فاز دایمر در زنجیره وامانده اسپین-۱/۲

طیبه ندایی*، سعید مهدوی‌فر
گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

چکیده

در این مقاله زنجیره هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین-۱/۲ وامانده دایمر، مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مدل δ پارامتر دایمر برای تبادل نزدیکترین همسایه‌ها و α پارامتر واماندهی برای تبادل دومین نزدیکترین همسایه‌هاست. ما نمودار فاز حالت پایهٔ سیستم هایزنبرگ اسپین-۱/۲ پادفرومغناطیس وامانده دایمر را در دو زیرفضای $S_z^{tot} =$ ۰و۱ مورد بررسی قرار دادیم. در این مطالعات از روش لنکشوز برای قطری سازی عددی زنجیرهٔ محدود استفاده کردیم و با استفاده از نتایج قطری‌سازی، توابع پاسخ سیستم را برحسب تابعی از پارامتر واماندهی محاسبه کردیم. براساس نتایج قطری‌سازی دقیق، همچنین با محاسبهٔ پارامترهای نظم برای سیستم مورد نظر مشخص شد که اثر دایمرشدگی در مدل زنجیرهٔ وامانده اسپین-۱/۲ منجر به یک گذار فاز مرتبهٔ دوم بین دو نوع فاز دایمر، در نقطهٔ واماندهی بحرانی α_c می‌شود.

کلیدواژگان: زنجیره هایزنبرگ، واماندهی، دایمرشدگی

مقدمه

دردهه‌های اخیر موضوع مدل‌های اسپینی کم-بُعد در فیزیک ماده چگال از اهمیت ویژه‌ای برخوردار شده است. بخشی از این اهمیت به‌دلیل مشاهدهٔ اثرات کوانتومی محض در این سیستم‌ها می‌باشد. در کنار جنبه‌های جذاب نظری، اندازه‌گیری‌های تجربی هم برای تعدادی از مواد شبه یک بُعدی انجام شده است.یکی از این سیستم‌ها زنجیرهٔ هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین-۱/۲ وامانده دایمر است که اخیراً مطالعات زیادی روی آن انجام شده [٦-۱] و برای مطالعات تجربی روی مواد اسپین-پایرلس $CuGeO_3$ و NaV_2O [۱۰-۷] و ترکیب‌های نردبان اسپینی مانند $Sr_2Cu_3O_5$ یا $(VO)_2P_2O_7$ [۱٤-۱۱] مورد توجه قرار گرفته است.

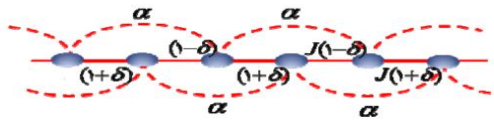
در این راستا، در مقالهٔ پیش رو زنجیرهٔ هایزنبرگ پادفرومغناطیس همسانگرد اسپین-۱/۲ وامانده دایمر با برهمکنش نزدیکترین همسایه‌ها و برهمکنش دومین نزدیکترین همسایه‌ها مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است.

هامیلتونی زنجیرهٔ مورد نظر با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود:

$$H = \sum_i \{[1-(-1)^i \delta] S_i . S_{i+1} + \alpha S_i . S_{i+2}\}, \qquad (1)$$

در این رابطه ما شرط مرزی دوره‌ای $S_1 = S_{N+1}$ را در نظر گرفته‌ایم و N تعداد اسپین‌ها است. α و δ به‌ترتیب پارامتر واماندهی و پارامتر دایمرشدگی هستند و S_i معرّف عملگر اسپین-۱/۲ روی سایت iاُم شبکه است. در شکل۱ یک طرح نمادین از زنجیرهٔ اسپینی وامانده دایمر نمایش داده شده است.

*ایمیل نویسنده مسئول: nedaeitayebeh@yahoo.com



شکل۱. طرح نمادین از زنجیرهٔ اسپینی وامانده دایمر.

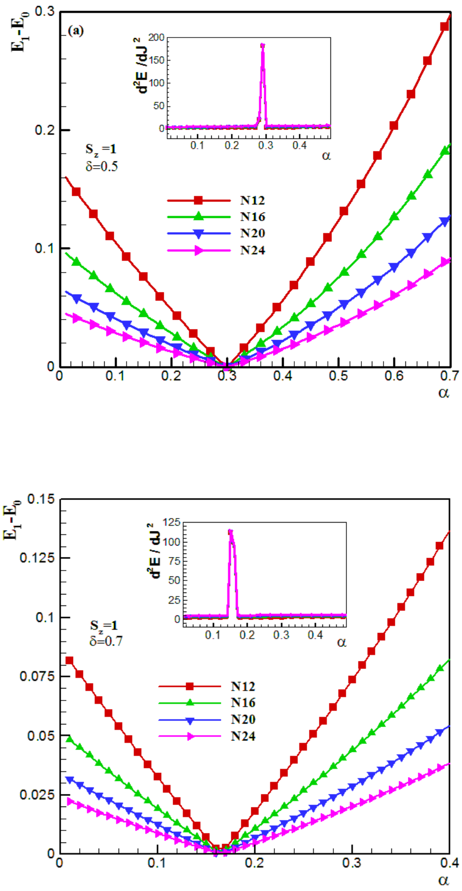
تا کنون سیستم فوق با استفاده از روش‌های تحلیلی و عددی مورد بررسی تقریبی قرار گرفته است. به‌عنوان مثال روش بوزونیزه کردن برای تحلیل این سیستم مفید است [۱۵]. اما جزئیات حالت پایه تنها با استفاده از روش‌های عددی به‌دست می‌آید. روش‌های عددی این امکان را به ما می‌دهند که مقدار واماندهی بحرانی، همچنین جزئیات حالت پایهٔ سیستم و نیز رفتار گاف برانگیخته را تعیین کنیم [۱٦]. در غیاب دایمرشدگی $(\delta=۰)$ مطالعات بسیاری انجام شده است [۱۷–۲۵]. مشخص شده که با افزایش قدرتواماندهی، یک گذار فاز از فاز سیال لاتینجر بدون گاف $(\alpha<\alpha_c \cong ۰٫۲٤۱۱)$ به فاز دارای گاف دایمر $\alpha>\alpha_c$ روی می‌دهد [۱۹]. همچنین در نقطهٔ ماجومدار-گوش[۱] $(\alpha_{MG}=۰٫۵)$، حالت پایهٔ این سیستم به‌طور دقیق مشخص است [۲٦–۲۹].در غیاب واماندهی $(\alpha=۰)$ و دایمرشدگی $(\delta=۰)$، حالت‌پایه دارای فاز سیال لاتینجر است. اخیراً در مرجع [۱۹] نسبت گاف سه‌گانه به گاف یک‌گانه برای زنجیرهٔ وامانده دایمر شده هایزنبرگ پادفرومغناطیس اسپین–۱/۲ با استفاده از روش‌های عددی محاسبه شده است. مقدار این نسبت قبلاً به‌صورت تحلیلی توسط روش بوزونیزه کردن $(r=\sqrt{۳})$ تخمین زده شده است [۳۰]. نتایج محاسبات عددی نشان می‌دهند که در غیاب واماندهی، $(r>۲)$ است و با افزایش واماندهی مقدار آن کاهش یافته و در $(\alpha=۰٫۲۵)$ به مقدار $(r=\sqrt{۳})$ می‌رسد. این نقطه خیلی نزدیک به $(\alpha_c=۰٫۲٤۱۱)$ است یعنی جایی که گذار از فاز سیال اسپینی لاتینجر به فاز دایمر اتفاق می‌افتد. اما با این وجود هنوز فقدان اطلاع دقیق از اثر پارامتر واماندهی روی حالت‌پایهٔ زنجیرهٔ دایمرشده فوق وجود دارد.

در این مقاله با استفاده از روش قطری سازی دقیق (لنکشوز)، رفتار فیزیکی دمای صفر سیستم فوق مورد تحلیل قرار گرفته است. نتایج محاسبات عددی لنکشوز روی گاف سه‌گانه و پارامتر دایمر شدگی برحسب میزان واماندهی ارائه شده است. در نهایت از تحلیل داده‌های عددی، وجود دو نوع فاز دایمر متفاوت که با روابط ٤ و ٥ معرفی می‌شوند در نمودار فاز حالت‌پایه زنجیره فوق تشخیص داده شده است.

بررسی نمودار فاز حالت‌پایه

ما با استفاده از روش لنکشوز گاف انرژی زنجیره هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین–۱/۲ وامانده دایمر را در زیرفضاهای $S_z^{tot}=۰$ و۱ برحسب تغییرات واماندهی و به‌ازای دایمرشدگی $(۰\leq\delta\leq۱)$ محاسبه کرده‌ایم. گاف انرژی به‌صورت اختلاف بین انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته در هر زیرفضا تعریف شده است. در شکل۲ نتیجه محاسبات فوق برای زنجیره‌هایی به‌طول $N=۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$ و دایمر شدگی $\delta=۰٫۵$ و $\delta=۰٫۷$ در زیرفضای $S_z^{tot}=۱$ ارائه شده است.

۱Majumdar-ghosh point



شکل۲. گاف سه‌گانه سیستم برحسب تغیرات واماندهی برای زنجیرهایی به‌طول $N=۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$، (a) به‌ازای مقدار دایمر $\delta=۰/۵$ و (b) به‌ازای مقدار دایمر $\delta=۰/۷$ (در داخل نمودار، مشتق مرتبه دوم انرژی حالت پایه نسبت به پارامتر واماندهی یعنی $(d^۲E/dJ^۲)$ که در آن $(\alpha=J)$ می‌باشد رسم شده است).

همچنان که در نمودار مربوط به گاف انرژی دیده می‌شود در غیاب واماندهی، سیستم متناهی در زیر فضای $(S_z^{tot}=۱)$ دارای گاف سه‌گانه است.با افزایش پارامتر واماندهی، گاف سه‌گانه سیستم کاهش یافته و به‌ازای دایمر شدگی $\delta=۰/۵$ در مقدار بحرانی واماندهی $\alpha=\alpha_c=۰/۳$، و به‌ازای دایمرشدگی $\delta=۰/۷$ در مقدار بحرانی واماندهی $\alpha=\alpha_c=۰/۱٦$ صفر می‌شود. همچنین به وضوح مشخص است که واماندهی بحرانی مستقل از اندازه سیستم است. با افزایش بیشتر واماندگی $(\alpha>\alpha_c)$، گاف سه‌گانه مجدداً باز شده و افزایش می‌یابد. همان‌طور که در هر دو قسمت شکل۲ نشان داده شده است مشتق مرتبه دوم انرژی حالت پایه نسبت به پارامتر واماندهی دقیقاً در نقطه واماندهی بحرانی $(\alpha=\alpha_c)$دارای پیک می باشد که مشخصه گذار فاز مرتبه دوم است.

در مرجع [۱٤] گاف یک‌گانه-سه‌گانه[۲] $G_{st}(N,\alpha)$ و گاف یک‌گانه-یک‌گانه[۳] $G_{ss}(N,\alpha)$ به‌صورت زیر تعریف شده‌اند:

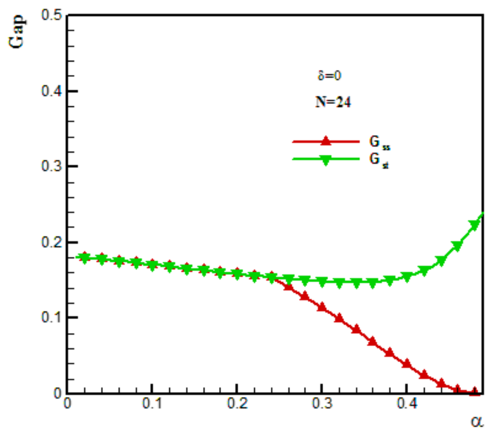
$$G_{st}(N,\alpha)\equiv E_1^{(0)}(N,\alpha)-E_0^{(0)}(N,\alpha) \qquad ۲$$

$$G_{ss}(N,\alpha)\equiv E_0^{(1)}(N,\alpha)-E_0^{(0)}(N,\alpha)$$

که در روابط بالا، $E_0^{(0)}(N,\alpha)$ و $E_1^{(0)}(N,\alpha)$ به ترتیب انرژی حالت‌پایه و انرژی اولین حالت برانگیخته در زیرفضای $S_z^{tot}=۰$ و $E_0^{(1)}(N,\alpha)$ انرژی حالت پایه در زیرفضای $S_z^{tot}=۱$ است. ما با توجه به روابط فوق و با استفاده از روش لنکشوز گاف سه‌گانه-یک‌گانه و گاف یک‌گانه-یک‌گانه را برای زنجیره اسپینی وامانده در غیاب دایمرشدگی $(\delta=۰)$ به‌طول $(N=۲٤)$ محاسبه کردیم که در شکل۳ نشان داده شده است. همان طور که ملاحظه می‌شود نقاط تقاطع $G_{st}(N,\alpha)$ و $G_{ss}(N,\alpha)$ تقریباً مستقل از اندازه سیستم N هستند. همچنین در بازه $(۰<\alpha<\alpha_c=۰/۲۵)$، تساوی $G_{st}(N,\alpha)=G_{ss}(N,\alpha)$ برقرار است.

[۲] Singlet-Triplet Gap

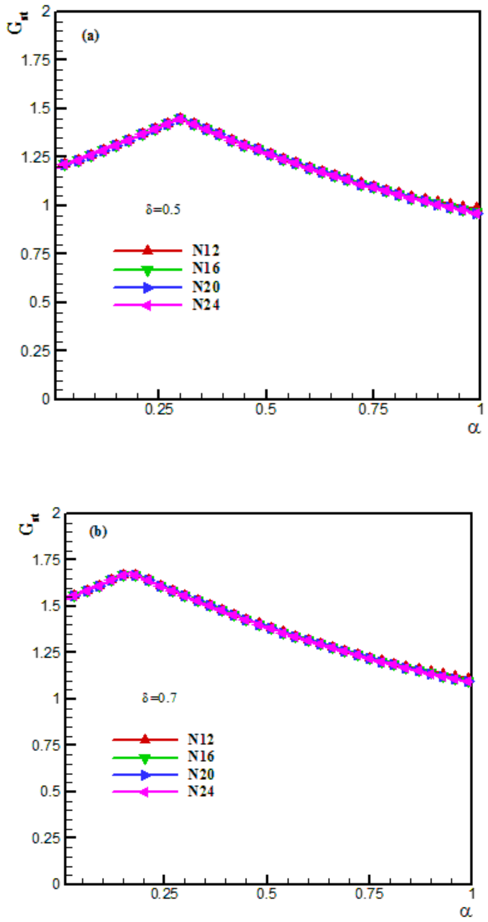
[۳] Singlet-Singlet Gap



شکل٣. گاف یک‌گانه–سه‌گانه (G_{st}) (گرادیان‌های سبز) و گاف یک‌گانه–یک‌گانه (G_{ss}) (دلتاهای قرمز) برای زنجیره وامانده در غیاب دایمرشدگی $(\delta = ٠)$ به‌طول $(N = ٢٤)$.

در مرجع [١٤] اوکاموتو و نامورا[٤] با استفاده از داده‌های سیستم‌های اندازه متناهی، مقدار $\alpha_c = ٠٫٢٤١١ \pm ٠٫٠٠١$ را برای واماندهی بحرانی به‌دست آوردند. همچنین نقطه تقاطع گاف یک‌گانه–سه‌گانه و گاف یک‌گانه–یک‌گانه را بین ٠٫٢٤ و ٠٫٢٥ گزارش دادند. اخیراً نیز تونگاوا و هارادا[٥] در مرجع [١٦] بیان کرده‌اند که $\alpha_c = ٠٫٢٥ \pm ٠٫٠١$ از تحلیل دوباره عددی سیستم‌های اندازه متناهی به‌وسیله گروه باز بهنجارش به‌دست می‌آید.

در شکل٤ نتایج مربوط به گاف یک‌گانه–سه‌گانه (G_{st}) برحسب تغییرات واماندهی به‌ازای دایمرشدگی $\delta = ٠٫٥$ و $\delta = ٠٫٧$ نشان داده شده است. عدم وابستگی نتایج به اندازه سیستم، بیان‌گر این واقعیت است که طول همبستگی در سیستم فوق از مرتبه‌طول سیستم متناهی است.



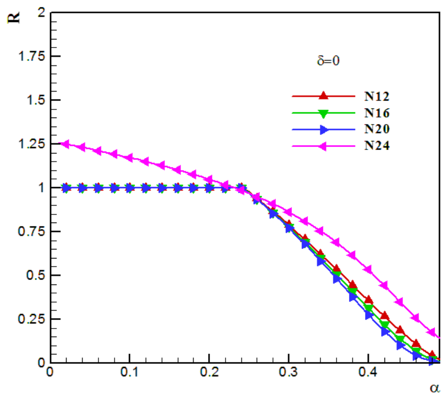
شکل٤. نمودار گاف یک‌گانه–سه‌گانه (G_{st}) برحسب تغییرات پارامتر واماندهی α برای زنجیره‌هایی به‌طول $N = ١٢, ١٦, ٢٠, ٢٤$، قسمت (a) به‌ازای مقدار دایمر $\delta = ٠٫٥$ و قسمت (b) به‌ازای مقدار دایمر $\delta = ٠٫٧$

همان‌طور که در شکل ملاحظه می‌شود، مانند گاف سه‌گانه در شکل٢ به‌ازای دایمرشدگی $\delta = ٠٫٥$ و $\delta = ٠٫٧$ نقطه بحرانی به‌ترتیب، $\alpha_c = ٠٫٣$ و $\alpha_c = ٠٫١٦$ است. ما نسبت گاف یک‌گانه–یک‌گانه (G_{ss}) به گاف یک‌گانه–سه‌گانه (G_{st}) یعنی $(R = \frac{G_{ss}}{G_{st}})$ را برای زنجیرهٔ وامانده در غیاب دایمر

[٤] Kiyomi Okamoto and KiyohideNumora

[٥] Tonegawa and Harada

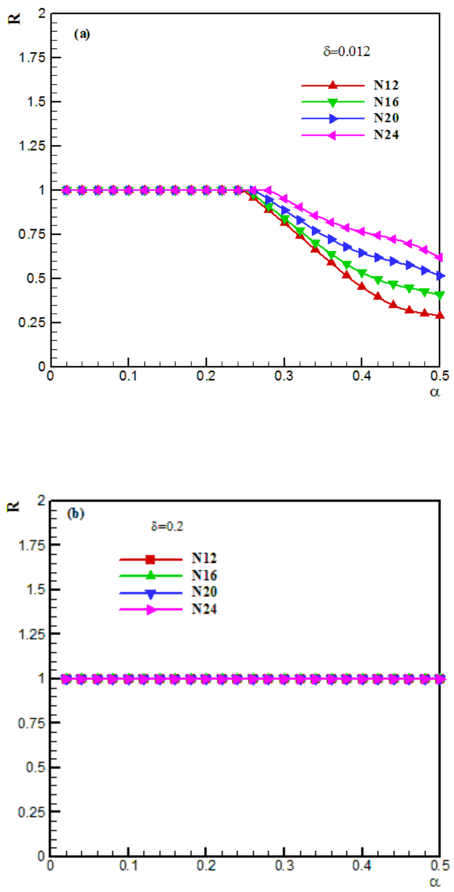
شدگی $(\delta=٠)$ برحسب تغییرات پارامتر واماندهی، محاسبه کردیم که نتایج مربوط به آن در شکل٥ نشان داده شده است.



شکل٥. نمودار نسبت گاف یک‌گانه-یک‌گانه به گاف یک‌گانه-سه‌گانه $(R=\frac{G_{ss}}{G_{st}})$ برای زنجیره وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$ در غیاب دایمرشدگی $(\delta=٠)$.

همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠$ نسبت $R=\frac{G_{ss}}{G_{st}}$، به‌ازای $\alpha=٠$ تا مقدار بحرانی واماندهی $\alpha_c=٠/٢٥$ برابر یک است. با افزایش مقدار واماندهی، R کاهش می‌یابد و سرانجام در نقطهٔ ماجومدار-گوش $\alpha_{MG}=٠/٥$، $R=٠$ می‌شود. همچنین با زیاد شدن طول زنجیره $N=٢٤$ در غیاب واماندهی $(\alpha=٠)$، $R=١/٢٥$ و در مقدار بحرانی واماندهی $(\alpha_c=٠/٢٥)$ $R=١$ است. این نتیجه نشان می‌دهد که احتمال دارد با افزایش طول زنجیره بتوان نتایج به‌دست آمده از قبل را تأیید کرد.

درشکل٦ نمودار نسبت گاف یک‌گانه- یک‌گانه به گاف یک‌گانه- سه‌گانه $(R=\frac{G_{ss}}{G_{st}})$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$. (a) در حضور دایمرشدگی کوچک $\delta=٠/٠١٢$ و (b) در حضور دایمرشدگی $\delta=٠/٢$ رسم شده است.



شکل٦. نمودار نسبت گاف یک‌گانه-یک‌گانه به گاف یک‌گانه-سه-گانه $(R=\frac{G_{ss}}{G_{st}})$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$. (a) به‌ازای مقدار دایمرشدگی کوچک $\delta=٠/٠١٢$، (b) به‌ازای مقدار دایمرشدگی $\delta=٠/٢$

برای مقادیر کوچک دایمرشدگی مانند $\delta=٠/٠١٢$ که در قسمت (a) شکل نشان داده شده است به‌ازای مقادیر واماندهی $(٠<\alpha<\alpha_c=٠/٢٥)$، $R=١$ است و با افزایش پارامتر واماندهی، نسبت R کاهش یافته و

در $(\alpha = ۰٫۵)$ به ۰٫۲۵ می‌رسد. این آزمایش عددی برای دیگر مقادیر دایمرشدگی‌های کوچک $(\delta = ۰٫۰۵, ۰٫۰۱, ۰٫۰۱۵)$ نیز تکرار شده و نتیجه یکسان بوده است. در قسمت (b) دیده می‌شود که به‌ازای دایمرشدگی $\delta = ۰٫۲$، در تمامی مقادیر واماندهی، $R = ۱$ است. این آزمایش نیز به‌ازای دایمرشدگی‌های $(\delta = ۰٫۱......۰٫۵)$ تکرار شده و به‌ازای همه این مقادیر $R = ۱$ به‌دست آمده است. البته این آزمایش برای زنجیره‌های محدود با طول $N = ۱۲,۱۶,۲۰,۲۴$ انجام شده است و ممکن است در صورتی که بتوانیم زنجیره‌های بلندتری را بررسی کنیم نتیجه متفاوتی به‌دست آید.

پارامتر نظم دایمرشدگی

یکی از مهمترین توابع پاسخ که برای توصیف رفتار سیستم‌های وامانده پیشنهاد شده، تابع همبستگی اسپینی روی باندهاست که تحت عنوان "پارامتر نظم دایمرشدگی" شناخته می‌شود. در نظریه مدل‌های اسپینی، پارامتر نظم دایمرشدگی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$D_{i,j} = \langle S_i . S_j \rangle = \langle GS | S_i . S_j | GS \rangle \qquad ۳$$

رابطه بالا میزان تشکیل حالت یک‌گانه، بین جفت ذرات با اسپین-۱/۲ را نشان می‌دهد. برای تشخیص نوع فازهای حالت‌پایه، ما پارامتر نظم دایمرشدگی سیستم را نیز با استفاده از روش عددی لنکشوز محاسبه کردیم. ابتدا پارامتر نظم دایمرشدگی را برای زنجیره وامانده در غیاب دایمرشدگی $(\delta = ۰)$ بررسی می‌کنیم.

پارامتر نظم دایمر روی باندهای فرد با رابطه۴ و روی باندهای زوج با رابطه۵ تعریف می‌شود:

$$D = \frac{۲}{N} \sum_{i=۱}^{N/۲} \langle S_{۲i-۱} . S_{۲i} \rangle \qquad ۴$$

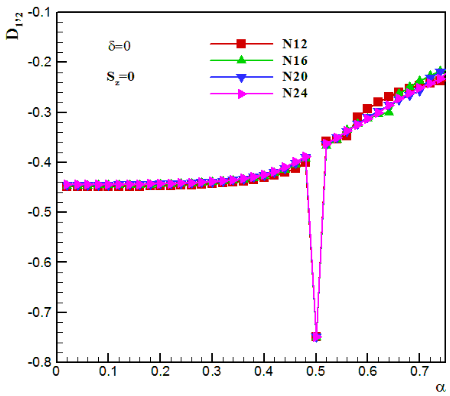
$$D = \frac{۲}{N} \sum_{i=۱}^{N/۲} \langle S_{۲i} . S_{۲i+۱} \rangle \qquad ۵$$

حالت پایه سیستم روی نقطه ماجومدار-گوش به‌صورت حاصل ضربی از $N/۲$ حالت یک‌گانه است در این نقطه حالت پایه، تبهگنی دوگانه دارد. انتظار می‌رود که در این نقطه، پارامتر نظم دایمرشدگی به‌طور دقیق به مقدار $(-۰٫۷۵)$ برسد.

۶

$$D|S\rangle = (\vec{S}_۱ . \vec{S}_۲)|S\rangle = \frac{۱}{۲}(S^۲ - S_۱^۲ - S_۲^۲)|S\rangle$$
$$= \frac{۱}{۲}\left[S(S+۱) - \frac{۳}{۲}\right]|S\rangle = -\frac{۳}{۴}|S\rangle$$

در شکل۷ به‌طور ویژه در زیرفضای $S_z^{tot} = ۰$، پارامتر نظم دایمرشدگی روی باندهای فرد را در غیاب دایمرشدگی $\delta = ۰$ رسم کرده‌ایم.



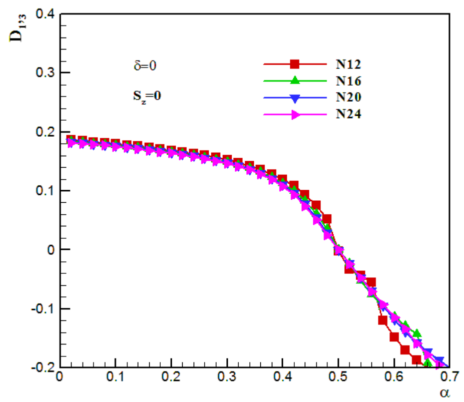
شکل۷. پارامتر نظم دایمرشدگی روی سایت (۱,۲) برحسب پارامتر واماندهی در زیرفضای $S_z^{tot} = ۰$ برای زنجیره‌های اسپینی وامانده به‌طول $N = ۱۲,۱۶,۲۰,۲۴$، در غیاب دایمرشدگی $\delta = ۰$.

مطابق شکل۷ همان‌طور که انتظار داشتیم این نمودار که از روش عددی به‌دست آوردیم با نتایج به‌دست آمده قبلی در توافق خوبی است. این دایمر مربوط به حالت یک‌گانه است. همان‌طور که انتظار داشتیم در زنجیرهٔواامانده، پارامتر دایمرشدگی برای $(\alpha_{MG} = ۰/۵)$ دارای مقدار $(-۰/۷۵)$ است. نتایجی که از محاسبات عددی در مورد پارامتر نظم دایمرشدگی روی باندهای زوج به‌دست آمد کاملاً با نتایج به‌دست آمده برای دایمرشدگی روی باندهای فرد که در شکل۷ نشان داده شده است یکسان است. همچنین دایمرشدگی روی دومین نزدیکترین همسایه‌ها نیز می تواند به‌صورت زیر نشان داده شود:

$$\psi_{۳} \equiv [۱,۳][۲,٤]........[N-۲,N] \qquad ۷$$

$$D = \langle \psi_{GS} | S_{N-۲}.S_N | \psi_{GS} \rangle = ۰ \qquad ۸$$

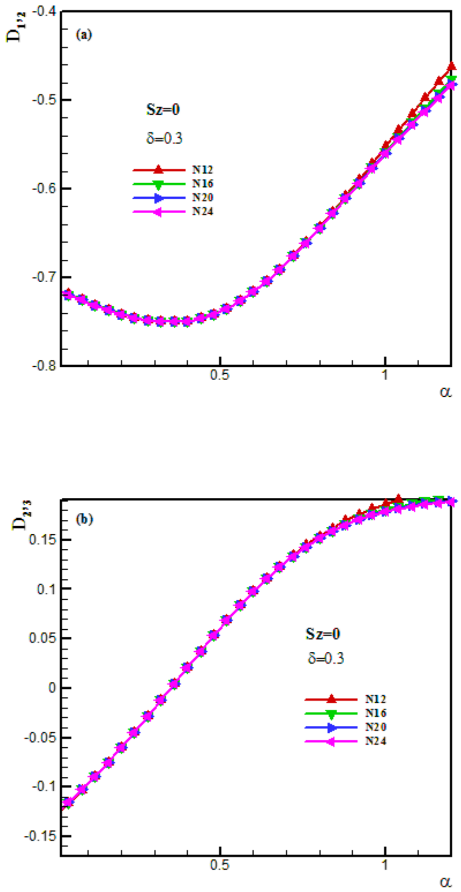
در شکل۸ پارامتر نظم دایمرشدگی روی دومین نزدیکترین همسایه‌ها برحسب واماندهی برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N = ۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$ در غیاب دایمرشدگی $(\delta = ۰)$ محاسبه شده است.



شکل۸. پارامتر نظم دایمر برای سایت $(۱,۳)$ برحسب پارامتر واماندهی در زیرفضای $S_z^{tot} = ۰$ برای زنجیره‌های اسپینی وامانده به‌طول $N = ۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$.

همان طور که در شکل۸ دیده می‌شود در نقطهٔ ماجومدار–گوش $(\alpha_{MG} = ۰/۵)$دایمر شدگی بین دومین نزدیکترین همسایه‌ها دقیقاً صفر می‌شود. بنابراین نتایج به‌دست آمده از روش عددی لنکشوز برای دایمرشدگی توافق خوبی با نتایج تحلیلی دارد. همچنین در شکل۷ و شکل۸ دیده می‌شود که در $(\alpha < \alpha_{MG} = ۰/۵)$ هیچ‌گونه تقاطعی بین خطوط وجود ندارد بنابراین اثرات وابسته به‌اندازه ذرات مشاهده نمی‌شود. اما در $(\alpha > \alpha_{MG})$ تقاطع‌هایی بین خطوط دیده می‌شود و وابستگی به اندازه ذرات محسوس است.

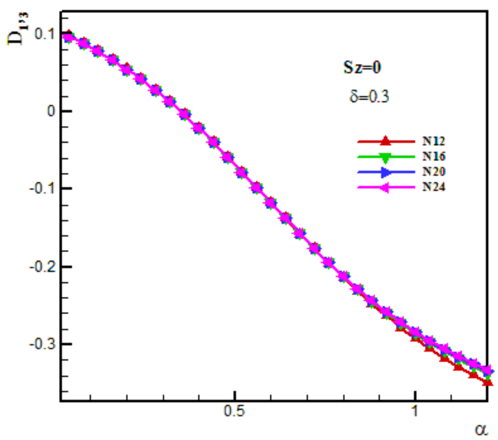
ما همچنین پارامتر نظم دایمر را برای زنجیره وامانده در حضور دایمرشدگی $(۰ < \delta < ۱)$ در زیرفضاهای $(S_z^{tot} = ۰,۱)$ روی باندهای نزدیکترین همسایه و باندهای دومین نزدیکترین همسایه محاسبه کردیم. در قسمت a شکل۹ پارامتر نظم دایمر برای باندهای فرد (سایت ۱ با ۲) و در قسمت b پارامتر نظم دایمر برای باندهای زوج (سایت ۲ با ۳) برحسب واماندهی α در زیر فضای $(S_z^{tot} = ۰)$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N = ۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$ به‌ازای دایمر $\delta = ۰/۳$ رسم شده است.



شکل۹. قسمت (a) پارامتر نظم دایمر روی باندهای فرد (سایت ۱ با ۲)، قسمت (b) پارامتر نظم دایمر روی باندهای زوج، در زیرفضای $(S_z^{tot}=٠)$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$ به‌ازای مقدار دایمر $\delta=٠٫٣$.

در شکل۹، پارامتر نظم دایمر روی باندهای فرد و روی باندهای زوج که به‌ترتیب با رابطه‌های٤ و ۵ تعریف می‌شوند برحسب واماندهی رسم شده است. در قسمت a شکل۹ برای دایمرشدگی روی باندهای فرد دیده می‌شود که به سبب افت و خیزهای کوانتومی در غیاب واماندهی کمیت فوق از مقدار اشباع خود $D=-٠٫٧٥$ انحراف دارد. با افزایش واماندهی، مقدار D روی باندهای فرد کاهش یافته و در مقدار دقیقی که از رابطهٔ $٢\alpha+\delta=١$ پیروی می‌کند به کمترین مقدار خود می‌رسد. در این مقدار واماندهی $\alpha=٠٫٣٥$ سیستم بس ذره‌ای فوق به $N/٢$ جفت ذرهٔ مستقل که در حالت یک‌گانهٔ اسپینی می‌باشند تبدیل می‌شود. با افزایش بیشتر پارامتر واماندهی، دایمرشدگی در باندهای فرد افزایش می‌یابد.

در قسمت (b) شکل۹ دیده می‌شود که دایمرشدگی مانند باندهای فرد در واماندهی بحرانی $(\alpha_c=٠٫٣٥)$ به مقدار اشباع $(-٠٫٧٥)$ می‌رسد. در شکل۱۰ پارامتر نظم دایمر روی باندهای دومین نزدیکترین همسایه (سایت ۱ با ۳) برحسب واماندهی در زیرفضای $(S_z^{tot}=٠)$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$ به‌ازای دایمرشدگی $\delta=٠٫٣$ رسم شده است.



شکل۱۰. پارامتر نظم دایمر روی سایت ۱ با ۳ برحسب واماندگی در زیرفضای $(S_z^{tot}=٠)$ برای زنجیره‌های وامانده به‌طول $N=١٢,١٦,٢٠,٢٤$ به‌ازای دایمرشدگی $\delta=٠٫٣$.

همان طور که درشکل دیده می‌شود دایمرشدگی بین دومین نزدیکترین همسایه‌ها دقیقاً در واماندهی $\alpha=٠٫٣٥$ برابر صفر است.

نتیجه‌گیری

ما در این مقاله، حالت‌پایه زنجیره وامانده دایمر شده هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین-۱/۲ کوانتومی را با استفاده از روش عددی لنکشوز مطالعه کردیم. ابتدا زنجیره هایزنبرگ وامانده را درنظر گرفتیم. حالت‌پایه این سیستم در نقطه ماجومدار-گوش $(\alpha_{MG}=۰/۵)$ یک گذار فاز از فاز سیال لاتینجر به فاز دایمر را نشان می‌دهد. همچنین نشان دادیم که در حضور دایمرشدگی گاف سیستم فوق، مجدداً باز می‌شود. با استفاده از روش لنکشوز، گاف انرژی را در دو زیرفضای $S_z^{tot}=۰$ و۱ برای زنجیره‌های وامانده دایمر متناهی به‌طول $N=۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$ محاسبه کردیم.

نتایج قطری سازی کامل نشان داد که حالت‌پایه سیستم متناهی در غیاب واماندهی دارای گاف سه‌گانه است. با افزایش پارامتر واماندهی α گاف سه‌گانه کاهش یافته و در مقدار واماندهی بحرانی α_c صفر می‌شود. همچنین مشخص شد که واماندهی بحرانی مستقل از اندازه سیستم است. با افزایش بیشتر پارامتر واماندهی $(\alpha>\alpha_c(\delta))$ گاف سه‌گانه مجدداً باز شده و افزایش می‌یابد. ما همچنین نسبت گاف یک‌گانه-یک‌گانه به گاف یک‌گانه-سه‌گانه $(R=\frac{G_{ss}}{G_{st}})$ را برای مدل مورد نظر با استفاده از روش عددی لنکشوز برای زنجیره‌های وامانده دایمر به‌طول محدود $N_{\max}=۲٤$ محاسبه کردیم و مشخص شد که برای دایمرشدگی ناچیز $(\delta=۰/۰۱۲)$ تا نقطه بحرانی واماندهی $(\alpha_c=۰/۲۵)$، این نسبت برابر با یک است و با افزایش واماندهی $(\alpha>\alpha_c)$ مقدار آن کاهش می‌یابد.

برای مشخص کردن نوع فازهای حالت‌پایه سیستم، پارامتر نظم دایمر را ابتدا در غیاب دایمرشدگی $(\delta=۰)$ و در زیرفضای $(S_z^{tot}=۰)$ روی سایت‌های نزدیکترین همسایه و دومین نزدیکترین همسایه، برحسب پارامتر واماندهی α برای زنجیره‌های اسپینی وامانده به‌طول‌های $N=۱۲,۱٦,۲۰,۲٤$ رسم کردیم و نشان دادیم که دایمر روی نقطه ماجومدار-گوش $(\alpha_{MG}=۰/۵)$ برای نزدیکترین همسایه‌ها به‌طور دقیق برابر $(-۰/۷۵)$ است و برای دومین نزدیکترین همسایه‌ها برابر صفر است. بنابراین نشان دادیم که نتایج به‌دست آمده از روش عددی لنکشوز برای دایمرشدگی زنجیره وامانده پادفرومغناطیس همسانگرد اسپین-۱/۲ هایزنبرگ با نتایج تحلیلی به‌خوبی در توافق است. سپس با محاسبه بردار حالت پایه سیستم وامانده در حضور دایمرشدگی نشان داده شد که در غیاب واماندهی $(\alpha=۰)$ پارامتر نظم دایمر از مقدار اشباع خود $(D=-۰/۷۵)$ انحراف دارد. این انحراف به‌دلیل وجود افت و خیزهای کوانتومی است. با افزایش واماندهی، مقدار دایمرشدگی روی باندهای فرد کاهش یافته و در مقدار دقیقی که از رابطه $(۲\alpha+\delta=۱)$ پیروی می‌کند، به کمترین مقدار خود می‌رسد. در این مقدار واماندهی بحرانی، سیستم بس‌ذره‌ای فوق به $N/۲$ جفت ذره مستقل که در حالت یک‌گانه اسپینی هستند تبدیل می‌شود. با افزایش بیشتر پارامتر واماندهی، دایمرشدگی در باندهای فرد افزایش می‌یابد.

مراجع

[1] H.J. Mikeska, A.K. Kolezhuk. *Lecture Note in Physics* 645 (2004) 1-38.

[2] D. Controzzi, C. DegliEspostiBoschi, F. OrtolaniandS. Pasini, *Physical Review B* 72 (2005) 172409.

[3] M. Kumar, S. Ramasesha, D. Sen, Z.G. Soos, *Physical Review B* 75 (2007) 052404.

[4] S. Takayoshi and M. Oshikawa, *Physical Review B* 86 (2012) 144408.

[5] J. Vahedi, S. Mahdavifar, M. R. Soltani, M. Elahi, *Physics Letters A* 392 (2013) 702.

[6] V.M.L. Durga Prasad Goli, ShaonSahoo, R.Ra-masesha, DiptimanSen, *Physics Condense Matter* 25 (2013) 125603.

[7] M. Isobe, Y. Ueda, *Physical Society of Japan* 65 (1996) 1178.

[8] M. Weiden, R. Hauptmann, C. Geibel, F. Steglich, M. Fischer, P. Lemmens, and G. Guntherodt, *Z Physik B* 103 (1997) 1.

[9] J.P. Boucher, L.P. Regnault, *Journal de Physique I* 6 (1996) 1939.

[10] J.W. Bray, L.V. Interrante, I.S. Jacobs, J.C. Bonner, in Extended Linear Chain Compounds, J.S. Miller (Ed.), Plenum New York Vol 3 (1983) p 353.

[11] A.W. Garrett, S.E. Nagler, T. Barnes, B.C. Sales, *Physical Review B* 55 (1997) 3631.

[12] A.W. Garrett, S.E. Nagler, D.A. Tennant, B.C. Sales, T. Barnes, *Physical Review Letters* 79 (1997) 745.

[13] A.V. Prokofiev, F. Büllesfeld, W. Assmus, H. Schwenk, D. Wichert, U. Low, B. Luthi, *European Physical Journal B* **5** (3) (1998) 313.

[14] E. Dagotto, T.M. Rice, *Science* 271 (1996) 618.

[15] T. Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension, Oxford University Press, New York (2004).

[16] R. Chitra, S. Pati, H.R. Krishnamurthy, D. Sen, S. Ramasesha, *Physical Review B* 52 (1995) 6581.

[17] S.R. White, I. Affleck, *Physical Review B* 54 (1996) 9862.

[18] F.D.M. Haldane, *Physical Review B* 25 (1982) 4925.

[19] K. Okamoto, K. Nomura, *Physics Letters A* 169 (1993) 433.

[20] G. Castilla, S. Chakravarty, V.J. Emery, *Physical Review Letters* 75 (1995) 1823.

[21] T. Tonegawa, I. Harada, *Physical Society of Japan* 56 (1987) 2153.

[22] R. Jullien, F.D.M. Haldane, Bull. *American. Physical. Society*. 28 (1983) 344.

[23] I. Affleck, D. Gepner, H.J. Schulz, T. Ziman, *Journal of Physics A* 22 (1989) 511.

[24] R. Bursill, G.A. Gehring, D.J.J. Farnell, J.B. Parkinson, T. Xiang, C. Zeng, *Physics Condens Matter* 7 (1995) 8605.

[25] D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov. *Physical Review B* 73 (2006) 024402.

[26] C.K. Majumdar, D.K. Ghosh, *Journal of Physics C* 3 (1970) 911.

[27] C.K. Majumdar, D.K. Ghosh, *Journal of Mathematical Physics 10* (1969) 1339.

[28] P.M. van den Broek, *Physics Letters A* 77 (1980) 261.

[29] B.S. Shastry, B. Sutherland, *Physical Review Letters* 47 (1981) 964.

[30] G. Bouzerar, A.P. kampf, G.I. japaridze, *physical Review B* 58 (1998) 3117.