

PROPIEDADES DEL ESTADO FUNDAMENTAL DE UN ANTIFERROMAGNETO SOBRE LA RED DE KAGOMÉ

L. O. Manuel, A. E. Trumper, C. J. Gazza, H. A. Ceccatto
 Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario y CONICET
 Boulevard. 27 de Febrero 210 Bis, 2000 (Rosario), República Argentina.

El estado fundamental clásico de un antiferromagneto de Heisenberg sobre una red de Kagomé es descrito como una fase espiral de una red cuadrada decorada equivalente. Las fluctuaciones cuánticas sobre dicho estado se incorporan mediante un formalismo de bosones de Schwinger invariante rotacional, recientemente desarrollado para el estudio de helimagnetos. Las excitaciones elementales que se obtienen presentan la estructura de modos cero correcta, sin las patologías presentes en estudios previos de este modelo mediante la aproximación de ondas de espín convencional. Para espín $S = \frac{1}{2}$ la teoría predice un estado fundamental ordenado, aunque con una magnetización fuertemente reducida de sólo el 18% del valor clásico. Se discuten también las implicancias de los resultados obtenidos en la explicación de la termodinámica de bajas temperaturas del antiferromagneto de Kagomé $\text{SrCr}_{8-x}\text{Ga}_{4+x}\text{O}_{19}$.

El antiferromagneto de Heisenberg sobre una red de Kagomé fue propuesto como modelo para dos sistemas experimentales: el compuesto aislador $\text{SrCr}_{8-x}\text{Ga}_{4+x}\text{O}_{19}$ y una segunda capa de ^3He absorbida en grafito. La red de Kagomé puede construirse quitando una de las cuatro subredes interpenetradas que forman una red triangular. Clásicamente, sobre esta red la energía es minimizada por cualquier configuración en la que el espín total de cada triángulo elemental es cero. El modelo presenta, entonces, un estado fundamental clásico altamente degenerado y un número de coordinación pequeño ($z=4$). Cálculos semiclásicos¹ muestran una conducta "patológica": para estados coplanares (todos los espines en un plano) una rama entera de excitaciones es nula y otras dos ramas degeneradas. Introduciendo una interacción J_3 entre terceros vecinos se rompe esta degeneración. Para $J_3 > 0$ el estado fundamental clásico es el denominado orden $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ (que se obtiene a partir del estado ordenado de la red triangular), para $J_3 < 0$ el orden $\mathbf{q} = 0$ (tres subredes alineadas ferromagnéticamente, orientadas a 120° de otra) es el estable.

Presentamos aquí un tratamiento de este modelo mediante la técnica de bosones de Schwinger². Esta técnica ha producido muy buenos resultados en el límite fuertemente cuántico $S \approx \frac{1}{2}$ para el caso de helimagnetos³. Por ello, primeramente, deformamos la red de Kagomé en una red cuadrada con un motivo de tres sitios (Fig.1), lo que nos permite tratar ambos estados arriba mencionados como fases espirales sobre esta red decorada equivalente.

Para el estado $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ el correspondiente vector de onda magnético es $\mathbf{Q} = (\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3})$, y las

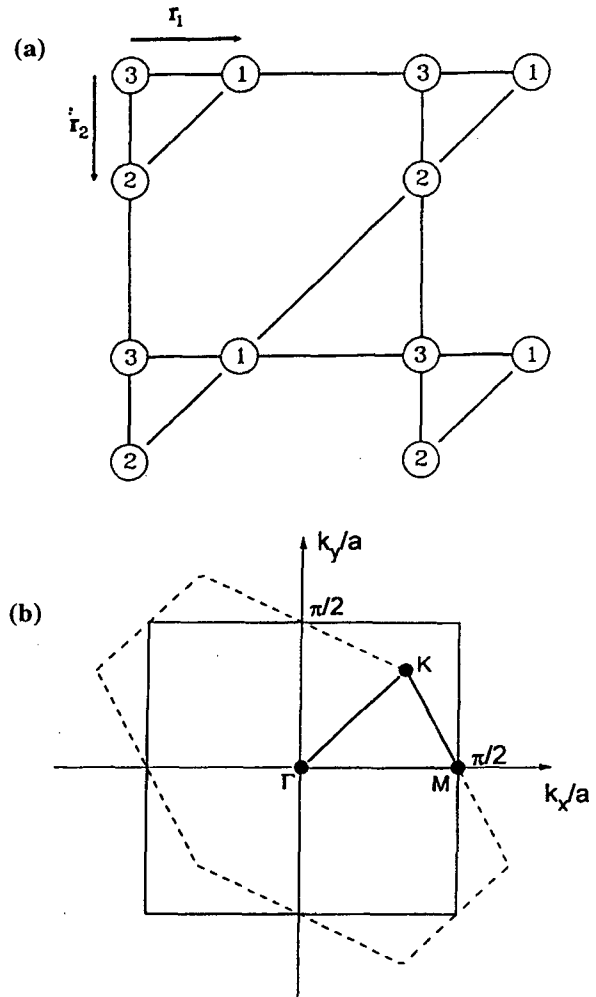


Fig. 1: a) Red Cuadrada con un motivo, equivalente a la estructura de Kagomé; b) Zona de Brillouin correspondiente a la dicha red cuadrada.

posiciones de los átomos del motivo son

$$r_1 = (\frac{1}{2}, 0), r_2 = (0, -\frac{1}{2}), y r_3 = (0, 0)$$

(en unidades del espaciado de la red cuadrada $a = 2$). Para el estado $q = 0$ se tiene, en cambio,

$$Q = (\pi, \pi) \text{ y } r_1 = (\frac{1}{3}, 0), r_2 = (0, -\frac{1}{3}), r_3 = (0, 0)$$

El hamiltoniano a considerar es

$$H = \frac{1}{2} \sum_{x,y,\alpha,\beta} J_{\alpha\beta}(x-y) S_{x+r_\alpha} \cdot S_{y+r_\beta}$$

con los órdenes magnéticos clásicos descritos por

$$S_{x+r_\alpha}^z = S \cos Q \cdot (x+r_\alpha), S_{x+r_\alpha}^x = S \sin Q \cdot (x+r_\alpha) \text{ y}$$

$$S_{x+r_\alpha}^y = 0.$$

Introducimos la representación de Schwinger de los operadores de espín, y separamos la interacción espín-espín en los canales ferromagnético y antiferromagnético:

$$S_{x+r_\alpha} \cdot S_{y+r_\beta} = B_{\alpha\beta}^\dagger(x,y) B_{\alpha\beta}(x,y) - A_{\alpha\beta}^\dagger(x,y) A_{\alpha\beta}(x,y)$$

con los campos de apareamiento singletes

$$A_{\alpha\beta}(x,y) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{\sigma,x}^{(\alpha)} b_{-\sigma,y}^{(\alpha)} \text{ y}$$

$$B_{\alpha\beta}^\dagger(x,y) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{\sigma,x}^{\dagger(\alpha)} b_{\sigma,y}^{(\beta)} (\sigma = \pm)$$

Transformando al espacio de los impulsos de acuerdo a

$$b_{\sigma,x}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q b_{\sigma,q\sigma}^{(\alpha)} e^{-iq_\sigma(x+r_\alpha)} \quad (q_\sigma = k + \sigma \frac{Q}{2}),$$

y efectuando un desacople de Hartree-Fock obtenemos:

$$H_{HF} = \frac{1}{2} \sum_{q,\alpha,\beta} b_q^{\dagger(\alpha)} D_{\alpha\beta}(q) b_q^{(\beta)} - (S + \frac{1}{2}) N \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)} - \langle H_{HF} \rangle$$

Hemos definido $b_q^\dagger = (b_{\uparrow,-q}^{\dagger(\alpha)}, b_{\downarrow,-q}^{\dagger(\alpha)})$ con $q = q_+$

y $\langle H_{HF} \rangle = N \sum_{x,\alpha,\beta} J_{\alpha\beta}(x) (B_{\alpha\beta}^2(x) - A_{\alpha\beta}^2(x))$ es la energía de Hartree-Fock. La matriz dinámica D

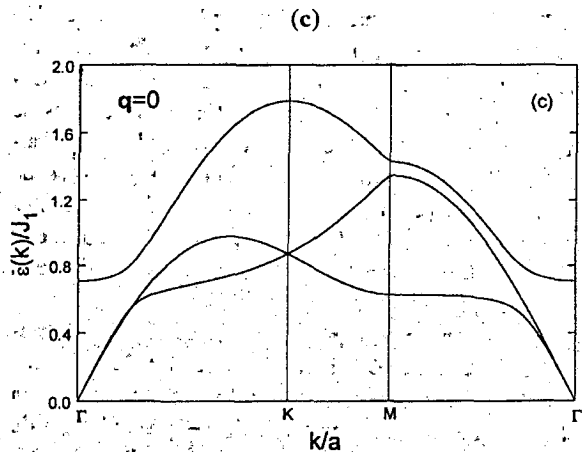
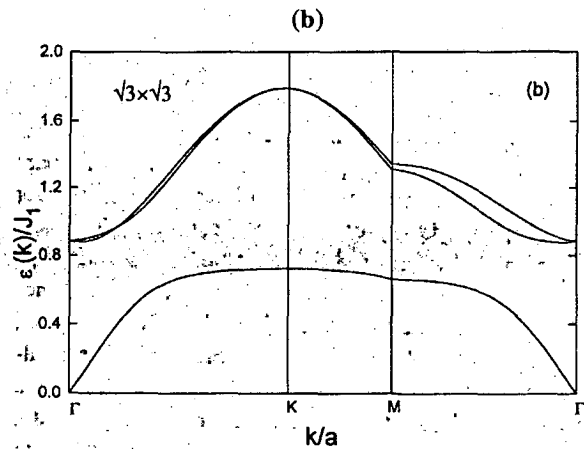
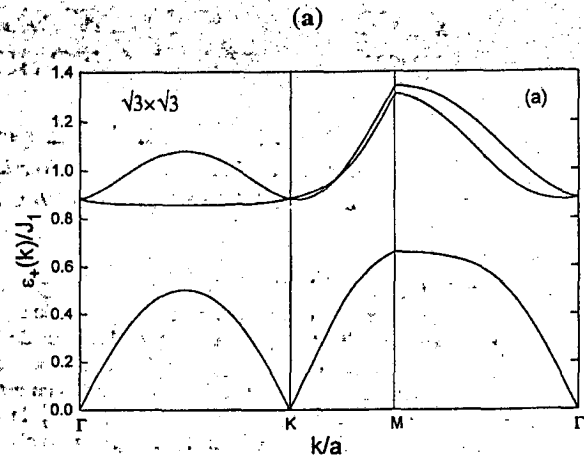


Fig. 2: Relaciones de dispersión, a lo largo del camino indicado en la Fig. 1b: a) para las cuasipartículas "up" en el estado $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$; b) lo mismo para las cuasipartículas "down"; c) para el estado $q=0$. En este caso ambos tipos de cuasipartículas son equivalentes.

está dada por

$$D(q) = \begin{pmatrix} \gamma_{\alpha\beta}^{(B)}(q) + \lambda^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} & -\gamma_{\alpha\beta}^{(A)}(q) \\ \gamma_{\alpha\beta}^{(A)}(q) & \gamma_{\alpha\beta}^{(B)}(q) + \lambda^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix},$$

con, $\gamma_{\alpha\beta}^{(B)} = \frac{1}{2} \sum_{\kappa} J_{\alpha\beta}(\kappa) B_{\alpha\beta}(\kappa) e^{iq \cdot (\kappa + r_{\alpha} - r_{\beta})}$, y una definición similar para $\gamma_{\alpha\beta}^{(A)}$.

Los λ 's son los multiplicadores de Lagrange que imponen la restricción de 2S bosones por átomo (en promedio).

Diagonalizamos paraunitariamente la matriz D definiendo nuevas cuasipartículas $a = Fb$, con

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} U & -V \\ V & U \end{pmatrix}.$$

De esta forma la energía del estado fundamental resulta

$$E = \sum_{\alpha, q} \omega_{\alpha}(q) - (2S+1)N \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)} - \langle H_{HF} \rangle,$$

con $\omega_{\alpha}(q)$ los autovalores positivos de D. La energía de las cuasipartículas "up" y "down" vienen dadas por $\epsilon_{\alpha}(\kappa, \sigma) = \omega_{\alpha}(\kappa + \sigma \frac{Q}{2})$ ($\sigma = \pm$).

Las ecuaciones de autoconsistencia para los parámetros de orden resultan

$$B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2N} \sum_q [(VV^{\dagger})_{\alpha\beta} e^{iq \cdot (x+r_{\alpha}-r_{\beta})} + C.C.],$$

$$A_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \sum_q [(UV^{\dagger})_{\alpha\beta} e^{-iq \cdot (x+r_{\alpha}-r_{\beta})} + C.C.],$$

mientras que las restricciones impuestas por los multiplicadores de Lagrange son

$$\sum_q [(VV^{\dagger})_{\alpha\alpha} + C.C.] = 2NS \quad (1)$$

Para redes finitas estas ecuaciones determinan los parámetros de orden A, B y los multiplicadores de Lagrange.

Para $N \rightarrow \infty$ los multiplicadores toman el valor que hace $\omega_{\alpha}(\frac{Q}{2}) = 0$ para las ramas acústicas. En el límite termodinámico se produce una condensación de Bose, ésto es, la aparición de un orden magnético de largo alcance.

La Ec. (1) puede entonces utilizarse para calcular la magnetización local:

$$M = (S + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} [(VV^{\dagger})_{\alpha\alpha} + C.C.]$$

La resolución numérica de las ecuaciones de autoconsistencia produce los resultados que a continuación comentamos. En la Fig. 2 mostramos las relaciones de dispersión de las dos clases de cuasipartículas para $S = \frac{1}{2}$ y $J_3 = 0$, a lo largo del camino indicado en la Fig. 1b. Encontramos que las interacciones renormalizan las excitaciones, estabilizando la rama semiclásicamente nula, y mantienen los modos de Goldstone físicos $\kappa = 0, \pm Q$. El estado fundamental tiene un orden $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, con energía por sitio $E_0 \cong -0.4714$ y magnetización local $M_0 \cong 0.088$. La gran reducción de la magnetización local sugiere que las fluctuaciones gaussianas podrían destruir el orden de largo alcance. Para el estado $q = 0$ la teoría predice $E_{q=0} \cong -0.4679$ y $M_{q=0} \cong 0.154$.

Cuando $J_3 < 0$ hay una transición de uno a otro estado para $J_3^c \cong 0.017$. Este valor pequeño de J_3^c indica que la inclusión de defectos, o la generación dinámica de interacciones entre vecinos más allá de los primeros, pueden fácilmente desestabilizar un orden en favor del otro.

Nuestros resultados permiten explicar, en parte, el calor específico anormalmente alto - unas 700 veces mayor al que correspondería a un sistema normal- observado en el compuesto $SrCr_{8-x}Ga_{4+x}O_{19}$ (correspondiente a $S\frac{3}{2}$).

Esta anomalía puede entenderse en virtud del "ablandamiento" de las velocidades de las excitaciones renormalizadas. Para explicar los resultados experimentales la velocidad de los magnones debe ser aproximadamente $C_{sw} \cong 0.2J_1S^4$ con $J_1 \cong 57K$. En nuestro caso $C_{Sch} \cong 0.54J_1S$ para los modos "blandos" del estado fundamental. Sin embargo, dado que nuestra teoría introduce dos tipos de bosones, para comparar con los valores experimentales debemos definir una velocidad efectiva $C_{eff} = C_{Sch} / \sqrt{2} \cong 0.39J_1S$. Encontramos entonces un calor específico cuatro veces menor al observado. Probablemente esta discrepancia no puede ser corregida considerando sólo fluctuaciones cuánticas alrededor de un único estado clásico. Existen además infinitos estados de baja energía sin invariancia traslacional, obtenidos a través de distorsiones locales e intermedios entre los órdenes $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ y $q = 0$, que contribuyen a la termodinámica del sistema.

REFERENCIAS

1. A. B. Harris, C. Kallin and A. J. Berlinsky, Phys. Rev. **B45**, 2899 (1992).
2. D. P. Arovav and A. Auerbach, Phys. Rev. **B38**, 316 (1988).
3. H. A. Ceccatto, C. J. Gazza and A. E. Trumper, Phys. Rev. **B47**, 12329 (1993).
4. A. Chubukov, Phys. Rev. Lett. **69**, 832 (1992)