

阻挫对准一维非对称子格反铁磁链自旋波激发的影响^{*}

蒋建军 张松俊 刘拥军[†]

(扬州大学物理科学与技术学院, 扬州 225002)

(2006 年 1 月 27 日收到, 2006 年 3 月 22 日收到修改稿)

子格对称性破缺使得 $s = 1/2$ 准一维海森伯自旋链具有三支自旋波激发谱(其中一支属于声学模, 两支属于光学模). 计算表明, 阻挫导致两支光学模能隙简并解除, 阻挫引起声学模自旋波激发谱软化, 但并不导致光学模激发谱软化, 阻挫导致两支光学模激发谱中的一支明显下移, 这意味着阻挫使光学模激发变得重要且容易实现, 阻挫引起的自旋偏离对于属于不同子格的自旋是不同的, 阻挫对于系统基态磁性长程序的削弱随着阻挫增强变得越来越明显. 通过与严格对角化方法和 DMRG 方法的数值结果比较, 还分析了自旋波近似的合理性和不足之处.

关键词: 准一维反铁磁自旋系统, 自旋波激发, 光学模, 能隙简并

PACC: 7530D, 7510J

1. 引言

自从 Anderson 指出氧化物导体的高温超导现象及其正常态的反常性质可能与铜氧面上的自旋无序有关后^[1], 低维强关联系统及其物理性质的研究一直受到广泛而持续的关注^[2]. 由于拓扑结构的差异, 各种变体的准一维反铁磁海森伯自旋体系呈现出丰富的自旋图像和物理性质, 并且近年来陆续发现了一些实际材料的性质可以用准一维海森伯模型给予理论解释. 比如自旋梯子模型具有自旋激发能隙^[3,4], 其基态自旋关联呈指数衰减^[4], 该模型被认为可以用来描述实际材料 SrCu_2O_3 和 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ 等的性质^[5]. 垂直二聚体(orthogonal-dimer)自旋链^[6]由于自旋相互作用与量子涨落竞争, 在不同参数区间, 其基态分别处于二聚体态和 plaquette 态, 该模型可以用来描述实际材料 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ 的性质. 反铁磁海森伯 Distorted-Diamond 链随着自旋相互作用参数的变化也可以分别处于奈尔序、二聚体态和自旋液体态^[7], 该模型可以用来描述实际材料 $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ 的性质.

尽管不少反铁磁海森伯自旋系统两个子格的自

旋数目相同(采用 Lieb 和 Mattis 的划分方法^[8]), 若某个格点自旋属于某一子格, 则通过最近邻相互作用与它相连的另一格点自旋属于另一子格, 但是确有一些自旋模型两个子格的自旋数目不相等^[7,9]. 子格对称破缺能够导致系统自旋图像的明显变化, 比如对于反铁磁海森伯 Distorted-Diamond 链, 在没有阻挫(frustration)情形, 尽管自旋相互作用是反铁磁的, 由 Lieb-Mattis 定理^[8]可知子格对称性破缺将导致该系统基态具有(非饱和)铁磁行为. 当阻挫相对较弱时, 它不足以破坏系统基态的磁性长程序^[7].

本文所研究的准一维反铁磁海森伯量子自旋系统如图 1 所示: 在 $2N$ 个自旋为 $1/2$ 的一维反铁磁海森伯自旋链同一子晶格的旁边掺入 N 个自旋也为 $1/2$ 的杂质自旋格点(称为侧自旋), 构成准一维量子自旋系统, 链间及侧自旋与链上最近邻格点自旋间的交换作用耦合常数为 J ($J > 0$), 侧自旋与链上次近邻格点自旋间的交换作用耦合常数为 αJ ($\alpha \geq 0$). 模型哈密顿量为

$$H = J \sum_{i=1}^N (s_{3i-2} \cdot s_{3i-1} + s_{3i-1} \cdot s_{3i+1} + s_{3i-1} \cdot s_{3i}) + \alpha J \sum_{i=1}^N (s_{3i-2} \cdot s_{3i} + s_{3i} \cdot s_{3i+1}). \quad (1)$$

该模型没有子格对称性, 在无阻挫情形($\alpha = 0$), 已

^{*} 江苏省高校自然科学研究项目(批准号 05KJB14047)资助的课题.

[†] E-mail: yjliu@yzu.edu.cn

经被严格证明其基态是反铁磁长程序和铁磁长程序共存的状态, 总体上表现出亚铁磁特征^[10]. 无阻挫情形的自旋波近似^[11]也表明, 由于子格对称性被打破, 尽管自旋关联是反铁磁的, 但系统基态具有铁磁行为.

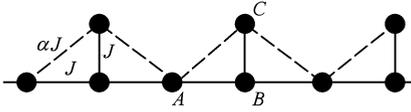


图1 方程(1)所描述的自旋 1/2 的准一维反铁磁 Heisenberg 自旋链

图1所示的准一维反铁磁自旋系统在有阻挫情形($\alpha > 0$), 由于量子涨落引起的数学复杂性, 目前尚不能严格求出系统的基态. 尽管如此, 认为足够的阻挫只能削弱但不能破坏基态磁性长程序在物理上是合理的, 即采用自旋波近似研究弱阻挫情形的图1所示系统是合理的. 本文的研究重点是阻挫对于准一维子格非对称反铁磁海森伯系统自旋波激发和基态自旋图像的影响.

2. 基于三子格的自旋波近似

根据格点自旋所处几何位置的差异, 图1所示系统可划分为三个子格 A, B 和 C. 引入自旋上升和下降算符, 改写(1)式为

$$H = J \sum_{i=1}^N \left\{ (s_{A,i}^z + s_{A,i+1}^z + s_{C,i}^z) s_{B,i}^z + \left[\frac{1}{2} (s_{A,i}^+ + s_{A,i+1}^+ + s_{C,i}^+) s_{B,i}^- + \text{h.c.} \right] \right\} + \alpha J \sum_{i=1}^N \left\{ (s_{A,i}^z + s_{A,i+1}^z) s_{C,i}^z \right\}$$

$$+ \left[\frac{1}{2} (s_{A,i}^- + s_{A,i+1}^-) s_{C,i}^+ + \text{h.c.} \right] \}, \quad (2)$$

作 Holstein-Primakoff 变换和点阵傅里叶变换后(2)式变为

$$H = E_0 + Js \sum_k \left[2a_k^+ a_k + 3b_k^+ b_k + c_k^+ c_k + 2\cos \frac{k}{2} (a_k^+ b_k^+ + a_k b_k) + (b_k^+ c_k^+ + b_k c_k) \right] + 2\alpha J \sum_k \left[-c_k^+ c_k - a_k^+ a_k + \cos \frac{k}{2} (a_k^+ c_k + a_k c_k^+) \right], \quad (3)$$

其中 $E_0 = -3JNs^2 + 2\alpha JNs^2$ 对应体系奈尔序存在时的经典基态能, a_k, b_k 和 c_k 分别满足玻色对易关系.

由格林函数理论可以求得该体系的动力学矩阵为

$$D = \begin{pmatrix} \hbar\omega + \mathfrak{A}(\alpha - 1)Js & -2Js \cos \frac{k}{2} & -2\alpha Js \cos \frac{k}{2} \\ 2Js \cos \frac{k}{2} & \hbar\omega + (2 + \alpha)Js & Js \\ -2\alpha Js \cos \frac{k}{2} & -Js & \hbar\omega + (2\alpha - 1)Js \end{pmatrix}. \quad (4)$$

由 $\det(D) = 0$ 得到体系的三支自旋波激发谱

$$\begin{aligned} \hbar\omega_1 &= \left| \frac{1}{3} \left[\lambda_k \cos \left(\frac{\arccos \xi}{3} \right) - 2\alpha \right] J \right|, \\ \hbar\omega_2 &= \left| \frac{1}{3} \left[\lambda_k \cos \left(\frac{\arccos \xi}{3} + \frac{2\pi}{3} \right) - 2\alpha \right] J \right|, \\ \hbar\omega_3 &= \left| \frac{1}{3} \left[\lambda_k \cos \left(\frac{\arccos \xi}{3} + \frac{4\pi}{3} \right) - 2\alpha \right] J \right|, \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \sqrt{\mathfrak{A}(5 + 3\cos k)\alpha^2 - 9\alpha + 6 - 3\cos k}, \\ \xi &= \frac{[-28\alpha^3 + 27\alpha^2 + 36\alpha - 27 + (81\alpha^2 - 36\alpha^3 - 72\alpha + 27)\cos k]}{2\sqrt{\mathfrak{A}(5\alpha^2 - 9\alpha + 6 + \mathfrak{A}(\alpha^2 - 1)\cos k)^2}}. \end{aligned}$$

3. 结果及讨论

3.1. 阻挫对自旋波激发谱的影响

计算表明, 子格对称性被打破导致系统存在光学模自旋波激发谱. 图2给出了系统存在的三支自旋波激发谱, 其中 $\hbar\omega_1$ 属于声学模, $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_2$ 属于光学模. 无阻挫情形($\alpha = 0$)光学模自旋波激发能隙

($k = 0$ 处)存在简并.

阻挫的引入导致图1所示系统自旋波激发谱出现明显变化. 图2给出了 $\alpha = 1/6$ 时系统的自旋波激发谱. 研究表明, 阻挫导致声学模自旋波激发谱明显软化, 但并不能导致光学模自旋波激发谱软化. 对于 $\hbar\omega_1$ 光学支, 阻挫的作用反而使得该支自旋波激发谱变得“硬化”. 从图2可以看到, 阻挫导致两光学支激发能隙简并解除. 这可能是由于阻挫打破了自旋相对偏离对称性而导致的. 计算还表明, 阻

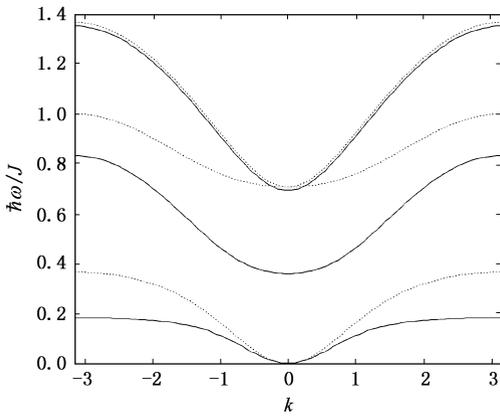


图2 虚线和实线分别表示 $\alpha = 0$ 和 $\alpha = 1/6$ 的自旋波激发谱. 对于三条虚线和三条实线, 从上到下分别对应 $\hbar\omega_2$, $\hbar\omega_1$ 和 $\hbar\omega_3$.

挫导致光学支自旋波激发谱的下移, 从图2可以看到, 对于 $\hbar\omega_1$ 支, 阻挫导致的激发谱下移现象是明显的; 但是对于 $\hbar\omega_2$ 支, 阻挫导致的激发谱下移并不明显. 光学支激发谱的下移表明: 对于图1所示系统, 阻挫使得光学模自旋波激发变得越来越容易实现, 或者说对于系统的低能激发而言, 阻挫使得光学模激发越来越重要. 这也意味着, 增强阻挫是有效利用图1所示模型所描述材料的光学模自旋波激发的有效途径.

3.2. 阻挫对基态自旋图像的影响

由格林函数谱定理, 可以求得各子格每一格点自旋 z 方向分量的基态平均值

$$s_A^z = \frac{1}{2} - \gamma_{11}, \quad s_B^z = -\frac{3}{2} + \gamma_{22},$$

$$s_C^z = \frac{1}{2} - \gamma_{33},$$

其中

$$\gamma_{ii} = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{l=1}^3 \frac{D_r(E_l)}{[\exp(\beta E_l) - 1] \prod_{l \neq i} (E_l - E_i)}$$

$$(i = 1, 2, 3),$$

式中 $E_1 = \hbar\omega_1$, $E_2 = -\hbar\omega_2$, $E_3 = \hbar\omega_3$, $D_r(E_l)$ 是 D 矩阵的三个对角元素的代数余子式. 图3给出了 $0 < \alpha < 1/3$ 时, 各子格及三子格总自旋 z 方向分量的基态平均值. 由于格点自旋所处几何位置的差异, 阻挫对不同子格自旋状态的影响不同. 对于侧自旋, 阻挫引起的偏离并不明显, 而链上格点自旋状态更容易被阻挫影响. 有意思的是, 尽管 B 子格上自旋并不受阻挫的直接作用, 但是阻挫引起的自旋偏离明显强于 C 子格上的自旋偏离, 并且对于属

于不同子格的自旋, 阻挫导致的自旋偏离的差异随阻挫的增强变得越来越明显. 这表明阻挫对于系统磁性的影响主要是通过链上格点自旋实现的, 也表明系统的量子涨落随阻挫增强而增强.

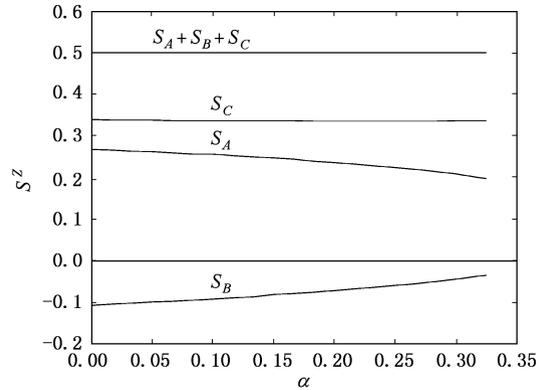


图3 各子格自旋 z 方向分量与 α 的关系

在参数范围 $0 < \alpha < 1/3$ 内, 元胞(包含 A, B, C 子格自旋各一个)总自旋 z 方向分量的平均值能很好地满足关系式

$$s_A^z + s_B^z + s_C^z = s. \quad (6)$$

这表明至少在此阻挫强度范围内, 阻挫只可能削弱但不能破坏系统基态的磁性长程序, 基态总自旋仍保持为 Ns . 为了进一步验证该结果的可靠性, 我们用基于 Lancös 技术的严格对角化方法计算了 30 个格点(周期边界条件)的图1所示系统, 计算表明, 在 $0 < \alpha < 1/3$ 参数范围内(6)式严格成立, 且系统基态总自旋确实为 $Ns = 5$.

3.3. 阻挫对基态磁性序的影响

为了调查阻挫对图1所示系统基态磁性序的影响, 还计算了图1所示系统的交错磁化率

$$M^z = s_A^z - s_B^z + s_C^z,$$

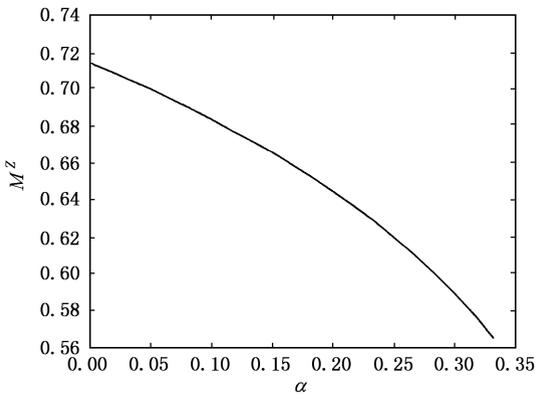
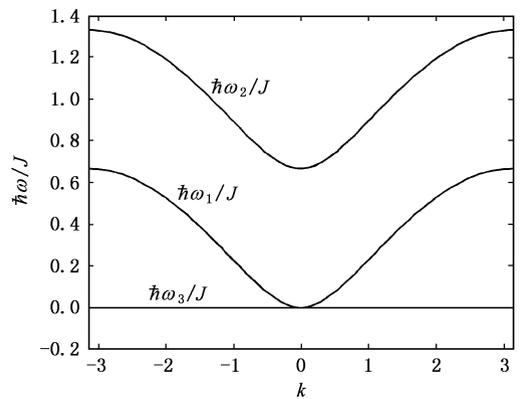
结果如图4所示. 对 M^z 作多项式拟合,

$$M^z = 0.7130 - 0.2201\alpha - 0.6318\alpha^2.$$

可见随着阻挫增强, 体系磁性序逐渐减弱. 交错磁化率 M^z 随阻挫相对强度 α 按平方关系减小, M^z 减小的速度随 α 线性增加. 这一结论可能是由于量子涨落随阻挫的增大而迅速增强导致的.

4. 结 论

图1所示的准一维自旋 $1/2$ 海森伯反铁磁系统打破了子格对称性, 使得在无阻挫和弱阻挫情形系

图4 交错磁化率 M^z 随 α 的变化图5 $\alpha = 1/3$ 时自旋波近似结果

统基态具有磁性长程序。系统存在三支自旋波激发谱,其中一支属于声学模,两支属于光学模。在无阻挫情形,光学支自旋波激发能隙存在简并。对于图1所示的准一维系统,阻挫的引入能够导致系统有意义的物理变化。1)阻挫导致两支光学模自旋波激发谱能隙简并($k=0$ 处)解除,这可能意味着阻挫导致格点自旋相对偏离对称性破缺。2)阻挫导致光学支自旋波激发谱下移,对于两支光学模激发谱而言,一支的下移是轻微的,另一支非常明显;光学支能谱下移表明阻挫将有效增强光学支自旋波激发的重要性。3)阻挫对位于不同几何位置的格点自旋状态的影响不同,阻挫引起侧自旋的偏离不明显,而对链上格点自旋状态的改变则要明显得多,并且这种差异随阻挫的增强变大。这说明阻挫对于系统基态磁性质的改变主要是通过链上格点自旋完成的,并且量子涨落随阻挫的增强而增强。4)系统磁性序随阻挫增强而减弱,其交错磁化率随阻挫强度 α 以两次多

项式方式衰减。阻挫削弱交错磁化率的速度随阻挫强度增强而线性增加。

自旋波近似只是在系统基态存在磁性长程序时才有比较好的结果。我们的计算表明,当在 $0 < \alpha < 1/3$ 范围,图1所示系统存在自旋波激发,当 $\alpha \geq 1/3$ 时,自旋波近似失效。图5给出了 $\alpha = 1/3$ 自旋波近似的计算结果。计算表明, $\alpha = 1/3$ 时,声学支自旋波激发谱 $\hbar\omega_3$ 完全软化。但是,当 $\alpha \rightarrow 1/3$ 时,图1所示系统基态的交错磁化率 M^z 并不趋于零(见图4),这表明在 $\alpha = 1/3$ 时,系统基态仍具有磁性长程序。同时也表明,对于图1所示系统,阻挫较强时 $\alpha \geq 1/3$,尽管系统还有磁性长程序存在,但是由于量子涨落的增强,基于奈尔序假设的自旋波近似不再适用。为了验证这个结论,我们用DMRG方法研究了图1所示系统,计算表明,当 $\alpha < 0.37$ 时,系统的基态仍具有磁性长程序。

- [1] Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196
 [2] Ying H P 1993 *Acta Phys. Sin.* **42** 153 (in Chinese)[应和平 1993 *物理学报* **42** 153]
 [3] Xu B W, Ye F, Ding G H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 122 (in Chinese)[许伯威、叶飞、丁国辉 2001 *物理学报* **50** 122]
 [4] Ivanov N B, Richter J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 144429
 [5] Azuma M, Fujishiro Y, Takano M 1997 *Phys. Rev. B* **55** 8658
 [6] Schulenburg J, Richter J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 134419
 [7] Okamoto K, Tonegawa T, Takahashi Y 1999 *J. Phys. : Condens*

Matter **11** 10485

- [8] Lieb E, Mattis D 1962 *J. Math. Phys* **3** 749
 [9] Liu Y J, Chen Y C, Yang M F, Gong C D 2006 *J. Phys. : Condens. Matter* **18** 1805
 [10] Liu Y J, Gong C D 2002 *J. Phys. : Condens. Matter* **14** 493
 [11] Wang C H, Chen D F, Liu Y J 2005 *Journal of Yangzhou University (Natural Science Edition)* **8** 28 (in Chinese)[王春花、陈东芳、刘拥军 2005 *扬州大学学报(自然科学版)* **8** 28]



Effect of frustration on spin-wave excitation of the quasi-one-dimensional antiferromagnetic chain with asymmetrical sublattices^{*}

Jiang Jian-Jun Zhang Song-Jun Liu Yong-Jun[†]

(*School of Physics Science and Technology, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China*)

(Received 27 January 2006; revised manuscript received 22 March 2006)

Abstract

The $s = 1/2$ quasi-one-dimensional Heisenberg antiferromagnetic chain with asymmetrical sublattices possesses three branches of spin-wave spectra (one in acoustic mode and the other two in optical mode). The frustration relieves the gap-degeneracy of two optical branches and softens the spectrum in acoustic mode, but doesn't soften the spectra in optical mode. Also, the frustration moves down obviously one of the two spectra in optical mode. It means that the frustration makes the spin-wave excitation described by spectrum in optical mode easier and more important. The status of spin on the chain changes more easily than that of side spin under the effect of frustration. The weakening of magnetic order in ground state becomes strong with the strengthening of frustration. By comparison with numerical results of exact diagonalization and DMRG methods, we discuss the merit and drawbacks of the spin-wave approximation.

Keywords : quasi-one-dimensional antiferromagnetic spin system, spin-wave excitation, optical mode, gap-degeneracy

PACC : 7530D, 7510J

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Granted No. 05KJB14047).

[†] E-mail : yjliu@yzu.edu.cn