

Transición singlete-triplete en sistemas magnéticos de baja dimensionalidad: aproximación de operadores de ligadura

A.E. Feiguin y H.A. Ceccatto

Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR Departamento de Física, FCEIA, UNR
e-mail: adrian@ifir.ifir.edu.ar

Se formula la teoría de campo medio para sistemas magnéticos frustrados en bajas dimensiones mediante la representación de "operadores de ligadura" para los operadores de espín. En particular se estudia i) el modelo de Heisenberg unidimensional con interacciones frustrantes (modelo $J_1 - J_2$), y ii) dos cadenas de Heisenberg acopladas (escalera). En torno al punto de Majumdar-Gosh en el primer caso, y para acoplamiento fuerte entre cadenas en el segundo, los respectivos estados fundamentales corresponden a una red de dímeros y las excitaciones son del tipo singlete-triplete. Para el modelo $J_1 - J_2$ los resultados muestran un gap finito en ausencia de frustración, lo que no concuerda con las predicciones de estudios numéricos y de grupo de renormalización. Concluimos que la aproximación no describe adecuadamente las propiedades dinámicas del sistema. En el caso de escaleras, la representación de operadores de ligadura resulta más adecuada, dado que la misma no requiere la ruptura de la simetría de traslación del modelo original. En particular, se obtuvo un muy buen acuerdo para la energía del estado fundamental por comparación con resultados numéricos exactos.

We present a mean-field theory for frustrated magnetic systems in low dimensions by means of the bond-operator representation of spin operators. In particular we study i) the one-dimensional Heisenberg model with frustrating interactions ($J_1 - J_2$ model), and ii) two coupled Heisenberg chains (ladder). Close to the Majumdar-Gosh point in the first case, and for strong interchain coupling in the second, the corresponding ground states are a lattice of dimers with singlet-triplet excitations. For the $J_1 - J_2$ model, the results show a finite gap in the absence of frustration, which does not agree with the numerical and renormalization group predictions. We conclude that this representation is not able to describe correctly the system excitations. In the ladder case, the bond-operator representation results more appropriate, since it does not require a translational symmetry breaking. In particular, we obtain very good results for the ground-state energy by comparison with numerical values.

El comportamiento de materiales magnéticos en baja dimensión continúa atrayendo interés experimental y teórico. Se ha observado una gran variedad de estados fundamentales exóticos en diferentes compuestos, dependiendo de las anisotropías, del espín de los iones magnéticos, del rango de interacción entre los mismos, del acoplamiento con los grados de libertad de la red, etc.

El sistema unidimensional a estudiar corresponde a un modelo de Heisenberg de $S = 1/2$ con interacción entre primeros y segundos vecinos (ver Fig. 1a):

$$H = \sum_i J_0 \mathbf{S}_{i1} \cdot \mathbf{S}_{i2} + \sum_{i\alpha \neq j\beta} J(i\alpha, j\beta) \mathbf{S}_{i\alpha} \cdot \mathbf{S}_{j\beta} \quad (1)$$

donde los índices i, j identifican a las celdas unitarias de dos sitios, y α, β a los átomos del motivo.

Investigamos la aplicación de la representación de espines $S = 1/2$ en término de los operadores de ligadura de Sachdev y Bhatt,¹ que fueron específicamente ideados para estudiar las propiedades de fases dimerizadas. Esta representación necesariamente rompe la simetría de traslación del Hamiltoniano, que es la simetría espacial de la red.

La ruptura de simetría de traslación no debería causar ningún efecto sobre el resultado exacto final. Sin embargo, esta simetría no es totalmente restaurada en un cálculo aproximado de campo medio.

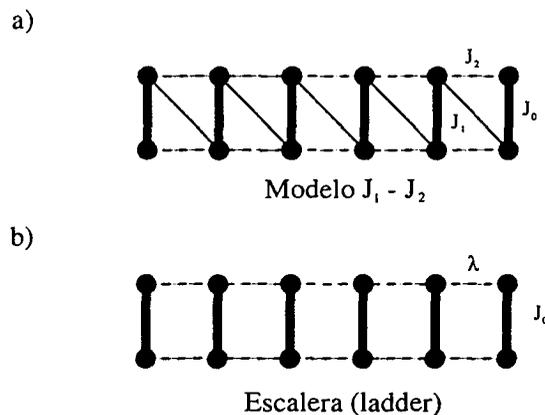


FIG. 1. Estructura de interacciones magnéticas para los modelos considerados. Las líneas gruesas componen el motivo de dímeros D (Ver texto principal).

Introducimos la representación considerando dos espines, \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 . Los cuatro estados en el espacio de Hilbert pueden ser combinados para formar un estado singlete $|s\rangle$ y tres estados triplete $|t_x\rangle$, $|t_y\rangle$, y $|t_z\rangle$. Definimos entonces los operadores de creación de estados singletes y tripletes,

$$\begin{aligned}
|s\rangle &= s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \\
|t_x\rangle &= t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
|t_y\rangle &= t_y^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \\
|t_z\rangle &= t_z^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle).
\end{aligned} \quad (2)$$

Estudiando los diferentes elementos de matriz $\langle s | S_1 | t_\alpha \rangle$ pueden obtenerse fácilmente las expresiones para S_1 y S_2 en esta representación:

$$\begin{aligned}
S_{1\alpha} &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\
S_{2\alpha} &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma).
\end{aligned} \quad (3)$$

En esta expresión α, β, γ toman los valores x, y, z , los índices repetidos se suman, y ϵ es el tensor antisimétrico. La restricción a estados físicos que sean singletes o tripletes origina la condición

$$s^\dagger s + t_\alpha^\dagger t_\alpha = 1,$$

que será introducida mediante un multiplicador de Lagrange μ . Por otro lado, los operadores satisfacen las reglas de conmutación bosónicas:

$$[s, s^\dagger] = 1, [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, [s, t_\alpha^\dagger] = 0.$$

Para emplear esta representación se hace necesario escoger el patrón de dimerización D , de modo de tomar espines de a dos. En nuestro modelo unidimensional ésto se reduce a considerar pares de sitios como muestra la Fig. 1a (debe notarse que no es la única elección posible). De este modo, en cada sitio de las nuevas celdas unitarias se substituyen los operadores de espín por sus expresiones (3). El Hamiltoniano queda expresado de la siguiente forma: $H_D = H_0 + H_1$, donde H_0 contiene a los términos armónicos:

$$\begin{aligned}
H_0 &= \sum_{i \in D} \left\{ \left(-\frac{3}{4} J_0 - \mu_i \right) s_i^\dagger s_i + \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{J_0}{4} - \mu_i \right) t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} + \mu_i \right\},
\end{aligned} \quad (4)$$

y H_1 contiene productos de cuatro operadores y toda la información sobre la geometría de las interacciones. El estudio previo efectuado por Chubukov² utilizando una representación alternativa corresponde a retener solamente los términos armónicos.

La expresión de H en campo medio se obtiene desacoplando los términos cuárticos, de modo que el nuevo Hamiltoniano efectivo sea cuadrático en los bosones. Llamando $\langle t_{i\alpha}^\dagger t_{i+r\alpha} \rangle = t_A(r)$, $\langle t_{i\alpha}^\dagger t_{i+r\alpha} \rangle = t_B(r)$, $\langle s_i^\dagger s_{i+r} \rangle = s_A(r)$, $\langle s_i^\dagger s_{i+r} \rangle = s_B(r)$, y proponiendo $\mu_i = \mu$ independiente del sitio de la red, al pasar al espacio k se obtiene

$$H = H_s + H_t + H_0, \quad (5)$$

con

$$\begin{aligned}
H_s &= \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{3}{4} J_0 - \mu + 2\gamma_{i_A}^a(\mathbf{k}) \right) s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{i_B}^a(\mathbf{k}) (s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{-\mathbf{k}}^\dagger + s_{\mathbf{k}} s_{-\mathbf{k}})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_t &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{J_0}{4} - \mu + 2\gamma_{s_A}(\mathbf{k}) - 2\gamma_{i_A}^c(\mathbf{k}) \right) t_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger t_{\mathbf{k}\alpha} \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_{s_B}(\mathbf{k}) + \gamma_{i_B}^c(\mathbf{k})) (t_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger t_{-\mathbf{k}\alpha}^\dagger + t_{\mathbf{k}\alpha} t_{-\mathbf{k}\alpha})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_0 &= -4 \sum_{i \in D, r} \{ a(r) (t_B(r) s_B(r) + s_A(r) t_A(r)) \\
&\quad + \frac{1}{3} c(r) (t_B^2(r) - t_A^2(r)) \} + \mu N.
\end{aligned}$$

Hemos definido $\gamma_{s_A}(\mathbf{k}) = 2a(r)s_A(r) \cos kr$, $\gamma_{i_A}^a(\mathbf{k}) = 2a(r)t_A(r) \cos kr$, $\gamma_{i_A}^c(\mathbf{k}) = \frac{4}{3}c(r)t_A(r) \cos kr$ (con expresiones análogas para t_B y s_B), y N es el número de dímeros de la red. Las constantes $a(r)$, $b(r)$, y $c(r)$ dependen de los acoplamientos magnéticos entre celdas. Los valores de expectación se determinan autoconsistentemente mediante las ecuaciones de minimización de la energía.

El Hamiltoniano (5) puede diagonalizarse mediante una transformación de Bogoliubov, resultando

$$H = 2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_s(\mathbf{k}) \eta_{\mathbf{k}}^\dagger \eta_{\mathbf{k}} + 2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_t(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\alpha} + E_0$$

con

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \omega_s(\mathbf{k}) + 3 \sum_{\mathbf{k}} \omega_t(\mathbf{k}) + 3\mu N + H_0.$$

Las relaciones de dispersión son:

$$\omega_s(\mathbf{k}) = \left\{ \left(-\frac{3}{8} J_1 - \frac{\mu}{2} + \gamma_{i_A}^a(\mathbf{k}) \right)^2 - (\gamma_{i_B}^a(\mathbf{k}))^2 \right\}^{1/2}$$

y

$$\begin{aligned}
\omega_t(\mathbf{k}) &= \left\{ \left(\frac{J_1}{8} - \frac{\mu}{2} + \gamma_{s_A}(\mathbf{k}) - \gamma_{i_A}^c(\mathbf{k}) \right)^2 - \right. \\
&\quad \left. - (\gamma_{s_B}(\mathbf{k}) + \gamma_{i_B}^c(\mathbf{k}))^2 \right\}^{1/2}
\end{aligned}$$

Los cálculos se efectuaron para una red finita de 14 sitios, para comparar con resultados exactos de Lanczos. En la Fig. 2 se grafican las energías obtenidas para esta red mediante distintos métodos, en función de la frustración J_2 . Podemos observar que los resultados de la aproximación utilizada en este trabajo coinciden con los exactos en el punto de Majumdar y Gosh (donde los singletes de spin se desacoplan completamente) pero difieren de los mismos cada vez más a medida que nos alejamos de dicho punto. Esto se debe a que el campo medio efectuado destruye la simetría traslacional de la red y no describe adecuadamente las correlaciones magnéticas entre las nuevas celdas unitarias de dos sitios. En la Fig. 3 mostramos el valor medio de los parámetros de orden $\langle s^\dagger s \rangle$, $\langle t^\dagger t \rangle$ y $\langle t^\dagger t^\dagger \rangle$. Como puede apreciarse, el operador de singletes prácticamente no varía con J_2 , lo que explica la

concordancia de nuestros resultados con los obtenidos por Chubukov² (línea de puntos en Fig. 2), donde estos operadores se congelan a su valor en el condensado bosónico.

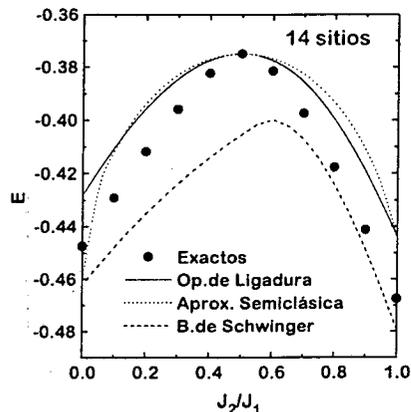


FIG. 2. Energía de una cadena de 14 sitios en función de la frustración. Se comparan los resultados de la representación de operadores de ligadura con resultados numéricos y los obtenidos mediante otras representaciones.

Los resultados obtenidos no son lo suficientemente alentadores como para efectuar una investigación más detallada del comportamiento del modelo dentro de la aproximación utilizada. Sin embargo, existen otros modelos donde la ruptura de simetría de traslación implicada en la aproximación de operadores de ligadura no ocurre. Tal es el caso de las llamadas "escaleras" de espines (ver Fig. 1b), que modelan el comportamiento de compuestos del tipo del $\text{Sr}_2\text{Cu}_4\text{O}_6$ y $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ ³. En este caso los operadores de ligadura se forman con los "peldaños" de la escalera. Estudios preliminares en esta dirección arrojaron los resultados que se muestran en la Fig. 3, donde se compara la energía del estado fundamental de una de estas escaleras en función del acoplamiento entre peldaños. Como puede apreciarse en dicha figura, los resultados obtenidos son concordantes con los exactos en un gran rango de variación del parámetro λ , definido como el cociente entre los acoplamientos magnéticos en cadenas y peldaños. Nuevamente para $\lambda = 0$ se obtiene el resultado exacto correspondiente a peldaños (singletes) desacoplados.

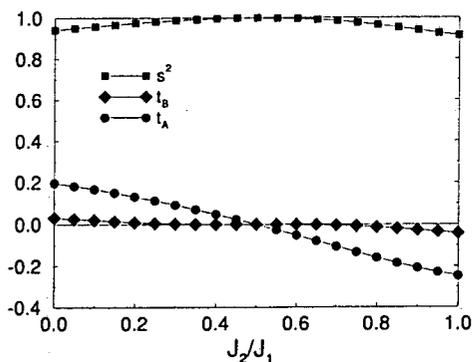


FIG. 3. Valor medio de los parámetros de orden en función de la frustración.

En conclusión, se muestra que debido a la ruptura de la simetría de traslación inherente a la representación de ligaduras, las excitaciones elementales no son bien descritas en aproximación de campo medio, tal como ocurre para el modelo unidimensional $J_1 - J_2$. En el caso en que esta simetría no se rompe, los resultados son más alentadores, como fuera ejemplificado con las escaleras. Se está estudiando la posibilidad de aplicar la presente técnica a planos acoplados magnéticamente ("bilayers") para estudiar el comportamiento de la representación en el caso de que exista orden magnético en el estado fundamental.

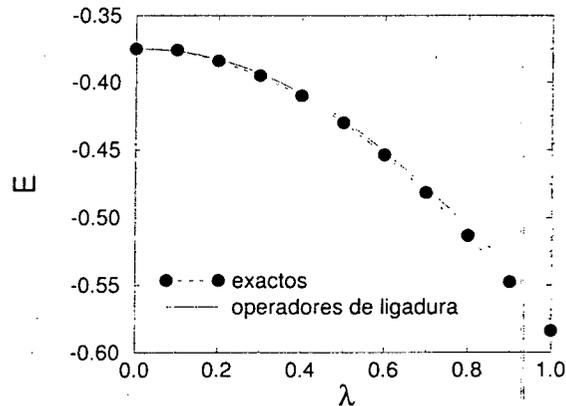


FIG. 4. Energía del estado fundamental de una escalera de 12 sitios, en función del acoplamiento entre peldaños. Se comparan los resultados numéricos exactos con los obtenidos mediante la representación de operadores de ligadura.

¹ S. Sachdev y R. N. Bhatt, Phys. Rev B 41, 9323 (1990).

² A. V. Chubukov, Phys. Rev. B 43, 3337 (1991); A. V. Chubukov y Th. Jolicoeur, Phys. Rev. B 44, 12050 (1991).

³ S. Gopalan, T. M. Rice y M. Sigrist, Phys. Rev B 49, 8901 (1994); T. Barnes y J. Riera, Phys. Rev. B 50, 6817 (1994).