مطالعه عددی زنجیره هایزنبرگ با مدول شدگی فضایی برهمکنش اسپینی

شهری ناصری ، محبوبه[۱] ؛ مهدوی فر، سعید[۲] ؛ فرجامی شایسته، صابر[۲]

[۱] گروه فیزیک ، دانشگاه پیام نور، رشت

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت

چکیده

ما زنجیره هایزنبرگ اسپین ۱/۲ دایمر شده با توزیع شش تایی اسپینی را مورد توجه قرار داده و دیاگرام فاز دمای صفر را در فضای پارامتری J_1, J_2, J_3 با روش قطری کردن دقیق مورد مطالعه قرار دادیم. دیاگرام فاز غنی و دارای دو فاز دایمر دارای گاف می باشد. وجود گذار فاز و تفاوت بین فازهای دایمر بصورت عددی مورد مطالعه قرار گرفت.

The numerical study of the Heisenberg chain with space modulation of exchange spin

Shahri Naseri, Mahboobeh[1]; Mahdavifar, Saeed[2]; Farjami Shayesteh, Saber[2]

[1] Department of Physics, Payame Noor University, Rasht

[2] Department of Physics, Universiyu of Guilan, Rasht

Abstract

We consider the dimerized spin-1/2 Heisenberg chain with spin hexameric distortion and study the zero-temperature phase diagram in the parameter space J_1, J_2, J_3 by the exact diagonalization method. The phase diagram is rich and has two gaped dimer phases. The existence of the transition phase and the difference between dimer phases is checked numerically.

PACS No. (6400)

مقدمه

بررسی فازهای دارای گاف انرژی در سیستم های یک بُعدی و شبه یک بُعدی از اهمیت ویژه ای برخوردار است. در این میان، دسته ای از گذار فازهای کوانتومی وجود دارند که در آن ها سیستم از یک فاز دارای گاف به فاز گاف دار دیگری می رود. بدون شک، مطالعه زنجیره های متناوبی که چنین گذار فازهایی را از خود نشان دهند پیامدهای فیزیکی جالبی به همراه خواهد داشت که در این مقاله، به مطالعه آن ها خواهیم پرداخت.

مطالعه سیستم های الکترونی همبسته قوی یک بُعدی و شبه یک بُعدی توجه زیادی را در سال های اخیر به خود اختصاص داده است. سنتز مواد در محدوده وسیعی از دما که اساساً بوسیله نردبان ها[۱] و زنجیره های اسپینی[۲] مدل می شوند باعث تحریک این جذابیت شدند [۳،۲،۱] . بنابر پیشنهاد هالدین[۳]، زنجیره اسپینی با اندازه اسپین S نیم صحیح دارای برانگیختگی بدون گاف و چنان چه صحیح باشد دارای گاف می باشد [٤] اما می توان تغییراتی در آرایش جفت شدگی زنجیره های اسپین ۱/۲ بوجود آورد که طیف انرژی آن ها هم دارای گاف شوند. به عنوان مثال، زنجیره اسپینی سه تایی فرومغناطیس- فرومغناطیس- پادفرومغناطیس با اسپین ۱/۲ [٥ ،٦] و زنجیره اسپینی ۱/۲ با پیوندهای مدول شده[٤] فضایی

[1] Ladder
[2] Spin chain
[3] Haldane
[4] Bond modulated

[۷] نمونه هایی از زنجیره هایی هستند که در غیاب میدان مغناطیسی دارای گاف هالدین بوده می باشند. اما سوأل اساسی که در این مقاله به آن پاسخ خواهیم داد این است که آیا می توان با ایجاد تغییراتی در قدرت برهمکنش تبادلی زنجیره های متناوب، نوعی گذار فاز بوجود آورد؟

فرمول بندی و شرح مدل

جهت پاسخ به سوأل فوق، نوعی متفاوت از آرایش اسپینی شامل زنجیره دایمر شده[5] انتخاب کرده و اختلال روی قدرت برهمکنش تبادلی پیوندهای زنجیره وارد می نماییم.

هامیلتونی زنجیره ی هایزنبرگ دایمر شده که اختلال کوچکی روی پیوند های آن وارد شده باشد به صورت زیر تعریف می شود:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\circ} + \hat{V}, \qquad (۱)$$

که $\hat{H}_{\circ}$ مربوط به هامیلتونی زنجیره دایمر شده است با این فرض که پیوندهای فرد قوی تر باشند ($\delta > \circ$):

$$\hat{H}_{\circ} = J\sum_{n=1}^{N}(1-(-1)^{n}\delta)\vec{S}_{n}.\vec{S}_{n+1}, \qquad (۲)$$

که $\vec{S}_{n}$ عملگر اسپین ۱/۲ روی جایگاه n و $J > \circ$ جفت شدگی پادفرومغناطیس را نشان می دهد. هم چنین، اختلال وارد شده بر پیوندها به صورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$\hat{V}_{Q} = \lambda J \sum_{p=1}^{\left[\frac{N}{N_{\circ}}\right]} \vec{S}_{PN_{\circ}-1}.\vec{S}_{PN_{\circ}}. \qquad (۳)$$

که مقدار $N_{\circ} \geq 3$ انتخاب شده است.

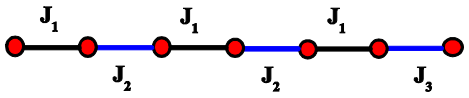
مدلی که ما توجه خود را روی آن معطوف کردیم شامل زنجیره دایمر شده با توزیع شش تایی[6] می باشد. بنابراین می توانیم روابط (۱) تا (۳) را به گونه ای دیگر بازنویسی نماییم:

$$H = J_1 \sum_{n=1}^{N/2} \vec{S}_{2n-1}.\vec{S}_{2n} + \sum_{n=1}^{N/2} J_{AF}(n)\vec{S}_{2n}.\vec{S}_{2n+1}, \qquad (٤)$$

که J_1، جفت شدگی تبادلی روی پیوندهای فرد می باشد که تماماً یکسان و از نوع پادفرومغناطیس هستند. اما برای دست یابی به تناوب شش تایی، پیوندهای زوج را به صورت مدول شده فضایی و با تابع $J_{AF}(n)$ تعریف می کنیم که از نوع پادفرومغناطیس انتخاب شده است:

$$J_{AF}(n) = J^{\circ}_{AF}(1+\delta\cos(\frac{2\pi}{3}n)). \qquad (۵)$$

شکل (۱)، نمایشی از این زنجیره با پیوندهای مدول شده فضایی را نشان می دهد که دوره تناوب سلول واحد، شش می باشد. همان طور که در شکل مشخص است قدرت برهمکنش روی پیوندهای فرد با J_1 و روی پیوندهای زوج با J_2 و J_3 نشان داده شده است.



شکل۱ : نمایشی از زنجیره هایزنبرگ شش تایی با پیوندهای مدول شده فضایی.

مطالعه عددی

با انجام یک آزمایش، می توان تصویر واضحی از فازهای مغناطیسی مختلف حالت پایه سیستم بدست آورد. از آنجا که انجام آزمایش واقعی در دمای صفر مطلق مقدور نمی باشد بهترین روش، انجام آزمایش عددی است.

یک روش دقیق در زمینه آزمایشات عددی، روش لنکشوز می باشد[۸] . ما نیز در محاسبات عددی خود از روش لنکشوز برای قطری سازی دقیق هامیلتونی رابطه (٤) بهره گرفته و آن را برای زنجیره های هایزنبرگ اسپینی معرفی شده در شکل (۱) با طول های $N = ۱۲,۱۸,۲٤$ و با شرط مرزی دوره ای استفاده کردیم.

چند مقدار متفاوت برای برهمکنش های تبادلی پیوندهای زوج در نظر گرفتیم که نسبت آن ها با $\gamma = \frac{J_{۲}}{J_{۱}}$ معرفی می شود. واضح است که با انتخاب $\gamma = ۱$، مقدار جفت شدگی تبادلی روی پیوند های زوج یکی می شود. در این صورت چنان چه مقدار $(J_{۱})$ نیز با آن ها برابر شود زنجیره متناوب شش تایی تبدیل به زنجیره پاد

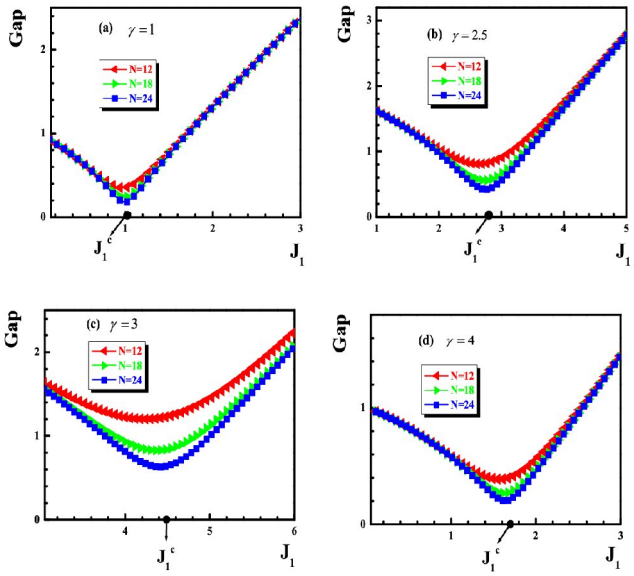
[5] Dimerized chain
[6] Hexamer

فرومغناطیسی اسپین $\frac{1}{2}$ می شود که قدرت جفت شدگی روی همه پیوندهای آن یکسان است و طبق حدس هالدین، چنین زنجیره ای بدون گاف می باشد [٤].

در شکل (۲)، منحنی گاف انرژی برای زنجیره هایزنبرگ شش تایی به عنوان تابعی از قدرت جفت شدگی تبادلی پیوندهای فرد (J_1) رسم شده است که گاف، تفاوت انرژی بین حالت پایه و اولین حالت برانگیخته سیستم می باشد. مقادیر مربوط به جفت های (J_2, J_3) به ترتیب در قسمت های (a) تا (d) برابر با (۱,۱) ، (۲,۵)، (۳,۹)و (۱,٤) است به طوری که γ به ترتیب دارای مقادیر ۱، ۲/۵، ۳ و ٤ می باشد. در قسمت های (a) تا (d) و با صفر شدن مقدار جفت شدگی تبادلی روی پیوندهای فرد $(J_1 = 0)$، سیستم از $\frac{N}{2}$ زوج های غیر برهمکنشی روی پیوند های زوج تشکیل یافته که در وضعیت یگانه قرار دارند. ما این وضعیت را فاز دایمر نوع I می نامیم که مطابق شکل، دارای گاف انرژی می باشد. با افزایش پارامتر جفت شدگی تبادلی (J_1)، گاف شروع به کاهش نموده تا اینکه در J_1^c، گاف بسته می شود. بعد از آن و با افزایش بیشتر (J_1)، مجدداً گاف باز می شود. در حد جفت شدگی خیلی قوی روی پیوندهای فرد و به طوری که $(J_2 = J_3 = 0)$، حالت پایه سیستم از جفت های یگانه روی پیوندهای فرد تشکیل یافته که این نوع دایمر شدگی را نوع II معرفی می کنیم. بنابراین رقابت بین این دو وضعیت در هامیلتونی سیستم منجر به گذار فاز کوانتومی از یک فاز دایمر شده به فاز دایمر شده دیگر می شود.

همان طور که از شکل پیداست در طیف انرژی سیستم به جز نقطه ی بحرانی J_1^c، گاف انرژی وجود دارد. قبلاً نیز چنین گذار فازهایی در زنجیره های هایزنبرگ اسپین ۱/۲ دایمر شده و وامانده[۷] مشاهده شده بود [۹-۱۲].

برای حالت (a)، که $\gamma = 1$ است مقدار $J_1^c = 1$ به دست آمد که در توافق بسیار خوبی با حدس هالدین می باشد.



شکل (۲): منحنی گاف انرژی برای زنجیره هایزنبرگ شش تایی به عنوان تابعی از قدرت جفت شدگی تبادلی پیوندهای فرد (J_1). مقادیر مربوط به جفت های (J_2, J_3) به ترتیب در قسمت های (a) تا (d) برابر با (۱,۱) ، (۲,۵)، (۳,۹) و (۱,٤) بوده و زنجیره دارای طول های $N = ۱۲,۱۸,۲٤$ است.

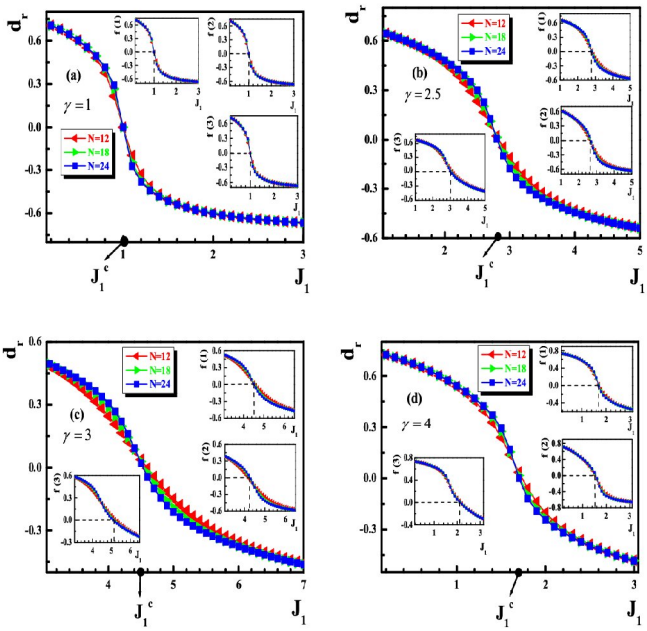
ساختار فاز دایمر می تواند با مطالعه نظم دایمر شدگی تعیین گردد. پارامتر نظم دایمر شدگی اسپینی (d_r) را به گونه ای تعریف می نماییم که به طور همزمان، همبستگی اسپینی همه پیوندها را لحاظ نماید و یا عبارتی دیگر توصیف کننده رفتار جمعی سیستم باشد و عبارت است از:

$$d_r = \frac{2}{N}\sum_{n=1}^{(N/6)} \left\langle Gs \left| \vec{S}_{2n-1}.\vec{S}_{2n} - \vec{S}_{2n}.\vec{S}_{2n+1} \right| Gs \right\rangle \quad (٦)$$

در شکل (۳)، پارامتر نظم دایمر شدگی اسپینی زنجیره هایزنبرگ شش تایی به عنوان تابعی از قدرت جفت شدگی تبادلی پیوندهای فرد (J_1) و برای طول های $N = ۱۲,۱۸,۲٤$ رسم شده است. مقادیر مربوط به جفت های (J_2, J_3) به ترتیب در قسمت های (a) تا (d) برابر با (۱,۱) ، (۲,۵)، (۳,۹) و (۱,٤) است به طوری که γ به ترتیب دارای مقادیر ۱، ۲/۵، ۳ و ٤ می باشد.

در غیاب قدرت جفت شدگی تبادلی پیوندهای فرد، سیستم از تعداد متناهی جفت هایی با قدرت های J_2 و J_3 روی پیوندهای زوج تشکیل یافته که در وضعیت یگانه قرار دارند. بنابراین، پارامتر

[7] Frustrated



شکل (۳): منحنی پارامتر نظم دایمر شدگی اسپینی برای زنجیره هایزنبرگ شش تایی به عنوان تابعی از قدرت جفت شدگی تبادلی پیوندهای فرد (J_1) برای زنجیره با طول های $N=12,18,24$. در داخل هر شکل، منحنی توابع دایمر شدگی $f(1)$، $f(2)$ و $f(3)$ به عنوان تابعی از قدرت پیوند های فرد رسم شده است. مقادیر مربوط به جفت های (J_2,J_3) به ترتیب در قسمت های (a) تا (d) برابر با $(1,1)$ ، $(2,5)$، $(3,9)$ و $(1,4)$ بوده و زنجیره دارای طول های $N=12,18,24$ است.

دایمر شدگی با توجه به رابطه (۶)، دارای مقدار بیشینه ۰/۷۵ خواهد بود و حالت پایه سیستم در فاز دایمر نوع I و در وضعیت اشباع قرار دارد. این نتیجه در شکل (۳) قسمت (a) که منحنی از $J_1=0$ رسم شده به وضوح دیده می شود. با افزایش (J_1)، مقدار پارامتر نظم دایمر شدگی کاهش می یابد تا این که در نقطه گذار J_1^c به صفر می رسد. با افزایش بیشتر مقدار (J_1)، زنجیره متناهی دارای قدرت بر همکنش های متناوبی خواهد بود که مقدار جفت شدگی تبادلی روی پیوندهای فرد قوی تر از پیوندهای زوج خواهد شد بنابراین طبیعی است که تابع دایمر شدگی دارای مقادیر منفی باشد و به فاز دایمر نوع II می رود.

مقدار اشباع منفی ۰/۷۵- در شکل (۳) قسمت (a)، مثل این است که زنجیره از تعدادی جفت های یگانه روی پیوندهای فرد تشکیل شده باشد.

آن چه به وضوح در شکل های (۲) و (۳)، دیده می شود این است که مقدار نقطه گذار J_1^c مستقل از اندازه ذرات می باشد و مقدار آن را در حد ترمودینامیکی $N\to\infty$ نشان داده شده است.

با توجه به رفتار کیفی تابع دایمر شدگی می توان بیان کرد که نوعی گذار بین پیوند های شبکه اتفاق افتاده است. مشخصه چنین گذاری رفتن از یک فاز دارای گاف به فاز گاف دار دیگری می باشد. این نوع گذار توسط منحنی گاف در شکل (۲) نیز تأیید شده بود.

نتیجه گیری

در این مقاله، به کمک روش قطری کردن دقیق به مطالعه زنجیره هایزنبرگ با مدول شدگی فضایی برهمکنش اسپینی پرداختیم و نشان دادیم که می توان با ایجاد تغییراتی در قدرت برهمکنش تبادلی زنجیره های متناوب، نوعی گذار فاز بوجود آورد.

مرجع ها

[۱] E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* 271, (1996) 618.
[۲] T. M. Rice, *Z. Phys. B* **103**, (1997) 165.
[۳] E. Dagotto, *Rep. Prog. Phys.* **62**, (1999) 1525.
[٤] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, (1983) 1153.
[٥] K. Hida, *J. phys. Soc. Jpn.* **63**, (1994) 2359.
[٦] K. Okamoto, *Solid State Commun.* **98**, (1996) 245.
[٧] S. Mahdavifar and J. Abouie, *J. Phys. Condens. Matter.* **23**, (2011) 246002.
[٨] C. Lanczos, *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **45**, (1950) 255.
[٩] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen and S. Ramasesha, *Phys. Rev. B* **52**, (1995) 6581.
[۱۰] G. Bouzerar, A. P. Kampf and G. I. Japaridze, *Phys. Rev. B* **58**, (1998) 3117.
[۱۱] X. F. Jiang, H. Chen, D. Y. Xing and J. M. Dong, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, (2001) 6519.
[۱۲] K. P. Schmidt, C. Knetter and G. S. Uhrig, *Phys. Rev. B* **69**, (2004) 104417.