

УДК 538.955

ИЗИНГОВСКИЙ НЕМАТИК В J_1 – J_2 МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ В РАМКАХ САМОСОГЛАСОВАННОЙ СПИН-ВОЛНОВОЙ ТЕОРИИ

© 2023 г. А. Н. Игнатенко¹, *, В. Ю. Ирхин¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
“Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук”,
Екатеринбург, Россия

*E-mail: ignatenko@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 22.05.2023 г.

После доработки 19.06.2023 г.

Принята к публикации 28.07.2023 г.

Изучено изинговское нематическое упорядочение, изинговский нематический фазовый переход и температурное поведение параметров ближнего порядка в квантовой антиферромагнитной модели Гейзенберга со спином 1/2 на двумерной квадратной решетке с учетом обменных параметров первых и вторых соседей. Рассмотрены две версии самосогласованной спин-волновой теории: с вспомогательными псевдофермионами и без них.

DOI: 10.31857/S0367676523702721, EDN: FPDTER

ВВЕДЕНИЕ

В отличие от обычного векторного магнитного упорядочения с ненулевым средним спином $\langle S_i^\alpha \rangle$ (где $\alpha = x, y, z$, а i — узел решетки), нематическое магнитное упорядочение характеризуется средним значением тензора $\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle$, нарушающим симметрию модели. Для модели Гейзенберга такой симметрией является $SO(3) \otimes \Lambda$ — произведение непрерывной группы спиновых вращений $SO(3)$ на дискретную группу симметрии решетки Λ .

В пионерской работе [1] было предложено, что одна из разновидностей нематического магнитного порядка реализуется в антиферромагнитной модели Гейзенберга

$$H = 1/2 \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

на двумерной квадратной решетке с обменом первых ($J_1 \geq 0$) и вторых ($J_2 > 0$) соседей при достаточно низких температурах $T > 0$ и $\eta = J_1/(2J_2) \ll 1$. При этом отличен от нуля нематический параметр порядка

$$\sigma = \langle \vec{S}_{i+\vec{e}_1} \cdot \vec{S}_i - \vec{S}_{i+\vec{e}_2} \cdot \vec{S}_i \rangle, \quad (2)$$

демонстрирующий различие ближнего магнитного порядка вдоль базисных векторов решетки $\vec{e}_1$ и $\vec{e}_2$ и нарушение симметрии решетки относительно поворотов на $\pi/2$. Поскольку симметрия

относительно поворотов решетки на π не нарушена, всего существует два состояния, отличающихся знаком σ и переходящих друг в друга при преобразованиях симметрии, т.е. нематическое упорядочение характеризуется изинговским параметром порядка. Отсутствие дипольного магнитного упорядочения с $\langle \vec{S}_i \rangle \neq 0$ при конечных T гарантируется теоремой Мермина–Вагнера. Компьютерное моделирование, проведенное в работах [2, 3], подтвердило существование нематической фазы. Изинговский нематик в J_1 – J_2 модели приобрел повышенный интерес в связи с открытием высокотемпературной сверхпроводимости в пниктидах железа [4–6].

Среди теоретических подходов, использовавшихся для понимания температурных свойств изинговского нематика, особая роль принадлежит методу ренормгруппы [1] и приближению больших n (n — число компонент спина) [5]. Однако оба эти подхода применяются не прямо к модели Гейзенберга, а к некоей континуальной модели, предположительно описывающей низкотемпературную физику модели Гейзенберга. В настоящей работе мы исследуем квантовую антиферромагнитную модель Гейзенберга для спина $S = 1/2$ на двумерной квадратной решетке с обменом первых ($J_1 \geq 0$) и вторых ($J_2 > 0$) соседей при $\eta = J_1/(2J_2) < 1$ в более прямом подходе самосогласованной спин-волновой теории (ССВТ) и показываем существование в нем нематического

фазового перехода с температурой перехода, согласующейся с результатом ренормгруппы [1] при $\eta \ll 1$.

САМОСОГЛАСОВАННАЯ СПИН-ВОЛНОВАЯ ТЕОРИЯ

ССВТ является самосогласованным вариантом нелинейной спин-волновой теории, модифицированной для работы в состояниях без дальнего дипольного магнитного порядка [7]. Как и любая спин-волновая теория, ССВТ начинается с выбора классического основного состояния. Одним из таких состояний является “полосатый” антиферромагнитный порядок с волновым вектором $\vec{Q} = (\pi, 0)$, представляющий собой ферромагнитно упорядоченные цепочки, ориентированные вдоль $\vec{e}_2$, намагниченность которых меняет знак при трансляции на $\vec{e}_1$ [1].

Следующий шаг состоит в замене спиновых операторов на их представление через бозевские операторы рождения и уничтожения, где последние играют роль отклонений направлений спинов от их положений в основном состоянии. Следуя работам [8, 9] мы используем представление Барьяхтара–Криворучко–Яблонского (БКЯ) [10, 11] для узлов с четными координатами вдоль вектора $\vec{e}_1$, и обращенное во времени представление БКЯ для узлов с нечетными координатами вдоль вектора $\vec{e}_1$:

$$S_j^z = e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_j} \left(S - : \overline{B_j^\dagger B_j} : \right), \quad (3)$$

$$S_j^+ = S_j^x + iS_j^y = \sqrt{2S} B_j, \quad (4)$$

$$S_j^- = S_j^x - iS_j^y = \sqrt{2S} \left(B_j^\dagger - \frac{1}{2S} : \widetilde{B_j^\dagger B_j^\dagger B_j} : \right), \quad (5)$$

где $\vec{r}_j = (x_j, y_j)$ – радиус-вектор узла решетки j ,

$$B_j = \begin{cases} b_j, & \text{если } e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_j} = 1, \\ b_j^\dagger, & \text{если } e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_j} = -1, \end{cases} \quad (6)$$

– операторы спиновых отклонений, совпадающие с бозевскими операторами уничтожения b_j либо с их обращением во времени $b_j^\dagger$, :: обозначает операцию нормального упорядочения бозевских операторов b_j и $b_j^\dagger$. Использование операции обращения времени вместо поворотов на 180 градусов в данном случае является лучшей альтернативой, поскольку сохраняет очевидной инвариантность модели относительно поворотов на угол φ вокруг оси z в спиновом пространстве при которых $B_j \rightarrow \exp(i\varphi) B_j$. Наконец,

$$\overline{B_i^\dagger B_i} = B_i^\dagger B_i + (2S+1)c_i^\dagger c_i, \quad (7)$$

$$\widetilde{B_i^\dagger B_i} = B_i^\dagger B_i + 2(2S+1)c_i^\dagger c_i, \quad (8)$$

где c_i и $c_i^\dagger$ – операторы уничтожения и рождения псевдофермионов (ПФ). Без учета ПФ представление БКЯ трансформируется в представление Дайсона–Малева [12–14]. ПФ позволяют учесть кинематическое взаимодействие бозонов, отражающее конечность размерности пространства состояний спина $2S+1$. Представление Дайсона–Малева является точным только при условии выполнения ограничения $n_j \leq 2S$ на числа заполнения бозонов $n_j = b_j^\dagger b_j$, которое чрезвычайно сложно учесть. В представлении БКЯ можно не учитывать ограничений $n_j \leq 2S$, поскольку “нефизические” ПФ приводят к точному сокращению вкладов от “нефизических” бозонов с $n_j > 2S$. Это сокращение обеспечивается, в том числе, дополнительным фазовым множителем в выражении для свободной энергии

$$F = -T \ln \left(\text{Tr} \left\{ \exp \left(-\beta \left(H - \mu \sum_i S_i^z \right) - i\pi \sum_i c_i^\dagger c_i \right) \right\} \right), \quad (9)$$

который приводит к изменению статистики ПФ и отличает их от обычных фермионов. В выражении (9) $\beta = 1/T$ и мы, следуя [7], ввели химический потенциал μ , определяемый из уравнения $\partial F / \partial \mu = 0$ или, что то же самое, $\langle S_i^z \rangle = 0$. В этом подходе химический потенциал μ открывает щель в спектре спиновых волн $\sim \mu$, а когда она закрывается, происходит бозе-конденсация, соответствующая появлению дальнего дипольного магнитного порядка.

Подставляя представление (3)–(5) в (9), расцепляя члены четвертого порядка по операторам рождения и уничтожения по Хартри–Фоку и диагонализуя возникающий квадратичный гамильтониан преобразованием Боголюбова, получим

$$F = F_0 + T \sum_k \ln \left[2 \text{sh} \left(\frac{E(\vec{k})}{2T} \right) \right] - TN \ln(1 - e^{-\beta E_f}), \quad (10)$$

где N – полное число узлов решетки,

$$E(\vec{k}) = \sqrt{A(\vec{k}) A(\vec{k} + \vec{Q})} \quad (11)$$

– спектр бозонов,

$$A(\vec{k}) = S(J_{\text{eff}}(\vec{k}) - J_{\text{eff}}(\vec{Q})) - \mu, \quad (12)$$

$$E_f = -(2S+1)(SJ(\vec{Q}) + \mu) \quad (13)$$

– спектр ПФ,

$$J_{\text{eff}}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \gamma_{ij} J_{ij} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (14)$$

— фурье-образ параметров эффективного обменного взаимодействия

$$(J_{\text{eff}})_{ij} = \gamma_{ij} J_{ij}, \quad (15)$$

$$F_0 = \frac{S}{2} \sum_{ij} \gamma_{ij} J_{ij} [1 + S(2 - \gamma_{ij})] e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + N\mu \left(S + \frac{1}{2} \right). \quad (16)$$

Заметим, что параметры перенормировки обменного взаимодействия γ_{ij} также имеют смысл параметров ближнего порядка, поскольку

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = S^2 \gamma_{ij} e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}. \quad (17)$$

Величины γ_{ij} и μ определяются из условий стационарности свободной энергии, имеющих следующий вид

$$S\gamma_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \begin{cases} \frac{A(\vec{k}) + A(\vec{k} + \vec{Q})}{4E(\vec{k})} \text{cth} \left[\frac{E(\vec{k})}{2T} \right] e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}, & \text{если } e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = 1, \\ \frac{A(\vec{k}) - A(\vec{k} + \vec{Q})}{4E(\vec{k})} \text{cth} \left[\frac{E(\vec{k})}{2T} \right] e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}, & \text{если } e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = -1, \end{cases} \quad (18)$$

$$0 = \left(S + \frac{1}{2} \right) \text{cth} \left[\frac{E_f}{2T} \right] - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{A(\vec{k}) + A(\vec{k} + \vec{Q})}{4E(\vec{k})} \text{cth} \left[\frac{E(\vec{k})}{2T} \right]. \quad (19)$$

Устремляя в этих уравнениях E_f к бесконечности, можно получить версию уравнений ССВТ без ПФ, соответствующую представлению Дайсона–Малева.

Ковариантность уравнений (18)–(19) относительно преобразований решетки явно нарушена присутствием в них волнового вектора $\vec{Q}$, и из того, что γ_{ij} — решение, не следует, что преобразованное γ_{ij} также является решением. Более того, можно убедиться в отсутствии полностью симметричных решений с совпадающими $\gamma_{ij} \neq 0$ для первых соседей вдоль векторов $\vec{e}_1$ (γ_{1x}) и $\vec{e}_2$ (γ_{1y}). Для несовпадающих γ_{1x} и γ_{1y} выражение (14) принимает вид

$$J_{\text{eff}}(\vec{k}) = 4J_2[\eta\gamma_{1x}\cos(k_x) + \eta\gamma_{1y}\cos(k_y) + \gamma_2\cos(k_x)\cos(k_y)], \quad (20)$$

где параметр γ_2 соответствует вторым соседям. Величины γ_{1x} , γ_{1y} , γ_2 и μ определим численным решением уравнений (18)–(19).

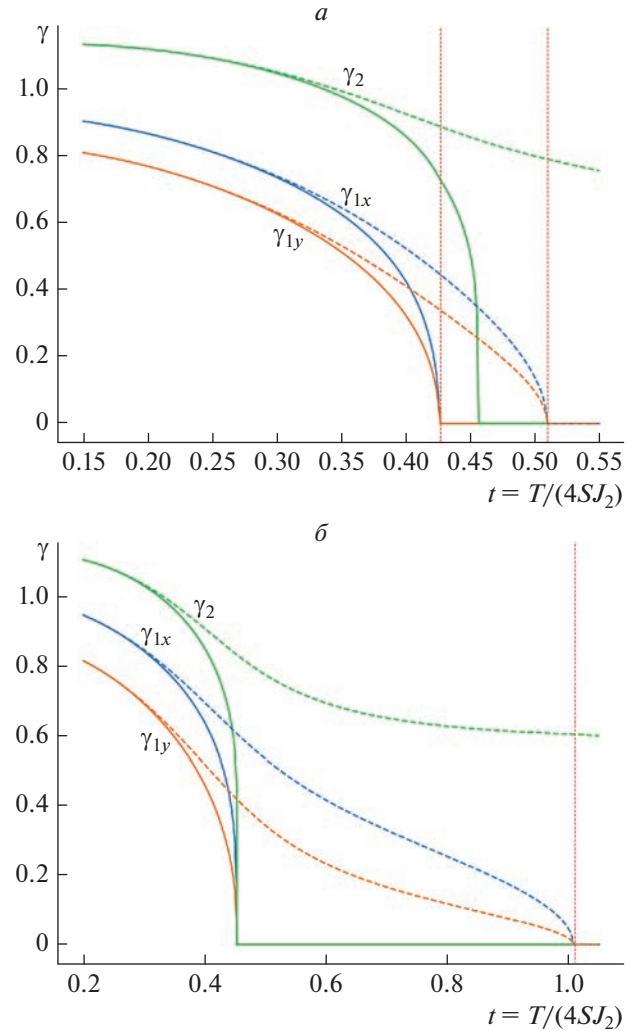


Рис. 1. Температурная зависимость параметров ближнего порядка для $S = 1/2$ и $\eta = 0.4$ (а), $\eta = 0.475$ (б). Сплошные (штриховые) линии соответствуют версии ССВТ с ПФ (с ПФ). Вертикальные тонкие пунктирные прямые линии отмечают точки нематического перехода второго рода.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 показаны температурные зависимости параметров ближнего порядка γ_{1x} , γ_{1y} , γ_2 в версиях ССВТ с ПФ и без них для спина $S = 1/2$ для модели Гейзенберга на двумерной квадратной решетке. В области $T \ll E_f$ обе версии ССВТ практически не отличаются. При не слишком больших $\eta < 0.475$ обе версии демонстрируют нематический фазовый переход второго рода, в точке которого T_n параметры γ_{1x} и γ_{1y} одновременно обращаются в нуль, восстанавливая таким образом нарушенную симметрию решетки относительно поворотов на $\pi/2$. Переходы первого и второго родов различались по наличию либо от-

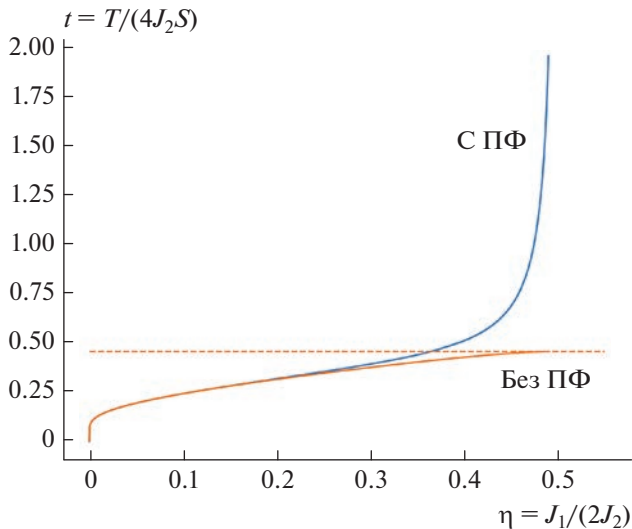


Рис. 2. Фазовые границы в координатах η – t для $S = 1/2$ в версиях ССВТ с псевдофермионами (одна сплошная линия) и без них (одна сплошная и одна штриховая линия). Сплошные (штриховые) линии соответствуют фазовым переходам второго (первого) рода.

существованию метастабильных состояний в точке перехода. При температуре T_0 выше температуры нематического перехода в версии без ПФ происходит еще один фазовый переход (на этот раз первого рода) в состояние, в котором полностью отсутствуют корреляции и $\gamma_{1x} = \gamma_{1y} = \gamma_2 = 0$. В версии с ПФ второй переход отсутствует. При достаточно больших $\eta \approx 0.475$ в версии без ПФ нематический переход сливается с переходом первого рода в трикритической точке.

На рис. 2 показана фазовая диаграмма в координатах η – T для обеих версий ССВТ и $S = 1/2$. В области малых $\eta \leq 0.2$ обе версии приводят к одинаковой температуре нематического перехода T_n . По мере приближения T_n к T_0 нарастает расхождение. При $\eta \approx 0.5$ значение T_n в версии с ПФ неограниченно возрастает, в то время как в версии без ПФ происходит слияние с T_0 . Температура перехода в состояние без корреляций $T_0 = 0.91081J_2$ не зависит от η .

Особый интерес представляет поведение T_n при $\eta \ll 1$. Так как T_n стремится к нулю, зависимость $T_n(\eta)$ определяется низкотемпературной физикой. Низкоэнергетические спин-волновые моды локализованы в окрестностях четырех точек зоны Бриллюэна $\vec{Q}_0 = (0,0)$, $\vec{Q}_1 = \vec{Q} = (\pi,0)$,

$\vec{Q}_2 = (0,\pi)$, $\vec{Q}_3 = (\pi,\pi)$ и имеют в пределе $\eta \rightarrow 0$ одинаковую энергию

$$E(\vec{Q}_i + \delta\vec{k}) \approx 4J_2S\gamma_2\sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2 + m^2}, \quad (21)$$

где

$$m = \sqrt{|\mu|/(2J_2S\gamma_2)} \quad (22)$$

имеет смысл обратной корреляционной длины. Выражение для m , полученное решением уравнения (19) при $T \rightarrow 0$, имеет хорошо известный экспоненциальный вид

$$m \sim t \exp[-\pi\gamma_2S_0/(2t)]/\gamma_2, \quad (23)$$

где $t = T/(4J_2S)$, S_0 – среднее значение магнитного момента в основном состоянии для $\eta = 0$ с учетом квантовых флуктуаций. Согласно [1], нематический фазовый переход происходит, когда $m \approx \eta$, что дает

$$t_n \approx \frac{\pi\gamma_2S_0}{2\ln(t_n/[\gamma_2\eta])} = \frac{0.5515}{\ln(t_n/(1.1571\eta))}, \quad (24)$$

где мы подставили значения $S_0 = 0.3034$ и $\gamma_2 = 1.1571$ из работы [7].

С другой стороны, численные данные, представленные на рис. 2 при $\eta < 0.1$ хорошо аппроксимируются формулой

$$t_n = a/(b + \ln(t_n/\eta)) \quad (25)$$

с $a = 0.502$ и $b = 1.29$, что находится в приемлемом согласии с оценкой (24).

Наконец, обсудим причину расхождения между двумя версиями ССВТ в области высоких температур. Из рис. 1б видно, что в версии с ПФ γ_2 не стремится к нулю при росте температуры, т.е. ближний порядок сохраняется даже при сколь угодно высоких температурах, что является нефизическим поведением. При очень высоких температурах свободная энергия определяется энтропией, равной

$$S_{\text{pf}} = N \ln(2S + 1) \quad (26)$$

в версии с ПФ и

$$S_b = N([n_b + 1]\ln[n_b + 1] - n_b \ln[n_b]) \quad (27)$$

в версии без ПФ, где $n_b = S$ – число бозонов. Однако энтропия бозонов S_b больше энтропии S_{pf} при любых значениях спина S . Соответственно, когда к энтропийному вкладу в свободную энергию добавляется отрицательная энергия антиферромагнитных взаимодействий, система без ПФ будет иметь большую тенденцию к переходу в полностью разупорядоченное состояние, чем система с ПФ. При $\gamma_{ij} = 0$ мы имеем систему независимых спинов, для которых существует только кинематическое взаимодействие, которое точно учитывается ПФ. Однако для физического пове-

дения при $\gamma_{ij} \neq 0$ точному учету кинематического взаимодействия, как оказывается, должен соответствовать более точный учет динамического взаимодействия.

Таким образом, в работе было исследовано температурное поведение параметров ближнего порядка в двух версиях самосогласованной спин-волновой теории для квантовой антиферромагнитной модели Гейзенберга со спином $1/2$ с учетом обменных параметров для первых (J_1) и вторых (J_2) соседей: с вспомогательными псевдофермионами и без них. В обеих версиях ближний порядок при низких температурах нарушает симметрию модели относительно поворотов решетки на $\pi/2$ (изинговская нематическая фаза). При повышении температуры симметрия решетки восстанавливается посредством фазового перехода второго рода. Была вычислена зависимость безразмерной температуры фазового перехода t_n от отношения $\eta = J_1/(2J_2)$. Показано, что при $\eta \ll 1$ эта зависимость хорошо аппроксимируется формулой (25), согласующейся с результатом ренормгруппы [1].

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема “Квант” гос. рег. № 122021000038-7).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chandra P., Coleman P., Larkin A.I. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 88.
2. Weber C., Capriotti L., Misguich G. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. Art. No. 177202.
3. Capriotti L., Fubini A., Roscilde T., Tognetti V. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. Art. No. 157202.
4. Xu C., Müller M., Sachdev S. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. Art. No. 20501.
5. Fang C., Yao H., Tsai W., Hu J., Kivelson. S.A. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Art. No. 224509.
6. Fernandes R.M., Chubukov A.V., Knolle J. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. Art. No. 24534.
7. Takahashi M. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 2494.
8. Irkhin V.Yu., Katanin A.A., Katsnelson M.I. // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 1082.
9. Катанин А.А., Ирхин В.Ю. // УФН. 2007. Т. 177. № 6. С. 639; Irkhin V.Yu., Katanin A.A. // Phys. Usp. 2007. V. 50. No. 6. P. 613.
10. Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 2. С. 602; Bar'yakhtar V.G., Krivoruchko V.N., Yablonskii D.A. // Sov. Phys. JETP. 1983. V. 58. No. 2. P. 351.
11. Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма. Киев: Наукова думка, 1984. 336 с.
12. Dyson F.J. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1217.
13. Dyson F.J. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1230.
14. Малеев С.В. // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 1010; Maleev S.V. // Sov. Phys. JETP. 1958. V. 6. P. 776.

Ising nematic in J_1 – J_2 square-lattice Heisenberg model within self-consistent spin-wave theory

A. N. Ignatenko^{a, *}, V. Yu. Irkhin^a

^aMikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, 620108 Russia

*e-mail: ignatenko@imp.uran.ru

We study the Ising nematic ordering, the Ising nematic phase transition, and the temperature behavior of the short-range order parameters in spin $1/2$ quantum Heisenberg model on two-dimensional square-lattice with exchange parameters of nearest and next-nearest neighbors. Two versions of the self-consistent spin-wave theory with and without auxiliary pseudofermions are considered.

Keywords: magnetism with localized moments, low-dimensional magnetism, two-dimensional magnetism, Heisenberg model, J_1 – J_2 Heisenberg model on square lattice, Ising nematic, spin-wave theory, self-consistent spin-wave theory, modified spin-wave theory, pseudofermions