

К ВОПРОСУ О ДАЛЬНЕМ ПОРЯДКЕ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА С ФРУСТРАЦИЕЙ

А. Ф. Барабанов, О. А. Старых

Для двумерной модели Гейзенберга с фрустрацией в области параметров $\alpha = J_2/J_1 \approx 0,6$ найдены указания на возможность существования состояния типа спиновой жидкости.

Известно, что спиновая подсистема диэлектрического состояния плоскости CuO_2 ВТСП хорошо описывается $2D$ -моделью Гейзенберга на квадратной решетке с антиферромагнитным (АФМ) взаимодействием ближайших $S = 1/2$ спинов¹. Существенный успех в изучении модели достигнут в работах²⁻⁵, где показано существование экспоненциально малой по T щели в спектре спиновых возбуждений и возникновение дальнего порядка при $T = 0$. Из экспериментов известно, что при допировании слои плоскости CuO_2 теряют дальний порядок¹. Принято считать, что допирование плоскости дырками приводит к фрустрации, то есть к взаимодействию между дальними спинами⁶. Поэтому в последнее время $2D$ модель активно изучается с точки зрения возможности существования спин-жидкостного состояния (СЖС)⁷. Мы приведем результаты рассмотрения модели с фрустрацией в пределе $T \rightarrow 0$, которые указывают на возможность реализации СЖС.

Гамильтониан модели имеет вид

$$H = 1/2J_1 \sum_{n,g} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+g} + 1/2J_2 \sum_{n,d} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+d}, \quad (1)$$

где $J_1, J_2 > 0$ описывают взаимодействие между первыми (векторы \mathbf{g}) и вторыми (векторы $\mathbf{d} = \pm \mathbf{g}_x \pm \mathbf{g}_y$) ближайшими соседями на квадратной решетке.

Для гамильтониана (1) в классическом пределе ($S \gg 1$) известно, что при $\alpha = J_2/J_1 < 1/2$ (случай I) реализуется двухподрешеточное состояние, при $\alpha > 1/2$ – "stripe" – состояние (случай II)⁸. В квантовом пределе ($S = 1/2$) этим случаям отвечают различные вакуумные состояния: случай I – $S_n^z = 1/2 (-1)^n$, случай II – $S_n^z = 1/2 (-1)^n x$. Соответственно

этим вакуумным состояниям представим спиновые операторы через бозонные, используя АФМ преобразование Дайсона – Малеева ⁵

В случае I гамильтониан приобретает вид

$$H = H_1 + H_2^a + H_2^b$$

$$H_1 = -\frac{1}{2}J_1N + \frac{1}{2}J_1 \sum_{\substack{\langle nm \rangle \\ \dot{m} = n + g, n \in A, m \in B}} \{ a_n^+ a_n + b_m^+ b_m - a_n^+ b_m^+ - a_n b_m + a_n^+ (b_m^+ - a_n)^2 b_m \} \quad (2)$$

$$H_2^a = \frac{1}{4}J_2N - \frac{1}{2}J_2 \sum_{\langle n_1 n_2 \rangle} \{ a_{n_1}^+ a_{n_1} + a_{n_2}^+ a_{n_2} - a_{n_1}^+ a_{n_2} - a_{n_2}^+ a_{n_1} + a_{n_1}^+ a_{n_2}^+ (a_{n_1} - a_{n_2})^2 \}, \\ n_2 = n_1 + d; n_1, n_2 \in A.$$

Здесь H_2^b , описывающий взаимодействие спинов на подрешетке B , имеет вид аналогичный H_2^a .

Как и в ⁵ будем рассматривать H (2) в приближении среднего поля с дополнительным условием $\langle S_n^z \rangle = 0$, чтобы удовлетворить теореме Мермена–Вагнера ⁹ при $T \neq 0$. Введем следующие средние

$$Q = \langle a_n^+ b_{n+g}^+ \rangle = \langle a_n b_{n+g} \rangle; \quad \Delta = \langle a_n^+ a_{n+d} \rangle; \quad \langle a_n^+ a_n \rangle = \langle b_m^+ b_m \rangle = \frac{1}{2} \quad (3)$$

Последнее равенство эквивалентно требованию $\langle S_n^z \rangle = 0$ и учитывается путем введения "химического потенциала" λ . После выделения средних (3) и перехода в импульсное представление гамильтониан (2) легко диагонализуется стандартным спин-волновым $u-v$ -преобразованием. В результате спектр возбуждений ω_k , самосогласованные уравнения (3) и энергия основного состояния E_0^I на узел имеют вид

$$\omega_k = [\epsilon_k^2 - (4QJ_1 \gamma_{gk})^2]^{1/2}, \quad \epsilon_k = \lambda + 4J_1 Q - 4J_2 \Delta (1 - \gamma_{dk}) \quad (4)$$

$$\gamma_{gk} = \frac{1}{2} (\cos k_x g + \cos k_y g), \quad \gamma_{dk} = \cos k_x g \cos k_y g; \quad E_0^I = -2(J_1 Q^2 - J_2 \Delta^2)$$

$$Q = 2N^{-1} \sum_k 4Q \gamma_{gk}^2 \omega_k^{-1} (v_k + \frac{1}{2}); \quad \Delta = 2N^{-1} \sum_k \epsilon_k \gamma_{dk} \omega_k^{-1} (v_k + \frac{1}{2}) \quad (5)$$

$$2N^{-1} \sum_k \{ \epsilon_k \omega_k^{-1} (v_k + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2} \} = \frac{1}{2}$$

Здесь \sum_k означает суммирование по магнитной зоне Бриллюэна, $v_k = v(\omega_k)$ — функция Бозе, $g = |\mathbf{g}|$ — постоянная решетки.

Также, как в ²⁻⁵ система (5) имеет решение с экспоненциально малой щелью $\lambda = \exp(-A/T)$, где A — константа при $T \rightarrow 0$. Конечное значение $A(T=0)$ интерпретируется аналогично бозе-конденсации возбуждений с $k=0$ ^{3, 4} и приводит к возникновению дальнего порядка при $T=0$. В нашем случае имеем

$$\langle S_n S_{n+l} \rangle = (-1)^{|l|} (m_0^I)^2 (0(l^{-1}))^2, \quad m_0^I = \frac{A}{2\pi(J_1 Q - 2J_2 \Delta)}, \quad g \ll l \ll \xi \quad (6)$$

$$\xi = \exp(A/T), \quad T \rightarrow 0,$$

где m_0^I — эффективный спин, ξ — корреляционная длина, A, Q, Δ являются функциями

α . Численное решение системы (5) при $T \rightarrow 0$ дает m_0^I и $E_0^I(\alpha)$ ($J_1 = 1$), приведенные на рис. 1, 2. Оказывается, что при $\alpha \approx 0,61$ А и m_0^I обращаются в ноль, то есть дальний порядок исчезает.

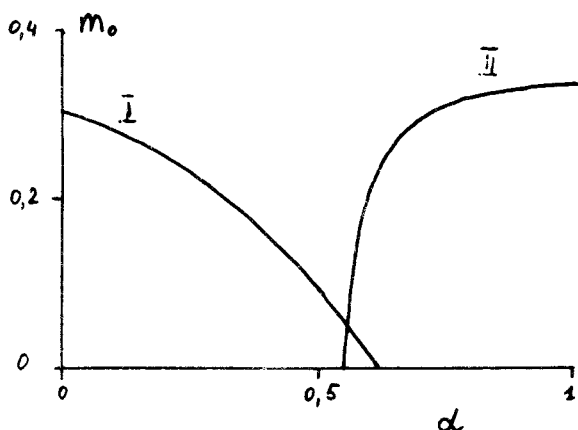


Рис. 1. Зависимость эффективного спина $m_0^{I, II}$ от α

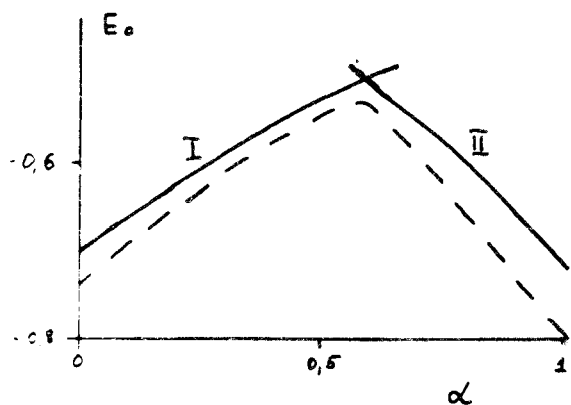


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния двух фаз $E_0^{I, II}$ от α . Пунктиром — $E_0(\alpha)$ из работы ¹¹

В случае II вводятся средние

$$d = \langle a_n^+ b_{n+d}^+ \rangle, \quad \rho_x = \langle a_n^+ b_{n+g_x}^+ \rangle, \quad \rho_y = \langle a_n^+ a_{n+g_y} \rangle, \quad (7)$$

которые определяются структурой вакуумного состояния II: ферромагнитного в направлении OY и АФМ по $O\bar{X}$. Возникающая система самосогласованных уравнений аналогична системе (5) и приводит к

$$\omega_k = [\epsilon_k^2 - (4J_2 q \gamma_{dk} + 2J_1 \rho_x \cos k_x g)^2]^{1/2}, \quad \epsilon_k = \lambda + 4J_2 q + 2J_1 \rho_x - 2J_1 \rho_y (1 - \cos k_y g)$$

$$E_0^{II} = -2J_2 q^2 - J_1 (\rho_x^2 - \rho_y^2). \quad (8)$$

Соответствующие энергия E_0^{II} и эффективный спин m_0^{II} приведены на рис. 1, 2. При $\alpha \approx 0,55$ дальний порядок исчезает со стороны больших α .

Для обеих фаз вид ω_k (4), (8) качественно совпадает со спектром в приближении линейных спиновых волн ¹⁰. Однако для $S = 1/2$ это приближение переоценивает роль квантовых флуктуаций и приводит к отсутствию решения в конечной по α области вблизи $\alpha = 0,5$. В нашем рассмотрении переход из одной фазы в другую происходит в области $\alpha \approx 0,55 - 0,6$. Точки $m_0 \rightarrow 0$ отвечают метастабильным фазам, которые лежат близко к стабильной фазе ($\Delta E \approx 0,01 J_1$). Такое поведение хорошо согласуется с результатом числен-

ной диагонализации кластера 4×4 ¹¹, энергия которого приведена на рис. 1. Отметим, что периодические граничные условия для кластера занижают E_0 относительно точного значения для бесконечной системы, в первую очередь при $\alpha > 0,5$. В обоих пределах $\alpha \rightarrow 0$ ($\alpha \rightarrow \infty$) энергия E_0^I (E_0^{II}) хорошо совпадает с известным значением $-0,667 J_1(J_2)$ ¹². Наличие при $\alpha \approx 0,6$ двух близко лежащих по энергии фаз с малыми значениями m_0 указывают на неустойчивость дальнего порядка относительно образования возможного кирального СЖС⁸. Этому состоянию должна отвечать конечная, независящая от температуры щель в спектре ω_k .

Литература

- 1, Endoh Y. Phys. B, 1989, 156, 839.
2. Arovas D.P., Auerbach A. Phys. Rev. B, 1988, 38, 316; Phys. Rev. Lett., 1988, 61, 617.
3. Hirsch J.E., Tang S. Phys. Rev. B, 1989, 39, 2850.
4. Yoshioka D. J. Phys. Soc. Jap. 1989, 58, 32.
5. Takahashi M. J. Phys. Soc. Jap., 1989, 58, 1524.
6. Inui M. et al. Phys. Rev. B, 1988, 38, 6631.
7. Anderson P.W. Science 1987, 235, 1196.
8. Wen X.G. et al. Phys. Rev. B, 1989, 39, 11413.
9. Mermin N.D., Wagner H. Phys. Rev. Lett., 1966, 17, 1133.
10. Chandra P., Doucot B. Phys. Rev. B, 1988, 38, 9335.
11. Dagotto E., Moreo A. Phys. Rev. B, 1989, 39, 4744.
12. Liang et al. Phys. Rev. Lett., 1988, 61, 365.

Институт физики высоких давлений
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
25 января 1990 г.