Петербургский институт ядерной физики
им. Б.П. Константинова
НИЦ «Курчатовский институт»

НОВЫЙ МЕТОД ОПИСАНИЯ СПИНОВОЙ ДИНАМИКИ В МАГНЕТИКАХ СО СПИНОМ 1/2

А.В. Сыромятников

ПЛАН

- Мотивация: трудности с описанием коротковолновой спиновой динамики в двумерных системах со спином 1/2
- Основные идеи метода кластерного представления спиновых операторов (КПСО)
- Применение КПСО к неколлинеарным системам
  - ✓ Антиферромагнетик со спином 1/2 на квадратной решетке в сильном поле
    - ➢ Новые элементарные возбуждения
    - ➢ Согласие с численными расчетами
  - ✓ Антиферромагнетик со спином 1/2 на треугольной решетке в поле и без него
    - ➢ Новые элементарные возбуждения
    - ➢ Согласие с нейтронным экспериментом

МОТИВАЦИЯ

- Длинноволновая (низкоэнергетическая) спиновая динамика в упорядоченных фазах хорошо описывается множеством разных теоретических методов

Самый известный подход – спин-волновая теория (1/*S*-разложение)

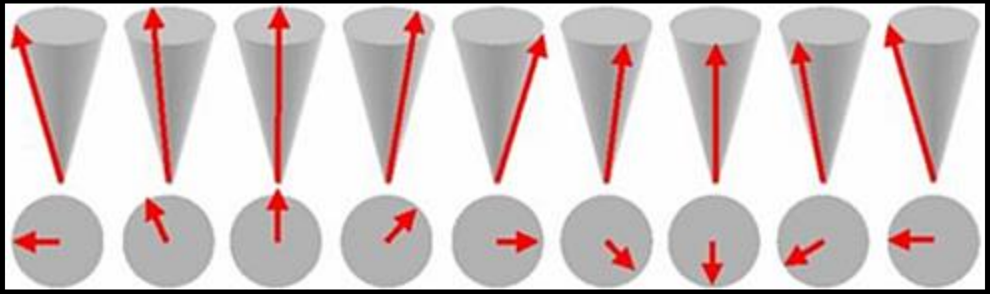
Преобразование Голдстейна-Примакова

$$S_i^- = a_i^\dagger \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i}$$

$$S_i^+ = \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i}\; a_i$$

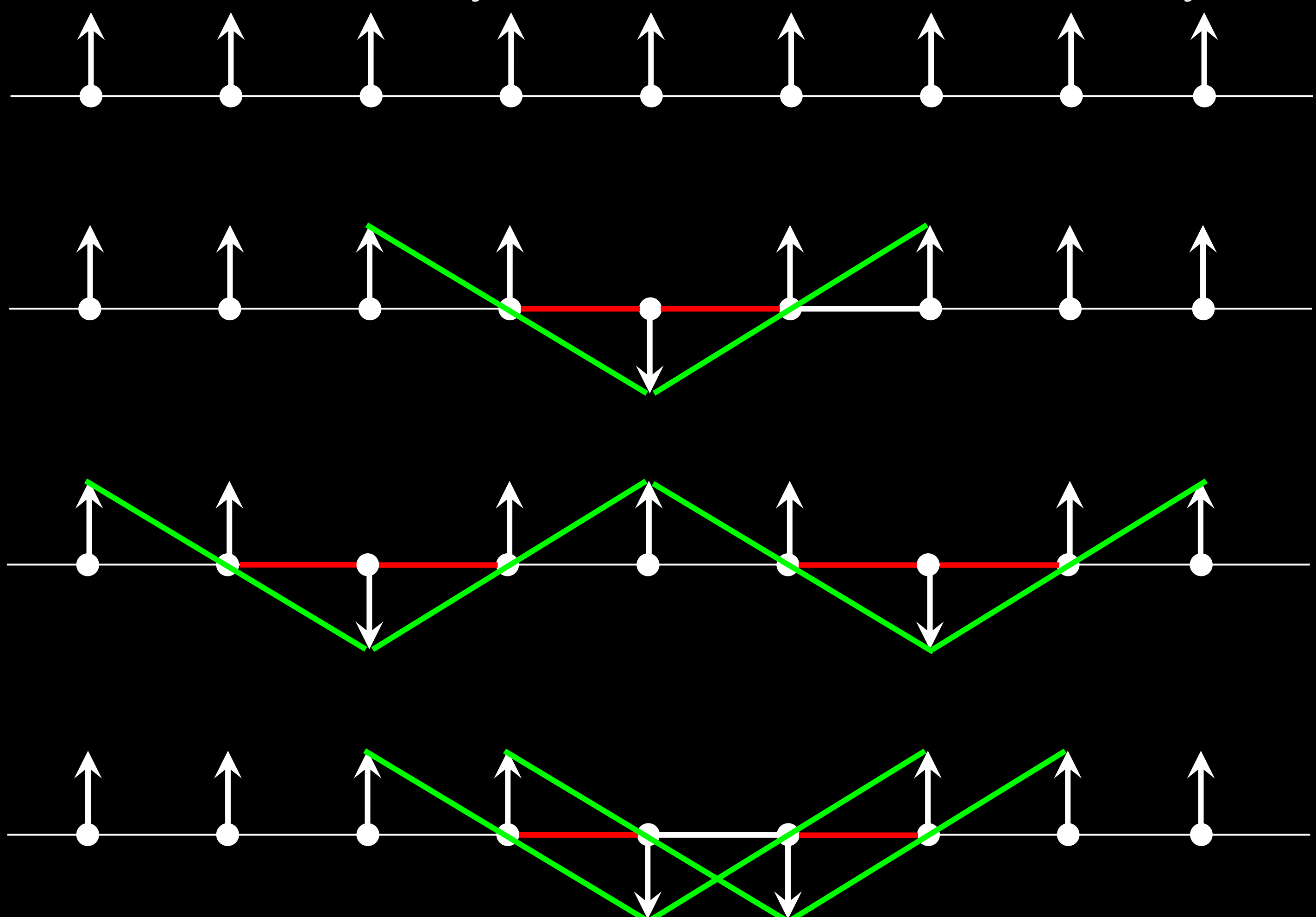
$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i \qquad S \gg 1$$

спиновая волна (магнон)



Возбужденные состояния в цепочке спинов 1/2 при $H \gtrsim H_S$

$$\mathcal{H} = \sum_j \left(-\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + J\,\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2} \right) - \mathbf{H} \sum_j \mathbf{S}_j$$



Основное состояние $E=0$

Магнон $E=\epsilon_{\mathbf{k}}$

2 магнона $E=\epsilon_{\mathbf{k1}} + \epsilon_{\mathbf{k2}}$

связанное состояние $E=\varepsilon_{\mathbf{k}}$

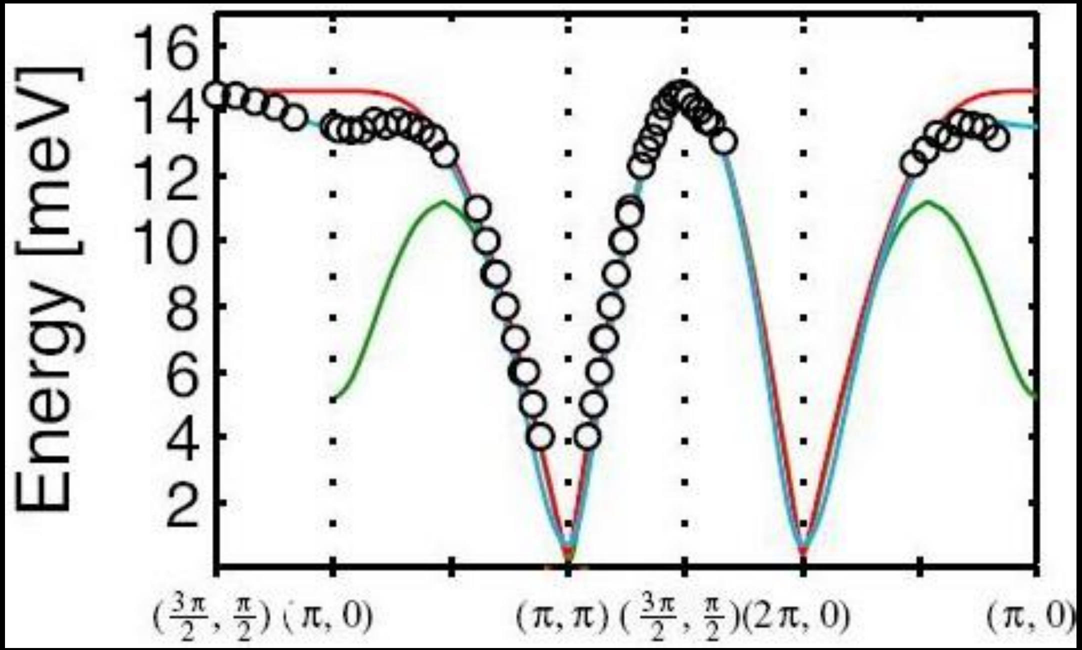
1/S-РАЗЛОЖЕНИЕ

Очень часто можно ограничиться первыми поправками 1/*S*-разложения даже в 2D антиферромагнетике

$$\frac{\upsilon}{\upsilon^{(0)}} = 1 + \frac{0.158}{2S} + \frac{0.0215}{(2S)^2}$$

$$\frac{\chi_\perp}{\chi_\perp^{(0)}} = 1 - \frac{0.551}{2S} + \frac{0.065}{(2S)^2}$$

$$\langle S_i^z \rangle = S - 0.2 + \frac{0.0035}{(2S)^2}$$



$Cu(DCOO)_2 4D_2O$

МОТИВАЦИЯ

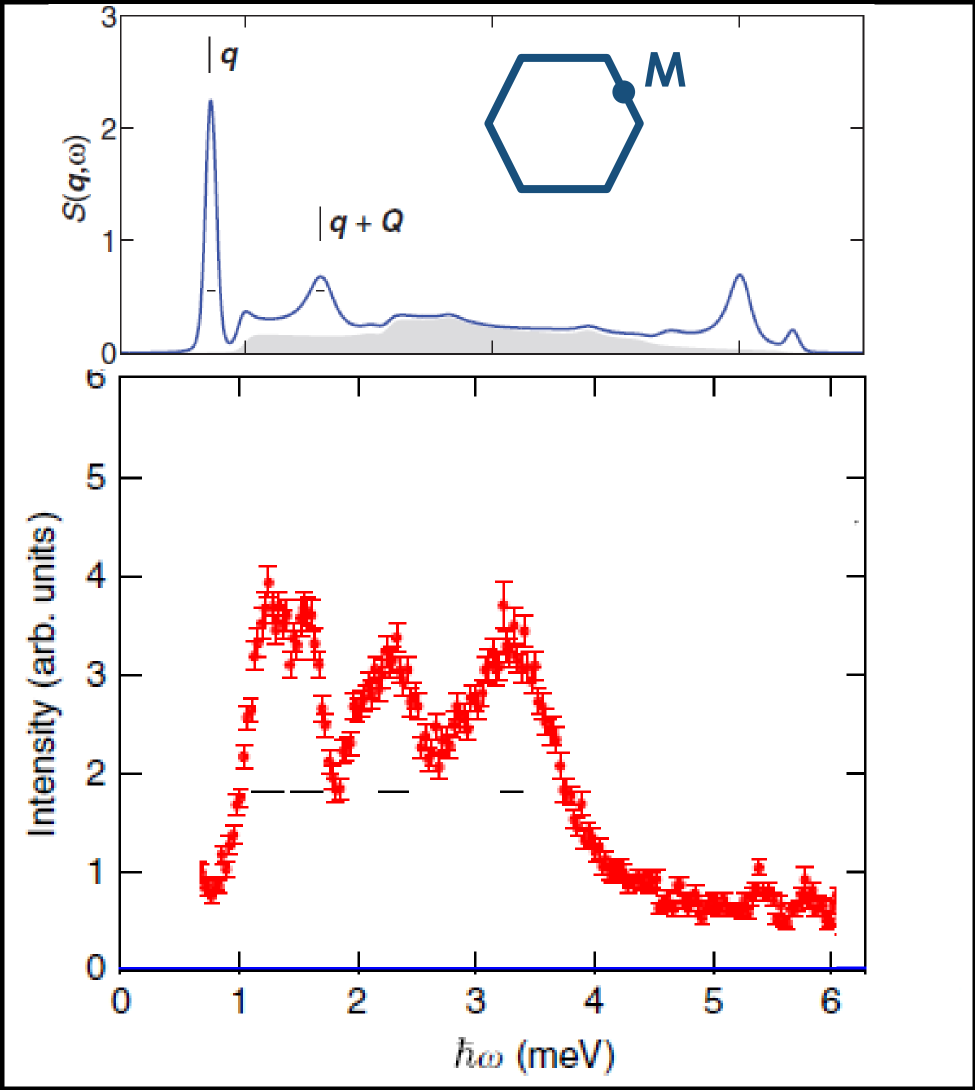
Однако

- В некоторых случаях стандартные подходы <u>даже качественно не описывают</u> коротковолновую спиновую динамику в 2D антиферромагнетиках со спином 1/2

Кроме того

- Отсутствуют удобные методы исследования элементарных возбуждений (квазичастиц), известных как связанные состояния простых квазичастиц (магнонов, триплонов и т.д.)

АНТИФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИНОМ 1/2 НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ



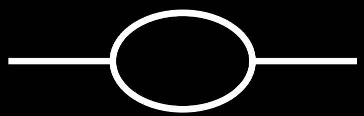
Предсказания спин-волновой теории

M. Mourigal et al., PRB **88**, 094407 (2013)

Нейтронный эксперимент в $Ba_3CoSb_2O_9$

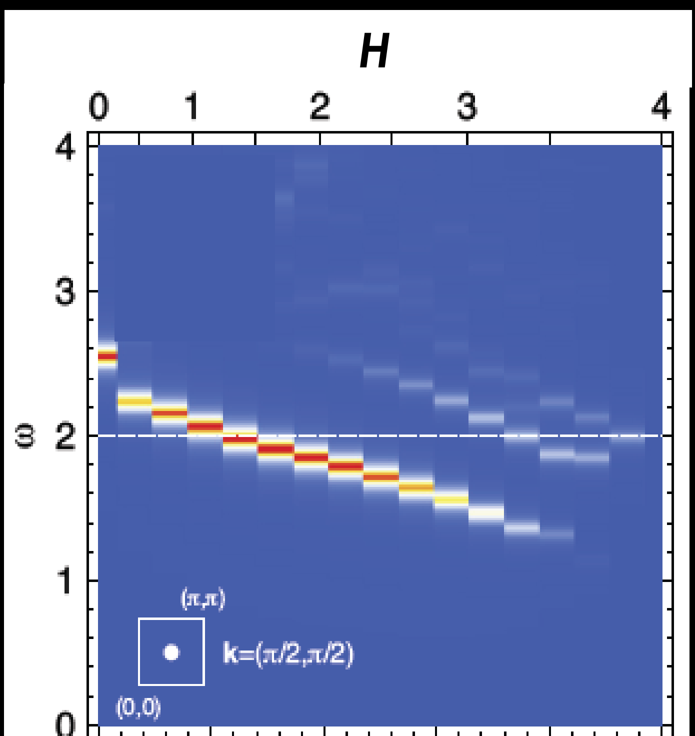
S. Ito et al.,
Nature Communications **8**, 235 (2017)

АНТИФЕРРОМАГНЕТИК СО СПИНОМ 1/2 НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ В ПОЛЕ



Спин-волновая теория предсказывает полное исчезновение коротковолновых магнонов при $3.8<H<H_s=4$

$\boxed{J=1}$



M. Zhitomirsky and A. Chernyshev, PRL **82**, 4536 (1999)

Точная диагонализация конечных кластеров

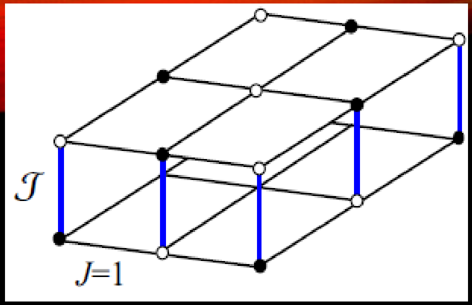
A. Luscher and A. Lauchli, PRB **79**, 195102 (2009)

МЕТОД КЛАСТЕРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ СПИНОВЫХ ОПЕРАТОРОВ

ОСНОВНАЯ ИДЕЯ

Учесть все спиновые степени свободы в магнитной элементарной ячейке при помощи подходящего бозонного представления спиновых операторов в надежде более точно описать коротковолновые корреляции

ДВА СПИНА В ЭЛЕМ. ЯЧЕЙКЕ



$$|0\rangle = \cos\alpha|\uparrow\downarrow\rangle - \sin\alpha|\downarrow\uparrow\rangle$$

$$a_j^\dagger|0\rangle = |a\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$b_j^\dagger|0\rangle = |b\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$c_j^\dagger|0\rangle = |c\rangle = \sin\alpha|\uparrow\downarrow\rangle + \cos\alpha|\downarrow\uparrow\rangle$$

$$S_{1j}^+ = -a_j^\dagger \sin\alpha + b_j \cos\alpha + c_j^\dagger b_j \sin\alpha + a_j^\dagger c_j \cos\alpha$$

$$S_{2j}^+ = a_j^\dagger \cos\alpha - b_j \sin\alpha + c_j^\dagger b_j \cos\alpha + a_j^\dagger c_j \sin\alpha$$

$$S_{1j}^z = \frac{\cos 2\alpha}{2} + \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(c_j + c_j^\dagger\right) + a_j^\dagger a_j \sin^2\alpha - b_j^\dagger b_j \cos^2\alpha - c_j^\dagger c_j \cos 2\alpha$$

$$S_{2j}^z = -\frac{\cos 2\alpha}{2} - \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(c_j + c_j^\dagger\right) + a_j^\dagger a_j \cos^2\alpha - b_j^\dagger b_j \sin^2\alpha + c_j^\dagger c_j \cos 2\alpha$$

$$\left(\mathbf{S}_{1j}\mathbf{S}_{2j}\right) = -\frac{1+2\sin 2\alpha}{4} + \frac{\cos 2\alpha}{2}\left(c_j + c_j^\dagger\right) + \frac{1+\sin 2\alpha}{2}\left(a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j\right) + c_j^\dagger c_j \sin 2\alpha$$

α=π/4 – неупорядоченная фаза

α≠π/4 – упорядоченная фаза

Коммутационная алгебра НЕ воспроизводится

ДВА СПИНА В ЭЛЕМ. ЯЧЕЙКЕ

$$S_{1j}^{+} = -a_j^{\dagger} P_j \sin\alpha + P_j b_j \cos\alpha + c_j^{\dagger} b_j \sin\alpha + a_j^{\dagger} c_j \cos\alpha$$

$$S_{2j}^{+} = a_j^{\dagger} P_j \cos\alpha - P_j b_j \sin\alpha + c_j^{\dagger} b_j \cos\alpha + a_j^{\dagger} c_j \sin\alpha$$

$$S_{1j}^{z} = \frac{\cos 2\alpha}{2} + \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \sin^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \cos^2\alpha - c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$S_{2j}^{z} = -\frac{\cos 2\alpha}{2} - \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \cos^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \sin^2\alpha + c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$\left(\mathbf{S}_{1j}\mathbf{S}_{2j}\right) = -\frac{1+2\sin 2\alpha}{4} + \frac{\cos 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + \frac{1+\sin 2\alpha}{2}\left(a_j^{\dagger} a_j + b_j^{\dagger} b_j\right) + c_j^{\dagger} c_j \sin 2\alpha$$

$$P_j = \sqrt{1 - a_j^{\dagger} a_j - b_j^{\dagger} b_j - c_j^{\dagger} c_j}$$

Коммутационная алгебра воспроизводится при любых α

ДВА СПИНА В ЭЛЕМ. ЯЧЕЙКЕ

$$S_{1j}^{+} = -a_j^{\dagger} P_j \sin\alpha + P_j b_j \cos\alpha + c_j^{\dagger} b_j \sin\alpha + a_j^{\dagger} c_j \cos\alpha$$

$$S_{2j}^{+} = a_j^{\dagger} P_j \cos\alpha - P_j b_j \sin\alpha + c_j^{\dagger} b_j \cos\alpha + a_j^{\dagger} c_j \sin\alpha$$

$$S_{1j}^{z} = n\frac{\cos 2\alpha}{2} + \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \sin^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \cos^2\alpha - c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$S_{2j}^{z} = -n\frac{\cos 2\alpha}{2} - \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \cos^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \sin^2\alpha + c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$\frac{1}{n}\left(\mathbf{S}_{1j}\mathbf{S}_{2j}\right) = -n\frac{1+2\sin 2\alpha}{4} + \frac{\cos 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + \frac{1+\sin 2\alpha}{2}\left(a_j^{\dagger} a_j + b_j^{\dagger} b_j\right) + c_j^{\dagger} c_j \sin 2\alpha$$

$$P_j = \sqrt{n - a_j^{\dagger} a_j - b_j^{\dagger} b_j - c_j^{\dagger} c_j}$$

n – максимальное число бозонов в элем. ячейке

Коммутационная алгебра воспроизводится при любых α и $n>0$

AS, PRB **98**, 184421 (2018)

Сравнение с представлением Голдстейна-Примакова

1/n разложение

$$S^{+}_{1j} = -a_j^{\dagger} P_j \sin\alpha + P_j b_j \cos\alpha + c_j^{\dagger} b_j \sin\alpha + a_j^{\dagger} c_j \cos\alpha$$

$$S^{+}_{2j} = a_j^{\dagger} P_j \cos\alpha - P_j b_j \sin\alpha + c_j^{\dagger} b_j \cos\alpha + a_j^{\dagger} c_j \sin\alpha$$

$$S^{z}_{1j} = n\frac{\cos 2\alpha}{2} + \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \sin^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \cos^2\alpha - c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$S^{z}_{2j} = -n\frac{\cos 2\alpha}{2} - \frac{\sin 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + a_j^{\dagger} a_j \cos^2\alpha - b_j^{\dagger} b_j \sin^2\alpha + c_j^{\dagger} c_j \cos 2\alpha$$

$$\frac{1}{n}\left(\mathbf{S}_{1j}\mathbf{S}_{2j}\right) = -n\frac{1+2\sin 2\alpha}{4} + \frac{\cos 2\alpha}{2}\left(P_j c_j + c_j^{\dagger} P_j\right) + \frac{1+\sin 2\alpha}{2}\left(a_j^{\dagger} a_j + b_j^{\dagger} b_j\right) + c_j^{\dagger} c_j \sin 2\alpha$$

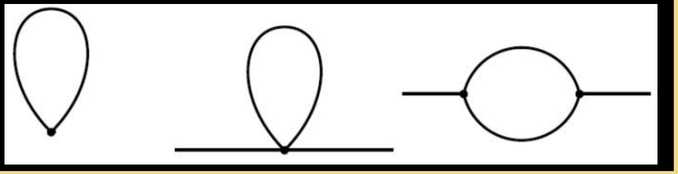
$$P_j = \sqrt{n - a_j^{\dagger} a_j - b_j^{\dagger} b_j - c_j^{\dagger} c_j}$$

1/S разложение

$$S_j^{+} = P_j a_j$$

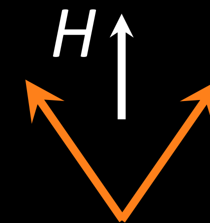
$$S_j^{z} = S - a_j^{\dagger} a_j$$

$$P_j = \sqrt{2S - a_j^{\dagger} a_j}$$

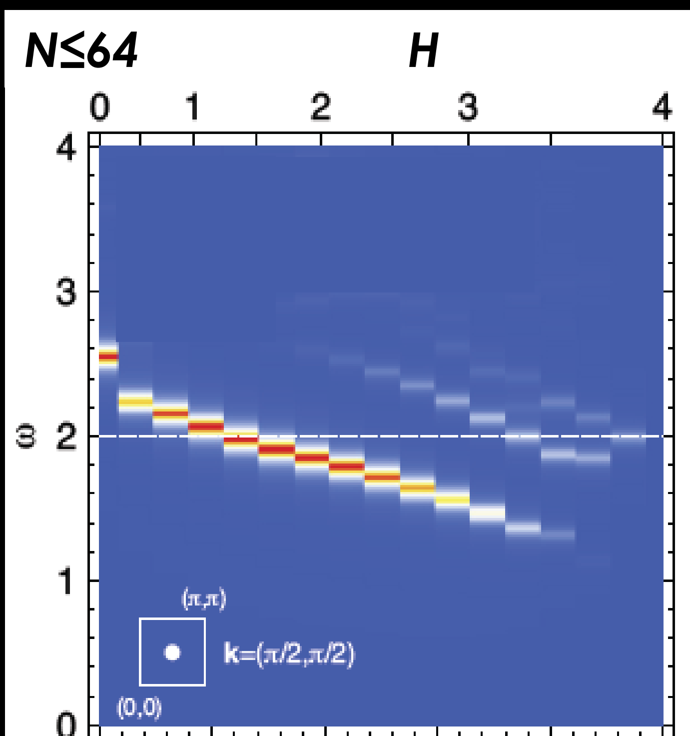


Антиферромагнетик со спином 1/2 на квадратной решетке в поле

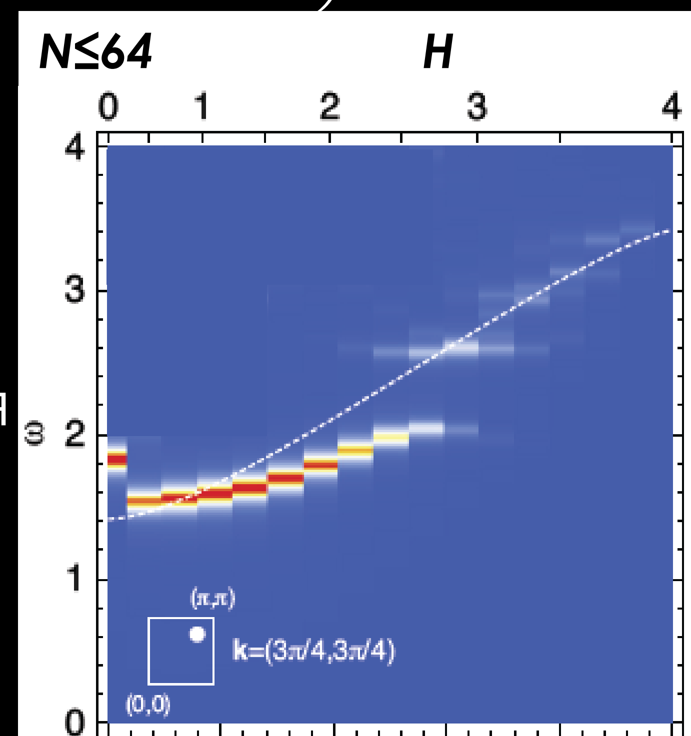
$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - H \sum_i S_i^z \qquad H_s = 4$$



$$\mathcal{S}^{zz}(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\left(i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left[S_{\mathbf{k}}^z(t), S_{-\mathbf{k}}^z(0) \right] \right\rangle \right)$$



Точная диагонализация конечных кластеров



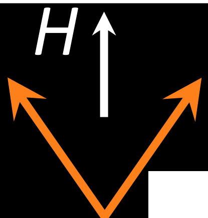
A. Luscher and A. Lauchli, PRB **79**, 195102 (2009)

1/S-РАЗЛОЖЕНИЕ

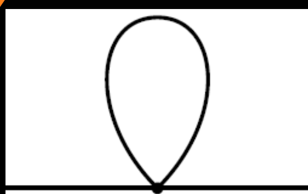
VOLUME 82, NUMBER 22 PHYSICAL REVIEW LETTERS 31 MAY 1999

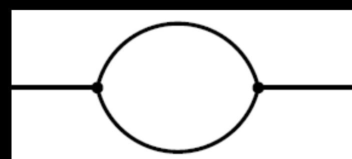
Instability of Antiferromagnetic Magnons in Strong Fields

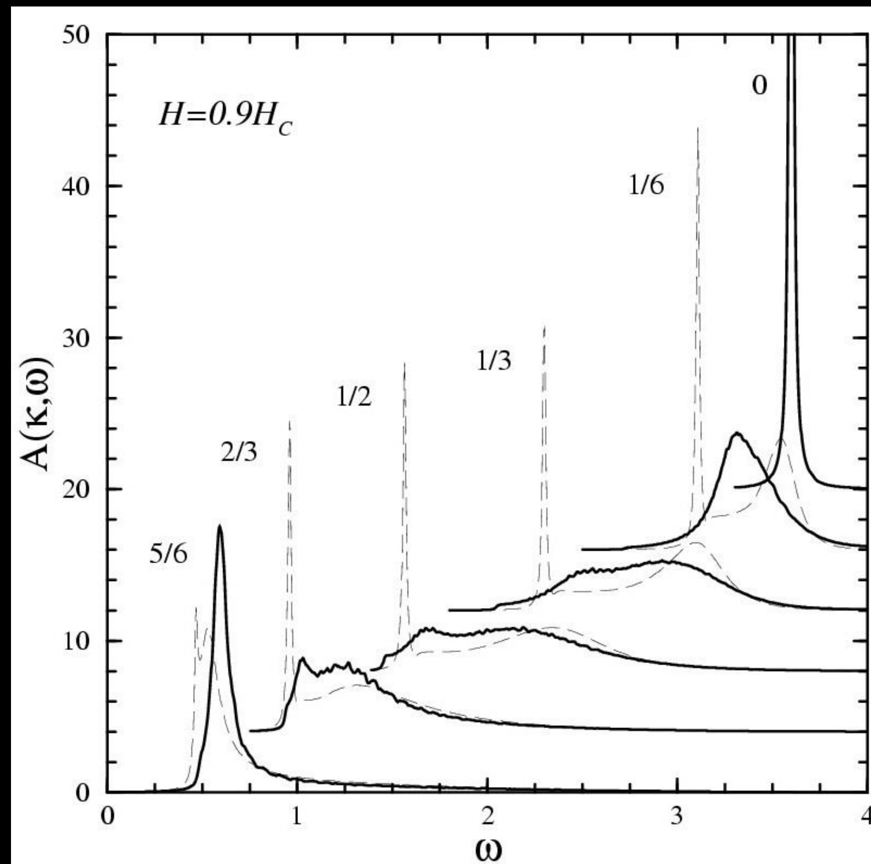
M. E. Zhitomirsky[1,2] and A. L. Chernyshev[3,*]



$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - H\sum_i S_i^z$$





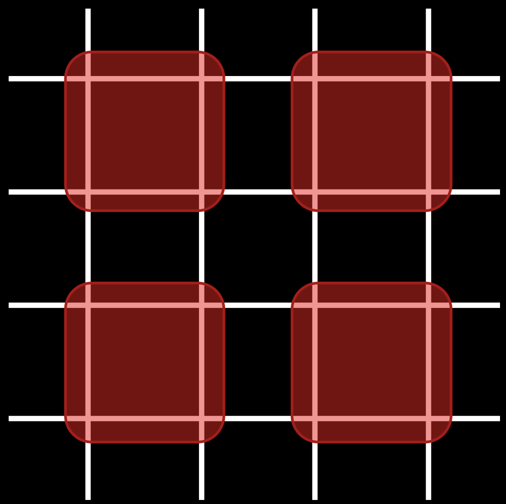


Магноны неустойчивы почти во всей зоне Бриллюэна при $0.76H_s<H<H_s$

$\mathbf{k}=\xi\mathbf{k}_0=\xi(\pi,\pi)$

Антиферромагнетик в сильном поле

Четырехспиновое КПСО



$2^4 - 1 = 15$ бозонов:

- 4 бозона – обычные магноны при $H \ll Hs$ и $H \geq H_s$
- 9 бозонов – высокоэнергетические сильно затухающие возбуждения
- 2 бозона – “немагнонная” мода, происходящая от моды Хиггса при $H=0$

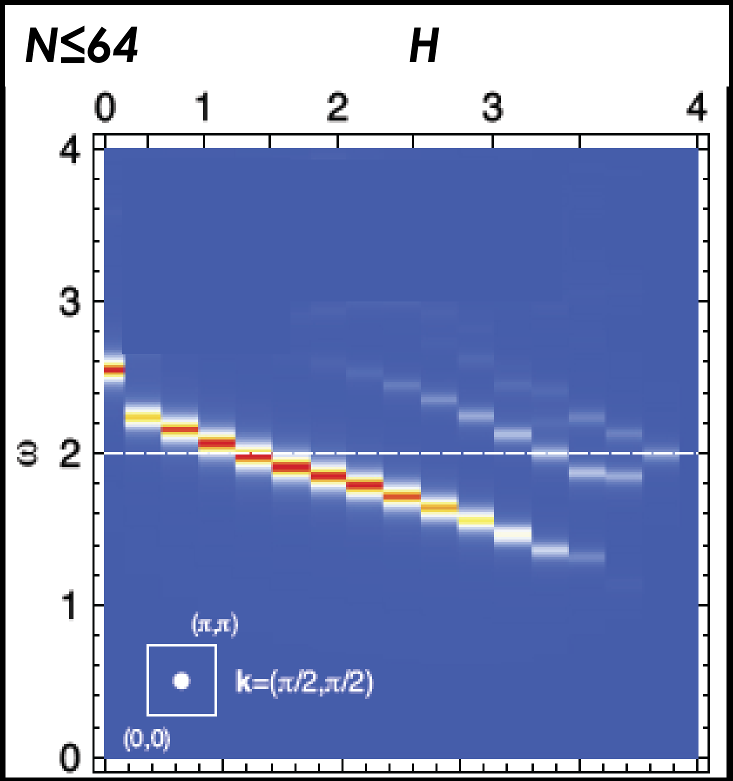
Много новых полюсов в первом порядке по 1/n

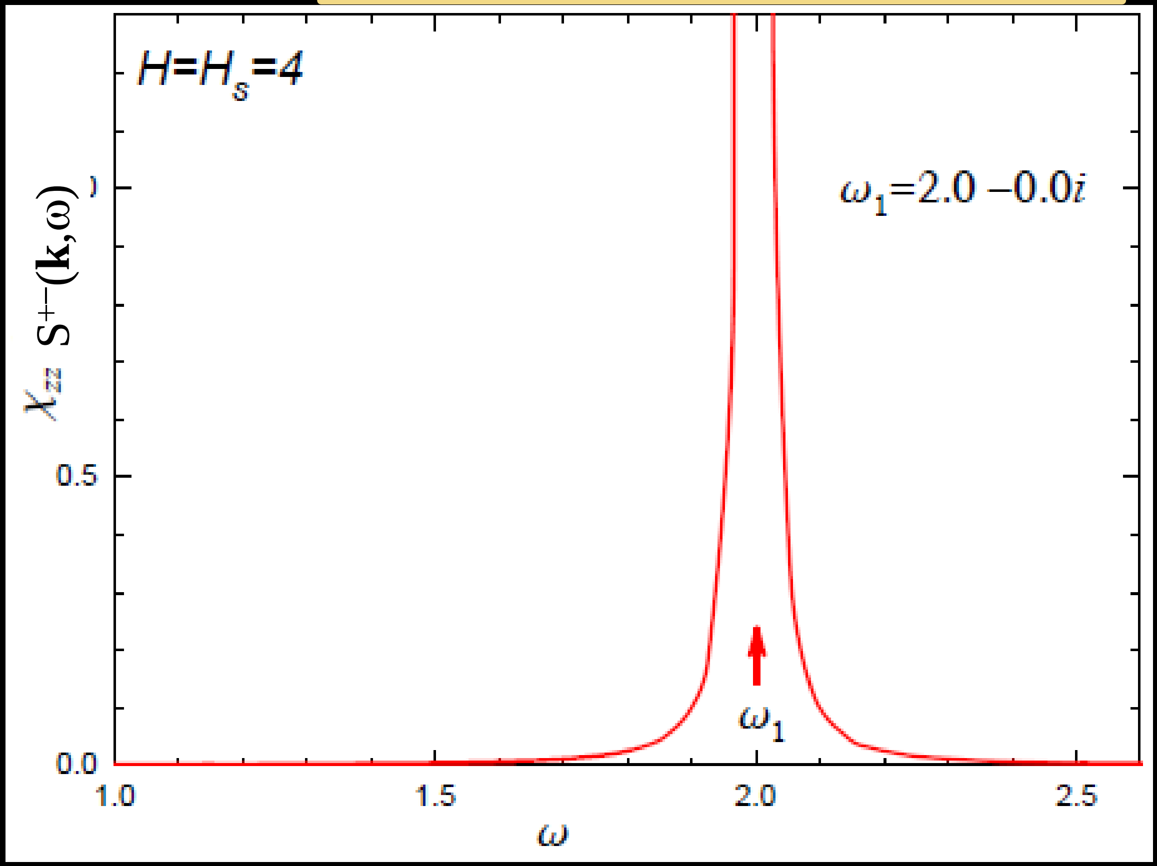
$$D\left(\mathbf{k}, \omega, \left\{\Sigma\left(\mathbf{k}, \omega\right)\right\}\right) = 0$$

Антиферромагнетик в сильном поле

$$S^{zz}(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\left(i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left[S^z_{\mathbf{k}}(t), S^z_{-\mathbf{k}}(0) \right] \right\rangle \right)$$

Первый порядок по 1/n

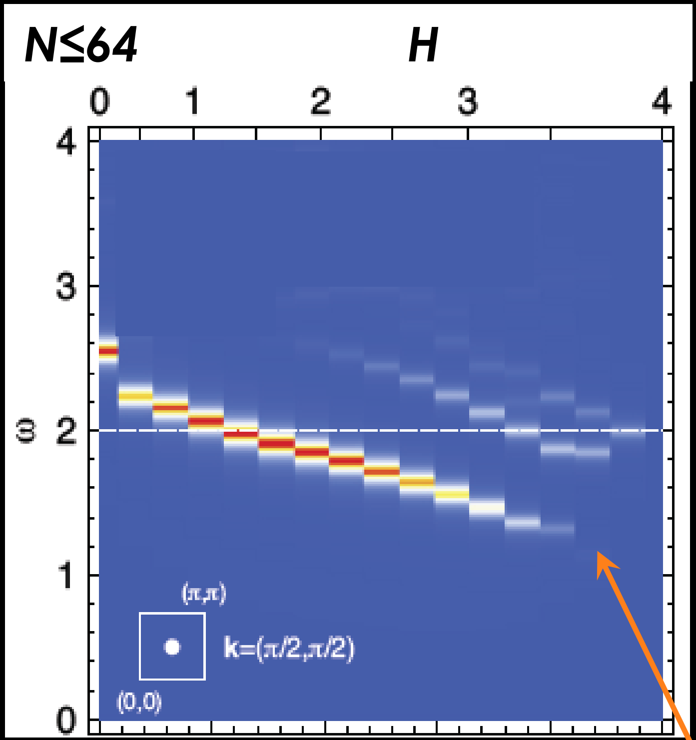


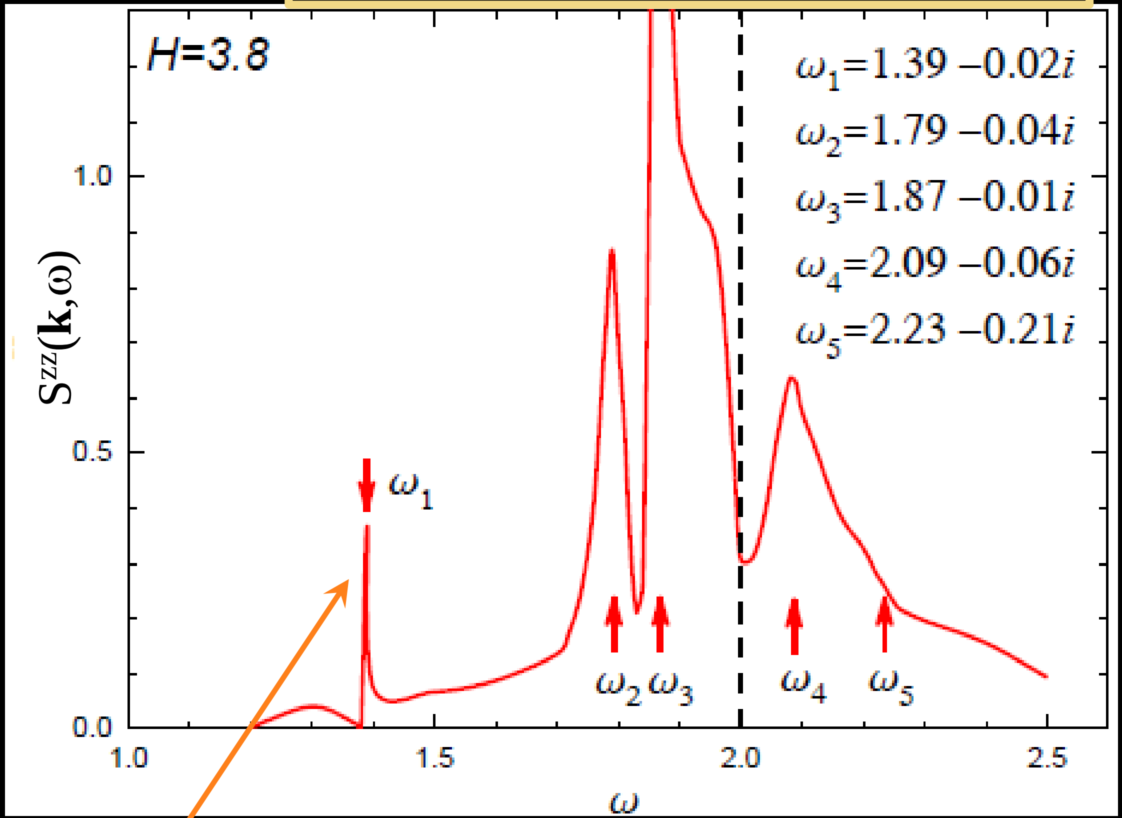


Антиферромагнетик в сильном поле

$$S^{zz}(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\left(i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left[S^z_{\mathbf{k}}(t), S^z_{-\mathbf{k}}(0) \right] \right\rangle \right)$$

Первый порядок по 1/n

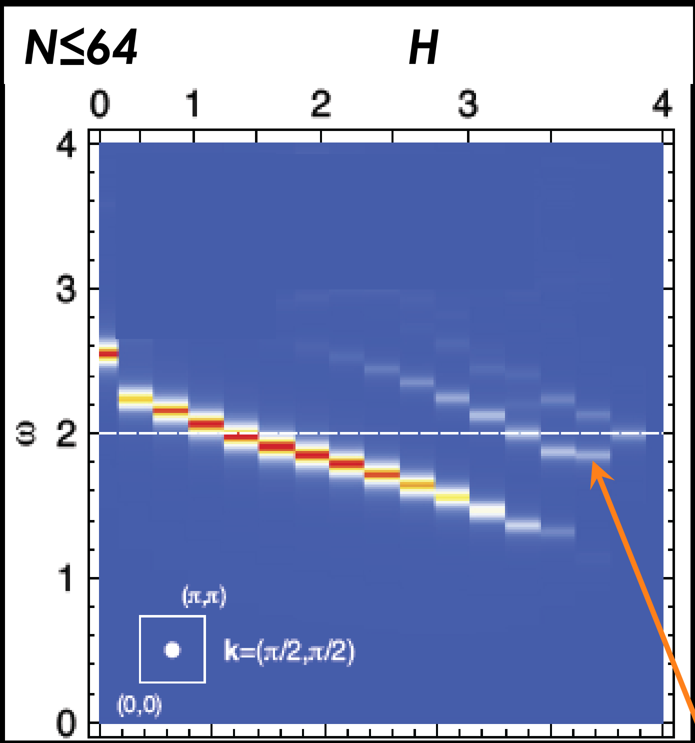


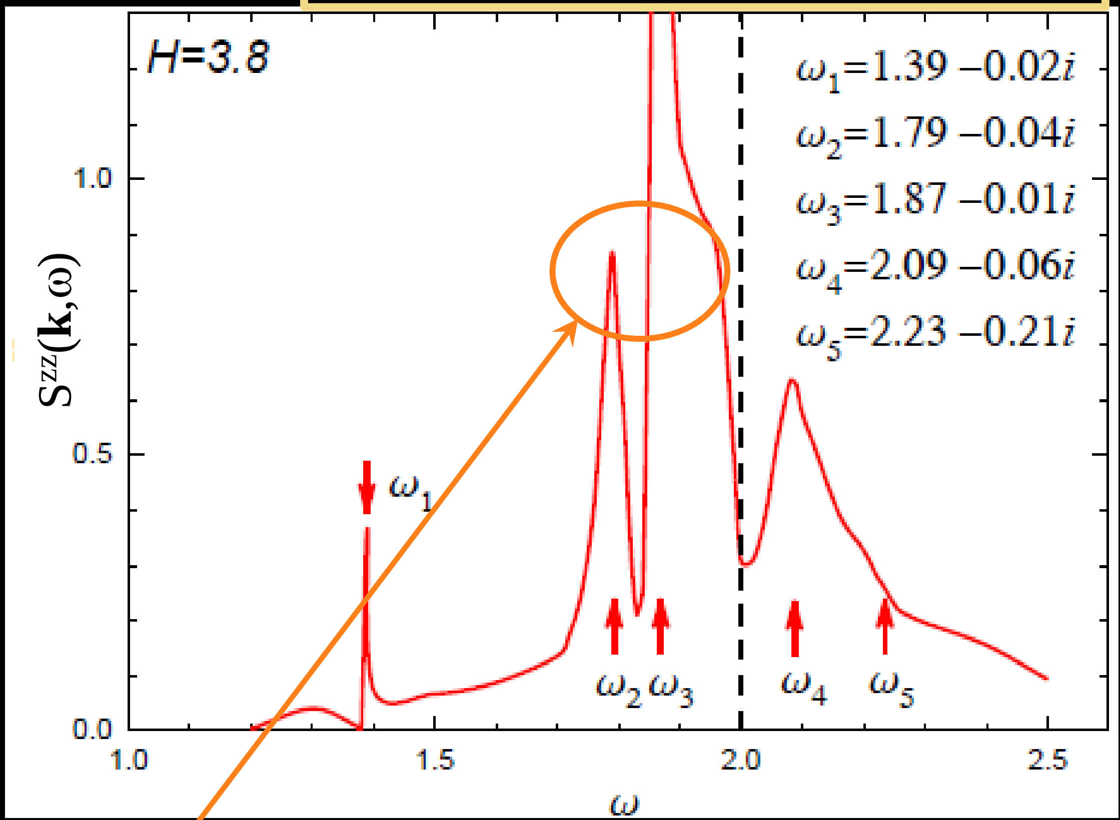


Антиферромагнетик в сильном поле

$$S^{zz}(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\left(i\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\langle \left[S^z_{\mathbf{k}}(t), S^z_{-\mathbf{k}}(0) \right] \right\rangle \right)$$

Первый порядок по 1/n

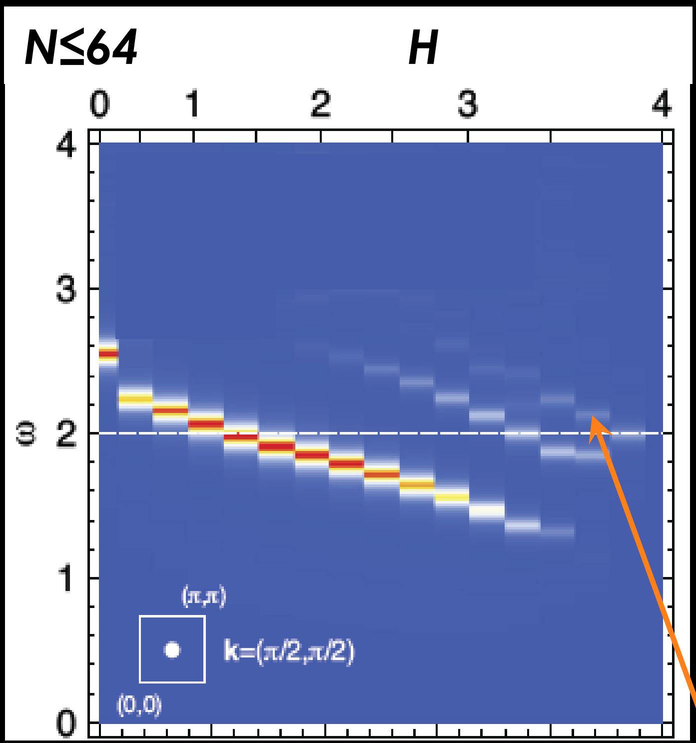


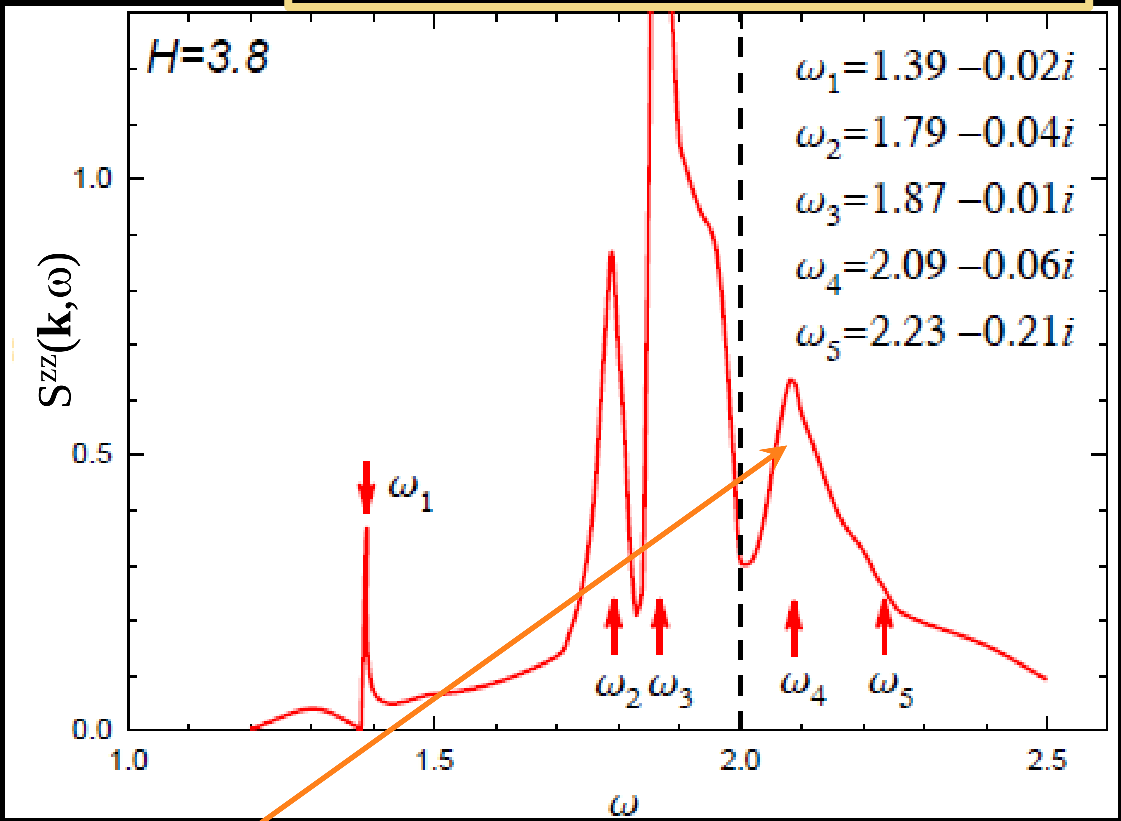


Антиферромагнетик в сильном поле

$$S^{zz}(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\left(i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left[S^z_{\mathbf{k}}(t), S^z_{-\mathbf{k}}(0) \right] \right\rangle \right)$$

Первый порядок по 1/n

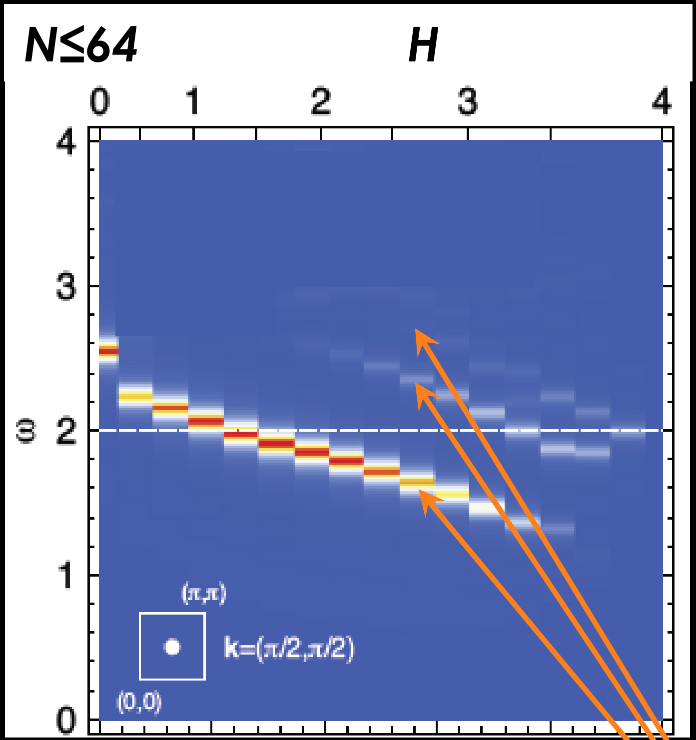


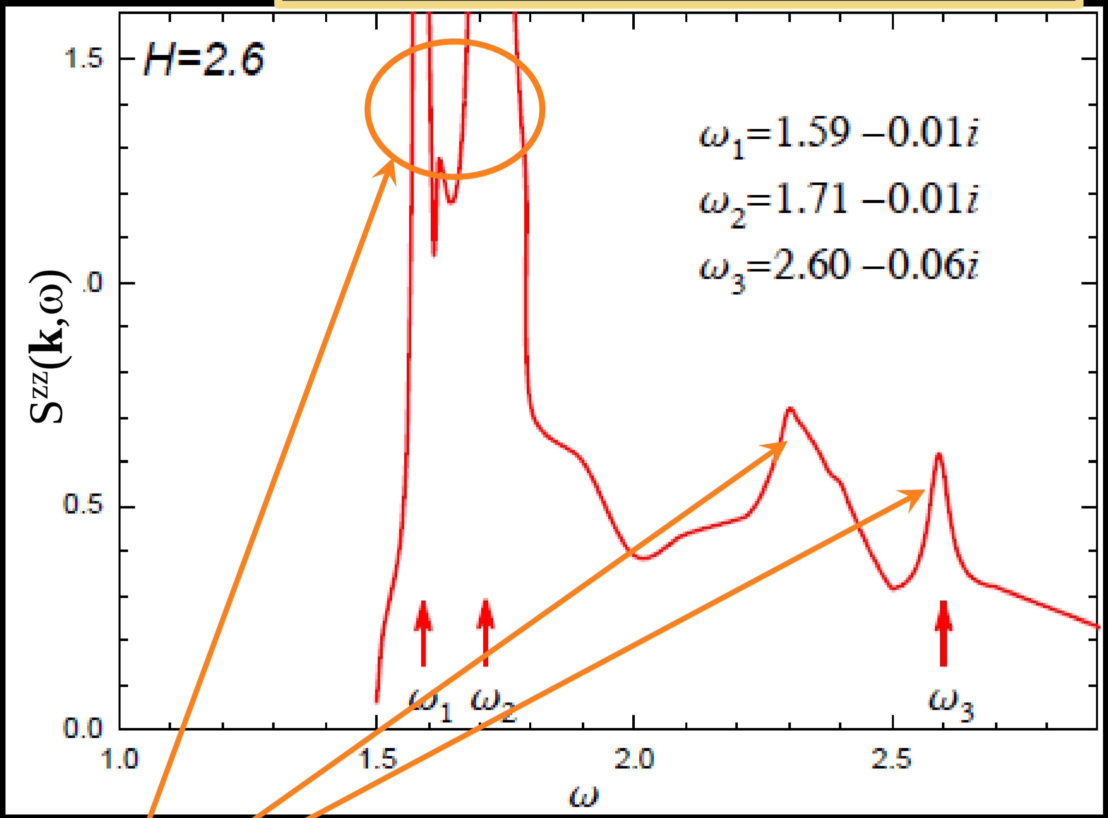


Антиферромагнетик в сильном поле

$$S^{zz}(\mathbf{k},\omega)=\mathrm{Im}\left(i\int_0^\infty dt e^{i\omega t}\left\langle\left[S^z_{\mathbf{k}}(t),S^z_{-\mathbf{k}}(0)\right]\right\rangle\right)$$

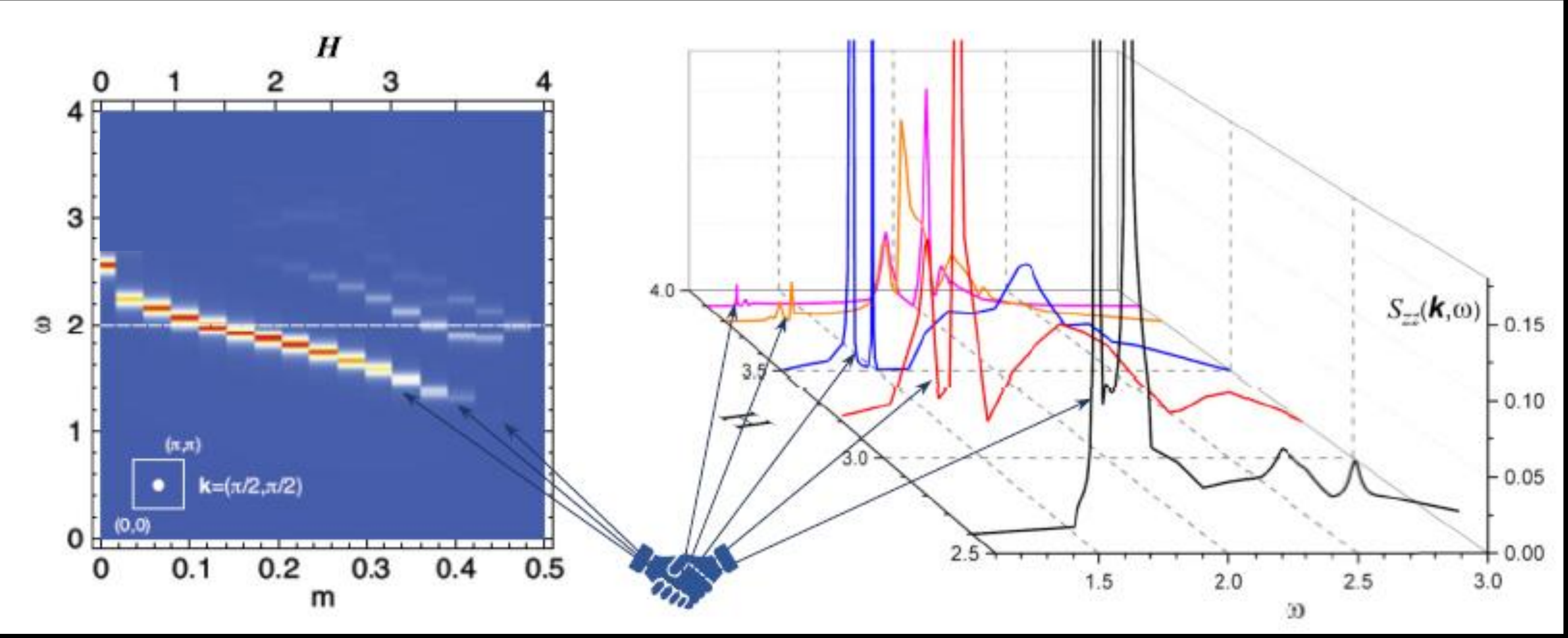
Первый порядок по 1/n





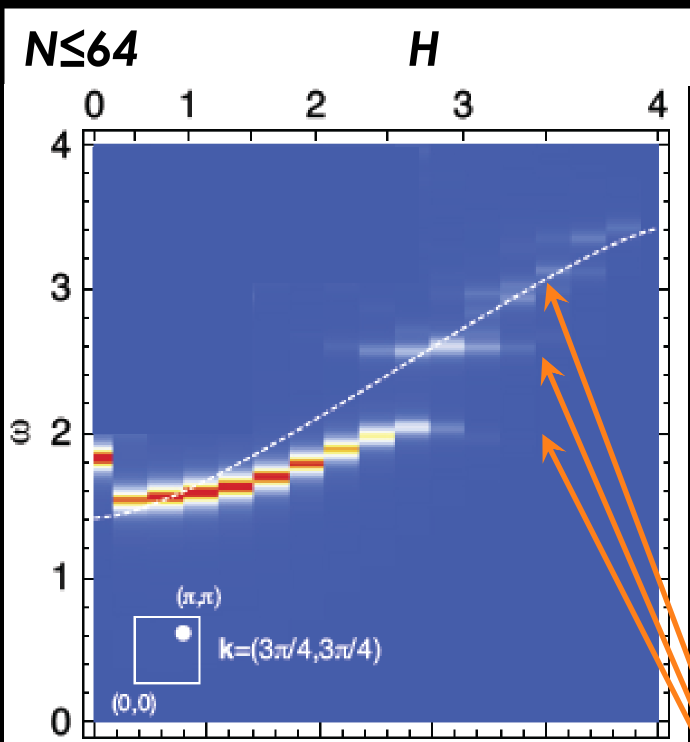
AS, PRB **102**, 014409 (2020)

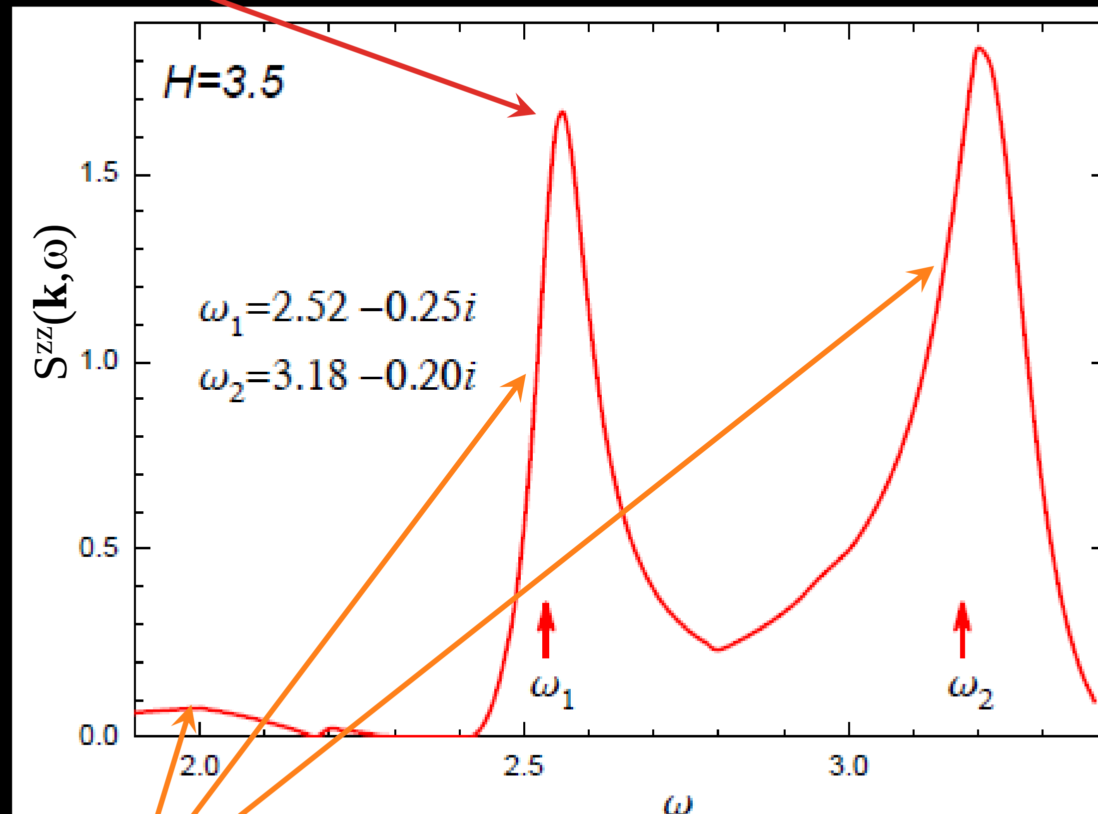
Антиферромагнетик в сильном поле



Антиферромагнетик в сильном поле

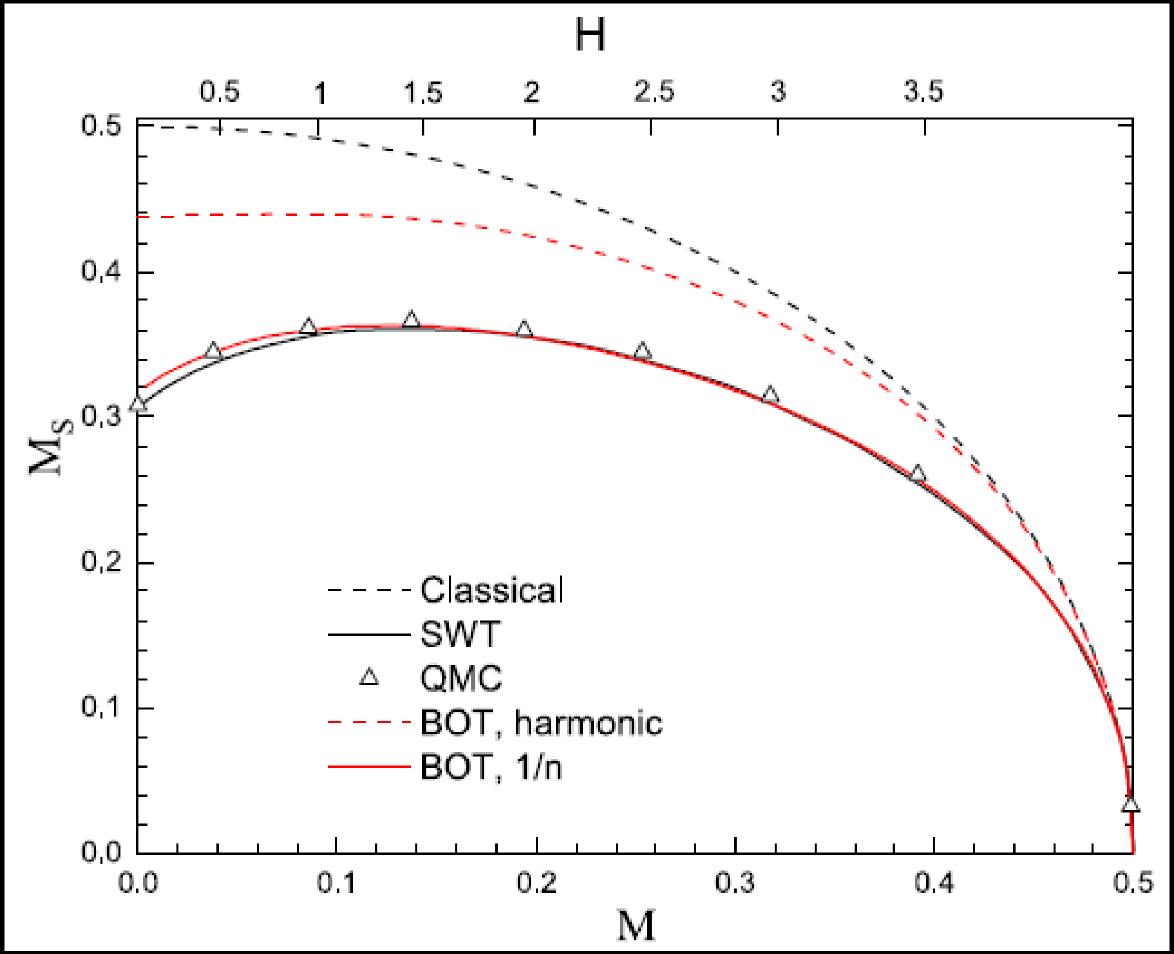
"немагнонная" мода, происходящая от моды Хиггса при H=0





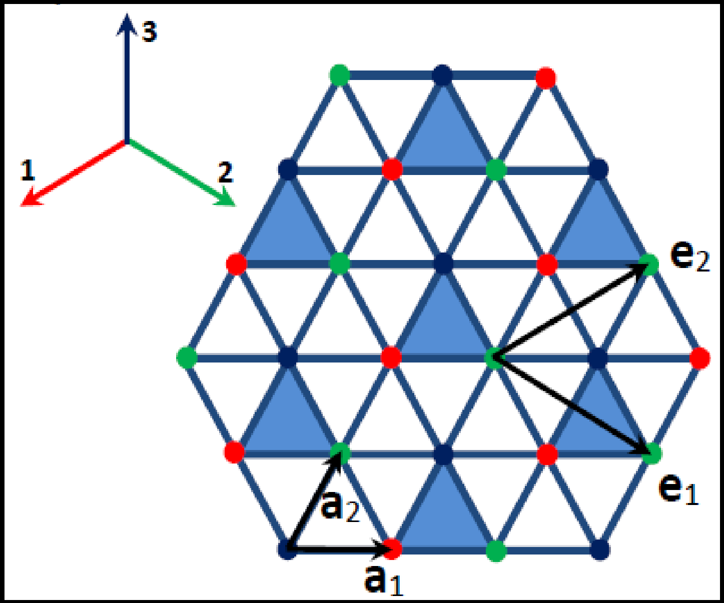
Первый порядок по 1/n

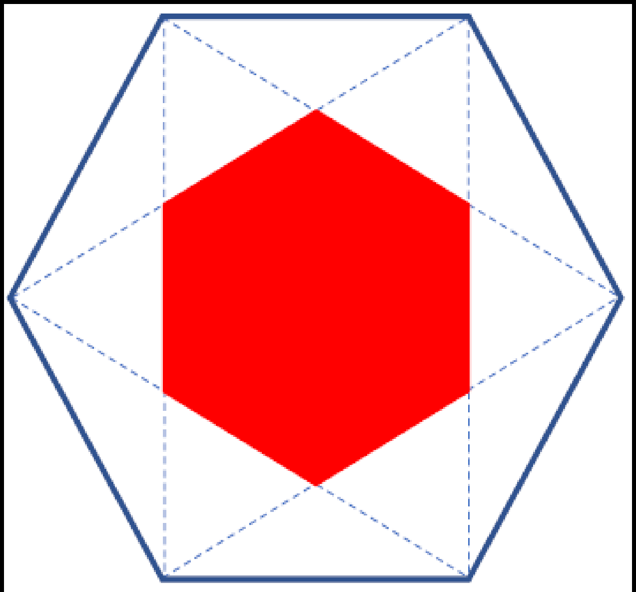
Статические свойства



Антиферромагнетик на треугольной решетке. Три спина в ячейке.

$$\mathcal{H} = J\sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$$





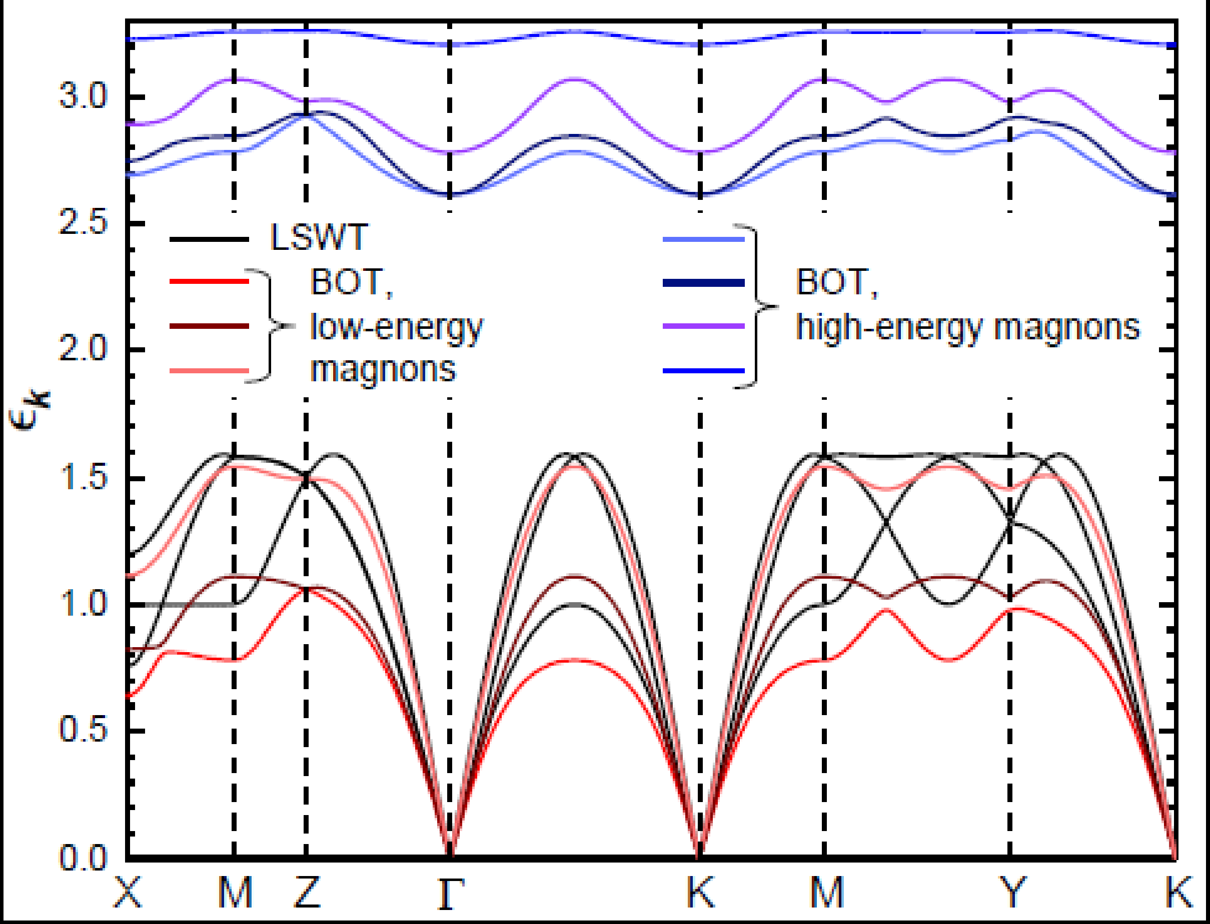
$$\chi(\mathbf{k},\omega) = i\int_0^\infty dt e^{i\omega t} \left\langle \left[\mathbf{S}_\mathbf{k}(t), \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}(0) \right] \right\rangle$$

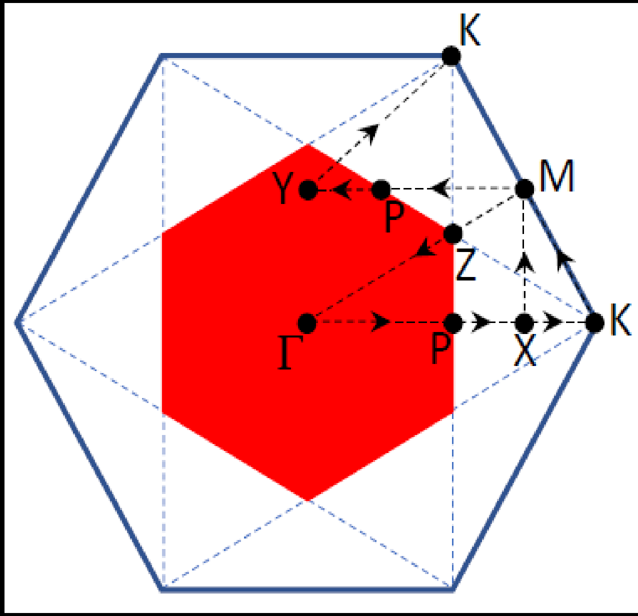
Антиферромагнетик на треугольной решетке

$2^3 - 1 = 7$ бозонов:

- 3 бозона – «обычные» магноны
- 4 бозона – другие квазичастицы

Гармоническое приближение

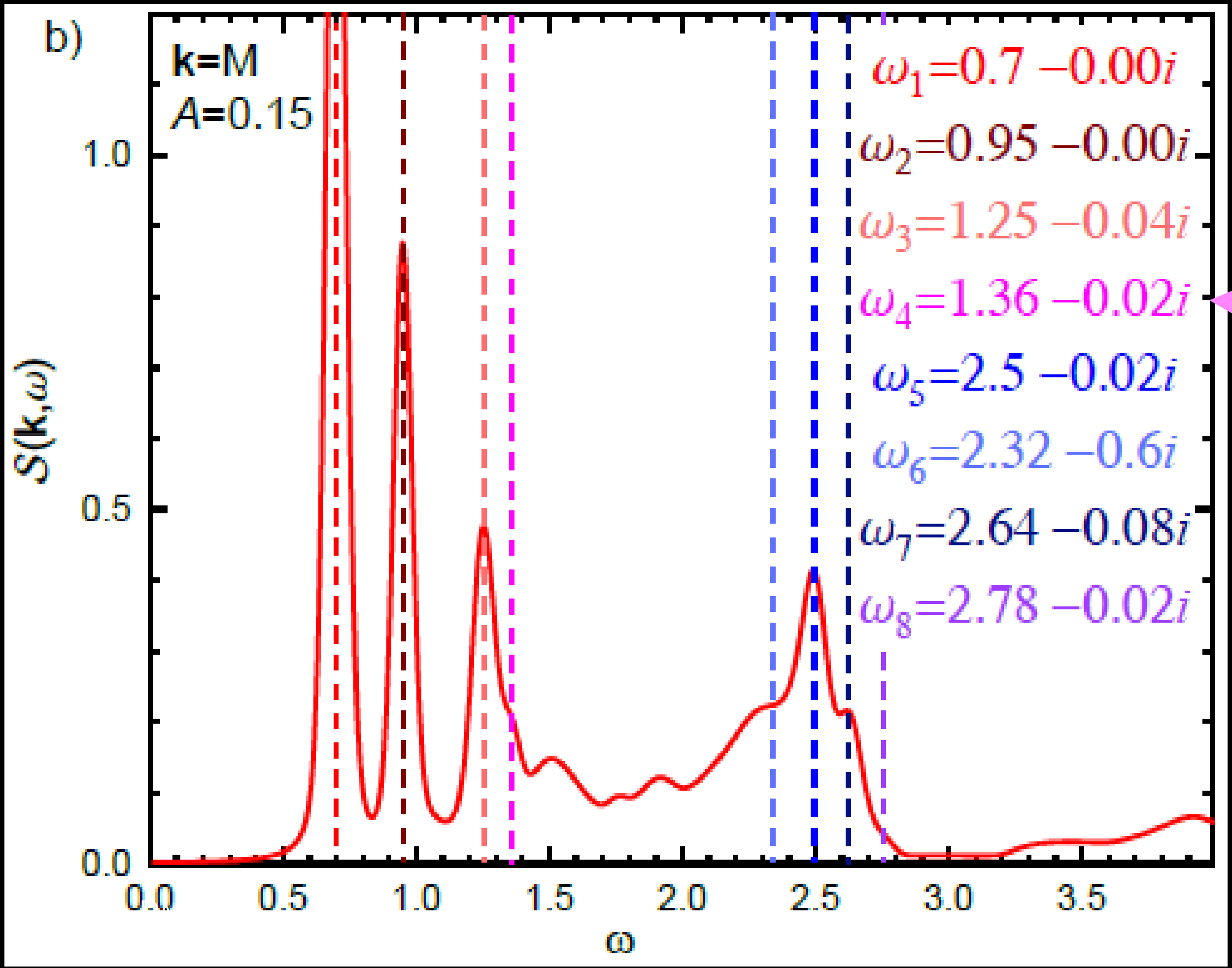


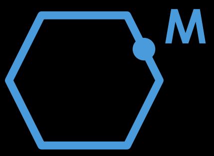


Антиферромагнетик на треугольной решетке

Первый порядок по1/n

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - A S_i^y S_j^y \right) \qquad A = 0.15$$





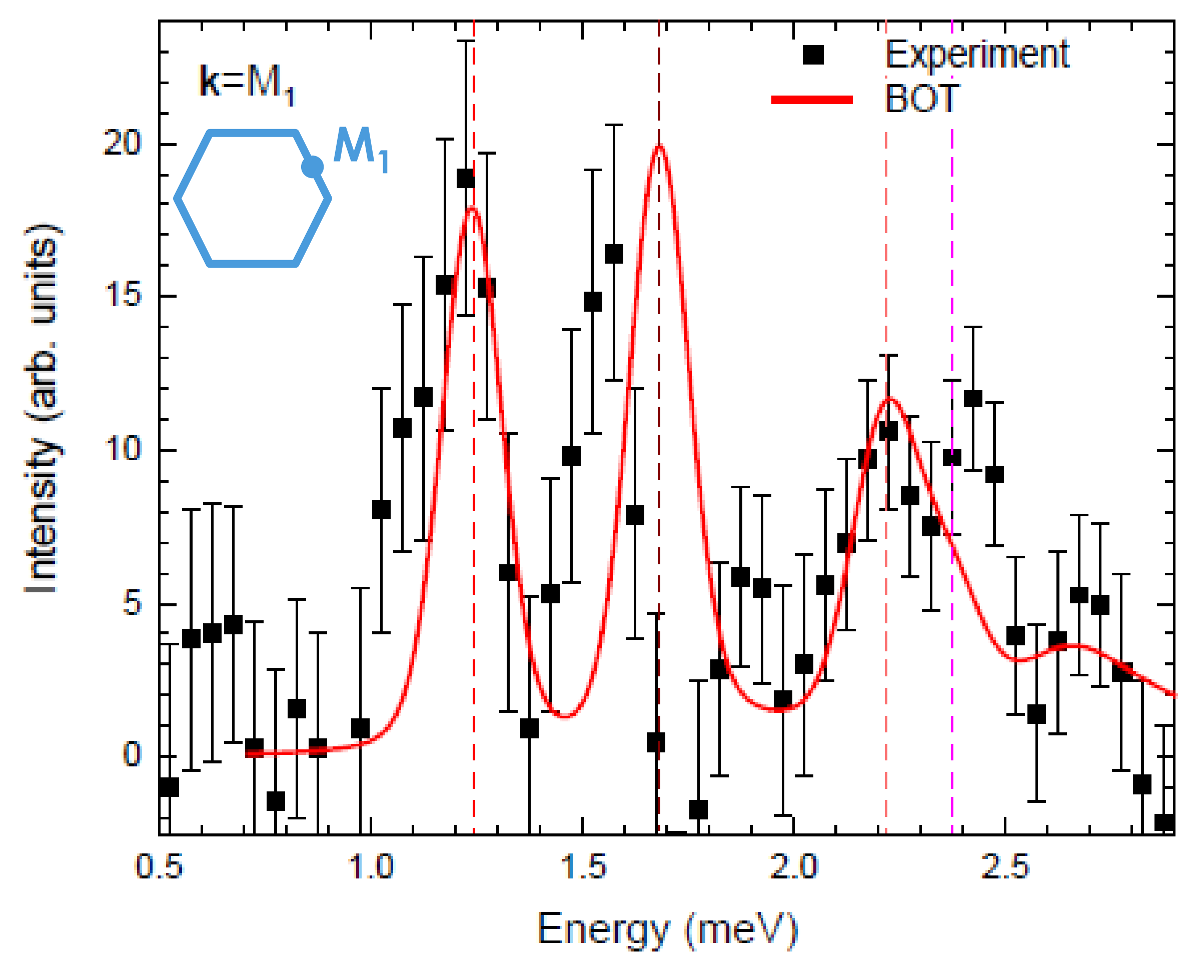
Новый полюс

$$D\left(\mathbf{k}, \omega, \left\{\Sigma\left(\mathbf{k}, \omega\right)\right\}\right) = 0$$

Антиферромагнетик на треугольной решетке. Сравнение с экспериментом.

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J\left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - A S_i^y S_j^y\right)$$

$$A = 0.15$$
$$J = 1.77 \ \mathrm{meV}$$

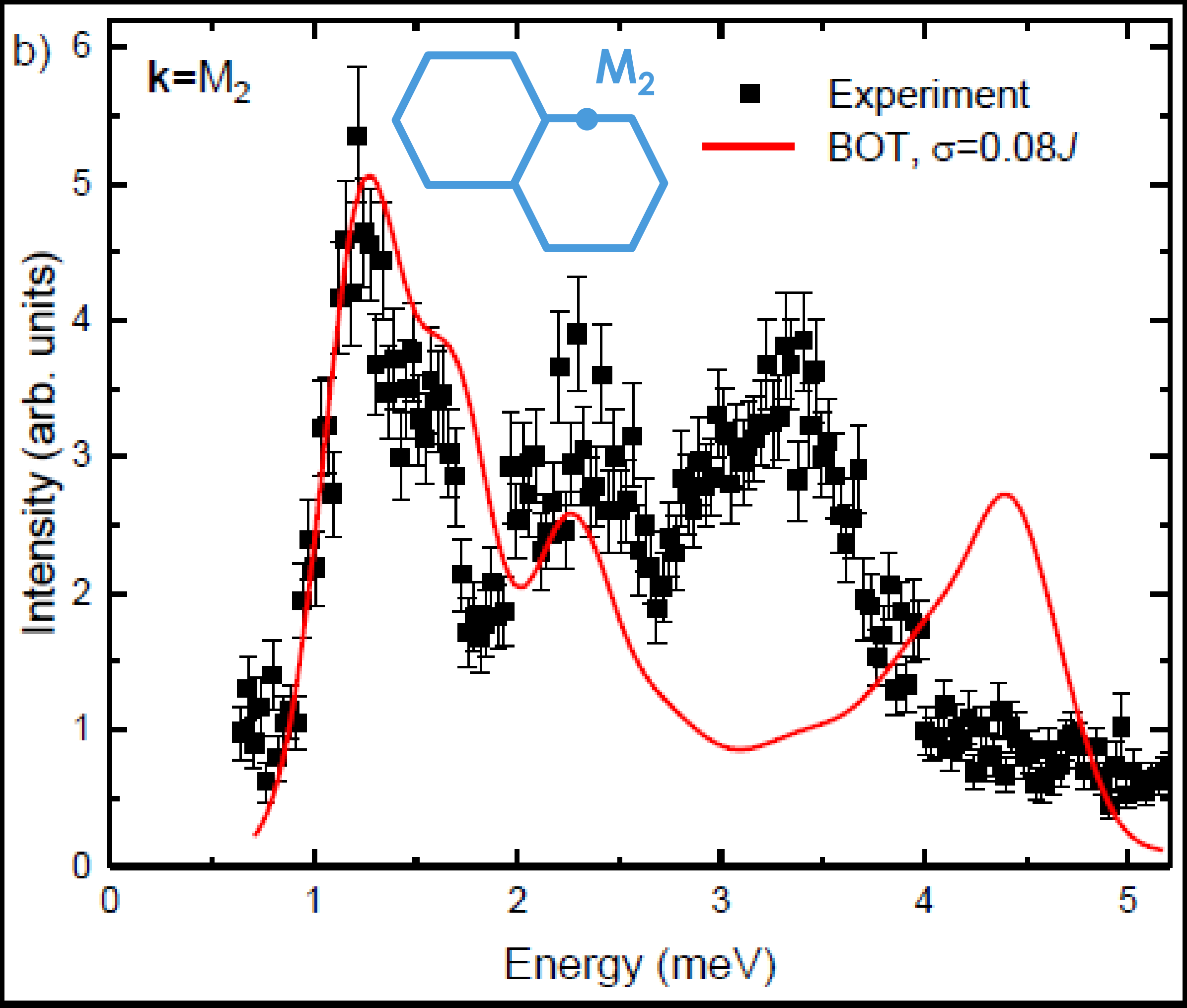


Нейтронный эксперимент в $Ba_3CoSb_2O_9$

J. Ma et al.,
PRL **116**, 087201 (2016)

Антиферромагнетик на треугольной решетке. Сравнение с экспериментом.

$$S(\mathbf{k},\omega) = \mathrm{Im}\sum_{\alpha,\beta}\left(\delta_{\alpha\beta} - k_\alpha k_\beta / k^2\right)\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\omega) \qquad \alpha,\beta = x,y,z$$



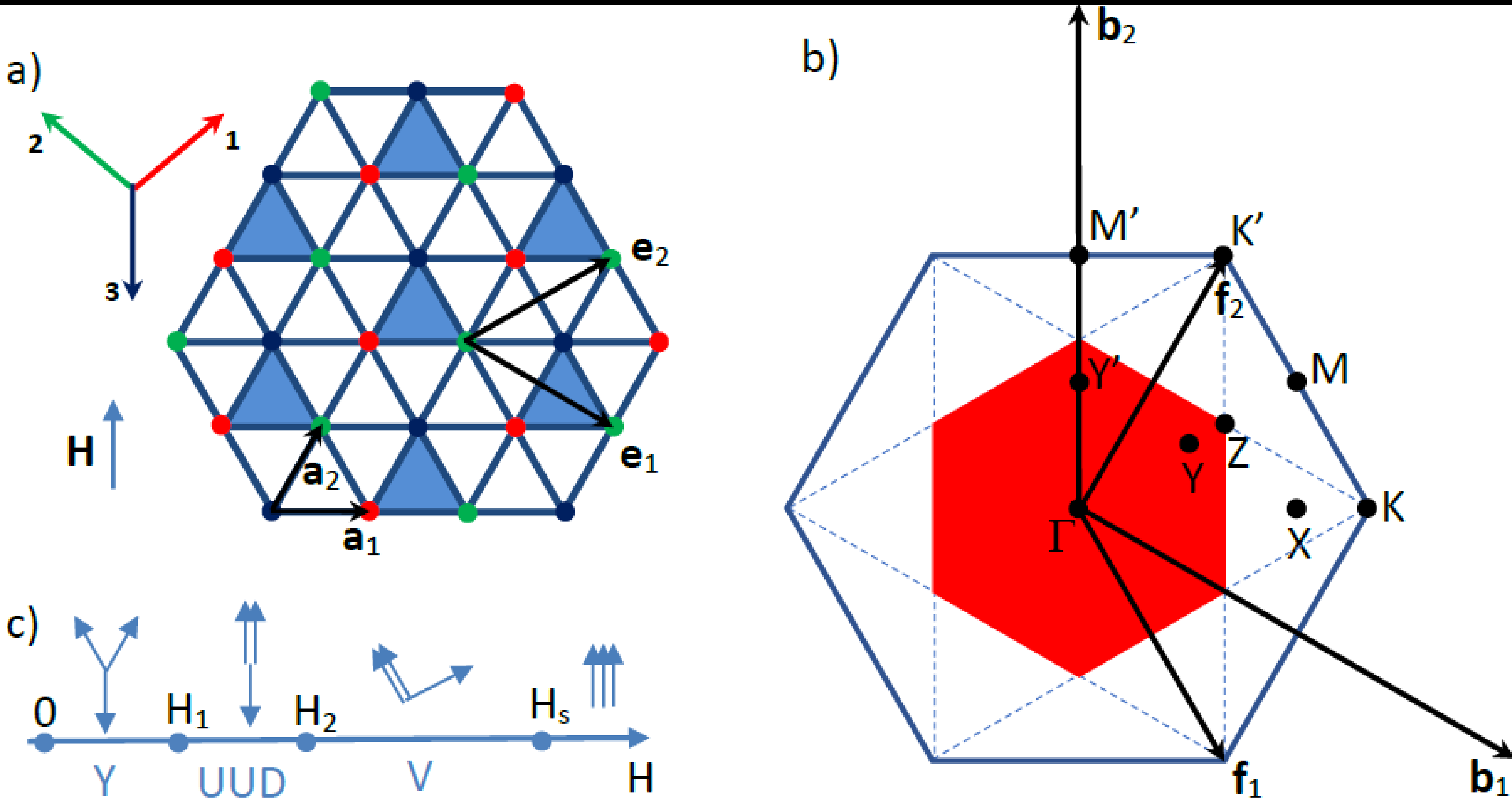
Нейтронный эксперимент в $Ba_3CoSb_2O_9$

S. Ito et al., Nature Communications **8**, 235 (2017)

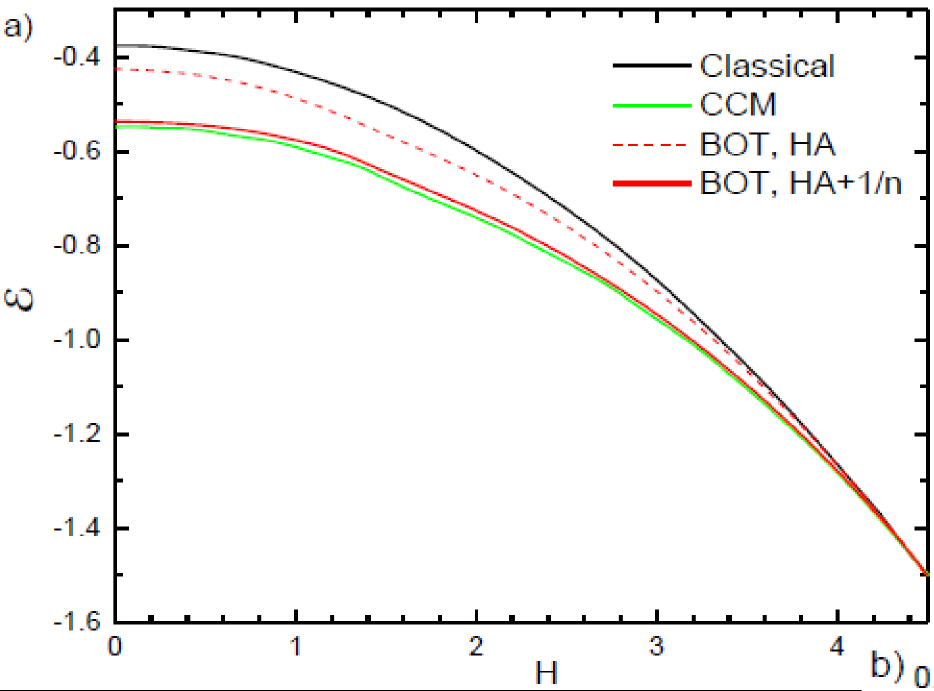
AS, PRB **105**, 144414 (2022)

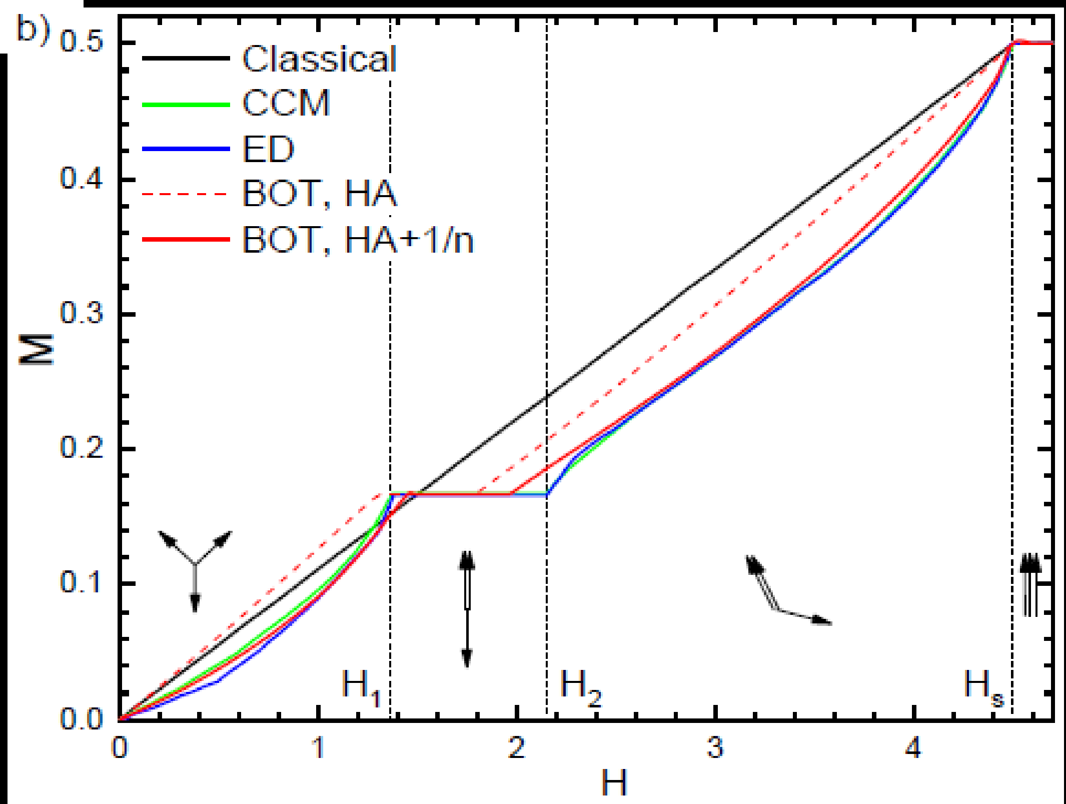
Антиферромагнетик на треугольной решетке в поле

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j - H\sum_i S_i^z$$

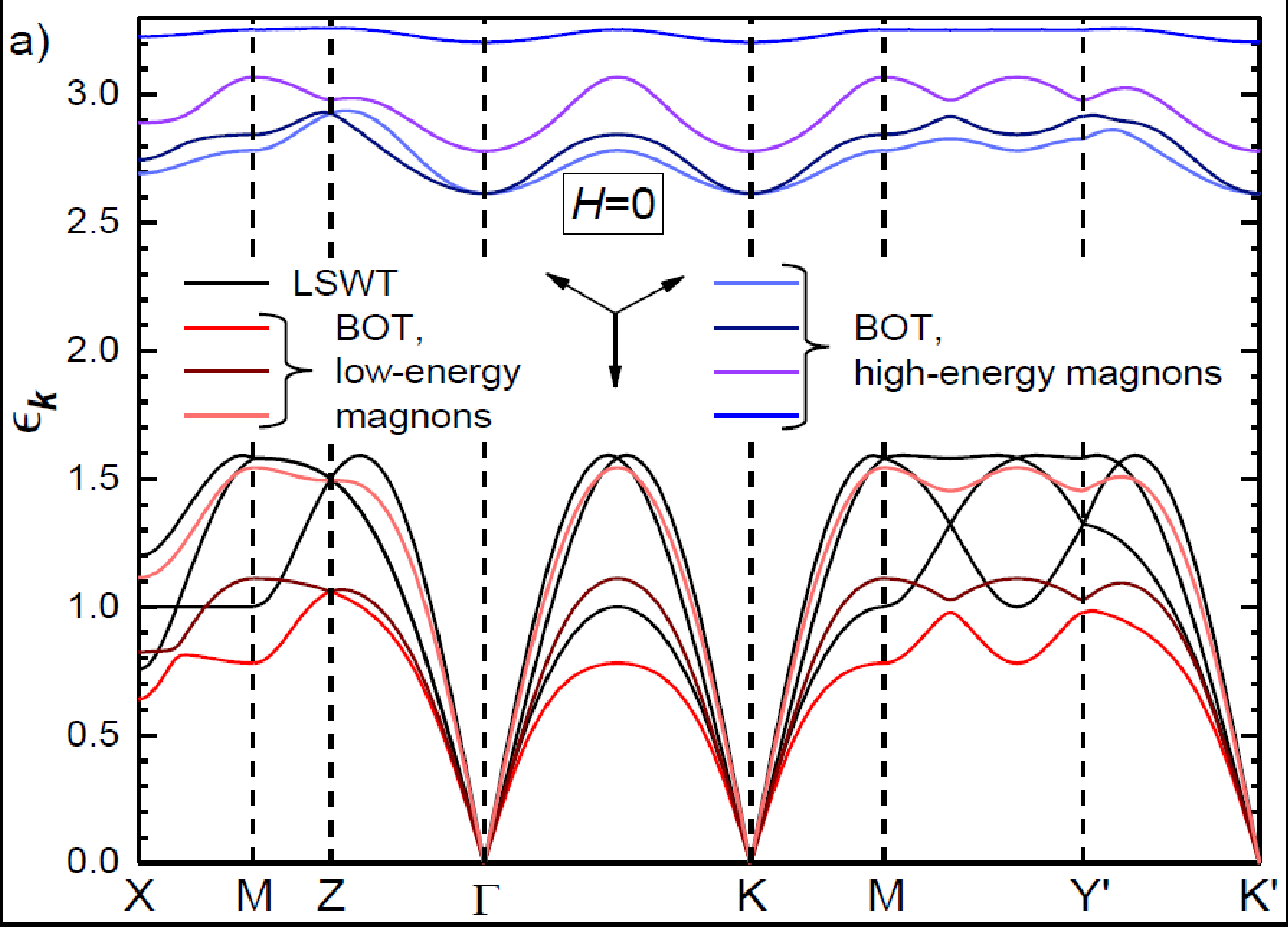


СТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

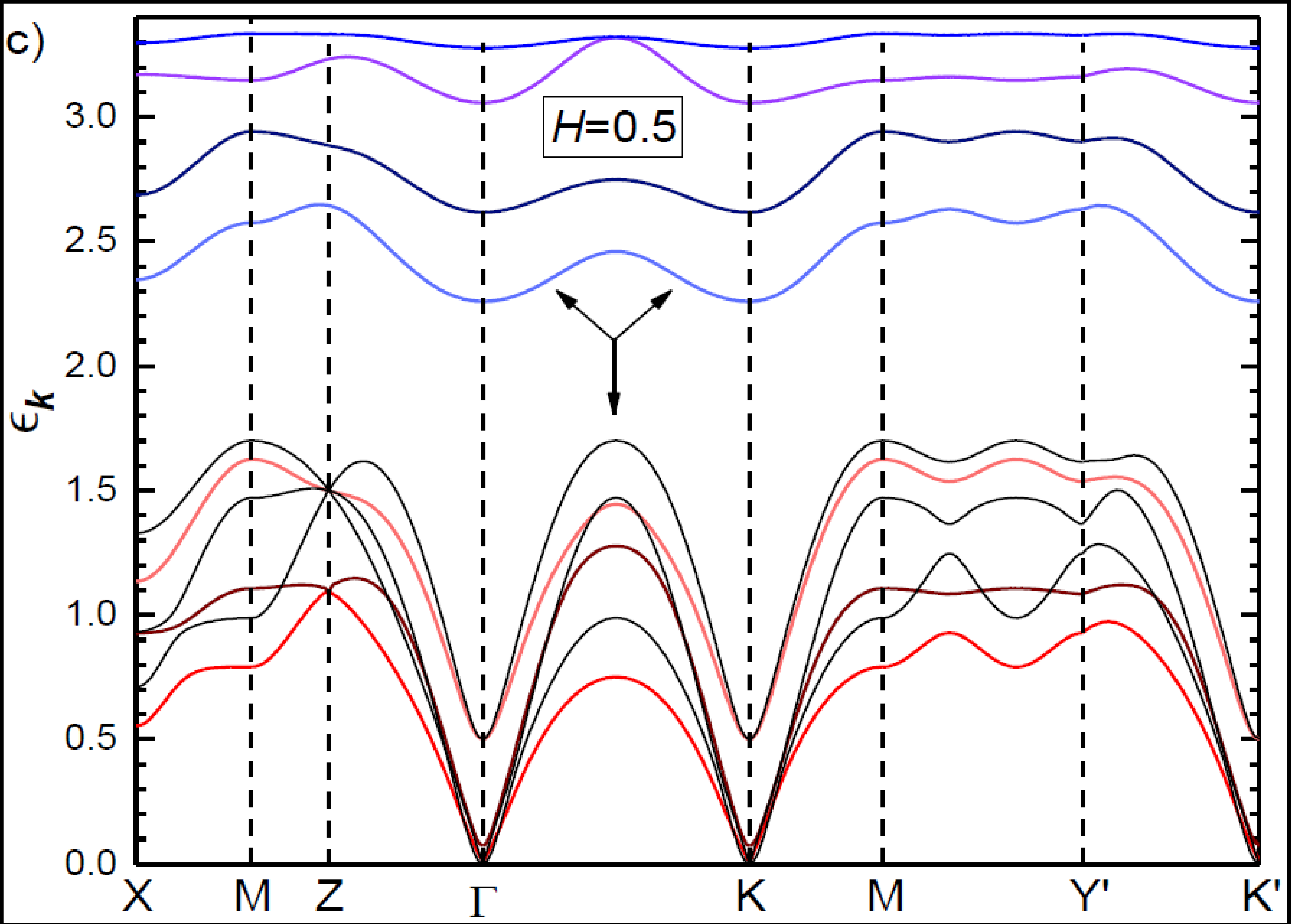




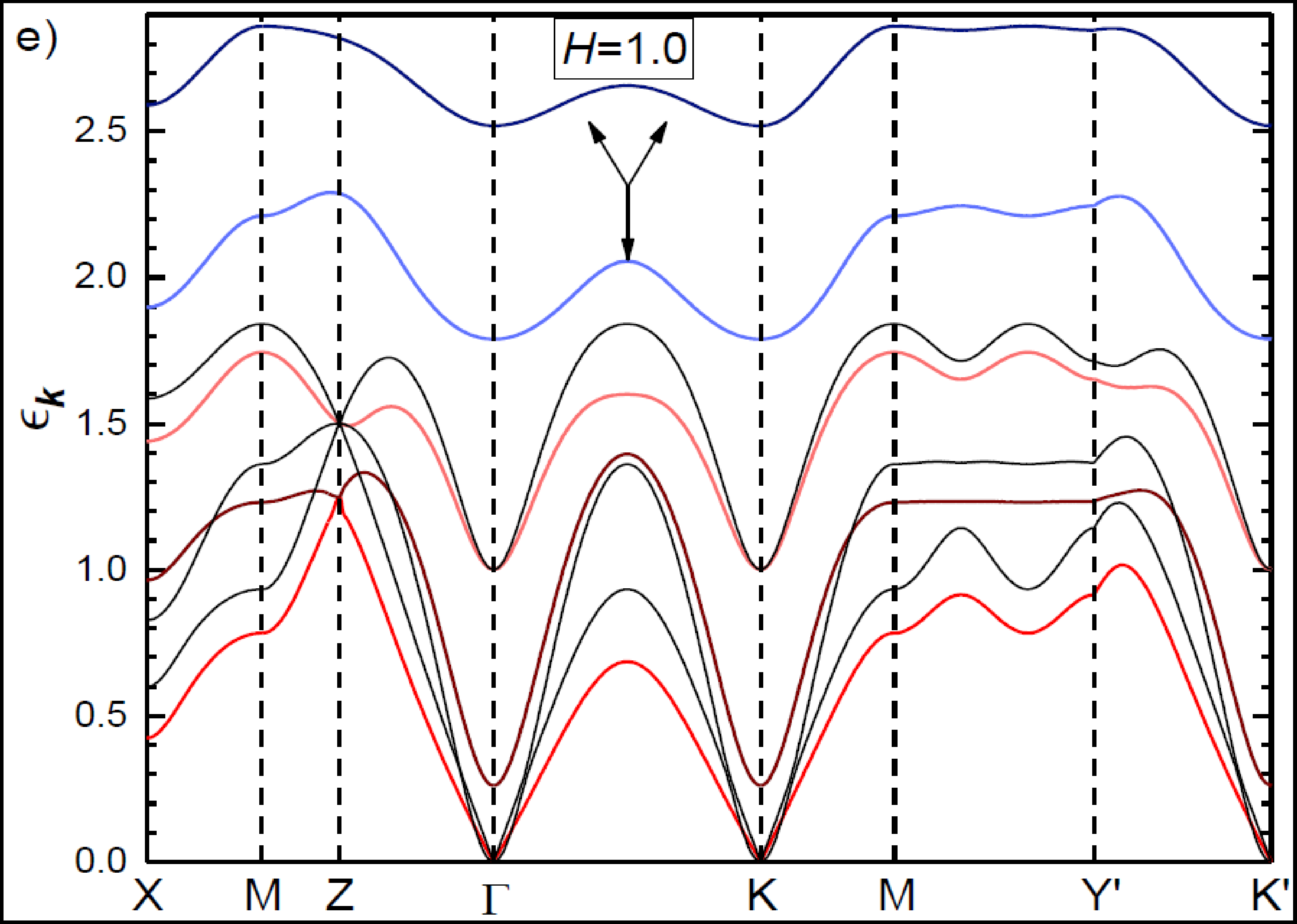
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



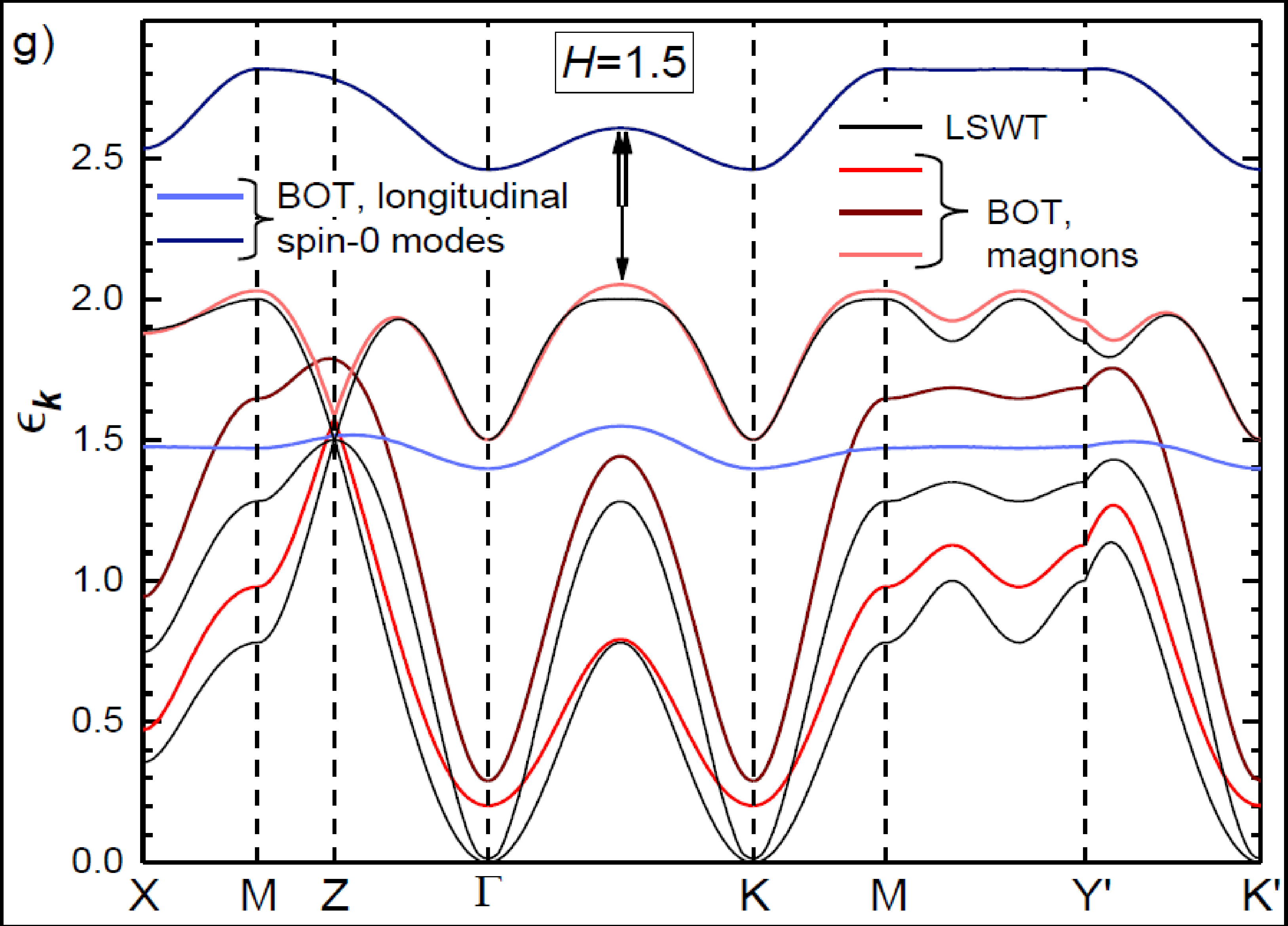
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



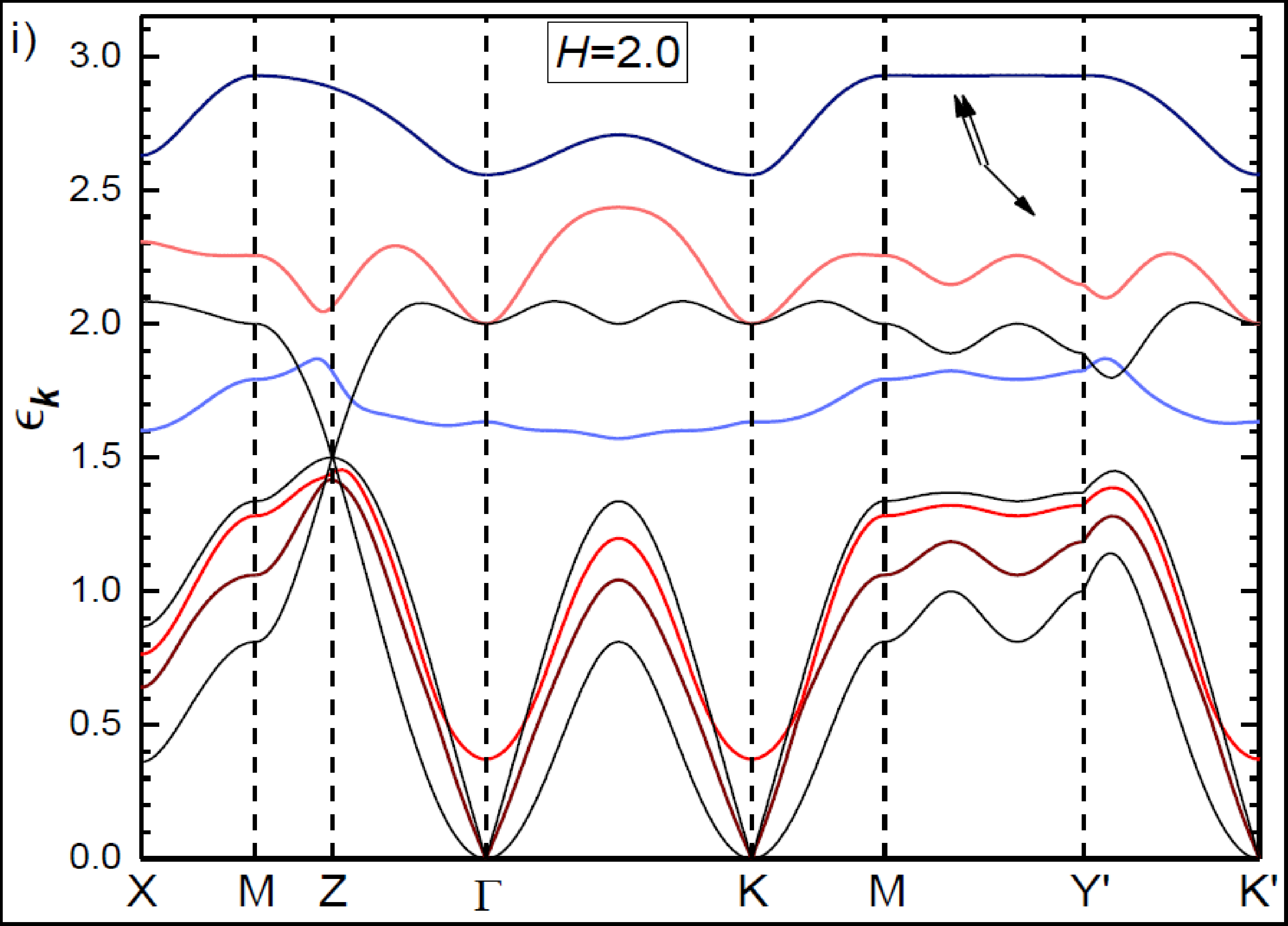
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



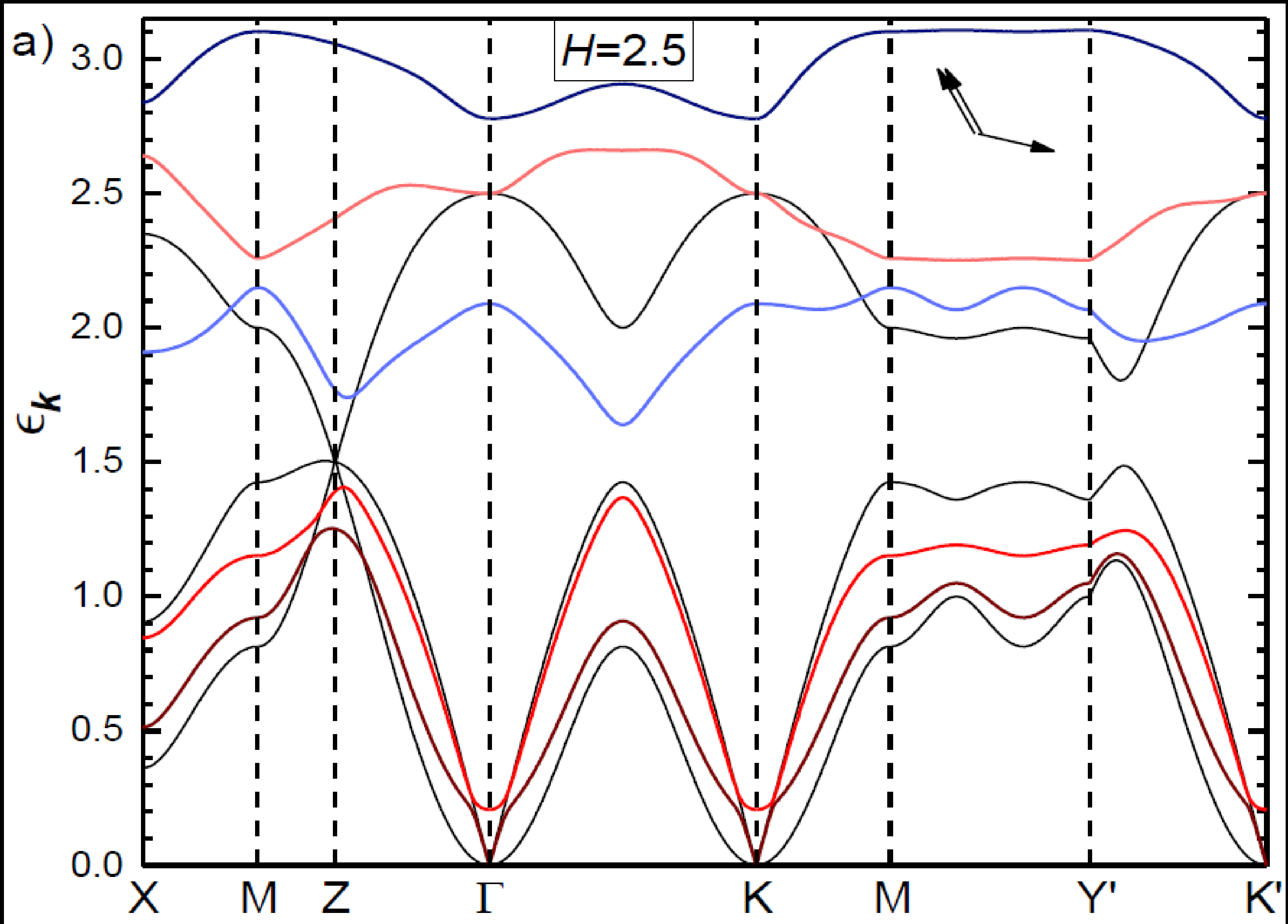
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



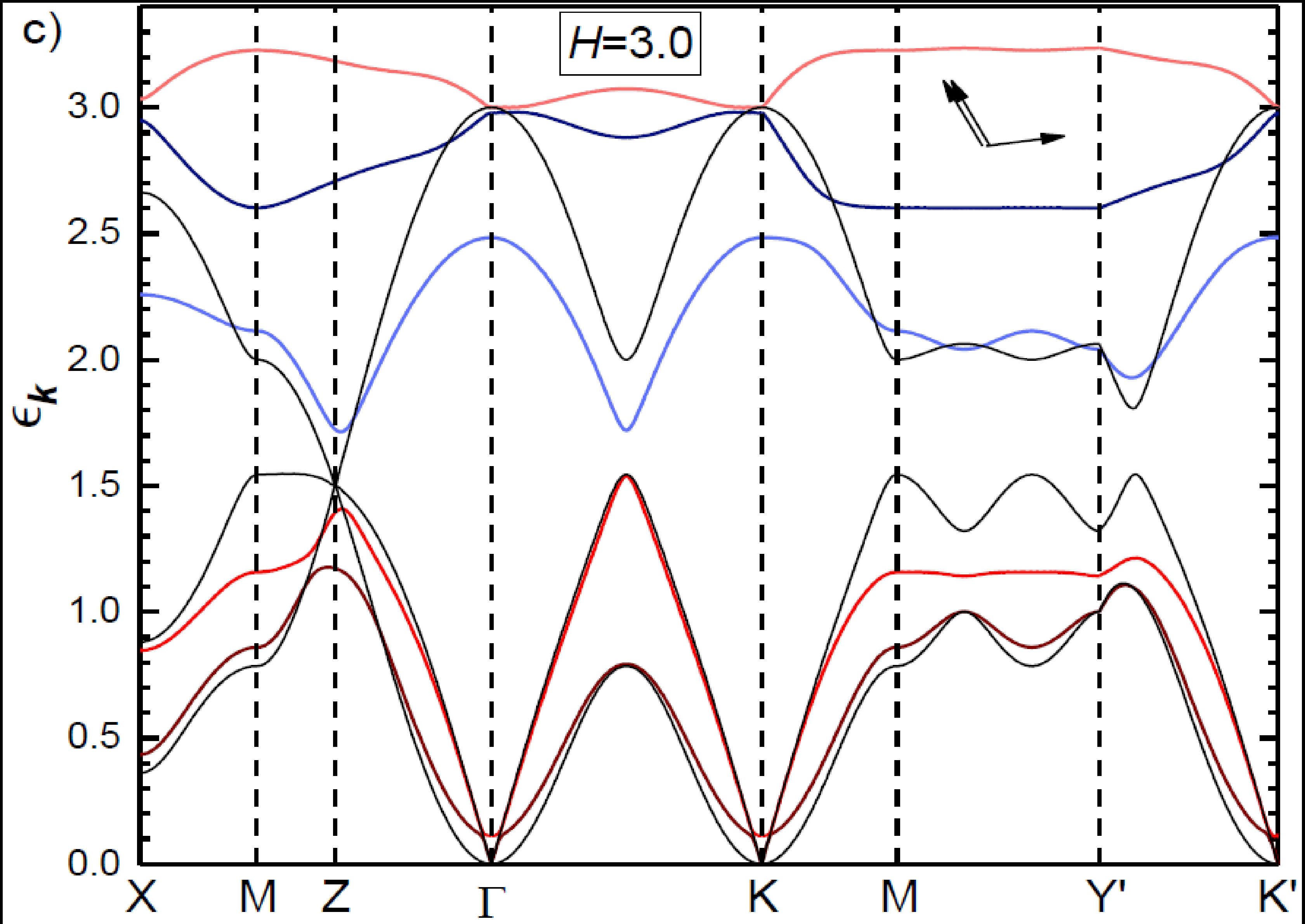
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



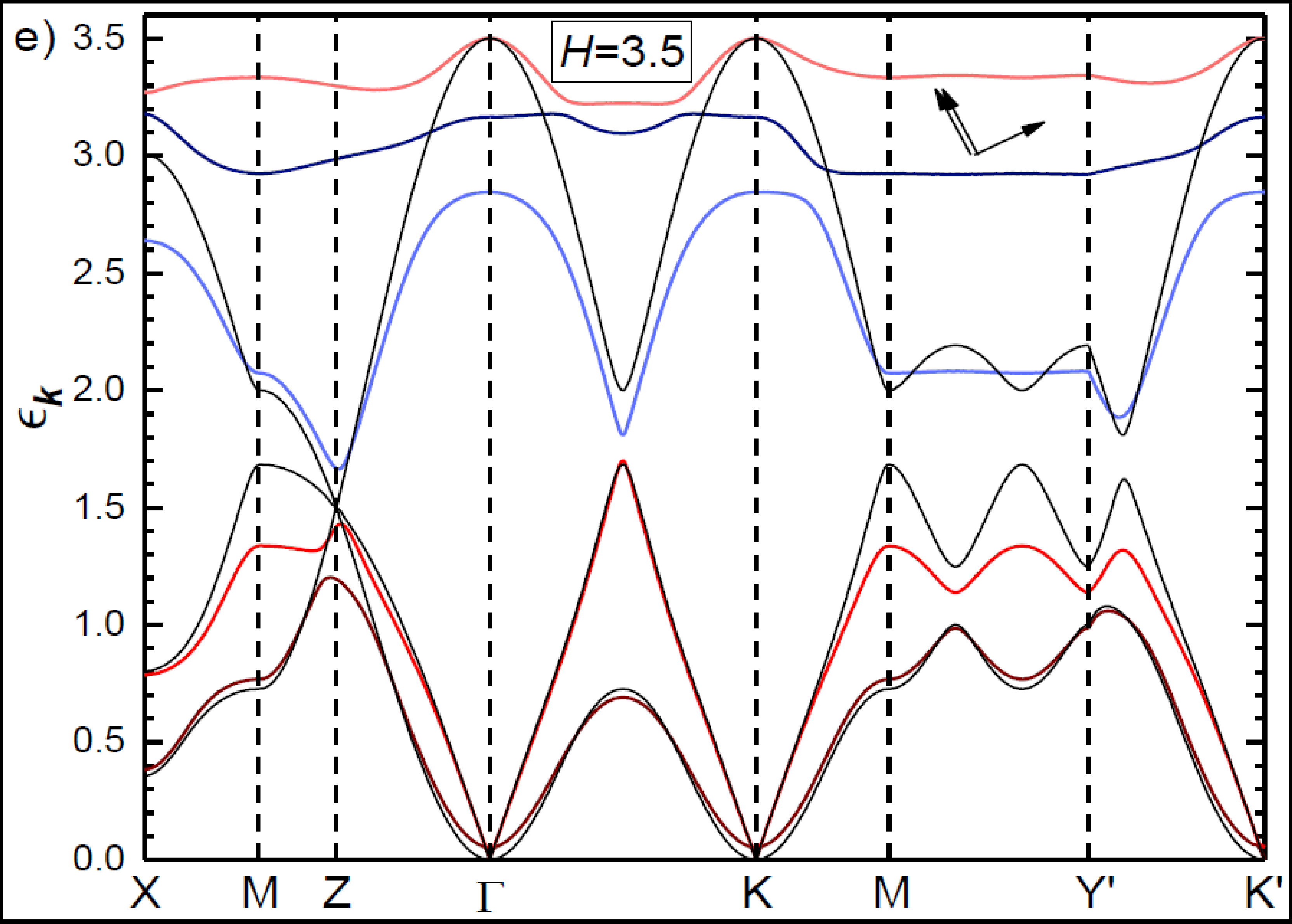
Динамические свойства. Гармоническое приближение.



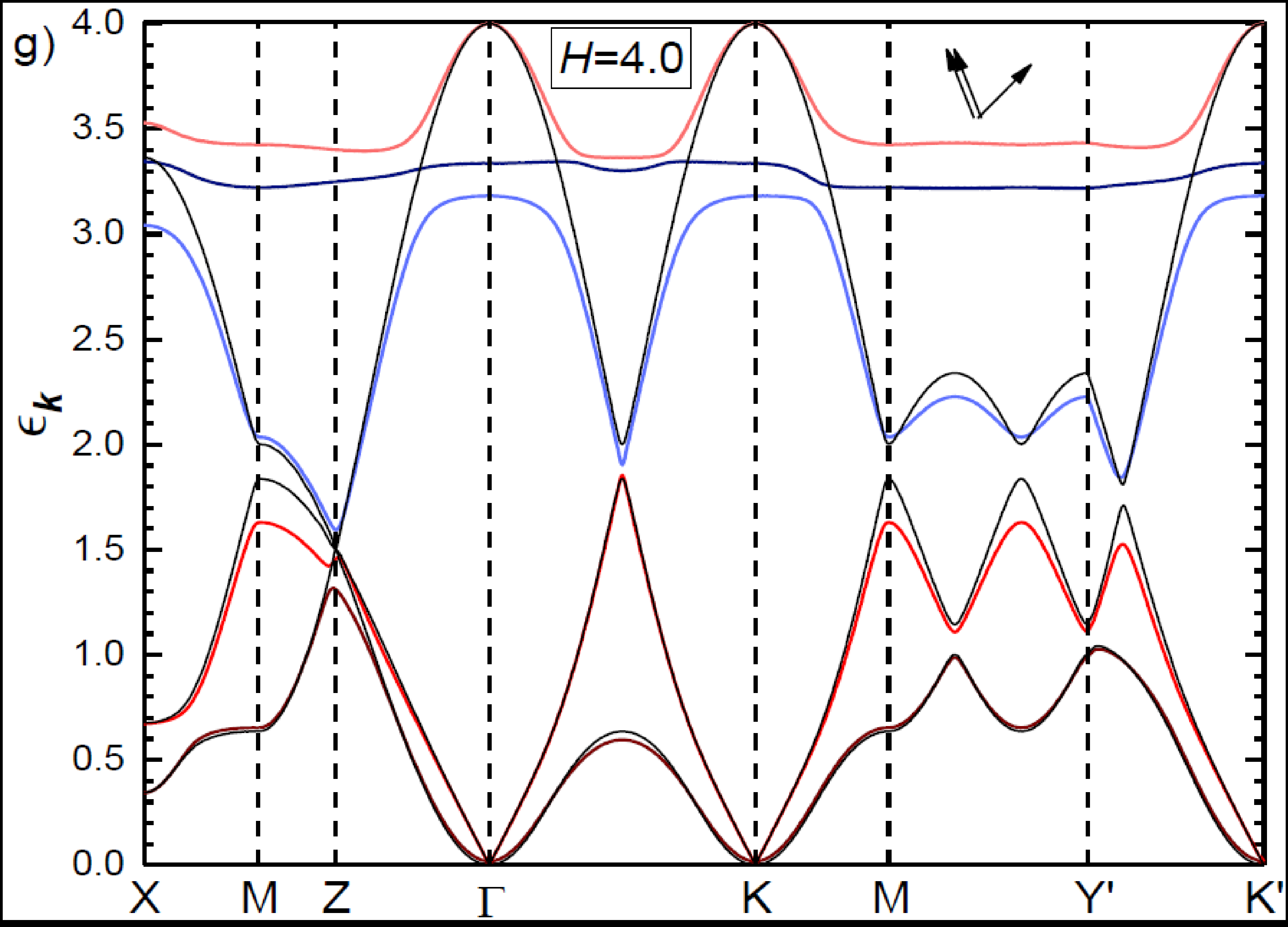
ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



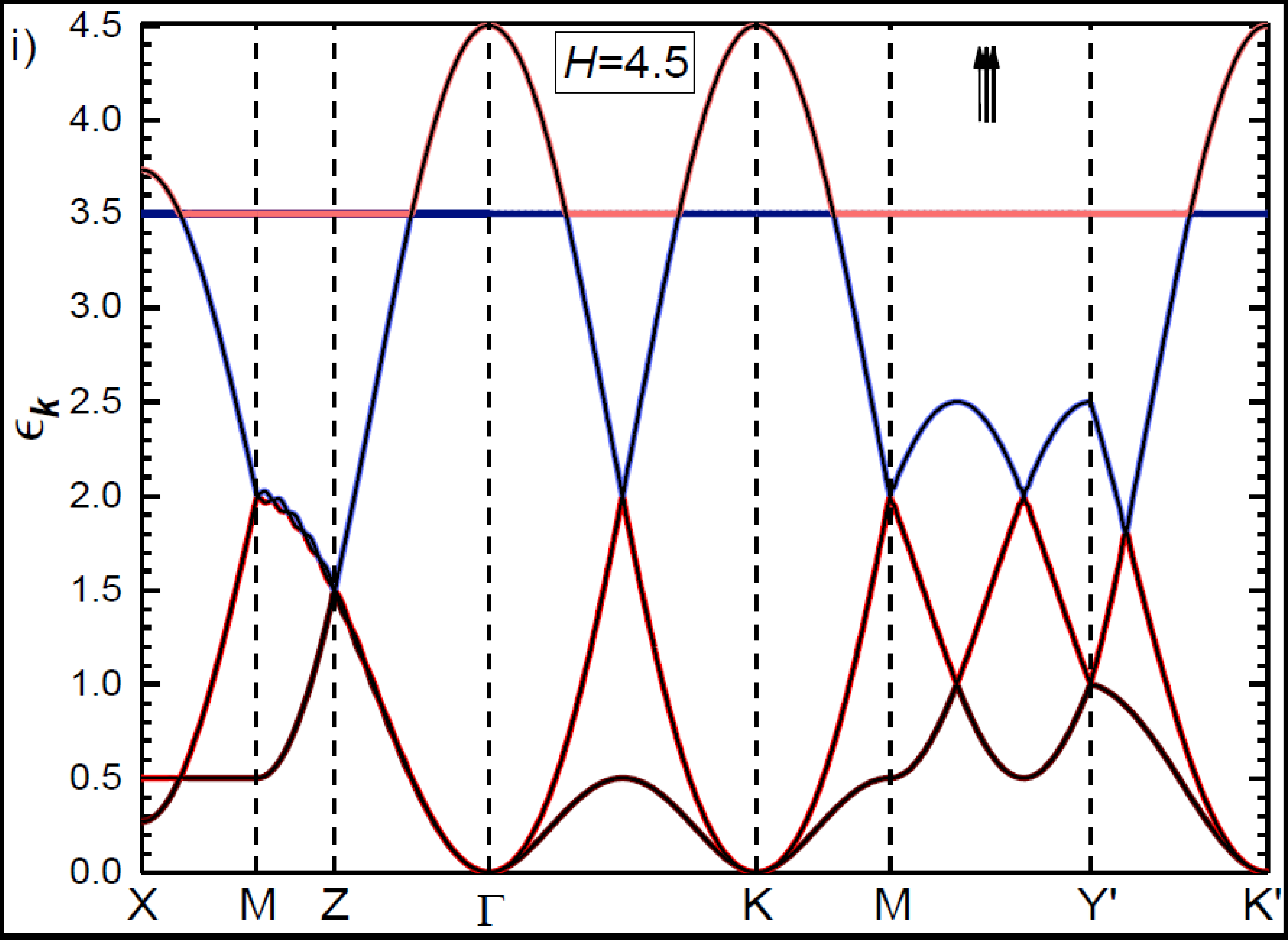
Динамические свойства. Гармоническое приближение.



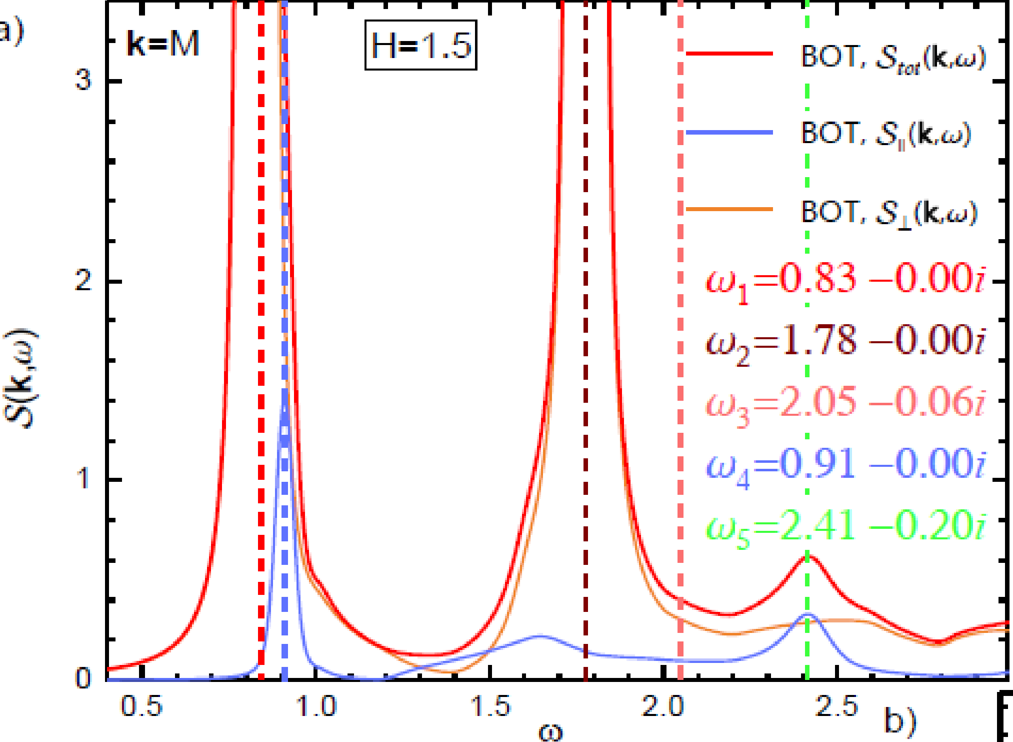
Динамические свойства. Гармоническое приближение.

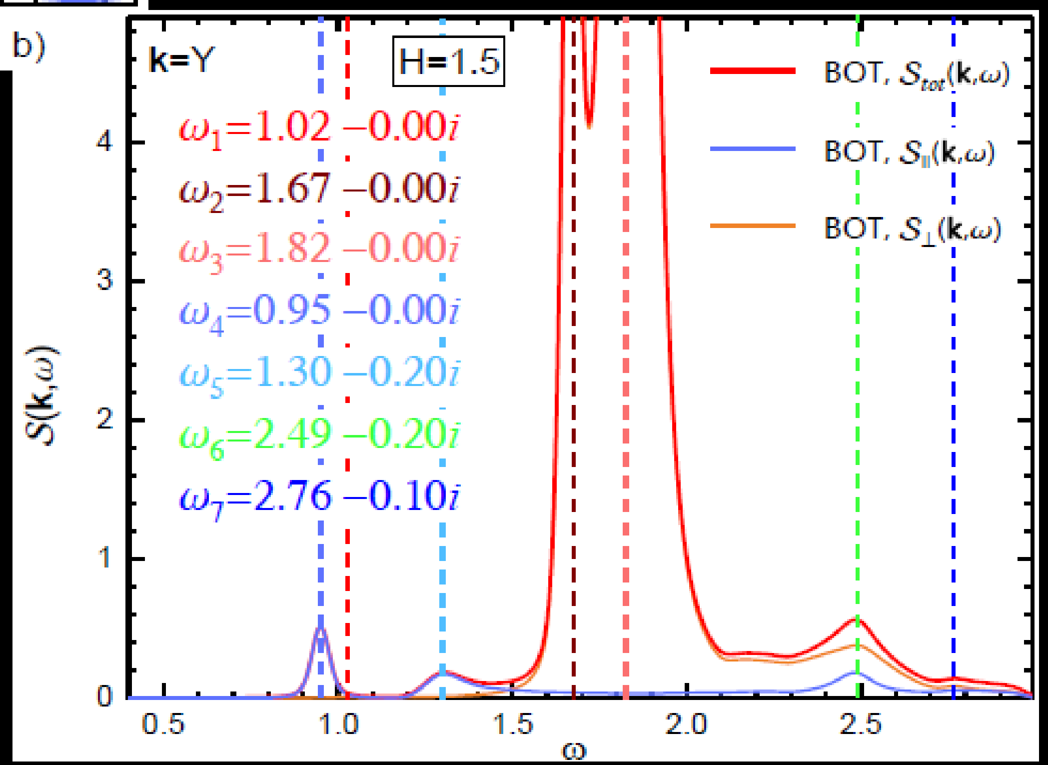


ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.



Первый порядок по1/n





Основные преимущества КПСО

✓Очень похоже на спин-волновую теорию:

- Параметр разложения1/n (физические результаты соответствуют n=1)
- Первые поправки по 1/n очень часто оказываются главными и вносят основной вклад в перенормировку наблюдаемых

✓Увеличение «зоопарка» элементарных возбуждений и довольно точное их описание

✓Подходит для описания как упорядоченных, так и неупорядоченных фаз

✓Правильное число голдстоуновских (бесщелевых) мод в любом порядке по 1/n

✓Процедура работает при любом числе спинов в элем. ячейке

✓Существенно стандартное описание переходов в некоторые экзотические фазы (например, в спиновый нематик)

Основные недостатки

Очень громоздкие преобразования

Спасибо за внимание!