Перепутанные состояния в одномерной и двумерной модели Кугеля-Хомского

А.В. Михеенков[1, 2 ,3 *], К.И. Кугель[4, 5], А.Ф. Барабанов[1], А.В. Шварцберг[2]

1 Институт физики высоких давлений РАН, Калужское шоссе, стр. 14, Москва (Троицк), 142190.

2 Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, Долгопрудный Мос. обл., 141700.

3 НИЦ «Курчатовский институт», пл. Академика Курчатова , 1, Москва, 123182.

4 Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, Ижорская ул., 13, Москва, 125412.

5 Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Мясницкая ул., 20, 101000.

*mikheen@bk.ru

Концепция перепутанных квантовых состояний (entangled states), возникшая еще в 1930-е годы, на протяжении многих лет была реализована лишь в оптических приложениях. Позднее перепутанные состояния нашли применение в квантовой информатике, криптографии и квантовых вычислениях. И только в самые последние годы идея перепутанных состояний проникла в физику конденсированного состояния. Здесь интересен случай, когда перепутываются состояния разной природы, например, спиновые и орбитальные. Такая ситуация может возникать в спин-орбитальных задачах, в частности, в модели Кугеля-Хомского. В работе рассматривается симметричная спин-орбитальная (спин-псевдоспиновая) модель Кугеля-Хомского для одного и двух измерений. Использован сферически-симметричный самосогласованный подход для спиновых (псевдоспиновых) функций Грина. Показано, что при антиферромагнитном знаке обменов в спиновой и псевдоспиновой подсистемах и отрицательном межподсистемном обмене *K<0* возникают перепутанные спин-псевдоспиновые (то есть спин-орбитальные) состояния.

Введение

В системах с сильно коррелированными электронами, таких как соединения переходных металлов, тесная взаимосвязь спиновых, орбитальных и зарядовых степеней свободы приводит к необычайному разнообразию фазовых диаграмм и ко многим необычным явлениям.

В недопированных соединениях магнетизм обусловлен сверхобменным взаимодействием, приводящим к гамильтониану типа Гейзенберга. В системах с орбитальным вырождением магнетизм обычно описывается спин-орбитальными моделями, в которых спиновое взаимодействие гейзенберговского типа дополняется взаимодействием между орбиталями, а также взаимодействием этих подсистем. Таким образом, орбитали определяют взаимодействие между спинами и наоборот. Однако обменный механизм взаимодействия орбиталей сосуществует и с решеточным (ян-теллеровским) механизмом. При заданном заполнении орбиталей величина и знак обменного взаимодействия задаются правилами Гудинафа--Канамори--Андерсона. Такая спин-орбитальная физика может интерпретироваться как обобщение модели Гейзенберга, где обменные интегралы сами являются операторами, зависящими от орбитальных степеней свободы. В результате и спиновое, и орбитальное взаимодействие может быть как ферро-, так и антиферромагнитного типа. При этом обменное взаимодействие оказывается сильно фрустрированным даже на квадратной и кубической решетках, что усиливает квантовые эффекты. Таким образом, спины и орбитали формируют «запутанное» квантовое состояние, которое вызывает в последнее время значительный интерес. Мы рассмотрим эту проблему на примере симметричной спин-орбитальной модели на линейной и квадратной решетках, воспользовавшись сферически-симметричным самосогласованным подходом, дающим надежные результаты для низкоразмерных спиновых систем.

Модель и метод

Будем исходить из симметричного варианта спин-орбитальной модели (иногда называемой моделью Кугеля--Хомского). Гамильтониан имеет вид

здесь $\mathrm{S_i}$, $\mathrm{S_{ig}}$ **–** операторы спина на узде i и соседнем узле **i+g**, ***T***– операторы псевдоспина с аналогичной

$$H = J\Sigma S_i S_{ig} + I\Sigma T_i T_{ig} + K\Sigma(S_i S_{ig})(T_i T_{ig})$$

индексацией, суммы берутся по связям. Рассматриваются 2D квадратная решетка и 1D цепочка.

Модель изучается в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода для двухвременных запаздывающих спиновых функций Грина (СССП). Метод (см. [1]) сводится к замыканию цепочки уравнений для функций Грина на втором шаге с выделением спин-спиновых корреляторов. Подход автоматически сохраняет SU(2) симметрию гамильтониана, трансляционную симметрию и спиновый констрейнт на узле. При ненулевой температуре в СССП также автоматически соблюдается теорема Мермина-Вагнера.

Мы рассматриваем случай АФМ взаимодействия в каждой из подсистем J = I > 0 и отрицательного межподсистемного обмена K < 0 (все энергетические величины приводятся в единицах J = I = 1).
В последнем слагаемом гамильтониана из трех возможных способов выделения в среднеполевом представлении ненулевых парных средних мы оставляем только случай выделения среднего $\langle S_i T_{ig} \rangle$ (детальное обсуждение использованного приближения см. в [1]).

Отметим, что получаемая таким образом модель имеет и иной физический смысл, она отвечает в 2D двум взаимодействующим плоскостям, а в 1D – двум взаимодействующим цепочкам, лестнице.

Далее вычисления следуют стандартной схеме самосгласования в СССП.

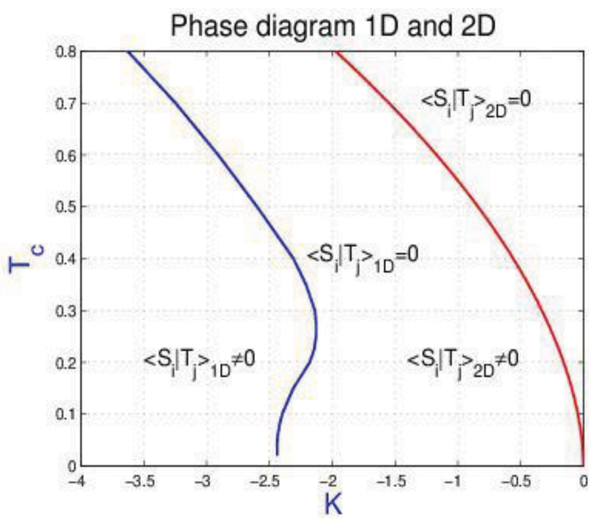

Рис. 1. Граница раздела областей с нулевыми и ненулевыми спин-певдоспиновыми корреляциами. По оси x – параметр взаимодействии подсистем, по y – температура. Красная линия отвечает случаю 2D, синяя – 1D

В работе получены спин-спиновые (псевдоспин-псевдоспиновые) корреляторы, спектры элементарных возбуждений и теплоемкость в широком диапазоне температур и параметра взаимодействии подсистем.

Результаты

На Рис.1 показана фазовая диаграмма модели. Фазовая граница разделяет области с нулевыми и ненулевыми спин-певдоспиновыми корреляциями. Красная линия отвечает случаю 2D, синяя – 1D. Одномерная и двумерная ситуации качественно различаются. В двумерном случае вблизи перехода спин-псевдоспиновые корреляционные функции степенным образом зависят как от межподсистемного обмена K (при этом внутри каждой из подсистем корреляционные функции почти не меняются), так и от температуры T. Фазовая граница, разделяющая области с нулевой и ненулевой перепутанностью, начинается в точке $T=0$, $K=0$ и хорошо описывается степенной зависимостью с показателем, близким к ½.

В одномерном же случае картина сложнее. Фазовая граница при низких температурах начинается при конечном $K<0$. Более того, температурная зависимость фазовой границы немонотонна. Соответствующим образом усложняются и зависимости спин-псевдоспиновых корреляционных функций от K и T. В работе предложено качественное объяснение указанного различия. В обеих размерностях появление перепутанности сопровождается расщеплением спектра элементарных возбуждений и пиком теплоемкости (в 2D это может означать возвратный переход и два пика теплоемкости на соответствующих вертикальных разрезах).

Отметим, что, как показано в [2], одномерный случай имеет не только чисто модельное значение, но и при соответствующей локальной геометрии может быть реализован на эксперименте в соединениях переходных металлов.

Работа поддержана РФФИ, грант 16-02-00304А.

Литература

1. М.Ю. Каган, К.И.Кугель, А.В. Михеенков et al. // Письма в ЖЭТФ, т. 100, 207 (2014).
2. K.I. Kugel, A.O. Sboychakov, S.V. Streltsov // ЖЭТФ, т. 149, 562 (2016).
3. А.В. Михеенков, К.И. Кугель, А. Ф. Барабанов et al. // в печати.