ФМ, должны возникать еще три фазы с дальним порядком — спиновые спирали (q,q), (π,q) и (q,0), в общем случае несоизмеримые. Вокруг всех границ при $J_3 > 0$ должны существовать прослойки спиновой жидкости. При T > 0 ближний порядок при различных значениях обменных параметров демонстрирует структуры, характерные для всех шести упомянутых фаз. В Разделе 4.2 исследуется эволюция спектра спиновых возбуждений и структурного фактора с ростом J_3 — при изменении ψ от 0° до 10° для фиксированных значений угла $\varphi = 0^\circ, 35^\circ, 20^\circ, 180^\circ$ и температуры T = 0.2, что соответствует вертикальным линиям на Рис. 2. С ростом ψ тип ближнего порядка либо не меняется ($\varphi = 0^\circ$), либо существенно модифицируется ($\varphi = 20^\circ, 35^\circ, 180^\circ$).



Рисунок 6 — Изменение спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ (a) и структурного фактор $c_{\mathbf{q}}$ (b) с ростом ψ (то есть J_3) при переходе от АФМ ближнего порядка к геликоидальной структуре. $\varphi = 20^{\circ}, \psi = 0^{\circ}$ и $\psi = 10^{\circ}, T = 0.2$. Спектр существенно модифицируется, образуется почти бездисперсионный участок на дуге, проходящей через диагональ зоны Бриллюэна Вдоль той же дуги виден локальный максимум $c_{\mathbf{q}}$.

На Рис. 6а показано изменение $\omega_{\mathbf{q}}$, а на Рис. 6b — структурного фактора с ростом ψ при $\varphi = 20^{\circ}$, что отвечает переходу от AФM ближнего порядка к геликоидальному. Строго говоря, при максимальном $\psi = 10^{\circ}$ образуется геликоид (π, q) (минимум спектра на границе зоны Бриллюэна), но фактически появляется почти бездисперсионная область локального минимума на дуге, проходящей через диагональ зоны Бриллюэна. Такая структура ближнего порядка может быть интерпретирована как изотропное спиральное состояние спиновой жидкости. Оно представляет собой квантовую суперпозицию спиралей, распространяющихся во все стороны, что принципиально невозможно в классическом пределе.

Полученные в этом параграфе результаты указывают на возможность реализации изотропных (или почти изотропных) спиралей, причем вблизи любой границы двух геликоидальных порядков, то есть как около ФМ области (малые φ), так и около АФМ области ($\varphi \simeq 180^{\circ}$).

В Разделе 4.3 для $J_1 - J_2 - J_3$ модели представлена статическая спиновая восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0) = -G^z(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в нескольких симметричных точках зоны Бриллюэна, отмечаются основные особенности ее поведения.



Рисунок 7 — Зависимость теплоемкости $C(T,\psi)$ (а) и восприимчивости $\chi(\Gamma,\omega=0,T,\psi)$ (b) от температуры и ψ при $\varphi=155^\circ$

Восприимчивость, вычисленная в конкретной точке зоны Бриллюэна, максимальна в той области (или областях) плоскости $\varphi - \psi$, где ближний порядок имеет "родную" для этой точки структуру. В остальных областях плоскости $\varphi - \psi$ восприимчивость мала. С ростом J_3 восприимчивость систематически падает. Восприимчивость, вычисленная в АФМ точке, расходится при $J_1 = 0$ и любых значениях остальных параметров.

При $\varphi \approx 155$, где с ростом φ возникает область параметров, где наблюдается существования двух пиков на температурной зависимости теплоемкости. На Рис. 7а представлена функция $C(\psi, T)$ при $\varphi = 155$. Вплоть до $\psi \simeq 5^{\circ}$ зависимость C(T) сохраняет два максимума — острый при низких температурах и более пологий при $T \simeq 0.6$.

Интересно, что восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega = 0)$, вычисленная в отвечающей ФМ порядку точке $\mathbf{q} = \mathbf{\Gamma} = (0,0)$, не проявляет двухпиковой структуры — это видно из Рис. 7b, где восприимчивость показана в тех же осях, что и теплоемкость на Рис. 7a.

В Разделе 4.4 приведена детальная эволюция спектра спиновых возбуждений и структурного фактора при изменении φ от 0° до 180° для фиксированных значений угла $\psi = 10^{\circ}$, эта область соответствует горизонтальной линии в верхней части Рис. 2. Структура ближнего порядка вдоль этой линии изменяется следующим образом: АФМ->геликоид (q,q)->геликоид (π,q) ->страйп->геликоид (q,0)->геликоид (q,q)->геликоид (q,0). Данная линия переходов интересна в силу того, что при $J_3 \neq 0$ в спектре могут возникать целые линии локального минимума (см., например, Рис. 8).

Как уже упоминалось, форма структурного фактора определяет симметрию и структуру соответствующего ему квантового состояния. Вулканоподобная



Рисунок 8 — а) "вулкан" — структурный фактор $c_{\mathbf{q}}$ и соответствующий ему b) "паук" — спектр $\omega_{\mathbf{q}}$. Здесь $\psi = 10^{\circ}$, $\phi = 20^{\circ}$, структура ближнего порядка — $A\Phi M$ геликоид.

форма рисунка 8a) ($\psi = 10^{\circ}, \varphi = 20^{\circ}$) означает изотропное квантовое состояние — максимум $c_{\mathbf{q}}$ образует кольцо с центром в точке (π,π). На этом же кольце наблюдается локальный минимум спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ (Puc.8b). Таким образом, ближний порядок имеет структуру изотропного геликоида. Это состояние можно рассматривать как квантовую суперпозицию направленных в разные стороны несоизмеримых спиралей.

Если мысленно стянуть вулкан к его центру — точке (π,π) , образуется строго АФМ ближний порядок, что указывает на АФМ происхождение несоизмеримого геликоида. Диаметр "кратера" можно рассматривать как параметр несоизмеримости разнонаправленных спиралей, а толщина стенок определяет их корреляционную длину в данном состоянии.

Аналогичная, и даже более ярко выраженная картина наблюдается вблизи ФМ области, где образуется ФМ несоизмеримый геликоид.

Отмечается, что локальный минимум спектра спиновых возбуждений по целой линии в зоне Бриллюэна является предвестником перехода Бразовского [19].

Резюмируя, в этом разделе показано, что среди "зоопарка" экзотических состояний в $J_1-J_2-J_3$ модели Гейзенберга при ненулевом третьем обмене появляются, в частности, изотропные квантовые геликоиды — структурный фактор имеет максимум, а спектр спиновых возбуждений имеет локальный минимум не в одной точке, а вдоль изотропной линии в зоне Бриллюэна.

В Разделе 4.5 обсуждаются результаты, полученные в четвертой главе.

В <u>пятой главе</u> обсуждается возможность использования модели Гейзенберга с тремя обменами для интерпретации эксперимента в слоистых, квазидвумерных соединениях. Существенное изменение, возникающее в модели при включении третьего обмена, состоит в появлении несоизмеримых геликоидальных фаз. Поэтому одним из возможных применений $J_1-J_2-J_3$ модели является интерпретация экспериментальных данных по квазидвумерным соединениям с геликоидальными спиновыми структурами.

В Разделе 5.1 рассматривается широко используемый механизм описания спиновых спиралей — взаимодействие Дзялошинского-Мории. В частности, отмечается, что механизм DMI применим только в случае нарушения в системе центральной симметрии. Однако существуют квазидвумерные соединения, в которых, с одной стороны, детектируются геликоидальные структуры, а с другой — нет нарушения центральной симметрии. Это, например, слоистое соединение (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀, которое довольно хорошо изучено экспериментально. Для его теоретического описания можно использовать $J_1-J_2-J_3$ модель Гейзенберга как альтернативу механизму DMI.

В Разделе 5.2 рассматривается экспериментально наблюдаемый спиновый порядок в $(CuBr)Sr_2Nb_3O_{10}$. Основное состояние — геликоид (q,0) с управляющей точкой $(3\pi/4,0)$ зоны Бриллюэна [20, 21]. В данном случае геликоид соизмеримый — спины поворачиваются при перемещении от узла к узлу вдоль одной из сторон квадрата и на восьмом шагу возвращаются в исходное состояние.

В подходе СССП буквальная интерпретация такого состояния затруднительна, поскольку средний спин на узле, как уже отмечалось, в СССП равен нулю. Свойства системы определяются спин-спиновыми корреляторам, а они, в свою очередь, зависят от структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$. Однако для однозначного определения параметров J_1 , J_2 и J_3 положения управляющей точки недостаточно, а прямое извлечение трех параметров обмена из эксперимента пока не представляется возможным. Конкретный набор обменных параметров фиксировался дополнительным условием: величина J_3 была выбрана минимальной из совместимых с геликоидальным порядком, поскольку физически очевидно, что обмен на третьих соседях не может быть большим. Окончательный набор обменных параметров отвечающих точке ($3\pi/4,0$) в рамках СССП оказался следующим:

$$J_1 = -0.81, \ J_2 = 0.56, \ J_3 = 0.17, \tag{10}$$

что отвечает параметрическим углам $\varphi = 146^{\circ}, \psi = 10^{\circ}.$

В Разделе 5.3 обсуждаются магнитные и термодинамические характеристики, полученные в рамках J_1 - J_2 - J_3 модели для соединения (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀. Отмечается качественное соответствие экспериментальных данных и теоретических результатов.



Рисунок 9 — Синяя кривая — экспериментальная температурная зависимость статической магнитной восприимчивости χ (данные предоставлены Y. Tsujimoto). Красная линия — результаты настоящей работы для χ при выбранных значениях обменных параметров $J_1 = -0.81, J_2 = 0.56, J_3 = 0.17$ (пунктиром показана экстраполяция по закону Кюри-Вейсса в область, где получение самосогласованного решения затруднено). Обе кривые нормированы на их значения в нуле $\chi_0 = \chi(T \to 0)$.

На Рис. 9 показаны данные — экспериментальные [22] и полученные в рамках диссертационной работы для статической магнитной восприимчивости. Из рисунка видно, что теоретические результаты для статической восприимчивости квазидвумерного соединения (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀ находятся в хорошем согласии с экспериментом. Аналогичное сравнение для теплоемкости приведено в самой диссертации.

Таким образом, вычисления в рамках СССП с входными параметрами, определяемыми положением нейтронного брэгговского пика в (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀, приводят к согласию с экспериментальными данными по теплоемкости и статической магнитной восприимчивости.

Далее обсуждается возможность более надежного подтверждения предложенного подхода. Приведен спектр для указанных параметров и отмечены его особенности: большой бездисперсионный участок, локальный минимум на стороне зоны Бриллюэна, "клюв" вблизи АФМ точки (π , π). Эти особенности могут быть экспериментально проверены, что позволит подтвердить, либо подвергнуть сомнению предложенный подход к теоретическому описанию геликоидальных структур в экспериментальных соединениях.

В Разделе 5.4 обсуждаются результаты, полученные в пятой главе.

В <u>шестой главе</u> изучается спин-орбитальная модель, которую часто называют моделью Кугеля-Хомского. Рассматриваются низкоразмерные (одномерный и двумерный) случаи, когда, как уже не раз отмечалось, при конечных температурах отсутствует дальний порядок. В обеих размерностях спин-орбитальные корреляции обращаются в нуль при некоторых пороговых значениях температуры или параметров обмена. Несмотря на обусловленное низкой размерностью отсутствие дальнего порядка, одновременно с пороговым ростом спин-орбитальных корреляций четко проявляются особенности термодинамических величин, напоминающие фазовый переход. Появление этих особенностей интерпретируется как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния.

В Разделе 6.1 кратко рассмотрена история спин-орбитальной модели. В простейшем варианте модель была предложена еще в 1943 году и в канонической форме появилась в 1970-х годах. До конца 1990-х годов исследование модели развивалось умеренными темпами. Пессимизм был вызван существенными экспериментальными трудностями в обнаружении орбитальных (псевдоспиновых) возбуждений, что делало модель в значительной степени умозрительной. Однако в 2000-годах были экспериментально обнаружены орбитоны — орбитальные волны, что стимулировало интерес к модели, и сейчас она исследуется крайне интенсивно. Одно из новейших направлений ее изучения — формирование так называемых "запутанных" (entangled) квантовых состояний [23,24].

В Разделе 6.2 кратко изложены основные свойства модели Кугеля-Хомского, а также развита модификация метода СССП для рассмотрения этой модели.

В Разделе 6.3 рассматривается двумерный случай спин орбитальной модели. Представлены зависимости спин-спиновых и спин-псевдоспиновых корреляторов от параметра межподсистемного обмена *K* и температур *T*.

С ростом межподсистемного обмена K при фиксированной температуре T спин-псевдоспиновые корреляторы равны нулю вплоть до критического значения K_c и затем начинают нарастать степенным образом. При этом возникают особенности термодинамических величин, напоминающие фазовый переход. Появление этих особенностей интерпретируется как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния. Дальний порядок в системе как спиновый, так и орбитальный, строго говоря, отсутствуют.

При входе в область с межподсистемными корреляциями теплоемкость испытывает скачок. Чем выше температура перехода, тем больше величина этого скачка. При высоких температурах все кривые выходят на единую асимптотику, а при $T \to 0$ для всех кривых $C \to 0$. Восприимчивость как и теплоемкость, также испытывает скачок в критических точках.

Таким образом, в 2D случае (на квадратной решетке) возникает область с запутанными спиновой и псевдоспиновой степенями свободы. На плоскости T - K граница запутанного состояния начинается в точке T = 0, K = 0 и представляет собой простую монотонную зависимость $T_c(K)$.

В Разделе 6.4 рассматривается, аналогично предыдущему параграфу, одномерный случай модели Кугеля-Хомского. Необходимо отметить, что, хотя СС-СП подход является среднеполевым (затухание спиновых возбуждений равно нулю), однако в 1D его результаты, приводят к хорошему согласию с данными точного решения (Бете-анзац), а при наличии фрустрации, когда нет точного решения, — с численными результатами.



Рисунок 10 — Одномерный и двумерный случаи. Области с нулевыми и ненулевыми спин-псевдоспиновыми корреляциями. Черная линия — фазовая граница в 1D, синяя — в 2D.

Фазовая диаграмма — совместно для обеих размерностей приведена на Рис. 10. Видно, что одномерный случай качественно отличается от двумерного. В 1D линия, разделяющая области с нулевыми и ненулевыми спин-псевдоспиновыми корреляциями, начинается при конечном межподсистемном обмене, в точке $(K \approx -2.44, T = 0)$. Кроме того, граница раздела немонотонна, что делает возможным возвратный переход в запутанную область по температуре. Эта немонотонность оказывает существенное влияние и на остальные результаты.

Далее в этом параграфе рассмотрены аналогичные зависимости спин-спиновых и спин-псевдоспиновых корреляторов для набора параметров K и T. Наиболее заметная особенность в поведении корреляторов — "пузырь" при K = -2.3 — обусловлена именно возвратным переходом по температуре в запутанную область и обратно.

Как и в 2D, при входе в запутанную область в 1D наблюдается скачок теплоемкости. Однако, знак этого скачка зависит от температуры перехода. На нижней части фазовой границы (см. Рис. 10) скачок положительный, но на верхней — отрицательный. Такое поведение не согласуется с интуитивным представлением о скачке теплоемкости при переходе в более упорядоченную фазу и обусловлено совместным влиянием разнонаправленных изменений внутриподсистемных и межподсистемных корреляторов. Асимптотическое же поведение кривых теплоемкости в пределах высоких и низких температур качественно такое же, как и в двумерном случае.

В заключении параграфа приводятся спин-спиновая χ_{ss} и спин-псевдоспиновая χ_{st} восприимчивости. Их поведение качественно аналогично ситуации в 2D. И спин-спиновая χ_{ss} , и спин-псевдоспиновая χ_{st} восприимчивости испытывают скачок в критических точках. Однако в 1D в областях, где происходит возвратный переход в запутанную область см. Рис. 10, возникает обратный скачок.

Таким образом, в 1D, как и в 2D, возникает область с запутанными спиновой и псевдоспиновой степенями свободы. Однако в этом случае граница $T_c(K)$ запутанного состояния на плоскости T - K немонотонна.

В Разделе 6.5 обсуждаются результаты, полученные в шестой главе.

В заключении приведены основные результаты работы:

1. Для квантовой $S = 1/2 J_1 - J_2 - J_3$ модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке в рамках сферически симметричного подхода вычислены спинспиновые корреляторы в наиболее интересной — фрустрированной — области параметров обмена. Продемонстрирована эволюция ближнего порядка. При $T \neq 0$ спиновый ближний порядок — определяемый положением и полушириной максимума структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$ — качественно воспроизводит все шесть фаз с дальним порядком классического предела.

2. В рамках принятого подхода СССП детально рассмотрена J_1-J_2 модель в полном диапазоне параметров. В широком диапазоне температур вычислены спин-спиновые корреляторы. Определена зависимость вида спектра и спиновых щелей от обменных параметров и температуры. Вычислены энергия и теплоемкость, определены их экстремумы по параметрам обменов, продемонстрировано появление дополнительного пика теплоемкости в определенном диапазоне параметров.

3. В широком диапазоне температур и полном диапазоне обменных параметров вычислена корреляционная длина. Показано, что для лантановых ВТСП купратов в области температур 50°K $\leq T \leq 100$ °K и допирований 0.1 $\leq x \leq 0.25$ фрустрированная J_1-J_2 модель Гейзенберга приводит к адекватным значениям спин-спиновой корреляционной длины. Установлен закон соответствия допирования в моделях с носителями и фрустрации в число спиновых моделях.

4. Рассмотрена эволюция спектра спиновых возбуждений $\omega_{\mathbf{q}}$ и структурного фактора $c_{\mathbf{q}}$ при ненулевом третьем обмене J_3 . Если с ростом J_3 тип ближнего порядка не меняется, $\omega_{\mathbf{q}}$ и $c_{\mathbf{q}}$ модифицируются слабо. Если же происходит переход в область геликоидального ближнего порядка, $\omega_{\mathbf{q}}$ и $c_{\mathbf{q}}$ меняются качественно. Наряду со структурами с четко выраженным максимумом $c_{\mathbf{q}}$ и минимумом $\omega_{\mathbf{q}}$ в определенной точке зоны Бриллюэна, появляются изотропные квантовые геликоиды — структурный фактор имеет максимум, а спиновая щель мала не в точке, а вдоль линии в зоне Бриллюэна. Последнее принципиально невозможно в классическом пределе.

5. В широкой области обменных параметров определена статическая спиновая восприимчивость. Восприимчивость, вычисленная в симметричной точке зоны Бриллюэна, максимальна в области (областях) обменных параметров, которые отвечают соответствующему этой точке типу ближнего порядка, и быстро спадает вне этой области. С ростом J_3 восприимчивость систематически падает. Восприимчивость, вычисленная в АФМ точке, расходится при $J_1 = 0$ и любых значениях остальных параметров.

6. Исследована эволюция теплоемкости при ненулевом третьем обмене J_3 . Теплоемкость при фиксированной температуре в основном слабо модулируется третьим обменом J_3 . Исключение представляет область ФМ ближнего порядка, где теплоемкость заметно зависит от J_3 . Более того, вблизи вблизи ФМ порядка обнаружена область обменных параметров, в которой температурный ход теплоемкости демонстрирует двухпиковую структуру.

7. Показано, что самосогласованный сферически-симметричный подход для двумерной фрустрированной $S = 1/2 J_1 - J_2 - J_3$ модели Гейзенберга может быть использован для описания квазидвумерных соединений с геликоидальным спиновым порядком, в частности, когда стандартное описание с привлечением взаимодействия Дзялошинского-Мории невозможно. На примере соединения $(CuBr)Sr_2Nb_3O_{10}$ получено хорошее согласие экспериментальных и теоретических данных по структуре спинового порядка, теплоемкости и магнитной восприимчивости.

8. Рассмотрена симметричная спин-орбитальная модель в двумерном и одномерном случаях. Вычислена зависимость спин-спиновых и спин-орбитальных (спин-псевдоспиновых) корреляторов от температуры и от параметра межподсистемного взаимодействия K. Определены также зависимости от T и K теплоемкости, спин-спиновой и спин-орбитальными восприимчивостей.

9. В обеих размерностях спин-орбитальные корреляции обращаются в нуль при некоторых пороговых значениях температуры или параметров обмена. Несмотря на обусловленное низкой размерностью отсутствие дальнего порядка, одновременно с пороговым ростом спин-орбитальных корреляций четко проявляются особенности термодинамических величин, напоминающие фазовый переход. Появление этих особенностей интерпретируется как возникновение квантового запутанного спин-орбитального состояния. Корреляционные и термодинамические особенности проявляются разным образом в разных размерностях. В частности, оказывается, что в 1D возможен возвратный (по температуре) переход в состояние с межподсистемными корреляциями.

Публикации автора по теме диссертации

1. Михеенков А. В., Валиулин В. Э., Шварцберг А. В., Барабанов А. Ф. Спин-спиновая корреляционная длина в 2D фрустрированном магнетике и ее связь с допированием // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2015. — № 121. — С. 446.

2. Mikheyenkov A. V., Shvartsberg A.V., Valiulin V.E., Barabanov A. F. Thermodynamic properties of the 2D frustrated Heisenberg model for the entire J_1-J_2 circle // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2016. — Vol. 419. — Pp. 131.

3. Михеенков А. В., Валиулин В. Э., Шварцберг А. В., Барабанов А. Ф. Квантовые спиральные состояния в сильно фрустрированном двумерном магнетике // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2018. — № 153. — С. 483–497.

4. Валиулин В. Э., Михеенков А. В., Кугель К.И., А. В., Барабанов А. Ф. Термодинамика симметричной спин-орбитальной модели: одномерный и двумерный случаи // Письма в ЖЭТФ. — 2019. — № 109. — С. 561 – 567.

Список использованных источников

Katayama, Y. A first-order liquid-liquid phase transition in phosphorus /
 Y. Katayama, T. Mizutani, U. Wataru // Nature. - 2000. - Vol. 403, no. 6766.
 - Pp. 170-173. https://doi.org/10.1038/35003143.

2. New Kinds of Phase Transitions: Transformations in Disordered Substances / V. Brazhkin, S. Buldyrev, V. Ryzhov, Eugene S. — Springer New York, 2002. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-0-387-68734-6_6.

3. *Ryltsev, R.* Multistage structural evolution in simple monatomic supercritical fluids: Superstable tetrahedral local order / R. Ryltsev, N. Chtchelkatchev // *Phys. Rev. E.* - 2013. - Vol. 88. - P. 052101. https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevE.88.052101.

4. *Ryltsev, R.* Universal self-assembly of one-component three-dimensional dodecagonal quasicrystals / R. Ryltsev, N. Chtchelkatchev // *Soft Matter.* — 2017. — Vol. 13, no. 29. — Pp. 5076–5082. https://doi.org/10.1039/c7sm00883j.

5. Self-interaction of NPM1 modulates multiple mechanisms of liquid-liquid phase separation / D. Mitrea, A. Jaclyn, B. Christopher et al. // *Nature Communications.* — 2018. — Vol. 9, no. 1. https://doi.org/10.1038/ s41467-018-03255-3.

6. A liquid-liquid transition in supercooled aqueous solution related to the HDA-LDA transition / S. Woutersen, B Ensing, M. Hilbers et al. // *Science*. - 2018. - Vol. 359, no. 6380. - Pp. 1127-1131. https://doi.org/10.1126/science.aao7049.

7. Sachdev, S. Quantum Phase Transitions / S. Sachdev. -2edition. - Cambridge University Press, 2011.

8. *Plakida, N.* Theoretical Models of High-Tc Superconductivity / N. Plakida // High-Temperature Cuprate Superconductors. — Springer Berlin Heidelberg, 2010. — Springer Series in Solid-State Sciences no. 166. — Pp. 377-478. http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-12633-8_7.

9. Tranquada, J. Neutron scattering studies of antiferromagnetic correlations in cuprates / J. Tranquada // Handbook of High-Temperature Superconductivity / Ed. by J. Robert Schrieffer, James S. Brooks. — Springer New York, 2007. — Pp. 257-298. http://link.springer.com/chapter/10.1007/ 978-0-387-68734-6_6.

10. Thermodynamics of the frustrated J1-J2 Heisenberg ferromagnet on the body-centered cubic lattice with arbitrary spin / P. Muller, J. Richter, A. Hauser, D. Ihle // *The European Physical Journal B.* - 2015. - Vol. 88, no. 6. - P. 159. https://doi.org/10.1140/epjb/e2015-60113-7.

11. Barabanov, A. Frustrated quantum two-dimensional $J_1 - J_2 - J_3$ antiferromagnet in a spherically symmetric self-consistent approach / A. Barabanov, A. Mikheyenkov, A. Shvartsberg // Theor. Math. Phys. - 2011. -Vol. 168, no. 3. - Pp. 1192-1215. http://www.springerlink.com/content/ hp50h2j71j831p22/.

12. *Mikheyenkov, A.* Self-consistent spin susceptibility in 2D frustrated antiferromagnet / A. Mikheyenkov, A. Barabanov, N. Kozlov // *Physics Letters A.* - 2006. - Vol. 354, no. 4. - Pp. 320 - 324. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960106001496.

13. Mikheenkov, A. Spin susceptibility of cuprates in the model of a 2D frustrated antiferromagnet: Role of renormalization of spin fluctuations in describing neutron experiments / A. Mikheenkov, A. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2007. — Vol. 105, no. 2. — Pp. 347–359. https://doi.org/10.1134/S1063776107080079.

14. Magnetic excitations in pure, lightly doped, and weakly metallic La₂ CuO₄ / B. Keimer, N. Belk, R. Birgeneau et al. // *Phys. Rev. B.* - 1992. - Vol. 46. - Pp. 14034-14053. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.14034.

15. Aeppli, G. Nearly singular magnetic fluctuations in the normal state of a high-T_c cuprate superconductor / G. Aeppli // Science. -1997. - Vol. 278, no. 5342. - Pp. 1432–1435. https://doi.org/10.1126/science.278.5342.1432.

16. Measurement of the q-dependent static spin susceptibility $\chi'(q)$ in YBa₂Cu₃O_{6.9} / T. Imai, C. Slichter, A. Paulikas, B. Veal // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 47. – Pp. 9158–9161. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB. 47.9158.

17. Monien, H. Collective excitations and sum rules for the Hubbard model in the spin-density-wave regime / H. Monien, K. Bedell // Phys. Rev. B. - 1992. - Vol. 45. - Pp. 3164-3167. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45. 3164.

18. Mason, T. Spins in the vortices of a high-temperature superconductor / T. Mason // Science. - 2001. - Vol. 291, no. 5509. - Pp. 1759-1762. https://doi.org/10.1126/science.1056986.

19. Brazovskiy, S. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state / S. Brazovskiy // Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics.
1975. - Vol. 41. - P. 85. http://adsabs.harvard.edu/abs/1975JETP...
41...85B.

20. Magnetic correlation in the square-lattice spin system (CuBr)Sr₂Nb₃O₁₀: A neutron diffraction study / S. Yusuf, A. Bera, C. Ritter, Y. Tsujimoto // Phys.

Rev. B. - 2011. - Vol. 84. - P. 064407. https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevB.84.064407.

21. Ritter, C. Field-induced evolution of magnetic ordering in the quantum spin system (CuBr)Sr2Nb3O10 with a 1/3 magnetization plateau / C. Ritter, S. Yusuf, K. Bera, Anup // Phys. Rev. B. - 2013. - Vol. 88. - P. 104401.

22. 1/3 Magnetization plateau in spin-1/2 square lattice antiferromagnet $(CuBr)Sr_2Nb_3O_{10}$ / Y. Tsujimoto, Y. Baba, N. Oba et al. // JPSJ. — 2007. — Vol. 76, no. 6. — P. 063711. https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.063711.

23. Bengtsson, I. Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement / I Bengtsson, K. Zyczkowski. — Cambridge University Press, 2006. https://www.cambridge.org/core/books/geometry-of-quantum-states/ 4BA9DCEED5BB16B222A917EAAAD17028.

24. *Benenti, G.* Principles of Quantum Computation and Information / G. Benenti, G. Casati, G. Strini. — World Scientific Publishing, 2007. https://www.worldscientific.com/worldscibooks/10.1142/5528.

Валиулин Валерий Эрижанович

ФРУСТРИРОВАННЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ СО СЛОЖНЫМ ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать 29.06.2019. Заказ № 248 Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 50 экз. Типография МФТИ