

ISSN 0131—5366

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ:

**физика
химия
техника**

Том 3, № 9
Сентябрь 1990

(стр. 1969 — 2132)

SUPERCONDUCTIVITY:
physics chemistry technique



ПЕРЕХОД В СОСТОЯНИЕ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ
В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГАЙЗЕНБЕРГА
С ФРУСТРАЦИЕЙ

А.Ф. Барабанов, О.А. Старых
Институт физики высоких давлений АН СССР,
142092, Троицк, Московская обл.

Л.А. Максимов
Институт атомной энергии им. И.В. Курчатова,
123182, Москва

Статья поступила в редакцию 16 апреля 1990 г.,
принята к печати 16 мая 1990 г.

Ключевые слова: модель Гайзенберга, фрустрация, корреляционные функции, спектр, щель, возбуждения, синглет, триплет, блок, спин-жидкостное состояние, дальний порядок, двумерный.

В модели Гайзенберга с антиферромагнитным взаимодействием между первыми и вторыми ближайшими соседями найден переход из состояния с дальним порядком в спин-жидкостное, которому отвечает конечная щель в спектре спиновых возбуждений.

Развитая в последнее время теория спиновых возбуждений для $S = 1/2$ двумерной модели Гайзенберга хорошо описывает спиновые корреляции в диэлектрическом состоянии плоскости CuO_2 ВТСП [1 – 3]. Мы рассмотрим при $T \rightarrow 0$ модель с фрустрацией, которая определяется антиферромагнитным (АФМ) взаимодействием J_1, J_2 между первыми и вторыми ближайшими соседями (б.с.) на квадратной решетке, при этом, как показано в [4], J_2 увеличивается с концентрацией дырок. В этой модели при $T = 0$ система может, в принципе, находиться в одном из трех состояний: 1) состояние неелевского типа с двумя или несколькими подрешетками и различными ненулевыми значениями $\langle S_i^z \rangle$ на каждой из подрешеток [5]; 2) сферически-симметричное состояние с дальним порядком (LROS) с $\langle S_i^z \rangle = 0$, $\langle S_i^\mu S_{i+r}^\nu \rangle = [(-1)^r/3] \delta_{\mu\nu} K_r$, $\lim_{r \rightarrow \infty} K_r = m_0^2 \neq 0$ [6]; 3) состояние спиновой жидкости (SLS) без дальнего порядка [4, 7]. Предполагается, что SLS возникает при допировании ВТСП, когда наблюдается исчезновение дальнего порядка [8]. В работах [4] в вариационном подходе находятся энергии LROS и SLS и показано, что при $\alpha = J_2/J_1 = 0,24$ происходит фазовый переход первого рода (см. также [9]). В данной работе при использовании блочного метода [10] найдены спиновые корреляторы и спектр спиновых возбуждений, который при $\alpha < \alpha_0 = 0,253$ при $T \rightarrow 0$ является бесщелевым, а при $\alpha > \alpha_0$ возникает щель $\Delta \sim (\alpha - \alpha_0)$. Это соответствует непрерывному переходу второго рода LROS–SLS.

Разобьем плоскость на квадратные блоки из четырех взаимодействующих спинов (блоки образуют квадратную решетку) и найдем собственные состояния блока. Из полного набора 16 собственных состояний выделим четыре низколежащих (при $\alpha < 0,5$) по энергии состояния: синглетное φ со спином $S_\varphi = 0$ и энергией $\epsilon_\varphi = -2 + \alpha/2$ и триплет-

ное ψ_m , $S_\psi = 1$, $m = \pm 1, 0$; $\epsilon_\psi = -1 + \alpha/2$ (остальные состояния имеют $\epsilon \geq -1,5\alpha$; здесь и ниже $J_1 = 1$).

Перепишем исходный узельный гамильтониан модели

$$H = \sum_{(i,j)} S_i S_j + \alpha \sum_{(i,j)} S_i S_j \quad (1)$$

($\langle i, j \rangle$, (i, j) — связи между первыми и вторыми б.с.) в подпространстве состояний φ , ψ_m ($|m\rangle = |\psi_m\rangle$):

$$\begin{aligned} H &= H_0 + T_g + T_b; \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{R}} \sum_m e Z_{\mathbf{R}}^{mm} + N \epsilon_\varphi; \\ T_g &= \frac{1}{2} v_g \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{g}} \sum_m \{ (-1)^m [Z_{\mathbf{R}}^{m\varphi} Z_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^{-m\varphi} + \text{h.c.}] + 2Z_{\mathbf{R}}^{m\varphi} Z_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^m \}; \\ v_g &= -\frac{1}{3}(1 - \alpha); \quad v_b = \frac{1}{6}\alpha; \quad e = \epsilon_\psi - \epsilon_\varphi, \end{aligned} \quad (2)$$

где \mathbf{R} — векторный номер блока; $\mathbf{g}(\mathbf{b})$ — векторы первых (вторых) б.с. для блоков; $Z_{\mathbf{R}}^{\lambda\mu} = |\lambda_{\mathbf{R}}\rangle \langle \mu_{\mathbf{R}}|$ — проекционный оператор Хаббарда для состояний блока \mathbf{R} ; T_b получается из T_g заменой \mathbf{g} на \mathbf{b} . В (2) опущены несущественные члены, описывающие переходы $(mm') \rightleftharpoons (m''m'')$ и $(m\varphi) \rightleftharpoons (m'm')$.

Одночастичные возбуждения описываются операторами $Z_{\mathbf{k}}^{m\varphi}$ (\mathbf{k} — квазиимпульс). Для отыскания спектра $\omega_{\mathbf{k}}$ одночастичных возбуждений и спиновых корреляторов введем следующие средние и двухвременные температурные функции Грина $G_{\mathbf{k}}$, $\tilde{G}_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} P_\varphi &= \langle Z_{\mathbf{R}}^{\varphi\varphi} \rangle; \quad P_\psi = \langle Z_{\mathbf{R}}^{mm} \rangle; \quad Q = P_\varphi - P_\psi; \\ B_{\mathbf{k}} &= (-1)^m \langle Z_{\mathbf{k}}^{m\varphi} Z_{-\mathbf{k}}^{-m\varphi} \rangle; \quad C_{\mathbf{k}} = \langle Z_{\mathbf{k}}^{m\varphi} Z_{\mathbf{k}}^m \rangle; \\ B_{\mathbf{r}} &= (-1)^m \langle Z_{\mathbf{R}}^{m\varphi} Z_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^{-m\varphi} \rangle = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}; \quad C_{\mathbf{r}} = \langle Z_{\mathbf{R}}^{m\varphi} Z_{\mathbf{R}+\mathbf{r}}^m \rangle; \\ G_{\mathbf{k}}^m &= \langle Z_{\mathbf{k}}^{m\varphi} | Z_{\mathbf{k}}^m \rangle; \quad \tilde{G}_{\mathbf{k}}^m = \langle Z_{-\mathbf{k}}^{-m} | Z_{\mathbf{k}}^m \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

Простейшие расщепления уравнений движения для G , \tilde{G} с учетом средних (3) приводят к трехкратно вырожденному по m спектру:

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{k}}^2 &= (e + 8v_g F_g + 8v_b F_b)(e + 8v_g F_g + 8v_b F_b - 8v_g Q\gamma_g - 8v_b Q\gamma_b); \\ \gamma_g &= \frac{1}{2} (\cos k_x g + \cos k_y g); \quad \gamma_b = \cos k_x g \cos k_y g; \\ F_{g(b)} &= B_{g(b)} + C_{g(b)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Самосогласованное вычисление Q , $F_{g(b)}$ с учетом очевидного равенства $P_\varphi + 3P_\psi = 1$ дает систему трех интегральных уравнений, решение которых при $T \rightarrow 0$ в зависимости от α приводит либо к бесщелевому спектру спиновых возбуждений и спиновым корреляторам с дальним порядком ($\alpha < \alpha_0$), либо к состоянию SLS ($\alpha > \alpha_0$), характеризуемому спектром со щелью и экспоненциально затухающими спиновыми корреляторами. Опишем подробнее эти состояния.

В случае LROS спиновые корреляционные функции изотропны:

$$(-1)^{i+j} K_{r,ij} = (-1)^{i+j} \langle S_{Ri} S_{R+rj} \rangle = \begin{cases} m_0^2(\alpha) + \frac{3}{8\pi(1-2\alpha)r}, & g \ll r \ll \xi; \\ \frac{3\Gamma}{4\sqrt{2}\pi(1-2\alpha)} \sqrt{\frac{\xi}{r}} e^{-r/\xi}, & r \gg \xi, \end{cases} \quad (5)$$

корреляционная длина ξ равна

$$\xi = \frac{c}{T} \exp \frac{2\pi\theta(\alpha)}{T}; \quad (6)$$

$$\theta(\alpha) = \frac{2}{3} (1-2\alpha)m_0^2(\alpha); \quad c^2 = \frac{2}{3} (1-2\alpha)Q \left[e + \frac{8}{3} (1-\alpha)F_g - \frac{4}{3} \alpha F_b \right].$$

Здесь S_{Ri} – спин i -го узла ($i = 1, 2, 3, 4$) в блоке R ; c – скорость спиновых волн, $\omega_k = ck$; величина $m_0(\alpha)$ называется эффективным спином, $m_0(0) = 0,358$ хорошо согласуется с численными расчетами: 0,34 [11], 0,33 [12]. Приведенная на рис. 1 зависимость $m_0(\alpha)$ хорошо аппроксимируется выражением $m_0(\alpha) = m_0(0)\sqrt{(1-\alpha/\alpha_0)/(1-2\alpha)}$, т.е. $m_0(\alpha)$ имеет критический индекс $\gamma = 1/2$.

SLS характеризуется следующими свойствами при $T = 0$:

$$\omega_k^r \rightarrow 0 = \Delta^2 + c^2 k^2; \quad \Delta = c\kappa; \quad (7)$$

$$K_{r,ij} = (-1)^{i+j} \frac{3c}{8\pi(1-2\alpha)} \frac{e^{-r\kappa}}{r} + \frac{3}{8} \left(\frac{Q\kappa}{4\pi} \frac{e^{-r\kappa}}{r} \right)^2, \quad r > \tilde{\xi} = \kappa^{-1}.$$

В спектре возникает конечная щель, наличие которой подтверждается подходом, основанным на аналогии с квантовым эффектом Холла [7]. Зависимости щели $\Delta(\alpha)$ и обратной корреляционной длины $\kappa(\alpha)$ приведены на рис. 2. При $r < \tilde{\xi}$ корреляторы не удается выразить аналитически, но очевидно, что в этой области экспоненциальное поведение (6) должно смениться на степенное. Независимость $\tilde{\xi}$ от T согласуется с экспериментом [8]. Интересной особенностью $K_{r,ij}$ (7) является наличие наряду с АФМ-корреляцией (первый член) более быстро убывающих ферромагнитных корреляций (второй член). Отметим, что в рамках стандартного спин-волнового подхода [13] построить SLS-фазу не удается. Значение энергии на узел при $\alpha = 0$ $\epsilon(0) = -0,65$ близко к хорошо установленному численному $-0,668$ [10].

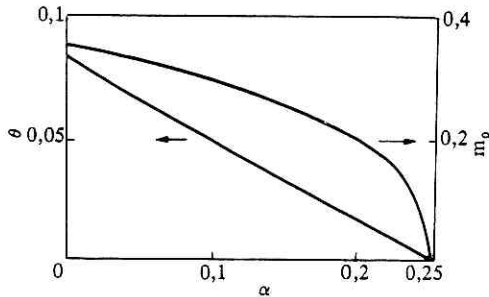


Рис. 1. Зависимость эффективного спина m_0 и θ от $\alpha = J_2/J_1$ в LROS

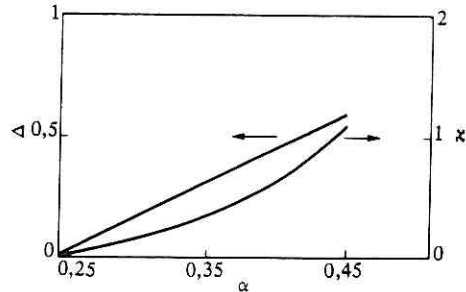


Рис. 2. Зависимость обратной корреляционной длины κ (в единицах $g^{-1} = (2a)^{-1}$) и щели Δ в спектре спиновых возбуждений в SLS от α

Обращение в нуль обратной корреляционной длины при $T \rightarrow 0$ в недопированном соединении La_2CuO_4 и конечный предел этой же величины в допированном случае естественно интерпретировать как фазовый переход LROS–SLS.

В заключение еще раз обратим внимание на то, что в отличие от одноузельного подхода блочный метод указывает на наличие в двумерном антиферромагнетике (как при $\alpha = 0$, так и при $\alpha \neq 0$) трех вырожденных ветвей, отличающихся поляризацией, что аналогично одномерной АФМ-модели [14]. Заметим также, что, как и должно быть, двумерная система находится в LROS-фазе только при $T = 0$, что отвечает фазовому переходу второго рода с $T_c = 0$.

Список литературы

1. Chakraverty S. et al. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 2344.
2. Takahashi M. – J. Phys. Soc. Jap., 1989, vol. 58, o. 1524.
3. Mata G.J., Arnold G.B. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 9768.
4. Inui M. et al. – Phys. Rev. B, 1988, vol. 38, p. 6631; Doniach S. et al. – Europhys. Let., 1988, vol. 6, p. 663.
5. Chandra P., Doucot B. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 38, p. 9335.
6. Hirsch J.E., Tang S. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 2850.
7. Laughlin R.B., Kalmeyer V. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 11879.
8. Thuston T.R. et al. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 40, p. 4585.
9. Барабанов А.Ф., Старых О.А. – Письма в ЖЭТФ, 1990, т. 51, с. 271.
10. Barabanov A.F. et al. – J. Phys., 1989, vol. 1, p. 10143.
11. Carlson J. – Phys. Rev. B, 1989, vol. 40, p. 846.
12. Liang S. et al. – Phys. Rev. Let., 1988, vol. 61, p. 365.
13. Jolicœur Th., Le Guillou J.C. – Europhys. Let., 1989, vol. 10, p. 599.
14. Johnson J.D. et al. – Phys. Rev. A, 1973, vol. 8, p. 2526.