

## Fases cuánticas y degeneración clásica en un antiferromagneto cuántico sobre la red de panal de abejas de dos capas

Carlos A. Lamas<sup>1, 2</sup>, Marcelo Arlego<sup>2</sup>

### Resumen

En este trabajo estudiamos la evolución de una fase de dímeros cuánticos sobre la red de tipo panal de abejas utilizando una representación de los operadores de espín en términos de operadores bosónicos [1, 2]. Este modelo ha sido propuesto para describir las propiedades del material  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  [2, 3, 4], por lo que el presente estudio puede ser relevante para describir el magnetismo de este material y otros con características similares. Llevando a cabo un desacoplamiento de campo medio, calculamos la relación de dispersión y a partir de la misma determinamos el gap de espín. Interesantemente, aunque el cierre de gap es calculado en un modelo puramente cuántico, éste ocurre sobre una curva continua en el espacio de momentos que coincide con la variedad de estados clásicos de mínima energía [5].

### Abstract

In this work, we study the evolution of a quantum dimer phase over the honeycomb bilayer lattice using a representation of the spins in terms of bosonic operators [1, 2]. This model has been proposed to describe the properties of the material  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  [2, 3, 4], so the present study may be relevant to describe the magnetism in this compound and materials with similar characteristics. Performing a mean field decoupling, we calculate the dispersion relation and determine the spin gap. Interestingly, although the gap closure calculation is based on a purely quantum model, it occurs on a continuous curve in the momentum space that coincides with the variety of classical states of minimum energy [5].

**Palabras Clave:** Magnetismo cuántico, Frustración magnética, Sistemas fuertemente correlacionados

### Introducción y modelo

El estudio de antiferromagnetos frustrados sobre redes panal de abeja ha atraído recientemente considerable interés. Desde un punto de vista experimental esto ha sido impulsado en parte por la síntesis del material  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  [1]. En este compuesto, los iones  $\text{Mn}^{4+}$  forman redes de tipo panal de abeja que se acoplan de a pares a través de la interacción de átomos de bismuto, formando una

<sup>1</sup> Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería UNLP.

<sup>2</sup> IFLP-CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias exactas UNLP.

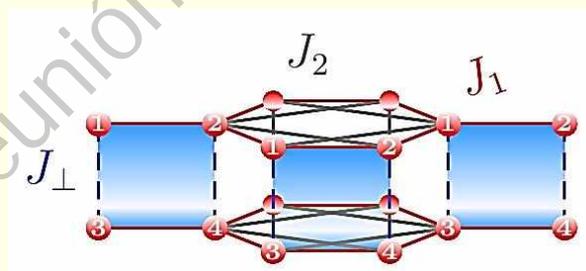
estructura bicapa, con gran separación entre bicapas. Las constantes de acoplamiento magnético han sido calculadas usando cálculos de primeros principios [2], mostrando que los acoplamientos dominantes son a primeros vecinos, entre planos  $J_{\perp}$  como en el plano  $J_1$ , y en menor medida segundos vecinos entre planos  $J_{\times}$  (no considerado aquí) y en el plano  $J_2$  (figura 1).

Desde un punto de vista teórico el estudio de este tipo de modelos comenzó con el caso de un plano [6, 7], donde el efecto de la frustración da lugar a la emergencia de fases cuánticas desordenadas y renormaliza las fases clásicas de Néel y espiral, presentes a baja y alta frustración, respectivamente. El caso de dos planos, en comparación ha sido menos investigado [2, 5, 8]. Aquí el enfoque se ha centrado en la evolución de las fases clásicas (principalmente Néel) a partir del caso límite de un plano, a medida que la interacción entre planos crece.

En este trabajo partimos del extremo opuesto, es decir cuando el acoplamiento entre planos es muy grande comparado con los restantes acoplamientos del modelo. En el caso límite  $J_{\perp} \rightarrow \infty$  el sistema se reduce a un conjunto de dímeros aislados, cada uno formado por un espín en un plano y su vecino más próximo en el otro plano. Este estado puramente cuántico y exacto del modelo evoluciona adiabáticamente a medida que las otras interacciones en el plano y entre planos son consideradas. El efecto conjunto de la frustración y acoplamiento entre planos determina la forma en que esta fase dimerizada se conecta con las fases clásicas que parten del caso límite de un plano.

Aquí nos concentraremos en el caso de la frustración en cada plano  $J_2$  que es el caso más complicado de tratar y por ende menos analizado.

Para abordar este problema utilizaremos la técnica de operadores de bond, que al partir de dímeros exactos es especialmente indicada para describir en términos generales la evolución de la fase dimerizada previamente mencionada. Veremos que la condensación de estos bosones no solo brinda una estimación de la extensión de la fase dimerizada, sino la forma en que la dispersión se comporta en el espacio de momentos anticipa algunas características de las fases semiclásicas emergentes. En la figura 1 se muestra esquemáticamente el modelo que analizaremos en este trabajo.



**Figura 1.** Modelo de red panal de abeja de dos planos y acoplamientos antiferromagnéticos analizado en este trabajo

## Métodos

Con el fin de estudiar la evolución de las fases cuánticas desordenadas a partir del límite de dímeros aislados ( $J_{\perp} \rightarrow \infty$ ) utilizamos una técnica operadores de bond (BO) basada en una representación bosónica de dímeros. Esta técnica es particularmente útil para explorar la evolución de los dímeros entre planos aislados [1].

En la representación de operadores de bond, los espines del par 1-3 (análogamente el par 2-4) como se muestran en la figura 1 pueden escribirse de la siguiente manera:

$$S_{\frac{1}{3}}^{\alpha} = \frac{1}{2} (\pm s^{\dagger} t_{\alpha} \pm t^{\dagger} s - \sum_{\beta, \gamma} i \varepsilon_{\alpha \beta \gamma} t_{\beta}^{\dagger} t_{\gamma})$$

(1)

donde  $s^{\dagger}$  and  $t_{\alpha}^{\dagger}$  crean estados de tipo singlete y tripletes en el dímero, y el índice  $\alpha = 1, 2, 3$  hace referencia al tipo de triplete. El siguiente vínculo debe ser impuesto en el número de bosones

$$s^{\dagger} s + \sum_{\alpha} t_{\alpha}^{\dagger} t_{\alpha} = 1$$

lo que hace que el álgebra bosónica sea idéntica a la de los espines. La representación BO transforma el modelo de espín en un modelo de tipo Hamiltoniano de Bose, para lo cual existen varios esquemas de tratamiento de la interacción. Dentro de las aproximaciones cuadráticas que pueden usarse para diagonalizar el Hamiltoniano, usamos aquí el enfoque conocido como aproximación de Holstein-Primakoff (BO-HP) En esta técnica, se retienen sólo los términos hasta segundo orden y se asume que los bosones correspondientes al estado singlete están condensados, por lo que se lleva a cabo reemplazando

$$s^{(\dagger)} \rightarrow s \in \mathbb{R}$$

La restricción en el número de bosones se impone en promedio utilizando un multiplicador de Lagrange global  $\lambda$ , y los parámetros de campo medios se reemplazan por su solución de campo medio correspondiente al caso no interactuante,  $s^2 = 1$  y  $\lambda = -3/4$ . Bajo estas suposiciones, el Hamiltoniano puede diagonalizarse fácilmente mediante una transformación Bogoliubov, obteniendo para la energía por celda unidad

$$E = -\frac{9}{2} + \frac{3}{2N} \sum_k \left( \sqrt{1 + \epsilon_+(k)} + \sqrt{1 - \epsilon_-(k)} \right)$$

donde

$$\epsilon_{\pm}(k) = \frac{J_1}{J_{\perp}} \sqrt{3 + 2 \cos(k_x) + 4 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right)} \pm 2 \frac{J_1}{J_{\perp}} \left( \cos(k_x) + 2 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \right)$$

(2)

Utilizando la relación de dispersión (2) calculamos el cierre del gap. La línea en el plano  $J_2 - J_{\perp}$  donde el gap se hace cero se muestra en la figura 2, para valores particulares de los acoplamientos allí indicados.

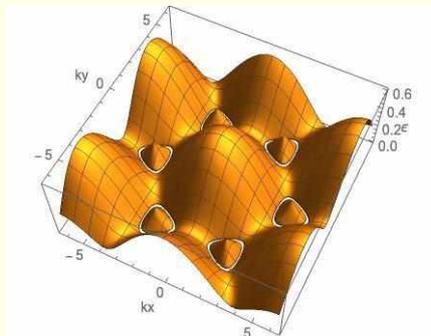
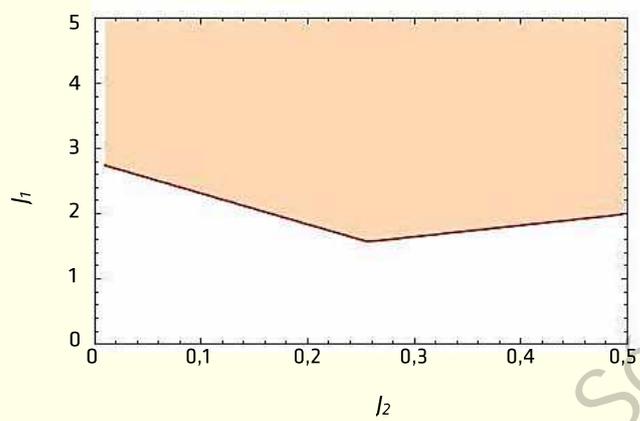


Figura 2. Relación de dispersión de los triplones obtenido mediante BO-HP para  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 0.7$  y  $J_{\perp} = 2.456$

## Resultados y discusión

Utilizando la relación de dispersión anterior calculamos el cierre del gap. La línea en el plano  $J_2 - J_\perp$  donde el gap se hace cero se muestra en la figura 3. Es importante notar el campo medio basado en operadores de bond es adecuado para describir el régimen de grandes  $J_\perp$ . En este sentido, la línea de la figura 3 debe tomarse como estimativa.



**Figura 3.** Región del diagrama de fases donde se detecta la presencia de gap (naranja). Los acoplamientos están en unidades de  $J_1$

Podemos ahora explorar la dependencia en momentos de la condensación de los bosones. Antes de hacer este análisis, consideremos la solución clásica ( $S \rightarrow \infty$ ) del modelo. Dado que el acoplamiento entre capas no introduce frustración, el estado fundamental de este modelo consiste en un estado de Néel para cada plano en el rango  $0 < J_2/J_1 < 1/6$ , mientras que para  $J_2/J_1 > 1/6$ , existe una familia de estados espirales coplanares clásicamente degenerados de la forma [5]

$$\vec{S}_i(\vec{r}) = (-1)^i S (\cos(\vec{Q} \cdot \vec{r} + \theta_i) \hat{i} + \sin(\vec{Q} \cdot \vec{r} + \theta_i) \hat{j}),$$

donde el vector de ordenamiento satisface

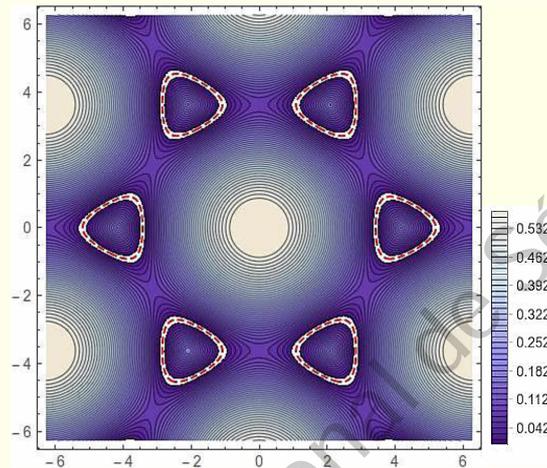
$$\cos(Q_x) + \cos\left(-\frac{Q_x}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}Q_y\right) + \cos\left(\frac{Q_x}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}Q_y\right) + \frac{3}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{J_1}{2J_2}\right)^2$$

Estos estados clásicamente degenerados forman curvas cerradas en el espacio de impulso. Por otro lado, la aproximación BO-HP es exacta en el límite en que los dímeros están aislados, donde el estado fundamental cuántico corresponde a un estado producto de singletes de espín con gap uno (en unidades de  $J_\perp$ ). Partiendo de este estado puramente cuántico, la aproximación de BO-HP permite estimar la evolución del gap a medida que se incrementan los acoplamientos en la capa, determinando el mínimo de la relación de dispersión (2).

Para algunos valores críticos de los acoplamientos la relación de dispersión se hace cero en ciertos valores de momento, dando lugar a una condensación de los bosones, por la cual el sistema entra en una fase cuántica magnéticamente ordenada. Al estudiar este proceso vemos que para  $J_2/J_1 < 1/6$  la condensación ocurre en  $\vec{Q} = (0,0)$ . Esto se corresponde con un orden de tipo Néel, mientras que para  $J_2/J_1 > 1/6$  la condensación no ocurre en un solo punto, sino en una línea en el espacio de momentos, que notablemente es la misma curva donde el modelo clásico presenta el estado mínimo de energía. Esto

se ilustra en la figura 4, donde se muestran las líneas de contorno correspondientes a la relación de dispersión cerca del punto donde ocurre la condensación (para los mismos acoplamientos de la figura 3), mientras que las líneas rojas corresponden a curvas en el espacio de momentos que determinan la variedad de estados clásicos de mínima energía [5].

La degeneración continua podría ser levantada por un mecanismo de tipo orden por desorden. El análisis de este aspecto requiere un tratamiento más sofisticado de la interacción entre bosones, que está claramente más allá del objetivo del presente trabajo. Sin embargo, esto no es en detrimento de nuestro tratamiento. Por el contrario, ilustra la potencia de la simple técnica BO-HP, que a pesar de no incorporar ninguna información sobre el estado fundamental clásico (ya que parte de la fase de dímeros cuánticos) refleja a través de la condensación algunas propiedades de las fases semiclásicas emergentes.



**Figura 4.** Gráfico de contornos correspondiente a la relación de dispersión de los triplones para  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 0.7$  y  $J_\perp = 2.456$ . Las líneas rojas corresponden a la solución clásica de mínima energía

## Conclusiones

A partir de una aproximación basada en operadores de bond, estudiamos el estado fundamental de un antiferromagneto cuántico sobre la red de panal de abejas de dos planos, motivados por la existencia de materiales que exhiben esta estructura.

En este modelo la fase exacta de dímeros que se forma en el límite de acoplamiento fuerte entre plaquetas evoluciona hacia un cierre de gap donde los bosones condensan. La localización en espacio de momentos de dicha condensación se produce en puntos aislados o a través de líneas continuas que dependen fuertemente de la frustración, y en todos los casos coinciden con las soluciones clásicas del modelo. Esto revela que en el límite de acoplamiento débil entre capas donde se produce la condensación, el estado fundamental cuántico contiene características del estado clásico de mínima energía, que son capturados por la aproximación bosónica.

## Agradecimientos

Carlos A. Lamas agradece al departamento de Ciencias Básicas de la Facultad de Ingeniería de la UNLP.

## Referencias

- [1] S. Sachdev and R. N. Bhatt; Phys. Rev. B 41 (1990) 9323.
- [2] H. Zhang, C. A. Lamas, M. Arlego, and W. Brenig; Phys. Rev. B 93 (2016) 235150.
- [3] O. Smirnova, M. Azuma, N. Kumada, Y. Kusano, M. Matsuda, Y. Shimakawa, T. Takei, Y. Yonesaki, and N. Kinomura; Journal of the American Chemical Society 131 (2009) 8313.
- [4] M. Matsuda, M. Azuma, M. Tokunaga, Y. Shimakawa, and N. Kumada; Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 187201.
- [5] A. Mulder, R. Ganesh, L. Capriotti, and A. Paramakanti; Phys. Rev. B 81 (2010) 214419.
- [6] Hao Zhang, C. A. Lamas; Phys. Rev. B 87 (2013) 024415.
- [7] D.C. Cabra, C.A. Lamas, H.D. Rosales; Phys. Rev. B 83 (2011) 094506
- [8] Hao Zhang, M. Arlego, C. A. Lamas; Phys. Rev. B 89 (2014) 024403

VII Reunión Nacional de Sólidos