

Ferromagnetismo débil en La_2CuO_4 : interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

L. O. Manuel, C. J. Gazza, A. E. Trumper y H. A. Ceccatto

Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR, y Departamento de Física, FCEIA, UNR.

e-mail: luis@ifir.edu.ar

Aplicamos una aproximación de bosones de Schwinger al modelo de Heisenberg con acoplamiento espín-órbita. Expresamos las interacciones anisotrópicas manteniendo las simetrías correctas presentes en la representación de espín, lo que nos permite realizar una aproximación de campo medio que preserva las simetrías originales. Se calcularon diferentes magnitudes físicas: energía, relaciones de dispersión, momento ferromagnético y gap de anisotropía. Nuestros resultados reproducen las predicciones de ondas de espín convencional en el límite semiclásico, y muestran una renormalización en el límite cuántico $S = 1/2$.

We present a Schwinger-boson approach to the Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Unlike previous studies of this model by linear spin-wave theory, our approach takes into account magnon-magnon interactions, and includes the effects of three-boson terms characteristic of noncollinear phases. We write the anisotropic interactions in terms of Schwinger bosons keeping the correct symmetries present in the spin representation, which allows us to perform a conserving mean-field approximation. Our results reproduce the linear spin-wave predictions in the semiclassical large- S limit, and show a sizeable renormalization in the strong quantum limit $S = 1/2$.

La introducción del acoplamiento espín órbita en el modelo de Hubbard modifica el término de salto, permitiendo procesos que no conservan el espín. Siguiendo el formalismo de Anderson¹, a segundo orden perturbativo de dicho acoplamiento, se obtiene la interacción de Dzyaloshinskii-Moriya^{2,3} que esta dada por:

$$H_{ij} = J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_i \cdot \bar{\Gamma}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j \quad (1)$$

donde $\bar{\Gamma}_{ij}$ es un tensor simétrico 3×3 . El primer término es el intercambio simétrico isotrópico. El segundo y el tercero representan las anisotropías antisimétricas y simétricas respectivamente.

Recientemente, Thio *et al.*⁴ propusieron que las propiedades magnéticas del La_2CuO_4 son descritas por el hamiltoniano (1). Coffey y colaboradores⁵ también invocaron este hamiltoniano para describir los planos CuO_2 en los cupratos. Los mismos mostraron que \mathbf{D}_{ij} no podía ser el mismo para todas las ligaduras (i, j) , como había sido supuesto por otros autores, ya que la dependencia está determinada por las propiedades de simetría de

la estructura cristalina.

Representación bosónica

Los dos últimos términos de (1) son las contribuciones que vienen de la interacción espín-órbita de los electrones originales. Estas contienen al vector de Moriya antisimétrico $\mathbf{D}_{ij} = 2Jr\hat{\mathbf{d}}_{ij}$ ($r = \tan \theta$), y al tensor anisotrópico simétrico $\bar{\Gamma}$. En realidad, (1) puede ser escrita de manera más simple en la forma

$$E_{ij} = JS_i \cdot S_j + 2Jr\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) +$$

$$Jr^2 [2(\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)(\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] = J_0 \mathbf{S}'_i \cdot \mathbf{S}'_j \quad (2)$$

donde $J_0 = 4t^2/U$. Los espines $\mathbf{S}'_i, \mathbf{S}'_j$ se obtienen rotando los originales alrededor del eje $\hat{\mathbf{d}}_{ij}$:

$$\mathbf{S}'_k = (1 - \cos \theta_k)(\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_k)\hat{\mathbf{d}}_{ij} + \cos \theta_k \mathbf{S}_k - \sin \theta_k \mathbf{S}_k \times \hat{\mathbf{d}}_{ij},$$

donde $k = i$ ó j , y los ángulos de la rotación vienen dados por $\theta_i = \theta = -\theta_j$.

En este punto introducimos la representación de Schwinger. La estructura invariante rotacional de (2) viene dada por

$$\mathbf{S}'_i \cdot \mathbf{S}'_j =: B'_{ij} \dagger B'_{ij} : - A'_{ij} \dagger A'_{ij} , \quad (3)$$

en términos de los singletes de $SU(2)$

$$B'_{ij} \dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} a'_{i\sigma} \dagger a'_{j\sigma} , \quad A'_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma a'_{i\sigma} \dagger a'_{j,-\sigma} .$$

Una rotación en un ángulo θ alrededor del eje $\hat{\mathbf{d}}$ se logra mediante la matriz de $SU(2)$ $\mathcal{U}_{\theta} = \exp[-i(\theta/2)\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \boldsymbol{\sigma}]$. De esta forma tenemos $\mathbf{a}' = \mathcal{U}_{\theta} \mathbf{a}$, y esta relación nos permite expresar los singletes A', B' en términos de los espinores no rotados:

$$B'_{ij} \dagger = \cos \theta B_{ij} \dagger + \sin \theta C_{ij} \dagger , \quad A'_{ij} = \cos \theta A_{ij} - \sin \theta D_{ij} . \quad (4)$$

Además de los singletes A, B hemos definido

$$C_{ij} \dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} a_{i\sigma} \dagger (i\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\sigma'} a_{j\sigma'} ,$$

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} a_{i\sigma} (\sigma^y \hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{\sigma\sigma'} a_{j\sigma'} .$$

Estos operadores son invariantes ante rotaciones alrededor del eje $\hat{\mathbf{d}}$. Para poder representar las interacciones entre espines en términos de bosones de Schwinger, reemplazamos (3) y (4) en (2):

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j =: B_{ij} \dagger B_{ij} : - A_{ij} \dagger A_{ij}$$

$$\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) = \frac{1}{2} (: B_{ij} \dagger C_{ij} : + A_{ij} \dagger D_{ij} + h.c.)$$

$$2(\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_i)(\hat{\mathbf{d}}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j =: C_{ij} \dagger C_{ij} : - D_{ij} \dagger D_{ij} .$$

De esta manera los términos de Dzyaloshinskii-Moriya se expresan como productos bilineales de operadores bosónicos, con las mismas propiedades rotacionales de las interacciones de espín originales. Esto nos permite desacoplar dichos términos manteniendo las simetrías correctas.

Estado fundamental clásico

Para los planos CuO_2 en la fase ortorrómbica de baja temperatura (OBT) del La_2CuO_4 , la simetría de la estructura del cristal nos lleva a un patrón en los vectores de Moriya como el que mostramos en la Fig. 1.

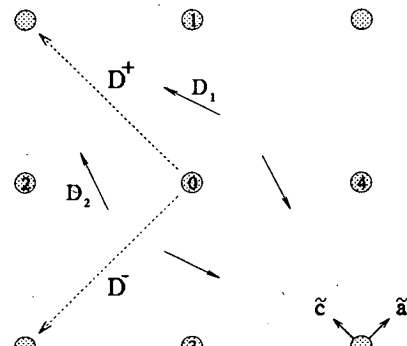


FIG. 1. Sitios de los coppers en los planos CuO_2 . Indicamos los ejes ortorrómbicos $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{c}}$, los vectores de Moriya \mathbf{D}_{ij} , y los correspondientes vectores \mathbf{D}^{\pm} definidos en el texto.

Los vectores de Moriya alternan en signo de ligadura en ligadura: $\mathbf{D}_1 = D\hat{\mathbf{d}}_{0i} = -D\hat{\mathbf{d}}_{30}$ y $\mathbf{D}_2 = D\hat{\mathbf{d}}_{20} = -D\hat{\mathbf{d}}_{04}$, con $\hat{\mathbf{d}}_{0i} = (-\sin \alpha, \cos \alpha, 0)$ y $\hat{\mathbf{d}}_{20} = (\sin \alpha, \cos \alpha, 0)$ ($D = 2Jr$). Notar que usamos coordenadas (x, y) a lo largo de los ejes ortorrómbicos $\tilde{\mathbf{a}}, \tilde{\mathbf{c}}$, y que debido a las simetrías solamente es necesario considerar $0 \leq \alpha \leq \pi/2$. De esta manera, la estructura magnética puede ser descrita en términos de dos subredes interpenetradas. Definiendo $\mathbf{D}^{\pm} = (\mathbf{D}_1 \pm \mathbf{D}_2)/2$, se puede mostrar⁶ que el sistema desarrolla un momento ferromagnético neto únicamente cuando ambos vectores \mathbf{D}^- y \mathbf{D}^+ son distintos de cero ($\alpha \neq 0, \pi/2$).

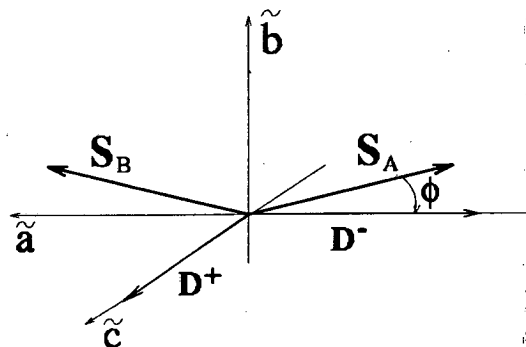


FIG. 2. Magnetizaciones en cada subred, $\mathbf{S}_A, \mathbf{S}_B$ y sus relaciones con los vectores \mathbf{D}^{\pm} .

En tal caso la magnetización "staggered" del estado fundamental está dirigida a lo largo de \mathbf{D}^- , y el momento ferromagnético neto es proporcional a $\mathbf{D}^+ \times \mathbf{D}^-$ (ver Fig. 2).

Desde el punto de vista de dos subredes, el estado fundamental clásico tiene magnetizaciones $\mathbf{S}_A = (S \cos \phi, 0, S \sin \phi)$, $\mathbf{S}_B = (-S \cos \phi, 0, S \sin \phi)$, con $\tan \phi = r \cos \alpha$. Con la intención de hacer contacto con la teoría desarrollada en Ref. 7, es conveniente describir este estado como un orden espiral conmensurado en una red distorsionada (Fig. 3). En la nueva red cuadrada decorada el orden magnético está dado por $\mathbf{S}_i = (S \sin \vec{Q} \cdot \vec{r}_i, 0, S \cos \vec{Q} \cdot \vec{r}_i)$, con vector de onda magnético $\vec{Q} = (2\pi/a, 0)$. El estado fundamental clásico se puede describir así condensando los bosones de Schwinger de acuerdo a $a_{\uparrow i}^\dagger = a_{\uparrow i} = \sqrt{2S} \cos \vec{Q} \cdot \vec{r}_i / 2$ y $a_{\downarrow i}^\dagger = a_{\downarrow i} = \sqrt{2S} \sin \vec{Q} \cdot \vec{r}_i / 2$.

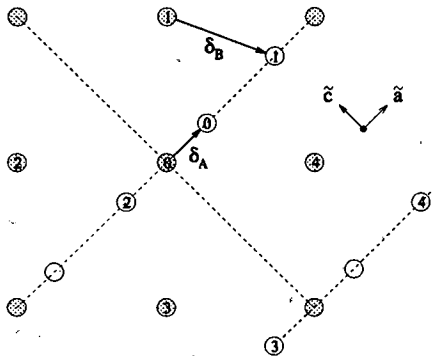


FIG. 3. Desplazamientos de los átomos en las subredes A y B, y estructura de la nueva red decorada.

Descripción cuántica en campo medio

Una vez que (2) ha sido expresado en términos de bosones de Schwinger, los productos de cuatro bosones se desacoplan usando como parámetros de orden los valores medios de las correlaciones A, B, C, D entre sitios en diferentes subredes. De esta forma el hamiltoniano de campo medio resulta:

$$H_{MF} = \sum_{i, \vec{\delta}} [B(\vec{\delta}) B_{i, i+\vec{\delta}}^\dagger - A^*(\vec{\delta}) A_{i, i+\vec{\delta}} + \text{H.c.}] - N \sum_{\vec{\delta}} (|B(\vec{\delta})|^2 - |A(\vec{\delta})|^2),$$

donde $B_{i, i+\vec{\delta}} = B_{i, i+\vec{\delta}} + r C_{i, i+\vec{\delta}}$, $A_{i, i+\vec{\delta}} = A_{i, i+\vec{\delta}} - r D_{i, i+\vec{\delta}}$, y $B(\vec{\delta}), A(\vec{\delta})$ son sus correspondientes valores medios. Con N indicamos el número de celdas unidad decoradas, e i corre sobre la subred A.

La diagonalización paraunitaria de H_{MF} produce las relaciones de dispersión para las cuasipartículas, que consisten en dos bandas, cada una de ellas doblemente degenerada. Como era de esperar, para el caso no frustrado las dos bandas se degeneran y corresponden a las de un antiferromagneto con la interacción renormalizada $J(1+r^2) = J/\cos^2 \theta \equiv J_0$ (ver (2)).

Resultados

La minimización de la energía del estado fundamental respecto de los parámetros arroja los siguientes resultados: Para el caso no frustrado ($\alpha = 0$) obtenemos, como esperábamos, las bandas degeneradas correspondientes a un antiferromagneto isotrópico con acoplamiento J_0 . Cuando α comienza a crecer desde cero, una de las ramas doblemente degenerada desarrolla un gap en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, que corresponde a los gaps idénticos en y fuera del plano, asociados a la anisotropía. Las otras ramas resultan no demasiado afectadas, es decir, permanecen casi iguales al caso isotrópico. Para S grande las ramas con gap en la aproximación de bosones de Schwinger coinciden con la predicción de la teoría de ondas de espín^{8,9}.

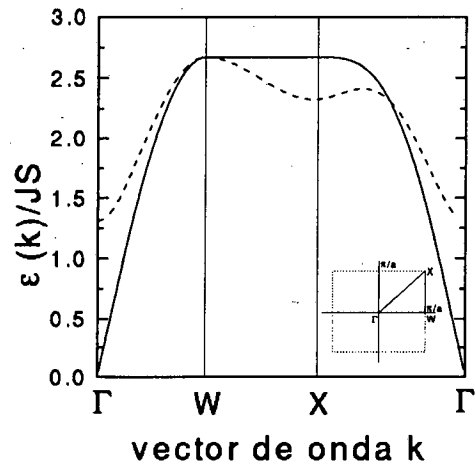


FIG. 4. Relaciones de dispersión de las cuasi-partículas para $r = 0.4$ y $\alpha = \pi/4$, a lo largo del camino $\Gamma - W - X$ mostrado en la inserción.

En la Fig. 4 dibujamos las ramas degeneradas (líneas llena y de trazos) a lo largo del camino típico $\Gamma - W - X$, para $r = 0.4$ y $\alpha = \pi/4$. La misma figura muestra la rama degenerada predicha por la teoría de ondas de espín armónica (línea de puntos).

En la Fig. 5 graficamos la componente S_z del espín como función de α , para varios valores de r . Como esperábamos⁶, la misma va a cero para $\alpha = \pi/2$, donde el vector de Dzyaloshinskii \mathbf{D}^+ se anula y la configuración del estado fundamental clásico es completamente antiferromagnética. Los valores en $\alpha = 0$ corresponden al momento ferromagnético máximo en el caso sin frustración ($\mathbf{D}^- = 0$). Sin embargo, estos resultados son inobservables ya que como indicamos anteriormente en este caso el hamiltoniano se hace isomorfo al modelo de Heisenberg isotrópico¹⁰.

En conclusión, adaptamos la aproximación de bosones de Schwinger al modelo de Heisenberg con interacción de DM. Mostramos como bosonizar las interacciones anisotrópicas manteniendo las simetrías correctas, lo que nos permitió realizar una aproximación de campo medio conservativa. A diferencia de estudios previos para este modelo por medio de la teoría de ondas de espín, nuestra aproximación toma en cuenta las interacciones magnón-magnón aún a orden cero del cálculo. Nuestros resultados recobran las predicciones de ondas de espín en el límite semiclásico (S grande), y muestran una pequeña renormalización en el límite fuertemente cuántico ($S = 1/2$).

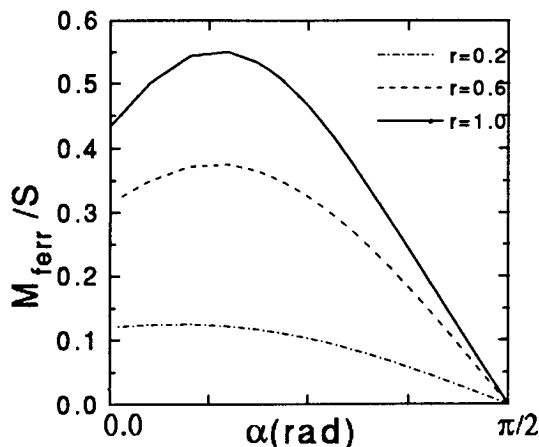


FIG. 5. Momento ferromagnético neto como función de α para varios valores de r .

- ¹ P.W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).
- ² I. E. Dzyaloshinski, J. Chem. Solids **4**, 241 (1958).
- ³ T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960); *ibid*, Phys. Rev. Lett. **4**, 228 (1960).
- ⁴ T. Thio, *et al.*, Phys. Rev. B **38**, 905 (1988); *ibid* **41**, 231 (1990).
- ⁵ D. Coffey, K.S. Bedell, and S.A. Trugman, Phys. Rev. B **42**, 6509 (1990); D. Coffey, T.M. Rice, and F.C. Zhang, Phys. Rev. B **44**, 10112 (1991); *ibid.* **46**, 5884 (E) (1992)
- ⁶ L. Shekhtman, Amnon Aharony, and O. Entin-Wohlman, Phys. Rev. B **47**, 174 (1993).
- ⁷ H. A. Ceccatto, C. J. Gazza and A. E. Trumper, Phys. Rev. B **47**, 12329 (1993).
- ⁸ O. Entin-Wohlman, Amnon Aharony, and L. Shekhtman, Phys. Rev. B **50**, 3068 (1994).
- ⁹ N.E. Bonesteel, Phys. Rev. B **47**, 11302 (1993).
- ¹⁰ L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and Amnon Aharony, Phys. Rev. Lett. **69**, 836 (1992).