

Cálculo de propiedades magnéticas en antiferromagnetos débilmente dopados

A.T. Foussats, C.E. Repetto* y O.P. Zandron

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura e Instituto de Física de Rosario
Bv. 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina
repetto@ifir.edu.ar

A partir del formalismo Lagrangiano para el modelo t-J previamente desarrollado, se evalúan propiedades magnéticas renormalizadas en antiferromagnetos débilmente dopados, debido a la interacción partícula-agujero con las ondas de spin. Para valores pequeños de dopaje se calculan las autoenergías. Tomando una forma aproximada para la función espectral de la partícula se analizan las regiones coherente (cuasi partícula) e incoherente (zona continua) con la finalidad de evaluar el ablandamiento y el amortiguamiento en la frecuencia del magnón antiferromagnético.

From the Lagrangian formalism for the t-J model previously developed, the renormalized magnetic properties in weakly doped antiferromagnets due to the interaction of particle-hole with the spin wave can be evaluated. For small concentration of holes the self-energies are computed. Taking an approximate form for the particle spectral function the quasiparticle peak and the incoherent continuum region are analyzed in order to evaluate the softening and damping of the antiferromagnetic magnon frequency.

11.10.Ef and 75.10.Jm

I. INTRODUCCIÓN

El interés reciente en el estudio de las propiedades magnéticas de antiferromagnetos débilmente dopados radica fundamentalmente en su conexión con fenómenos de superconductividad de alta temperatura. Entre otros fenómenos, los experimentos muestran importantes ablandamiento y amortiguamiento en las excitaciones de spin, como así también un significativo aumento en la susceptibilidad de spin. El dopaje introduce agujeros y a partir de algún modelo es posible estudiar la interacción agujero - ondas de spin. Este estudio se realizó en detalle en una red de dos dimensiones. El dopaje tiende a destruir el orden antiferromagnético debido al movimiento de los agujeros.

El modelo teórico más utilizado es el modelo Hamiltoniano t-J^{1-3,8}. En la literatura corriente, se estudia este modelo en la representación fermión esclavo para el caso de una matriz antiferromagnética. La dinámica de los agujeros se trata en el marco de la aproximación de Born autoconsistente. Eso permite resolver en forma autoconsistente la ecuación para la autoenergía del agujero. Con ello, utilizando la ecuación de Dyson, se viste el propagador $G(k, \nu)$.

En el presente trabajo se utiliza nuestro formalismo Lagrangiano para el modelo t-J previamente desarrollado⁴⁻⁷. Utilizando la diagramática del modelo, se calculan valores de autoenergía y se estudian algunas propiedades físicas.

II. FORMALISMO Y DIAGRAMÁTICA PARA CONFIGURACIÓN ANTIFERROMAGNÉTICA

Asumimos un régimen con bajo dopaje, donde el sistema es un aislador antiferromagnético. Bajo esta

condición, se puede asumir que la densidad de agujeros ρ es pequeña y constante, quedando determinada por consistencia para un dado valor del potencial químico μ . Como es usual, en la configuración antiferromagnética se realiza la siguiente rotación de spin en la segunda subred⁸:

$$S_{j1} \rightarrow S_{j1}, S_{j2} \rightarrow -S_{j2}, S_{j3} \rightarrow -S_{j3} \text{ and } \Psi_{j\sigma} \rightarrow \Psi_{j\bar{\sigma}}, \quad (2.1)$$

donde $\sigma \rightarrow \bar{\sigma}$ implica $\pm \rightarrow \mp$.

A partir de ahora, se supone que el sistema fluctúa alrededor de un estado antiferromagnético ($J_{ij} < 0$). En tales condiciones, las componentes del campo vectorial real \mathbf{S} son las variables de spin definidas de la siguiente forma:

$$\mathbf{S} = (0, 0, s') + (\widetilde{S}_1, \widetilde{S}_2, \widetilde{S}_3) \quad (2.2)$$

Siguiendo Ref.7, el Lagrangiano efectivo euclideanizado, en término de las fluctuaciones de campo y de las dos componentes de campo fermiónico (Ψ_+, Ψ_-), se escribe:

$$\begin{aligned} L_{eff}^E = & \frac{i}{2s} (1 - \rho) \sum_i \frac{S_{i1} \dot{S}_{i2} - S_{i2} \dot{S}_{i1}}{s + s'} \\ & \times \left[1 + \sum_{n=1} (-1)^n \left(\frac{S_{i3}}{s + s'} \right)^n \right] \\ & - \frac{s}{s + s'} \sum_i (\dot{\Psi}_{i-}^* \Psi_{i-} + \dot{\Psi}_{i-} \Psi_{i-}^*) \\ & \times \left[1 + \sum_{n=1} (-1)^n \left(\frac{S_{i3}}{s + s'} \right)^n \right] \\ & - \frac{2s \mu}{s + s'} \sum_i \Psi_{i-}^* \Psi_{i-} \left[1 + \sum_{n=1} (-1)^n \left(\frac{S_{i3}}{s + s'} \right)^n \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{(s+s')} \sum_{i,j} t_{ij} \Psi_{i-} \Psi_{j-}^* [S_{i1} - iS_{i2} + S_{j1} + iS_{j2}] \\
& + \frac{1}{(s+s')} \sum_{i,j} t_{ij} \Psi_{i-} \Psi_{j-}^* [(S_{i1} - iS_{i2} + S_{j1} + iS_{j2}) \\
& \times \left(\sum_{n=1} (-1)^n \left(\frac{S_{i3}}{s+s'} \right)^n \right)] \\
& - \frac{1}{8s^2} J' \sum_{i,I} [S_{i1} S_{(i+I)1} - S_{i2} S_{(i+I)2} - S_{i3} S_{(i+I)3} \\
& + S_{i1}^2 + S_{i2}^2 + S_{i3}^2] - 2s' \sum_i \lambda_i S_{i3} \\
& - \sum_i \lambda_i (S_{i1}^2 + S_{i2}^2 + S_{i3}^2), \tag{2.3}
\end{aligned}$$

donde $J' = J(1 - \rho)^2 < 0$. A partir de este Lagrangiano efectivo se obtienen los propagadores libres de los campos bosónicos y fermiónicos y los vértices.

El propagador del campo bosónico $V^a = (S_1, S_2, S_3, \lambda)$ es una matriz 4×4 . Una vez realizada la transformación de Bogoliubov¹, el propagador libre del magnón antiferromagnético resulta:

$$D_{(0)}^{+-} = (D_{(0)}^{-+})^* = \langle T S^+(\tau) S^-(0) \rangle = -\frac{1}{\omega_q - i\omega_n} \tag{2.4}$$

donde ω_n es la frecuencia de Matsubara y la frecuencia ω_q es

$$\omega_q = \frac{zJ'}{8s} (s+s')(1+\rho) \sqrt{1-\gamma_q^2}. \tag{2.5}$$

En esta ecuación, z es el número de primeros vecinos y $z\gamma_q = \sum_I \exp(iq \cdot I)$, donde I es el vector de la red. El resultado dado en ecuación (2.4) coincide con el de Ref.3.

Las demás componentes del propagador libre distintas de cero resultan

$$D_{(0)}^{34} = D_{(0)}^{43} = -\frac{1}{2s'} \tag{2.6a}$$

$$D_{(0)}^{44} = \frac{J'z}{32(s+s')^2} (1-\gamma_q) \tag{2.6b}$$

Para el campo fermiónico se obtiene la siguiente funcional no propagante:

$$G_0 = \frac{s+s'}{2s} \frac{1}{i\nu_n - \mu}, \tag{2.7}$$

que es sólo función de la frecuencia de Matsubara ν_n .

Los vértices resultan de las siguientes interacciones entre las componentes de campos:

a) Vértice de tres patas bosónicas

$$\begin{aligned}
L_{int}^{3B} &= \frac{1}{3!} F_{abc}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) V^a(\omega_1, q_1) \\
&\times V^b(\omega_2, q_2) V^c(\omega_3, q_3), \tag{2.8}
\end{aligned}$$

b) Vértice de cuatro patas bosónicas

$$\begin{aligned}
L_{int}^{4B} &= \frac{1}{4!} F_{abcd}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) V^a(\omega_1, q_1) V^b(\omega_2, q_2) \\
&\times V^c(\omega_3, q_3) V^d(\omega_4, q_4), \tag{2.9}
\end{aligned}$$

c) Vértice de tres patas (dos fermiones y un bosón)

$$L_{int}^{2F-1B} = \Psi_-^*(\nu, k) K_a V^a \Psi_-(\nu', k'), \tag{2.10}$$

d) Vértice de cuatro patas (dos fermiones y dos bosones)

$$L_{int}^{2F-2B} = \frac{1}{2!} \Psi_-^*(\nu', k') K_{ab} V^a V^b \Psi_-(\nu, k), \tag{2.11}$$

La manera usual de resolver la propagación de partícula-agujero es mediante la ecuación de Dyson:

$$G(k, \nu_n) = [G_0^{-1}(\nu_n) - \Sigma(k, \nu_n)]^{-1}, \tag{2.12}$$

El propagador vestido (2.12) se puede evaluar en el marco de la aproximación de Born autoconsistente. Utilizando técnicas estándar, se obtiene la siguiente expresión para la autoenergía del fermión a temperatura cero:

$$\begin{aligned}
\Sigma(k, i\nu_n) &= \frac{(1+\rho)}{2N_s} t^2 z^2 \\
&\times \sum_q \frac{(u_q \gamma_{k+q} + v_q \gamma_k)^2}{i\nu_n - \omega_q - \mu - \Sigma(k+q, i\nu_n - \omega_q)} \tag{2.13}
\end{aligned}$$

donde

$$u_q = \left(\frac{1 + \sqrt{(1-\gamma_q^2)}}{2\sqrt{(1-\gamma_q^2)}} \right)^{1/2}, \tag{2.14a}$$

$$v_q = -(\text{sign } \gamma_q) \left(\frac{1 - \sqrt{(1-\gamma_q^2)}}{2\sqrt{(1-\gamma_q^2)}} \right)^{1/2}, \tag{2.14b}$$

y $\epsilon_k = -z t \gamma_k = -t \sum_I \exp(iq \cdot I)$.

Una vez evaluada numéricamente la función autoenergía (2.13), el propagador vestido $G(k, \nu)$ queda bien definido. De esta manera es posible computar numéricamente la función espectral $B(k, \nu) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(k, \nu + i\epsilon)$.

III. AUTOENERGÍA DEL MAGNÓN ANTIFERROMAGNÉTICO RENORMALIZADO

El propagador vestido queda definido a partir de la ecuación de Dyson:

$$D^{ab}(q, \omega_n) = [D_{(0)ab}^{-1}(q, \omega_n) - \Pi_{ab}(q, \omega_n)]^{-1}. \tag{3.1}$$

La autoenergía total Π_{ab} del campo bosónico se obtiene computando las contribuciones correspondientes

a los cinco diagramas a un loop que resultan de los vértices (2.8-2.11).

La contribución a la autoenergía de los vértices puramente bosónicos provienen de los tres diagramas

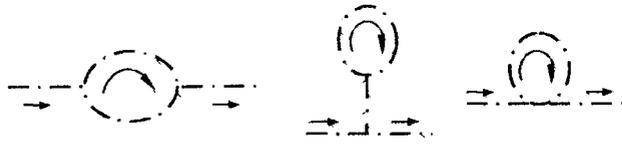


FIG. 1.

La contribución a la autoenergía de los vértices fermión-bosón provienen de los dos diagramas



FIG. 2.

donde la línea llena representa el propagador fermiónico y la línea de punto- raya representa el propagador bosónico.

En una configuración antiferromagnética, el movimiento de los agujeros interaccionan fuertemente con las ondas de spin. Por lo tanto, en lo que sigue tendremos en cuenta solamente contribuciones de orden t^2 que son las que corresponden a las interacciones de las componentes transversales de las ondas de spin con los agujeros. Hacemos notar que las componentes longitudinales Π_{+3} Π_{-3} que aparecen en los diagramas de Fig.2 son de orden t , por lo tanto son correcciones a las contribuciones dada por los modos transversales. Vemos así que el modelo da cuenta de los magnones transversales y longitudinales. En la contribución bosónica pura también hay contribuciones transversales, pero no son de orden t^2 y su efecto es pequeño comparado con los términos en t^2 .

Consecuentemente, se obtiene como resultado que la contribución transversal a la autoenergía de orden t^2 es exactamente la obtenida a partir del modelo Hamiltoniano con el método de la función de Green (ver Ref. 3). Este resultado representa un chequeo crucial para nuestro modelo Lagrangiano.

Los últimos dos diagramas contienen propagadores vestidos G de partícula-agujero, que como dijimos, deben ser calculados numéricamente.

En el método de aproximación de Born autoconsistente, podemos suponer que la función espectral para los agujeros se compone de una parte coherente correspondiente al pico de cuasipartícula y un continuo incoherente, tal que la función espectral se escribe:

$$B(k, \nu) = [B_{coh}(k, \nu) + B_{inc}(k, \nu)] \mathcal{F}^\pm(k) \theta(\pm \nu) \quad (3.2)$$

$$\text{con } \mathcal{F}_-(k) = \sum_{i=1}^4 \theta(k_F - |k - k_i|), \quad \mathcal{F}_+(k) = 1 - \mathcal{F}_-(k).$$

Es posible tomar para la función espectral de los cuasi-agujeros la siguiente forma aproximada:

$$B_{coh}(k, \nu) = Z_k \delta(\nu - \varepsilon_k), \quad (3.3a)$$

$$B_{inc}(k, \nu) = h \theta(|\nu| - zJ/2) \theta(2zt + zJ/2 - |\nu|). \quad (3.3b)$$

donde Z_k es la intensidad del estado de cuasipartícula (factor de renormalización); $\varepsilon_k = \varepsilon_{min} + (k - k_i)^2 / 2m$, donde $k_i = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ son los momentos correspondientes a la mínima energía, y m es la masa efectiva.

La contribución a la autoenergía $\Pi_{ab}(q, \omega)$ del magnón antiferromagnético de orden t^2 se evalúa en forma directa. La frecuencia renormalizada ω_q puede así ser evaluada y está dada por los polos del propagador vestido $D(q, \omega)$, es decir por la condición

$$[(D_0^{+-})^{-1} - \Pi^{+-}] [(D_0^{+})^{-1} - \Pi^{+}] - \Pi^{++} \Pi^{--} = 0. \quad (3.4)$$

Analizando la región donde $\text{Im}\Pi(q, \omega) = 0$ permite obtener el valor del ablandamiento en la frecuencia del magnón antiferromagnético cuya expresión renormalizada resulta

$$\omega_q^R = \omega_q + \text{Re}\Pi^{+-} = \omega_q [1 - r(q)]; \quad (3.5)$$

donde para $r(q)$ se obtiene el mismo valor que el dado en Ref. [3].

Análogamente, la región donde $\text{Im}\Pi(q, \omega) \neq 0$ permite evaluar el amortiguamiento, obteniéndose la inversa de la vida media dada por

$$\Gamma_q = -2\text{Im}\Pi^{+-}(q, \omega_q) \quad (3.6)$$

Los resultados obtenidos en el caso de configuración antiferromagnética constituyen otra prueba de la validez de nuestro modelo Lagrangiano.

- ¹ G. Martinez and P.Horsch, Phys. Rev **B44** 1991 317.
- ² Jun-ichi Igarashy and P. Fulde, Phys. Rev **B45** 1992 12357.
- ³ I.R. Pimentel, F. Carvalho Días and L.M. Martelo, Phys. Rev **B60** 1999 12329.
- ⁴ A. Foussats, A. Greco and O. S. Zandron, Annals of Physics (NY) **275**(1999), 238.
- ⁵ A. Foussats, A. Greco and O. S. Zandron, Annals of Physics (NY) **279**(2000), 263.
- ⁶ A. Foussats, A. Greco, C. Repetto, O. P. Zandron and O. S. Zandron, Journal of Physics **A33** (2000) 5849.
- ⁷ A. Foussats, C. Repetto, O. P. Zandron and O. S. Zandron, Int. Journal of Theoretical Physics **41** (2002) 1053.
- ⁸ A. Izyumov, Physics - Uspekhi **40** (1997), 445.