

DIMERIZACIÓN EN EL MODELO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL

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

Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario y CONICET,
Boulevard 27 de Febrero 210 Bis, (2000) Rosario, República Argentina.

Investigamos la estabilidad del orden antiferromagnético en el modelo de Heisenberg bidimensional frente a dimerización de la red debida a la interacción electrón-fonón. A diferencia del caso unidimensional, encontramos que se requiere un acoplamiento crítico para formar un estado dimerizado. Nuestros cálculos, basados en la aproximación adiabática y la representación de Schwinger de operadores de espín, indican que la transición de fase a dicho estado es de primer orden.

I. INTRODUCCIÓN

Varios de los modelos propuestos para explicar la superconductividad de alta temperatura crítica en óxidos de Cu están basados en el modelo de Hubbard bidimensional (2D)¹. Dado que en algunas de estas propuestas el modo fonónico de dimerización Cu-Cu juega un rol importante², resulta interesante el estudio de los efectos de competencia entre la repulsión electrón—electrón y la interacción electrón—fonón (e-f) en dicho modelo. En 1D este problema fue estudiado por distintos autores³. En particular se ha mostrado que un acoplamiento e-f infinitesimal es suficiente para distorsionar la red. Basado en estos resultados, Hirsch⁴ ha conjeturado que el modelo de Hubbard a banda semillena en una red cuadrada también es inherentemente inestable frente a dimerización, con la formación de un estado "bond charge-density-wave". Más recientemente Zhang y Prelovsek⁵ han cuestionado esta conjetura. Estos autores presentan evidencia numérica sobre redes finitas que indicarían la existencia de un acoplamiento crítico mínimo, a partir del cual la interacción e-f produciría un estado dimerizado.

Este trabajo reinvestiga el problema de dimerización en 2D debido al acoplamiento e-f, en el caso particular de banda semillena y repulsión electrón-electrón muy grande en el que el modelo de Hubbard se reduce al de Heisenberg.

II. MODELO HAMILTONIANO

Consideraremos el modelo de Hubbard de una banda sobre una red cuadrada, acoplado con distorsiones de la red tratadas en la aproximación adiabática. Para banda semillena y repulsión electrón—electrón U grande, dicho modelo puede ser mapeado en el llamado modelo de espín-Peirls:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{K}{2} \sum_i u_i^2 \quad (1)$$

con $J_{ij} = 4t_{ij}^2 / U$. En esta ecuación $t_{ij} = t_0 - \alpha u_{ij}$, con α el acoplamiento e-f, t_0 la integral de salto sin dimerización, y $u_{ij} = u_i - u_j$ el cambio en la distancia entre sitios. De acuerdo con la aproximación adiabática, los desplazamientos u_i serán tratados clásicamente. La influencia del modo de dimerización se reduce así a cambiar la integral de salto a primeros vecinos.

Sin el acoplamiento e-f, el estado fundamental de Ec. (1) sobre una red cuadrada presenta orden de Néel antiferromagnético (AFM) con una celda unidad el doble de lo normal. En presencia de acoplamiento de los electrones con la red, la interacción entre espines favorece la dimerización, mientras que la energía de distorsión elástica se opone. Analizaremos la posibilidad de estados dimerizados con simetrías prefijadas (Fig. 1), permitiendo desplazamientos dados por $u_i = \pm \frac{u_0}{2}(1,0)$. De esta forma el acoplamiento transversal en dirección y prácticamente no se ve afectado ($J_T \cong 4t_0^2 / U$), mientras que en la dirección longitudinal x se tiene $J_T = 4(t_0 \pm \alpha u_0)^2 / U$. Introduciendo desplazamientos y acoplamientos adimensionales $x = \alpha u_0 / t_0$ y $\lambda = 32\alpha^2 / KU$ respectivamente, la Ec. (1) puede ponerse en la forma

$$\frac{H}{J} = \sum_{\langle ij \rangle} \tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{N x^2}{\lambda} \quad (2)$$

Hemos definido $\tilde{J}_{ij} = J_{ij} / J = 1(-x\eta_{ij})^2$ donde $\eta_{ij} = 1$ para i, j vecinos próximos en dirección x , y 0 para vecinos próximos en dirección y . N es el número de sitios de la red.

Con el fin de describir los estados dimerizados, la interacción entre espines se reescribe como

$$H_{\text{spin}} = \frac{1}{2} \sum_{nn'\alpha\alpha'} \tilde{J}_{\alpha\alpha'} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') \mathbf{S}_{n\alpha} \cdot \mathbf{S}_{n'\alpha'} \quad (3)$$

donde \mathbf{n} y \mathbf{n}' indican sitios de la red, y $\alpha\alpha'$ posicionan los átomos del motivo. Los operadores de espín se expresan en la representación de bosones de Schwinger⁶: $\vec{S}_x = \frac{1}{2} \mathbf{a}_x^\dagger \vec{\sigma} \cdot \mathbf{a}_x$, donde $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli, y los espinores bosónicos $\mathbf{a}_x = (a_{x\uparrow}, a_{x\downarrow})$ satisfacen $\mathbf{a}_x^\dagger \cdot \mathbf{a}_x = 2S$. De esta forma, definiendo

$$\hat{B}_{nn'\alpha\alpha'}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} a_{\sigma n\alpha}^\dagger a_{\sigma n'\alpha'},$$

$$\hat{A}_{nn'\alpha\alpha'}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma a_{\sigma n\alpha}^\dagger a_{\sigma n'\alpha'},$$

se puede realizar un desacople invariante rotacional de la correlación en Ec. (3):

$$(\mathbf{S}_{n\alpha} \cdot \mathbf{S}_{n'\alpha'})_{HF} = B_{\alpha\alpha'} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') \hat{B}_{nn'\alpha\alpha'}^\dagger - A_{\alpha\alpha'} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') \hat{A}_{nn'\alpha\alpha'}^\dagger + H.c. - \langle (\mathbf{S}_{n\alpha} \cdot \mathbf{S}_{n'\alpha'})_{HF} \rangle.$$

La diagonalización mediante una transformación de Bogoliubov del hamiltoniano resultante permite obtener la energía del estado fundamental. La misma es una función de los parámetros de orden $A_{\alpha\alpha'}(\mathbf{n})$, $B_{\alpha\alpha'}(\mathbf{n})$, y del multiplicador de Lagrange η que impone la restricción a $2S$ bosones por sitio (en promedio). Minimización con respecto a estas cantidades produce ecuaciones de autoconsistencia que se resuelven numéricamente. El estado fundamental del hamiltoniano completo Ec. (2) se obtiene finalmente adicionando la contribución de la energía de distorsión de la red y minimizando con respecto a x . Este procedimiento debe repetirse para los distintos a patrones de distorsión considerados (Fig. 1). En todos los casos, hemos encontrado que la dimerización en columna se ve favorecida energéticamente.

Note que la energía del estado fundamental puede escribirse de manera general como

$$E = E_0 + \left(a_2 + \frac{1}{\lambda} \right) x^2 + f(x) \quad (4)$$

donde E_0 es la energía de la red sin distorsionar, y

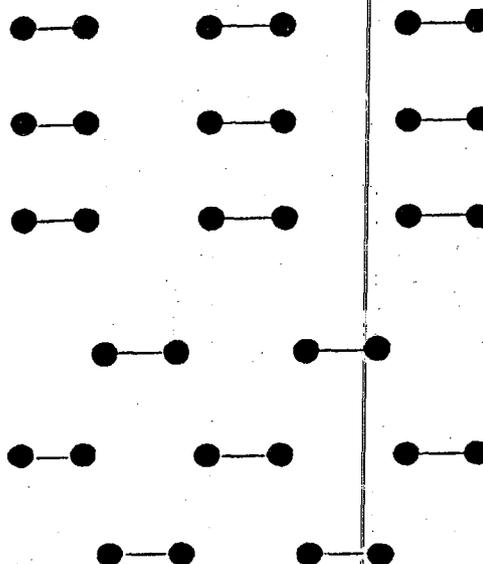


Fig. 1: Patrones de dimerización originados por distorsiones de la red analizados en este trabajo. La estructura en columna se ve siempre favorecida energéticamente.

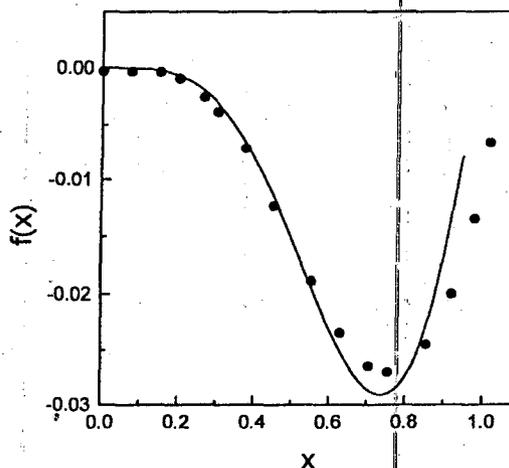


Fig. 2: Función $f(x)$ (definida en el texto principal, Ec.(4)) para la red de 8 sitios. Los puntos son resultados de diagonalización exacta tomados de Ref. (5); la línea es el resultado de nuestra aproximación.

$$f(x) = a_4 x^4 + a_6 x^6 + \dots \quad (5)$$

A manera de chequeo de nuestra aproximación, en la Fig. 2 graficamos la función $f(x)$ obtenida por el procedimiento arriba descrito para una red

de 8 sitios, y comparamos los resultados con los obtenidos mediante diagonalización exacta por Zhang y Prelovsek⁵. Como puede apreciarse, el acuerdo es excelente. Por otro lado, numéricamente se encuentra $a_2 \cong -0.7919$, mientras que con nuestra aproximación obtenemos $a_2 \cong -0.750$.

Los resultados muestran que se requiere un acoplamiento e-f crítico $\lambda_c \cong 1.175$ para dimerizar la red, permaneciendo el estado AFM estable para acoplamientos débiles. Para $\lambda \geq \lambda_c$ los desplazamientos son finitos ($x \geq x_c \cong 0.6$), lo que indica que la transición entre el estado AFM y el estado dimerizado es de primer orden. Una condición necesaria para una transición de segundo orden es $a_4 > 0$ en Ec. (5), mientras que tanto numéricamente como a través de nuestra aproximación se obtienen valores negativos.

Una vez chequeada la validez del método utilizado por comparación con resultados en redes finitas, investigamos el límite termodinámico. Encontramos que para sistemas infinitos $\lambda_c \cong 1.08$, con un desplazamiento $x_c \cong 0.48$. Los coeficientes del desarrollo resultan $a_2 = -0.91$ y $a_4 = -0.02$, lo que indica también para la red infinita una transición de primer orden. Es de destacar que los resultados de la teoría de ondas de espín convencional predicen una transición de segundo orden⁵.

En la Fig. 3 presentamos la energía de la red infinita como función de x para distintos valores del acoplamiento e-f λ .

III. CONCLUSIONES

Encontramos que, dentro de la aproximación adiabática, el estado fundamental AFM del modelo de Heisenberg en 2D es estable para una interacción e-f $\lambda < \lambda_c = 1.08$. Para valores mayores de λ nuestra aproximación predice la formación de un estado dimerizado. Esto es cualitativamente diferente del caso unidimensional, donde el estado fundamental del sistema no distorsionado -un singlete sin orden AFM- es inestable para acoplamientos infinitesimales con la red. En 2D el estado fundamental AFM es mucho más estable: cada sitio en la red cuadrada tiene 4 uniones, la dimerización favorece una de estas uniones y disminuye la energía de intercambio

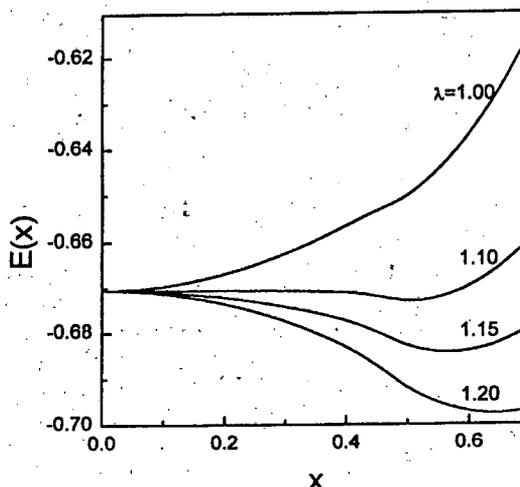


Fig. 3: Energía de la red infinita como función del parámetro de distorsión de la red x , para distintos valores de la interacción electrón-fonón λ .

de las otras tres, estableciéndose así la competencia de los dos órdenes.

Finalmente, es de destacar que nuestros cálculos están en excelente acuerdo con resultados numéricos exactos sobre redes finitas. Al igual que éstos, predicen una transición de primer orden entre el orden AFM y el estado dimerizado, en contraposición a lo que indica la teoría de ondas de espín convencional.

REFERENCIAS

1. T. M. Rice, Z. Phys. **B67**, 141 (1987).
2. S. A. Kivelson, D. S. Rokhsar, and J. P. Sethna, Phys. Rev. **B35**, 8865 (1987).
3. M. C. Cross and D. S. Fisher, Phys. Rev. **B19**, 402 (1979).
4. J. E. Hirsch, Phys. Rev. **B35**, 8726 (1987).
5. F. C. Zhang and P. Prelovsek, Phys. Rev. **B4**, 1569 (1988).
6. H. A. Ceccatto, C. J. Gazza and A. E. Trumper, Phys. Rev. **B47**, 12329 (1993).