

链间超交换相互作用下 spin-Peierls 梯子模型的基态行为

刘海莲¹⁾ 王治国²⁾ 杨成全¹⁾ 石云龙^{1)†}

1) 雁北师范学院固体物理研究所,大同 037009)

2) 同济大学波耳固体物理研究所,上海 200092)

(2005 年 11 月 14 日收到,2006 年 1 月 6 日收到修改稿)

采用 Lanczos 数值计算方法研究了具有链间海森堡相互作用和链间 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用 spin-Peierls 梯子模型的基态行为. 分析了链间海森堡相互作用和链间 DM 相互作用对系统二聚化的影响. 结果发现,这两种链间作用都不利于系统的二聚化,会造成系统基态二聚化的减小,这说明随着系统维度的增大,系统的各向相互作用会限制系统的二聚化,甚至会破坏系统的二聚化相.

关键词: spin-Peierls 模型, 海森堡相互作用, DM 相互作用, 二聚化

PACC: 7510, 7550, 0550

1. 引言

自从无机 spin-Peierls (s-P) 材料 CuGeO_3 ^[1] 被发现以来,已经出现了大量及其有意义的实验结果和相关理论^[2-5]. 纯净的 CuGeO_3 材料在温度 $T_{\text{sp}} \approx 14\text{K}$ 时会发生 s-P 结构相变,在温度 T_{sp} 以下,系统的基态为二聚化的自旋单重态,基态与三重态的激发态之间的能隙 $\Delta = 24\text{K}$. 理论上,人们通常采用一维或者准一维的 s-P 链来分析系统二聚化基态的性质,给出系统的相图^[6,7]. 由于实验结果^[2-4,8]和理论结论的不一致,人们又在简单 s-P 链模型的基础上考虑了 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用^[9,10]. 实际上, CuGeO_3 的空间结构为正交晶系,三个方向的晶格常数分别为 $a = 4.81\text{\AA}$, $b = 8.47\text{\AA}$, $c = 2.94\text{\AA}$; 在 Cu^{2+} 离子上存在有效的 $S = 1/2$ 的局域自旋. 反映在理论上, CuGeO_3 可以用具有二聚化的海森堡模型描述,三个方向的海森堡超交换相互作用常数分别为 $J_c = 10.4\text{meV}$, $J_b = 0.1J_c$, $J_a = -0.01J_c$.

在研究 CuGeO_3 系统时,为了全面了解该系统的性质,只研究一维相互作用是远远不够的. 本文利

用梯子模型使得结论更接近于实际材料. 最近的理论工作^[6,7,11]表明,链内 DM 相互作用可能有利于二聚化,也有可能不利于二聚化,而链间 DM 相互作用对系统二聚化的影响目前并不清楚. 本文将研究 s-P 梯子模型中,链间海森堡相互作用和链间 DM 相互作用对系统基态行为的影响.

2. 模型及哈密顿量

同时具有链间海森堡相互作用和链间 DM 相互作用的修正 s-P 梯子模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^2 [J_n (S_{m,n} \cdot S_{m,n+1})] + \sum_{n=1}^N \{J_1 (S_{1,n} \cdot S_{2,n}) + D_1 \cdot (S_{1,n} \times S_{2,n})\} + KN\delta^2,$$

其中 $J_n = J_0 [1 + (-1)^n \delta]$ 表示通常的 s-P 相互作用参数, J_1 表示链间海森堡相互作用参数, D_1 表示链间 DM 相互作用参数, δ 为晶格畸变的二聚化位移, K 是晶格畸变弹性系数, N 是格点数.

下面主要研究链间海森堡相互作用和链间 DM 相互作用对系统二聚化的影响. 为了处理的方便,将仅考虑 DM 相互作用的 Z 方向,即 $D_1 = (0, 0, D_1)$.

† E-mail: shi_yunlong@yahoo.com.cn

3. 模型计算和分析

这里采用 Lanczos 数值计算方法研究系统的基态行为. Lanczos 数值方法是一种在严格对角化基础上发展起来的求解格点模型基态性质的近似方法, 它很好地解决了格点数目较多的问题. Lanczos 数值方法的要点是首先选一组基矢作为初始态, 并且此态一定要避免和基态正交, 否则会使计算失去应有的意义. 因为基态在自旋 Z 分量为零的子空间, 为方便起见, 我们在此子空间中选出自旋向上和向下数目相等且交替出现的态作为初始态 φ_1 , 则相应的薛定谔方程组为

$$\begin{aligned} H\varphi_1 &= a_1\varphi_1 + b_1\varphi_2, \\ H\varphi_2 &= b_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + b_2\varphi_3, \\ H\varphi_3 &= b_2\varphi_2 + a_3\varphi_3 + b_3\varphi_4, \\ &\dots \\ H\varphi_n &= b_{n-1}\varphi_{n-1} + a_n\varphi_n + b_n\varphi_{n+1}, \end{aligned}$$

其中 $b_0 = 0, \varphi_0 = 0, a_n = \langle \varphi_n | H | \varphi_n \rangle, b_n = \| H\varphi_n - b_{n-1}\varphi_{n-1} - a_n\varphi_n \|$. 由此, 我们看到哈密顿量 H 在这样一组基矢中可以表示为

$$H = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \dots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_2 & \dots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix},$$

即哈密顿量被化成了三对角矩阵, 这将使计算量大大减少. 计算的目的是找出系统的最低能量, 也就是最低的 Hamiltonian 矩阵本征值.

对于链内 DM 相互作用单独对系统二聚化位移的影响, 我们已经利用 Lanczos 数值计算方法在文献 [7 和 [12] 中做了研究. 结果表明, 当链内 DM 相互作用受二聚化调制 $\eta = 1$ 时, 该相互作用有利于系统二聚化; 当链内 DM 相互作用与二聚化无关时, 该相互作用不利于二聚化. 在所有计算中, 根据材料的具体性质, 考虑 NMR 实验结果给出的参数, 设定系统的晶格畸变弹性系数 $K = 0.65, J_0 = 1$ 作为能量单位, 计算的格点数为 30, 并且采用了周期性边界条件.

在不考虑链间 DM 相互作用的情况下, 这里研究了链间海森伯相互作用对系统二聚化的影响. 首先计算了系统基态能量密度 $\epsilon(\delta) - \epsilon(0)$ 随二聚化

位移参量 δ 的变化, 找到使得系统基态能量密度关于参量 δ 的极小点, 从而得到系统基态的二聚化位移. 计算的结果在图 1 中给出. 图 1(a) 给出了二聚化位移 δ_c 随 J_1 的变化图, 对应能量密度 $\epsilon^*(\delta_c)$ 随 J_1 的变化在图 1(b) 中给出. 从结果可以发现, 随着链间海森伯相互作用的增大, 系统链内的二聚化单调变小, 同时, 系统的基态能量密度也单调降低. 这说明链间海森伯相互作用对系统链内的二聚化有强烈的抑止作用.

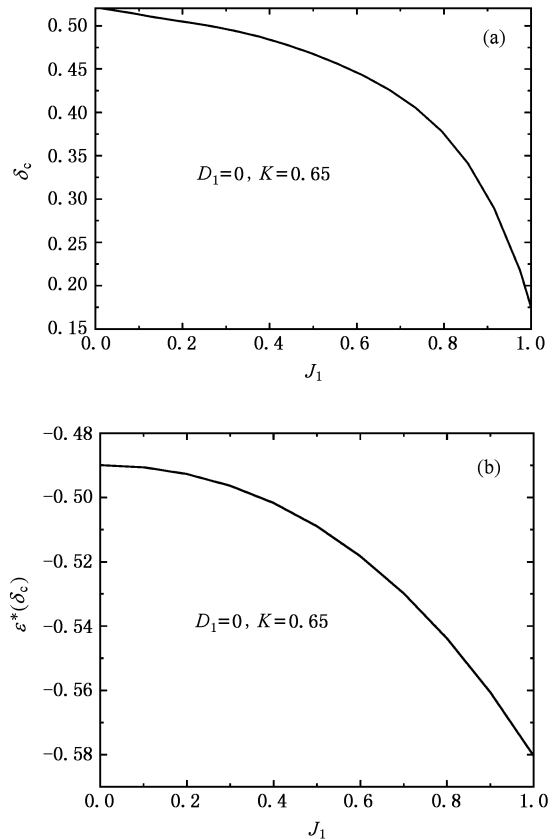


图 1 单独的链间海森伯相互作用对系统二聚化和基态能量的影响 (a) 在 $D_1 = 0$ 时, 二聚化位移随链间海森伯相互作用变化曲线 (b) 在 $D_1 = 0$ 时, 系统基态能量密度随链间海森伯相互作用变化曲线

链间 DM 相互作用对系统二聚化的影响结果在图 2 中给出. 图 2(a) 给出了二聚化位移 δ_c 随 D_1 的变化图, 对应能量密度 $\epsilon^*(\delta_c)$ 随 D_1 的变化在图 2(b) 中给出. 从结果可以发现, 链间 DM 相互作用也是完全制约系统二聚化的, 随着 D_1 的增大, 系统的基态能量密度也将降低.

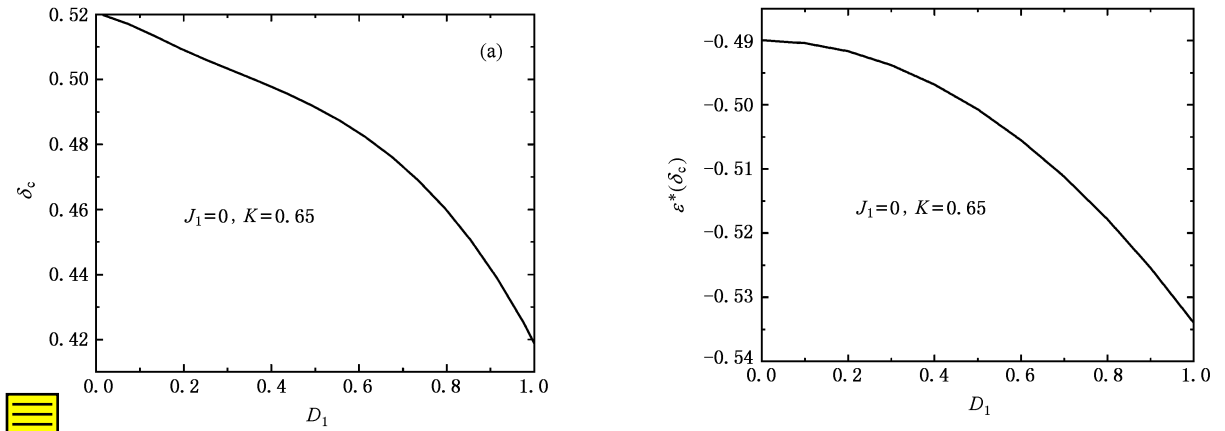


图2 单独的链间 DM 相互作用对系统二聚化和基态能量的影响 (a) 在 $J_1=0$ 时, 二聚化位移随链间 DM 相互作用变化曲线 (b) 在 $J_1=0$ 时, 系统基态能量密度随链间 DM 相互作用变化曲线

4. 结 论

利用 Lanczos 数值计算方法, 我们研究了 s-P 梯子模型的基态行为. 计算结果表明链间海森伯相互作用总是制约系统的二聚化, 这些和以前数值计算的结论是一致的. 在考虑了链间 DM 相互作用时, 我

们也研究了该作用对系统二聚化的影响, 发现链间 DM 相互作用也不利于系统的二聚化. 从计算结果发现, 链间海森伯相互作用相比链间 DM 相互作用对系统二聚化的影响要更强烈一些. 结论表明, 各种链间作用会造成系统基态二聚化的减小, 这说明随着系统维度的增大, 系统的各向相互作用会限制系统的二聚化, 甚至会破坏系统的二聚化相.

- [1] Hase M, Terasaki I, Uchinokura K, Tokunaga M, Miura N, Obara H 1993 *Phys. Rev. B* **48** 9616
- [2] Hase M, Terasaki I, Uchinokura K 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3651
- [3] Yamada I, Nishi M, Akimitsu J 1996 *J. Phys. Condens. Matter* **8** 2625
- [4] Nojiri H, Ohta H, Okubo S, Fujita O, Akimitsu J, Motokawa M 1999 *J. Phys. Soc. Jpn.* **68** 3417
- [5] Golovenchits E I, Sanina V A, Gurevich A G 1969 *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)*. **11** 642
- [6] Shu L, Chen Y G, Chen H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 902 (in Chinese) [晏 蕾、陈宇光、陈 鸿 2002 物理学报 **51** 902] Wang Z G, Ding G H, Xu B W 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 296 (in Chinese) [王治国、丁国辉、许伯威 1999 物理学报 **48** 296]
- [7] Yang Z G, Wang Z G, Chen H 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 199
- [8] Tsukada I, Takeya J, Masuda T, Uchinokura K 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 127203
- [9] Dzyaloshinsky I 1958 *J. Phys. Chem. Solid.* **4** 241
- [10] Moriya T 1960 *Phys. Rev.* **120** 91
- [11] Derzhko O, Richter J, Zaburannyi O 2000 *J. Phys. Condens. Matter* **12** 8661
- [12] Liu H L, Wang Z G, Chen Y G, Shi Y L, Chen H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2375 (in Chinese) [刘海莲、王治国、陈宇光、石云龙、陈 鸿 2005 物理学报 **54** 2375]

Ground state properties of spin-Peierls ladder model with interchain superexchange interactions

Liu Hai-Lian¹⁾ Wang Zhi-Guo²⁾ Yang Cheng-Quan¹⁾ Shi Yun-Long^{1)†}

¹⁾ *Institute of Solid State Physics, Yanbei Normal College, Datong 037009, China*

²⁾ *Poh Institute of Solid State Physics, Tongji University, Shanghai 200092, China*

(Received 14 November 2005 ; revised manuscript received 6 January 2006)

Abstract

The ground-state properties of spin-Peierls ladder model with interchain Heisenberg interaction and interchain Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interaction are studied by Lanczos numerical method. We mainly concentrate on the influence of interchain Heisenberg interaction and interchain DM interaction on system dimerization. The results show that these two interchain interactions always act against the dimerization of the system, and they can make system ground state dimerization diminishing, which means that increasing the system dimensions may reduce system dimerization, even destroy the dimerization phase.

Keywords : spin-Peierls model, Heisenberg interaction, DM interaction, dimerization

PACC : 7510, 7550, 0550

† E-mail: shi_yunlong@yahoo.com.cn