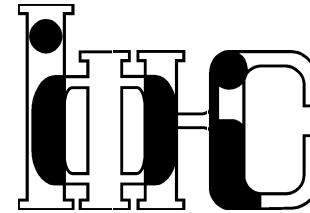


Heisenberg model studied using an extended Wigner-Jordan transformation. // Phys. Rev. B vol. 43, 3786-3789 (1991).

37. Y. R. Wang. Low-dimensional quantum antiferromagnetic Heisenberg model studied using Wigner-Jordan transformation. // Phys. Rev. B vol. 46, 151-161 (1992).
38. A. W. Sandvik. Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model. // Phys. Rev. B vol. 56, 11678-11690 (1997).

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-15-01U

О.Р. Баран, Т.М. Верхоляк

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
СПІН-1/2 $J_1 - J_2$ МОДЕЛІ ГАЙЗЕНБЕРГА
НА ПРЯМОКУТНІЙ ФРУСТРОВАНІЙ ҐРАТЦІ
В НАБЛИЖЕННІ ТИПУ СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ
В РАМКАХ МЕТОДУ ФЕРМІОНІЗАЦІЇ ЙОРДАНА-ВІГНЕНА.
АНТИФЕРОМАГНІТНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ НЕЕЛЯ

ЛЬВІВ

УДК: 548:573.611.4

PACS: 75.10.Jm

Термодинамічні властивості спин-1/2 $J_1 - J_2$ моделі Гайзенберга на прямокутній фрустрованій ґратці в наближенні типу середнього поля в рамках методу ферміонізації Йордана-Віґнера. Антиферромагнітне впорядкування Нееля

О.Р. Баран, Т.М. Верхоляк

Анотація. Спин-1/2 модель Гайзенберга на прямокутній ґратці з взаємодіями найближчих та наступних після найближчих сусідів розглянута в рамках перетворення Йордана-Віґнера. До фазових множинників та до членів, які описують взаємодію безспінових ферміонів, у ферміонізованому гамільтоніані застосовано наближення типу середнього поля. У випадку впорядкування Нееля в основному стані розраховано залежність магнітного параметра порядку від параметра фрустрації. Результат порівнюється із результатами інших методів.

Thermodynamical properties of spin-1/2 $J_1 - J_2$ Heisenberg model on frustrated rectangular lattice within Jordan-Wigner fermionization and mean-field approach. The Néel order

O.R. Baran, T.M. Verkholyak

Abstract. The rectangular-lattice spin-1/2 Heisenberg model with nearest-neighbor, and next-nearest-neighbor interactions is considered by means of the Jordan-Wigner transformation. We use a mean-field type approximation for phase factors as well as for the terms which describe the spinless fermion interaction in the fermionized Hamiltonian. In the case of Néel phase the dependence of the magnetic order on frustration parameter is obtained in the ground-state. The obtained result is compared with the result of other analytical and numerical methods.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

© Інститут фізики конденсованих систем 2015
Institute for Condensed Matter Physics 2015

1. Вступ

В даній роботі в рамках методу, базованому на перетворенні Йордана-Віґнера, будемо досліджувати термодинамічні властивості антиферромагнітної спин-1/2 моделі Гайзенберга (АФММГ) із взаємодіями між найближчими та між наступними після найближчих сусідами ($J_1 - J_2$ модель) на прямокутній ґратці. Ця модель була введеною в працях [1,2] у зв'язку із дослідженням купратних високотемпературних надпровідників і відтоді є однією із найбільш інтенсивно досліджуваних моделей в теорії конденсованих систем. Такий інтерес до $J_1 - J_2$ АФММГ є як суто теоретичний і пов'язаний із тим, що вона є однією із найпростіших квантових моделей з фрустраціями, так і практичний, оскільки вона виявляється ефективною для опису ряду магнітних матеріалів, зокрема VOMoO_4 , $\text{Li}_2\text{VO}\text{SiO}_4$ та $\text{Li}_2\text{VO}\text{GeO}_4$ (див. роботи [3–6]). Окрім того, таку просту модель із квантовими фрустраціями досліджують (див. наприклад [7–9]) також і у зв'язку з вивченням фази квантової спінової рідини [10].

На даний час існує багато теоретичних підходів, які використовуються при дослідженні квантових спінових систем з фрустраціями. Так, $J_1 - J_2$ АФММГ на квадратній ґратці розглядалась, зокрема, в рамках таких методів: у високотемпературному розвиненні [6], методом ренормалізаційної групи матриці густини [7,8], квантовим методом Монте-Карло [9], на основі теорії функцій Гріна [11–13], а також методами зв'язаних кластерів [14–16] та точної діагоналізації [17,18].

Поряд із цими методами досить ефективними можуть виявитися різноманітні підходи та наближення, в яких використовуються різні варіанти двовимірного перетворення Йордана-Віґнера. Вперше одновимірне перетворення Йордана-Віґнера, яке дозволяє перейти від спінових операторів до операторів Фермі, було реалізоване в роботі [19] для спин-1/2 одновимірного XY ланцюжка. Пізніше були запропоновані різні узагальнення цього перетворення на двовимірні та тривимірні випадки (див. огляд [20]), які досить інтенсивно застосовуються при дослідженні як термодинамічних, так і динамічних властивостей різноманітних систем [21–35].

В своїй роботі ми реалізуємо ферміонізацію Йордана-Віґнера, яка було запропонованою для АФММГ на квадратній ґратці при взаємодії лише найближчих сусідів у праці [36], до спин-1/2 $J_1 - J_2$ АФММГ на прямокутній ґратці. Обмежимося наближенням типу середнього поля, як у роботах [22,36], і розглянемо лише випадок антиферромагнітного впорядкування Нееля. Отримаємо термодинамічні функції та розрахуємо магнітний параметр порядку в основному стані. Ре-

зультат порівняємо із результатами інших методів.

У зв'язку з використаним нами теоретичним підходом, окремо згадаємо про праці [21, 22]. Так, в роботі [21] в подібному до застосованого нами наближенні розглядалась спін-1/2 двовимірна $J_1 - J_2$ модель Гайзенберґа в зовнішньому магнітному полі. В ній в основному увага зосереджувалась на вивченні залежностей сумарної намагніченості системи від магнітного поля. Ми ж у своєму дослідженні при відсутності зовнішнього поля розраховуватимемо намагніченості підґраток. В роботі [22] в аналогічному з нашим наближенні вивчалася спін-1/2 двовимірна XZ модель з взаємодіями лише між найближчими сусідами. Було встановлено, що результати узгоджуються із результатами спін-хвильової теорії.

2. Постановка задачі

Розглянемо модель Гайзенберґа з обмінними взаємодіями J_1, J_\perp між найближчими та J_2 між наступними після найближчих сусідами на прямокутній ґратці (див. рис. 1) розміру $N_x \times N_y$ ($N_x \rightarrow \infty, N_y \rightarrow \infty$), яка описується гамільтоніаном

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \left(J_1 \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} + J_\perp \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1} \right. \\ &\quad \left. + J_2 \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j+1} + J_2 \mathbf{S}_{i,j+1} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} \right). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Сума $\sum_{\langle i,j \rangle}$ пробігає по найближчих, а $\sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}$ – по наступних після найближчих сусідах. Взаємодія $J_{i,j}$, як видно з рис. 1, є рівною або J_1 , або J_\perp .

Зауважимо, що тут і надалі будемо паралельно використовувати два різні позначення для вузлів ґратки: або позначення вузла i, j

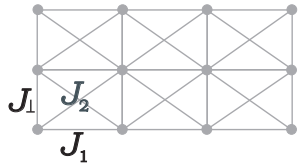


Рис. 1. Прямокутна ґратка, на якій позначені обмінні взаємодії.

(див. рис. 2а), або позначення $\mathbf{i} = i_x \mathbf{n}_x + i_y \mathbf{n}_y$ (див. рис. 2б), де \mathbf{n}_x та \mathbf{n}_y – одиничні вектори.

Ввівши оператори $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ перепишемо гамільтоніан (2.1):

$$H = H_{XY} + H_Z, \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} H_{XY} &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \left(S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^- \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \left(S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^- \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} H_Z &= \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \left(S_i^+ S_i^- - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^+ S_j^- - \frac{1}{2} \right) \\ &\quad + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \left(S_i^+ S_i^- - \frac{1}{2} \right) \left(S_j^+ S_j^- - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Тут H_{XY} – XY частина гамільтоніану (2.1), а H_Z – Ізінґова його частина.

Слід зауважити, що оператори S_i^+ та S_i^- на одному вузлі задовільняють комутаційні співвідношення Фермі

$$\{S_i^-, S_i^+\} = 1, \quad \{S_i^+, S_i^+\} = \{S_i^-, S_i^-\} = 0, \quad (2.5)$$

а на різних вузлах ($\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$) – Бозе комутаційні співвідношення

$$[S_i^-, S_j^+] = [S_i^+, S_j^+] = [S_i^-, S_j^-] = 0. \quad (2.6)$$

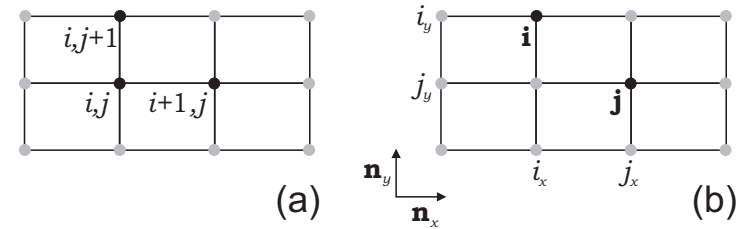


Рис. 2. Прямокутна ґратка, на якій наведено позначення вузлів.

3. Перетворення Йордана-Вігнера

З допомогою перетворення Йордана-Вігнера

$$S_i^- = e^{i\alpha_i} d_i, \quad S_i^+ = e^{-i\alpha_i} d_i^+, \quad (3.1)$$

$$\alpha_i = \sum_{j(\neq i)} B_{ij} n_j, \quad n_j = d_j^+ d_j, \quad (3.2)$$

(де B_{ij} є скалярами, елементами певної матриці \mathbf{B}) здійснюється перехід від задачі, у якій оператори S_i^+ та S_i^- задовільняють переставні співвідношення (2.5), (2.6), до задачі, у якій оператори d_i^+ та d_i задовільняють переставні співвідношення Фермі

$$\{d_i^+, d_j\} = \delta_{i,j}, \quad \{d_i^+, d_j^+\} = \{d_i, d_j\} = 0, \quad (3.3)$$

як на одному, так і на різних вузлах. Саме в такому вигляді (співвідношення (3.1), (3.2)) перетворення було запропоноване у роботі [36] для дослідження моделі Гайзенберга з взаємодіями між найближчими сусідами у випадку квадратної ґратки.

Зрозуміло, що числова матриця \mathbf{B} у (3.2) повинна бути вибраною так (див. огляд [20]), щоб задовільнялися переставні співвідношення для спінових операторів (2.5) та (2.6). Зупинимось коротко на її отриманні.

Приймаючи до уваги те, що оператори d_i^+ , d_i є Фермі оператора-ми, можна переконатись, що

$$e^{iB_{ij}n_j} d_i = \left[1 + iB_{ij}n_j + \frac{1}{2!}(iB_{ij})^2 n_j + \dots \right] d_i = d_i e^{iB_{ij}n_j}, \quad (3.4)$$

і аналогічно, що

$$e^{-iB_{ij}n_j} d_i^+ = d_i^+ e^{-iB_{ij}n_j}. \quad (3.5)$$

А оскільки $[n_i, n_j] = 0$, то легко бачити:

$$e^{i\alpha_i} d_i = d_i e^{i\alpha_i}, \quad e^{-i\alpha_i} d_i^+ = d_i^+ e^{-i\alpha_i}. \quad (3.6)$$

Також нам будуть потрібні співвідношення

$$e^{-in_j B_{ij}} = 1 + (e^{-iB_{ij}} - 1) n_j, \quad e^{in_i B_{ji}} = 1 + (e^{iB_{ji}} - 1) n_i, \quad (3.7)$$

які отримуються з допомогою розкладу експоненти в ряд з урахуванням, що $n_i^2 = n_i$.

Порахуємо тепер комутатор $[S_i^-, S_j^+]$, використовуючи перетворення (3.1) та враховуючи співвідношення (3.4) – (3.6).

$$\begin{aligned} & [S_i^-, S_j^+] \\ &= \left(e^{in_j B_{ij}} d_i e^{-in_i B_{ji}} d_j^+ - e^{-in_i B_{ji}} d_j^+ e^{in_j B_{ij}} d_i \right) \cdot e^{i \sum_{l \neq i, l \neq j} n_l (B_{il} - B_{jl})} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Оскільки в загальному випадку $e^{i \sum_{l \neq i, l \neq j} n_l (B_{il} - B_{jl})} \neq 0$, то рівність нулеві комутатора $[S_i^-, S_j^+]$ буде забезпечена тоді, коли

$$e^{in_j B_{ij}} d_i e^{-in_i B_{ji}} d_j^+ = e^{-in_i B_{ji}} d_j^+ e^{in_j B_{ij}} d_i.$$

А дану умову (яка забезпечує виконання $[S_i^-, S_j^+] = 0$), враховуючи співвідношення (3.7) та властивості операторів Фермі (3.3), можна переписати у такому простому вигляді:

$$e^{iB_{ij}} = -e^{iB_{ji}}. \quad (3.9)$$

Подібно, як це робилося вище для комутатора $[S_i^-, S_j^+]$, можна переконатись, що умова (3.9), накладена на матрицю \mathbf{B} , забезпечує також і виконання двох інших комутаційних співвідношень (2.6) для спінових операторів на різних вузлах. А для забезпечення переставних співвідношень для спінових операторів на одному вузлі (2.5) достатньою є лише умова, що оператори d_i^+ , d_i задовільняють переставні співвідношення Фермі (3.3).

Здійснимо тепер перетворення Йордана-Вігнера (3.1) у обох частинах гамільтоніану (2.2). З урахуванням співвідношень (3.6) будемо мати:

$$\begin{aligned} H_{XY} &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \left(d_i^+ e^{i(\alpha_j - \alpha_i)} d_j + d_j^+ e^{i(\alpha_i - \alpha_j)} d_i \right) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \left(d_i^+ e^{i(\alpha_j - \alpha_i)} d_j + d_j^+ e^{i(\alpha_i - \alpha_j)} d_i \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} H_Z &= \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \left(d_i^+ d_i - \frac{1}{2} \right) \left(d_j^+ d_j - \frac{1}{2} \right) \\ &+ \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \left(d_i^+ d_i - \frac{1}{2} \right) \left(d_j^+ d_j - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Зауважимо, що фазові множники $\exp(\pm i\alpha_i)$ є лише у XY частині (3.10) гамільтоніану Гайзенберга і відсутні у його Ізінґовій частині (3.11). Зупинимось спочатку на розгляді XY частини (3.10).

4. Наближення середнього поля для фазових множників. ХУ частина гамільтоніану

В роботі [36] було запропоновано такий вибір числової матриці \mathbf{B} :

$$B_{ij} = \arg(\tau_j - \tau_i), \quad (4.1)$$

де τ_i та τ_j – комплексні числа

$$\tau_i = i_x + ii_y, \quad \tau_j = j_x + ij_y, \quad (4.2)$$

які відповідають вузлам $\mathbf{i} = i_x \mathbf{n}_x + i_y \mathbf{n}_y$ та $\mathbf{j} = j_x \mathbf{n}_x + j_y \mathbf{n}_y$ (див. рис. 2). Тут $\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y$ – одиничні вектори.

Оскільки, як легко бачити, $\arg(\tau_j - \tau_i) = \arg(\tau_i - \tau_j) \pm \pi$, то такий вибір B_{ij} забезпечує виконання умови (3.9). А так як комплексне число $\tau_j - \tau_i = |\tau_j - \tau_i| e^{i \arg(\tau_j - \tau_i)} = |\tau_j - \tau_i| e^{i B_{ij}}$, то звідси видно, що (4.1) можна переписати у вигляді:

$$B_{ij} = \text{Im} \ln(\tau_j - \tau_i). \quad (4.3)$$

Таким чином, при виборі матриці \mathbf{B} у вигляді (4.1), фазові множники у перетвореннях (3.1) будуть мати вигляд

$$\alpha_i = \sum_{j(\neq i)} n_j \text{Im} \ln(\tau_j - \tau_i). \quad (4.4)$$

Розглянемо (див. [20,36,37]) векторне поле $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, таке, що різниця фаз

$$\alpha_j - \alpha_i = \int_i^j \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \int_i^j \mathbf{dr} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \alpha(\mathbf{r}). \quad (4.5)$$

На основі (4.4) отримаємо:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla_{\mathbf{r}} \alpha(\mathbf{r}) &= \frac{\partial}{\partial r_x} \left(\sum_{l(\neq \mathbf{r})} n_l \text{Im} \ln(l_x - r_x + i(l_y - r_y)) \right) \mathbf{n}_x \\ &+ \frac{\partial}{\partial r_y} \left(\sum_{l(\neq \mathbf{r})} n_l \text{Im} \ln(l_x - r_x + i(l_y - r_y)) \right) \mathbf{n}_y \\ &= \sum_{l(\neq \mathbf{r})} n_l \frac{(l_y - r_y) \mathbf{n}_x - (l_x - r_x) \mathbf{n}_y}{(\mathbf{l} - \mathbf{r})^2}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Реалізувавши в однорідному випадку наближення середнього поля

$$n_i \rightarrow \langle n_i \rangle = \langle n \rangle \quad (4.7)$$

(нагадаємо, що $n_i = d_i^+ d_i = S_i^+ S_i^- = S_i^z + 1/2$, що видно із співвідношень (3.1) та (3.6)) в континуальній границі, в якій суму $\sum_{l(\neq \mathbf{r})}$ можна замінити на подвійний інтеграл $\frac{1}{S_0} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dr'_x \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dr'_y$, отримуємо векторний потенціал у такому вигляді (див. [20,37]):

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= -\langle n \rangle \frac{1}{S_0} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dr'_x \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dr'_y \frac{(r'_y - r_y) \mathbf{n}_x - (r'_x - r_x) \mathbf{n}_y}{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2} \\ &= \langle n \rangle \frac{\pi}{S_0} (-r_y \mathbf{n}_x + r_x \mathbf{n}_y) = \langle n \rangle \frac{\pi}{S_0} \mathbf{n}_z \times \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Тут S_0 – площа елементарної плакетки (див. рис. 3), а $L_x = L_y = L \rightarrow \infty$ – лінійні розміри системи. Зауважимо, що Гамільтоніан (2.2), (3.10), (3.11) при виборі фазових множників на основі (4.5), (4.8) описує систему заряджених безспінових ферміонів, які рухаються у площині в однорідному магнітному полі, яке, як буде показано нижче, є перпендикулярним до цієї площини. Як слідує із (4.8), напруженість цього магнітного поля

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \langle n \rangle \frac{\pi}{S_0} \begin{vmatrix} \mathbf{n}_x & \mathbf{n}_y & \mathbf{n}_z \\ \frac{\partial}{\partial r_x} & \frac{\partial}{\partial r_y} & \frac{\partial}{\partial r_z} \\ -r_y & r_x & 0 \end{vmatrix} = \langle n \rangle \frac{2\pi}{S_0} \mathbf{n}_z, \quad (4.9)$$

а потік вектора напруженості магнітного поля через елементарну плакетку

$$\Phi_0 = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \cdot S_0 \mathbf{n}_z = 2\pi \langle n \rangle. \quad (4.10)$$

Обмежимося надалі випадком $\langle S^z \rangle = 0$, що може відповідати, наприклад, ХУ моделі, або антиферомагнітній моделі Гайзенберга,

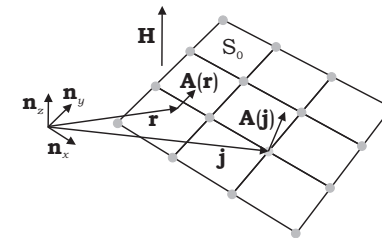


Рис. 3. Ферміони у однорідному магнітному полі \mathbf{H} , яке виникає в результаті реалізації наближення середнього поля для фазових множників. Векторні потенціали, які лежать у площині ґратки, наведені схематично.

в якій відсутній далекий порядок. А так, як $\langle n \rangle = \langle S^z \rangle + 1/2$, то у такому випадку потік $\Phi_0 = \pi$.

Оскільки векторний потенціал є калібрувально інваріантним, то ми можемо здійснити калібрувальне перетворення $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ з умовою, що потік вектора напруженості магнітного поля не зміниться

$$\Phi_0 = \text{rot}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot S_0 \mathbf{n}_z = \text{rot}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot S_0 \mathbf{n}_z = \pi \quad (4.11)$$

Останню ж рівність можна переписати у вигляді

$$\Phi_0 = \int_{S_0} \text{rot}\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) dS = \oint_{S_0} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \pi. \quad (4.12)$$

Оскільки циркуляція потенціалу $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ по границях елементарної плакетки дорівнює π , то природно прийняти, що відповідна циркуляція по границі будь-якої половини плакетки у вигляді прямокутного трикутника з базисними векторами у якості катетів буде $\pi/2$. Один із способів вибору векторного потенціалу $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$, який задовільнить ці умови є таким (див. також рис. 4):

$$\begin{aligned} \alpha_{2,1} - \alpha_{1,1} &= \int_{1,1}^{2,1} d\mathbf{r} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = 0, & \alpha_{1,2} - \alpha_{2,2} &= \pi \\ \alpha_{2,2} - \alpha_{2,1} &= \alpha_{1,1} - \alpha_{1,2} = 0 \\ \alpha_{1,1} - \alpha_{2,2} &= \alpha_{1,2} - \alpha_{2,1} = \pi/2, \\ &\vdots \\ \alpha_{4,2} - \alpha_{3,2} &= -\pi, & \alpha_{3,3} - \alpha_{4,3} &= 2\pi, \\ \alpha_{4,3} - \alpha_{4,2} &= \alpha_{3,2} - \alpha_{3,3} = 0, \\ \alpha_{3,3} - \alpha_{4,2} &= \alpha_{3,2} - \alpha_{4,3} = 3\pi/2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.13)$$

Враховуючи співвідношення (4.13) перепишемо XY частину гамільтоніана (3.10) у вигляді:

$$\begin{aligned} H_{XY} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \left\{ J_1 (-1)^{i+j} \left(d_{i,j}^+ d_{i+1,j} + d_{i+1,j}^+ d_{i,j} \right) \right. \\ &\quad + J_{\perp} \left(d_{i,j}^+ d_{i,j+1} + d_{i,j+1}^+ d_{i,j} \right) \\ &\quad \left. - i J_2 (-1)^{i+j} \left(d_{i,j}^+ d_{i+1,j+1} - d_{i+1,j+1}^+ d_{i,j} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\left. + d_{i,j+1}^+ d_{i+1,j} - d_{i+1,j}^+ d_{i,j+1} \right\}. \quad (4.14)$$

Зауважимо, що реалізація наближення середнього поля для фазових множників, покладання $\langle n \rangle = 1/2$ (що відповідає випадку $\langle S^z \rangle = 0$) та вибір калібрувального векторного потенціалу $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ у формі (4.13) приводять до того, що замість фазових множників $e^{i(\alpha_j - \alpha_i)}$ у XY частині гамільтоніану (3.10) появились просто додаткові множники $(-1)^{i+j}$ біля взаємодії J_1 (див. також роботу [20]) та множники $i(-1)^{i+j}$ або $-i(-1)^{i+j}$ біля взаємодії J_2 .

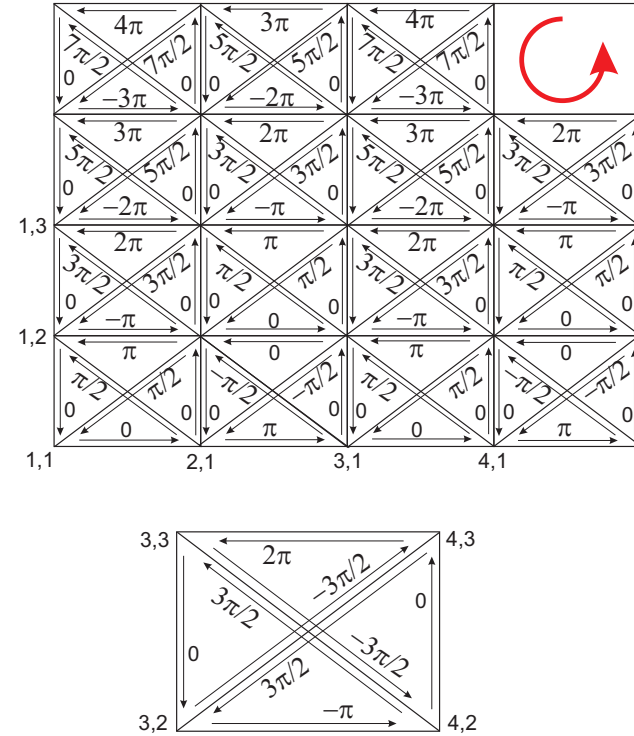


Рис. 4. Вибір різниці фаз $\alpha_i - \alpha_j$, який задовільняє умову, що циркуляція векторного потенціалу $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ по чотирьох ребрах елементарної плакетки дорівнює π , а циркуляція по двох ребрах та діагоналі плакетки дорівнює $\pi/2$.

5. Наближення типу середнього поля для Ізінґової частини гамільтоніану. Випадок «однорідного потоку для впорядкування Нееля» (Néel flux phase)

Надалі нас буде цікавити випадок фрустрованої ґратки, коли всі взаємодії є антиферромагнітними ($J_1 > 0, J_\perp > 0, J_2 > 0$).

Застосуємо до Ізінґової частини гамільтоніана (3.11) наближення типу середнього поля, як у роботах [20, 22, 36, 37]. Тобто, зробимо таку заміну членів гамільтоніана, які описують взаємодію безспінових ферміонів:

$$d_i^+ d_j^+ d_j \rightarrow d_i^+ d_i \langle d_j^+ d_j \rangle + \langle d_i^+ d_i \rangle d_j^+ d_j - \langle d_i^+ d_i \rangle \langle d_j^+ d_j \rangle. \quad (5.1)$$

Зауважимо, що тут було також покладено $\langle d_j^+ d_i \rangle = 0$, що відповідає випадку «однорідного потоку для впорядкування Нееля» (the uniform flux with the Néel order; див. роботи [20, 36]).

В рамках такого наближення Ізінґова частина гамільтоніану буде мати вигляд:

$$H_Z = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \left(d_i^+ d_i \langle S_j^z \rangle + d_j^+ d_j \langle S_i^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle - \frac{1}{2} \langle S_i^z \rangle - \frac{1}{2} \langle S_j^z \rangle \right) + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} J_2 \left(d_i^+ d_i \langle S_j^z \rangle + d_j^+ d_j \langle S_i^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle - \frac{1}{2} \langle S_i^z \rangle - \frac{1}{2} \langle S_j^z \rangle \right). \quad (5.2)$$

Обмежимося надалі випадком антиферромагнітного впорядкування Нееля. Враховуючи, що намагніченості підґраток рівні за модулем та відрізняються знаком ($m_A = \langle d_{i,j}^+ d_{i,j} \rangle - \frac{1}{2} = \langle S_{i,j}^z \rangle = \langle S_{i+1,j+1}^z \rangle = \dots = -m_B = -\langle S_{i+1,j}^z \rangle = -\langle S_{i,j+1}^z \rangle = \dots$) для Ізінґової частини гамільтоніану будемо мати:

$$H_Z = m_A \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \left\{ (J_1 + J_\perp) (-1)^{i+j+1} d_{i,j}^+ d_{i,j} + J_1 (-1)^{i+j} d_{i+1,j}^+ d_{i+1,j} + J_\perp (-1)^{i+j} d_{i,j+1}^+ d_{i,j+1} + J_2 (-1)^{i+j} \left(d_{i,j}^+ d_{i,j} + d_{i+1,j+1}^+ d_{i+1,j+1} \right) + J_2 (-1)^{i+j+1} \left(d_{i,j+1}^+ d_{i,j+1} + d_{i+1,j}^+ d_{i+1,j} \right) \right\} + \tilde{J} N_x N_y m_A^2. \quad (5.3)$$

Тут використане позначення $\tilde{J} = J_1 + J_\perp - 2J_2$.

6. Термодинаміка моделі Гайзенберґа у випадку антиферромагнітного впорядкування Нееля

Здійснимо спочатку перетворення Фур'є

$$d_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{k_x, k_y} e^{i(k_x i + k_y j)} d_{k_x, k_y},$$

$$d_{i,j}^+ = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{k_x, k_y} e^{-i(k_x i + k_y j)} d_{k_x, k_y}^+, \quad (6.1)$$

$$\delta_{k_x, k'_x} = \frac{1}{N_x} \sum_i e^{i(k_x - k'_x) i}, \quad \delta_{k_y, k'_y} = \frac{1}{N_y} \sum_j e^{i(k_y - k'_y) j}$$

у обох частинах гамільтоніану (4.14) та (5.3). В результаті для антиферромагнітної моделі Гайзенберґа $H = H_{XY} + H_Z$ отримаємо:

$$H = \sum_{k_x, k_y} \left\{ -i J_1 \sin k_x d_{k_x, k_y}^+ d_{k_x - \pi, k_y - \pi} + J_\perp \cos k_y d_{k_x, k_y}^+ d_{k_x, k_y} + 2J_2 \cos k_x \sin k_y d_{k_x, k_y}^+ d_{k_x - \pi, k_y - \pi} - 2m_A \tilde{J} d_{k_x, k_y}^+ d_{k_x - \pi, k_y - \pi} \right\} + \tilde{J} N_x N_y m_A^2. \quad (6.2)$$

Надалі зручно перейти від сумування по першій зоні Бріллюена у (6.2) до сумування по області, яка представлена на рис. 5 (заштрихована ділянка). Ввівши позначення

$$b_{k_x, k_y}^+ = d_{k_x, k_y}^+, \quad b_{k_x, k_y} = d_{k_x, k_y},$$

$$a_{k_x, k_y}^+ = d_{k_x - \pi, k_y - \pi}^+, \quad a_{k_x, k_y} = d_{k_x - \pi, k_y - \pi}, \quad (6.3)$$

та враховуючи періодичність $d_{k_x + 2\pi, k_y + 2\pi} = d_{k_x, k_y}$, представимо гамільтоніан (6.2) у вигляді:

$$H = \sum_{\mathbf{k}}' H_{\mathbf{k}} + \tilde{J} N_x N_y m_A^2, \quad (6.4)$$

$$H_{\mathbf{k}} = b_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} C_{ba} + a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} C_{ab} + b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} C_{bb} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} C_{aa}. \quad (6.5)$$

Тут використані також ще такі позначення:

$$C_{ba} = -2m_A \tilde{J} + 2J_2 \cos k_x \sin k_y - iJ_1 \sin k_x,$$

$$C_{ab} = -2m_A \tilde{J} + 2J_2 \cos k_x \sin k_y + iJ_1 \sin k_x = C_{ba}^*,$$

$$C_{bb} = J_\perp \cos k_y, \quad C_{aa} = -J_\perp \cos k_y. \quad (6.6)$$

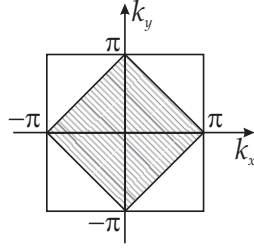


Рис. 5. Перша зона Бріллюена та область (заштрихована ділянка), по якій проводиться сумування \sum'_{k_x, k_y} .

Квадратичну форму (6.5) можна представити у матричному вигляді:

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}}^+ & a_{\mathbf{k}}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{bb} & C_{ba} \\ C_{ba}^* & -C_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}} \\ a_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (6.7)$$

Оскільки в даній роботі нас цікавлять лише термодинамічні властивості досліджуваної моделі, знайдемо тільки власні значення матриці 2×2 із останнього співвідношення (для розрахунку динамічних властивостей необхідними є ще і відповідні власні функції). Одне із власних значень є таким:

$$\lambda_{\mathbf{k}} = \lambda_{\mathbf{k}}(m_A) = \sqrt{J_{\perp}^2 \cos^2 k_y + J_1^2 \sin^2 k_x + (-2\tilde{J}m_A + 2J_2 \cos k_x \sin k_y)^2}, \quad (6.8)$$

а інше є рівним за модулем і має протилежний знак $(-\lambda_{\mathbf{k}})$.

Легко бачити, що тепер ми можемо записати $H_{\mathbf{k}}$ (6.7) у діагональному вигляді

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \beta_{\mathbf{k}}^+ & \alpha_{\mathbf{k}}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -\lambda_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

(де $\beta_{\mathbf{k}}^+$, $\alpha_{\mathbf{k}}^+$, $\beta_{\mathbf{k}}$, $\alpha_{\mathbf{k}}$ – нові оператори Фермі) і в результаті представити гамільтоніан моделі Гайзенберга у випадку антиферромагнітного впорядкування Нееля (6.4) у такій формі:

$$H = \sum'_{\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} - \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}) + \tilde{J} N_x N_y m_A^2. \quad (6.10)$$

Зауважимо, що для знаходження співвідношень, які пов'язують оператори $\beta_{\mathbf{k}}^+$, $\alpha_{\mathbf{k}}^+$, $\beta_{\mathbf{k}}$, $\alpha_{\mathbf{k}}$ із операторами $b_{\mathbf{k}}^+$, $a_{\mathbf{k}}^+$, $b_{\mathbf{k}}$, $a_{\mathbf{k}}$ необхідні ще

власні функції матриці 2×2 у (6.7). Проте, в рамках поставленої в даній роботі задачі ці співвідношення не є необхідними.

На основі (6.10) отримуємо вільну енергію з розрахунку на одну частинку:

$$\begin{aligned} \frac{F(T, m_A)}{N_x N_y} &= -\frac{2k_B T}{N_x N_y} \sum'_{\mathbf{k}} \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\lambda_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) + \tilde{J} m_A^2 \\ &= -\frac{k_B T}{N_x N_y} \sum'_{\mathbf{k}} \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\lambda_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) + \tilde{J} m_A^2 \\ &= -k_B T \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\lambda_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) + \tilde{J} m_A^2, \quad (6.11) \end{aligned}$$

а намагніченість підґратки $m_A(T)$ визначається з умови мінімуму $F(T, m_A)$ по m_A .

Енергію основного стану легко отримати на основі (6.10). Оскільки $\lambda_{\mathbf{k}} \geq 0$, то основний стан буде при $\beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} = 0$, $\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} = 1$. В результаті для енергії основного стану з розрахунку на одну частинку матимемо:

$$\begin{aligned} \frac{E_0(m_A)}{N_x N_y} &= -\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi+|k_x|}^{\pi-|k_x|} \frac{dk_y}{2\pi} \lambda_{\mathbf{k}} + \tilde{J} m_A^2 \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \lambda_{\mathbf{k}} + \tilde{J} m_A^2, \quad (6.12) \end{aligned}$$

причому параметр m_A визначається з умови мінімуму $E_0(m_A)$ по m_A .

7. Результати числових розрахунків та висновки

Зупинимося тепер коротко на результатах числових розрахунків для основного стану у випадку квадратної ґратки ($J_{\perp} = J_1$).

На рис. 6 приведено залежність намагніченості підґратки від параметра J_2/J_1 , отриману нами на основі (6.12). На ньому представлені для порівняння також результати із інших робіт [7, 8, 11–14, 17, 38].

Перш за все, слід зауважити, що результати методу ренорм-групи матриці густини [7, 8], скінченновимірного скейлінгу, як даних точної діагоналізації для скінченновимірних ґраток [17], так і даних, розрахованих у методі зв'язаних кластерів [14], не тільки якісно, але і досить добре кількісно узгоджуються між собою. Результати ж, отримані нами (в позакритичній області $J_2/J_1 \ll J_2^c/J_1$, $J_2^c/J_1 \approx 0.357$), а також в рамках підходів [11–13], побудованих на функціях Гріна,

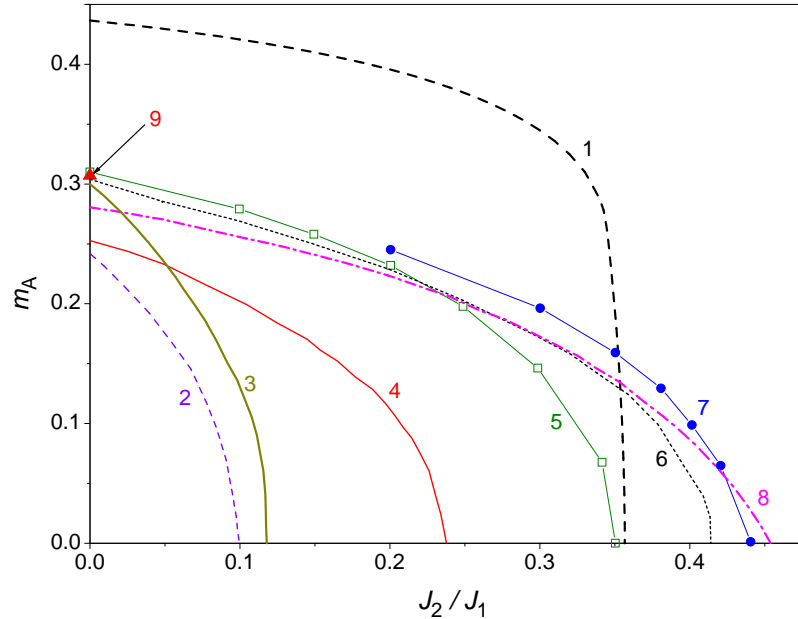


Рис. 6. Залежність підґраткової намагніченості від параметра J_2/J_1 у різних підходах: 1 – результат наших розрахунків; 2, 3, 4 – методів на основі функцій Гріна [11–13] відповідно; 5 – скінченновимірного скейлінгу даних точної діагоналізації для скінченновимірних ґраток [17]; 6, 7 – методу ренорм-групи матриці густини [7, 8] відповідно; 8 – екстраполяції даних методу зв'язаних кластерів [14]; 9 – квантового методу Монте-Карло [38].

узгоджуються лише якісно із результатами згаданих вище достатньо точних методів [7, 8, 14, 17].

Те, що порохований на основі (6.12) магнітний параметр порядку занадто різко спадає при J_2/J_1 близькому до точки переходу J_2^c/J_1 , а також те, що ми отримали значно завищені значення m_A при малих J_2/J_1 , на нашу думку пов'язано із використаним наближенням типу середнього поля, в якому до того ж нехтувалося кореляціями $\langle d_j^+ d_i \rangle$ (див. співвідношення (5.1)). Так, для нефрустрованої квадратної ґратки ($J_2 = 0$) ми отримуємо $m_A \approx 0.437$, що є суттєво більше від, наприклад, результату моделювання квантовим методом Монте-Карло ($m_A \approx 0.307$) [38]. Проте, слід зауважити, що в рамках застосованого нами підходу результат можна дещо покращити,

якщо врахувати кореляції $\langle d_j^+ d_i \rangle$, як це робиться в роботі [36] (див. також [20]). Таке врахування згаданих кореляцій дає $m_A \approx 0.389$ при $J_2 = 0$ [36].

Виходячи із сказаного вище, ми можемо зробити висновок, що використане нами просте наближення типу середнього поля в рамках методу ферміонізації Йордана-Вігнера може бути ефективним при теоретичному дослідженні двовимірних квантових фрустрованих систем.

Література

1. M. Inui, S. Doniach, M. Gabay. Doping dependence of antiferromagnetic correlations in high-temperature superconductors. // Phys. Rev. B vol. 38, 6631-6635 (1988).
2. P. Chandra, B. Doucot. Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice. // Phys. Rev. B vol. 38, 9335-9338 (1988).
3. P. Carretta, N. Papinutto, C. B. Azzoni, M. C. Mozzati, E. Pavarini, S. Gonthier, P. Millet. Frustration-driven structural distortion in VOMoO₄. // Phys. Rev. B vol. 66, 094420 (2002).
4. R. Melzi, P. Carretta, A. Lascialfari, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet, F. Mila. Li₂VO(Si,Ge)O₄, a Prototype of a Two-Dimensional Frustrated Quantum Heisenberg Antiferromagnet. // Phys. Rev. Lett. vol. 85, 1318-1321 (2000).
5. R. Melzi, S. Aldrovandi, F. Tedoldi, P. Carretta, P. Millet, F. Mila. Magnetic and thermodynamic properties of Li₂VOSiO₄: A two-dimensional S=1/2 frustrated antiferromagnet on a square lattice. // Phys. Rev. B vol. 64, 024409 (2001).
6. H. Rosner, R. R. P. Singh, W. H. Zheng, J. Oitmaa, W. E. Pickett. High-temperature expansions for the $J_1 - J_2$ Heisenberg models: Applications to *ab initio* calculated models for Li₂VOSiO₄ and Li₂VOGeO₄. // Phys. Rev. B vol. 67, 014416 (2003).
7. H. C. Jiang, H. Yao, L. Balents. Spin liquid ground state of the spin-1/2 square $J_1 - J_2$ Heisenberg model. // Phys. Rev. B vol. 86, 024424 (2012).
8. S. S. Gong, W. Zhu, D. N. Sheng, O. I. Motrunich, M. P. A. Fisher. Plaquette Ordered Phase and Quantum Phase Diagram in the Spin-1/2 $J_1 - J_2$ Square Heisenberg Model. // Phys. Rev. Lett. vol. 113, 027201 (2014).
9. S. Morita, R. Kaneko, M. Imada. Quantum Spin Liquid in Spin 1/2 $J_1 - J_2$ Heisenberg Model on Square Lattice: Many-Variable Variati-

- onal Monte Carlo Study Combined with Quantum-Number Projections. // J. Phys. Soc. Jpn. vol. 84, 024720 (2015).
10. L. Balents. Spin liquids in frustrated magnets. Nature (London) vol. 464, 199-208 (2010).
 11. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг. Фрустрированный $J_1 - J_2 - J_3$ квантовый двумерный антиферромагнетик в сферически-симметричном самосогласованном подходе. // ТМФ т. 168, N3, 389-416 (2011).
 12. A. F. Barabanov, V. M. Berezovsky. On the theory of the two-dimensional Heisenberg antiferromagnet with frustration on a square lattice. // J. Phys. Soc. Jpn. vol. 63, 3974-3982 (1994).
 13. L. Siurakshina, D. Ihle, R. Hayn. Magnetic order and finite-temperature properties of the two-dimensional frustrated Heisenberg model. // Phys. Rev. B vol. 64, 104406 (2001).
 14. J. Richter, R. Zinke, D. J. J. Farnell. The spin-1/2 square-lattice $J_1 - J_2$ model: the spin-gap issue. // Eur. Phys. J. B vol. 88, 2 (2015).
 15. O. Götze, S. E. Krüger, F. Fleck, J. Schulenburg, J. Richter. Ground-state phase diagram of the spin-1/2 square-lattice $J_1 - J_2$ model with plaquette structure. // Phys. Rev. B vol. 85, 224424 (2012).
 16. R. Darradi, O. Derzhko, R. Zinke, J. Schulenburg, S. E. Krüger, and J. Richter. Ground state phases of the spin-1/2 $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnet on the square lattice: A high-order coupled cluster treatment. // Phys. Rev. B vol. 78, 214415 (2008).
 17. J. Richter, J. Schulenburg. The spin-1/2 $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnet on the square lattice: Exact diagonalization for $N = 40$ spins. Eur. Phys. J. B vol. 73, 117-124 (2010).
 18. H. J. Schulz, T. A. L. Ziman, D. Poilblanc. Magnetic Order and Disorder in the Frustrated Quantum Heisenberg Antiferromagnet in Two Dimensions. // J. Phys. I France vol. 6, 675-703 (1996).
 19. E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. // Ann. Phys. (N.Y.) vol. 16, 407-466 (1961).
 20. O. Derzhko. Jordan-Wigner fermionization for spin-1/2 systems in two dimensions: A brief review. // J. Phys. Studies vol. 5, 49-64 (2001).
 21. M. C. Chang, M. F. Yang. Chern-Simons theory for magnetization plateaus of the frustrated $J_1 - J_2$ Heisenberg model. // Phys. Rev. B vol. 66, 184416 (2002).
 22. O. Derzhko, T. Verkholyak, R. Schmidt, J. Richter. Square-lattice $s = 1/2$ XY model and the Jordan-Wigner fermions: the ground-state and thermodynamic properties. // Physica A vol. 320, 407-428

- (2003).
23. O. Derzhko, T. Krokhamalskii. Dynamics of zz spin correlations in the square-lattice spin-1/2 isotropic XY model. // Physica B vol. 337, 357-362 (2003).
 24. D. C. Cabra, G. L. Rossini. Numerical Jordan-Wigner approach for two-dimensional spin systems. // Phys. Rev. B vol. 69, 184425 (2004).
 25. O. Derzhko, T. Krokhamalskii. Jordan-Wigner Approach to Dynamic Correlations in 2D Spin-1/2 Models. // Czechoslovak Journal of Physics vol. 55, 601-604 (2005).
 26. L. L. Gonçalves, L. P. S. Coutinho, J. P. de Lima. Static and dynamic properties of the XXZ chain with long-range interactions. // Physica A vol. 345, 71-91 (2005).
 27. P. Lou. Quantum phase transition in a solvable spin model. // Phys. Rev. B vol. 72, 064435 (2005).
 28. T. Verkholyak, A. Honecker, W. Brenig. Jordan-Wigner approach to the frustrated spin one-half XXZ chain. // Eur. Phys. J. B vol. 49, 283-287 (2006).
 29. D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov. Frustrated ferromagnetic spin-1/2 chain in a magnetic field. // Phys. Rev. B vol. 73, 024402 (2006).
 30. J. Li, S. Lei. Thermodynamic properties of the spin-1/2 ferromagnetic Heisenberg chain with long-range interactions. // Phys. Lett. A vol. 372, 4086-4091 (2008).
 31. H. Wu, G. Wei, Y. Han, G. Yi, W. Gong. Exact results of a dimerized $S=1$ Ising chain with single-ion anisotropy. // J. Magn. Magn. Mater. vol. 321, 3104-3109 (2009).
 32. T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter. Magnetic properties of the quantum spin-1/2 XX diamond chain: the Jordan-Wigner approach. // Eur. Phys. J. B vol. 80, 433-444 (2011).
 33. H. Wu, G. Wei, A. Du, G. Yi, W. Gong. Exact results of an alternating-bond mixed spin-1/2 and spin-1 Ising chain with both longitudinal and transverse single-ion anisotropies. // J. Magn. Magn. Mater. vol. 323, 1428-1432 (2011).
 34. S. Paul, A. K. Ghosh. Ground state energy and scaling behaviour of spin gap in the XXZ spin-1/2 antiferromagnetic chain in longitudinal staggered field. // J. Magn. Magn. Mater. vol. 362, 193-203 (2014).
 35. K. Kumar, K. Sun, E. Fradkin. Chern-Simons theory of magnetization plateaus of the spin-1/2 quantum XXZ Heisenberg model on the kagome lattice. // Phys. Rev. B vol. 90, 174409 (2014).
 36. Y. R. Wang. Ground state of the two-dimensional antiferromagnetic