

КВАНТОВЫЕ РЕНОРМИРОВКИ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЕЛЯ КВАЗИДВУМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ СПИНОМ

А. С. Мартынов , Д. М. Дзедзисавили*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 9 апреля 2026 г.,
после переработки 28 апреля 2026 г.
Принята к публикации 29 апреля 2026 г.

Для квазидвумерного антиферромагнетика на треугольной решетке с произвольной величиной спина исследовано влияние квантовых флуктуаций на намагниченность подрешетки и ренормировку температуры Нееля. В рамках уравнений движения для комбинированных функций Грина, состоящих из спиновых операторов и операторов Хаббарда, и использования расщепления Тябликова в аналитическом виде получены выражения для 1) шести ветвей спектра спин-волновых возбуждений; 2) параметра порядка; 3) температуры Нееля T_N , ренормированной обобщенным интегралом Ватсона. Показано, что намагниченность подрешеток достигает максимального значения при равенстве внутрислойного J и межслойного I обменных интегралов. Установлено, что при $I > J$ учет квантовых флуктуаций приводит не к понижению T_N , как в обычных (анти)ферромагнетиках, а к повышению T_N по сравнению с ее среднеполевым значением. Последнее объясняется излишне заниженным значением T_N , получаемым в приближении среднего поля во фрустрированных магнетиках.

Ключевые слова: квазидвумерный антиферромагнетик на треугольной решетке, комбинированные функции Грина, приближение Тябликова, температура Нееля

DOI: 10.31857/S0044451026060066

1. ВВЕДЕНИЕ

Квазидвумерные антиферромагнетики с треугольной решеткой (АФМТР) представляют значительный интерес, поскольку в данных системах наиболее ярко проявляются квантовые эффекты на макроскопическом уровне [1, 2]. Пониженная размерность и фрустрированность треугольной решетки приводит к существенному вкладу квантовых флуктуаций в магнитные и термодинамические свойства квазидвумерных АФМТР [3–5]. К настоящему времени открыто большое количество подобных соединений, и во многих из них величина эффективного спина S магнитоактивного иона равна $1/2$. К таким материалам относятся, например, $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ [6–10], Cs_2CoBr_4 [11], CsYbSe_2 [12], CsCeSe_2 [13], $\text{CoZnMo}_3\text{O}_8$ [14], CeCd_3As_3 [15],

$\text{Na}_2\text{BaCo}(\text{PO}_4)_2$ [16, 17]. Тем не менее имеется немало АФМТР, величина спина в которых больше $1/2$. Например, в соединении $\text{Na}_2\text{BaNi}(\text{PO}_4)_2$ [18] величина эффективного спина $S = 1$, а в $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ [19–22] и $\text{Na}_2\text{BaMn}(\text{PO}_4)_2$ [23, 24] эффективный спин $S = 5/2$. В этом отношении интересной представляется система $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$, которая характеризуется различными значениями эффективных спинов $S = 1/2, 1, 5/2$ в зависимости от сорта магнитоактивного иона $M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$ соответственно. Это обстоятельство позволяет, в частности, проследить за изменением свойств АФМТР при увеличении спина.

При теоретическом описании АФМТР в области температур, много меньших температуры Нееля T_N , активно используются методы, основанные на представлении операторов спина через бозе-операторы. В рамках этих методов квадратичная часть гамильтониана диагонализуется с помощью преобразования Боголюбова, а слагаемые, описывающие взаимодействие, учитываются по теории возмущений

* E-mail: mart@iph.krasn.ru

[25–28]. Среди других подходов, зарекомендовавших себя при изучении низкотемпературных свойств АФМТР, отметим представление операторов связи [29], представление швингеровских бозонов [30, 31], а также проекционную технику Мори [32].

Как и в чисто двумерном случае, в квазидвумерных антиферромагнетиках квантовые флуктуации приводят к значительному уменьшению среднего значения спина даже при $T \rightarrow 0$. Это явление принято называть квантовым сокращением спина. Температура Нееля также уменьшается при учете квантовых флуктуаций, что математически обусловлено появлением в знаменателе выражения для T_N так называемого интеграла Ватсона W , значение которого больше единицы. Для получения подобного выражения необходимы методы исследования, адекватные при температурах порядка T_N . Для описания магнитных систем в данном температурном диапазоне чаще всего используется метод уравнений движения для двухвременных температурных запаздывающих функций Грина (ФГ) [33–36]. В рамках данного метода, «стартующего» с уравнения движения для простейшей ФГ $\langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$, возникает цепочка уравнений для все более сложных ФГ, которые на определенном этапе расцепляются, что приводит к получению замкнутой системы уравнений для ФГ. Однако даже для изотропного магнетика получаемых таким образом ФГ оказывается недостаточно, если величина спина S больше $1/2$. В этом случае для нахождения намагниченности необходимо вычислить дополнительные ФГ [37–39].

Способы преодоления данной трудности предлагались в работах [40, 41]. В первой работе решались дополнительные уравнения движения для недостающих при $S > 1/2$ функций Грина, а во второй определялась производящая ФГ, для которой было получено и решено дифференциальное уравнение.

Более рациональная, на наш взгляд, теория описания магнитных систем со спином $S > 1/2$ была предложена в работе [42]. Ее ключевой момент состоял во введении двухвременных запаздывающих комбинированных ФГ, состоящих как из спиновых операторов, так и их парциальных составляющих — операторов Хаббарда [43]. В рамках данной теории авторы работы [42] рассмотрели ферромагнетик с одноионной анизотропией, а также двухподрешеточный анизотропный антиферромагнетик [44], определили температуру Нееля и среднее значение магнитного параметра порядка.

В недавней работе [45] метод комбинированных ФГ был применен нами для описания свойств квазидвумерных АФМТР с произвольной величи-

ной спина. В качестве целевых систем выступали приведенные в начале данного раздела соединения $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$, где $M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$, а $S = 1/2, 1, 5/2$ соответственно. Помимо треугольной симметрии кристаллической решетки в каждом слое, характерной особенностью данных систем является относительно сильный антиферромагнитный обмен в слое и слабый (но тоже антиферромагнитный) между слоями. Однако в работе [45] для упрощения расчетов обмен между слоями предполагался ферромагнитным, что не позволяет применить развитый в [45] подход непосредственно для соединений $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$).

В настоящей работе проводится дальнейшее развитие теории [45] посредством ее обобщения на случай антиферромагнитного типа межслойного обменного взаимодействия. Несмотря на то, что в реальных соединениях важную роль играет также анизотропия, которая здесь не учитывается, тем не менее тип обменных взаимодействий и кристаллическая структура уже вполне адекватны отмеченным выше системам. В рамках предложенной теории квазидвумерного АФМТР с произвольной величиной спина S вычисляются шесть ветвей магнетонного спектра в аналитическом виде, исследуется квантовое сокращение спина, выводится выражение для температуры Нееля, на основе которого изучается ренормировка T_N при разных спинах S и отношениях I/J внутрислойного I и межслойного J обменных интегралов.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 сформулирован гамильтониан модели квазидвумерного АФМТР. В разд. 3 описывается магнитная структура основного состояния модели. Система уравнений для комбинированных функций Грина выводится в разд. 4. В разд. 5 представлены аналитические результаты теории: выражение для магнетонного спектра; уравнение для намагниченности подрешеток; выражение для температуры Нееля. Обсуждение результатов численных расчетов зависимости параметра порядка и обобщенного интеграла Ватсона и их интерпретация приведены в разд. 6. Основные выводы работы представлены в Заключение.

2. МОДЕЛЬ КВАЗИДВУМЕРНОГО АФМТР

Как отмечалось во Введении, соединения $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$) обладают слоистой структурой. Внутри каждого слоя магнитоактивные ионы образуют треугольную решетку, а

обменное взаимодействие между ними имеет антиферромагнитный характер. Соответствующий обменный интеграл J будем считать отличным от нуля только для ближайших соседей. Магнитоактивные ионы из соседних слоев находятся строго друг над другом и также связаны между собой посредством обменного антиферромагнитного взаимодействия с интегралом I . Интегралы I и J являются положительными величинами, а условие квазидвумерности рассматриваемых соединений накладывает требование $J \gg I$. Согласно цитированным выше экспериментальным работам, в соединениях $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$) имеется легкоосная одноионная анизотропия. Однако, как указывалось во Введении, мы ею будем пренебрегать.

Известно, что в чисто двумерном АФМТР при нулевой температуре в отсутствие внешнего магнитного поля магнитная система переходит в фазу со 120° -градусным магнитным упорядочением; спины из разных подрешеток лежат в одной плоскости (не совпадающей, вообще говоря, с плоскостью решетки) и образуют угол в 120° друг с другом. Очевидно, что при образовании из таких слоев квазидвумерного АФМТР магнитная структура в каждом слое не изменится, но ближайшие спины в соседних слоях будут ориентированы противоположно. Таким образом, в нулевом внешнем магнитном поле структура рассматриваемого квазидвумерного АФМТР представляет собой шесть взаимопроникающих слоистых подрешеток, в каждой из которых слой — это снова треугольная решетка, а спины каждой подрешетки направлены одинаково. Сказанное демонстрируется на рис. 1. Спины из трех подрешеток, обозначаемых далее символами F_1, G_1 и L_1 , изображены на верхнем слое кристаллической решетки синим, зеленым и красным цветами соответственно. Спины из трех других подрешеток, обозначаемых далее символами F_2, G_2 и L_2 , показаны также синим, зеленым и красным цветами, но на нижнем слое. Спины из подрешеток A_1 и A_2 , где $A = F, G, L$, ориентированы противоположно.

С учетом сказанного, гамильтониан изотропного квазидвумерного АФМТР запишем в виде

$$H_{ex} = H_J + H_I, \tag{1}$$

где

$$H_J = J \sum_j \left[\sum_{\{f_j g_j\}} \mathbf{S}_{f_j} \mathbf{S}_{g_j} + \sum_{\{g_j l_j\}} \mathbf{S}_{g_j} \mathbf{S}_{l_j} + \sum_{\{l_j f_j\}} \mathbf{S}_{l_j} \mathbf{S}_{f_j} \right], \tag{2}$$

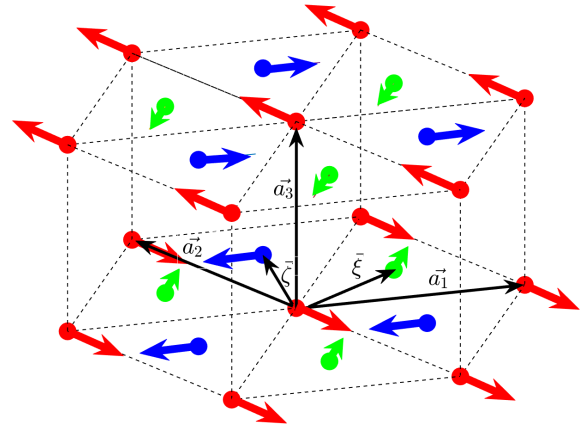


Рис. 1. Магнитная структура квазидвумерного антиферромагнетика на треугольной решетке в упорядоченной фазе. Синие, зеленые и красные кружки и стрелки указывают положения магнитоактивных ионов и направления их спинов из подрешеток $F_{1(2)}, G_{1(2)}$ и $L_{1(2)}$ соответственно. Черные стрелки — векторы решетки Браве \mathbf{a}_j ($j = 1, 2, 3$, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$, $|\mathbf{a}_3| = c$), стрелки ξ и ζ — векторы базиса

$$H_I = I \sum_j \left[\sum_{f_j} \mathbf{S}_{f_j} \mathbf{S}_{f_{j+1}} + \sum_{g_j} \mathbf{S}_{g_j} \mathbf{S}_{g_{j+1}} + \sum_{l_j} \mathbf{S}_{l_j} \mathbf{S}_{l_{j+1}} \right]. \tag{3}$$

Оператор H_J описывает энергию обменного взаимодействия между ближайшими спинами, расположенными внутри j -го слоя. В зависимости от значения индекса j в каждом слое находятся ионы либо только из подрешеток F_1, G_1 и L_1 либо F_2, G_2 и L_2 . Оператор H_I отвечает энергии обменного взаимодействия между ближайшими спинами из соседних слоев, т. е. из подрешеток A_1 и A_2 , где $A = F, G, L$. Индексы f_j, g_j и l_j указывают на принадлежность спинового оператора \mathbf{S} к j -му слою и соответствующей подрешетке F, G или L . Фигурные скобки под знаком суммы в выражении (2) показывают, что при вычислении двойной суммы по соответствующим индексам каждая их пара учитывается только один раз и только для ближайших узлов.

3. УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГАМИЛЬТониАНА АФМТР

Не теряя общности, будем теперь считать, что плоскость, в которой лежат спины всех подрешеток в пределах каждого слоя, совпадает с геометрической плоскостью этого слоя. Выберем систему координат таким образом, чтобы ось y была направлена перпендикулярно слою, а оси z и x лежали в слое. Для нахождения намагниченности подрешетки пе-

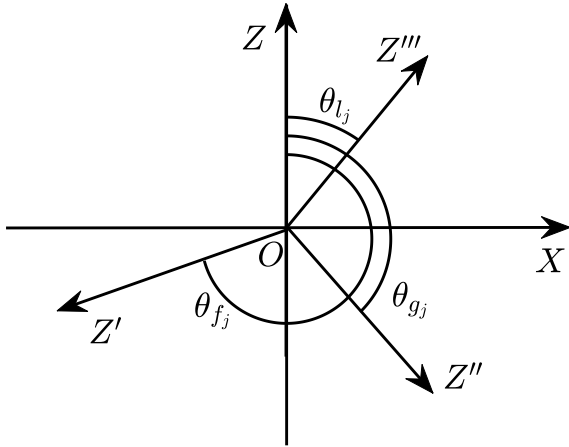


Рис. 2. Поворот локальных осей координат на углы θ_{f_j} , θ_{g_j} и θ_{l_j} вокруг оси y на узлах f_j , g_j и l_j при унитарном преобразовании (5)

рейдем к локальным системам координат в каждой подрешетке, выполнив унитарное преобразование

$$H_{ex}(\theta) = U(\theta) H_{ex} U^\dagger(\theta), \tag{4}$$

где оператор унитарных преобразований имеет вид

$$U(\theta) = \prod_j \left[\prod_{f_j \in F} \exp(i\theta_{f_j} S_{f_j}^y) \times \right. \\ \left. \times \prod_{g_j \in G} \exp(i\theta_{g_j} S_{g_j}^y) \prod_{l_j \in L} \exp(i\theta_{l_j} S_{l_j}^y) \right]. \tag{5}$$

Здесь величина θ обозначает совокупность углов θ_{l_j} , θ_{f_j} и θ_{g_j} , каждый из которых отвечает повороту вокруг оси Oy в локальной системе координат, связанной с узлами решетки l_j , f_j и g_j соответственно (см. рис. 2).

Проведение преобразования (5) для спиновых операторов в гамильтониане (1) эквивалентно замене

$$S_{p_j}^x \rightarrow S_{p_j}^x \cos \theta_{p_j} + S_{p_j}^z \sin \theta_{p_j}, \quad S_{p_j}^y \rightarrow S_{p_j}^y, \\ S_{p_j}^z \rightarrow S_{p_j}^z \cos \theta_{p_j} - S_{p_j}^x \sin \theta_{p_j}, \tag{6}$$

где $p = \{l, f, g\}$. В результате первое слагаемое гамильтониана (1) после унитарного преобразования принимает вид

$$H_J(\theta) = J \sum_j \sum_{\{f_j g_j\}} \left[S_{f_j}^y S_{g_j}^y + \right. \\ \left. + \cos(\theta_{f_j} - \theta_{g_j}) \left(S_{f_j}^x S_{g_j}^x + S_{f_j}^z S_{g_j}^z \right) + \right. \\ \left. + \sin(\theta_{f_j} - \theta_{g_j}) \left(S_{f_j}^z S_{g_j}^x - S_{f_j}^x S_{g_j}^z \right) \right] + \\ + \left[\begin{matrix} f \rightarrow g \\ g \rightarrow l \end{matrix} \right] + \left[\begin{matrix} f \rightarrow l \\ g \rightarrow f \end{matrix} \right]. \tag{7}$$

Здесь слагаемые в последней строчке выражения (7) получаются из первого слагаемого посредством указанной в квадратных скобках замены индексов узлов.

Аналогичным образом для второго слагаемого в (1) после унитарного преобразования получаем

$$H_I(\theta) = I \sum_j \sum_{f_j} \left[S_{f_j}^y S_{f_{j+1}}^y + \right. \\ \left. + \cos(\theta_{f_j} - \theta_{f_{j+1}}) \left(S_{f_j}^x S_{f_{j+1}}^x + S_{f_j}^z S_{f_{j+1}}^z \right) + \right. \\ \left. + \sin(\theta_{f_j} - \theta_{f_{j+1}}) \left(S_{f_j}^z S_{f_{j+1}}^x - S_{f_j}^x S_{f_{j+1}}^z \right) \right] + \\ + [f \rightarrow g] + [f \rightarrow l], \tag{8}$$

где, так же как и в (7), последние два слагаемых получаются из первого соответствующей заменой индексов узлов.

Направления осей z новых локальных координат (т.е. значения углов θ) выбираются таким образом, чтобы они были ориентированы вдоль равновесных векторов намагниченности \mathbf{R}_{A_n} ($A = F, G, L$ и $n = 1, 2$) в каждой подрешетке. Учитывая структуру основного состояния, представленную на рис. 1, значения углов нетрудно выписать явно. Поскольку гамильтониан рассматриваемого АФМТР изотропен, в одной из шести подрешеток угол можно фиксировать произвольно. Пусть, например, в подрешетке L_1 угол $\theta_{l_1} \equiv \theta_{L_1} = 0$. Тогда для углов из подрешеток F_1 и G_1 можем написать $\theta_{F_1} = -2\pi/3$, а $\theta_{G_1} = 2\pi/3$ (рис. 3). Очевидно, что для подрешеток F_2, G_2 и L_2 имеем равенство $\theta_{A_2} = \theta_{A_1} + \pi$, где $A = F, G, L$.

Нетрудно убедиться, что указанные значения углов являются решениями системы уравнений

$$3J[R_{L_1} \sin(\theta_{L_1} - \theta_{F_1}) - R_{G_1} \sin(\theta_{F_1} - \theta_{G_1}) + \\ + 2IR_{F_2} \sin(\theta_{F_2} - \theta_{F_1}) = 0, \\ 3J[R_{L_2} \sin(\theta_{L_2} - \theta_{F_2}) - R_{G_2} \sin(\theta_{F_2} - \theta_{G_2}) + \\ + 2IR_{F_1} \sin(\theta_{F_1} - \theta_{F_2}) = 0, \tag{9}$$

и еще четырех уравнений, получаемых циклической перестановкой индексов F, G и L . Эти уравнения

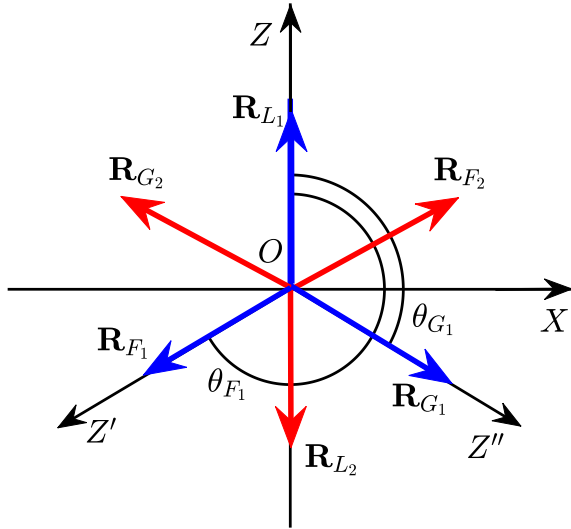


Рис. 3. Ориентация векторов равновесной намагниченности шести подрешеток и осей локальных координат. В подрешетках F_1 и G_1 оси z поворачиваются на углы $\theta_{F_1} = -2\pi/3$ и $\theta_{G_1} = 2\pi/3$ и занимают новые положения z' и z'' соответственно вдоль равновесных намагниченностей подрешеток \mathbf{R}_{F_1} и \mathbf{R}_{G_1} (синие стрелки). Угол $\theta_{L_1} = 0$ на рисунке не показан. Векторы равновесных намагниченностей \mathbf{R}_{F_2} , \mathbf{R}_{G_2} и \mathbf{R}_{L_2} изображены красными стрелками, а оси z соответствующих локальных координат поворачиваются на углы $\theta_{A_2} = \theta_{A_1} + \pi$, где $A = F, G, L$

выводятся из условия обращения в нуль коэффициентов при операторах S^x в выражении для гамильтониана после унитарного преобразования (4) и расцепления в приближении среднего поля. При этом следует учесть очевидное для изотропного АФМТР совпадение всех средних значений:

$$R_{A_{1(2)}} \equiv \langle S_{p_j}^z \rangle = R, \quad A = F, G, L, \quad p = f, g, l.$$

Таким образом, окончательный вид преобразованного гамильтониана АФМТР с основным состоянием, отвечающим магнитной структуре, изображенной на рис. 1, получается подстановкой значений углов

$$\begin{aligned} \theta_{G_1} &= -\theta_{F_1} = 2\pi/3, \\ \theta_{L_1} &= 0, \quad \theta_{A_2} = \theta_{A_1} + \pi, \\ A &= F, G, L, \end{aligned} \quad (10)$$

в выражения (7) и (8). В результате гамильтониан (1) принимает вид

$$\begin{aligned} H_{ex} = J \sum_j \left\{ \sum_{\{f_j g_j\}} \left[-\frac{1}{2} (S_{f_j}^x S_{g_j}^x + S_{f_j}^z S_{g_j}^z) + \right. \right. \\ \left. \left. + S_{f_j}^y S_{g_j}^y - \frac{\sqrt{3}}{2} (S_{f_j}^z S_{g_j}^x - S_{f_j}^x S_{g_j}^z) \right] + \right. \\ \left. + \left[\begin{matrix} f \rightarrow g \\ g \rightarrow l \end{matrix} \right] + \left[\begin{matrix} f \rightarrow l \\ g \rightarrow f \end{matrix} \right] \right\} - \\ - I \sum_j \left\{ \sum_{f_j} \left[(S_{f_j}^x S_{f_{j+1}}^x + S_{f_j}^z S_{f_{j+1}}^z) - S_{f_j}^y S_{f_{j+1}}^y \right] + \right. \\ \left. + \left[\begin{matrix} f \rightarrow g \\ f \rightarrow l \end{matrix} \right] \right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

где спиновые операторы $S_{p_j}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z, p = f, g, l$) определяют проекцию спиновых моментов вдоль новых (повернутых) локальных осей координат.

4. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ КОМБИНИРОВАННЫХ И СПИНОВЫХ ФГ

Для нахождения параметра порядка R и температуры Нееля T_N рассматриваемой модели АФМТР с произвольной величиной спина S воспользуемся подходом, предложенным в работе [42], в рамках которого вводятся двухвременные запаздывающие комбинированные ФГ

$$\langle \langle X_p^{mn}(t) | S_p^\pm(t') \rangle \rangle = -i\theta(t-t') \langle [X_p^{mn}(t), S_p^\pm(t')] \rangle, \quad (12)$$

состоящие из спиновых операторов S_p^\pm и их парциальных вкладов, выраженных через операторы Хаббарда $X_p^{mn} = |m\rangle\langle n|$. Здесь p обозначает индекс узла решетки f_j, g_j или l_j ; $|m\rangle$ и $|n\rangle$ — собственные состояния оператора S_p^z ; m и n — соответствующие собственные значения ($S_p^z|m\rangle = m|m\rangle, S_p^z|n\rangle = n|n\rangle$); $\theta(t-t')$ — функция Хевисайда ($\theta(x) = 0$ при $x < 0$, $\theta(x) = 1$ при $x > 0$). Угловые скобки в правой части (12) обозначают взятие термодинамического среднего, квадратные скобки [..., ...] — коммутатор, а зависимость от времени у операторов указывает на то, что они берутся в представлении Гейзенберга.

Как показано в работе [42], для замыкания цепочки уравнений движения для ФГ (12) достаточно использовать только те X -операторы, у которых индексы m и n отличаются на единицу. Это обусловлено, во-первых, структурой атомного представления для спиновых операторов:

$$\begin{aligned}
 S_p^z &= \sum_{m=-S}^S m X_p^{mm}, \\
 S_p^+ &= \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m X_p^{m+1,m}, \\
 S_p^- &= \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m X_p^{m,m+1},
 \end{aligned} \tag{13}$$

где $\gamma_m = \sqrt{(S-m)(S+m+1)}$ – параметры представления, а во-вторых, тем, что в гамильтониане изотропного гейзенберговского магнетика спиновые операторы, отвечающие каждому узлу решетки, имеют степень не выше первой.

Учитывая сказанное, составим уравнения движения для ФГ (12) с $m = n \pm 1$ (точнее для их фурье-образов по времени):

$$D_{PF_1}^{n\pm 1, n; -}(p - f_1, \omega) = \langle \langle X_p^{n\pm 1, n} | S_{f_1}^- \rangle \rangle_\omega, \tag{14}$$

где индекс P обозначает одну из шести подрешеток $\{F_1, G_1, L_1, F_2, G_2, L_2\}$, индекс p принимает значения $\{f_1, g_1, l_1, f_2, g_2, l_2\}$ (например, при $p = f_1$ этот индекс пробегает номера узлов только из подрешетки F_1 и т. д.), а n изменяется в интервале либо $n = -S, \dots, S - 1$, либо $n = -S + 1, \dots, S$.

Согласно общей теории, уравнения движения для указанных ФГ имеют вид

$$\begin{aligned}
 \omega D_{PF_1}^{n\pm 1, n; -}(p - f_1, \omega) &= \langle \langle [X_p^{n\pm 1, n}, S_{f_1}^-] \rangle \rangle + \\
 &+ \langle \langle [X_p^{n\pm 1, n}, H_{ex}] | S_{f_1}^- \rangle \rangle_\omega.
 \end{aligned} \tag{15}$$

При вычислении коммутаторов, входящих в (15), и при последующем расщеплении высших ФГ в приближении Тябликова возникают также чисто спиновые ФГ:

$$D_{PF_1}^{\alpha -}(p - f_1, \omega) = \langle \langle S_p^\alpha | S_{f_1}^- \rangle \rangle_\omega, \tag{16}$$

где $\alpha = \pm, x, y$. Переходя далее к представлению квазиимпульса для ФГ, согласно определению

$$\begin{aligned}
 \langle \langle X_p^{n\pm 1, n} | S_{f_1}^- \rangle \rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_k D_{AF_1}^{n\pm 1, n; -}(k, \omega) e^{ik(p-f_1)}, \\
 \langle \langle S_p^\alpha | S_{f_1}^- \rangle \rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_k D_{PF_1}^{\alpha -}(k, \omega) e^{ik(p-f_1)},
 \end{aligned} \tag{17}$$

получаем уравнения ($m = -S, \dots, S - 1$)

$$\begin{aligned}
 (\omega - h) D_{F_1 F_1}^{m+1, m; -}(k, \omega) &= C_m - \\
 - C_m \frac{J_0}{4} [\nu_k D_{G_1 F_1}^{x-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{L_1 F_1}^{x-}(k, \omega)] - \\
 - C_m \frac{J_0}{2i} [\nu_k D_{G_1 F_1}^{y-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{L_1 F_1}^{y-}(k, \omega)] - \\
 - C_m \frac{I_0}{2} \cos(k_y d) D_{F_2 F_1}^{--}(k, \omega),
 \end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}
 (\omega + h) D_{F_1 F_1}^{m, m+1; -}(k, \omega) &= \\
 = C_m \frac{J_0}{4} [\nu_k D_{G_1 F_1}^{x-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{L_1 F_1}^{x-}(k, \omega)] - \\
 - C_m \frac{J_0}{2i} [\nu_k D_{G_1 F_1}^{y-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{L_1 F_1}^{y-}(k, \omega)] + \\
 + C_m \frac{I_0}{2} \cos(k_y d) D_{F_2 F_1}^{+-}(k, \omega),
 \end{aligned}$$

а также уравнения, следующие из приведенных выше в результате циклической перестановки у всех ФГ левых нижних индексов F, G и L . При записи выражений (18) использовались следующие обозначения:

$$h = R(J_0 + I_0), \quad J_0 = 3J, \quad I_0 = 2I.$$

Посредством d обозначено расстояние между слоями, а $C_m = \gamma_m(N_{m+1} - N_m)$, где $N_m = \langle X_p^{mm} \rangle$ – числа заполнения. Структурный фактор ν_k треугольной решетки имеет вид

$$\nu_k = \frac{1}{3} \sum_\delta e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos \frac{k_x}{2} e^{i \frac{k_y}{2\sqrt{3}}} + e^{-i \frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right), \tag{19}$$

где δ – вектор, принимающий три значения $\{\xi, -\zeta, \zeta - \xi\}$ (см. рис. 1). Верхний символ «*» в записи ν_k^* обозначает комплексное сопряжение.

Следуя работе [42], замкнем систему уравнений (18) на чисто спиновые ФГ. Для этого заметим, что с учетом представления (13) результат вычисления коммутатора $[S^+, S^-]$ можно записать в виде

$$[S^+, S^-] = 2S^z = \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m^2 (X^{m+1, m+1} - X^{m, m}). \tag{20}$$

Усредняя это выражение и учитывая определение параметра C_m , получим равенство

$$\sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m C_m = 2R. \tag{21}$$

Если теперь умножить уравнения (18) на параметр γ_m и просуммировать по m от $-S$ до $S - 1$, то

равенство (21) позволяет записать систему уравнений (18) только через спиновые ФГ:

$$\begin{aligned}
 (\omega - h)D_{F_1F_1}^{+-}(k, \omega) &= \\
 &= 2R - I_0R \cos(k_y d) D_{F_2F_1}^{--}(k, \omega) + \\
 &+ \frac{J_0}{4} R \left[\nu_k D_{G_1F_1}^{+-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{L_1F_1}^{+-}(k, \omega) - \right. \\
 &\left. - 3\nu_k D_{G_1F_1}^{--}(k, \omega) - 3\nu_k^* D_{L_1F_1}^{--}(k, \omega) \right], \\
 (\omega + h)D_{F_1F_1}^{--}(k, \omega) &= \\
 &= I_0R \cos(k_y d) D_{F_2F_1}^{+-}(k, \omega) + \\
 &+ \frac{J_0}{4} R \left[3\nu_k D_{G_1F_1}^{+-}(k, \omega) + 3\nu_k^* D_{L_1F_1}^{+-}(k, \omega) - \right. \\
 &\left. - \nu_k D_{G_1F_1}^{--}(k, \omega) - \nu_k^* D_{L_1F_1}^{--}(k, \omega) \right].
 \end{aligned} \tag{22}$$

Кроме двух выписанных уравнений (22), имеется еще десять, получаемых циклической перестановкой нижних левых индексов F, G, L у ФГ, а также инверсией индексов $1 \leftrightarrow 2$ в каждом из уравнений (22). Таким образом, мы приходим к замкнутой системе из двенадцати уравнений для определения спиновых ФГ $D_{P\bar{F}_1}^{\pm\pm}(k, \omega)$, где $P = \{F_1, G_1, L_1, F_2, G_2, L_2\}$. Комбинированные ФГ вычисляются через спиновые ФГ по уравнениям (18).

5. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ, ПАРАМЕТР ПОРЯДКА И ТЕМПЕРАТУРА НЕЕЛЯ

Для вычисления спектра спин-волновых возбуждений систему уравнений (22) удобно представить в матричной форме:

$$\hat{\Omega} \mathbf{D} = \mathbf{B}, \tag{23}$$

где $\mathbf{B}^T = (2R, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$, вектор-столбец \mathbf{D} составлен из двенадцати ФГ:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}^T &= (\mathbf{D}_1^{+-}, \mathbf{D}_2^{+-}, \mathbf{D}_1^{--}, \mathbf{D}_2^{--}), \\
 \mathbf{D}_{1(2)}^{\pm\pm} &= (D_{F_1(2)F_1}^{\pm\pm}, D_{G_1(2)F_1}^{\pm\pm}, D_{L_1(2)F_1}^{\pm\pm}),
 \end{aligned} \tag{24}$$

а матрица $\hat{\Omega}$ имеет следующий блочный вид:

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \omega - \Gamma_k & 0 & \frac{3RJ_0}{4} \Lambda_k & \epsilon_k \\ 0 & \omega - \Gamma_k & \epsilon_k & \frac{3RJ_0}{4} \Lambda_k \\ -\frac{3RJ_0}{4} \Lambda_k & -\epsilon_k & \omega + \Gamma_k & 0 \\ -\epsilon_k & -\frac{3RJ_0}{4} \Lambda_k & 0 & \omega + \Gamma_k \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Элементы этой матрицы — блоки 3×3 , при записи которых воспользуемся единичной матрицей $\mathbf{1}$ ранга три:

$$\begin{aligned}
 \omega &= \omega \cdot \mathbf{1}, \quad \Gamma_k = h \cdot \mathbf{1} + \frac{RJ_0}{4} \Lambda_k, \\
 \mathbf{0} &= \mathbf{0} \cdot \mathbf{1}, \quad \epsilon_k = I_0R \cos(k_y d) \cdot \mathbf{1}.
 \end{aligned}$$

Матрица Λ_k составлена из структурных факторов (19):

$$\Lambda_k = \begin{pmatrix} 0 & \nu_k & \nu_k^* \\ \nu_k^* & 0 & \nu_k \\ \nu_k & \nu_k^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Условие существования нетривиального решения системы (23) приводит к дисперсионному уравнению

$$|\hat{\Omega}| = 0, \tag{27}$$

которое является уравнением шестой степени относительно ω^2 . Несмотря на высокую степень, дисперсионное уравнение (27) имеет довольно простые аналитические решения:

$$\begin{aligned}
 E_{jk}^2 &= R^2 J_0^2 (1 + \lambda(1 \pm \cos(k_y d)) - \mu_k - \mu_k^*) \times \\
 &\times (1 + \lambda(1 \mp \cos(k_y d)) + \frac{1}{2}\mu_k + \frac{1}{2}\mu_k^*),
 \end{aligned} \tag{28}$$

где

$$\lambda = I_0/J_0, \quad \mu_k = \nu_k e^{i\phi}, \quad \phi = \pi, \pm\pi/3.$$

Комбинируя два знака « \pm » и три значения угла ϕ , получаем шесть ветвей E_{jk} ($j = 1, \dots, 6$) спектра спин-волновых возбуждений.

Явный аналитический вид дисперсионных зависимостей (28) существенно упрощает вычисление представляющих интерес термодинамических средних. Так, например, числа заполнения N_m по спектральной теореме выражаются через комбинированные ФГ $D_{F_1F_1}^{m+1, m;-}$:

$$\gamma_m N_m = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega b(\omega) \frac{1}{N} \sum_k \text{Im} D_{F_1F_1}^{m+1, m;-}(k, \omega), \tag{29}$$

которые по формулам (18) определяются через спиновые ФГ (16). Последние находятся из решения системы (22). При известных числах заполнения N_m параметр порядка R вычисляется по формуле (21). В выражении (29) $b(\omega) = (\exp(\omega/T) - 1)^{-1}$ — функция распределения Бозе-Эйнштейна.

Учитывая определение C_m , из формулы (29) получаем рекуррентное соотношение

$$N_m = N_{m+1} \alpha(T), \quad \alpha(T) = \frac{P_S(T)}{1 + P_S(T)}, \quad (30)$$

где

$$P_S(T) = P_S(0) + \delta P_S(T), \quad (31)$$

$$P_S(0) = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{i=1}^6 \frac{A_k(E_{ik})}{2E_{ik} \prod_{j(\neq i)}^6 (E_{ik}^2 - E_{jk}^2)}, \quad (32)$$

$$\delta P_S(T) = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{i=1}^6 \frac{\tilde{A}_k(E_{ik}) b(E_{ik})}{E_{ik} \prod_{j(\neq i)}^6 (E_{ik}^2 - E_{jk}^2)}. \quad (33)$$

Выражения для спектральных функций $A_k(\omega)$ и $\tilde{A}_k(\omega)$ в формулах (32), (33) довольно громоздкие и здесь не приводятся.

Условие полноты

$$1 = \sum_{m=-S}^S N_m$$

вместе с рекуррентным соотношением (30) позволяет получить решения для $2S + 1$ величин N_m и записать выражение для параметра порядка в виде

$$R = \sum_{m=-S}^S m N_m = S - P_S(T) + \frac{(2S + 1)P_S(T)^{2S+1}}{(1 + P_S(T))^{2S+1} - P_S(T)^{2S+1}}. \quad (34)$$

Как показывают расчеты, при температурах $T \ll T_N$ величина $P_S(T) \ll 1$, и тогда приближенно можно написать

$$R \cong S - P_S(0),$$

поскольку $\delta P_S(T) \rightarrow 0$. Отсюда видно, что именно $P_S(0)$ определяет сокращение спина за счет квантовых флуктуаций.

В окрестности другой интересующей нас области $T \lesssim T_N$, наоборот, величина $x = 1/P_S(T_N) \ll 1$. В этом случае формулу (34) удобно переписать в виде

$$R = S - \frac{1}{x} + \frac{1}{x} \left[\frac{x(2S + 1)}{(1 + x)^{2S+1} - 1} \right]. \quad (35)$$

При малых x , для получения отличного от нуля вклада в правой части (35), в разложении функции в квадратных скобках необходимо удерживать слагаемые до второго порядка по x . Тогда для параметра порядка R получаем выражение

$$R \cong xS(S + 1)/3,$$

или, вспоминая определение x ,

$$R P_S(T_N) = \frac{S(S + 1)}{3}. \quad (36)$$

С другой стороны, если учесть, что при $T \sim T_N$ параметр порядка R мал, то из выражений (31)–(33) получим

$$P_S(T_N) = P_S(0) + \frac{T_N}{R J_0} W, \quad (37)$$

где W — обобщенный интеграл Ватсона:

$$W = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{i=1}^6 \frac{\tilde{A}_k(\mathcal{E}_{ik})}{\mathcal{E}_{ik}^2 \prod_{j(\neq i)}^6 (\mathcal{E}_{ik}^2 - \mathcal{E}_{jk}^2)}, \quad (38)$$

в определении которого используются безразмерные энергии для спектра магнонов $\mathcal{E}_{ik} = E_{ik}/R J_0$.

Пренебрегая малой величиной $P_S(0)$ в формуле (37) и сравнивая эту формулу с (36), находим окончательное выражение для определения температуры Нееля:

$$T_N = \frac{S(S + 1)}{3} \frac{J_0}{W}. \quad (39)$$

Видно, что зависимость температуры Нееля от величины спина S определяется только первым множителем в (39), так как интеграл Ватсона от S не зависит. В то же время зависимость T_N от межплоскостного обменного интеграла I определяется неявно через тот же интеграл Ватсона, который зависит от параметра квазидвумерности I/J за счет ренормированного спектра \mathcal{E}_{jk} ($j = 1, \dots, 6$).

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Представленные в предыдущих разделах результаты аналитического рассмотрения АФМТР в приближении Тябликова показывают, что квантовые флуктуации приводят, во-первых, к сокращению параметра порядка R (см. формулу (34)), а во-вторых, к ренормировке температуры Нееля (39). В последнем случае ренормировка обусловлена обобщенным интегралом Ватсона (38).

На рис. 4 представлена зависимость величины обобщенного интеграла Ватсона W от параметра квазидвумерности I/J . Данный график с точностью вычислений совпадает с аналогичной зависимостью, построенной в работе [45] также для модели АФМТР, но с ферромагнитным обменным взаимодействием между ближайшими узлами из разных

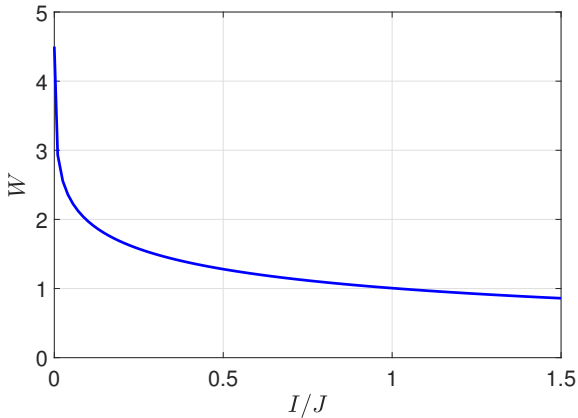


Рис. 4. Зависимость обобщенного интеграла Ватсона W от отношения обменных интегралов I/J

слоев решетки. Как и в [45], в окрестности точки $I = J$ обобщенный интеграл Ватсона W равен единице. Это говорит об отсутствии в данной точке ренормировки температуры Нееля за счет «антиферромагнитных» квантовых флуктуаций, что, однако, не означает отсутствия квантового сокращения для спина, что хорошо видно, например, на рис. 5. Кроме того, правее точки $I = J$ величина W становится меньше единицы, что приводит к увеличению температуры Нееля по сравнению с приближением среднего поля и, следовательно, к росту стабильности дальнего магнитного порядка. Такое, на первый взгляд, неожиданное поведение может быть объяснено тем, что при $I > J$ приближение среднего поля «переучитывает» роль фрустраций в слоях АФМТР и приводит к излишне заниженному значению T_N . Приближение Тябликова частично исправляет данную ситуацию посредством ренормировки T_N через обобщенный интеграл Ватсона. При уменьшении межслойного обменного взаимодействия ($I \rightarrow 0$) температура Нееля, в соответствии с теоремой Мермина–Вагнера [46], стремится к нулю, а система фактически становится двумерной.

Выражения (39), (38) позволяют провести сравнение результатов развитой здесь теории с экспериментальными данными. В табл. 1 приведены значения обменных интегралов J и I , а также температуры Нееля T_N для четырех АФМТР. В последнем столбце таблицы представлены значения температуры Нееля T_N^* , рассчитанные по формуле (39) с использованием данных из 2-го, 3-го и 4-го столбцов. Наблюдаемое довольно неплохое согласие между T_N и T_N^* для $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ (первая строка в табл. 1) объясняется тем, что в этом соединении анизотропия имеет легкоплоскостной характер, а рассмат-

Таблица 1. Сравнение температуры Нееля T_N^* , вычисленной по формуле (39), с экспериментальным значением T_N , полученным для соединений $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ (RFM), $\text{Na}_2\text{BaCo}(\text{PO}_4)_2$ (NBC), $\text{Na}_2\text{BaNi}(\text{PO}_4)_2$ (NBN), $\text{Na}_2\text{BaMn}(\text{PO}_4)_2$ (NBM). Расчеты T_N^* выполнены с использованием значений обменных интегралов J и I из 3-го и 4-го столбцов и взятых из работ, указанных в 1-ом столбце. Во втором столбце приведена величина спина магнитоактивного иона

АФМТР	S	J , мэВ	I , мэВ	T_N , К	T_N^* , К
RFM [22]	$\frac{5}{2}$	0.086	0.0007	3.8	4.2
NBC [17]	$\frac{1}{2}$	0.076	0.127	0.05	0.77
NBN [18]	1	0.032	0.015	0.43	0.57
NBM [24]	$\frac{5}{2}$	0.11	0.002	1.28	7.5

риваемая нами структура основного состояния в данном случае минимизирует энергию анизотропии. Поэтому модель АФМТР (1)–(3) вполне адекватна для описания свойств соединения $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$ в нулевом магнитном поле H . Если H не равно нулю, то энергию анизотропии необходимо учитывать и, следовательно, модель (1)–(3) должна быть обобщена. При сравнении температур Нееля T_N и T_N^* в системах $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ с $M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$ (последние три строчки в табл. 1) согласие значительно хуже, поскольку в данных АФМТР имеются немалая одноионная одноосная анизотропия и анизотропия обмена, которые в рассматриваемой нами модели не учитывались.

На рис. 5 представлены зависимости параметра порядка R от параметра квазидвумерности I/J в случае $S = 1/2$. При $I = 0$ АФМТР чисто двумерный, а сокращение спина равно $S - R \approx 0.17$, что хорошо согласуется с результатами, например, работы [25]. При включении обменного интеграла I система становится трехмерной, а величина R растет с увеличением отношения I/J и достигает при $I = J$ максимального значения, которое все же уменьшено относительно $S = 1/2$ за счет квантовых флуктуаций. Интересно, что при дальнейшем увеличении отношения I/J величина R снова уменьшается, что обуславливается тенденцией к повторному понижению ее эффективной размерности. Действительно, при $I \gg J$ систему можно представить как двумерное множество слабо взаимодействующих между собой жестких антиферромагнитных цепочек. Таким образом, наименьшее сокращение спина наблюдается при $I = J$, но при отходе от этой точки в большую или меньшую сторону параметр порядка уменьшается, что связано с уменьшением ее эффективной размерности.

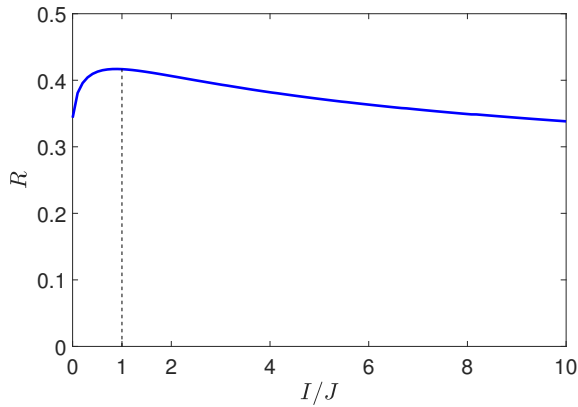


Рис. 5. Зависимость намагниченности R подрешетки от отношения обменных интегралов I/J при $S = 1/2$

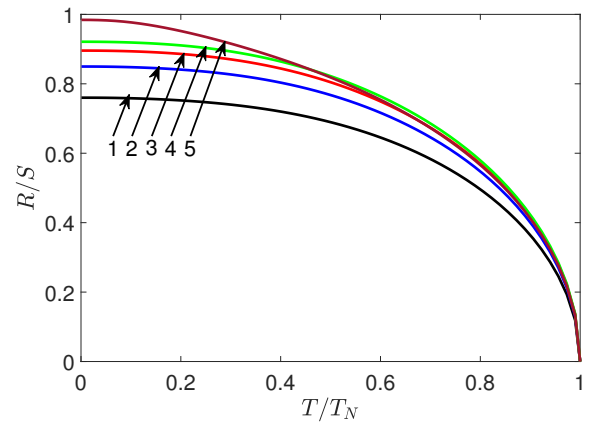


Рис. 6. Зависимости относительной намагниченности R/S подрешетки от относительной температуры T/T_N при $I/J = 0.1$ для разных значений спина S : 1 — $S = 1/2$; 2 — $S = 1$; 3 — $S = 3/2$; 4 — $S = 2$, 5 — $S = 10$

На рис. 6 представлены графики зависимости относительного параметра порядка R/S от температуры T , приведенной к температуре Нееля T_N , при $I/J = 0.1$ для разных значений спина. Видно, что с ростом величины S квантовое сокращение спина ожидаемо уменьшается и становится совсем незначительным при больших значениях S .

На рис. 7 приведены зависимости параметра порядка R от температуры T , нормированной на величину обменного интеграла J , который в данном случае полагался равным 0.1. Расчет выполнен для разных значений параметра межслойного обмена I и для $S = 1/2$. Видно, что при малой величине I значение температуры Нееля T_N также мало и стремится к нулю при $I \rightarrow 0$ в полном согласии с теоремой Мермина – Вагнера [46]. При этом величина R согласуется с результатами работы [25] (см. красную линию на рис. 7). Кроме того, на рис. 7 можно заметить, что линии 6 и 7, построенные при значениях I/J , равных 1.5 и 3, пересекают линию 5, которая рассчитана при $I = J$. Такое поведение обусловлено усилением квантового сокращения спина при $I > J$, продемонстрированным ранее на рис. 5.

В табл. 2 значения параметра порядка R и величины квантового сокращения спина $S - R$, рассчитанные самосогласованно при нулевой температуре на основе уравнений (34), (31) и (28), сравниваются с аналогичными величинами, рассчитанными в рамках спин-волнового приближения (СВП) согласно теории, изложенной в работе [47]. Из приведенных в табл. 2 данных следует, что при малых значениях спина S и при отношении I/J , много меньшем единицы, величина параметра порядка R , вычисленная по формуле (34), существенно отличается от величины R , полученной в СВП. При других значени-

ях S и I/J величины R и $S - R$ близки. Заметное различие значений R и $S - R$ при малых S и I/J в двух указанных подходах связано с наличием третьего слагаемого в правой части выражения (34); в СВП в уравнении для параметра порядка это слагаемое отсутствует. При больших значениях спина S или не малом отношении I/J третье слагаемое в правой части (34) не дает существенного вклада, и поэтому результаты, полученные в обоих подходах, практически совпадают.

Если же сравнивать значения R и $S - R$, представленные в табл. 2, с аналогичными значениями в таблице из работы [45], то можно прийти к выводу, что квантовое сокращение спина в случае межплоскостного антиферромагнитного обмена оказывается большим, чем для межплоскостного ферромагнитного обмена при всех значениях I/J и на всем интервале температур от нуля до температуры Нееля. При этом сама температура Нееля в обоих указанных случаях одинакова.

Наконец отметим, что приближение Тябликова, как известно, приводит к более высоким значениям параметра порядка в сравнении с другими известными методами. Так, например, для $S = 1/2$ значение среднего спина в модели АФМТР, вычисленное методом квантового Монте-Карло, равно $R \approx 0.2$ [48]; методом ренормализационной группы матрицы плотности — $R \approx 0.2$ [49]; методом разложения в ряд — $R \approx 0.19$ [50]. Эти значения заметно отличаются от полученной нами величины $R \approx 0.32$ в пределе $I = 0$.

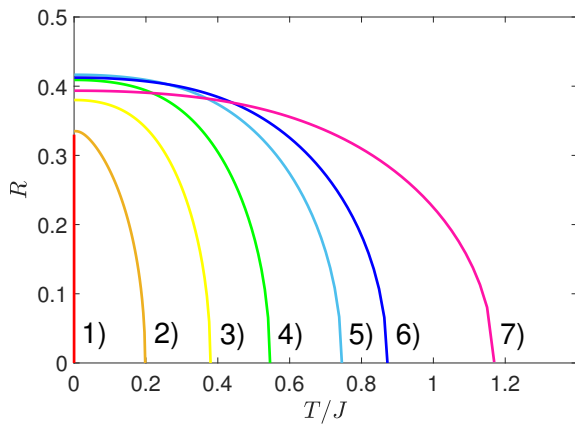


Рис. 7. Зависимости намагниченности R подрешетки от относительной температуры T/J при $S = 1/2$ для различных соотношений обменных интегралов I/J : 1 — 0; 2 — 0.001; 3 — 0.1; 4 — 0.4; 5 — 1; 6 — 1.5; 7 — 3

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены результаты исследований квазидвумерных антиферромагнетиков на треугольной решетке с произвольной величиной спина S , в которых межслойное обменное взаимодействие также антиферромагнитно. Данная работа является естественным продолжением исследований [45], в которых межслойный обмен в АФМТР для простоты предполагался ферромагнитным. В качестве примера реальных магнетиков, на описание которых нацелена развиваемая теория, служат системы $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ с величиной спина магнитоактивных ионов $S = 1/2, 1, 5/2$ в зависимости от вида иона $M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$ соответственно.

Основной целью исследований являлся расчет величины сокращения среднего значения магнитного момента R подрешетки за счет квантовых флуктуаций в зависимости от величины спина S и отношения I/J меж- и внутрислойных обменных интегралов, а также получение аналитического выражения, определяющего температуру Нееля и ее квантовые ренормировки. Расчет выполнен в приближении Тябликова в рамках метода комбинированных функций Грина, предложенного в работе [42] и позволяющего с помощью атомного представления в единой схеме описывать магнетики с произвольной величиной спина S .

Среди главных численных результатов исследования следует выделить два. Первый связан с обнаружением максимума в зависимости R от отношения I/J при $I = J$. В этом случае квантовое сокра-

Таблица 2. Значения параметра порядка R и квантового сокращения спина $S - R$ при $T = 0$ для различных S и при двух значениях отношения обменных интегралов I/J . Расчеты проведены двумя способами: на основе уравнения (34) и в рамках СВП [47]

S	$I/J = 1$			
	R		$S - R$	
	Ур-е (34)	СВП	Ур-е (34)	СВП
1/2	0.41674	0.40011	0.08326	0.09989
1	0.90236	0.90011	0.09764	0.09989
3/2	1.40038	1.40011	0.09962	0.09989
2	1.90014	1.90011	0.09986	0.09989
5/2	2.40011	2.40011	0.09989	0.09989
S	$I/J = 0.001$			
	R		$S - R$	
	Ур-е (34)	СВП	Ур-е (34)	СВП
1/2	0.34375	0.27272	0.15625	0.22728
1	0.79190	0.77272	0.20810	0.22728
3/2	1.27743	1.27272	0.22257	0.22728
2	1.77381	1.77272	0.22619	0.22728
5/2	2.27296	2.27272	0.22704	0.22728

щение минимально, поскольку при $I = J$ система максимально «трехмерна». Действительно, рассматривая два крайних предела, $I/J \rightarrow 0$ и $I/J \rightarrow \infty$, получаем соответственно либо двумерные невзаимодействующие плоскости АФМТР, либо крайне слабо взаимодействующие жесткие одномерные антиферромагнитные цепочки. Второй результат работы связан с увеличением значения T_N при $I > J$ по сравнению с его значением в приближении среднего поля. Последнее обусловлено «переучетом» квантового сокращения спина в теории среднего поля и его коррекцией в приближении Тябликова.

Среди аналитических результатов, кроме выражения для температуры Нееля, отметим формулы, описывающие шесть ветвей спектра коллективных спин-волновых возбуждений, которые были получены в явном виде, несмотря на довольно высокую степень дисперсионного уравнения. Это существенно упростило численные расчеты.

В заключение отметим, что полученные в работе результаты имеют общий характер. Для корректного описания в рамках данной теории магнитных и термодинамических свойств таких соединений, как, например, $\text{Na}_2\text{BaM}(\text{PO}_4)_2$ ($M = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mn}$), важное значение имеет одноионная анизотропия. Именно с ее учетом будет связано дальнейшее развитие представленного здесь подхода.

Благодарности. Авторы выражают благодарность В. В. Валькову за полезные советы и стимулирующее обсуждение результатов.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов. Вклад авторов равноценен.

ЛИТЕРАТУРА

- R. S. Gekht, Phys. Usp. **32**, 871 (1989) [Р. С. Гехт, УФН **159**, 261 (1989)].
- O. A. Starykh, Rep. Prog. Phys. **78**, 052502 (2015).
- A. Lauchi, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).
- Yu. A. Fridman and O. A. Kosmachev, Phys. Solid State **51**, 1167 (2009) [Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, ФТТ **51**, 1104 (2009)].
- A. S. Martynov and D. M. Dzebisashvili, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **167**, 95 (2025) [А. С. Мартынов, Д. М. Дзебисашвили, ЖЭТФ **167**, 95 (2025)].
- Y. Shirata, H. Tanaka, A. Matsuo et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 057205 (2012).
- S. Ito, N. Kurita, H. Tanaka et al., Nat. Commun. **8**, 235 (2017).
- N. A. Fortune, Q. Huang, T. Hong et al., Phys. Rev. B **103**, 184425 (2021).
- K. Okada, H. Tanaka, N. Kurita et al., Phys. Rev. B **106**, 104415 (2022).
- R. Chi, Y. Liu, Y. Wan et al., Phys. Rev. Lett. **129**, 227201 (2022).
- L. Facheris, K. Yu. Povarov, S. D. Nabi et al., Phys. Rev. Lett. **129**, 087201 (2022).
- T. Xie, A. A. Eberharter, J. Xing et al., npj Quantum Mater. **8**, 48 (2023).
- T. Xie, S. Gozel, J. Xing et al., Phys. Rev. Lett. **133**, 096703 (2024).
- B. Gao, T. Chen, C. L. Huang et al., Phys. Rev. B **108**, 024431 (2023).
- K. E. Avers, P. A. Maksimov, P. F. S. Rosa et al., Phys. Rev. B **103**, L180406 (2021).
- Y. Gao, Y.-C. Fan, H. Li et al., npj Quantum Mater. **7**, 89 (2022).
- J. Xiang, C. Zhang, Y. Gao et al., Nature **625**, 270 (2024).
- J. Sheng, J.-W. Mei, L. Wang et al., Nat. Mater. **24**, 544 (2025).
- L. E. Svistov, A. I. Smirnov, L. A. Prozorova et al., Phys. Rev. B **74**, 024412 (2006).
- A. I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura et al., Phys. Rev. B **75**, 134412 (2007).
- A. I. Smirnov, T. A. Soldatov, O. A. Petrenko et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 047204 (2017).
- Yu. A. Sakhratov, L. E. Svistov, and A. P. Reyes, JETP **137**, 526 (2023) [Ю. А. Сахраатов, Л. Е. Сви-стов, А. П. Рейес, ЖЭТФ **164**, 607 (2023)].
- C. Zhang, J. Xiang, C. Su et al., Phys. Rev. B **110**, 214405 (2024).
- N. Biniskos, F. J. dos Santos, M. Stekiel et al., Phys. Rev. B **112** (2025).
- A. V. Chubukov and D. I. Golosov, J. Phys. Condens. Matter **3**, 69 (1991).
- R. S. Gekht and I. N. Bondarenko, JETP **84**, 345 (1997) [Р. С. Гехт, И. Н. Бондаренко, ЖЭТФ **111**, 627 (1997)].
- A. L. Chernyshev and M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. B **79**, 144416 (2009).
- T. Coletta, T. A. Toth, K. Penc et al., Phys. Rev. B **94**, 075136 (2016).
- A. V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B **105**, 144414 (2022).
- D. Yoshioka and J. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 614 (1991).
- S. Dey, J. Maciejko, and M. Vojta, Phys. Rev. B **109**, 224424 (2024).
- P. Rubin, A. Sherman, and M. Schreiber, Phys. Lett. A **376**, 1062 (2012).
- D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Plenum Consultants Bureau, New York (1974) [Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971)].
- S. V. Tyablikov, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Springer, New York (1967) [С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1965)].
- Yu. G. Rudoi and Yu. A. Tserkovnikov, Theor. Math. Phys. **14**, 75 (1973) [Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, ТМФ **14**, 102 (1973)].

36. Yu. A. Tserkovnikov, *Theor. Math. Phys.* **40**, 726 (1979) [Ю. А. Церковников, *ТМФ* **40**, 251 (1979)].
37. N. A. Potapkov, *Theor. Math. Phys.* **8**, 905 (1971) [Н. А. Потапков, *ТМФ* **8**, 381 (1971)].
38. J. F. Devlin, *Phys. Rev. B* **4**, 136 (1971).
39. M. Tanaka and Y. Kondo, *Progr. Theor. Phys.* **48**, 1815 (1972).
40. R. Tahir-Kheli and D. ter Haar, *Phys. Rev.* **127**, 88 (1962).
41. H. B. Callen, *Phys. Rev.* **130**, 890 (1963).
42. V. V. Val'kov and S. G. Ovchinnikov, *Theor. Math. Phys.* **50**, 306 (1982) [В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *ТМФ* **50**, 466 (1982)].
43. J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A* **276**, 238 (1964).
44. V. V. Valkov and S. G. Ovchinnikov, Preprint of the Institute of Physics SB AS USSR (1981) [В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, Препринт ИФ СО АН СССР (1981)].
45. V. V. Val'kov, A. S. Martynov, and D. M. Dzebisashvili, *Theor. Math. Phys.* **223**, 826 (2025) [В. В. Вальков, А. С. Мартынов, Д. М. Дзедбисашвили, *ТМФ* **223**, 343 (2025)].
46. N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
47. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
48. L. Capriotti, A. E. Trumper, and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3899 (1999).
49. S. R. White and A. L. Chernyshev, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 127004 (2007).
50. W. Zheng, J. O. Fjærestad, R. R. Singh et al., *Phys. Rev. B* **74**, 224420 (2006).

Quantum Renormalizations of the Néel Temperature in a Quasi-Two-Dimensional Antiferromagnet on a Triangular Lattice with Arbitrary Spin

*A. S. Martynov**, *D. M. Dzebisashvili*

Kirensky Institute of Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
660036, Krasnoyarsk, Russia,

*E-mail: mart@iph.krasn.ru

Received April 9, 2026

Revised April 28, 2026

Accepted April 29, 2026

Abstract

The effect of quantum fluctuations on the sublattice magnetization and the renormalization of the Néel temperature is studied for a quasi-two-dimensional antiferromagnet on a triangular lattice with arbitrary spin. Utilizing the equations of motion for the hybrid Green's functions consisting of spin operators and Hubbard operators and using Tyablikov decoupling, analytical expressions are obtained for i) six branches of the spin-wave excitation spectrum; ii) the order parameter; iii) the Néel temperature T_N , renormalized by the generalized Watson integral. It is shown that the sublattice magnetization reaches its maximum value when the intralayer J and interlayer I exchange integrals are equal. It has been established that for $I > J$, taking quantum fluctuations into account does not lead to a decrease in T_N , as in conventional (anti)ferromagnets, but to an increase in T_N compared to its mean-field value. The latter is explained by the excessively reduced value of T_N obtained in the mean-field approximation in frustrated magnets.

Keywords: quasi-two-dimensional antiferromagnet on a triangular lattice, hybrid Green's functions, Tyablikov approximation, Néel temperature

Acknowledgements. The authors express their gratitude to V. V. Val'kov for useful advice and stimulating discussion of the results.

Funding. The study was carried out within the framework of the State Assignment of the Kirensky Institute of Physics.

Conflict of interest. The authors declare that they have no conflict of interest.

Authors' contributions. The contributions of the authors are equal.