

阻挫诱导的亚铁磁性 Heisenberg 系统中的量子相变*

张松俊 蒋建军 刘拥军†

(扬州大学物理科学与技术学院, 扬州 225002)
(2007 年 4 月 7 日收到 2007 年 6 月 5 日收到修改稿)

利用密度矩阵重整化群(DMRG)方法研究磁性阻挫对一种 $S = 1/2$ 准一维反铁磁自旋链但却具有亚铁磁性的 Heisenberg 系统基态的影响. 计算了单个晶胞的基态能、自旋关联函数以及自旋能隙. 研究表明这种 Heisenberg 自旋系统的基态随着阻挫 α 的增强将从磁有序相变化到自旋无序相, 并且伴随着自旋能隙的出现, 量子相变点为 $\alpha \approx 0.412$. 同时线形链上格点间自旋长程关联值的计算结果表明在磁有序区间体系的磁有序性质随着 α 的增强而减弱, 阻挫在 $0 \leq \alpha < 0.412$ 的范围内还不足以破坏其亚铁磁性(非饱和铁磁行为).

关键词: 准一维反铁磁自旋链, 亚铁磁性, 密度矩阵重整化群, 自旋能隙

PACC: 7510J, 7540M

1. 引言

自从在一些有阻挫的海森伯自旋模型中^[1]发现了可能跟高温超导机理有关的短程共振价键态(RVB)后, 有阻挫的自旋系统引起了人们的广泛关注. 同时近年来一些由非常有趣的有阻挫的磁性晶格组成的实际材料陆续被发现或合成, 比如 Dimer-plaquet 自旋链的合成材料 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ^[2], Spin-Peierls 自旋链的合成材料 CuGeO_3 ^[3]和 Diamond-chain 自旋链的合成材料 $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ ^[4], 这就更加引起了人们的研究兴趣.

介于二维和准一维之间的准一维反铁磁自旋体系因不同几何结构会导致很强的量子涨落, 从而呈现出丰富的自旋图像和物理性质. 比如因几何结构而引起的子格对称性破缺能够导致系统自旋图像发生明显变化. 对于反铁磁海森伯 Distorted-Diamond 链^[5], 在没有阻挫(frustration)情况下尽管自旋相互作用是反铁磁的, 但由 Lieb-Mattis 定理^[6]可知子格对称性破缺将导致该系统基态具有亚铁磁性.

准一维反铁磁自旋模型中引入阻挫后, 由于量子涨落和磁性阻挫的相互作用将使其基态更加复杂

而有趣. 目前对低维量子自旋系统的基态研究可以借助于由 White 等人^[7]发展的密度矩阵重整化群(DMRG)方法, 研究表明^[8]该方法是处理一维和准一维量子自旋系统的一种强有力的工具, 它克服了量子蒙特卡罗方法中的负符号以及严格对角化方法中的只能处理小尺寸系统的问题. 本文将利用 DMRG 方法研究阻挫对一种 $S = 1/2$ 准一维反铁磁自旋链但却具有亚铁磁性的 Heisenberg 系统基态的影响.

2. 研究模型

本文研究的模型如图 1 所示, 模型哈密顿量为

$$H = J_1 \sum_{n=1}^N (S_{A_n} \cdot S_{B_n} + S_{B_n} \cdot S_{C_n} + S_{B_n} \cdot S_{A_{n+1}}) + J_2 \sum_{n=1}^N (S_{A_n} \cdot S_{C_n} + S_{A_{n+1}} \cdot S_{C_n}), \quad (1)$$

其中整数 n 标记系统中 N 个晶胞, $S_{A_n}, S_{B_n}, S_{C_n}$ 为第 n 个晶胞中子格 A, B 和 C 的自旋算符. 同时我们假定 N 为偶数, $J_1 = 1, \alpha = J_2/J_1 > 0$ 为阻挫变量.

模型(1)在无阻挫情形($\alpha = 0$)时, 运用 Lieb-Mattis 定理^[6]很容易得出系统基态为总自旋 $S_T = N/$

* 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

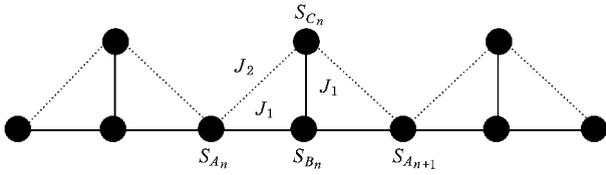


图1 方程(1)所描述的自旋 1/2 的准一维反铁磁 Heisenberg 自旋链

2 的亚铁磁态(非饱和铁磁态,铁磁态总自旋 $S_T = 3N/2$),自旋图像为奈尔序排列.文献[9]也已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.同时解析自旋波理论^[10]及数值密度矩阵重整化群方法^[11]的研究也都表明该模型在无阻挫情形具有磁性长程序.如果纳入次近邻自旋的反铁磁相互作用 J_2 (即磁性阻挫作用)则最近邻和次近邻自旋相互作用将形成竞争,这种竞争可能导致系统发生量子相变.当阻挫 α 较小时,次近邻自旋相互作用(即 J_2 项)的影响是微弱的,最近邻自旋相互作用(即 J_1 项)将主导系统自旋状态,此时系统基态自旋图像仍为奈尔序排列,体系仍具有亚铁磁特征(非饱和铁磁行为).文献[12]中采用自旋波近似研究证实弱阻挫情形下($0 < \alpha < 1/3$)系统基态仍具有磁性长程序,在此阻挫变化范围内体系的磁有序性质随着 α 的增强而减弱.当阻挫作用很强而使系统处于自旋无序状态时基于奈尔序假设的自旋波近似将失效,而本文的主要任务是利用不需要对基态性质进行任何初始假设的 DMRG 数值方法研究该模型在整个区域($0 \leq \alpha \leq 1$)下阻挫对基态的影响.

3. 基态能图

为了研究模型(1)在整个区域($0 \leq \alpha \leq 1$)里阻挫对系统基态的影响,我们直接从(1)式出发采用 DMRG 方法的无限算法的一般步骤^[7].在各物理量的具体计算中,都采用开放性边界条件,保留态数为 80—100(为提高精度相变点附近适当增加),相应的截断误差为 $P_m < 1.0 \times 10^{-12}$.为了得到系统在热力学极限下的性质,系统的晶胞数 N 的上限取 300,最后再从 DMRG 的数据外推到无穷大晶胞数.此外利用系统的好量子数 $M^z = \sum_i s_i^z$ 来节省计算时间和提高精度,因为系统的总自旋 z 轴分量 M^z 与系统的哈密顿量(1)式对易,即

$$[M^z, H] = 0, \quad (2)$$

从而系统的哈密顿量可以按 M^z 进行分块对角化.由于系统的晶胞数 N 为偶数,体系总自旋格点数 $3N$ 也为偶数,则系统不管处于什么相区间基态总自旋 S_G^T 必为整数,那么可以判定在 $M^z = 0$ 子空间里的最低能量本征态始终可以为系统的基态.例如无阻挫情形时系统基态为有净剩自旋的亚铁磁态(总自旋为 $S_T = N/2$),此时基态是 $2 \times N/2 + 1$ 重简并的,简并的基态分别对应于磁量子数为 $M^z = -N/2, \dots, 0, \dots, N/2$ 的子希尔伯特空间中,那么在 $M^z = 0$ 的子空间中仍然能获得体系的基态本征值和本征波函数.因此本文在阻挫变化的整个区域($0 \leq \alpha \leq 1$)中的系统基态计算都在 $M^z = 0$ 的子空间里进行.

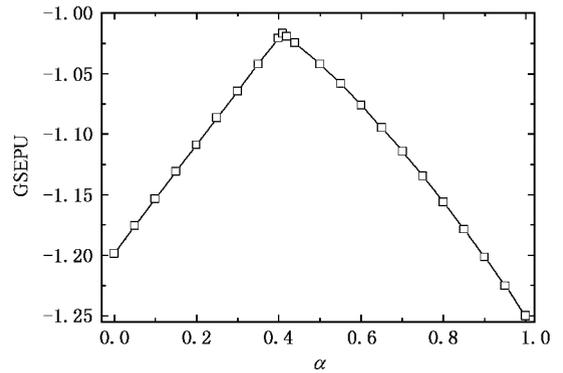


图2 单个晶胞的基态能(GSEPU)与阻挫变量 α 的关系

图2给出了系统在热力学极限下单个晶胞的基态能(GSEPU)与阻挫变量 α 的关系图.从图2中可以看出基态能图为一不光滑的曲线,在 $\alpha_c = 0.412$ 处出现了拐点(基态能对于 α 一阶导数的不连续点),这个拐点代表体系在此发生了能级交错.能级交错意味着系统的量子基态在此处产生了突变,因而拐点 α_c 为系统的量子相变点.在 α_c 的左边区域为磁有序相,右边区域为自旋无序相,对此将在下一节中进一步说明.

4. 自旋关联图

为了进一步说明系统基态能拐点为量子相变点,我们引入自旋关联函数

$$C_{\alpha\beta}(|i-j|) = \langle G | S_{\alpha i} \cdot S_{\beta j} | G \rangle, \quad (3)$$

式中 $|G\rangle$ 为系统的基态, i 和 j 为晶格的标号, α 和 β 标记单个晶格中子格 A, B, C . 计算表明自旋关联

函数 $C_{\alpha\beta}(|i-j|)$ 在 $\alpha < \alpha_c$ 时随晶胞间隔 $|i-j|$ 增加而缓慢变化并将收敛于一个常数, 在 $\alpha > \alpha_c$ 时随晶胞间隔 $|i-j|$ 增加而迅速变化到 0. 我们把以上收敛值记为自旋长程关联值 $C_{\alpha\beta}$. 我们想通过线形链上格点间的自旋长程关联值 C_{AA} , C_{BB} 和 C_{AB} 随 α 的变化(如图 3 所示)来研究阻挫对系统基态的影响. 从图 3 中可以看出三者的跃变都发生在 $\alpha = 0.412$ 附近, 与基态能图中的拐点基本一致. 且在跃变点左边区域的 C_{AA} , C_{BB} 和 C_{AB} 都为有限值, 右边三者都为 0. 说明左边区域系统仍具有磁性长程序, 右边区域自旋长程序已消失进入自旋无序区, 则可以判断基态能的拐点 $\alpha_c = 0.412$ 为系统由于阻挫增强而引起的自旋有序—无序相变点. 在跃变点的左边区域(即磁有序相), 同子格间的自旋长程关联值 C_{AA} , C_{BB} 为正值, 不同子格间的自旋长程关联值 C_{AB} 为负值, 说明阻挫在 $0 < \alpha < 0.412$ 范围内体系基态仍然为反铁磁长程序和铁磁长程序共存的亚铁磁态. 同时在磁有序相区域, 随着 α 的增加三者绝对值都缓慢减小, 表明体系的磁有序性质随着 α 的增强而减弱, 但还不足以破坏基态的磁性长程序. 这与采用自旋波近似得出的结果^[12]基本一致.

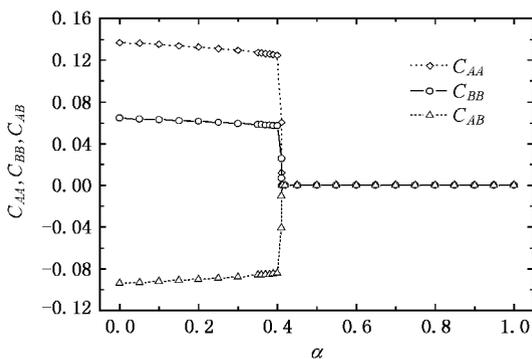


图 3 自旋长程关联值 C_{AA} , C_{BB} 和 C_{AB} 随阻挫变量 α 的变化

5. 无序区 ($0.41 < \alpha \leq 1$) 的自旋能隙

低维系统的基态与第一激发态间的自旋能隙与体系的磁序特性有密切联系. 若系统具有磁性长程序, 则体系不存在自旋能隙. 但若系统不具有磁性长程序, 体系未必存在自旋能隙. 比如自旋为 $1/2$ 的一维海森伯反铁磁链的基态是自旋无序的, 体系却不存在自旋能隙^[13]. 因此本文研究的模型在磁有序区 ($0 < \alpha < 0.41$) 显然不存在自旋能隙. 下面我们就对

系统无序区 ($0.41 < \alpha \leq 1$) 是否存在自旋能隙进行计算. 一般地, 如果一个自旋系统的基态排列是无序的, 则其相应的基态总自旋将取最低可能总自旋值 S_{\min}^T (对于包含偶数格点自旋的系统, $S_{\min}^T = 0$)^[14]. 本文研究的模型包含偶数个自旋格点, 则其在无序区 ($0.41 < \alpha \leq 1$) 的基态总自旋 $S_C^T = 0$. 因此系统在无序区的自旋能隙就为体系基态(总自旋 $S^T = 0$)与总自旋 $S^T = 1$ 的低激发态之间的能量差. 总自旋 $S^T = 0$ 的基态肯定为 $M^z = 0$ 的子空间里的最低能量本征态, 而总自旋 $S^T = 1$ 的低激发态可以选为 $M^z = 1$ 的子空间里的最低能量本征态, 则此系统的自旋能隙定义如下:

$$\Delta = E_0(M^z = 1) - E_0(M^z = 0), \quad (4)$$

式中 $E_0(M^z = 1)$ 和 $E_0(M^z = 0)$ 分别表示子空间 $M^z = 1$ 和 $M^z = 0$ 的最低能量本征值. 图 4 给出了无序区 ($0.41 < \alpha \leq 1$) 自旋能隙 Δ 与阻挫变量 α 的关系. 从图 4 可看出在自旋无序区随着阻挫 α 的增加, 自旋能隙逐渐打开, 并在 $\alpha = 0.801$ 附近其值达到最大. 由此可知由于阻挫的增强而诱导的自旋无序相伴随着自旋能隙的出现.

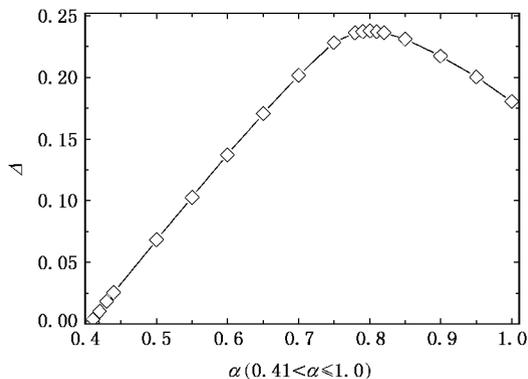


图 4 无序区自旋能隙 Δ 与阻挫变量 α 的关系

6. 结 论

利用数值密度矩阵重整化群 (DMRG) 方法对图 1 所示的自旋 $S = 1/2$ 有阻挫的准一维海森伯反铁磁系统进行了研究. 研究表明: 随着阻挫 α 的增强将使系统从磁有序相变到自旋无序相, 并且伴随着自旋能隙的出现. 这种由阻挫诱导的量子相变出现在 $\alpha \approx 0.412$ 的基态能拐点处. 本文的研究模型在经典情况下(即把自旋算符 S_{A_n} , S_{B_n} , S_{C_n} 都看成是经典矢量), 计算表明在 $0 \leq \alpha \leq 1$ 范围内呈现出奈尔序(0

$\leq \alpha < 1/3$)和倾斜序(the canted state, $1/3 < \alpha \leq 1$)的两相.可以发现在经典情形,最近邻(J_1 项)和次近邻(J_2 项)自旋相互作用的竞争并不导致体系出现自旋无序相.因此这种 J_1 项与 J_2 项相互竞争带来的无序相,主要源于自旋量子涨落,它是一个纯量子项.这与二维无限 J_1 - J_2 模型相类似,许多研究结

果^[15,16]表明量子涨落将导致宏观二维 J_1 - J_2 量子自旋模型出现一个无序相,然而其无穷大经典模型只出现奈尔序和 colinear 序(相变点为 $J_2/J_1 = 0.5$).本文模型在自旋无序相区间的具体自旋状态将是后续工作的研究要点,它对系统自旋能隙打开的起因研究和新材料的开发研制都有直接意义.

- [1] Figueirido F, Karlhede A, Kivelson S *et al* 1999 *Phys. Rev. B* **41** 4619
- [2] Ueda K, Miyahira S 1999 *J. Phys. : Condens. Matter* **11** L175
- [3] Hase M, Terasaki I, Uchinokura K 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3651
- [4] Kikuchi H, Fujii H, Chiba M *et al* 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 227201
- [5] Okamoto K, Tonegawa T, Takahashi Y *et al* 1999 *J Phys :Condens Matter* **11** 10485
- [6] Lieb E, Mattis D 1962 *J. Math. Phys.* **3** 749
- [7] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **148** 10345
- [8] Peschel I, Wang X, Kaulke M 1999 *Density Matrix Renormalization : New Numerical Method in Physics Lecture Notes in Physics* (New York : Spinger)
- [9] Liu Y J, Gong C D 2002 *J Phys : Condens Matter* **14** 493
- [10] Wang C H, Chen D F, Liu Y J 2005 *Journal of Yangzhou University (Natural Science Edition)* **8**(1) 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**(1) 28]
- [11] Chen D F 2005 *Journal of East China Shipbuilding Institute (Natural Science Edition)* **19**(2) 33 (in Chinese) [陈东芳 2005 华东船舶工业学院学报(自然科学版) **19**(2) 33]
- [12] Jiang J J, Zhang S J, Liu Y J 2006 *Acta Phys. Sin.* **50** 4888 (in Chinese) [蒋建军、张松俊、刘拥军 2006 物理学报 **50** 4888]
- [13] Orbach R L 1958 *Phys. Rev.* **112** 309
- [14] Gao L, Liu Y J 2002 *Journal of Yangzhou University (Natural Science Edition)* **5**(4) 21 (in Chinese) [高莉、刘拥军 2002 扬州大学学报(自然科学版) **5**(4) 21]
- [15] Schulz H J, Ziman T A L, Poilblanc D 1996 *J. Phys. (Fr)* **16** 675
- [16] Liu Y J, Chen Y C, Yang M F *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024403

Quantum phase transition as a result of magnetic frustrations in a ferrimagnetic Heisenberg system^{*}

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

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

(Received 10 April 2007; revised manuscript received 5 June 2007)

Abstract

Using density-matrix renormalization group (DMRG) method, we studied the effect of magnetic frustrations due to next-nearest neighbor bonds in a system of quasi-one-dimensional Heisenberg antiferromagnetic chain but with ferrimagnetic properties. In this paper, the ground state energy per unit cell, spin correlation function and spin gap are calculated. As a result of the frustrations, the quantum disordered phase with the spin gap appears at the spin order-disorder phase transition point $\alpha_c \approx 0.412$ to $\alpha = 1$. And in the region of magnetic order phase, the increasing magnetic frustrations reduce the magnetic order.

Keywords: quasi-one-dimensional Heisenberg antiferromagnetic chain, ferrimagnetic properties, density-matrix renormalization group method, spin gap

PACC: 7510J, 7540M

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

[†] E-mail: yjliu@yzu.edu.cn