

Dimerización de espín-Peierls y frustración en antiferromagnetos bidimensionales

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.
e-mail: adrian@ifir.edu.ar

Estudiamos la inestabilidad de Peierls en el modelo de Hubbard, en el límite de repulsión U grande y llenados $n = 1 - \delta$ con $\delta \sim 0$. La frustración dinámica del orden antiferromagnético causada por el dopaje leve se aproxima introduciendo interacciones frustrantes entre segundos y terceros vecinos en el modelo de Heisenberg. La correspondiente transición de espín-Peierls resulta de primer orden en toda la región de parámetros donde el orden de Néel es estable en el modelo sin acoplamiento con la red, volviéndose de segundo orden en el punto donde dicho orden es destruido por la frustración. Para $U/t = 5 \sim 10$ este punto corresponde a dopajes realistas $\delta = 0.079 \sim 0.0576$, y en sus proximidades serían aplicables las ideas de Hirsch sobre la conexión entre superconductividad y un estado "bond-charge-density-wave" producido por dimerización.

I. INTRODUCCIÓN

En algunas de las propuestas para explicar la superconductividad de alta T_c^{1-3} la dimerización de la red debida a la interacción electrón-fonón (e-f) juega algún rol, lo que ha motivado recientes estudios de la inestabilidad de Peierls en el modelo de Hubbard a banda semillena^{4,5}. En una dimensión (1D) dicho modelo es inherentemente inestable frente a una distorsión de la red, que duplica la celda unidad e introduce un "gap" en la energía de Fermi. En particular la repulsión en el sitio U refuerza este efecto. Hirsch² supuso que un comportamiento similar podría ocurrir en 2D debido al "nesting" perfecto de la red cuadrada a banda semillena. Esta conjetura fue cuestionada por Zhang y Prelovsek⁴ quienes mostraron, mediante cálculos exactos en redes finitas para U grande, la necesidad de un acoplamiento e-f crítico para formar un estado dimerizado vía una transición de primer orden. Este resultado, en contradicción con lo que ocurre en 1D y con las predicciones de la teoría de ondas de espín convencional (que indica una transición de segundo orden), fue posteriormente verificado por Hirsch y Tang⁵

mediante cálculos de Monte Carlo. Estos autores mostraron también que el fonón con vector de onda $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ es el más favorable para distorsionar la red.

En un trabajo previo⁶ presentamos resultados analíticos, basados en la representación de Schwinger de operadores de espín, en remarkable coincidencia tanto cualitativa como cuantitativa con los resultados numéricos arriba mencionados. En este trabajo reinvestigamos la estabilidad del orden antiferromagnético (AFM) frente a los efectos combinados de dimerización de la red e interacciones frustrantes a segundos vecinos (que simulan un dopaje leve de la banda semillena⁷).

II. MODELO DE ESPÍN-PEIERLS

Introducimos en el modelo de Hubbard los grados de libertad vibracionales de la red mediante una modulación de la integral de salto,

$$t_{ij} = t - \alpha \mathbf{n}_{ij} \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (1)$$

donde α es la constante de acoplamiento electrón-fonón, \mathbf{n}_{ij} es el versor que une los sitios i y j , y \mathbf{u}_i es la distorsión de la red en

el sitio i . Para U grande y banda semillena el hamiltoniano efectivo del sistema resulta entonces el llamado modelo de espín-Peierls:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + \frac{K}{2} \sum_i \mathbf{u}_i^2. \quad (2)$$

Los acoplamientos de intercambio $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$ están modulados con la integral de salto efectiva (1).

Sin acoplamiento electrón-fonón, para interacciones entre primeros vecinos solamente el estado fundamental en una red cuadrada presenta un orden AFM. En presencia del acoplamiento, la ganancia en energía magnética dada por el primer término de (2) favorece la dimerización, mientras que la energía elástica (segundo término) se opone. La competencia de estos dos efectos conduce, para un acoplamiento e-f suficientemente grande, a la destrucción del orden de Néel, estableciendo una distorsión permanente de la red. Analizaremos la posibilidad de estados dimerizados permitiendo desplazamientos dados por $\mathbf{u}_i = \pm \frac{u}{2}(1,0)$, donde los signos \pm corresponden a las dos subredes generadas. De esta forma el acoplamiento transversal en dirección y prácticamente no se ve afectado ($J_T \simeq 4t^2/U \equiv J$), mientras que en la dirección longitudinal x se tiene $J_L = 4(t \pm \alpha u)^2/U$. Es conveniente además introducir desplazamientos y acoplamientos adimensionales $x = \alpha u/t$ y $\lambda = 32\alpha^2/KU$ respectivamente.

Estamos interesados en el efecto que produce una interacción J_2 entre espines segundos vecinos, motivados parcialmente por el hecho de simular el efecto de los huecos en el régimen de bajo dopaje de los planos CuO_2 ⁷. En particular, aún sin considerar el acoplamiento e-f, en la región cercana a $J_2/J_1 = 0.5$ se cree que el sistema puede tener una fase no-magnetizada con orden dimerizado⁸ producida por la fuerte frustración⁹. Bajo la suposición de que la interacción entre segundos vecinos i, k es originada por el movimiento de los huecos⁷ se tiene $J_{ik} \simeq 4t_{ij}t_{jk}\delta/U$. Aquí t_{ij} y t_{jk} son las integrales de salto entre primeros vecinos en las direcciones longitudinal y transversal respectivamente. Este resultado se obtiene para dopajes $\delta = 1 - n \simeq 0$. Como mencionáramos an-

teriormente, hemos considerado $t_{ij} = t \pm \alpha u$ y $t_{jk} \simeq t$, con lo cual $J_{ik} \simeq J_2(1 \pm x\eta_{ij})$ con $J_2 = J\delta$. Por otro lado, el movimiento de los huecos también afecta el intercambio entre primeros vecinos, produciendo un acoplamiento efectivo $J_1 \simeq J[1 - (5 + U/t)\delta]$.

Dado un valor de J_2 (es decir, de δ) la transición de un orden a otro puede caracterizarse por el desplazamiento adimensional de la red x . La energía total (magnética más elástica) puede expandirse en serie de potencias alrededor de $x = 0$:

$$E = E_0 + (a_2 + \frac{1}{\lambda})x^2 + f(x), \quad (3)$$

donde E_0 es la energía de la red sin distorsionar y $f(x)$ contiene potencias de x mayores a 2. En cada caso buscamos la configuración que representa el estado fundamental del sistema, esto es, aquella que tiene menor energía para cada valor de los parámetros.

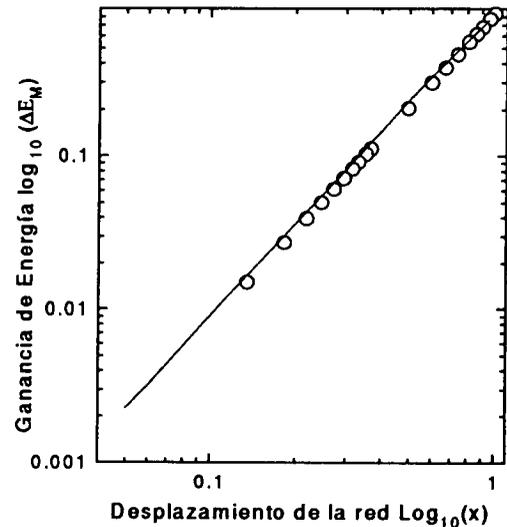


FIG. 1. Ganancia en energía magnética ΔE_M como función de la distorsión de la red x . La línea llena es nuestro resultado; los círculos son resultados de Monte Carlo⁵

III. RESULTADOS

En nuestro anterior trabajo⁶ utilizamos la técnica de bosones de Schwinger para evaluar a_2 y $f(x)$ en (3) en el caso $J_2 = 0$, y chequeamos la confiabilidad de la aproximación utilizada comparando sus predicciones

con resultados exactos en redes finitas⁴. Un mejor chequeo lo constituye la comparación directa con resultados de Monte Carlo extrapolados al límite termodinámico. En la Fig. 1 mostramos la ganancia en energía magnética ΔE_M que se obtiene mediante dicho método⁵, junto con el resultado obtenido por nosotros. El acuerdo es notablemente bueno.

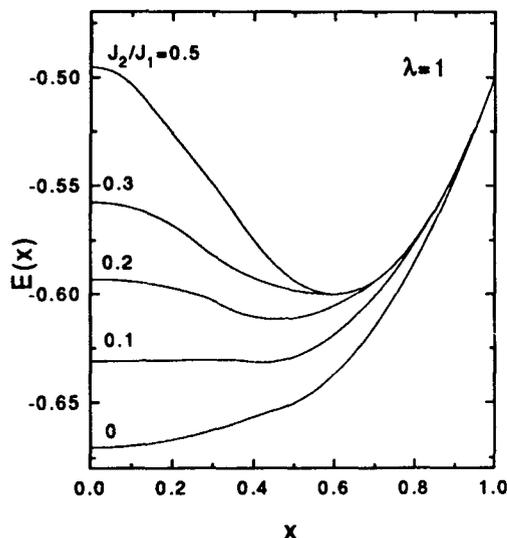


FIG. 2. La energía por sitio del estado fundamental $E(x)$ como función de la distorsión de la red x , para $\lambda = 1$ y diferentes valores del cociente J_2/J_1

Una vez validada nuestra aproximación comparando con resultados numéricos para $J_2 = 0$, retomamos la consideración del objetivo central del presente trabajo, es decir, el estudio de los efectos sobre los resultados anteriores de la inclusión de la interacción a segundos vecinos. Para ello resolvimos las ecuaciones de autoconsistencia con J_2/J_1 como nuevo parámetro. En la Fig. 2 mostramos la energía de la red infinita en función del desplazamiento adimensional x , para $\lambda = 1$ y varios valores de J_2/J_1 . En la Fig. 3 graficamos los valores críticos de acoplamiento λ_c y distorsión de la red x_c como función de J_2/J_1 . Como es de esperar, dichos valores críticos decrecen con el nivel de frustración. Las líneas de punto son extrapolaciones (cuadrática para λ_c y lineal para x_c) en la región donde el orden de Néel se torna metaestable. En esta región la solución correspondiente a dicho orden es cada

vez más difícil de hallar, ya que las iteraciones numéricas para lograr autoconsistencia dan lugar a otras soluciones más estables. Para x_c la extrapolación indica que se anula cerca de $J_2/J_1 \simeq 0.63$, el punto donde el orden AFM de la red sin distorsionar se destruye por la frustración⁹. En este punto las condiciones son similares al caso unidimensional, donde la transición es de segundo orden y la red se torna más susceptible a dimerizar. En consecuencia, en las vecindades de este punto las ideas de Hirsch² concernientes a la conexión entre superconductividad y un estado 'bond charge-density-wave' serían aplicables. Sin embargo, la extrapolación de λ_c muestra que, contrariamente al caso unidimensional, un acoplamiento electrón-fonón mínimo es necesario para distorsionar la red.

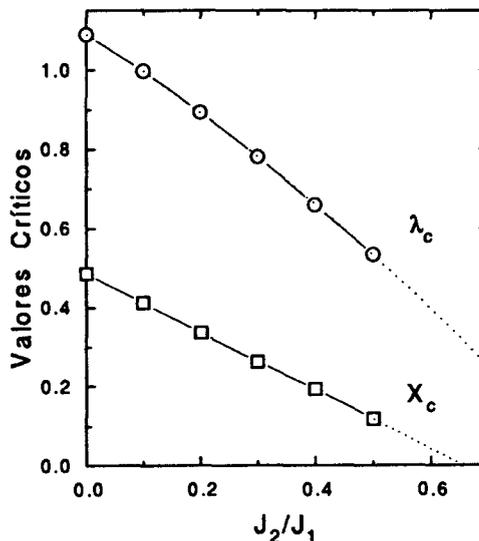


FIG. 3. El valor crítico λ_c , correspondiente al mínimo acoplamiento electrón-fonón requerido para dimerizar la red, como función de J_2/J_1 . El valor de x_c es el desplazamiento de la red producido por λ_c en el punto de transición de primer orden. Las líneas de trazos son extrapolaciones descritas en el texto principal

Para concluir, discutimos la aplicación de los resultados a los planos CuO_2 en La_2CuO_4 , teniendo siempre en cuenta las limitaciones de nuestra aproximación. En un trabajo previo⁹, estudiamos el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ en la línea $J_2 = 2J_3$, situación que corresponde a interacciones generadas por el movimiento de agujeros. Encontramos en ese caso que el orden

de Néel desaparece para $J_2/J_1 = \delta_c/[1 - (5 + U/t)\delta_c] \simeq 0.38$ que, para $U/t = 5 \sim 10$, indica $\delta_c = 0.079 \sim 0.057$, esto es, en el rango observado. Por otra parte, Zhang y Prelovsek⁴ estimaron para el acoplamiento reducido electrón-fonón de los iones de cobre y oxígeno $\lambda_{CuO} \simeq 2.1 \sim 2.6$. El acoplamiento e-f cobre-cobre está relacionado a un proceso de salto de segundo orden vía iones de oxígeno, por lo que se espera que sea sensiblemente menor que este valor. Sin embargo, en vista de la disminución de λ_c mostrada en la Fig. 3, resulta plausible que cerca del punto donde el orden AFM es destruido por dopaje la red se torne altamente susceptible a dimerizar.

Agradecimientos

HAC agradece a la Fundación Antorchas por el financiamiento parcial de este trabajo.

-
- ¹ S.A. Kivelson, D.S. Rokhsar, y J.P. Sethna, Phys. Rev. B35, 8865 (1987)
 - ² J.E. Hirsch, Phys. Rev. B35, 8726 (1987)
 - ³ K. Machida y M. Kato, Phys. Rev. B36, 854 (1987)
 - ⁴ F.C. Zhang y P. Prelovsek, Phys. Rev. B37, 1569 (1988)
 - ⁵ S. Tang y J.E. Hirsch, Phys. Rev. B37, 9546 (1988).
 - ⁶ A. Feiguin, C. Gazza, A. Trumper y H. A. Ceccatto, Anales AFA (1993)
 - ⁷ M. Inui, S. Döniach, y M. Gabay, Phys. Rev. B38, 6631 (1988)
 - ⁸ M.P. Gelfand, R.R.P. Singh, y D.A. Huse, Phys. Rev. B40, 10801 (1989)
 - ⁹ H. A. Ceccatto, C. J. Gazza, y A. E. Trumper, Phys. Rev. b47, 12329 (1993)