

Rigidez de Spin en Antiferromagnetos Frustrados

A. E. Feiguin, C. J. Gazza, A. E. Trumper
y H. A. Ceccatto

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

Calculamos la rigidez de spin del antiferromagneto de Heisenberg frustrado (modelo $J_1 - J_2$) en redes finitas, usando la representación de bosones de Schwinger. Para $S = 1/2$ la comparación con recientes resultados numéricos exactos revela que la falta de ley de escala con el tamaño de las redes, para frustraciones intermedias y grandes, no puede considerarse como indicativo de ausencia de orden de Néel. Esta ausencia de ley de escala ya es evidente para frustración pequeña y es un efecto de tamaño finito. Nuestros resultados indican que el comportamiento esperado se reobtiene para redes más grandes que las consideradas en el estudio numérico.

We calculate the spin stiffness of the $S = 1/2$ frustrated Heisenberg antiferromagnet on finite square lattices by means of the Schwinger - boson approach. Comparison with recent exact numerical results reveals that the observed lack of scaling with lattice size for intermediate to large frustration cannot be taken as an indication of absence of Néel order. This lack of scaling is already apparent for small frustration and is a finite lattice effect. Our results also indicate that the expected behavior is regained for larger lattices than those considered in numerical studies.

Los antiferromagnetos de Heisenberg han suscitado gran interés en los últimos años debido a sus posibles conexiones con la física de los cerámicos superconductores¹. El sistema en estudio es el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones a primeros y segundos vecinos en una red cuadrada, o modelo $J_1 - J_2$ ². Para una frustración $J_2/J_1 < 0.5$ el estado fundamental clásico del sistema corresponde al orden de Néel. Exactamente para $J_2/J_1 = 0.5$ esta fase aparece degenerada con una gran variedad de estados clásicos, lo cual se ha tomado como indicativo de que en las cercanías de este punto las fluctuaciones cuánticas podrían estabilizar alguna fase desordenada, o quizás algún orden exótico sin análogo clásico. Dejando de lado la naturaleza de esta nueva fase, el rango de J_2/J_1 donde debería estar presente e incluso su misma existencia siguen siendo controversial³.

En este trabajo empleamos la técnica de bosones de Schwinger previamente desarro-

llada⁴ para investigar el comportamiento de la rigidez de espín en redes finitas en función del aumento de la frustración. Esta magnitud permite determinar la existencia de orden magnético de largo alcance, y es una de las dos cantidades -junto a la velocidad de ondas de espín- que caracterizan la dinámica de bajas energías de los sistemas magnéticos⁵.

La rigidez de espín ρ_s se puede obtener considerando el Hamiltoniano de Heisenberg sobre una red finita con condiciones de borde giradas en una de las direcciones de la red⁶. Por lo tanto, en un marco de referencia local el Hamiltoniano correspondiente es:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot (R_{ij}^\theta \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

donde los \mathbf{S}_i ahora satisfacen condiciones de borde periódicas, y R_{ij}^θ rota los espines un ángulo $\theta_{ij} = (n_j - n_i)\theta$ alrededor de un eje arbitrario (n_i, n_j son las coordenadas de los sitios i, j a lo largo de una de las direcciones de la red, en unidades del espaciamiento de la misma). La rigidez de espín está dada por:

$$\rho_s = \frac{1}{N} \frac{d^2}{d\theta^2} E(\theta) |_{\theta=0}, \quad (2)$$

con $E(\theta)$ la energía del estado fundamental y N el número de sitios. Eligiendo la rotación alrededor del eje \hat{y} en el espacio de los espines tenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot (R_{ij}^\theta \mathbf{S}_j) &= \frac{1}{2}(1 + \cos \theta_{ij}) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \\ &\frac{1}{2}(1 - \cos \theta_{ij})(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 2S_i^y S_j^y) \quad (3) \\ &+ \sin \theta_{ij}(\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \cdot \hat{y}. \end{aligned}$$

Los operadores de espín se reemplazan por los bosones de Schwinger de acuerdo a

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \\ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 2S_i^y S_j^y &= \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} - : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : \\ (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \cdot \hat{y} &= \frac{1}{2}(: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} + \text{H.c.}). \end{aligned}$$

Hemos definido los singletes

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{\sigma_i} b_{\sigma_j}, \quad \hat{B}_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{\sigma_i}^\dagger b_{\sigma_j}^\dagger,$$

con $\sigma = \pm 1$, $\bar{\sigma} = -\sigma$, y los operadores

$$\hat{C}_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{\sigma_i}^\dagger b_{\sigma_j}, \quad \hat{D}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{\sigma_i} b_{\sigma_j},$$

los cuales son invariantes ante rotaciones alrededor de \hat{y} , y $:O:$ indica el orden normal del operador O . Estas expresiones pueden obtenerse fácilmente a partir de la interacción espín-espín isotrópica rotando los espinores de acuerdo a $b_{\sigma_j} \rightarrow b_{\sigma_j} \cos(\theta_j/2) - \sigma b_{\bar{\sigma}_j} \sin(\theta_j/2)$. De esta manera, todos los términos en (1) pueden ser expresados en términos de bosones de Schwinger manteniendo las simetrías correctas. Después del desacople de campo medio correspondiente, el Hamiltoniano armónico resultante es transformado al espacio k y diagonalizado por una transformación de Bogoliubov. Puede verse fácilmente que la energía del estado fundamental resulta una función de la combinación de parámetros de orden

$$A_{ij} \equiv \langle \hat{A}_{ij} \cos(\theta_{ij}/2) - \hat{D}_{ij} \sin(\theta_{ij}/2) \rangle,$$

$$B_{ij} \equiv \langle \hat{B}_{ij} \cos(\theta_{ij}/2) + \hat{C}_{ij} \sin(\theta_{ij}/2) \rangle.$$

A fin de comparar con los resultados numéricos, consideramos separadamente las dos contribuciones a ρ_s , que provienen de los términos que incluyen el coseno y el seno en la ecuación (3). Introduciendo un factor rotacional⁷, dichas contribuciones pueden ser obtenidas de las relaciones

$$TY = -\frac{1}{2N} E(\theta = 0), \quad JY = \rho_s - TY.$$

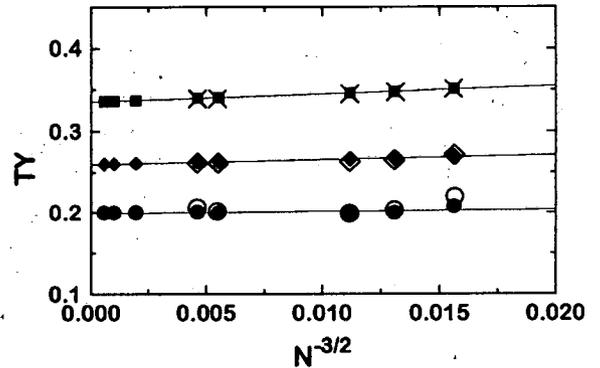


FIG. 1. TY en función del tamaño para $J_2/J_1 = 0$ (cuadrados llenos), 0.2 (diamantes llenos) y, 0.4 (puntos llenos). También se muestran los resultados exactos⁷ indicados por cruces, diamantes vacíos y puntos vacíos respectivamente

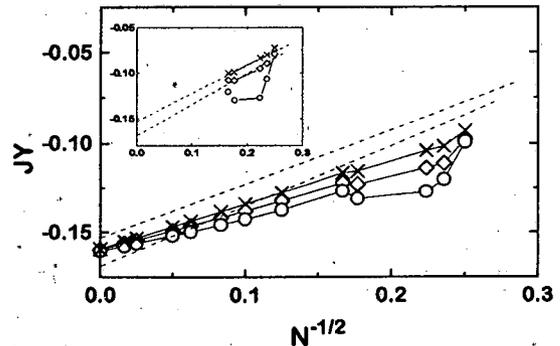


FIG. 2. JY en función del tamaño para $J_2/J_1 = 0$ (cruces), 0.2 (diamantes vacíos), y 0.4 (puntos vacíos). Inserción: resultados exactos⁷. Tanto en la figura principal como en la inserción las líneas de trazos corresponden a las extrapolaciones para el límite termodinámico realizadas en el estudio exacto para $J_2/J_1 = 0$ y 0.2

Los resultados para diferentes tamaños de redes en función del grado de frustración se presentan en las Figs. 1 y 2, donde también se muestran los resultados exactos. Para obtener estos resultados hemos introducido un factor 2 *ad hoc* en el cálculo de ρ_s , requerido para lograr un acuerdo con los resultados clásicos para S grande. La necesidad de este tipo de factores fue discutida previamente⁸, y está relacionado con el hecho de haber tratado en promedio la restricción sobre el número de bosones por sitio.

La Fig. 1 muestra un destacable acuerdo cuantitativo entre los resultados aproximados y los exactos para TY, aún para una frustración grande. Esto no es sorprendente ya que esta cantidad está directamente relacionada con la energía del estado fundamental, la cual es muy bien reproducida por nuestra aproximación⁴. Lo que sí es sorprendente es el comportamiento de escala de JY con el tamaño de la red, mostrado en la Fig. 2. Aunque en este caso el acuerdo cuantitativo con los resultados exactos no es tan bueno, el comportamiento cualitativo para redes pequeñas es totalmente análogo al encontrado en los estudios numéricos. Si bien no hay un comportamiento de escala tan obvio cuando se incrementa la frustración, para redes mayores que las consideradas exactamente⁷ el sistema reobtiene el comportamiento indicado por la teoría de ondas de espín convencional. Es de destacar que la falta de escala para redes con $N \leq 36$ fue considerada como una indicación de ausencia de orden de Néel en el estado fundamental. La extrapolación al límite termodinámico muestra muy poca dependencia de JY con la frustración; los resultados para la rigidez de espín para $J_2/J_1 = 0, 0.2, 0.4$ son $\rho_s^\infty = 0.1756, 0.0994, 0.0382$ respectivamente. Como esperábamos, ρ_s^∞ se anula para $J_2/J_1 \simeq 0.62$, el punto donde el orden de Néel desaparece debido a la frustración. Este resultado corresponde a la aproximación de punto de ensilladura ("saddle-point") de la teoría basada en los bosones de Schwinger, y debería disminuir si se incluyen las fluctuaciones gaussianas.

Para concluir, quisiéramos proponer dos posibles interpretaciones de los resultados que no necesariamente se excluyen mutuamente. Por un lado, se puede argumentar que la aproximación que estamos usando es, por alguna razón, cualitativamente y hasta cierto punto cuantitativamente precisa para redes pequeñas, pero se hace poco confiable para redes grandes ($N > 36$). Alternativamente, los resultados pueden ser interpretados como una indicación de la incertidumbre en las predicciones obtenidas a partir de estudios en redes pequeñas, ya que la región de escala para las extrapolaciones corresponde a valores de N mayores que los considerados en los estudios numéricos. En cualquier caso, lo que parece bien claro es que la falta de comportamiento de escala para $N \leq 36$ no puede ser considerada indicativa de la ausencia de orden de Néel. Dicha ausencia de un comportamiento de escala ya aparece para una frustración pequeña, y es solamente una consecuencia de la mezcla de redes finitas normales y giradas en los estudios numéricos.

¹ E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).

² P. Chandra, and B. Doucot, Phys. Rev. B **38**, 9335 (1988).

³ E. Dagotto, y A. Moreo, Phys. Rev. Lett **63**, 2148 (1989); M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, y D. A. Huse, Phys. Rev. B **40**, 10801 (1989); N. Read y S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **62**, 1694 (1989); J. H. Xu, y C. S. Ting, Phys. Rev. B **42**, 6861 (1990); H. A. Ceccatto, C. J. Gazza, A. E. Trumper, Phys. Rev. B **45**, 7832 (1992).

⁴ H. A. Ceccatto, C. J. Gazza, A. E. Trumper, Phys. Rev. B **47**, 12329 (1993).

⁵ B.I. Halperin y P.C. Hohenberg, Phys. Rev. **188**, 898 (1969).

⁶ B.S. Shastry y B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **65**, 243 (1990).

⁷ T. Einarsson y H. J. Schultz, Phys. Rev. B **51**, 6151 (1995).

⁸ A. Auerbach y D. Arovos, Phys. Rev. Lett. **61**, 617 (1988); Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).