

Orden de Néel en el modelo de Heisenberg sobre la red triangular

Luca Capriotti¹, Adolfo E. Trumper² y Sandro Sorella¹

¹ *Istituto Nazionale di Fisica della Materia and International School for Advanced Studies, Via Beirut 4, I-34013 Trieste, Italy*

² *Instituto de Física Rosario (CONICET) y Universidad Nacional de Rosario, Bv. 27 de febrero 210 bis, (2000) Rosario, Argentina. trumper@ifir.ifir.edu.ar*

Se estudió el modelo de Heisenberg sobre la red triangular mediante distintas técnicas de Monte Carlo Cuántico (hasta 144 sitios), y diagonalización exacta (hasta 36 sitios). Estudiando el gap de excitaciones como función del tamaño del sistema hemos obtenido una evidencia robusta de que el espectro es gapless, confirmando la existencia de orden de Néel de largo alcance. Nuestra mejor estimación es que en el límite termodinámico el parámetro de orden $m^\dagger = 0.41 \pm 0.02$ se reduce un 59% de su valor clásico y la energía del estado fundamental por sitio es $e_0 = -0.5458 \pm 0.0001$ en unidades de la constante de intercambio. Además, hemos identificado correlaciones de corto alcance cruciales para la correcta descripción del estado fundamental.

We have studied the Heisenberg model on the triangular lattice using several Quantum Monte Carlo (QMC) techniques (up to 144 sites), and exact diagonalization (ED) (up to 36 sites). By studying the spin gap as a function of the system size we have obtained a robust evidence for a gapless spectrum, confirming the existence of long range Néel order. Our best estimate is that in the thermodynamic limit the order parameter $m^\dagger = 0.41 \pm 0.02$ is reduced by about 59% from its classical value and the ground state energy per site is $e_0 = -0.5458 \pm 0.0001$ in unit of the exchange coupling. We have identified the important ground state correlations at short distance.

El viejo debate, iniciado por Anderson y Fazekas¹, sobre la naturaleza del estado fundamental del modelo de Heisenberg

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (1)$$

sobre la red triangular y para $S = 1/2$ no ha sido concluido todavía. Básicamente el punto de discusión es si el efecto combinado de la frustración y las fluctuaciones cuánticas favorece orden de Néel de largo alcance o un estado desordenado tipo líquido de espines. De hecho, después de un largo período de intensos estudios numéricos²⁻⁸, y analíticos⁹⁻¹³ no han habido conclusiones definitivas. Desde el punto de vista numérico, los estudios de diagonalización exacta, los cuales presentan ciertas limitaciones por el tamaño de los sistemas considerados, proveen una importante característica⁵: el espectro de niveles de más baja energía se ordena a medida que el espín total se incrementa –una reminiscencia del teorema de Lieb-Mattis¹⁴ para redes bipartitas–, y son consistentes con la simetría del parámetro de orden clásico⁵. Sin embargo, otros estudios de escaleo del parámetro de orden en redes finitas indican una situación cercana a la crítica o completamente desordenada⁷.

Con técnicas como Monte Carlo Variacional (MCV) las investigaciones numéricas pueden ser extendidas a sistemas bastante grandes, al precio de hacer algunas aproximaciones, las cuales quedan determinadas por la calidad de la función de onda variacional (FOV). En la literatura muchas FOV han sido propuestas^{2,3,8} y las mejores estimaciones de la energía del estado fundamental han sido obtenidas con las del tipo orden de largo alcance de Néel. En particular, Huse y Elser³

introdujeron importantes correcciones cuánticas al estado de Néel clásico por medio de factores de correlación de dos y tres espines en la FOV:

$$|\psi_V\rangle = \sum_x \Omega(x) \exp\left(\frac{\gamma}{2} \sum_{i,j} v(i-j) S_i^z S_j^z\right) |x\rangle, \quad (2)$$

donde $|x\rangle$ es una configuración específica de espín asignando el valor de S_i^z para cada sitio y

$$\Omega(x) = T(x) \exp\left[i \frac{2\pi}{3} \left(\sum_{i \in B} S_i^z - \sum_{i \in C} S_i^z \right)\right] \quad (3)$$

representa las tres subredes del estado de Néel clásico en el plano xy multiplicado por un término de tres espines

$$T(x) = \exp\left(i \beta \sum_{\langle i,j,k \rangle} \gamma_{ijk} S_i^z S_j^z S_k^z\right), \quad (4)$$

definido por los coeficientes $\gamma_{ijk} = 0, \pm 1$, elegidos apropiadamente de manera tal que preserven las simetrías del estado de Néel clásico, y por un factor global β como esta discutido en Ref.³. Como el Hamiltoniano es real y conmuta con la componente z del espín total, \hat{S}_{tot}^z , se obtiene una mejor FOV en redes finitas si se toma la parte real de Ec. (2) proyectada en el subespacio $S_{\text{tot}}^z = 0$. Además, sobre la base de la consistencia con resultados de ondas de espín y de un cuidadoso tratamiento de los modos singulares que provienen de asumir la simetría $SU(2)$ rota^{15,16}, es también posible obtener explícitamente la transformada de Fourier v_q del potencial de Jastrow de dos

cuerpos $v(r)$. Este análisis, para el caso más general del Hamiltoniano XXZ con una constante de intercambio relativa $\alpha = J_z/J$, resulta

$$v_q = 1 - \sqrt{\frac{1 + 2\alpha\gamma_q}{1 - \gamma_q}} \quad (5)$$

para $q \neq 0$ y cero para el caso contrario, donde $\gamma_q = z^{-1} \sum_d \cos(q \cdot d)$, $z = 6$ es el número de coordinación, los vectores d son los desplazamientos a primeros vecinos y los momentos q son los permitidos en una red finita de N sitios.

A diferencia del antiferromagneto sobre la red cuadrada—donde de acuerdo al teorema de Marshall la parte clásica de la FOV determina exactamente las fases del estado fundamental en la base elegida— para el caso triangular las fases exactas son desconocidas y la parte clásica no es suficiente para fijarlas correctamente. Si bien las correlaciones de tres cuerpos de Ec. (4) no dan la respuesta exacta, estas permiten ajustar los signos de la FOV en forma no trivial y sin cambiar el orden de Néel clásico. Para mostrar esto, es útil definir el signo promedio de la FOV relativo al estado fundamental exacto normalizado $|\psi_0\rangle$ como:

$$\langle s \rangle = \sum_x |\psi_0(x)|^2 \text{sgn}(\psi_V(x)\psi_0(x)), \quad (6)$$

con $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$.

Hemos comparado el cálculo variacional con el estado fundamental exacto obtenido por diagonalización exacta en un sistema de $N = 36$. Por completitud hemos considerado desde el caso XY ($\alpha = 0$) hasta el caso completamente isotrópico ($\alpha = 1$). Como se muestra en Fig. 1, la introducción de correlaciones de tres cuerpos de Ec. (4), si bien no da la respuesta exacta, mejora tanto el solapamiento de la FOV con el verdadero estado fundamental como la precisión de la energía del estado fundamental variacional. En particular, el signo promedio $\langle s \rangle$ mejora notablemente con los términos de tres cuerpos, sobre todo en el caso isotrópico $\alpha \rightarrow 1$. Esto es crucial cuando la FOV es usada para realizar la *importancia de muestreo* en la técnica de Green Funcion Monte Carlo (GFMC) modificada^{17,18} para controlar el famoso *problema de signo*, el cual limita las aplicaciones de métodos estocásticos para el estudio de sistemas de espines frustrados así como de modelos fermiónicos.

Recientemente se implementó, dentro de un esquema variacional, un GFMC con nodos fijos (FN)¹⁷ capaz de aliviar las inestabilidades provenientes del problema de signo mencionado arriba. Este método mejora notablemente el MC variacional convencional. Sin embargo, como se muestra en Fig. 2 y también en Ref.¹⁸, para sistemas de espines esta técnica no representa un avance representativo comparado con MCV, conduciendo a resultados que dependen fuertemente de las cualidades de la FOV.

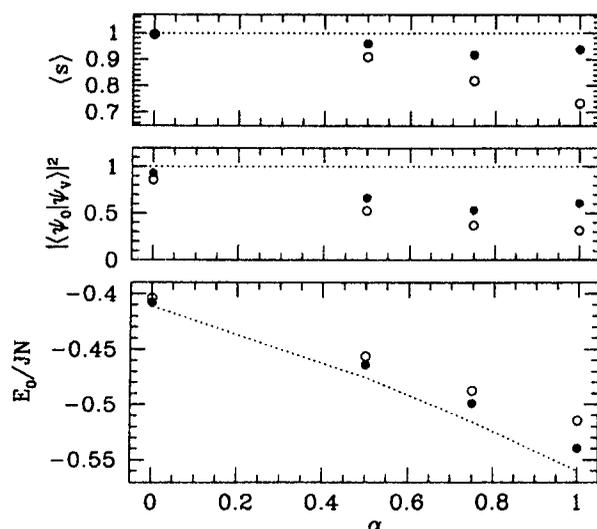


FIG. 1. Signo promedio, solapamiento al cuadrado y energía del EF por sitio obtenida para $N = 36$ usando FOV de Ec. (2), con (círculos llenos) y sin (círculos vacíos) términos de tres espines de Ec. (4), como función de la anisotropía α . Los cálculos fueron realizados sumando exactamente sobre todas las configuraciones y las líneas punteadas conectan resultados exactos.

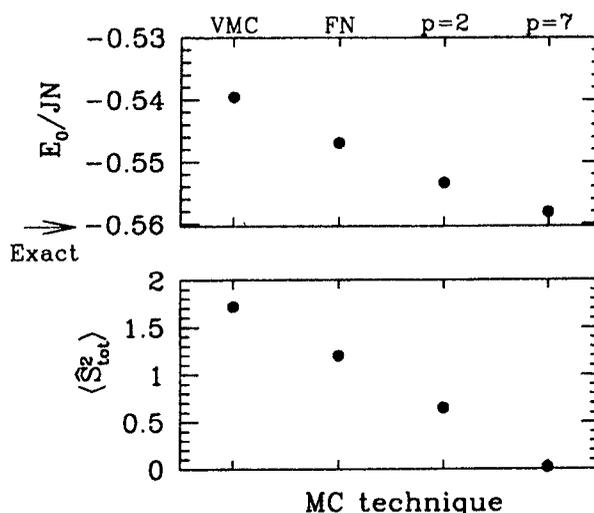


FIG. 2. Estimaciones variacionales (MCV) y medias mixtas²⁰ (NF, RE) de la energía del EF por sitio E_0/JN y del espín total al cuadrado S_{tot}^2 para $N = 36$. Los datos de RE se obtuvieron usando las funciones de correlación generadas por \hat{H} ($p = 2$), y \hat{H}^2 ($p = 7$).

Para superar esta dificultad hemos utilizado una técnica recientemente desarrollada: GFMC con Reconfiguración Estocástica (RE)¹⁸, la cual permite relajar la aproximación de Nodos Fijos de manera controlada pero aproximada, dando, como se muestra en Fig. 2, resultados mucho más precisos para las energías. En el límite apropiado¹⁸ de un número grande de walkers y alta frecuencia de RE, el bias residual introducido por la RE depende solamente del número de operadores p utilizados para guiar el proceso de Markov del GFMC permitiendo simulaciones sin in-

estabilidades numéricas. En principio la respuesta exacta puede obtenerse, dentro del error estadístico, con la condición de que p iguale la enorme dimensión del espacio de Hilbert. En la práctica solo es necesario trabajar con un número pequeño siendo crucial la selección de los operadores físicamente relevantes. Como puede esperarse fácilmente, las funciones de correlación de corto alcance $\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z$ y $(\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+)$ contenidas en el Hamiltoniano ($p = 2$) mejoran la energía del estado fundamental respecto de Nodos Fijos cuando se introducen en el proceso de reconfiguración estocástica. Como está discutido en Ref.¹⁹, y para ser sistemáticos, hemos incluido también en la RE las correlaciones de corto alcance generadas por \hat{H}^2 ($p = 7$), promediadas sobre todas las simetrías espaciales que conmutan con el Hamiltoniano. Estas correlaciones locales (ver Fig.2) son particularmente importantes para obtener estimaciones confiables y más precisas no solo de la energía del estado fundamental sino también de la media mixta²⁰ del espín total \hat{S}_{tot}^2 . En particular es interesante notar que, partiendo de una FOV sin espín total definido, la invariancia rotacional de espín del estado fundamental para redes finitas se recupera sistemáticamente por medio de la técnica de RE.

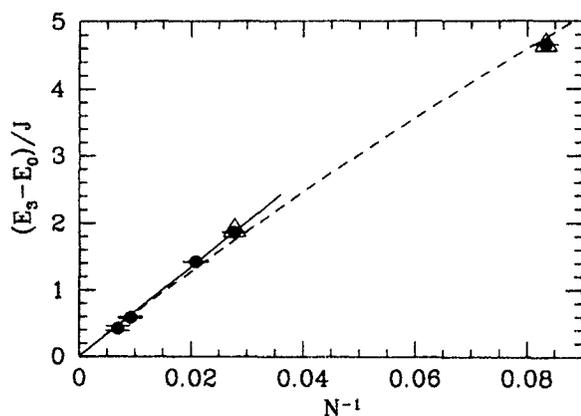


FIG. 3. Escalado del gap de espín de la excitación $S = 3$ obtenida con la técnica de RE ($p = 7$) (círculos llenos). Los triángulos vacíos son los resultados de DE, la línea de trazos es la predicción de ondas de espín y la línea llena son los mínimos cuadrados de los datos de RE para $N \geq 36$.

Habiendo obtenido estimaciones de la energía, al menos un orden de magnitud más precisas que nuestros resultados variacionales, parece posible obtener características físicas que no están presentes a nivel variacional. Usando la técnica de RE, estudiamos el escalado del gap de excitaciones de espín $S = 3$, perteneciente a los estados de baja energía E_S y espín S . En el caso de un antiferromaneto cuántico ordenado se espera un comportamiento del tipo $E_S - E_0 \propto S(S+1)/N^5$. Como se muestra en Fig. 3, para los tamaños de red en los que DE es posible, el gap de espín estimado con la técnica de RE es cercanamente exacto. La importancia de extender las investigaciones numéricas a sistemas suficientemente grandes para obtener extrapolaciones más confiables se evidencia en la misma figura en la que los resultados exactos de $N = 12$ y $N = 36$ extrapolan linealmente a un valor grande y finito. Este comportamiento es,

sin lugar a dudas, un efecto de tamaño finito ya que es corregido por los resultados de RE para $N \geq 48$, confirmando un espectro de excitaciones tipo gapless.

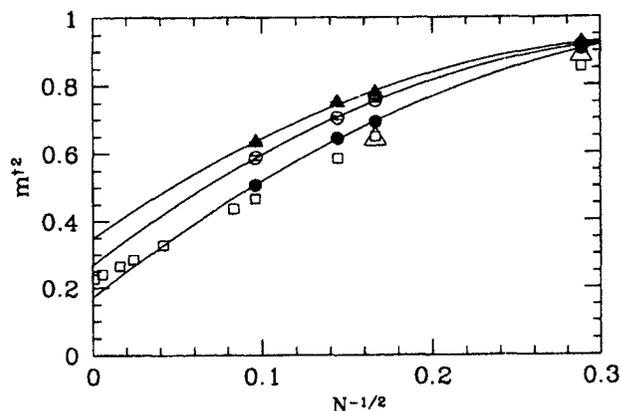


FIG. 4. Escalado del parámetro de orden: MCV (triángulos llenos), NF (círculos vacíos), RE (círculos llenos), datos exactos (triángulos vacíos) y OE para tamaños finitos (cuadrados vacíos). Las líneas corresponden a interpolaciones cuadráticas.

Consistentemente con el espectro gapless, nuestras mejores estimaciones del parámetro de orden ($m^{1/2}$)¹⁹, extrapolan en el límite termodinámico a un valor finito aunque bastante por debajo de los resultados de ondas de espín (OE)(Fig. 4). Nuestros resultados dan una evidencia robusta de que *el estado fundamental del presente modelo tiene orden de Néel de largo alcance* descartando la existencia un líquido de espines. Estas predicciones podrían ser verificadas experimentalmente en la interfase K/Si(111):B²¹ la cual se ha constituido recientemente en el primer caso real de un antiferromagneto triangular.

Los autores agradecen a C. Lhuillier, G. Santoro, A. Parola, M. Calandra, F. Becca y M. Capone por las provechosas discusiones Este trabajo fue parcialmente financiado por INFM (PRA HTSC y PRA LOTUS), CINECA grant y CONICET (A.E.T.).

- ¹ P. Fazekas and P. W. Anderson, *Philos. Mag.* **30**, 423 (1974).
- ² V. Kalmeyer and R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2095 (1987).
- ³ D.A. Huse and V. Elser, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2531 (1988).
- ⁴ R. Singh and D. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1766 (1992).
- ⁵ B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2590 (1992); B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, L. Pierre, *Phys. Rev. B* **50**, 10048 (1994).
- ⁶ N. Elstner, R. R. P. Singh, and A. P. Young, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1629 (1993).
- ⁷ P. W. Leung and K. J. Runge, *Phys. Rev. B* **47**, 5861 (1993).
- ⁸ P. Sindzingre, P. Lecheminant and C. Lhuillier, *Phys. Rev. B* **50**, 3108 (1994).

- ⁹ Th. Jolicoeur and J. C. Le Guillou, Phys. Rev. B **40**, 2727 (1989).
- ¹⁰ S. J. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 983 (1992).
- ¹¹ A. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 8891 (1994).
- ¹² L. O. Manuel, A. E. Trumper and H. A. Ceccatto, Phys. Rev. B **57**, 8348 (1998).
- ¹³ P. Azaria, B. Delamotte and D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **70**, 2483 (1993).
- ¹⁴ E. Lieb and D. Mattis, J. Math. Phys. **3**, 749 (1962).
- ¹⁵ F. Franjic and S. Sorella, Prog. Theor. Phys. **97**, 399 (1997).
- ¹⁶ Q. F. Zhong and S. Sorella, Europhys. Lett. **21**, 629 (1993).
- ¹⁷ D. F. B. ten Haaf *et al.*, Phys. Rev. B **51**, 13039 (1995).
- ¹⁸ S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **80**, 4558 (1998); S. Sorella and L. Capriotti, to be published.
- ¹⁹ L. Capriotti, A. E. Trumper and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **82**, 3899 (1999).
- ²⁰ Recordamos que la media mixta de un operador \hat{O} está definida como $\langle \psi_V | \hat{O} | \psi_0 \rangle / \langle \psi_V | \psi_0 \rangle$, donde $|\psi_V\rangle$ es la función de onda guía para la importancia de muestreo.
- ²¹ H. H. Weitering, X. Shi, P. D. Johnson, J. Chen, N. J. DiNardo and K. Kempa, Phys. Rev. Lett. **78**, 1331 (1997).

CEILAP
 CITEFA - CONICET
 ZUFRIATEGUI Y VARELA
 1603 - VILLA MARTELLI
 REPUBLICA ARGENTINA