

一种等效于反铁磁海森伯混合自旋链的铁磁 - 反铁磁交替自旋链*

蒋建军^{1)†} 杨翠红²⁾ 刘拥军³⁾

1) (三江学院物理教研室, 南京 210012)

2) (南京信息工程大学数理学院, 南京 210044)

3) (扬州大学物理科学与技术学院, 扬州 225002)

(2011年1月19日收到; 2011年7月24日收到修改稿)

利用严格对角化方法研究了一种自旋为 $1/2$ 的铁磁 - 反铁磁交替自旋链的物理性质, 计算了自旋关联函数、自旋 z 方向分量、自旋激发谱和磁化曲线等基本物理量, 并将这些物理量和自旋为 $(1, 1/2)$ 的混合反铁磁自旋链对应的物理性质进行了比较. 结果表明, 当铁磁作用居于主导地位时, 该模型的物理行为等效于混合自旋模型. 因此, 可以通过分析铁磁 - 反铁磁交替自旋链的物理性质研究混合自旋链的物理行为.

关键词: 海森伯自旋链, 自旋激发谱, 关联函数, 磁化曲线

PACS: 75.10.Pq, 75.40.Mg

1 引言

自从 Anderson^[1] 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, 一维海森伯自旋链及其物理性质的研究一直受到广泛而持续的关注^[2,3]. 1983年, Haldane^[4] 利用非线性 Sigma 模型研究一维均匀反铁磁自旋系统时, 提出了一个重要的猜想: 如果系统的自旋为整数, 该系统具有有限的能隙, 其自旋关联函数呈指数函数衰减; 如果系统的自旋为半整数, 系统不存在自旋能隙, 其自旋关联函数呈幂次函数衰减. 该猜想引起了许多理论和实验工作者的关注, 并且不断得到验证^[5-7]. 为了进一步验证 Haldane 的猜想, 文献 [8, 9] 利用密度矩阵重整化群方法研究了一类铁磁 - 反铁磁海森伯交替自旋链的物理性质. 结果表明, 当铁磁作用居于主导地位时, 由铁磁耦合作用相连的 n 个近邻自旋将形成一个铁磁的 n 聚化, 其总自旋为 $S = n/2$. 此时, 铁磁 - 反铁磁系统的性质等效于自旋为 $S = n/2$ 的反铁磁海森伯自旋系统, 因此可以采用铁磁 - 反铁

磁海森伯交替自旋链研究 Haldane 的猜想. 除了上述两种自旋为 $1/2$ 的整数倍和半整数倍的海森伯自旋链外, 如图 1(b) 所示, 还有一种自旋大小为 1 和 $1/2$ 沿链方向交替出现的反铁磁混合自旋链, 该模型也一直是人们研究的一个热点课题^[10-14]. 由于自旋排列的特殊性, 混合自旋模型具有许多不同于自旋为 $1/2$ 和 1 的海森伯自旋链的奇特物理特性. 例如, 虽然该模型自旋之间的相互作用是反铁磁的, 但它却具有铁磁磁性长程序. 对该模型的研究不仅具有理论意义, 同时还可以用其来解释合成材料 $\text{NiCu}(\text{pba})(\text{D}_2\text{O})_3 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$ 的物理性质^[15]. Haldane 猜想中的两种自旋模型都可以用铁磁 - 反铁磁模型进行解释, 那么混合自旋模型的物理性质是否也可以采用一种铁磁 - 反铁磁模型进行解释呢? 鉴于此, 有必要引入图 1(a) 所示的铁磁 - 反铁磁海森伯自旋链模型 ($J_1 - J_2 - J_2$ 模型), 图中 A , B 子格最近邻格点之间的自旋相互作用 J_1 为铁磁耦合作用, B , C 子格和 C , A 子格最近邻格点之间的自旋相互作用 J_2 为反铁磁耦合作用. 模型的哈密顿量为

* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 10804053) 和江苏省青蓝工程资助的课题.

† E-mail: jian-jun-jiang@yahoo.cn

$$H = J_1 \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_{A,i} \cdot \mathbf{S}_{B,i} + J_2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_{B,i} \cdot \mathbf{S}_{C,i} + \mathbf{S}_{C,i} \cdot \mathbf{S}_{A,i+1}), \quad (1)$$

式中 $J_1 < 0$ 为铁磁耦合作用, $J_2 > 0$ 为反铁磁耦合作用, $\mathbf{S}_{A,i}$, $\mathbf{S}_{B,i}$ 和 $\mathbf{S}_{C,i}$ 为第 i 个晶胞中子格 A , B 和 C 的自旋算符.

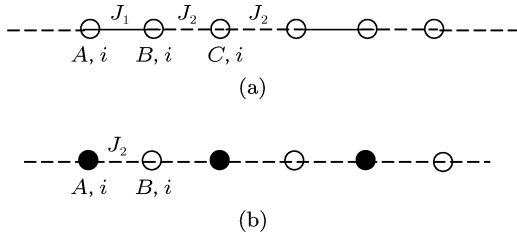


图1 方程 (1) 所描述的自旋 1/2 的铁磁 - 反铁磁交替自旋链和自旋为 1 和 1/2 的反铁磁混合自旋链 实心和空心圆分别表示自旋大小为 1 和 1/2 的格点

显然, 对于 J_1 - J_2 - J_2 模型, 当铁磁作用起主导作用时 ($|J_1| \gg J_2$), 由铁磁耦合作用相连的两个临近自旋将形成一个铁磁的二聚化, 其总自旋为 1. 那么此时 J_1 - J_2 - J_2 模型是否可以用来解释混合自旋链的物理性质呢? 利用数值严格对角化方法, 本文计算了由 24 个格点组成的 J_1 - J_2 - J_2 模型和 16 个格点组成的混合自旋模型的自旋关联函数、自旋 z 方向分量、自旋激发谱和磁化曲线, 并将这

些结果进行比较来探讨上述问题. 不失一般性, 在本文的讨论中, 我们假设 $J_1 = -1$, 同时定义参数 $\alpha = J_2/|J_1|$.

2 结果及讨论

2.1 自旋关联函数

对于混合自旋链, 由于大小为 1 和 1/2 的自旋沿链方向交替出现, 因此存在三种自旋关联函数 [16]

$$\begin{aligned} C_{AA}(|i-j|) &= \langle G | \mathbf{S}_{A,i}^z \cdot \mathbf{S}_{A,j}^z | G \rangle, \\ C_{BB}(|i-j|) &= \langle G | \mathbf{S}_{B,i}^z \cdot \mathbf{S}_{B,j}^z | G \rangle, \\ C_{AB}(|i-j|) &= \langle G | \mathbf{S}_{A,i}^z \cdot \mathbf{S}_{B,j}^z | G \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $|G\rangle$ 为系统的基态. 相应的, 对于 J_1 - J_2 - J_2 模型, 我们也定义 3 种自旋关联函数:

$$\begin{aligned} C_{(A+B)(A+B)}(|i-j|) &= \langle G | \mathbf{S}_{(A+B),i}^z \cdot \mathbf{S}_{(A+B),j}^z | G \rangle, \\ C_{CC}(|i-j|) &= \langle G | \mathbf{S}_{C,i}^z \cdot \mathbf{S}_{C,j}^z | G \rangle, \\ C_{(A+B)C}(|i-j|) &= \langle G | (\mathbf{S}_{A,i}^z + \mathbf{S}_{B,i}^z) \cdot \mathbf{S}_{C,j}^z | G \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

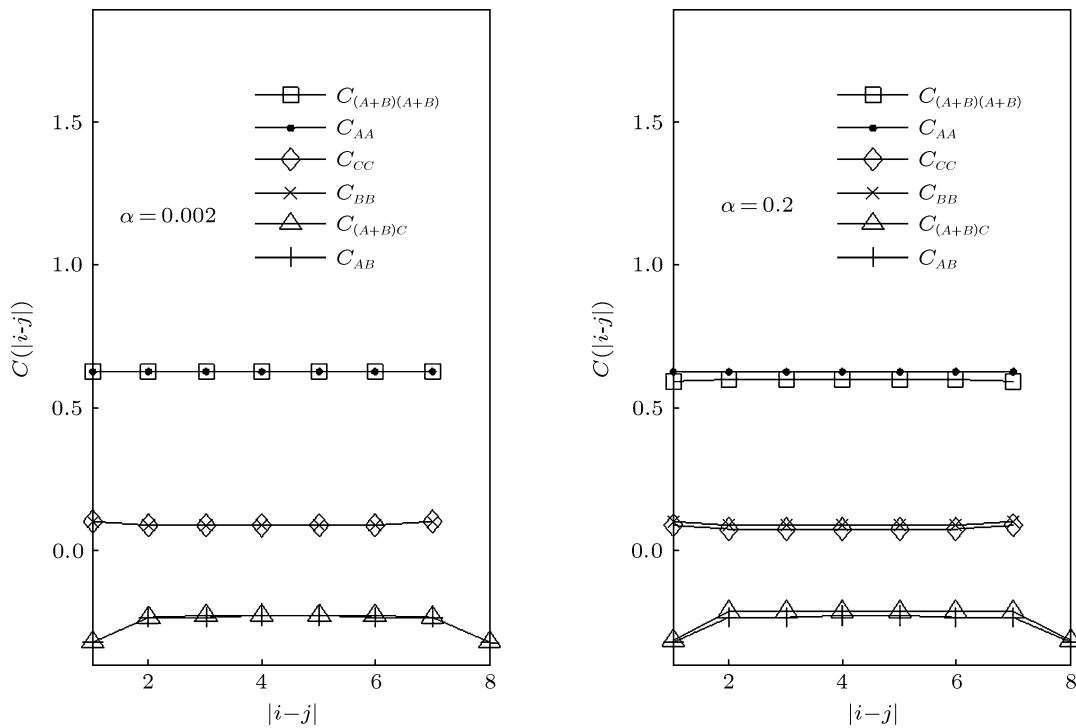


图2 $\alpha = 0.002$ 和 $\alpha = 0.2$ 时的自旋关联函数

图 2 给出了 $\alpha = 0.002$ 和 $\alpha = 0.2$ 时两种模型自旋关联函数的计算结果. 由图可知, 随晶胞间隔 $|i - j|$ 的增加, 两种模型的自旋关联函数都快速收敛于一个常数, 并且同套子格间的自旋关联函数是正值, 而不同子格间的自旋关联函数为负值. 表明这两种模型中, 铁磁和反铁磁性长程序共同存在. 当 $\alpha = 0.002$ 时, 两种模型的自旋关联函数已经非常接近了. 因此, 从自旋关联函数的观点来看, 当 α 取很小数值时, 两种自旋模型的行为是等效的.

2.2 基态自旋图像

为了研究两种自旋模型基态自旋图像之间的关系, 首先计算了混合自旋链两套子格的自旋 z 方向分量的基态平均值, 其大小分别为 0.7924 和 -0.2924 . 该结果和利用密度矩阵重整化群方法^[11]、量子蒙特卡罗方法^[16]和矩阵直积态方法^[17]计算所得到的自旋 z 方向分量符合得很好. 为了比较, 又计算了 J_1 - J_2 - J_2 模型的基态自旋 z 方向分量 $\langle S_A^z + S_B^z \rangle$ 和 $\langle S_C^z \rangle$, 结果如图 3 所示. 从图中可以发现, 与混合自旋链类似, 量子涨落对 J_1 - J_2 - J_2 模型不同子格的自旋状态影响不同. 对于子格 C , 量子涨落引起的自旋偏离要明显大于 A, B 子格. 并且随着 α 的逐渐变小, $\langle S_A^z + S_B^z \rangle$ 和 $\langle S_C^z \rangle$ 越来越接近于混合自旋链两套子格的自旋 z 方向分量. 因此, 在小 α 的参数范围内, 两种自旋链的基态自旋图像是相互等效的.

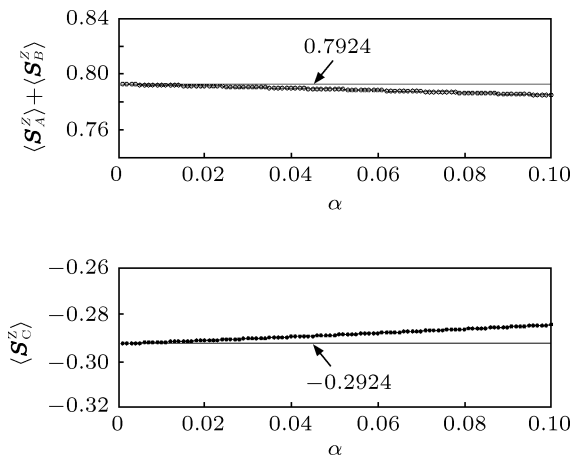


图 3 自旋 z 方向分量和 α 的关系

2.3 自旋激发谱

对于混合自旋链, 体系同时存在两支自旋激发谱, 一支是没有能隙的铁磁自旋激发谱, 另一支是

有能隙的反铁磁自旋激发谱^[10], 这两支自旋激发谱可以通过下式求得

$$\begin{aligned} \omega_{AF} &= E_0(S_T = N/2 + 1, k) - E_g, \\ \omega_F &= E_0(S_T = N/2 - 1, k) - E_g, \end{aligned} \quad (4)$$

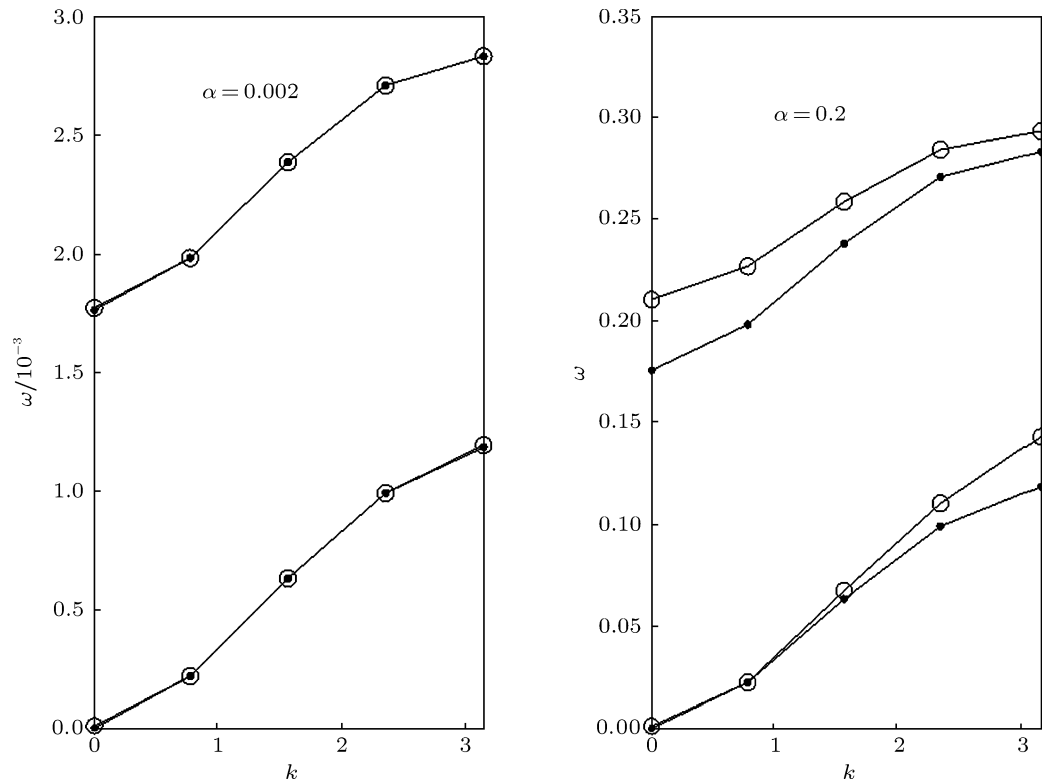
式中 E_g 和 $E_0(S_T, k)$ 分别为体系的基态能量和总自旋为 S_T 、动量为 k 的子空间中能量的最低值. 计算结果表明, 混合自旋链的反铁磁自旋激发谱的自旋激发能隙大小为 $1.7594J_2$, 该值和文献 [10] 中采用蒙特卡罗方法计算所得的能隙值 $1.75914J_2$ 非常接近. 为了比较, 利用 (4) 式, 也计算了 J_1 - J_2 - J_2 模型的两支自旋激发谱. 两种自旋链激发谱的计算结果如图 4 所示. 需要说明的是, 对于混合自旋链, 与自旋为 1 的格点相对应的原子内部有两个电子 (自旋为 1/2) 参与反铁磁耦合作用, 因此每对最近邻原子之间有两对电子对反铁磁交换作用能有贡献; 而对于 J_1 - J_2 - J_2 模型, 每个格点的原子内部都只有一个电子参与耦合作用, 意味着由反铁磁耦合作用相连的每对最近邻原子之间只有一对电子对反铁磁交换作用能有贡献. 因此, 为了清楚地看出两种模型自旋激发之间的关系, 图 4 中混合自旋链的自旋激发谱在数量上都除以 2. 观察图 4 可以发现, 与混合自旋链类似, J_1 - J_2 - J_2 模型确实也同时存在着一支有能隙的反铁磁自旋激发谱和一支无能隙的铁磁自旋激发谱. 当 $\alpha = 0.002$ 时, 两种模型的自旋激发谱已经基本重合了, 这就说明, 在小 α 参数范围内, 两种模型的自旋激发行是等效的.

2.4 磁化曲线

1997 年, Oshikawa Masaki 等^[18] 在研究自旋系统的磁化曲线时提出, 如果一个自旋系统具有磁化平台, 则其必然满足条件

$$n(S - m) = \text{整数}, \quad (5)$$

式中 n 为体系基态的周期, S 为单套晶胞各子格自旋量子数之和, m 为晶胞的磁化率. 将此条件应用到 J_1 - J_2 - J_2 模型和混合自旋模型可以发现, 这两种模型可能在 $m = 1/2$ 处存在磁化平台. 对于混合自旋模型, 基于蒙特卡罗方法的计算表明^[12], 该模型在 $m = 1/2$ 处确实具有磁化平台. 而对于 J_1 - J_2 - J_2 模型, 文献 [19, 20] 分别利用密度矩阵重整化群方法和转移密度矩阵重整化群方法计算了铁磁耦合


 图4 $\alpha = 0.002$ 和 $\alpha = 0.2$ 时, 铁磁 - 反铁磁交替自旋链 (○) 和混合自旋链 (●) 的自旋波激发谱

作用 J_1 和反铁磁耦合作用 J_2 分别等于某些参数时的磁化曲线, 结果显示, 该模型在 $m = 1/2$ 处也具有磁化平台. 既然上述两种模型在 $m = 1/2$ 处均存在磁化平台现象, 那么在小 α 的参数条件下, 它们在外磁场作用下所表现出来的磁化行为是否也是等效的呢? 要探究上述问题, 就要计算出 J_1 - J_2 - J_2 模型和混合自旋模型的磁化曲线, 并将其结果进行比较.

为了计算出 J_1 - J_2 - J_2 模型的磁化曲线, 需要对其施加一个变化磁场 h 的作用, 此时体系的哈密顿量从 (1) 式变为

$$\begin{aligned}
 H = & J_1 \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_{A,i} \cdot \mathbf{S}_{B,i} \\
 & + J_2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_{B,i} \cdot \mathbf{S}_{C,i} + \mathbf{S}_{C,i} \cdot \mathbf{S}_{A,i+1}) \\
 & - h \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_{A,i}^z + \mathbf{S}_{B,i}^z + \mathbf{S}_{C,i}^z). \quad (6)
 \end{aligned}$$

因为系统的总自旋 z 轴分量 $\mathbf{S}_{\text{tot}}^z = \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_{A,i}^z +$

$\mathbf{S}_{B,i}^z + \mathbf{S}_{C,i}^z)$ 和 (6) 式的哈密顿量对易, 即 $[\mathbf{S}_{\text{tot}}^z, H] = 0$, 因此 (6) 式的哈密顿量可以按 $\mathbf{S}_{\text{tot}}^z$ 进行分块对角化, 这样就可以减小计算所需内存, 同时节约计算时间. 由于 (6) 式的哈密顿量具有上述特点, 因此可以按照下述方法计算它的磁化曲线: 首先求出外加磁场为零时, 系统在各个不同子空间中 ($\mathbf{S}_{\text{tot}}^z = 0, 1, \dots, 3N/2$) 所具有的能量最小值 $E(\mathbf{S}_{\text{tot}}^z, h = 0)$, 然后再利用关系式 $E(\mathbf{S}_{\text{tot}}^z, h) = E(\mathbf{S}_{\text{tot}}^z, h = 0) - h\mathbf{S}_{\text{tot}}^z$, 就可确定出在外加磁场 h 中, 体系在各个不同子空间中所具有的能量最低值 $E(\mathbf{S}_{\text{tot}}^z, h)$, 最后根据能量最低原理, 将不同子空间中的能量最低值进行比较, 就可以确定出体系的磁化曲线. 利用同样的方法, 也可以计算出混合自旋模型的磁化曲线.

图 5 给出了两种模型的晶胞磁化率 m 随外加磁场 h 变化的关系曲线. 与自旋激发谱图类似, 在小 α 情况下, 为了比较两种模型磁化曲线的关系, 图 5 中, 与 J_1 - J_2 - J_2 模型相对应的外加磁场在数量上扩大了一倍. 观察图 5, 可以发现, 与文献 [12], [19] 和 [20] 的结果类似, 两种模型

在 $m = 0.5$ 处都具有磁化平台. 磁化平台出现的主要原因是由于处于外磁场中的混合自旋链和 J_1 - J_2 - J_2 模型, 其基态和激发态之间存在有限能隙. 除了 $m = 1/2$ 的磁化平台, 图 5 中还有一些区间很窄的磁化平台, 这种现象主要是由于计算的尺寸效应导致的, 在热力学极限下, 这些磁化平台的宽度都将趋于零. 当 $\alpha = 0.002$ 时, 两种模型的磁化曲线几乎完全重合了. 由此可见, 在小 α 的参数条件下, 两种模型在外磁场作用下所表现出来的磁化行为是相互等效的.

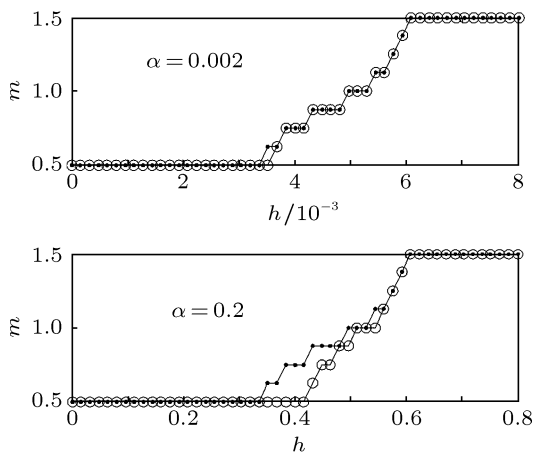


图 5 $\alpha = 0.002$ 和 $\alpha = 0.2$ 时, 铁磁 - 反铁磁交替自旋链 (○) 和混合自旋链 (●) 的磁化曲线

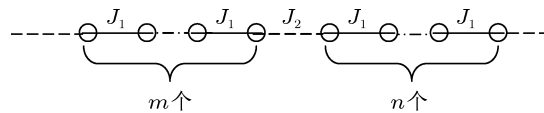


图 6 分别由 m 和 n 个铁磁耦合作用相连的自旋为 $1/2$ 的铁磁 - 反铁磁海森伯自旋链

3 总结

利用数值严格对角化方法, 计算了图 1 所示的铁磁 - 反铁磁交替自旋链的基本物理量, 并将其和自旋大小为 1 和 $1/2$ 的混合自旋链相对应的物理量进行了比较. 结果表明, 在小 α 参数范围内: 1) 两种模型的自旋 z 方向分量和自旋关联函数几乎相等. 2) 混合自旋链的自旋激发能隙和磁化平台的宽度均为 J_1 - J_2 - J_2 模型的两倍, 原因在于混合自旋链中参与反铁磁耦合作用的电子数目是 J_1 - J_2 - J_2 模型的两倍. 以上结果表明, 当铁磁耦合占主导作用时, J_1 - J_2 - J_2 模型和混合自旋模型是相互等效的. 对该结论做进一步的推广还可得到由自旋大小为 $m/2$ 和 $n/2$ 构成的一维海森伯反铁磁混合自旋模型, 其物理行为必然等效于图 6 所示, 即铁磁耦合居主导作用的自旋大小为 $1/2$ 的铁磁 - 反铁磁海森伯自旋链. 因此, 可以通过图 6 所示的铁磁 - 反铁磁海森伯自旋链探究一般混合自旋链的物理性质, 这就为混合自旋模型的研究提供了一种新的途径.

[1] Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196
 [2] Lin N, Yu Z R 1993 *Acta Phys. Sin.* **42** 1990 (in Chinese) [林念, 于祖荣 1993 物理学报 **42** 1990]
 [3] Wang Y S 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1458 (in Chinese) [王延申 2002 物理学报 **51** 1458]
 [4] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153
 [5] Buyers W J L, Morra R M, Armstrong R L, Hogan M J, Gerlach P, Hirakawa K 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 371
 [6] Affleck I 1989 *J. Phys.: Condens. Mat.* **1** 3047
 [7] Shi Y, Xing H Z, Zhang H W, Jing Y L, Liu Y L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 0280 (in Chinese) [石玉, 邢怀中, 张怀武, 荆玉兰, 刘颖力 2005 物理学报 **54** 0280]
 [8] Hung H H, Gong C D 2005 *Phys. Rev. B* **71** 054413
 [9] Pan L H, Gong C D 2008 *J. Phys.: Condens. Mat.* **20** 215232
 [10] Yamamoto S, Brehmer S, Mikeska H J 1998 *Phys. Rev. B* **57** 13610
 [11] Pati S K, Ramasesha S, Sen D 1997 *J. Phys.: Condens. Mat.* **9** 8707
 [12] Sakai T, Yamamoto S 1999 *Phys. Rev. B* **60** 4053
 [13] Yamamoto S, Hori H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 054423
 [14] Fukushima N, Honecker A, Wessel S, Brenig W 2004 *Phys. Rev. B* **69** 174430
 [15] Hagiwara M, Minami K, Narumi Y, Tatani K, Kindo K 1998 *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** 2209
 [16] Brehmer S, Mikeska H J, Yamamoto S 1997 *J. Phys.: Condens. Mat.* **9** 3921
 [17] Kolezhuk A K, Mikeska H J, Yamamoto S 1997 *Phys. Rev. B* **55** R3336
 [18] Oshikawa M, Yamanaka M, Affleck I 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1984
 [19] Gu B, Su G, Gao S 2005 *J. Phys.: Condens. Mat.* **17** 6081
 [20] Gu B, Su G, Gao S 2006 *Phys. Rev. B* **73** 134427

A kind of ferromagnetic-antiferromagnetic alternating spin chain equivalent to the mixed spin Heisenberg chain*

Jiang Jian-Jun^{1)†} Yang Cui-Hong²⁾ Liu Yong-Jun³⁾

1) (Department of Physics, Sanjiang College, Nanjing 210012, China)

2) (Faculty of Mathematics and Physics, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China)

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

(Received 19 January 2011; revised manuscript received 24 July 2011)

Abstract

By using the method of exact diagonalization, the properties of the spin-1/2 ferromagnetic-antiferromagnetic alternating Heisenberg chain are investigated. The spin-spin correlation, the sublattice magnetizations, the spin excitation spectrum and the magnetization curve of the model are calculated and compared with the corresponding properties of the mixed spin chain. The results show that the behaviors of the alternating Heisenberg chain are equivalent to those of the mixed spin chain when the ratio of antiferromagnetic to ferromagnetic coupling strength α is very small. So, the properties of the mixed spin chain can be analyzed by using the spin-1/2 ferromagnetic-antiferromagnetic-antiferromagnetic alternating Heisenberg chain.

Keywords: Heisenberg spin chain, spin excitation spectra, correlation function, magnetization curve

PACS: 75.10.Pq, 75.40.Mg

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10804053) and Qing Lan Project of Jiangsu Province, China.

† E-mail: jian_jun_jiang@yahoo.cn