

FASES NO-CLASICAS EN ANTIFERROMAGNETOS FRUSTRADOS

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

Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario,

Bvd. 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario.

Mediante un formalismo unificado invariante rotacional se estudia la estructura de fases magnéticas y no-magnéticas de antiferromagnetos frustrados en redes cuadradas. Se muestra la existencia de una fase no-magnética de origen puramente cuántico, que separa la fase de Néel de la fase espiral. La teoría predice la ausencia de fases intermedias tipo "spin-nematic" propuestas recientemente.

La fase aisladora de los compuestos superconductores de alta temperatura (SAT) se describe muy bien por un modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin $1/2$, definido¹ sobre una red cuadrada que representa los planos $Cu-O_2$. $AT=0$ este modelo presenta un orden de Néel, el cual es rápidamente suprimido por dopaje debido al efecto de frustración causado por el movimiento de los agujeros introducidos en el sistema. Se ha sugerido² que el estado conductor así generado podría ser diferente a un líquido de Fermi, con propiedades inusuales que proveerían un mecanismo para llevar al sistema a una fase superconductora.

Cómo se desestabiliza el orden de Néel por dopaje, y la naturaleza del estado desordenado así generado, son problemas centrales en el estudio de la SAT. Para bajo dopaje, una aproximación muy simple al problema³ consiste en eliminar los agujeros, reemplazándolos por interacciones efectivas de mayor alcance entre los spines:

$$H = J_1 \sum_{x,\mu} S_x \cdot S_{x+\mu} + J_2 \sum_{x,\mu'} S_x \cdot S_{x+\mu'} + J_3 \sum_{x,\mu''} S_x \cdot S_{x+\mu''} \quad (1)$$

Los acoplamientos J_2 y J_3 representan una medida de la frustración originada en el movimiento de los agujeros, verificándose en la región de interés $J_2 \cong 2J_3$. Dado que en (1) la frustración dinámica ha sido reemplazada por una estática, el hamiltoniano resultante captura sólo características gruesas de la física involucrada en el problema. Por otro lado, el estudio del mismo es interesante *per se* como modelo de un helimagneto, con la frustración responsable de la existencia de fases espirales en su estado fundamental.

En este trabajo estudiamos las propiedades del estado fundamental de (1) -especialmente sus fases espirales inconmensuradas- con particular énfasis en el límite cuántico fuerte $S=1/2$. Utilizamos para ello el método de bosones de Schwinger, que consiste básicamente en reemplazar los operadores de spin por $S_x = a_x \cdot \vec{\sigma} \cdot a_x$, donde $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ son las matrices de Pauli, y los espinores bosónicos $a_x = (a_{x\uparrow}, a_{x\downarrow})$ verifican $a_x^\dagger \cdot a_x = 2S$. El hamiltoniano cuántico en operadores de Bose así generado se desacopla luego de manera invariante-rotacional, obteniéndose

$$(S_x \cdot S_y) HF = \frac{1}{2} (B_{xy} \hat{B}_{xy} - A_{xy} \hat{A}_{xy} + h.c.) \quad (2)$$

Los operadores \hat{B}_{xy} y \hat{A}_{xy} vienen dados por

$$\hat{B}_{xy} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} a_{x\sigma} a_{y\sigma} \text{ y } \hat{A}_{xy} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma a_{x\sigma} a_{y-\sigma}.$$

Condiciones de autoconsistencia requieren que los parámetros B_{xy} y A_{xy} se elijan de manera que

$$B_{xy} = \langle \hat{B}_{xy} \rangle \text{ y } A_{xy} = \langle \hat{A}_{xy} \rangle.$$

En consecuencia, dado que

$$\langle (S_x \cdot S_y) HF \rangle = |B_{xy}|^2 - |A_{xy}|^2, \quad (3)$$

los módulos al cuadrado de B_{xy} y A_{xy} representan una medida de la correlación ferro y antiferromagnética respectivamente entre spines en sitios x y y de la red.

En el espacio de los momentos, el hamiltoniano de Hartree-Fock (1-2) puede ser diagonalizado mediante una transformación de Bogoliubov,

obteniéndose una energía

$$E^{HF} = \frac{1}{2} \sum_q \omega_q + \left(S + \frac{1}{2} \right) \lambda N$$

una relación de dispersión para las cuasipartículas

$$\omega_q = \sqrt{(\gamma_B(q) - \lambda)^2 - \gamma_A^2(q)}. \text{ En estas expresiones hemos definido } q = k - Q/2,$$

$$\gamma_A(q) = \frac{i}{2} \sum_x J(x) A(x) e^{-iq \cdot x},$$

$$\gamma_B(q) = \frac{1}{2} \sum_x J(x) B(x) e^{-iq \cdot x}$$

y λ es el multiplicador de Lagrange que impone (en promedio) la restricción local sobre el número de bosones por sitio: $\langle a_x a_x \rangle = 2S$. El vector Q se obtiene minimizando la energía y constituye el vector de onda que caracteriza a la fase espiral.

Antes de presentar los resultados que se obtienen resolviendo las ecuaciones de autoconsistencia para A_{xy} , B_{xy} y la ecuación de restricción para λ , es conveniente comentar las diferencias entre nuestros cálculos y otros trabajos recientes^{4,5} usando la técnica de bosones de Schwinger:

1. No hemos referido los operadores de spin a ejes de cuantización locales, como es común en la teoría de ondas de spin convencional, y en estudios de helimagnetos similares al realizado en este trabajo⁴. Esto ayuda a mantener la simplicidad en la estructura de la interacción entre spines (Eq.(2)).
2. No utilizamos la forma exacta (operatorial) de la restricción en el número de bosones por sitio para simplificar el hamiltoniano. Evitamos su uso dado que al imponer dicha restricción sólo en promedio a través del multiplicador de Lagrange λ , las identidades operatoriales que se generan son largamente violadas en valor medio.
3. La tercer diferencia con otros trabajos recientes^{4,5}, y la más importante, consiste en permitir el apareamiento con ruptura de paridad de los bosones de Schwinger en la fase espiral (Este hecho está relacionado con el valor medio distinto de cero de A_{xy} en dicha fase). Como consecuencia de ello, y a diferencia de los trabajos mencionados, nuestra teoría conserva la correcta estructura de bosones de Goldstone (modos cero para $k=0$, $\pm Q$), asociados a la ruptura de la simetría de rotación.

La solución numérica de las ecuaciones de autoconsistencia involucra hallar las raíces de 13 ecuaciones no-lineales acopladas. Doce de ellas corresponden a los parámetros de orden $A(\delta_i)$, $B(\delta_i)$, donde δ_i ($i = 1, 12$) indican las posiciones de los 1^{ros}, 2^{dos} y 3^{ros} vecinos próximos a un sitio dado; la restante ecuación es la condición adicional que determina λ . Para redes finitas esto debe realizarse para distintos modos Q de la red, a fin de hallar el que minimiza la energía. Para la red infinita la condición de restricción en el número de bosones se desacopla del sistema, y solamente determina la magnetización local⁶. En este caso se deben agregar las ecuaciones de minimización de la energía con respecto a las variables (cuasi) continuas $Q = (Q_x, Q_y)$.

La Fig.1 muestra una muy buena concordancia entre nuestras predicciones para la energía del estado fundamental de una red de 20 sitios y los valores exactos obtenidos por diagonalización numérica del hamiltoniano⁷.

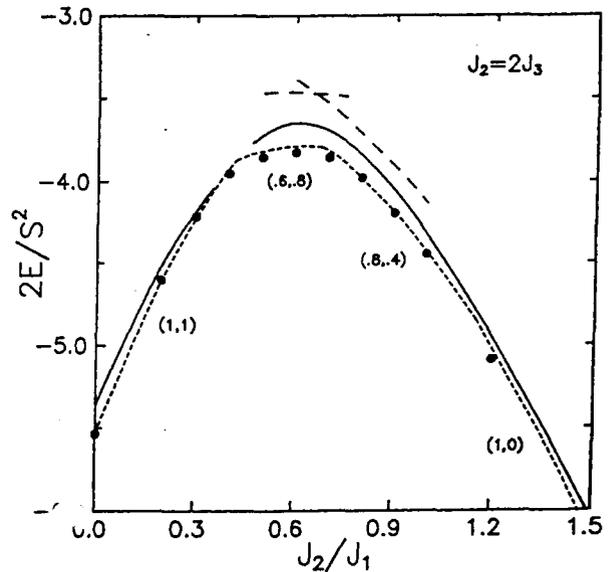


Fig.1. Energía del estado fundamental por unión para $S = 1/2$. La línea de trazos cortos es nuestro resultado para la red de 20 sitios; las líneas de trazo largo son las energías de las distintas fases espirales de acuerdo con Ref.4. Los puntos corresponden a los valores numéricos exactos de Ref.7. Los valores (a,b) indican los vectores de onda Q/π que minimizan la energía. La línea continua es nuestra predicción para la red infinita.

En la misma figura se presentan los resultados de una red infinita. Advierta en este caso el segmento

faltante para $0.38 \leq \frac{J_2}{J_1} \leq 0.47$. En esta región del espacio de los parámetros no se encontró ninguna

solución con magnetización local no nula. Esto puede entenderse mejor observando la Fig.2, donde se grafica M_Q , la magnetización local en la fase espiral (para $Q = (\pi, \pi)$) corresponde a la magnetización "staggered" de la fase de Néel).

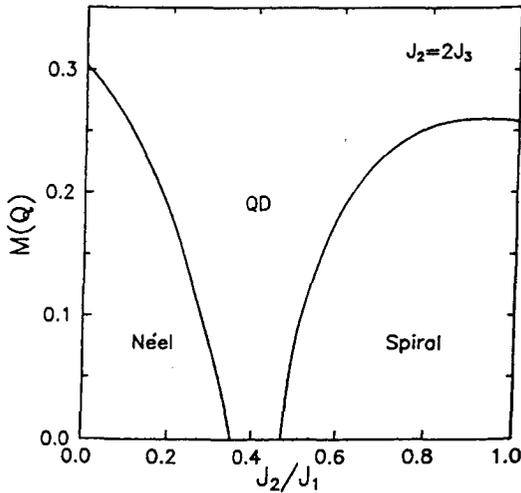


Fig.2. Magnetización local M_Q para $S = 1/2$.

Dicha cantidad viene dada por el comportamiento a grandes distancias de la función de correlación:

$$\lim_{|x-y| \rightarrow \infty} \langle S_x \cdot S_y \rangle \approx M_Q^2 \cos Q \cdot (x-y).$$

Para $S = \frac{1}{2}$ tanto el orden de Néel como el espiral se funden debido a las fluctuaciones cuánticas, dejando una ventana en la región antes mencionada donde no existe una estructura magnética obvia en el estado fundamental de (1). Nuestra teoría predice una fase desordenada simple con "gap", aunque otras posibilidades han sido sugeridas en la literatura (esta fase correspondería al líquido de spines hipnotizado² en conexión con SAT). Es claro sin embargo que no puede existir una fase tipo "spin-nematic" como la sugerida en Ref.5. Nuestra función de onda del estado fundamental es un singlete isotrópico, con el orden magnético apareciendo como un fenómeno de condensación de Bose⁷. Cuando el momento local M_Q se anula el condensado desaparece y un orden de largo alcance tensorial (como en la fase spin-nematic) no puede mantenerse.

En la Fig.3 se muestran las regiones de estabilidad de las distintas fases para spin S general. Las áreas rayadas son regiones de meta-estabilidad del orden de Néel y colineal (el orden colineal corresponde a spines ordenados ferromagnéticamente en una dirección de la red cuadrada y antiferromagnéticamente en la otra).

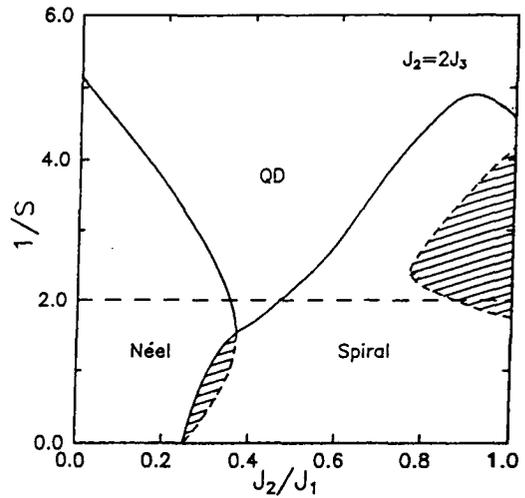


Fig.3. Diagrama de fases mostrando líneas de estabilidad (continuas) y metaestabilidad (trazos). Las regiones rayadas son zonas de metaestabilidad de los ordenes de Néel y colineal.

Para $S \geq 1$ el orden espiral va continuamente a un orden ferromagnético. Para $S = 1/2$, como fuera comentado arriba, aparece una ventana entre las dos fases donde el estado fundamental es desordenado.

AGRADECIMIENTOS

H.A.C. agradece a la Fundación Antorchas por el otorgamiento de un subsidio para la reinstalación de becarios externos.

REFERENCIAS

- 1- S. Chakravarty, B.I.Halperin, and D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988); Phys. Rev. B **5**, 2344 (1989).
- 2- P.W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- 3- S. Doniach, M.Inui, V. Kalmeyer, and M. Gabay, Europhys. Lett. **6**, 663 (1988), M.Inui, S. Doniach, and M. Gabay, Phys. Rev. B **38**, 6631 (1988).
- 4- P. Chandra, P. Coleman and A.I. Larkin, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 7933 (1990).
- 5- P. Chandra, P. Coleman, Phys. Rev. Lett. **66**, 100 (1991).
- 6- J.E. Hirsch and Sanyee Tang, Phys. Rev. B **39**, 2850 (1989).
- 7- A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and J. Riera, Phys. Rev. B **42**, 6283 (1990).