

一维扩展 t - J 模型中密度-自旋相互作用诱导的相分离

毛斌斌 程晨 陈富州 罗洪刚

Phase separation induced by density-spin interaction in one-dimensional extended t - J model

Mao Bin-Bin Cheng Chen Chen Fu-Zhou Luo Hong-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 187105 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.187105

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187105>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维扩展离子 Hubbard 模型的相图研究

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model

物理学报.2015, 64(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107101>

NbSi₂ 奇异高压相及其热力学性质的第一性原理研究

Pressure-induced structural transition and thermodynamic properties of NbSi₂ from first-principles calculations

物理学报.2015, 64(8): 087103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.087103>

Ga₂ 基 Heusler 合金 Ga₂XCr (X = Mn Fe Co Ni Cu) 的四方畸变、电子结构、磁性及声子谱的第一性原理计算
First-principles investigations on tetragonal distortion electronic structure magnetism and phonon dispersion of Ga₂XCr (X = Mn Fe Co Ni Cu) Heusler alloys

物理学报.2015, 64(7): 077104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077104>

在永磁体强磁场中 Mn_{1.2}Fe_{0.8}P_{1-x}Si_x 系列化合物热磁发电研究

Thermomagnetic power generation of Mn_{1.2}Fe_{0.8}P_{1-x}Si_x compounds in strong field of permanent magnet

物理学报.2015, 64(4): 047103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.047103>

硅基二氧化钒相变薄膜电学特性研究

Researches on the electrical properties of vanadium oxide thin films on Si substrates

物理学报.2015, 64(1): 017102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017102>

专题: 计算物理的近期发展和应用

一维扩展 t - J 模型中密度-自旋相互作用诱导的相分离*

毛斌斌¹⁾ 程晨²⁾ 陈富州¹⁾ 罗洪刚^{1)2)†}

1) (兰州大学物理科学与技术学院交叉学科研究中心, 兰州 730000)

2) (北京计算科学研究中心, 北京 100084)

(2015年9月2日收到; 2015年9月15日收到修改稿)

t - J 模型是研究高温超导电性的重要理论模型之一. 最近的冷分子实验表明可用极性分子模拟 t - J 模型. 实验模拟的 t - J 模型除了引进长程的偶极相互作用外, 还引进了密度-自旋相互作用. 本文使用密度矩阵重整化群方法研究了密度-自旋相互作用对一维 t - J 模型基态性质的影响. 选取了 t - J 模型基态相图中不同相区的三个点, 计算了不同密度-自旋相互作用强度下的粒子数和自旋的实空间分布, 以及密度-密度关联函数和自旋-自旋关联函数与相应的结构因子. 计算结果表明, 密度-自旋相互作用强度较弱时, 对系统的性质不会产生定性影响; 当其强度足够大时, 系统会进入相分离, 该相分离与传统 t - J 模型的相分离有很大区别.

关键词: t - J 模型, 密度矩阵重整化群, 密度-自旋相互作用, 相变

PACS: 71.10.Hf, 71.10.Pm, 67.85.-d

DOI: 10.7498/aps.64.187105

1 引言

t - J 模型是强关联电子体系最重要的理论模型之一, 特别是在描述空穴掺杂铜氧化物高温超导体方面具有基础意义. 因此, 对该模型的研究一直以来受到极大的关注. 一般认为, 铜氧化物高温超导体的超导机制与其二维铜氧面结构密切相关, 其蕴含的物理被认为可由二维 t - J 模型所描述^[1,2]. 然而, 在二维情况下, t - J 模型无法被解析精确求解, 相关数值计算也由于计算量太大或方法原因, 其结果仍不具备说服力. 相反, 在一维情况下, 该模型在特殊参数下可被解析求解, 同时得益于各种数值方法的发展, 该模型所蕴含的物理逐步被揭示. 1991年, 日本科学家 Ogata 等^[3] 通过对 16 个格点的一维 t - J 模型的精确对角化计算, 表明该系统服从拉廷格 (Luttinger) 液体行为, 包含三个基本的相: 金属相 (排斥的拉廷格液体相)、超导相 (吸引

的拉廷格液体相) 以及相分离. 其中, 他们还发现在超导相可能存在自旋能隙打开的区域. 但由于计算格点尺寸限制, 并没有清楚地确定各个相的边界. 随后的工作^[4,5,6] 对自旋能隙打开的相边界做了进一步研究, 直到 2011 年, Moreno 等^[7] 通过密度矩阵重整化群 (density matrix renormalization group, DMRG) 方法, 对一维 t - J 模型进行了大尺度的计算, 对一维 t - J 模型的相图得到了较系统的结果, 并明确了自旋能隙打开的相边界. 至此, 对传统的一维 t - J 模型的理解基本获得共识.

另一方面, 随着冷原子和冷分子实验技术的发展, 使用冷原子或冷分子体系对凝聚态理论模型哈密顿量进行模拟研究已成为研究强关联系统性质的可行手段之一. 最近, 实验上在光晶格中实现了 KRb^[8] 和 LiCs^[9,10] 等超冷极性分子的制备, 并可以用来模拟 t - J 模型^[11,12]. 模拟模型的优点在于系统的各种耦合参数, 如动能项 t 、反铁磁相互作用 J

* 国家自然科学基金 (批准号: 11325417, 11174115) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: luohg@lzu.edu.cn

等可以通过激光的强度和所加的微波频率和强度等手段独立调节, 这样提供了一个对模型的各种性质开展研究的全方位的手段, 其优越性是固体材料所无法比拟的. 此外, 由于极性分子间存在长程相互作用, 该模型也可以用来研究长程相互作用对系统性质的影响. 有趣的是, 本文作者曾研究了具有长程相互作用的 t - J 模型的基态相图^[13], 发现长程偶极相互作用在低密度区域对自旋能隙影响很大, 使得自旋能隙能够在金属相中打开, 形成了一个新的自旋配对态. 从直观的物理理解, 长程相互作用会产生阻挫的反铁磁相互作用, 该阻挫效应对金属相中打开自旋能隙有重要贡献. 另一个阻挫对自旋能隙产生影响的相关研究是 t - J - J' 模型, 此系统是有最近邻和次近邻相互作用的一维扩展 t - J 模型, 系统中也存在阻挫效应. Nakamura 等^[6] 通过调节不同的阻挫强度 $\alpha \equiv J'/J$, 也发现了在排斥拉廷格液体区打开自旋能隙的现象.

使用超冷极性分子模拟 t - J 模型, 除了引进长程相互作用外, 还使得一些相互作用项独立可调, 比如, 密度-密度相互作用 V 、密度-自旋相互作用 W 等. 密度-密度相互作用已有很多研究^[14-17], 但密度-自旋相互作用研究还很少^[18,19]. 本文主要利用 DMRG 方法对具有密度-自旋相互作用的一维 t - J 模型开展研究. 直观地理解, 密度-自旋相互作用扮演磁场角色, 但它与磁场又有很大的不同. 由于有动能 t , 粒子倾向于格点间会跳跃, 而格点间又有反铁磁相互作用 J , 所以, 系统的基态性质由 t , J 和 W 相互竞争决定. 在下面的研究中, 我们分别在金属相、超导相和相分离区调节密度-自旋相互作用 W , 研究电荷与自旋密度分布, 以及相应结构因子的变化. 通过对结果的分析, 发现系统在大的密度-自旋相互作用区域显示出特殊的相分离行为.

2 模型和算法

Gorshkov 等^[11,12] 首先提出 t - J 模型的超冷极性分子模拟方案, 其所获得的 Hamiltonian 被称为扩展的 t - J - V - W 模型, 具体形式为

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t \left[c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.} \right] + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|^3} \left[\frac{J_z}{2} S_i^z S_j^z + \frac{J_\perp}{2} S_i^+ S_j^- \right] + \frac{V}{2} n_i n_j + W n_i S_j^z, \quad (1)$$

其中, $\langle \rangle$ 表示最近邻格点间跃迁; $c_{j\sigma}^\dagger$ ($c_{j\sigma}$) 为费米子的产生(湮灭)算符, 表示在格点 j (x - y 平面中的位置为 \mathbf{R}_j) 处产生(湮灭)一个自旋为 σ 的费米子. 此外, 电荷密度和自旋算符定义为 $n_{j\sigma} = c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$, $n_j = \sum_{\sigma} n_{j\sigma}$, $S_j^+ = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}$, $S_j^- = c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}$, $S_j^z = (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow})/2$. 与传统 t - J 模型相比, 该实验模拟模型有其新的特点: 一方面, 由于极性分子本身的特性, 模型中引进了长程偶极相互作用; 另一方面, 该模型的各个参数 t , J_z , J_\perp , V 和 W 具有高度可控性, 其大小和符号均可独立调节^[11,12]. 文献^[12] 简单分析了长程相互作用对一维 t - J_\perp 链的影响, 文献^[13] 系统地研究了长程相互作用对一维 t - J 模型基态相图的影响. 在本文中, 我们的兴趣集中在哈密顿量(1)中的密度-自旋相互作用项, 希望探究密度-自旋相互作用对传统 t - J 模型基态性质的影响. 具体地, 我们研究如下的哈密顿量:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) + W \sum_{\langle i,j \rangle} n_i S_j^z, \quad (2)$$

这里 $W \sum_{\langle i,j \rangle} n_i S_j^z$ 为密度-自旋关联项, $W = 0$ 时模型(2)回到传统的 t - J 模型.

一维传统 t - J 模型在 $J \rightarrow 0$ 时与 $U/t \rightarrow \infty$ 的 Hubbard 模型等价; 在 $J = \pm 2t$ 时, t - J 模型也可以由 Bethe 拟设精确求解^[20,21], 这两种情况下 t - J 模型的基态均表现为拉廷格液体. 其他参数区域 t - J 模型无法解析求解, 需要借助各种各样的数值方法^[3-7], 如精确对角化、变分波函数、DMRG 方法等. DMRG 方法是由 White^[22,23] 于 1992 年在 Wilson^[24] 的数值重整化群方法 (numerical renormalization group, NRG) 的基础上发展出来的, 该方法求解一维问题非常有效, 对于一维自旋 -1 的海森堡模型, 其基态能量的误差可以控制在 10^{-10} 以内^[25]. 因此, 本文主要使用 DMRG 方法数值研究哈密顿量(2). 我们采用了开放边界条件, 选取跃迁系数 $t = 1$ 作为能量单位, 计算了不同参数区域中尺寸 $L = 80$ 的系统的基态性质. 计算中, 我们动态保留了 DMRG 状态数, 使截断误差小于 10^{-10} .

3 结果和讨论

Moreno 等^[7]用 DMRG 方法计算了一维最近邻相互作用的 t - J 模型, 并得到了精确相图, 如图 1 所示. 为了研究密度-自旋相互作用对不同相的影响, 我们选取了金属相 ($n = 0.6, J = 0.2$, 图 2)、超导相 ($n = 0.7, J = 3$, 图 3) 和相分离区域 ($n = 0.4, J = 3.6$, 图 4) 中的三组参数, 计算了不同的密度-自旋相互作用强度下, 系统的实空间粒子数分布以及自旋分布、密度-密度关联函数、自旋-自旋关联函数以及相应的结构因子. 这里, 密度-密度关联函数的结构因子

$$N(k) = \sum_{j,l} e^{ik(j-l)} N_{jl}, \quad (3)$$

其中 $N_{jl} = \langle n_j n_l \rangle - \langle n_j \rangle \langle n_l \rangle$. 自旋-自旋关联函数的结构因子

$$S(k) = \sum_{j,l} e^{ik(j-l)} S_{jl}, \quad (4)$$

其中 $S_{jl} = \langle S_j^z S_l^z \rangle$.

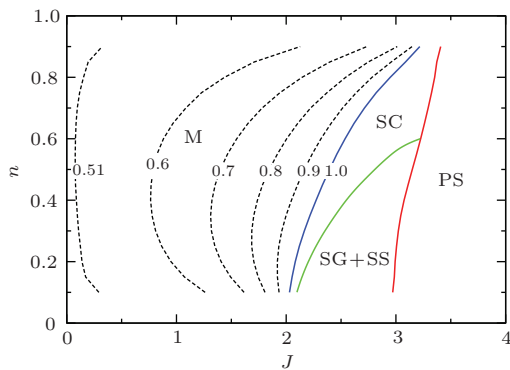


图 1 通过 DMRG 方法计算得到的一维传统 t - J 模型的基态相图. 相图包含四个相: 金属相 (metallic phase, M)、超导相 (superconducting phase, SC)、自旋能隙打开的超导相 (singlet-superconducting with spin gap, SG+SS) 以及相分离 (phase separation, PS) (图片引自文献^[7])

Fig. 1. Ground-state phase diagram of the 1D conventional t - J model obtained from DMRG. The phase diagram consists of four phases: metallic phase (M), superconducting phase (SC), singlet-superconducting with spin gap (SG+SS) and phase separation (PS). For original figure, one can refer to Ref. ^[7].

传统 t - J 模型的物理主要来源于跃迁项 t 和海森堡相互作用项 J 之间的竞争, 当相互作用 J/t 不足以破坏系统的稳定性时, 系统的基态由拉廷格液体理论描述. 在拉廷格液体理论框架下, 体系的低

激发态表现为无能隙电荷密度波和自旋密度波. 在 $J/t \rightarrow \infty$ 的极限, 海森堡项起支配作用, 系统进入不稳定的相分离区域.

根据电荷间相互作用由排斥到吸引的转变, 拉廷格液体区域可进一步细分为金属相和超导相. 随着 J/t 逐渐增大, 体系经历金属-超导-相分离的相变. 在拉廷格液体区域, 基于共形场理论, 系统的密度-密度关联函数表现为

$$\langle n(r) n(0) \rangle = \frac{K_\rho}{(\pi r)^2} + A_1 \frac{\cos(2k_F r)}{r^{1+K_\rho}} \ln^{-3/2}(r) + A_2 \cos(4k_F r) r^{-4K_\rho}, \quad (5)$$

自旋-自旋关联函数有

$$\langle S^z(r) S^z(0) \rangle = \frac{1}{(\pi r)^2} + B_1 \frac{\cos(2k_F r)}{r^{1+K_\rho}} \ln^{1/2}(r), \quad (6)$$

式中的 A_1, A_2, B_1 是与模型有关的常数; 其中费米波矢 $k_F = n\pi/2$, n 表示粒子填充比例; K_ρ 为系统的拉廷格参数, 其数值可由电荷密度结构因子得到, 有 $K_\rho = \frac{N(k)}{k/\pi}, k \rightarrow 0$.

当相互作用 J/t 很小时, $K_\rho < 1$, 系统电荷间呈有效的排斥相互作用, 系统处于金属相. 如图 2(a) 中 $W = 0$ 对应的曲线所示, 系统的实空间电荷密度均匀分布. 由于我们选取了开放边界条件, 这里可以观察到很明显的实空间电荷密度波. 相应地, 系统的电荷密度结构因子在 $2k_F$ 处呈现反常结构, 自旋密度结构因子在 $2k_F$ 处呈现反常. 当相互作用 J/t 逐渐增大至 $K_\rho > 1$, 系统电荷间呈有效的相互吸引作用, 系统进入超导相. 与金属相的最大区别体现在自旋结构因子的反常消失, 如图 3(d) $W = 0$ 对应的曲线所示, 表明超导区域系统无磁有序结构. 在 $J/t \rightarrow \infty$ 的极限, 海森堡项起支配作用, 系统倾向于形成反铁磁海森堡链以降低能量. 当填充数 $n < 1$ 时, 系统进入不稳定的相分离区域, 粒子在实空间分离为富含粒子的岛结构和粒子数密度极低的区域, 如图 4(a) $W = 0$ 对应的曲线所示.

图 2 和图 3 分别给出了金属相和超导相中电荷、自旋密度分布以及结构因子受密度-自旋相互作用 W 的影响. 从电荷密度分布 (如图 2(a)、图 3(a)) 可以明显看出, 随着 W 的增大, 系统的性质经历了某种跃变. 当 W 较小时, 从电荷密度分布看不出系统性质有定性的改变, 而当 W 增大至某

特定值时, 体系进入了相分离的状态. 对应电荷密度关联结构因子(如图 2(c), 图 3(c)) 也出现跃变. 当 W 较小时, 电荷密度结构因子随 W 增大而发生定量改变, 然而其反常结构出现的位置保持在 $2k_F$ 处, 直到 W 增大至某特定值时, 其反常结构的位置才出现偏离. 对于自旋密度分布而言, 由于引入 W 项破坏了系统的自旋 $SU(2)$ 对称性, 实空间自旋不再处处为 0, 而是呈现出自旋密度波的形式, 其波矢对应图 2(d)、图 3(d) 中自旋密度关联结构因子的峰值位置, 可以看到随着 W 的增大, 该位置保持在 $2k_F$ 处不变, 直至系统进入相分离区域.

从图 2 和图 3 的结构因子图中可以看出, 在密度-自旋相互作用增大时, 除了奇异点 $2k_F$ 处有明显的变化之外, 在 k 取值较小的地方也会有明显的变化. 如图 2 中 $W = 4.0$ 对应的曲线, 自旋-自旋关联函数结构因子在系统开始进入相分离时, 在 k 较小时有明显的尖峰出现, 对应位置的密度-密度关联函数的结构因子也会增大. 我们认为这一点的奇异行为显示了系统整体表现出来的周期调制, 而 $2k_F$ 和 $4k_F$ 表现出的奇异行为显示的是系统局部的周期调制行为.

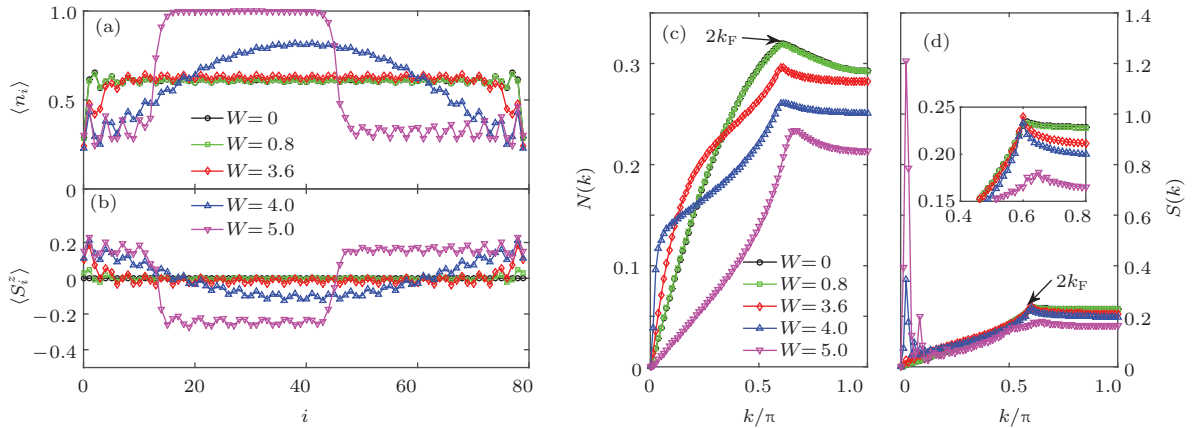


图 2 金属相 ($n = 0.6, J = 0.2$) 中引进密度-自旋相互作用 W 对 (a) 实空间粒子数密度分布 $\langle n_i \rangle$ 、(b) 实空间自旋分布 $\langle S_i^z \rangle$ 、(c) 密度-密度关联结构因子 $N(k)$ 以及 (d) 自旋-自旋关联结构因子 $S(k)$ 的影响, 图 (d) 中的插图是在 $k = 2k_F$ 附近的局部放大图

Fig. 2. Effect of density-spin interaction W on (a) density distributions $\langle n_i \rangle$, (b) spin distributions $\langle S_i^z \rangle$ in real space, (c) structure factor $N(k)$ for the density-density correlation function, and (d) structure factor $S(k)$ for the spin-spin correlation in metallic phase ($n = 0.6, J = 0.2$). The inset in (d) is expanded near $k = 2k_F$.

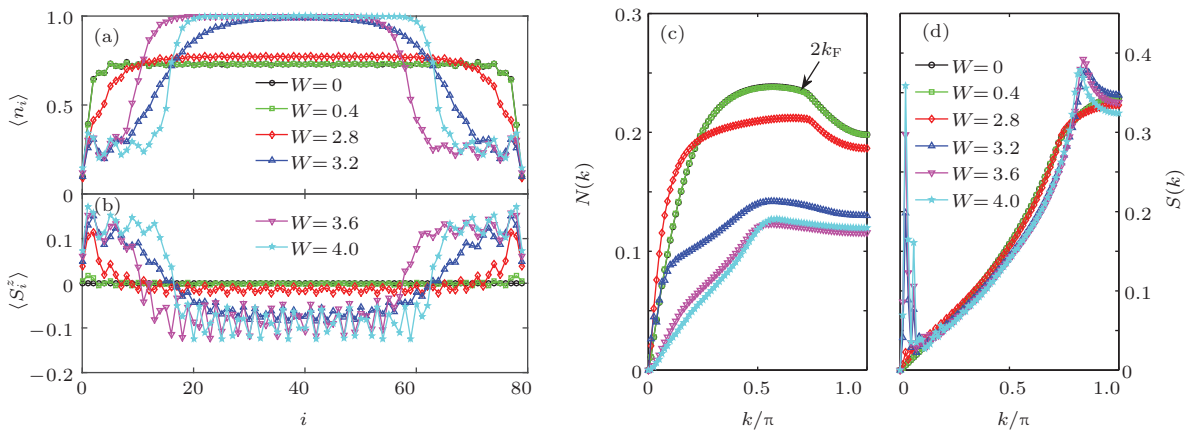


图 3 超导相 ($n = 0.7, J = 3.0$) 中引进密度-自旋相互作用 W 对 (a) 实空间粒子数密度分布 $\langle n_i \rangle$ 、(b) 实空间自旋分布 $\langle S_i^z \rangle$ 、(c) 密度-密度关联结构因子 $N(k)$ 以及 (d) 自旋-自旋关联结构因子 $S(k)$ 的影响

Fig. 3. Effect of density-spin interaction W on (a) density distributions $\langle n_i \rangle$, (b) spin distributions $\langle S_i^z \rangle$ in real space, (c) structure factor $N(k)$ for the density-density correlation function, and (d) structure factor $S(k)$ for the spin-spin correlation in superconducting phase ($n = 0.7, J = 3.0$).

另外需要指出的是, 密度-自旋相互作用 W 诱导的相分离与传统 t - J 模型中的相分离有很明显的不同. 传统 t - J 模型描述的系统进入相分离后, 电荷自由度被完全禁锢, 实空间分离成电荷密度为 1 和 0 的区域 (如图 4(a) $W = 0$ 曲线所示), 自旋密度处处为 0 (如图 4(b) $W = 0$ 曲线所示). 在电荷密度为 1 的区域, 自旋自由度的表现完全由海森堡模型描述. 表现在结构因子上, 电荷密度关联结构因

子无反常结构, 自旋密度关联结构因子呈非常明显的 π 反铁磁结构. 而 W 诱导的相分离相中, 实空间分离为电荷密度为 1 和另一非零数值的区域. 在电荷密度为 1 的区域, 体系并不表现为反铁磁海森堡链的性质, 其自旋关联结构因子在 $k \neq \pi$ 的某一位置出现反常结构, 表明体系仍存在自旋密度波序. 在电荷密度不等于 1 的区域, 体系表现为电荷密度波, 其反常结构出现于 $k \neq 2k_F$ 的位置.

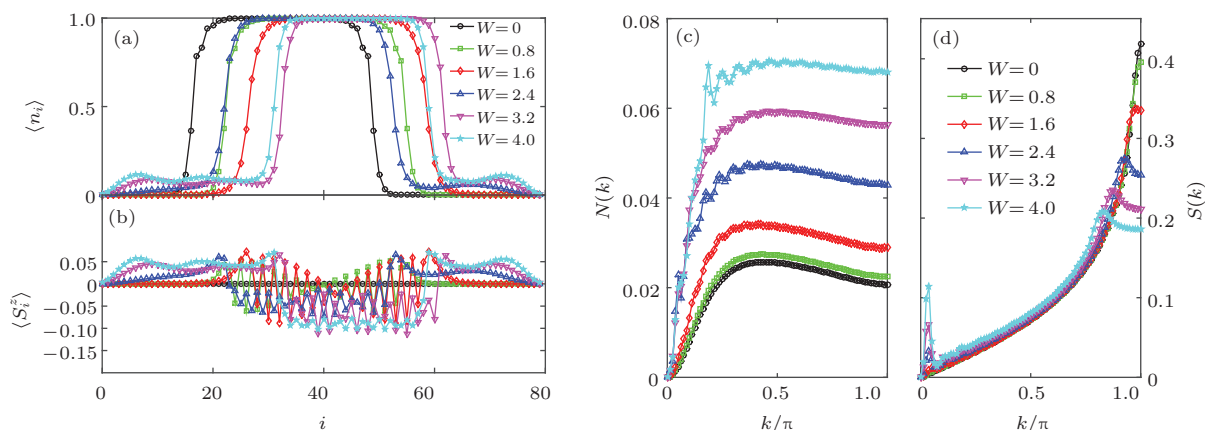


图 4 相分离区域 ($n = 0.4, J = 3.6$) 引进密度-自旋相互作用 W 对 (a) 实空间粒子数密度分布 $\langle n_i \rangle$ 、(b) 实空间自旋分布 $\langle S_i^z \rangle$ 、(c) 密度-密度关联结构因子 $N(k)$ 以及 (d) 自旋-自旋关联结构因子 $S(k)$ 的影响

Fig. 4. Effect of density-spin interaction W on (a) density distributions $\langle n_i \rangle$, (b) spin distributions $\langle S_i^z \rangle$ in real space, (c) structure factor $N(k)$ for the density-density correlation function, and (d) structure factor $S(k)$ for the spin-spin correlation in phase separation ($n = 0.4, J = 3.6$).

图 4 给出了系统本身处于相分离区域的情况. 从图 4(a) 可以看出, 引入密度-自旋相互作用后, 实空间电荷密度为 0 的区域随 W 增大而减小直至消失. 系统的自旋密度分布也从相邻格点自旋反向逐渐变为自旋密度波的形式. 相应地, 自旋-自旋关联结构因子从 $k = \pi$ 处出现尖峰变为反常出现于 $k \neq \pi$, 表现为 π 反铁磁序至自旋密度波序的转变.

处于金属相和超导相的系统均表现为拉廷格液体, 拉廷格液体的一个重要特性是自旋-电荷分离: 低能的激发不再是同时带电荷 e 和自旋 $1/2$ 的准粒子, 而是自旋激发和电荷激发相互独立分开, 有着不同的速度, 称之为自旋-电荷分离. 引入密度-自旋相互作用之后, 我们期待会对系统中自旋-电荷分离相关的性质产生影响. 从计算结果来看, 在密度-自旋相互作用强度较小时, 系统的低能激发并没有受到定性的改变. 当密度-自旋相互作用足够大时, 系统在任意参数下均处于相分离区. 然而, 由密度-自旋相互作用诱导的相分离与传统 t - J 模型中 J 诱导的相分离有很大的区别. 进一步的工

作中, 我们希望通过某些序参量对存在密度-自旋相互作用的一维 t - J 模型的相分离区进行更详细的研究.

4 结 论

t - J 模型是强关联体系中重要的物理模型之一, 且与高温超导机制密切相关, 因而对 t - J 模型的研究具有重要意义. 随着光晶格囚禁超冷原子分子技术的发展, 可以用极性分子模拟各项参数可独立调节的一维扩展 t - J 模型, 从而可以观测 t - J 模型理论研究中发现的 t - J 模型的性质. 由于实验上模拟的模型是扩展的 t - J 模型, 因此需要研究长程相互作用以及扩展模型中的其他项对 t - J 模型的影响. 本文研究了密度-自旋相互作用项对 t - J 模型的影响, 发现 W 较小时, 系统的性质不会发生变化, W 较大时会使金属相和超导相发生相变, 从而进入相分离区. 但是该密度-自旋相互作用诱导的相分离保留了 $W = 0$ 时所在相区的一些性质, 且与 $W = 0$

时的相分离区性质有很大不同. 更深入的研究, 如 W 项对其他物理量如拉廷格常数、超导配对关联函数、自旋能隙的影响以及系统基态相图的变化等, 在后续的研究工作中将会继续进行.

参考文献

- [1] Anderson P W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1839
- [2] Ogata M, Fukuyama H 2008 *Rep. Prog. Phys.* **71** 036501
- [3] Ogata M, Luchini M U, Sorella S, Assaad F F 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 18
- [4] Hellberg C S, Mele E J 1993 *Phys. Rev. B* **48** 1
- [5] Nakamura M, Nomura K, Kitazawa A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3214
- [6] Nakamura M, Kitazawa A, Nomura K 1999 *Phys. Rev. B* **60** 7850
- [7] Moreno A, Muramatsu A, Manmana S R 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205113
- [8] Ni K K, Ospelkaus S, de Miranda M H G, Péér A, Neyenhuis B, Zirbel J J, Kotochigova S, Julienne P S, Jin D S, Ye J 2008 *Science* **322** 231
- [9] Aikawa K, Akamatsu D, Hayashi M, Oasa K, Kobayashi J, Naidon P, Kishimoto T, Ueda M, Inouye S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 203001
- [10] Deiglmayr J, Grochola A, Repp, Mörtlbauer K, Glück C, Lange J, Dulieu O, Wester R, Weidemüller M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 133004
- [11] Gorshkov A V, Manmana S R, Chen G, Demler E, Lukin M D, Rey A 2011 *Phys. Rev. A* **84** 033619
- [12] Gorshkov A V, Manmana S R, Chen G, Ye J, Demler E, Lukin M D, Rey A M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 115301
- [13] Cheng C, Mao B B, Chen F Z, Luo H G 2015 *Europhys. Lett.* **110** 37002
- [14] Troyer M, Tsunetsugu H, Rice T M, Riera J, Dagotto E 1993 *Phys. Rev. B* **48** 6
- [15] Dagotto E, Riera J 1992 *Phys. Rev. B* **46** 12084(R)
- [16] Kivelson S A, Emery V J, Lin H Q 1990 *Phys. Rev. B* **42** 10
- [17] Assaad F F, Würtz D 1991 *Phys. Rev. B* **44** 6
- [18] Bariev R Z 1993 *Phys. Rev. B* **49** 2
- [19] Saiga Y, Kato Y, Kuramoto Y 1996 *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 2361
- [20] Bares P A and Blatter G 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 2567
- [21] Bares P A and Blatter G 1991 *Phys. Rev. B* **44** 130
- [22] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [23] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [24] Wilson K G 1975 *Rev. Mod. Phys.* **47** 773
- [25] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 3844

SPECIAL ISSUE—Recent developments and applications of computational physics

Phase separation induced by density-spin interaction in one-dimensional extended t - J model*

Mao Bin-Bin¹⁾ Cheng Chen²⁾ Chen Fu-Zhou¹⁾ Luo Hong-Gang^{1)2)†}

1) (Center of Interdisciplinary Studies of Department of Physics, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

2) (Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100084, China)

(Received 2 September 2015; revised manuscript received 15 September 2015)

Abstract

t - J model is one of important theoretical models in the study of high temperature superconductivity. Recent cold molecule experiments indicate that t - J model can be simulated by ultracold polar molecules. In the simulated t - J model, besides long-range dipolar interaction, density-spin interaction has also been introduced. In the present paper we study the effect of density-spin interaction in the one-dimensional extended t - J model by using the density matrix renormalization group method. We choose three sets of representative parameters, which correspond to three different phases in the ground state phase diagram of t - J model, to calculate the charge and spin density distribution in real space and the structure factor of density-density and spin-spin correlation functions. The results indicate that the nature of the system will not change if the intensity of the density-spin interaction is small, however if the intensity is large enough, the system enters the phase separation, in which the character is quite different from that of the phase separation in the traditional t - J model.

Keywords: t - J model, density matrix renormalization group, density-spin correlation, phase separation

PACS: 71.10.Hf, 71.10.Pm, 67.85.-d

DOI: [10.7498/aps.64.187105](https://doi.org/10.7498/aps.64.187105)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11325417, 11174115).

† Corresponding author. E-mail: luohg@lzu.edu.cn