

Димерное состояние в двумерной анизотропной модели Гейзенберга с альтернированными обменами

© С.С. Аплеснин

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия

(Поступила в Редакцию 2 января 1998 г.)

Рассматривается 2D-модель Гейзенберга с $S = 1/2$, анизотропным обменным взаимодействием между ближайшими соседями и альтернированным обменом в двух направлениях, [100] и [010] (соответствует конденсации (π, π) -моды), и в одном направлении [100] (соответствует конденсации $(\pi, 0)$ -моды). Квантовым методом Монте-Карло вычислены термодинамические характеристики и спиновые корреляционные функции, на основании которых определена граница устойчивости анизотропного антиферромагнетика относительно альтернирования обмена $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.4}$ в модели (π, π) и $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.31}$ в модели $(\pi, 0)$. В модели $(\pi, 0)$ в области $(1 - J^{x,y}/J^z)^{0.31} < \delta < (0.3 - 0.35)$ существует неупорядоченное квантовое состояние. Определена зависимость энергии $(E - 0.68) = 0.36\delta^{1.80(6)}$ и $0.21\delta^{2.0(5)}$, энергетической щели между основным и возбужденным состояниями $H_c(\delta) = 1.96\delta^{2.1(1)}$, $1.8(1)(\delta - 0.35(3))^{0.67(2)}$ от величины альтернирования обмена соответственно в (π, π) - и $(\pi, 0)$ -моделях.

Димеризация решетки, вызванная электрон-фононным взаимодействием и приводящая к спин-пайерлсовскому переходу в одномерных системах, подробно рассматривалась в литературе [1,2]. В связи с открытием высокотемпературных сверхпроводников исследовалась пайерлсовская нестабильность в 2D-модели Хаббарда с наполовину заполненной зоной [3,4]. В пределе сильного притяжения $(U/t) \gg 1$ в адиабатическом приближении методом точной диагнолизации [5] рассматривались модели с альтернированным обменом, соответствующие фононной (π, π) -моды и $(\pi, 0)$ -моды. Согласно этим расчетам, димеризация происходит в направлении [100].

Область устойчивости антиферромагнитного (AF) упорядочения относительно альтернирования обмена вычислялась при численном решении системы уравнений для спиновых операторов в швингеровском представлении на решетке 40×40 [6], в неоднородном хартри-фоковском приближении [7,8]. Во всех случаях дальний AF-порядок исчезает при критической величине димеризации решетки, соответствующей 50% изменению величины обмена, когда альтернирование составляет $\sim 0.5J$. Для квазидвумерных магнетиков CuGeO_3 [9], $\text{Cs}_3\text{Cr}_2\text{Br}_9$ [10], в которых существует переход в димерное состояние, эти оценки не реальны. Возможно, из-за этих высоких оценок величин альтернирования обмена интерес к исследованию 2D-моделей с альтернированным обменом уменьшился.

В данной работе решаются три задачи. Первая состоит в том, чтобы определить, какая фононная мода, (π, π) или $(\pi, 0)$, приводит к наибольшей магнитной энергии на одну альтернированную связь. Вторая — исследовать стабильность AF-упорядочения относительно альтернирования обмена в зависимости от величины анизотропии обмена. Третья — выяснить возможно ли существование неупорядоченного квантового состояния или при увеличении параметра альтернирования обмена антиферромагнетик сразу переходит в димерное состояние. Для решения этих вопросов используется квантовый

метод Монте-Карло (МК) на основе траекторного алгоритма [11]. Основная идея алгоритма — преобразование квантовой D -мерной задачи к классической $D + 1$ -мерной путем введения "временных" срезов в пространстве мнимого времени $0 < \tau < 1/T$ и реализации МК-процедуры в пространстве "мнимое время-координата".

1. Модель и основное состояние 2D-модели Гейзенберга с альтернированными обменами

Рассмотрим двумерную решетку с локализованными в узлах решетки спинами $S = 1/2$. Альтернирование обмена будем рассматривать в двух моделях. В первом случае альтернирование происходит вдоль одного из направлений решетки (например, по [100]) и (согласно обозначениям работы [5]) вызвано конденсацией фононной моды $(\pi, 0)$. Во втором случае альтернирование происходит в двух направлениях и вызвано конденсацией моды (π, π) , т.е. $J_{l,l+1} = J_0 + \delta$, $J_{l+1,l+2} = J_0 - \delta$ (рис. 1). Эта неоднородность обмена может быть обусловлена как искажением решетки $J_{l,l+1}^c - J_{l+1,l+2}^c = \lambda'(u_l - u_{l+1})$ (u — смещение атома из равновесного положения), так и ангармонизмом колебаний. Гамильтониан в модели $(\pi, 0)$ имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^L \left\{ J_{i,j}^{z(010)} S_i^z S_j^z + J_{i,j}^{x,y(010)} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) / 2 \right\} \\ \times \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^L \left\{ (J_{i,j}^{z(100)} + (-1)^j \delta^z) S_i^z S_j^z + (J_{i,j}^{x,y(100)} + (-1)^j \delta^{x,y}) (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) / 2 \right\} - \sum_{i=1}^N h^z S_i^z,$$

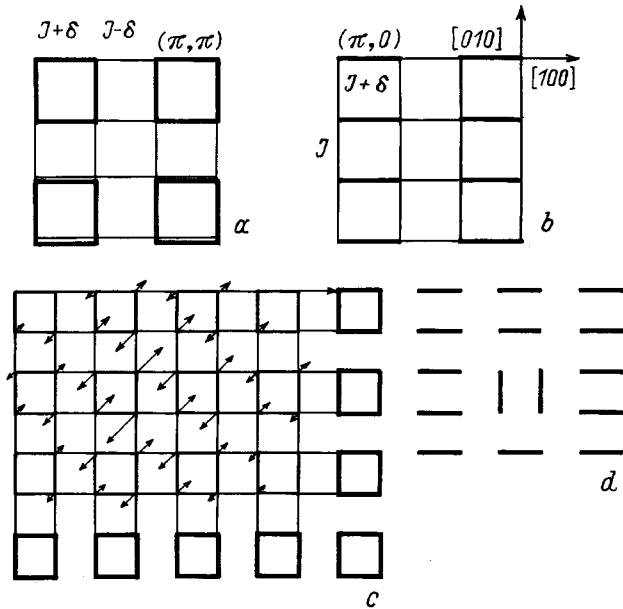


Рис. 1. Расположение связей на решетке в двух моделях: (π, π) (a) и $(\pi, 0)$ (b), стрелками обозначен солитон (c), отрезки линий соответствуют парам спинов в синглетном состоянии — димерам (d).

а в модели (π, π) — вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^L \left\{ (J_{i,j}^z + (-1)^j \delta^z) S_i^z S_j^z + (J_{i,j}^{x,y} + (-1)^j \delta^{x,y}) \times (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) / 2 \right\} - \sum_{i=1}^N h^z S_i^z,$$

где $J^{z,x,y} < 0$ — анизотропное взаимодействие, $J^z > J^{x,y}$, $\Delta = 1 - J^{x,y}/J^z$, $\delta^{z(x)}$ — альтернирование обмена, $H = h^z/J$ — внешнее магнитное поле, L — линейный размер решетки ($N = L \times L$) (рис. 1, a).

Алгоритм и метод МК подробно изложены ранее [12]. Гамильтониан разбивается на кластеры из четырех спинов на квадрате, коммутация между которыми учитывается с помощью формулы Троттера. В данной работе в МК-процедуре используются периодические граничные условия по троттеровскому направлению и по решетке. Линейный размер решетки $L = 40, 48, 64$ и $m = 16, 24, 32$. Количество МК-шагов на один спин изменялось от 3000 до 10 000. Один МК-шаг определяется поворотом всех спинов на решетке размером $L \times L \times 4m$.

Определим параметр упорядочения димеров из четырехспиновой корреляционной функции $\langle S_0^z S_1^z S_r^z S_{r+1}^z \rangle$, зависимость которой от расстояния имеет осциллирующий вид, а разность между минимумом и максимумом соответствует величине $q = \langle S_0^z S_1^z S_r^z S_{r+1}^z \rangle - \langle S_0^z S_1^z S_{r+1}^z S_{r+2}^z \rangle$. Вычислим парные спин-спиновые корреляционные функции по продольным и поперечным компонентам спинов, выполнение соотношения между которыми на расстоянии $r = 1$ необходимо для установления синглетного состояния.

Область устойчивости антиферромагнитного (AF) и димерного (DS) состояний определим из спин-спиновых корреляционных функций, параметра димеризации, радиуса корреляции, вычисленных при трех температурах $T/J = 0.1, 0.15$ и 0.2 в зависимости от величины альтернирования обмена для ряда параметров анизотропии обмена $\Delta = 0, 0.01, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.4$ и 0.5 . Критическую величину альтернирования обмена δ_c , при которой исчезает дальний антиферромагнитный порядок, определим из спин-спиновых корреляционных функций $\langle S_0^z S_r^z \rangle \rightarrow 0$ на расстоянии $r = L/2$, вычисленных для разных размеров решетки.

На рис. 2 приведены спиновые корреляционные функции для трех параметров анизотропии обмена $\Delta = 0, 0.05, 0.25$, вычисленные в двух моделях альтернирования обмена. Величина альтернирования обмена, соответствующая точке перегиба параметра димеризации $q(\delta)$ и образованию димерного состояния, совпадает с критической величиной δ_c , при которой разрушается AF-порядок в модели (π, π) и в модели $(\pi, 0)$ для анизотропии обмена $\Delta > 0.02$. Для изотропной модели Гейзенберга зависимость $q(\delta)$ линейная и выходит из нуля в случае (π, π) -димеризации (рис. 2, b) и из $\delta_c \approx 0.3$ для $(\pi, 0)$ (рис. 2, a). Спиновые корреляционные функции между ближайшими соседями по продольным и поперечным компонентам спина существенно не меняются при увеличении альтернирования обмена при (π, π) - и $(\pi, 0)$ -димеризации в направлении $[100]$, так как изотропный двумерный AF находится в синглетном состоянии [13,14]. В анизотропном AF в направлении альтернирования обмена корреляционная функция по поперечным компонентам растет, что также указывает на образование димеров, а в направлении $[010]$ в модели $(\pi, 0)$ $\langle S_0^+ S_1^- \rangle$ уменьшается с ростом δ .

Корреляционный радиус в димерном состоянии расходуется по степенному закону при приближении к критическому значению δ_c (рис. 2, c, d). В случае (π, π) -димеризации выполняется соотношение $\xi = 1/(\delta - \delta_c)^\beta$, где показатель степени уменьшается с ростом величины анизотропии обмена. В изотропном случае корреляционный радиус хорошо аппроксимируется зависимостью $\xi = 1/\delta^{2.15}$ в модели (π, π) и $\xi = 4.5/(\delta - 0.33(3))^{0.70(4)}$ в модели $(\pi, 0)$ с критическим значением $\delta_c = 0.33(3)$. Соответствующие интерполяционные зависимости изображены на рис. 2, c, d пунктирными линиями, и в пределах погрешности вычислений $\sim 10\%$ не зависят от размеров решетки, изображенных на рисунке для $L = 48, 64$. Из вычисленных зависимостей $q(\delta)$, $\xi(\delta)$ и $\langle S_0^{z,+} S_1^{z,-} \rangle(\delta)$ следует, что при альтернировании обмена по двум направлениям в 2D-модели Гейзенберга образуется димерное состояние и анизотропный AF переходит в DS при некотором критическом значении величины альтернирования обмена. Между димерами существует корреляция по продольным компонентам спина в области размером $\sim \xi^2$, изображенная на рис. 1, c. В модели $(\pi, 0)$ упорядоченное димерное состояние

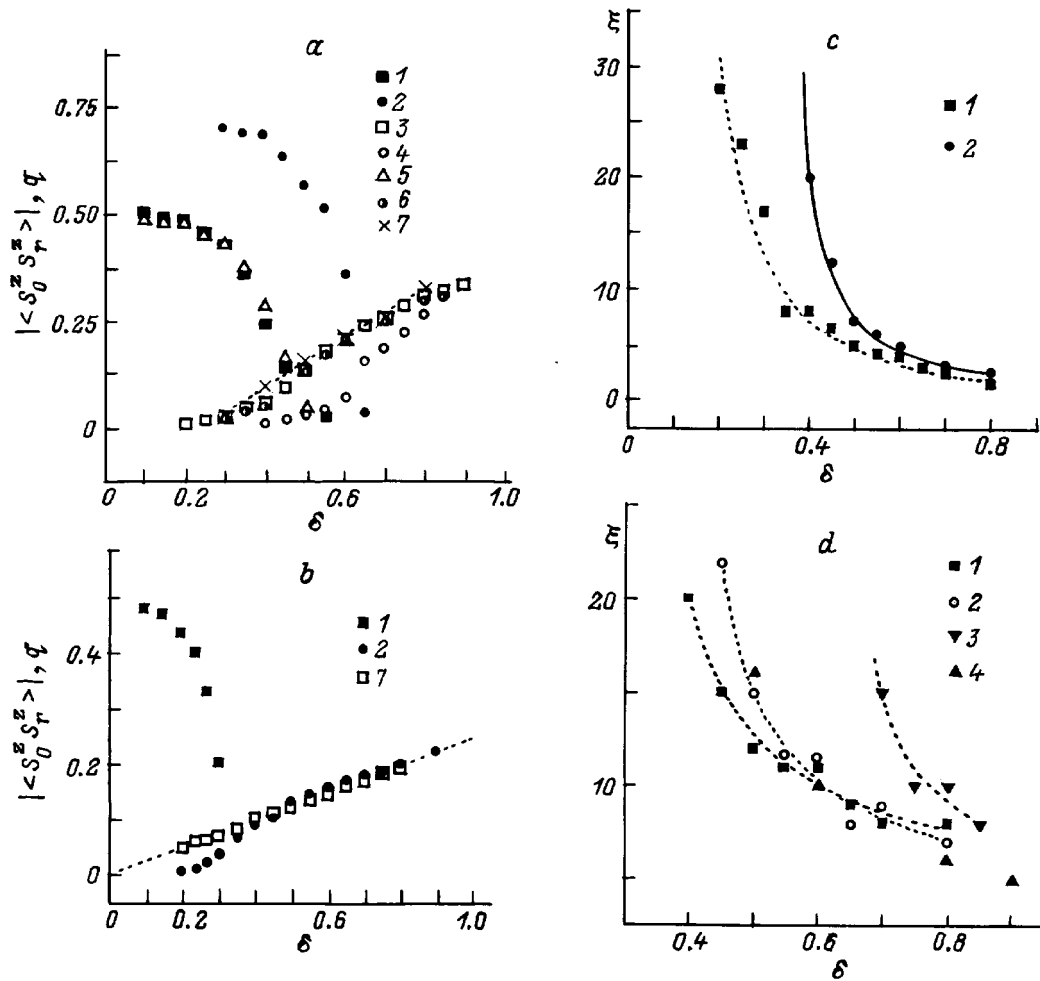


Рис. 2. Зависимости корреляционной функции на расстоянии $r = 22$ (5, 6), 30 (1), параметра димеризации q (2–4, 7) для анизотропии обмена $\Delta = 0$ (7), 0.05 (1–3, 5), 0.25 (4, 6) на решетке $L = 64$ (1, 2, 7), 48 (3, 5, 6) и корреляционного радиуса ξ для $\Delta = 0$ (1), 0.05 (2, 4), 0.25 (3) на решетке размером 64×64 (1, 2) и 48×48 (3, 4) от альтернирования обмена в моделях $(\pi, 0)$ (a, c) и (π, π) (b, d).

образуется при критическом значении $\delta_c = 0.3-0.35$. Энергия изолированного димера равна $E/J = 3/2(1+\delta)$. При перестановке двух димеров в направлении $[010]$, как изображено на рис. 1, d, энергия уменьшается на $\Delta E/J = 3\delta$. Если эта энергия меньше энергии триплетного возбуждения $\Delta E/J = 1$, то при $\delta < \delta_c = 1/3$ упорядоченное состояние димеров отсутствует. В модели $(\pi, 0)$ корреляционный радиус анизотропен и в направлении $[100]$ имеет максимальное значение.

Вычисленная МК-методом энергия для двух моделей (π, π) и $(\pi, 0)$ и разных величин анизотропии обмена хорошо интерполируется степенной зависимостью $(E - E(0)) = A\delta^\alpha$, где показатель степени α растет с увеличением анизотропии обмена. В изотропном пределе в моделях (π, π) и $(\pi, 0)$ интерполяционные зависимости соответственно имеют вид $(E - 0.68) = 0.36\delta^{1.80(6)}$ и $0.21\delta^{2.0(5)}$. При $\delta \approx 0.50(4)$ энергии, вычисленные в двух моделях димеризации и нормированные на число альтернированных связей, совпадают. Для $\delta < 0.50(4)$ энергия DS, нормированная на число альтернирован-

ных связей, в модели (π, π) превышает по абсолютной величине энергию в модели $(\pi, 0)$, а для $\delta > 0.50(4)$ $E(\pi, \pi) < E(\pi, 0)$. При спин-пайерловском переходе увеличение магнитной энергии, достигнутое за счет димеризации, должно превышать потери энергии в упругой системе $0.36\delta^{1.80(6)} \geq Ku^2/2$ или $\lambda^{1.8} \geq 1.4Ku^{0.2}$, где λ — константа спин-фононного взаимодействия, K — модуль упругости, $u = |u_i - u_j|$ — изменение расстояния между ближайшими соседями, т.е. в результате взаимодействия упругой и магнитной подсистем для $\delta < 0.5J$ предпочтительна димеризация магнитной структуры по двум направлениям. В области больших констант спин-фононного взаимодействия возможно образование димеров в одном из направлений вектора трансляций решетки. Расчеты, проведенные на малых решетках [5], указывают на преимущество $(\pi, 0)$ -димеризации. Возможно, это вызвано конечными размерами решетки 4×4 . Так, линейный размер решетки равен корреляционному радиусу при $\delta = 0.7$, при этой величине альтернирования обмена МК-расчеты дают $(\pi, 0)$ -димеризацию.

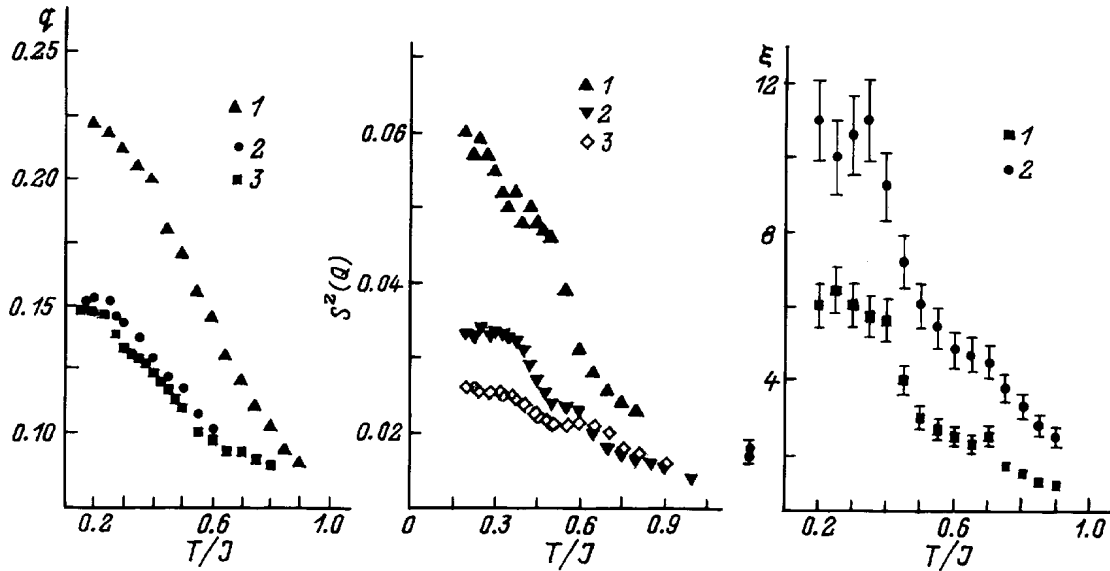


Рис. 3. Зависимости параметра димеризации q в направлении $[100]$, корреляционного радиуса ξ в направлении $[010]$ для $\Delta = 0.05$, $\delta = 0.65$ (1), $\Delta = 0.0$, $\delta = 0.5$ (2, 3) для $L = 64$ (1, 2), 48 (3) и статического магнитного структурного фактора $S^c(Q)$ для $Q = \pi$ по $[010]$ (1, 3), $[100]$ (1, 2) для $\Delta = 0.05$, $\delta = 0.65$ (2, 3) и $\Delta = 0.0$, $\delta = 0.35$ (1) от температуры в димерном состоянии в модели $(\pi, 0)$.

Граница устойчивости дальнего АФ-порядка хорошо аппроксимируется степенной зависимостью $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.4}$ в модели (π, π) и $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.31}$ в $(\pi, 0)$. В модели $(\pi, 0)$ в области параметров $\delta < \delta_c = 0.27-0.33$ и $\Delta \leq 0.02$ реализуется неупорядоченное квантовое состояние.

2. Определение последовательности переходов димерное состояние–квантовое неупорядоченное состояние–парамагнетик (PM)

Вычисление зависимостей теплоемкости и восприимчивости от температуры показывает две критические области и две характерные температуры перехода: T_{c1} и T_{c2} . Ниже T_{c1} температурная зависимость теплоемкости и восприимчивости хорошо аппроксимируется экспоненциальной зависимостью, что указывает на существование энергетической щели в спектре возбуждений. В интервале $T_{c1} < T < T_{c2}$ наблюдается степенное поведение $C(T)$. В области низких температур $T < T_{c1}$ сохраняется упорядоченное состояние димеров в обоих моделях. Параметр димеризации q , корреляционный радиус и корреляционные функции по продольным компонентам спина на расстоянии $r = 1$ довольно слабо зависят от температуры при $T < T_{c1}$ (рис. 3). Это связано с тем, что возбуждениями являются спионы (понятие, введенное Андерсоном [13]), т.е. димер разрывается на два спина, находящихся на некотором расстоянии

друг от друга. Этот тип возбуждений можно представить как солитон, изображенный на рис. 1, с. При температуре T_{c1} происходит протекание солитонов, и в области температур $T_{c1} < T < T_{c2}$ образуется газ солитонов. С ростом температуры плотность солитонов растет, среднее расстояние между ними уменьшается и соответственно уменьшается корреляционный радиус. Возможно, что в окрестности T_{c2} происходит смена зависимости корреляционного радиуса от температуры $\xi(T)$ с экспоненциальной на степенную (рис. 3). Корреляционная функция $\langle S_0^{z,+} S_1^{z,-} \rangle$, статический магнитный структурный фактор $S^c(Q)$ на $Q = \pi$ имеют две точки перегиба, соответственно связанные с переходом из димерного состояния в неупорядоченное квантовое состояние, имеющее ближний порядок димеров и топологические возбуждения (солитоны) (QD), и с переходом QD–PM. Для $\delta = 0.3$ в модели $(\pi, 0)$ $S^c(Q)$ имеет одну точку перегиба при температуре T_{c2} (рис. 3).

Зависимость температуры перехода DS–QD хорошо интерполируется степенным законом $T_{c1} = 0.7(\delta - \delta_c)^{0.50(4)}$ в модели $(\pi, 0)$, где параметр δ_c хорошо согласуется с величинами критических значений альтернирования обмена и в изотропном случае $\delta_c = 0.33(2)$. При (π, π) -альтернировании обмена $T_{c1}(\delta) = 1.10(7)\delta^{2.0(7)}$.

Величину энергетической щели между основным и возбужденным состояниями определим из зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости решетки. Так, при критическом значении поля H_c намагниченность $M \neq 0$, корреляционный радиус, параметр димеризации резко

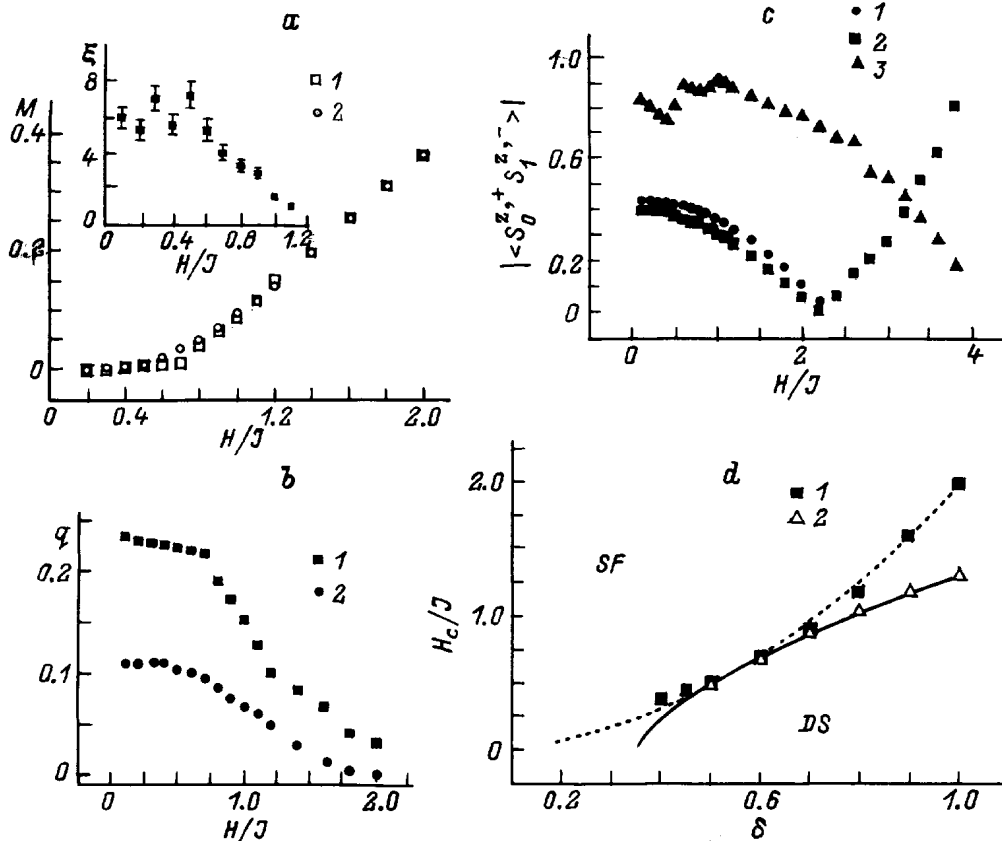


Рис. 4. Зависимости намагниченности M (а), корреляционного радиуса ξ (на вставке), параметра димеризации q (б) и спиновой корреляционной функции на $r = 1$ по продольным (z) (1, 2) и поперечным (+, -) (3) компонентам спина $\langle S_0^{s_1} S_1^{s_2} \rangle$ в модели $(\pi, 0)$, $\Delta = 0.05$, $\delta = 0.65$ (1) и (π, π) , $\Delta = 0.0$, $\delta = 0.45$ (2, 3) (с) от внешнего поля. d — фазовая диаграмма димерного состояния (DS), спин-флоп фазы (SF) на плоскости поле-альтернирование обмена в модели (π, π) (1) и $(\pi, 0)$ (2) для изотропного обмена $\Delta = 0$.

уменьшаются с ростом величины поля в обоих моделях (рис. 4). Корреляционные функции по поперечным компонентам меняются незначительно. Здесь также можно выделить область полей $H_c < H < H^*$, в которой реализуется неоднородное магнитное состояние, исчезающее при $\xi \rightarrow 0$. Зависимость $M(H)$ линейна в этой области полей. В полях $H > H^*$ образуется классическое спин-флоп-состояние. На рис. 4 изображена зависимость критических полей от величины альтернирования обмена для двух моделей в изотропном случае. В моделях (π, π) и $(\pi, 0)$ эти зависимости соответственно интерполируются степенными зависимостями $H_c = 1.96\delta^{2.1}$ и $H_c = 1.8(1)(\delta - 0.35(3))^{0.67(2)}$. При альтернировании обмена по двум направлениям отношение $H_c/T_{c1} \cong 1.78$ не зависит от величины альтернирования обмена, а в модели $(\pi, 0)$ наблюдается зависимость от δ , которую можно приблизительно оценить как $H_c/T_{c1} \sim (\delta - 0.34)^{0.17}$. По-видимому, это связано с анизотропией корреляционного радиуса. Так, с ростом δ магнитная квазиодномерность увеличивается, происходит перераспределение плотности состояний синглетных и триплетных возбуждений, что проявляется в смещении температуры максимума те-

плоемкости и восприимчивости. В $2D$ -модели Гейзенберга $T_{C \max}/T_{\chi \max} \approx 0.5$, в $1D$ -модели $T_{C \max}/T_{\chi \max} \approx 0.76$. В области $\delta \approx 0.5$, где энергии DS в двух моделях сравниваются, энергетические щели также равны.

Итак, при альтернировании обмена по двум векторам трансляций либо по одному из них получены асимптотические зависимости от альтернирования обмена значений энергии $(E - 0.68) = 0.36\delta^{1.80(6)}$ и $0.21\delta^{2.0(5)}$, энергетической щели между основным и триплетным состояниями $H_c(\delta) = 1.96\delta^{2.1}$ и $1.8(1)(\delta - 0.35(3))^{0.67(2)}$. Определены границы устойчивости анизотропного антиферромагнетика относительно альтернирования обмена $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.4}$ в модели (π, π) и $\delta = (1 - J^{x,y}/J^z)^{0.31}$ в модели $(\pi, 0)$. Энергия, приходящаяся на одну альтернативную связь, больше по абсолютной величине в (π, π) -модели, чем в $(\pi, 0)$, для $\delta < 0.5$. При альтернировании обмена по одному из векторов трансляций анизотропный AF с анизотропией $\Delta < 0.02$ переходит в димерное состояние через неупорядоченное квантовое состояние. Это состояние реализуется в области температур между DS и PM.

Список литературы

- [1] L.N. Bulaevskii, A.I. Buzdin, D.I. Khomskii. Solid State Commun. **27**, 5 (1978).
- [2] M.C. Cross, D.S. Fisher. Phys. Rev. **B 19**, 402 (1979).
- [3] S.A. Kivelson, D.S. Rokhsar, J.P. Sethna. Phys. Rev. **B 35**, 8865 (1987).
- [4] J.E. Hirsch. Phys. Rev. **B 35**, 8726 (1987).
- [5] S. Tang, J.E. Hirsch. Phys. Rev. **B 37**, 9546 (1988).
- [6] A. Feiguin, C.J. Gazza, A.E. Trumper, H.A. Ceccatto. J. Phys.: Condens. Matter. **6**, 9546 (1988).
- [7] K. Yonemitsu, A.R. Bishop, J. Lorenzana. Phys. Rev. **B 47**, 8065 (1993).
- [8] N. Read, S. Sachdev. Phys. Rev. **B 42**, 4568 (1990).
- [9] M. Nishi, O. Fujita, J. Akimitsu. Technical Report of ISSP. Ser. A **2759**, 1 (1993).
- [10] J.R. Fletcher, S.S. Kazmi, K.J. Maxwell, J.R. Owers-Bradley. Physica **B 165–166**, 973 (1990).
- [11] H. Raedt, A. Lagendijk. Phys. Rep. **127**, 233 (1985).
- [12] С.С. Аплеснин. ФТТ **38**, 6, 1868 (1996).
- [13] P.W. Anderson. Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [14] P. Vries, H.D. Raedt. Phys. Rev. **B 47**, 7929 (1993).