Письма в ЖЭТФ, том 52, вып. 9, стр. 1103 - 1107 10 ноября 1990 г.

О НЕМАТИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ В ОБМЕННОМ ГАЙЗЕНБЕРГОВСКОМ ГАМИЛЬТОНИАНЕ

Л.П.Горьков, А.В.Сокол

Приведены качественные соображения в пользу того, что в системе квантовых спинов с парным фрустрирующим обменным взаимодействием возможно состояние спинового нематика. Аргументация основана на возможной неустойчивости спектра спиновых волн в неелевском состоянии по отношению к образованию пар квазичастиц.

В таких ВТСП, как $La_2CuO_{4+\delta}$ и $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$, экспериментально наблюдается АФМ состояние, природу которого обычно связывают с конфигурацией $Cu^{2+}(d^9)$. Хотя d-оболочка меди, несомненно, гибридизуется с p-орбиталями кислорода в подрешетке плоскостей CuO_2, существование локализованного момента есть экспериментальный факт. Естествен вопрос, исчезают ли локализованные моменты при допировании. Авторы неоднократно подчеркивали (см., напр., [1]), что со стороны малых концентраций допантов АФМ-фаза должна быть отделена от металлического состояния фазовым переходом I-го рода. Остается вопрос, что же происходит с локализованным магнитным моментом в металлической области. Конечно, можно предположить, что имеет место моттовский переход первого рода из диэлектрика в металл, когда все сильно коррелированные электроны становятся делокализованными. Тогда проблемы магнитных моментов нет. Однако вся совокупность экспериментальных данных убеждает, что это не так — переход I-го рода, видимо, достаточно слабый, а присутствие локальных моментов сказывается в спиновых флуктуациях.

В этой связи ниже мы хотим обсудить возможность существования, помимо АФМ и парамагнитного состояния, других параметров порядка, напр., нематического (квадрупольного) состояния. Возможность квадрупольного упорядочения неоднократно обсуждалась ранее [2-4]. При этом, однако, предполагалось, что квадрупольному упорядочению способствует обмен высокого порядка (четверной и выше). Цель этой работы в том, чтобы показать, что возможным источником нематического состояния является, например, фрустрация в обменном гайзенберговском гамильтониане (см. также [5]). Задача, очевидно, не имеет малых параметров и не решается точно, поэтому мы ограничимся простыми качественными соображениями.

Рассмотрим модель Гайзенберга с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{nm} I(\vec{R}_n - \vec{R}_m)\, \hat{\vec{\sigma}}_n \hat{\vec{\sigma}}_m \qquad (1)$$

($\vec{\sigma}$ - матрицы Паули). Пусть $T = 0$, так что термодинамических флуктуаций нет. Тогда результаты будут справедливы и для двух, и для трех измерений. Наши качественные аргументы в пользу существования нематического основного состояния состоят в том, что в некотором интервале параметров задачи спектр спиновых волн в неелевском состоянии может оказаться неустойчивым по отношению к образованию пар квазичастиц.

Пусть, для определенности, мы имеем дело с двумерной квадратной решеткой, причем обмен отличен от нуля только для ближайших соседей ($I_1 > 0$) и ближайших соседей по диагонали ($I_2 > 0$), так что I_2 играет роль фрустрации. В области параметров $I_2 < I_1/2$ фурье-образ обмена

$$I_q = \sum_R I(\vec{R}) \exp[i\vec{q}\vec{R}] \qquad (2)$$

имеет минимум в углу зоны Бриллюэна $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (a - параметр решетки). В этом случае классическое неелевское состояние содержит две коллинеарные подрешетки, так что проекция $\hat{\sigma}^z_n$ на его волновую функцию $|\Phi_0\rangle$ дает $\sigma^z = \pm 1$:

$$\hat{\sigma}^z_n |\Phi_0\rangle = \exp(i\vec{Q}\vec{R}_n)|\Phi_0\rangle. \qquad (3)$$

На фоне неелевского состояния $|\Phi_0\rangle$ можно ввести операторы уничтожения $b_{q\alpha}$ и рождения $b^\dagger_{q\alpha}$ поперечных магнонов, где $\vec{q}$ - волновой вектор, пробегающий значения в зоне Бриллюэна для удвоенной решетки $B_{1/2}$ (см. рис.1), $\alpha = \uparrow, \downarrow$ - поляризация. Как нетрудно проверить, для операторов

$$b_{q\uparrow} = \frac{1}{2}\left\{u_q \hat{\sigma}^-_q - u_{q+Q}\hat{\sigma}^-_{q+Q}\right\}, \quad b_{q\downarrow} = \frac{1}{2}\left\{u_q \hat{\sigma}^+_q + u_{q+Q}\hat{\sigma}^+_{q+Q}\right\}, \qquad (4)$$

где

$$\hat{\sigma}^\pm_q = \sum_a \hat{\sigma}^\pm_a \exp(-i\vec{q}\vec{R}_a), \quad u_q = \left[\frac{\beta_q}{\beta_{q+Q}}\right]^{1/4}, \quad \beta_q = 2(I_q - I_Q) > 0, \qquad (5)$$

выполняются следующие "коммутационные соотношения":

$$[b_{q\alpha}, b^\dagger_{q'\alpha'}]_- |\Phi_0\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\delta(\vec{q} - \vec{q}')|\Phi_0\rangle, \quad [b_{q\alpha}, b_{q'\alpha'}]_- |\Phi_0\rangle = 0, \quad [b^\dagger_{q\alpha}, b^\dagger_{q'\alpha'}]_- |\Phi_0\rangle = 0. \qquad (6)$$

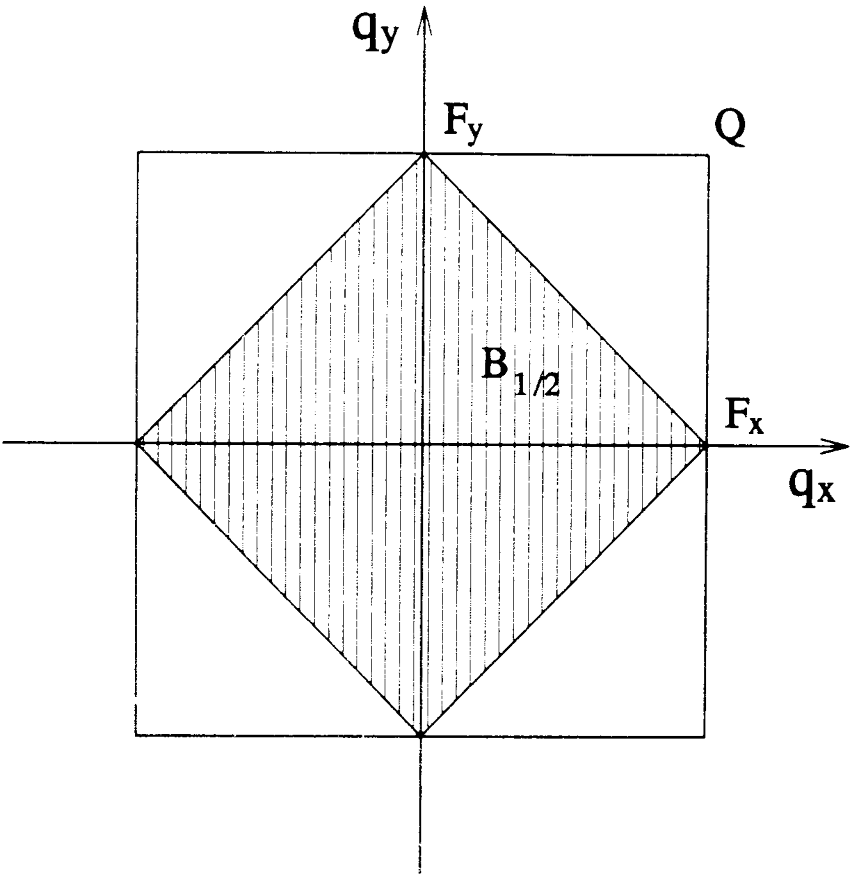

Рис. 1. Положение точек $\vec{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, $\vec{F}_x = (\pi/a, 0)$ и $\vec{F}_y = (0, \pi/a)$ в обратном пространстве

Таким образом, операторы (4) являются "бозонными", будучи спроектированы на неелевское состояние. Коммутатор оператора $b^\dagger_{q\alpha}$ с гамильтонианом (1) равен

$$[\hat{H}, b^\dagger_{q\alpha}]_- |\Phi_0\rangle = \epsilon_q b^\dagger_{q\alpha} |\Phi_0\rangle, \tag{7}$$

где ϵ_q, играющая роль энергии магнона, есть

$$\epsilon_q = \sqrt{\beta_q \beta_{q+Q}}. \tag{8}$$

Таким образом, одночастичный гамильтониан магнонов (без учета взаимодействия)

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_\alpha \int_{B_{1/2}} d\vec{q}\, \epsilon_q b^\dagger_{q\alpha} b_{q\alpha}. \tag{9}$$

Рассмотрим зависимость ϵ_q от параметров задачи. В зоне Бриллюэна $B_{1/2}$ для тетрагональной удвоенной решетки (см. рис.1) энергия магнона обращается в ноль при $\vec{q} = 0$ и имеет локальные минимумы при $\vec{q} = \pm\vec{F}_x, \pm\vec{F}_y$, где $\vec{F}_x = (\pi/a, 0)$, $\vec{F}_y = (0, \pi/a)$ (все четыре точки эквивалентны в $B_{1/2}$: $\vec{F}_x \equiv \vec{F}_y \equiv \vec{F}$). Вблизи локального минимума имеем:

$$\epsilon_q \approx \Delta + \frac{(\vec{q} - \vec{F})^2}{2m^*}, \quad \Delta = 8(I_1 - 2I_2), \quad m^* = \frac{1}{8a^2 I_2}. \tag{10}$$

Щель Δ в точке $\vec{F}$ обращается в ноль при $I_2 = I_1/2$, когда структура (3) становится менее выгодна, чем две "вложенные" неелевские структуры (полное число подрешеток равно четырем). В структурных переходах обращение Δ в ноль интерпретируется как фазовый переход по схеме т.н. "мягкой моды". Для спиновой задачи ангармонизмы не малы, что приводит к возникновению новой возможности для перестройки основного состояния.

Прежде всего, отметим, что $b_{q\alpha}|\Phi_0\rangle \to 0$ при $\vec{q} \approx \vec{F}$, так что неелевское состояние является "вакуумом" для спиновых волн в этой области волновых векторов. Это позволяет нам говорить об одно-, двухмагнонном и т.д. состояниях вблизи $\vec{F}$. Построим гамильтониан магнонов $\hat{H}_2$, правильно описывающий уравнения движения для двухмагнонного состояния $|\Phi_2\rangle = b^\dagger_{q\alpha} b^\dagger_{q'\alpha'}|\Phi_0\rangle$:

$$[H_2, b^\dagger_{q\alpha} b^\dagger_{q'\alpha'}]|\Phi_0\rangle = [H, b^\dagger_{q\alpha} b^\dagger_{q'\alpha'}]|\Phi_0\rangle. \tag{11}$$

При общем положении $\vec{q}, \vec{q}'$ в зоне Бриллюэна в гамильтониане H_2 присутствуют члены вида $bbbb+$э.с., $b^\dagger bbb+$э.с. и $b^\dagger b^\dagger bb$. Взаимодействие магнонов рассматривалось во многих работах (см., напр., [6]). Ниже нам существенно, что если все волновые вектора лежат вблизи $\vec{F}$, то члены, не сохраняющие число частиц, малы ($\sim a^2(\vec{q}-\vec{F})^2$). Взаимодействие вблизи $\vec{F}$ сводится к рассеянию магнонов с амплитудой

$$U^{\alpha\alpha'}_{q,q'\to q+p,q'-p} = \begin{cases} 64I_2 > 0, & \alpha = \alpha' \\ -32I_1 < 0, & \alpha \neq \alpha' \end{cases}. \tag{12}$$

Иначе говоря, вблизи точки $\vec{F}$ в зоне Бриллюэна существует область, где магноны с разной поляризацией притягиваются. Поскольку амплитуда (12) не мала, притяжение свидетельствует о возможности образования связанного состояния магнонов с волновым вектором центра масс, расположенным вблизи $\vec{F}$. Так как $U^{\alpha\alpha'} \neq 0$ при $I_2 = I_1/2$, когда $\Delta = 0$, при увеличении фрустрации должен наступить момент, когда полная энергия связанного состояния $2\Delta + E_c$ (энергия связи $E_c < 0$) обращается в ноль.

Таким образом, спектр спиновых волн в неелевском состоянии может стать неустойчивым. В системе происходит коллапс, связанный с образованием пар магнонов. Одной из реализаций этого коллапса могло бы явиться нематическое упорядочение $\langle\sigma^\mu_n \sigma^\nu_m\rangle \neq \delta_{\mu\nu}\delta_{nm}$, $\langle\sigma^\mu_n\rangle = 0$. Например, спиновая симметрия $\langle b^\dagger_\uparrow b^\dagger_\downarrow\rangle$ не противоречит этому предположению. Случай $\Delta = 0$ рассматривался в [5], где показано, что при этом флуктуации для гамильтониана (1) приводят к квадрупольному взаимодействию. Однако в [5] был получен только скалярный параметр порядка.

Для большого спина S взаимодействие магнонов порядка $1/S$. Задача сводится к вычислению уровня энергии частицы с массой $m^*/2$ в слабом притягивающем потенциале, поэтому можно ограничиться $\vec{q} \approx \vec{F}$. В 2D-случае хотя бы один дискретный уровень заведомо существует. Добавим в заключение, что приведенный выше пример фрустрации из-за взаимодействия ближайших соседей по диагонали — не единственная возможность. Так, любое дальнодействующее АФМ взаимодействие (см., напр., [7]) также приводит к притяжению магнонов вблизи точки $\vec{F}$ (здесь минимума в ϵ_q нет, но $b_{q\alpha}|\Phi_0\rangle \approx 0$), причем для передачи импульса $p \sim R_0^{-1}$ амплитуда взаимодействия превышает энергию магнонов в $(R_0/a)^2$ раз ($R_0 \gg a$ — радиус взаимодействия). Исследование этого случая мы откладываем до следующей статьи.

Эта работа выполнена в рамках проекта Европейского Филиала ИТФ при I.S.I. Foundation, Турин, Италия. Авторам приятно поблагодарить Г.Е. Воловика и А.В. Чубукова за полезные дискуссии.

Литература

1. *Горьков Л.П., Сокол А.В.* Письма в ЖЭТФ, 1987, 46, 333.
2. *Blume M., Hsieh Y.Y.* J. Appl. Phys., 1969, 40, 1249.
3. *Матвеев В.М.* ЖЭТФ, 1973, 65, 1626; ФТТ 1983, 25, 3655.
4. *Андреев А.Ф., Грищук И.А.* ЖЭТФ, 1984, 87, 467.
5. *Chandra P., Coleman P., Larkin A.I.* Phys. Rev. Letters, 1990, 64, 88.
6. *Sólyom J.* Z. Phys., 1971, 243, 382.
7. *Горьков Л.П., Сокол А.В.* Письма в ЖЭТФ, 1988, 48, 505.

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау
Академии наук СССР.

Поступила в редакцию
18 октября 1990 г.