

准周期调制下自旋 1/2 反铁磁 XY 模型中的晶格畸变行为*

李鹏飞[†] 曹海静 郑莉 蒋秀丽

(上海电力学院数理学院, 上海 200090)

(2013 年 4 月 2 日收到; 2013 年 4 月 24 日收到修改稿)

利用严格对角化方法研究了 Thue-Morse 准周期调制下自旋 1/2 反铁磁 XY 模型中的晶格畸变行为. 结果显示: 系统中每个格点的晶格畸变幅度介于均匀分布和无序分布之间. 对于较弱的准周期调制, 调制强度的增加有利于晶格畸变的形成. 但是, 对于较强的准周期调制, 调制强度的增加则阻碍晶格畸变的形成. 此外, 系统低能谱的能隙也明显受到准周期调制的影响.

关键词: 晶格畸变, Thue-Morse 序列, 准周期调制

PACS: 75.10.Jm, 75.30.Gw, 71.23.Ft

DOI: 10.7498/aps.62.157501

1 引言

自从 1984 年在实验上发现准晶体以来^[1], 准周期结构成为了物理学研究的一个新领域^[1-15]. 准周期结构介于周期和无序结构之间, 展示了许多奇异的性质. 当前, 越来越多的具有准周期结构的材料被合成^[2-6]. 一维准周期结构由于在数学处理上相对简单, 因而得到了更广泛的关注. 在这种结构中, 电子的本征态既不是周期结构的扩展态, 也不是无序系统的局域态, 而是处于它们之间的居间态^[7,8]. 理论上, 人们构造了各种各样的准周期序列, 如 Fibonacci 序列、Thue-Morse 序列等^[9]. Thue-Morse 序列是一种典型的非周期结构. 在这种序列中, 其晶格展示出奇异连续的 Fourier 变换^[10]和类 Cantor 结构的声子谱^[11]. 当前一种观点认为 Thue-Morse 序列的性质介于周期和 Fibonacci 序列之间, 因而比 Fibonacci 结构更具有周期性^[9]. 而另一种观点则认为 Thue-Morse 序列是比 Fibonacci 更“无序”的结构^[10]. 所以对 Thue-Morse 序列的研究仍然是一个有趣的课题.

在本文中, 我们研究了 Thue-Morse 准周期调制

下自旋 1/2 反铁磁 XY 模型中的晶格畸变行为. 结果表明, 系统的晶格畸变依赖于 Thue-Morse 准周期调制的强度, 并且其低能激发谱总是打开一个能隙. 上述性质明显区别于 Fibonacci 准周期调制^[12].

2 模型和方法

在绝热近似下, 准周期调制的自旋反铁磁 XY 模型的哈密顿可以写作

$$H = J \sum_{i=1}^N (1 + \alpha u_i) (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + \frac{1}{2} K \sum_{i=1}^N u_i^2 + \sum_{i=1}^N \lambda_i S_i^z, \quad (1)$$

其中 S_i^β 是自旋 1/2 算符的 β 分量 ($\beta = x, y, z$). u_i 是第 i 和 $i+1$ 个晶格之间的畸变. K 代表晶格弹性常数. N 是晶格数. λ_i (分别被设为两个值 λ_A 和 λ_B) 代表准周期调制的幅度. 本文中, λ_i 按照 Thue-morse 序列分布, 其迭代规则为: $A \rightarrow AB, B \rightarrow BA$. 因而最前面的五代可以写为

$$A \rightarrow AB \rightarrow ABBA \rightarrow ABBABAAB \rightarrow ABBABAABBAABABABBA.$$

* 上海市教育委员会科研 (创新) 项目 (批准号: 10ZY159) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: lpfshiep@sina.com

设定系统满足周期性边界条件 ($S_{N+1} = S_1$). $J(> 0)$ 为格点间的反铁磁耦合强度. 在下列计算中, 设 J 为能量单位, 因而其他物理量都化为无量纲的参数. 利用变换 $\alpha u_i \rightarrow \delta_i$, 自旋-声子耦合 α 被吸收进晶格弹性常数中 ($K/\alpha^2 \rightarrow \eta$).

在 Jordan-Weigner 变换下 [16], 哈密顿 (1) 可以变换为

$$H = \sum_{i=1}^N (1 + \delta_i)(c_i^\dagger c_{i+1} + c_i c_{i+1}^\dagger) + \frac{\eta}{2} \sum_{i=1}^N \delta_i^2 \sum_i \delta_i^2 + \sum_{i=1}^N \lambda_i c_i^\dagger c_i, \quad (2)$$

其中, $c_i^\dagger(c_i)$ 是无自旋电子的创造和湮没算符. 哈密顿 (2) 能够被严格对角化, 因而可得出对应的本征值和本征函数. 这里定义准周期调制的强度为 $\Delta\lambda = \lambda_A - \lambda_B$. 晶格畸变可以按照文献 [17] 介绍的自洽方法得到.

3 结果和讨论

在一维反铁磁自旋系统中, 自旋-声子耦合作用使得晶格产生畸变. 在周期自旋系统中每一格点的畸变幅度是相等的, 这就是所谓的二聚化. 晶格二聚化降低了整个系统的磁能, 在自旋激发谱中打开了一个能隙. 然而, 准周期调制破坏了系统的平移不变形, 因而导致了奇异的晶格畸变. 在图 1 中, 我们给出了每一格点的晶格畸变的绝对值. 图中的格点数取作 $N = 128$, 晶格弹性常数 $\eta = 1.0$, 准周期调制的强度为 $\Delta\lambda = 1.5$. 结果发现, 晶格畸变的幅度既不是均匀的 (每一格点晶格畸变幅度相等), 也不是无序的, 而是处于它们中间的一种分布. 但是, 这种中间分布并没有显示出自相似性, 因而体现了 Thue-Morse 调制和 Fibonacci 调制的不同.

进一步, 我们研究准周期调制对晶格总体畸变行为的影响. 这里, 定义一个平均的晶格畸变

$$\langle \delta \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N |\delta_i|, \quad (3)$$

在图 2 中, 给出了不同晶格弹性常数下, 系统平均的晶格畸变和准周期调制之间的函数关系 (格点数 $N = 128$). 结果显示: 在较弱的准周期调制下, 随着调制强度的增加, 平均晶格畸变越来越大. 但是, 当调制强度大于某一个临界值 $\Delta\lambda_c$ 时, 随着调制强度的增加, 平均晶格畸变会越来越小, 最后趋向于一个有限值. 也就是说, 对较弱的准周期调制, 增加调

制强度将有助于晶格畸变的形成. 而对于较强的准周期调制, 调制强度增加将阻碍晶格畸变的形成, 并最终达到一种平衡状态. 图 2 中还显示, 随着晶格弹性常数的增加 (也即自旋-声子耦合强度的减小), 对应的平均晶格畸变幅度减小, 而临界值 $\Delta\lambda_c$ 将逐渐增大. 这些现象可能来自于自旋-声子耦合和准周期调制之间的竞争. 当这种竞争达到平衡时, 平均的晶格畸变将趋向一个有限值.

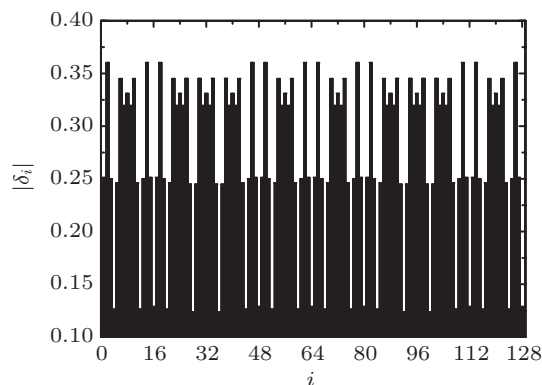


图 1 系统各点的晶格畸变幅度 (格点数 $N = 128$, 晶格弹性常数 $\eta = 1.0$, 准周期调制强度 $\Delta\lambda = 1.5$)

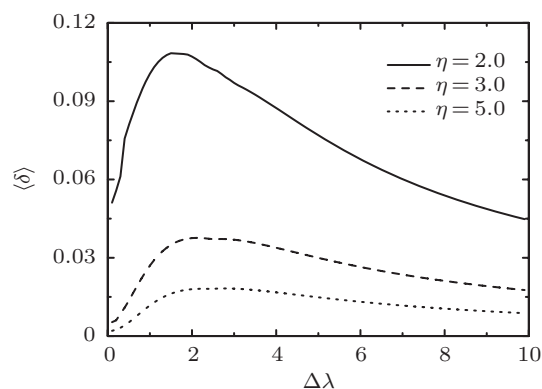


图 2 不同晶格弹性常数下, 系统平均的晶格畸变和准周期调制之间的函数关系 (格点数 $N = 128$, 点线、折线和实线分别对应于晶格弹性常数 $\eta = 2.0, 3.0$ 和 5.0)

研究表明, 在 Fibonacci 准周期调制的自旋系统中, 能谱表现出自相似的特征 [15], 并且其基态能强烈的依赖于自旋-声子耦合 [12]. 对于 Thue-Morse 准周期调制, 图 3 给出了不同晶格弹性常数和调制强度下, $\ln N$ 和 $\ln \Delta E$ 之间的函数关系. 其中能隙 ΔE 定义为

$$\Delta E = E_0 \left(\frac{N}{2} + 1 \right) - E_0 \left(\frac{N}{2} \right). \quad (4)$$

这里, N 是一个偶数. $E_0(L)$ 是具有 L 个自旋的系统的基态能. 可以看出, 对于所有的情况, 系统基

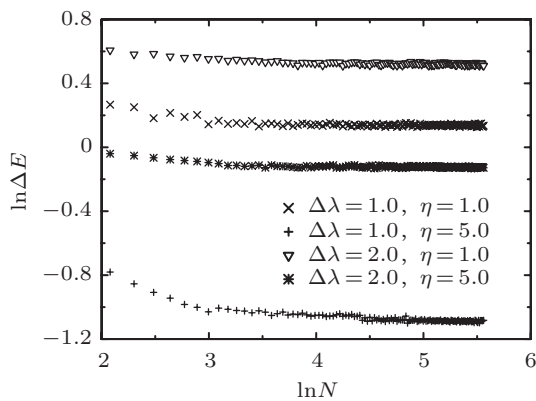


图3 不同晶格弹性常数和准周期调制下 $\ln N$ 和 $\ln \Delta E$ 之间的函数关系 (格点数 $N = 128$)

态的能隙总是存在. 这一性质与周期结构是相似的. 而且, 能隙的大小强烈依赖于晶格弹性常数和调制

强度. 当给定晶格弹性常数时, 能隙随调制的增强而变大. 而对于一定的调制强度, 能隙则随晶格弹性常数的增加而减小.

4 结论

综上所述, 我们利用严格对角化方法研究了 Thue-Morse 准周期调制下自旋 1/2 反铁磁 XY 模型中的基态性质. 结果显示, 每个格点的晶格畸变幅度既不是均匀的, 也不是无序的, 而是处于它们之间的中间态. 存在一个临界的调制强度, 这一点对应的晶格畸变最大. 对低能谱的研究发现, 在准周期调制下, 激发态仍然打开一个能隙, 这一点类似于周期结构.

[1] Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951
 [2] Tam W Y, Vastano J A, Swinney H L, Horsthemke W 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2163
 [3] Macon L, Desideri J P, Sornette D 1989 *Phys. Rev. B* **40** 3605
 [4] Du Y, Zhu S N, Zhu Y Y, Xu P, Zhang C, Chen Y B, Liu Z W, Ming N B, Zhang X R, Zhang F F, Zhang S Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1573
 [5] Dou J H, Sheng Y, Zhang D Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4685 (in Chinese) [窦军红, 盛艳, 张道中 2009 物理学报 **58** 4685]
 [6] Wang X N, Geng X G, Zang D Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 054701 (in Chinese) [王晓娜, 耿兴国, 臧渡洋 2013 物理学报 **62** 054701]
 [7] Zhong J X, Mosseri R 1995 *J. Phys. C* **7** 8383
 [8] Piéchon F 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4372
 [9] Liu Y Y, Fu X J, Huang X Q 1997 *Progress in Physics* **17** 1 (in Chinese) [刘有延, 傅秀军, 黄秀清 1997 物理学进展 **17** 1]
 [10] Cheng Z, Savit R, Merlin R 1988 *Phys. Rev. B* **37** 4375
 [11] Axel F, Peyriere J 1989 *J. Stat. Phys.* **57** 1013
 [12] Li P F, Chen Y G 2009 *Phys. Scr.* **79** 055701
 [13] Ma T X, Liang C, Wang L G, Lin H Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 252402
 [14] Noh H, Yang J K, Boriskina S V, Rooks M J, Solomon G S, Negro L D, Cao H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 201109
 [15] Li Y Z, Chen Y G, Shi Y L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2539 (in Chinese) [李煜芝, 陈宇光, 石云龙 2006 物理学报 **55** 2539]
 [16] Leib E H, Shultz T, Mattis D J 1961 *Ann. Phys. (NY)* **16** 407
 [17] Fang Z, Liu Z L, Yao K L 1994 *Phys. Rev. B* **49** 3916

Behaviors of lattice distortions in the spin 1/2 antiferromagnetic XY model with quasiperiodic modulation*

Li Peng-Fei[†] Cao Hai-Jing Zheng Li Jiang Xiu-Li

(Department of Mathematics and Physics, Shanghai University of Electric Power, Shanghai 200090, China)

(Received 2 April 2013; revised manuscript received 24 April 2013)

Abstract

The behaviors of lattice distortions in the spin 1/2 antiferromagnetic XY model with Thue-Morse quasiperiodic modulation are investigated by the method of exact diagonalization. It is found that the lattice distortion at each site has the character intermediate between the periodic and random systems. For weaker or stronger quasiperiodic modulation, the lattice distortion may increase or decrease with strengthening of the modulation amplitude, respectively. The results also indicate that the energy gaps of ground states are strongly affected by the quasiperiodic modulation

Keywords: lattice distortion, Thue-Morse sequence, quasiperiodic modulation

PACS: 75.10.Jm, 75.30.Gw, 71.23.Ft

DOI: 10.7498/aps.62.157501

* Project supported by the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission, China (Grant No. 10ZY159).

[†] Corresponding author. E-mail: lpfshiep@sina.com