

# 双层 Heisenberg 反铁磁体中的量子相变

余登科 顾 强 汪汉廷 沈觉涟

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1999 年 6 月 10 日收到)

用键算符平均场方法研究了双层正方格子 Heisenberg 反铁磁体中的量子相变问题. 得到的临界点以及低温下的量子临界行为符合相关的数值计算结果和非线性  $\sigma$  模型的结果. 在数值计算不能达到的极低温度范围 ( $T \leq 0.3J_1$ ,  $J_1$  为面内最近邻反铁磁交换作用), 给出了量子临界行为的新证据.

PACC: 7550E; 7540C; 7510J

## 1 引 言

本文研究了一个在双层正方格子上自旋为  $-1/2$  的量子反铁磁体系<sup>[1]</sup>

$$H = J_1 \sum_{a, \langle i, j \rangle} S_{a, i} \cdot S_{a, j} + J_2 \sum_i S_{1, i} \cdot S_{2, i}, \quad (1)$$

式中  $a = 1, 2$  代表双层,  $\langle i, j \rangle$  表示正方格子上的最近邻.  $J_1$  和  $J_2$  为反铁磁交换作用. 当  $J_2/J_1$  很大时, 体系的基态是自旋单态的直积. 体系是无序的, 并且有能隙. 当  $J_2/J_1$  很小时, 体系的基态是 Néel 态, 无能隙. 在某个特定的  $J_2/J_1$ , 体系经历一个有序-无序相变. 对这个模型感兴趣有两方面的原因. 一是在实验上, 高温超导体  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  正常态的反常磁性性质被认为与它处在这个模型的量子临界点附近有关. 另一个原因是在于理论方面的兴趣. 这个模型可能是具有  $O(3)$  普适类的量子相变且不必引入阻挫的最简单的自旋体系. 通过影射到量子非线性  $\sigma$  模型的办法, 获得了对临界点附近可观测量的定量预测<sup>[2]</sup>. 数值上, 量子蒙特卡罗 (QMC) 模拟<sup>[3, 4]</sup> 和级数展开<sup>[5]</sup> 都给出了有序-无序转变的临界值  $(J_2/J_1)_c \approx 2.5$ . 解析方法中, 修正的自旋波理论<sup>[6]</sup> 和 Schwinger 玻色子平均场方法<sup>[7]</sup> 都给出临界值  $(J_2/J_1)_c \approx 4.3$ , 并且是一级相变. 因此, 解析结果与数值结果存在较大的差异. Chubukov 等<sup>[8]</sup> 指出, 造成这种差别的原因在于自旋波理论忽略了纵向自旋涨落, 因而不能得到正确结果.

我们所采用的键算符平均场方法, 包含了纵向自旋涨落, 克服了上述自旋波理论的缺点, 给出了正确结果. 本方法合理地描述了零温下的有序-无序相变和低温下的量子临界行为. 我们得到的量子转变点在  $(J_2/J_1)_c \approx 2.29$ , 非常接近数值结果. 在临界点和低温下 ( $T \leq 0.4J_1$ ), 算得的自旋波质量、静态均匀磁化率和关联长度的倒数都与温度成很好的线性关系, 与量子非线性  $\sigma$  模型的结果符合得非常好. 这是用解析方法获得了与数值计算和  $\sigma$  模型完全一致的结果.

## 2 键算符表示

我们用键算符平均场方法研究这个模型. 对两个 1/2 的自旋  $S_1$  和  $S_2$ , Sachdev 等<sup>[9]</sup> 引入了四个算符  $s^\dagger, t_x^\dagger, t_y^\dagger, t_z^\dagger$ , 以产生自旋单态  $|s\rangle$  和三重态  $|t_x\rangle, |t_y\rangle, |t_z\rangle$ . 自旋  $S_1$  和  $S_2$  可用键算符表示为

$$\begin{aligned} S_{1\alpha} &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\ S_{2\alpha} &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $\alpha = x, y, z$ , 重复指标代表求和.  $s$  和  $t_\alpha$  满足玻色对易关系. 约束条件是  $s^\dagger s + t_\alpha^\dagger t_\alpha = 1$ . 选择上下两层中近邻的两个自旋为  $S_1$  和  $S_2$ , 我们得到了方程(1)的键算符表示,

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 + H_2, \\ H_0 &= \sum_i J_2 \left( -\frac{3}{4} s_i^\dagger s_i + \frac{1}{4} t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} \right) - \mu_i (s_i^\dagger s_i + t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} - 1), \\ H_1 &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,\delta} [s_i^\dagger s_{i+\delta}^\dagger t_{i\alpha} t_{i+\delta,\alpha} + s_{i+\delta}^\dagger s_i^\dagger t_{i\alpha} t_{i+\delta,\alpha} + \text{H. c.}], \\ H_2 &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,\delta} - (1 - \delta_{\alpha\beta}) (t_{i\alpha}^\dagger t_{i+\delta,\alpha}^\dagger t_{i\beta} t_{i+\delta,\beta} - t_{i\alpha}^\dagger t_{i+\delta,\beta}^\dagger t_{i+\delta,\alpha} t_{i\beta}). \end{aligned} \quad (3)$$

我们加了  $\mu_i$  项来满足约束条件. 在键算符表象下, 体系的有序态和无序态可以作如下描述<sup>[9]</sup>: (i) 二聚化态: 这是磁无序的相, 且有  $\langle s \rangle \neq 0$ ,  $\langle t_\alpha \rangle = 0$  和  $\langle t_\alpha t_\beta \rangle = C\delta_{\alpha\beta}$ . (ii) 磁有序相:  $t_\alpha$  玻色子的凝聚导致了长程序, 且有  $\langle t_\alpha \rangle \neq 0$  和  $\langle s \rangle \neq 0$ .  $t_\alpha$  玻色子凝聚的波矢量和极化方向决定了这种磁序的性质.

键算符平均场理论可以合理地描述本模型在绝对零度下的有序-无序相变和低温量子临界行为, 因为它包含了纵向的自旋涨落.

## 3 绝对零度下的有序-无序相变

首先讨论  $T=0$  时无序相的性质. 由于  $H_2$  的贡献较小, 故忽略  $H_2$ . 设  $\langle S_i \rangle = \bar{s}$ , 并把局域的约束  $\mu_i$  变成一个整体的约束  $\mu$ . 通过傅里叶变换和博戈留玻夫变换, 我们得到对角化的哈密顿量,

$$\begin{aligned} H_m(\mu, \bar{s}) &= N \left( -\frac{3}{4} J_2 - \mu \right) \bar{s}^2 + N\mu \\ &\quad + \frac{3}{2} \sum_k (\omega_k - \Lambda_k) + \sum_k \omega_k \xi_{k\alpha}^\dagger \xi_{k\alpha}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $\xi_{k\alpha}$  为玻色子,

$$\omega_k = [\Lambda_k^2 - (2\Delta_k)^2]^{1/2},$$

$$\begin{aligned}\Lambda_k &= J_2/4 - \mu + 2J_1\bar{s}^2\gamma_k, \\ \Delta_k &= J_1\bar{s}^2\gamma_k, \\ \gamma_k &= \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y).\end{aligned}$$

参数  $\bar{s}, \mu$  的自洽方程为

$$\begin{aligned}\bar{s}^2 &= \frac{5}{2} - \frac{3}{N} \sum_k \frac{1}{\sqrt{1-\Gamma_k^2}} \left( n_k + \frac{1}{2} \right), \\ \mu &= -\frac{3}{4}J_2 + \frac{6J_1}{N} \sum_k \frac{\gamma_k(1-\Gamma_k)}{\sqrt{1-\Gamma_k^2}} \left( n_k + \frac{1}{2} \right),\end{aligned}\quad (5)$$

其中

$$\Gamma_k = (2\Delta_k)/\Lambda_k,$$

$n_k$  为玻色子占据数.

绝对零度下,  $n_k = 0$ . 当  $J_2/J_1$  足够大时, 能谱  $\omega_k$  在布里渊区都是实的和正的. 能带的极小值在  $k = (\pi, \pi)$ . 给出能隙

$$\Delta = \sqrt{\left(\frac{J_2}{4} - \mu\right)\left(\frac{J_2}{4} - \mu - 4J_1\bar{s}^2\right)}.\quad (6)$$

能隙随  $J_1$  增大而减小, 并在  $J_1/J_2 \simeq 0.436$  达到零. 因此临界点在  $(J_2/J_1)_c \simeq 2.29$ . 符合量子蒙特卡罗和级数展开的结果.

下面讨论有序态. 假定  $t_z$  凝聚在  $(\pi, \pi)$ ,  $t_{kx} = \bar{t}\delta_{k,\pi} + \bar{t}_{kx}$ . 我们得到

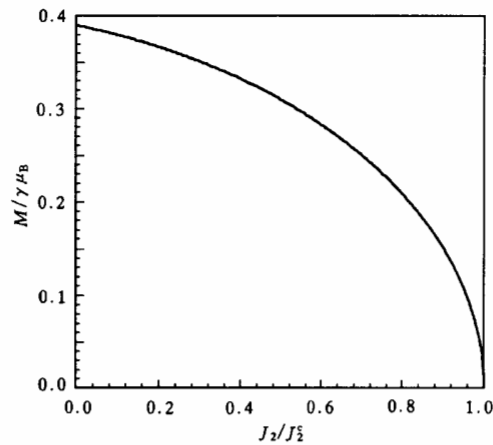
$$\begin{aligned}H_m(\mu, \bar{s}, \bar{t}) &= N \left[ \left(-\frac{3}{4}J_2 - \mu\right)\bar{s}^2 + \left(\frac{J_2}{4} - \mu\right)\bar{t}^2 - 4J_1\bar{s}^2\bar{t}^2 + \mu \right] \\ &\quad + \frac{3}{2} \sum_k (\omega_k - \Delta_k) + \sum_k \omega_k (\xi_{kx}^\dagger \xi_{kx} + \bar{\eta}_k^\dagger \bar{\eta}_k),\end{aligned}\quad (7)$$

其中  $\omega_k$  与无序态的一样;  $\xi_{k\alpha}^\dagger \xi_{k\alpha}$  ( $\alpha = x, y$ ) 为横模;  $\bar{\eta}_k^\dagger \bar{\eta}_k$  为纵模, 被自旋波理论忽略了. 对纵模的求和不包括  $k = (\pi, \pi)$ . 可以看出, 纵模与横模是简并的. 当考虑  $H_2$  的影响时, 这种简并得到解除.

当  $\bar{t} \neq 0$ , 体系有长程序,  $M = \frac{1}{2} \langle S_1^x - S_2^x \rangle = \sqrt{\bar{s}^2 \bar{t}^2}$ . 解  $\bar{s}, \bar{t}$  和  $\mu$  的自洽方程, 得到

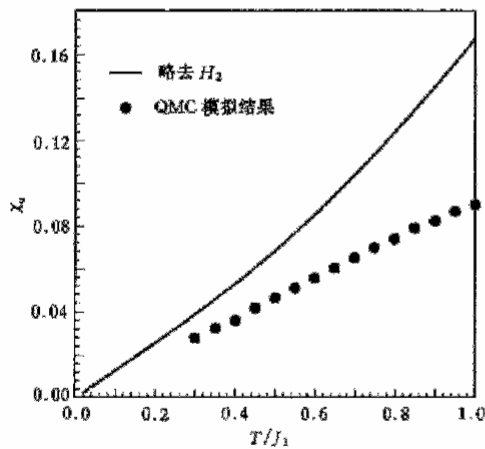
$$M = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{J_2}{4J_1} + 1.0629\right)\left(-\frac{J_2}{4J_1} + 0.5713\right)}.\quad (8)$$

令  $M = 0$ , 我们得到  $J_2^c = 2.285J_1$ , 与从无序态获得的结果完全一致. 在临界点附近, 有  $M \propto (J_2^c - J_2)^{1/2}$ . 当  $J_2 = 0$  时,  $M = 0.39$ .  $M$  随  $J_2$  增加而单调下降 (见图 1). 总之, 自旋波理论忽略了纵向自旋涨落, 只能在小的层间耦合时得到合理结果. 键算符理论计入了纵向自旋涨落, 因此能够在临界点附近给出正确结果, 但在小的层间耦合时不能得到准确结果.

图1 子格磁化  $M$  随层间耦合的变化

#### 4 低温下的量子临界行为

下面讨论低温下体系在临界点上的量子临界行为. 利用  $O(3)$   $\sigma$  模型的  $1/N$  展开<sup>[2]</sup>, 文献[2]给出体系的自旋波质量、静态均匀磁化率以及关联长度的倒数在低温下都

图2 临界点上体系的均匀磁化率  $\chi_0$  随温度  $T$  的变化保持较好的线性关系

与温度成正比. 他们的结论已经被量子蒙特卡罗模拟在  $T \geq 0.3J_1$  温区内证实<sup>[3,4]</sup>. 键算符平均场方法能够在极低的温区内 ( $T \leq 0.4J_1$ ) 对体系的量子临界行为给出合理的描述. 它们符合  $\sigma$  模型的预测, 为极低温区内的量子临界行为给出了新的证据.

$\sigma$  模型给出自旋波质量  $m = 1.04T$ , 蒙特卡罗模拟结果为  $m = 1.02T$ , 我们算得的结果为  $m \simeq 0.99T$ . 它们相互之间符合得不错.

$\sigma$  模型预测体系的均匀磁化率低温下正比于  $T$ . 如图2所示, 所得的均匀磁化率与温度在  $T \leq 0.4J_1$  时保持较好的线性关系.

$\sigma$  模型给出关联长度的倒数与温度也是呈线性关系. 图3示出算得的  $\xi^{-1}$  在  $T \leq 0.4J_1$  时与温度呈现较好的线性关系. 采用最小二乘法进行拟合, 所得结果  $\xi^{-1} \simeq 0.60T$ , 与量子蒙特卡罗模拟符合得较好.

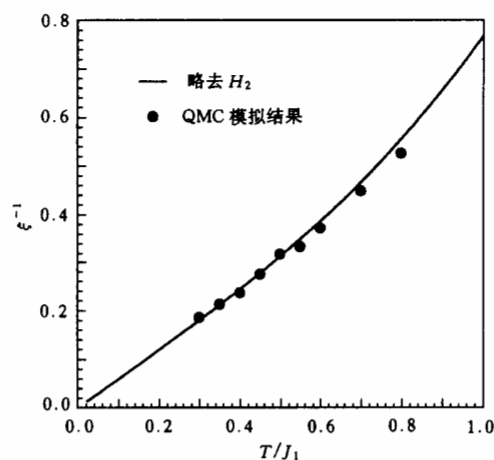


图3 临界点上体系的关联长度倒数  $\xi^{-1}$  与温度呈较好的线性关系

## 5 结 语

本文用键算符平均场方法研究了双层正方格子 Heisenberg 反铁磁体中的量子相变问题. 得到的临界点以及低温下的量子临界行为符合相关的数值计算结果和非线性  $\sigma$  模型的结果. 在数值计算不能达到的极低温范围, 给出了量子临界行为的新证据.

- [1] A. J. Millis, H. Monien, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 2810; *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 16606.
- [2] A. V. Chubukov, S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.*, **71**(1993), 169; A. V. Chubukov, S. Sachdev, J. Ye, *Phys. Rev.*, **B49**(1994), 11919.
- [3] A. W. Sandvik, D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2777.
- [4] A. W. Sandvik, A. V. Chubukov, S. Sachdev, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 16483.
- [5] W. H. Zheng, *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 12267.
- [6] K. Hida, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **59**(1990), 2230.
- [7] K. K. Ng, F. C. Zhang, M. Ma, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 12196.
- [8] A. V. Chubukov, D. K. Morr, *Phys. Rev.*, **B52**(1995), 3521.
- [9] S. Sachdev, R. N. Bhatt, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 9323.

## QUANTUM PHASE TRANSITION IN A BILAYER HEISENBERG ANTIFERROMAGNET

YU DENG-KE GU QIANG WANG HAN-TING SHEN JUE-LIAN

(*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*)

(Received 10 June 1999)

### ABSTRACT

In this paper we use a bond-operator mean-field theory to study the quantum phase transition in the bilayer Heisenberg antiferromagnet. The obtained critical point and low temperature quantum critical behavior are consistent with the numerical results and the nonlinear  $\sigma$  model results. In the very low temperature ( $T \leq 0.3J_1$ ,  $J_1$  is the in-plane antiferromagnetic coupling), where the numerical results are not available, present paper gives new evidence for the quantum critical behavior.

**PACC:** 7550E; 7540C; 7510J