

Invariancia rotacional y rigidez de espín en sistemas de espines cuánticos

L. O. Manuel, A. E. Trumper y H. A. Ceccatto

Instituto de Física Rosario, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas y Universidad Nacional de Rosario, Bvd. 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario, República Argentina

Calculamos, en el esquema de bosones de Schwinger, las correcciones gaussianas a la rigidez de espín del antiferromagneto de Heisenberg sobre la red triangular. Encontramos que las correcciones debilitan la rigidez, pero el estado fundamental del sistema permanece ordenado en el patrón espiral clásico de 120° . Además, discutimos varios aspectos metodológicos relacionados con la aproximación de bosones de Schwinger. En particular, mostramos que la consideración de redes finitas con condiciones de borde giradas evita el uso de factores *ad hoc* frecuentemente empleados en la literatura.

We compute, within the Schwinger-boson scheme, the Gaussian-fluctuation corrections to the order-parameter stiffness of the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet. We found that the corrections weaken the stiffness, but the ground state of the system remains ordered in the classical 120° spiral pattern. In addition, we discuss several methodological questions related to the Schwinger-boson approach. In particular, we show that the consideration of finite clusters which require twisted boundary conditions to fit the infinite-lattice magnetic order avoids the use of *ad hoc* factors to correct the Schwinger-boson predictions.

Aunque hay en general una creciente convicción de que el antiferromagneto de Heisenberg sobre la red triangular (AFHT) presenta un estado fundamental ordenado del tipo espiral a 120° (quizás con una importante reducción del valor de la magnetización clásica $\frac{1}{2}$),^{1,2} usando diferentes métodos algunos autores encontraron que no hay orden magnético de largo alcance.^{3,4} Recientemente, se obtuvieron nuevos resultados sobre redes finitas^{2,4} y cálculos de orden $1/S$ en ondas de espín^{5,6}, lo que nos condujo a reconsiderar este modelo mediante la técnica de bosones de Schwinger (BS)⁷.

Consideremos el modelo de Heisenberg,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \vec{S}_{\mathbf{r}} \cdot \vec{S}_{\mathbf{r}'} \quad (1)$$

donde \mathbf{r}, \mathbf{r}' indican sitios sobre la red triangular. Sobre redes finitas generadas por los vectores de traslación \mathbf{T}_α ($\alpha = 1, 2$) imponemos condiciones de borde arbitrarias $\vec{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{T}_\alpha} = \mathcal{R}_{\hat{n}}(\Phi_\alpha) \vec{S}_{\mathbf{r}}$, donde $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\Phi_\alpha)$ es la matriz que rota un ángulo Φ_α alrededor de algún eje \hat{n} . Notar que estamos usando negrita (flechas) para vectores en el espacio real (espines). Realizando rotaciones locales $\vec{S}_{\mathbf{r}} \rightarrow \mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta_{\mathbf{r}}) \vec{S}_{\mathbf{r}}$ de ángulo $\theta_{\mathbf{r}} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}$, y eligiendo $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{T}_\alpha = \Phi_\alpha$, las condiciones de borde son las periódicas usuales $\vec{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{T}_\alpha} = \vec{S}_{\mathbf{r}}$.

Definimos el tensor de rigidez de espín $\rho_{\hat{n}}$ a $T = 0$ como

$$\rho_{\hat{n}}^{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 E_{GS}(\mathbf{Q})}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} \right|_{\mathbf{Q}=0}, \quad (2)$$

donde E_{GS} es la energía del estado fundamental *por espín*, y $\theta_\alpha = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2$) son los ángulos de rotación a lo largo de los vectores base \mathbf{e}_α .

Utilizamos la técnica de BS, la cual mantiene la invariancia rotacional en redes finitas y desarrolla la ruptura espontánea de simetría en el límite

termodinámico mediante una condensación de los bosones. Para ello, representamos los operadores de espín en términos de los BS:⁹ $\vec{S}_i = \frac{1}{2} \mathbf{a}_i^\dagger \cdot \vec{\sigma} \cdot \mathbf{a}_i$, donde $\mathbf{a}_i^\dagger = (a_{i\uparrow}^\dagger, a_{i\downarrow}^\dagger)$ es un espinor bosónico, $\vec{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli, e imponemos la restricción $\sum_\sigma a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} = 2S$ en el número de bosones en cada sitio. De esta manera, podemos escribir la función de partición para el Hamiltoniano (1) como una integral funcional sobre estados coherentes de bosones, lo cual permite realizar una expansión alrededor del punto de ensilladura. Siguiendo los cálculos de⁸, que no reproducimos aquí, podemos calcular la energía del estado fundamental como la suma de la energía de punto de ensilladura (SP) más las contribuciones a un "loop", $E_{GS}(\mathbf{Q}) = E_0(\mathbf{Q}) + E_1(\mathbf{Q})$.

Evaluamos $E_{GS}(\mathbf{Q})$ sobre redes finitas de manera de evitar las divergencias infrarrojas asociadas a la condensación de Bose. La rigidez de espín se obtiene mediante la diferenciación numérica de $E_{GS}(\mathbf{Q})$ según (2).

Para la red triangular, las redes finitas apropiadas corresponden a vectores de traslación $\mathbf{T}_1 = (n + m)\mathbf{e}_1 + m\mathbf{e}_2$, $\mathbf{T}_2 = n\mathbf{e}_1 + (n + m)\mathbf{e}_2$, donde $\mathbf{e}_1 = (a, 0)$, $\mathbf{e}_2 = (-\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a)$ (a es el parámetro de red).² El número de sitios de estas redes es $N = n^2 + m^2 + nm$. Cuando $2n + m$ y $n - m$ son múltiplos de 3, $N = 3p$ (p entero), y las condiciones de borde periódicas no frustran el orden espiral de 120° . En caso contrario, $N = 3p + 1$ y se tienen que usar condiciones de borde giradas con ángulos $\frac{2}{3}\pi(2n + m)$ y $\frac{2}{3}\pi(n - m)$ a lo largo de las direcciones \mathbf{T}_1 y \mathbf{T}_2 respectivamente.

Para espines clásicos y eligiendo condiciones de borde apropiadas como se explicó arriba, la energía es minimizada por una configuración $\vec{S}_{\mathbf{r}} = S(\cos \theta_{\mathbf{r}}, \sin \theta_{\mathbf{r}}, 0)$. Aquí $\theta_{\mathbf{r}} = \mathbf{Q}_{\text{spiral}}^\Delta \cdot \mathbf{r}$, con vector de onda magnético $\mathbf{Q}_{\text{spiral}}^\Delta = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$. Como tomamos espines en el plano xy , es necesario considerar la rigidez paralela $\rho_{\parallel} \equiv \rho_{\hat{z}}$ ante una rotación alrededor de \hat{z} , y la

rigidez perpendicular promedio $\rho_{\perp} \equiv \overline{\rho_{xy}}$, para rotaciones alrededor de los versores \hat{n} que se encuentran en este plano. Para espines clásicos se puede demostrar que $\rho_{\parallel} = JS^2 a^2$, $\rho_{\perp} = \frac{1}{2} \rho_{\parallel}$ y $\bar{\rho} = \frac{2}{3} \rho_{\parallel}$.

Para obtener las correcciones de estos resultados debido a la naturaleza cuántica de los espines seguimos el procedimiento discutido en la sección previa. En las redes $N = 3p$ con condiciones de borde periódicas nuestra aproximación es invariante rotacional y solamente tenemos acceso a $\bar{\rho}$. Como ahora ρ_{\parallel} y ρ_{\perp} no están relacionadas, la teoría no puede producir predicciones concretas para ellas a partir de $\bar{\rho}$. Por otro lado, encontramos que para esta última cantidad el resultado en el límite de S grande da exactamente $4/3$ más chico que el valor clásico. Este tipo de problemas es frecuente en la teoría de BS, y en la literatura se ha optado por incluir factores *ad hoc* para compensar esta deficiencia. A fin de calcular ρ_{\parallel} y ρ_{\perp} seguimos la idea de^{2,6}, y consideramos redes del tipo $N = 3p + 1$ con condiciones de borde giradas apropiadamente de manera de describir el orden espiral 120° en el plano- xy . Como las condiciones de borde rompen la invariancia rotacional, se pueden calcular separadamente la rigidez paralela y perpendicular. Además, encontramos que para estas redes las predicciones en el límite de S grande se comportan correctamente y no requieren factores *ad hoc*.

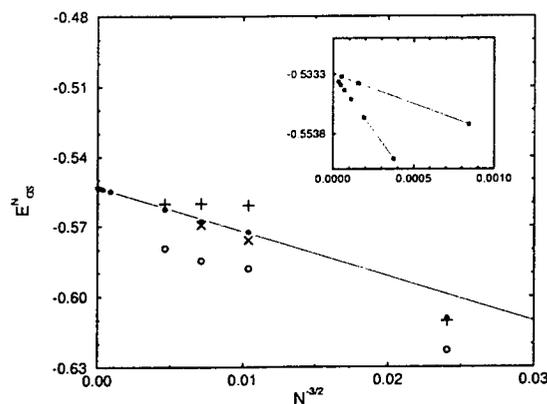


FIG. 1. Energía del estado fundamental *por sitio* E_{GS}^N para el AFHT como función del número de sitios de la red N . Círculos vacíos y llenos dan los resultados a orden SP y fluctuaciones, respectivamente; las cruces son los valores numéricos exactos de⁴. La línea indica la extrapolación al límite termodinámico. Inserción: Extrapolación a la red infinita usando redes finitas con condiciones de contorno periódicas (círculos llenos) y giradas (círculos vacíos).

En la Fig. 1 comparamos los resultados de la energía para redes $N = 3p$ con los de diagonalización exacta. Como puede verse, para $N = 12, 36$, después de la inclusión de las fluctuaciones gaussianas nuestra teoría da predicciones muy cercanas a las exactas. Sin embargo, para $N = 21, 27$ el acuerdo no es tan bueno. Esto puede explicarse si tenemos en cuenta que para redes impares el verdadero estado fundamental tiene espín $S = 1/2$, mientras que en nuestra aproximación

la función de onda es siempre un singlete. La diferencia entre N par e impar es también evidente en los resultados exactos, ya que éstos no se alinean de acuerdo a la ley de escala esperada (ondas de espín). Este problema se vuelve menos importante para redes más grandes. La inserción de la Fig. 1 muestra la extrapolación al límite termodinámico sobre redes grandes de los dos tipos $N = 3p$ y $N = 3p + 1$. Los "escalos" de la energía en el límite termodinámico tienen pendientes bastante diferentes entre los dos tipos de redes, aunque, por supuesto, el valor final de la energía del estado fundamental por sitio $E_{GS} \simeq -0.5533$ es el mismo en los dos casos.

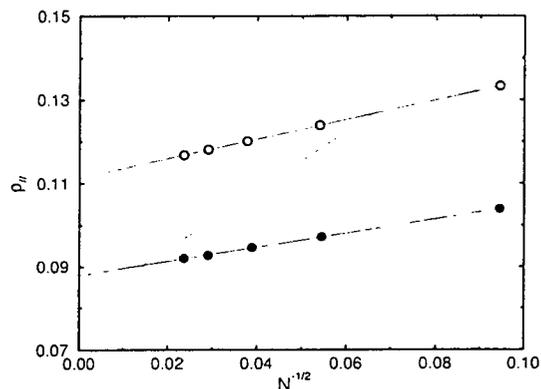


FIG. 2. Rigidez de espín paralela ρ_{\parallel} para el AFHT en función del número de sitios N de la red finita. Círculos vacíos y llenos dan los resultados de SP y fluctuaciones, respectivamente. Las líneas llenas indican las extrapolaciones al límite termodinámico y la quebrada es el resultado de ondas de espín a primer orden⁶.

El escaleo de las redes finitas para la rigidez paralela se muestra en la Fig. 2. En esta figura graficamos los resultados de SP y los corregidos por las fluctuaciones, los que puede verse son prácticamente paralelos. También se muestran los resultados de ondas de espín a primer orden de⁶. Se puede notar que, a pesar de la diferencia en las pendientes, los valores extrapolados no difieren mucho. Para una mejor comparación, en Fig. 3 graficamos el factor de renormalización entre los resultados clásicos y cuánticos para la rigidez paralela en redes pequeñas dados por las diferentes técnicas. Como puede verse, la inclusión de las correcciones gaussianas a los resultados de SP dan valores más cercanos a los exactos que aquellos calculados con la teoría de ondas de espín a primer orden.

La necesidad de factores *ad hoc* para corregir los resultados de BS está conectada a la delicada interrelación existente entre la invariancia rotacional y la relajación de la restricción local del número de bosones. Esto se sustenta con el siguiente argumento: a orden SP la energía $E_{GS}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}) [B_{\mathbf{r}}^2(\mathbf{Q}) - A_{\mathbf{r}}^2(\mathbf{Q})]$, donde $B_{\mathbf{r}}(\mathbf{Q})$ y $A_{\mathbf{r}}(\mathbf{Q})$ son los parámetros de orden que miden la interacción espín-espín en los canales ferro y antiferromagnéticos respectivamente. Al mismo orden de cálculo, la condición (local) exacta

impondría la identidad $B_r^2(\mathbf{Q}) + A_r^2(\mathbf{Q}) \equiv S^2$, la cuál muestra que ambos parámetros de orden deberían contribuir de la misma manera a la rigidez (2). Además, la misma identidad indica que $(\frac{\partial A_r}{\partial \mathbf{Q}})^2 + (\frac{\partial B_r}{\partial \mathbf{Q}})^2 \equiv -(A_r \frac{\partial^2 A_r}{\partial \mathbf{Q} \partial \mathbf{Q}} + B_r \frac{\partial^2 B_r}{\partial \mathbf{Q} \partial \mathbf{Q}})$. Sin embargo, cuando las condiciones se imponen en promedio los parámetros de orden se comportan independientemente, la identidad se viola, y esta última relación no se cumple (el miembro izquierdo se anula). Por otro lado, sobre redes finitas con condiciones de borde giradas, esta relación entre las derivadas se cumple conduciendo a valores correctos de la rigidez de espín.

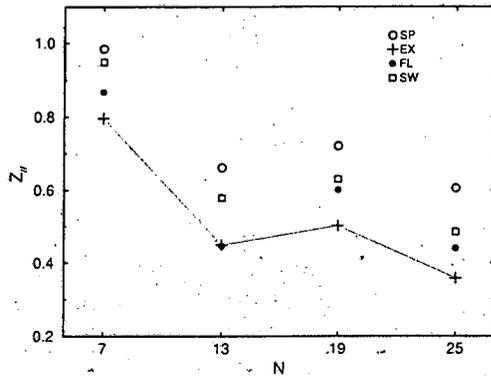


FIG. 3. El factor de renormalización $Z_{||} = \rho_{||}/\rho_{||}^{Cl}$ para el AFHT en redes finitas. Círculos vacíos y llenos corresponden a resultados de SP y fluctuaciones, respectivamente. Los resultados exactos (EX) y de ondas de espín a primer orden (SW), están indicados con cruces y cuadrados vacíos respectivamente⁶.

En conclusión, se consideraron las correcciones por fluctuaciones gaussianas a la rigidez de espín para el AFHT. Encontramos que éstas debilitan la rigidez de espín, pero el estado fundamental permanece ordenado en el patrón clásico de 120° . En el curso de esta investigación discutimos varios aspectos metodológicos relacionados con la aproximación de BS. En particular mostramos que la consideración de condiciones de bordé giradas de manera tal que describan correctamente el orden magnético evita el uso de factores *ad hoc* para corregir las predicciones de los BS. Este hecho está indicando la delicada interrelación entre la invariancia rotacional y la relajación de las restricciones locales en esta aproximación. Todo indica que restringir las fluctuaciones de espín a un plano, mediante condiciones de contorno giradas, suprime fuertemente fluctuaciones bosónicas espurias y conduce a los resultados correctos.

¹ B. Bernu, C. Lhuillier, y L. Pierre, Phys. Rev. Lett. 69, 2590 (1992).

² B. Bernu *et al*, Phys. Rev. B 50, 10048 (1994).

³ K. Yang, L. K. Warman, y S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett.

70, 2641 (1993), y referencias allí citadas.

⁴ P. W. Leung y K. Runge, Phys. Rev. B 47, 5861 (1993).

⁵ A. Chubukov, S. Sachdev, y T. Senthil, J. Phys.: Condens. Matter 6, 8891 (1994).

⁶ P. Lecheminant *et al*, Phys. Rev. B 52, 9162 (1995).

⁷ L. O. Manuel, A. E. Trumper, y H. A. Ceccatto, Phys. Rev. B (en prensa) (1997).

⁸ A. E. Trumper, L. O. Manuel, C. J. Gazza, y H. A. Ceccatto, Phys. Rev. Lett. 78, 2216 (1997).

⁹ A. Auerbach y D. Arovas, Phys. Rev. Lett. 61, 617 (1988); Phys. Rev. B 38, 316 (1988).