

## نظم‌های مغناطیسی مدل هایزنبرگ $J_1 - J_2$ پادفرومغناطیس شبکه لانه زنبوری در حضور برهم کنش ژئالوشینسکی - موری

فریبا مسعودی و حمید مصدق

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۰۸/۱۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۱۲/۱۰)

### چکیده

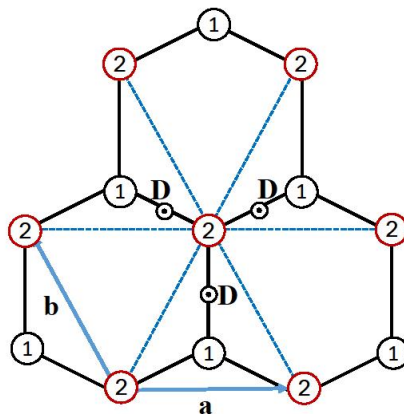
بر اساس بررسی‌های جدیدی که نشان دهنده وجود برهم کنش ژئالوشینسکی - موری در ماده  $Bi_2Mn_2O_7(NO_2)$  است، در این مقاله به بررسی اثر این برهم کنش بر روی نظم‌های مغناطیسی مدل هایزنبرگ  $J_1 - J_2$  پادفرومغناطیس شبکه لانه زنبوری پرداخته‌ایم. مطالعه مدل را با روش کلاسیکی لاتینجر - تیزا شروع می‌کنیم. در این تقریب کلاسیکی سیمای فاز به دو ناحیه تقسیم می‌شود. برای نواحی که  $J_2 < (1+D^2)/6$  مدل دارای نظم نل پیچیده شده است و برهم کنش ژئالوشینسکی - موری باعث پیچش اسپین‌های یکی از زیرشبکه می‌شود. اما برای نواحی که  $J_2 > (1+D^2)/6$  مدل دارای واگنی است و بی‌نهایت بردار پیچش وجود دارد که می‌توانند مدل را کمینه کنند. وجود این ناحیه در سیمای فاز به دلیل افزایش احتمال وجود فاز مایع اسپینی کوانتومی بسیار مهم است. برای بررسی اثر افت و خیزهای کوانتومی بر روی پایداری فازهای کلاسیک به دست آمده، از روش موج اسپینی خطی هولشتاین - پریماکوف استفاده می‌شود. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که در ناحیه واگنی که  $J_2 > (1+D^2)/2$  وارد کردن افت و خیزهای کوانتومی باعث ایجاد نظم در دستگاه اسپینی می‌شود. اما برای  $J_2 < (1+D^2)/2$  و  $J_2 < (1+D^2)/6$  افت و خیزهای کوانتومی هیچ نظمی را نمی‌توانند پایدار کنند و همچنان این ناحیه گزینه مناسبی برای یافتن فاز اسپین مایع کوانتومی باقی می‌ماند.

واژه‌های کلیدی: برهم کنش ژئالوشینسکی - موری، مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس

### ۱. مقدمه

شبکه‌های غیرناکام تعریف می‌شوند که باعث ناکامی دستگاه مغناطیسی می‌شوند [۴]. یکی از این مدل‌ها مدل هایزنبرگ با برهم کنش همسایه اول و دوم پادفرومغناطیس بر روی شبکه لانه زنبوری است [۵-۸]. حالت پایه مدل هایزنبرگ با برهم کنش پادفرومغناطیس همسایه اول دارای نظم نل است. در این نظم تمام اسپین‌های متعلق به یک زیرشبکه با هم موازی

و واگنی کلاسیکی شدید حالت پایه مدل می‌تواند باعث بروز ناکامی مغناطیسی شود. دستگاه‌های مغناطیسی ناکام شده به دلیل مشخصه‌های زیادی که دارند مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند [۱]. علاوه بر دستگاه‌های مغناطیسی که به دلیل هندسه شبکه ناکام شده‌اند [۲-۳]، مدل‌های مغناطیسی بر روی



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) شبکه لانه زنبوری از یک یاخته بسیط دو اتمی و با بردارهای شبکه  $\vec{a} = \hat{x}$ ،  $\vec{b} = -\hat{x}/2 + (\sqrt{3}/2)\hat{z}$  مشخص می‌شود. در این شکل همسایه‌های اول ( $J_1$ ) با خط و همسایه‌های دوم ( $J_2$ ) با خط چین مشخص شده‌اند. بردار برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موریای بر روی برهم‌کنش‌های همسایه اول و در جهت عمود بر صفحه و به سمت بیرون رسم شده است.

اسپین  $\frac{3}{2}$ ، یک شبکه لانه زنبوری دوبعدی تشکیل می‌دهند. مطالعات تجربی نشان می‌دهد که این ماده تا دماهای خیلی پایین هیچ نظم مغناطیسی از خود نشان نمی‌دهد. از این رو این ماده می‌تواند گزینه مناسبی برای مشاهده تجربی اسپین مایع کوانتومی باشد. مطالعه اخیر که بر روی این ماده انجام شده است نشان می‌دهد که علاوه بر برهم‌کنش‌های هایزنبرگ بین اسپین‌ها، برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موریای نیز در این ماده وجود دارد. شدت این برهم‌کنش در مقایسه با شدت برهم‌کنش‌های هایزنبرگ به اندازه‌ای است که می‌تواند باعث تغییر در نظم مغناطیسی شود [۱۰]. برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موریای، یک جمله برهم‌کنش اسپینی مؤثر برای جفت شدگی اسپین - مدار در حالت‌های متقارن است که توسط ژئالوشینسکی [۱۱] و موریای [۱۲] به دست آمد.

هدف از این مقاله بررسی اثر برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موریای در سیمای فاز مدل هایزنبرگ  $J_1 - J_2$  پادفرومغناطیس اسپین  $\frac{3}{2}$  بر روی شبکه لانه زنبوری است. این بررسی به ما کمک می‌کند که به نظم مغناطیسی واقعی ماده در حضور برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موریای نزدیک شویم. این مطالعه در دمای صفر و بدون در نظر گرفتن افت و خیزهای گرمایی انجام می‌شود. در این مقاله، ابتدا مدل را به صورت کلاسیکی مطالعه

هستند و در خلاف جهت اسپین‌های زیرشبکه دیگر قرار می‌گیرند. برهم‌کنش پادفرومغناطیس همسایه دوم سعی می‌کند که اسپین‌های یک زیر شبکه را نیز در خلاف جهت هم دیگر قرار دهد (شکل ۱). این رقابت بین برهم‌کنش‌های همسایه اول و دوم باعث ناکامی مدل در یافتن حالت پایه خود می‌شود.

بررسی مدل‌های مغناطیسی بر روی شبکه لانه زنبوری از نظر تئوری و تجربی ارزشمند است. شبکه لانه زنبوری دارای کمترین مقدار عدد هم‌آرایی در بین شبکه‌های دوبعدی است و کم بودن عدد هم‌آرایی باعث افزایش اثر افت و خیزهای کوانتومی در این شبکه شده است. از این رو شبکه لانه زنبوری گزینه مناسبی برای مطالعه این افت و خیزها در مدل‌های دوبعدی است. افت و خیز کوانتومی می‌تواند مانع ایجاد نظم‌های مغناطیسی در دمای صفر باشد و در مدل مغناطیسی ناکام شده، احتمال مشاهده مایع اسپین کوانتومی را افزایش می‌دهد. در فاز مایع اسپینی کوانتومی هیچ تقارنی در دمای صفر شکسته نمی‌شود و برانگیختگی اسپینی آن کسری است [۹].

از طرف دیگر، ساختن ترکیباتی که از لایه‌های اکسید عناصر واسطه تشکیل شده‌اند، توجه محققان را برای ارائه مدل اسپینی مناسب برای آنها به خود جلب کرده است. یکی از این مواد  $Bi_{1-x}Mn_xO_{1-x}(NO_3)$  است. در این ماده یون‌های  $Mn^{4+}$  با

مرجع به اندازه  $\bar{a} + \bar{b}$  و  $\bar{b}$  به دست آمده‌اند.

در شکل ۱، نقاط همسایه دوم با خط چین به هم وصل شده‌اند. همان طور که در شکل دیده می‌شود هر اسپین از یک زیرشبکه در شبکه لانه زنبوری دارای ۶ اسپین همسایه دوم از همان زیرشبکه است. اگر مشابه جمله برهم‌کنش همسایه اول، بر روی یکی از زیرشبکه‌ها حرکت کنیم و تمام همسایه‌های دوم آن را در نظر بگیریم، هر برهم‌کنش همسایه دوم از شبکه لانه زنبوری دو بار در هامیلتونی محاسبه می‌شود. بنابراین یک ضریب  $\frac{1}{2}$  در این جمله ضرب می‌شود.

$$H_{J_2} = (J_2 / 2) \sum_i (S_{i\pm\bar{a}}^1 \cdot S_i^1 + S_{i\pm\bar{b}}^1 \cdot S_i^1 + S_{i\pm(\bar{a}+\bar{b})}^1 \cdot S_i^1 + (S_{i\pm\bar{a}}^2 \cdot S_i^2 + S_{i\pm\bar{b}}^2 \cdot S_i^2 + S_{i\pm(\bar{a}+\bar{b})}^2 \cdot S_i^2)) \quad (3)$$

جمله اول این عبارت برهم‌کنش بین اسپین‌های همسایه دوم زیرشبکه ۱ است و جمله دوم برای همین برهم‌کنش بین اسپین‌های همسایه دوم زیرشبکه ۲ نوشته شده است.

آخرین جمله هامیلتونی، جمله برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا است. این برهم‌کنش یک برهم‌کنش جهت‌دار است که جهت آن با بردار  $\bar{D}_{ij}$  مشخص می‌شود. تقارن‌های شبکه قیدهایی روی جهت بردار  $\bar{D}_{ij}$  تحمیل می‌کنند که این قیدهها مشخص کننده جهت بردار  $\bar{D}_{ij}$  هستند [۱۳]. تقارن‌های شبکه لانه زنبوری باعث می‌شود که اگر برهم‌کنش‌های ژئالوشینسکی-موریا بین اسپین‌های همسایه اول بررسی شود، جهت بردار  $\bar{D}_{ij}$  به راستای عمود بر صفحه شامل شبکه محدود می‌شود. این بردار در شکل ۱ بر روی برهم‌کنش‌های همسایه اول نشان داده شده است. در این مقاله، شبکه در صفحه  $xz$  است و بردار برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا در جهت محور  $y$  قرار می‌گیرد و مولفه  $y$  ضرب برداری برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا در هامیلتونی وارد می‌شود ( $\bar{D}_{ij} = D\hat{y}$ ). چون این برهم‌کنش نیز بین همسایه‌های اول است، جملات این برهم‌کنش را نیز مشابه  $H_{J_1}$  می‌نویسیم.

$$H_D = D \sum_i (S_{i,z}^1 S_{i,x}^1 - S_{i,x}^1 S_{i,z}^1) + (S_{i,z}^1 S_{i+\bar{b},x}^1 - S_{i,x}^1 S_{i+\bar{b},z}^1) + (S_{i,z}^1 S_{i+\bar{a}+\bar{b},x}^1 - S_{i,x}^1 S_{i+\bar{a}+\bar{b},z}^1) \quad (4)$$

می‌کنیم. مطالعه کلاسیکی مدل می‌تواند راهنمای ما برای یافتن فاز اسپین مایع در سیمای فاز مدل شود. چون اسپین  $\frac{3}{4}$  به اندازه کافی بزرگ نیست که بتوان از افت و خیزهای کوانتومی صرف نظر کرد، نظریه موج اسپینی خطی برای بررسی اثر افت و خیزهای کوانتومی بر روی حالت پایه کلاسیکی به کار گرفته شده است. در نهایت نمودار فاز بر حسب تغییرات ضریب جفت شدگی همسایه دوم و برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا نمایش داده می‌شود.

## ۲. معرفی مدل و شبکه

مدل بررسی شده در این مقاله، با اضافه کردن جمله برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا به هامیلتونی هایزبرگ پادفرومغناطیس با برهم‌کنش همسایه‌های اول و دوم به دست می‌آید.

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i \cdot S_j + \sum_{\langle ij \rangle} D_{ij} \cdot (S_i \times S_j) \quad (1)$$

دو جمله اول برهم‌کنش‌های هایزبرگ بین اسپین‌های همسایه اول  $J_1$  و همسایه دوم  $J_2$  هستند و جمله سوم برهم‌کنش ژئالوشینسکی-موریا است.

با توجه به مشخصه‌های شبکه لانه زنبوری، هامیلتونی را می‌توان برای این شبکه بازنویسی کرد. شبکه لانه زنبوری شامل دو زیرشبکه مثلثی است (شکل ۱). بنابراین شبکه لانه زنبوری را می‌توان با استفاده از یک یاخته بسیط دو اسپینی و بردارهای شبکه مثلثی تشکیل داد. بردارهای شبکه در شکل ۱ با  $\bar{a}$  و  $\bar{b}$  مشخص شده‌اند. در نزدیک‌ترین همسایگی هر اسپین از زیرشبکه ۱، سه اسپین از زیرشبکه ۲ قرار دارند. اگر دو اسپین درون یاخته بسیط واقع در مکان  $\bar{R}_i$  را با  $S_i^1$  و  $S_i^2$  نشان دهیم، جمله اول هامیلتونی ۱ برای شبکه لانه زنبوری به صورت

$$H_{J_1} = J_1 \sum_i (S_i^1 \cdot S_i^1 + S_{i+\bar{b}}^2 \cdot S_i^2 + S_{i+\bar{a}+\bar{b}}^2 \cdot S_i^2) \quad (2)$$

نوشته می‌شود که جمع روی همه اسپین‌های زیرشبکه ۱ اعمال شده است. اولین جمله از دو اسپین همسایه اول درون یک یاخته بسیط به دست می‌آید و دو اسپین همسایه اول بعدی متعلق به یاخته‌های مجاور هستند که با انتقال یاخته اسپین

$$\begin{aligned} A_q &= (1 + e^{i\bar{q}\bar{b}} + e^{i\bar{q}(\bar{a}+\bar{b})}), \\ B_q &= \sqrt{2}J_1(\cos(\bar{q}\bar{a}) + \cos(\bar{q}\bar{b}) + \cos(\bar{q}(\bar{a}+\bar{b}))), \\ C_q &= DA_q. \end{aligned} \quad (10)$$

با قطری کردن ماتریس هامیلتونی شش ویژه مقدار ماتریس به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \lambda_q^1 &= B_q - |A_q|, \\ \lambda_q^2 &= B_q + |A_q|, \\ \lambda_q^3 &= B_q - |A_q| \sqrt{1+D^2}, \\ \lambda_q^4 &= B_q + |A_q| \sqrt{1+D^2}, \\ \lambda_q^5 &= B_q - |A_q| \sqrt{1+D^2}, \\ \lambda_q^6 &= B_q + |A_q| \sqrt{1+D^2}. \end{aligned} \quad (11)$$

حال می‌توان هامیلتونی را در پایه‌های جدید به شکل قطری آن بنویسیم.

$$E = \sum_{\bar{q}, \mu} \lambda_q^\mu |\bar{S}_q^\mu\rangle. \quad (12)$$

در این رابطه  $\bar{S}_q^T$  پایه‌های جدید هستند. این پایه‌ها از ضرب پایه‌های قبلی در ماتریس تبدیل محاسبه می‌شوند و ماتریس تبدیل را هم از کنار هم قرار دادن ویژه بردارهای ماتریس هامیلتونی به دست می‌آوریم.

$$S_q^T T = \bar{S}_q^T \quad (13)$$

اگر اسپین‌ها کلاسیکی باشند اندازه هر بردار اسپین برابر  $S$  است. روش لاتینجر- تیزا این قید را به صورت میانگین برای کل اسپین‌های شبکه اعمال می‌کند  $(\sum_i |S_i|^2 = NS^2)$ . فرض

می‌کنیم که اندازه اسپین یک است. اگر  $\lambda_q^1$  کمینه انرژی در  $q$  باشد، در این صورت با اعمال قید  $(\sum_i |S_i|^2 = \sum_q |S_q|^2 = N)$

انرژی کل از رابطه

$$E = N\lambda_q^1 + \sum_{\bar{q}, \mu > 0} (\lambda_q^\mu - \lambda_q^1) |\bar{S}_q^\mu|^2, \quad (14)$$

به دست می‌آید. اگر تمام ضرایب  $(\lambda_q^\mu - \lambda_q^1) > 0$  صفر شود، رابطه بالا معرف حد بالایی انرژی حالت پایه است. با این شرایط می‌توان بردار موج پیش اسپین‌ها در حالت پایه کلاسیکی و زاویه نسبی بین اسپین‌های یک یاخته بسط را محاسبه کرد.

در این مقاله سیمای فاز کلاسیکی مدل بر حسب تغییرات پارامترهای  $J_1$  و  $D$  به دست می‌آید. با توجه به روابط (۱۱)

در نهایت هامیلتونی هایزنبرگ با برهم‌کنش‌های همسایه اول و دوم و برهم‌کنش ژئالوشنسکی- موریای بر روی شبکه لانه زنبوری از مجموع این سه جمله به دست می‌آید.

$$H = H_{J_1} + H_{J_2} + H_D \quad (5)$$

### ۳. روش کلاسیکی لاتینجر- تیزا

در این تحقیق برای یافتن سیمای فاز کلاسیکی مدل از روش لاتینجر- تیزا استفاده شده است. این روش برای یافتن حالت پایه هامیلتونی‌های مربعی با اعمال یک قید ضعیف استفاده می‌شود. اینجا ویژه بردارها و ویژه مقدارهای نمایش ماتریسی هامیلتونی در پایه‌های اسپین‌های کلاسیکی، برای تعیین ساختار اسپین‌ها در حالت پایه مدل مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۴-۱۷]. در ادامه محاسبات روش لاتینجر- تیزا به صورت مرحله به مرحله توضیح داده شده است.

برای محاسبه سیمای فاز کلاسیکی با استفاده از روش لاتینجر- تیزا از هامیلتونی  $5$  شروع می‌کنیم و  $J_1 = 1$  قرار می‌دهیم. اگر شبکه لانه زنبوری شامل  $N$  اسپین باشد، تبدیل فوریه هر اسپین از شبکه به صورت

$$\bar{S}^b(\vec{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_q \bar{S}_q^b e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}, \quad (6)$$

تعریف می‌شود.  $b$  شماره زیر شبکه است که همان طور که گفته شد برای شبکه لانه زنبوری مساوی  $1$  و  $2$  است. بنابراین شکل ماتریسی هامیلتونی در فضای  $q$  با رابطه

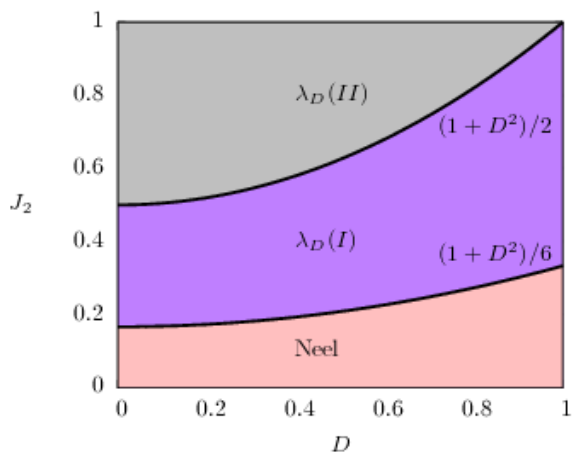
$$H = \sum_q S_{-q}^T M_q S_q, \quad (7)$$

نوشته می‌شود اگر

$$S_{-q}^T = (S_{-q,x}^1 \ S_{-q,y}^1 \ S_{-q,z}^1 \ S_{-q,x}^2 \ S_{-q,y}^2 \ S_{-q,z}^2), \quad (8)$$

باشد. همچنین در این رابطه ماتریس هامیلتونی یک ماتریس  $6 \times 6$  است.

$$M_q = \begin{pmatrix} B_q & 0 & 0 & A_q & 0 & -C_q \\ 0 & B_q & 0 & 0 & A_q & 0 \\ 0 & 0 & B_q & C_q & 0 & A_q \\ A_q^* & 0 & C_q^* & B_q & 0 & 0 \\ 0 & A_q^* & 0 & 0 & B_q & 0 \\ -C_q^* & 0 & A_q^* & 0 & 0 & B_q \end{pmatrix}, \quad (9)$$



شکل ۲. رنگی در نسخه الکترونیکی) سیمای فاز کلاسیکی مدل.

به صورت

$$\begin{aligned} S_{x2} &= -S_{x1}, \\ S_{y2} &= -S_{y1}, \\ S_{z2} &= -S_{z1}, \end{aligned} \quad (17)$$

است. یعنی دو اسپین یک یاخته بسط در خلاف جهت هم قرار می‌گیرند. در  $D \neq 0$ ، از بقیه ویژه مقادیر کوچک‌تر است.

پس در این حالت فاز نسبی را روابط

$$\begin{aligned} S_{z2} &= -\frac{|A|\sqrt{1+D^2}}{A^*(1+D^2)} S_{z1} + \frac{|A|D\sqrt{1+D^2}}{A^*(1+D^2)} S_{x1}, \\ S_{x2} &= -\frac{|A|D\sqrt{1+D^2}}{A^*(1+D^2)} S_{z1} - \frac{|A|\sqrt{1+D^2}}{A^*(1+D^2)} S_{x1}, \\ S_{y2} &= S_{y1} = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

تعیین می‌کند. این معادلات نشان می‌دهند که بردارهای اسپین مقید می‌شوند که در صفحه عمود بر بردار برهم‌کنش ژئالوشینسکی - موری قرار گیرند. با استفاده از جواب‌های دستگاه معادلات (۱۵) و (۱۶) و روابط (۱۷) و (۱۸) سیمای فاز کلاسیکی مدل، که در شکل ۲ نشان داده شده است، به دست می‌آید. این سیمای فاز دارای دو بخش اصلی است.

فاز نل پیچیده شده: برای مقادیری از پارامترهای مدل که  $J_2 < (1+D^2)/6$  است، ویژه مقادیر  $\lambda$  و  $\lambda_D$  در  $Q = (0,0)$  کمینه می‌شوند. این مقدار از بردار پیش اسپین به معنای هم‌جهتی تمامی اسپین‌های روی یک زیرشبکه است. رابطه (۱۴) نشان می‌دهد که در  $D=0$  اسپین‌های زیرشبکه دوم در خلاف زیر شبکه اول قرار می‌گیرند (بالا سمت چپ در شکل ۴). این نظم، همان نظم نل است. با اضافه شدن برهم‌کنش

واضح است که تمام ویژه مقادیر به جز  $\lambda_q^1$  و  $\lambda_q^0 = \lambda_q^2$  در کل ناحیه اول بریلوئن مثبت هستند و طبق نظریه لاتینجر-تیزا ضرایب آنها در رابطه (۱۴) باید حذف شوند. پس برای به دست آوردن سیمای فاز باید نقاط کمینه انرژی  $\lambda_q^1$  و  $\lambda_q^0 = \lambda_q^2$  را محاسبه کنیم و رقابت بین انرژی آنها را بررسی کنیم. ادامه مقاله  $\lambda_q^1$  را با  $\lambda$  و  $\lambda_q^0 = \lambda_q^2$  را با  $\lambda_D$  نشان می‌دهیم. کمینه‌های انرژی، جواب‌های دستگاه دو معادله و دو مجهول به دست آمده از مشتق ویژه مقادیر انرژی هستند.

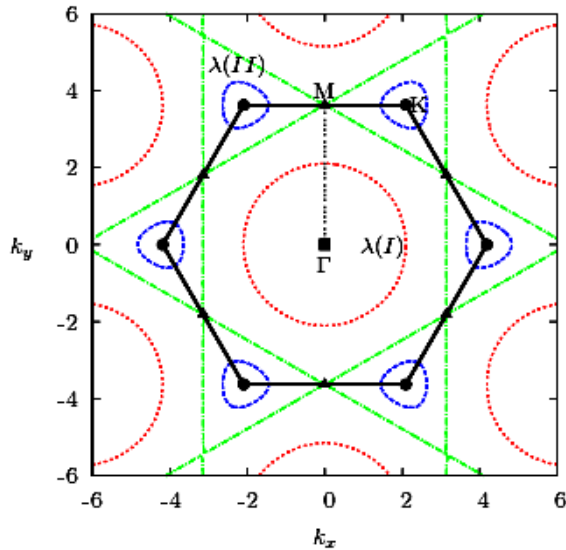
$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda}{\partial q_x} &= (\sin(q_x) + \sin(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z)) \\ & \quad (-2J_2 + \frac{1}{\sqrt{\gamma + \gamma \cos(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z) + \gamma \cos(q_x)}}) = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda}{\partial q_z} &= \sqrt{\gamma} (\cos(\frac{q_x}{\gamma}) \sin(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z)) (-2J_2 \\ & \quad + \frac{1}{\sqrt{\gamma + \gamma \cos(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z) + \gamma \cos(q_x)}}) = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_D}{\partial q_x} &= (\sin(q_x) + \sin(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z)) \\ & \quad (-2J_2 + \frac{1+D^2}{\sqrt{\gamma + \gamma \cos(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z) + \gamma \cos(q_x)}}) = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_D}{\partial q_z} &= \sqrt{\gamma} (\cos(\frac{q_x}{\gamma}) \sin(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z)) (-2J_2 \\ & \quad + \frac{1+D^2}{\sqrt{\gamma + \gamma \cos(\frac{q_x}{\gamma}) \cos(\frac{\sqrt{\gamma}}{\gamma} q_z) + \gamma \cos(q_x)}}) = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

در نهایت با محاسبه مشتق دوم ویژه مقادیر، محدوده پایداری جواب‌های به دست آمده را بررسی می‌کنیم. بعد از یافتن جواب‌ها و محدوده اعتبار هر جواب، ضرایب بقیه ویژه مقادیر را در رابطه (۱۴) صفر قرار می‌دهیم. این محاسبات به ما کمک می‌کند تا فاز نسبی بین اسپین‌های یک یاخته بسط را به دست آوریم. در  $D=0$ ،  $\lambda_1 = \lambda_0 = \lambda_2$  دارای انرژی کمتری هستند و باید ضریب بقیه ویژه مقادیر در معادله (۱۴) مساوی صفر باشند. در این حالت، فاز نسبی



شکل ۳. رنگی در نسخه الکترونیکی) ناحیه اول بریلوئن (خطوط مشکی)، منحنی‌های واگنی کلاسیکی نوع اول (نقطه چین قرمز)، منحنی‌های واگنی کلاسیکی روی خط  $J_4 = (1+D^2)/2$  (نقطه-خط چین سبز) و منحنی‌های واگنی کلاسیکی نوع دوم (نقطه چین آبی).

در این روابط صدق می‌کنند مکان کمینه‌های انرژی پایه مدل در فضای وارون هستند. بنابراین در این ناحیه یک واگنی کلاسیکی وجود دارد. مکان‌های کمینه‌های انرژی و یا منحنی‌های واگنی کلاسیک در شکل ۳ نشان داده شده‌اند. در ناحیه نل، انرژی تنها در  $Q = (0,0)$  کمینه می‌شود و مکان کمینه انرژی در نقطه  $\Gamma$  است. با عبور از خط  $J_4 = (1+D^2)/6$ ، در سیمای فاز نشان داده شده در شکل ۲، مکان کمینه‌های انرژی به منحنی‌های بسته‌ای حول نقطه  $\Gamma$  تبدیل می‌شوند. این منحنی‌ها در شکل ۳ با نقطه چین سبز رنگ و با برچسب  $\lambda_D(I)$  مشخص شده‌اند. با تغییر ثابت‌های مدل و نزدیک شدن به خط  $J_4 = (1+D^2)/2$  این منحنی‌ها بزرگ‌تر می‌شوند و بر روی این خط منحنی واگنی کلاسیک (خط-نقطه چین سبز رنگ در شکل ۳) به مرز ناحیه اول بریلوئن می‌رسد. بعد از این خط منحنی واگنی کلاسیک به صورت چند منحنی گسسته حول نقطه  $K$  تغییر شکل می‌دهد. این منحنی‌ها نیز در شکل ۳ با خط چین آبی و برچسب  $\lambda_D(II)$  معین شده‌اند. به لحاظ کلاسیکی، شکل این منحنی‌ها هیچ

ژیاوشینسکی-موریا، روابط (۱۸) تعیین کننده فاز نسبی جهت اسپین‌های دو زیرشبکه هستند. چون همه اسپین‌های یک زیرشبکه در یک جهت هستند ما فرض می‌کنیم که همه اسپین‌های زیرشبکه یک در راستای محور  $x$  قرار گرفته‌اند، یعنی  $S_x = S, S_y = 0, S_z = S$ . با این فرض رابطه (۱۸) در این ناحیه به رابطه

$$\begin{aligned} S_{z^2} &= + \frac{D}{\sqrt{(1+D^2)}} S, \\ S_{xy} &= - \frac{1}{\sqrt{(1+D^2)}} S, \\ S_{y^2} &= S_{y^1} = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

کاهش می‌یابد. با افزایش برهم‌کنش ژیاوشینسکی-موریا مولفه  $x$  اسپین‌های زیرشبکه ۲ کاهش می‌یابد و مولفه  $z$  بزرگ می‌شوند. نتیجه این کاهش و افزایش دوران ساعت گرد اسپین‌های زیرشبکه ۲، نسبت به حالت نل، با افزایش شدت برهم‌کنش ژیاوشینسکی-موریا است (شکل ۴). به همین دلیل به این نظم، نظم نل پیچیده شده می‌گوییم. مقدار این دوران در  $D=1$  به اندازه ۴۵ درجه است (بالا سمت راست در شکل ۴) و اگر این برهم‌کنش خیلی بزرگ شود در نهایت اسپین‌های زیرشبکه ۲ در راستای محور  $z$  قرار می‌گیرند. علت این تغییرات در شکل برهم‌کنش ژیاوشینسکی-موریا در هامیلتونی است. با فرض‌های مقاله این برهم‌کنش در هامیلتونی به شکل  $-DSS_{z^2}$  تصحیح می‌شود. بنابراین با افزایش  $D$ ،  $S_{z^2}$  افزایش می‌یابد تا انرژی کاهش یابد.

ناحیه واگنی کلاسیک: تمام  $Q = (q_x, q_z)$  هایی که در معادلات

$$(-2J_4 + \frac{1}{\sqrt{3+4\cos(\frac{q_x}{\gamma})\cos(\frac{\sqrt{3}}{\gamma}q_z)+2\cos(q_x)}}) = 0, \quad (20)$$

و

$$(-2J_4 + \frac{1+D^2}{\sqrt{3+4\cos(\frac{q_x}{\gamma})\cos(\frac{\sqrt{3}}{\gamma}q_z)+2\cos(q_x)}}) = 0, \quad (21)$$

صدق می‌کنند، به ترتیب جواب‌های دستگاه معادلات (۱۵) و (۱۶) هستند. به عبارت دیگر، تمام بردارهای پیچش اسپینی که

و با تعریف  $(c_k^\dagger d_k^\dagger c_{-k} d_{-k}) = \psi_k^\dagger$ ، هامیلتونی شامل افت و خیزهای کوانتومی را به شکل ماتریسی زیر می‌نویسیم

$$H_{LSW} = E_{cl} + \gamma S \sum_{k>0} [\psi_k^\dagger M_k \psi_k - \gamma A_k], \quad (26)$$

جمله  $-\gamma A_k$  از روابط جابه‌جایی حاصل شده است و ماتریس هامیلتونی  $M_k$  که ماتریس ضرایب نام دارد، یک ماتریس  $4 \times 4$  به شکل زیر است:

$$M_k = \begin{pmatrix} A_k^* & B_k & C_k^* & D_k \\ B_k^* & A_k & D_k^* & C_k \\ C_k^* & D_k & A_k & B_k \\ D_k & C_k & B_k^* & A_k \end{pmatrix}, \quad (27)$$

که عناصر ماتریس بالا به صورت زیر هستند:

$$A_k = \frac{J_1}{\gamma} [\cos \phi + \cos(\phi - Q_b) + \cos(\phi - Q_b - Q_a)] - \frac{J_2}{\gamma} [\cos Q_a + \cos Q_b + \cos(Q_a + Q_b)] + \frac{J_2}{\gamma} [(\cos Q_a + 1) \cos k_a + (\cos Q_b + 1) \cos k_b + (\cos(Q_a + Q_b) + 1) \cos(k_a + k_b)] + D [\sin \phi + \sin(\phi - Q_b) + \sin(\phi - Q_b - Q_a)], \quad (28)$$

$$B_k = \frac{J_1}{\gamma} [(\cos \phi - 1) + (\cos(\phi - Q_b) - 1) e^{-ik_b} + (\cos(\phi - Q_b - Q_a) - 1) e^{-i(k_a + k_b)}] - \frac{D}{\gamma} [(\sin \phi - 1) + (\sin(\phi - Q_b) - 1) e^{-ik_b} + (\sin(\phi - Q_b - Q_a) - 1) e^{-i(k_a + k_b)}], \quad (29)$$

$$C_k = \frac{J_2}{\gamma} [(\cos Q_a - 1) \cos k_a + (\cos Q_b - 1) \cos k_b + (\cos(Q_a + Q_b) - 1) \cos(k_a + k_b)], \quad (30)$$

$$D_k = \frac{J_1}{\gamma} [(\cos \phi + 1) + (\cos(\phi - Q_b) + 1) e^{-ik_b} + (\cos(\phi - Q_b - Q_a) + 1) e^{-i(k_a + k_b)}] - \frac{D}{\gamma} [(\sin \phi + 1) + (\sin(\phi - Q_b) + 1) e^{-ik_b} + (\sin(\phi - Q_b - Q_a) + 1) e^{-i(k_a + k_b)}], \quad (31)$$

$\bar{Q}_a$  را برای اختصار با  $Q_a$  نشان داده‌ایم و به همین صورت برای  $Q_b$ ،  $k_a$  و  $k_b$  عمل شده است. نشان داده شده است که ویژه مقادیر ماتریس هامیلتونی بوزونی با ویژه مقادیر ماتریس دینامیکی  $D = I_- M$  برابر است.  $I_-$  ماتریس واحدی است که درایه‌های

نیمه پایینی آن ۱- هستند [۲۰]. در هامیلتونی قطری شده

$$H_{LSW} = E_{cl} + \gamma S \sum_{k>0} [\lambda_+(k) \gamma_{+k}^\dagger \gamma_{+k} + \lambda_-(k) \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} + \lambda_+(k) + \lambda_-(k) - \gamma A_k], \quad (32)$$

جمله

$$E_{qu} = E_{cl} + \gamma S \sum_{k>0} [\lambda_-(k) + \lambda_+(k) - \gamma A_k], \quad (33)$$

تصحیحات کوانتومی در انرژی حالت پایه است. ویژه

مقادیر  $\lambda_{\pm}(k)$  به صورت زیر هستند

تاثیری در خواص اسپینی آنها ندارد و مدل برای تمام ناحیه کلاسیک باعث می‌شود تقارن  $SU(2)$  برای اسپین‌ها حفظ شود و حالت پایه مدل بی‌نظم بماند.

#### ۴. روش هولشتاین - پریماکوف

برای بررسی دقیق‌تر و نزدیک‌تر کردن نتایج محاسبات مدل به نتایج تجربی به دست آمده از ماده واقعی، باید افت و خیزهای کوانتومی اسپین‌ها در محاسبات لحاظ شوند. در ادامه برای بررسی تصحیحات کوانتومی روی سیمای فاز کلاسیکی از نظریه موج اسپینی هولشتاین - پریماکوف استفاده می‌کنیم [۱۸].

در نظریه موج اسپینی یک نظم کلاسیکی برای اسپین‌های شبکه فرض می‌شود و با بازنویسی هامیلتونی بر حسب تعداد مناسبی بوزون، اثر افت و خیز کوانتومی بر روی نظم کلاسیکی فرض شده مطالعه می‌شود. در همین راستا، برای انجام ساده‌تر محاسبات، به جای اسپین‌های  $S_{i,\alpha=x,y,z}^b$  از اسپین‌های دوران یافته  $\tilde{S}_{i,\alpha=x,y,z}^b$  استفاده می‌شود.

$$\begin{pmatrix} S_{j,x}^b \\ S_{j,y}^b \\ S_{j,z}^b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_j^b & 0 & \sin \theta_j^b \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta_j^b & 0 & \cos \theta_j^b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{S}_{j,x}^b \\ \tilde{S}_{j,y}^b \\ \tilde{S}_{j,z}^b \end{pmatrix}, \quad (22)$$

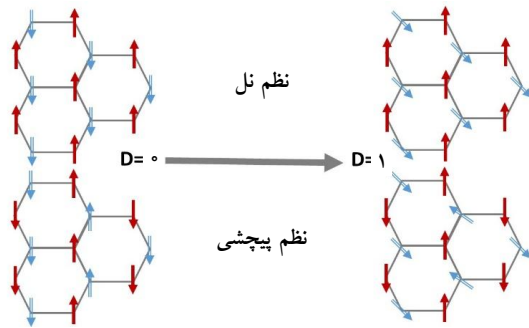
که  $b$  همان اندیس زیرشبکه است و  $\theta_j^b = \bar{Q} \cdot r_j$  و  $\theta_j^b = Q \cdot r_j + \phi$  و با زاویه  $\theta_j^b$  طوری دوران می‌یابد که اسپین‌های دوران یافته به صورت نل منظم شوند [۸]. حال بر طبق تبدیلات هولشتاین - پریماکوف خطی می‌توان تنها با استفاده از دو بوزون هامیلتونی بوزونی مربعی را به دست آورد [۱۹].

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+i}^1 &\approx a_i \sqrt{2S}, \\ \tilde{S}_{-i}^1 &\approx a_i^\dagger \sqrt{2S}, \\ \tilde{S}_{2i}^1 &= S - a_i^\dagger a_i, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+i}^2 &\approx b_i^\dagger \sqrt{2S}, \\ \tilde{S}_{-i}^2 &\approx b_i \sqrt{2S}, \\ \tilde{S}_{2i}^2 &= -S + a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \quad (24)$$

با استفاده از تبدیلات فوریه

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N/\gamma}} \sum_k c_k e^{ik \cdot r_i}; b_i = \frac{1}{\sqrt{N/\gamma}} \sum_k d_k e^{ik \cdot r_i}, \quad (25)$$



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات نظم نل و نظم پیچشی بر اثر برهم کنش ژیاالوشینسکی - موریای.

به محض این که منحنی واگنی کلاسیکی به مرز ناحیه اول بریلوین می رسد (ناحیه  $\lambda_D(II)$ ) جمله موهومی در رابطه (۱۰) حذف می شود. پس در این ناحیه می توانیم انرژی حالت پایه کوانتومی را بر روی منحنی های واگنی کلاسیک کمینه کنیم. محاسبات ما نشان می دهد که مقدار انرژی کوانتومی برای مقادیری از بردار پیچش اسپینی که محل تلاقی منحنی های واگنی کلاسیک و مرز ناحیه بریلوئن هستند، حقیقی و کمینه است. نکته ای که اینجا وجود دارد این است که منحنی های واگنی کلاسیک با تغییر پارامترهای مدل تغییر می کنند و هر نقطه از سیما فاز یک مقدار معین  $Q$  دارد. در این حالت نیز فاز نسبی بین دو اسپین از رابطه (۱۹) محاسبه می شود و با تغییر شدت برهم کنش ژیاالوشینسکی - موریای تغییر می کند. به عنوان مثالی برای این ناحیه، در شکل ۴، نظم مغناطیسی را برای مقادیری از پارامترهای مدل که بر روی مرز دو ناحیه  $\lambda_D(I) - \lambda_D(II)$  در سیما فاز هستند، رسم کرده ایم. برای این مقدار اسپین های زیر شبکه به صورت یک در میان به طرف بالا و پایین قرار می گیرند. جهت اسپین های زیر شبکه دوم نیز با توجه به مقدار برهم کنش ژیاالوشینسکی - موریای تغییر می کند. در  $D=0$  اسپین های دو ستون به طور کامل در خلاف جهت هم دیگر قرار می گیرند (شکل چپ پایین در شکل ۴). این نظم را می توانیم یک نظم ستونی بنامیم. با افزایش مقدار برهم کنش ژیاالوشینسکی - موریای اسپین های زیر شبکه ۲ در جهت عکس عقربه های ساعت دوران می کنند. مقدار این دوران در  $D=1$  برابر ۴۵ درجه است و برای شدت برهم کنش خیلی بزرگ به

$$\lambda_{\pm}(k) = \sqrt{\alpha_k \pm \beta_k}, \quad (34)$$

و  $\alpha_k$  و  $\beta_k$  با روابط

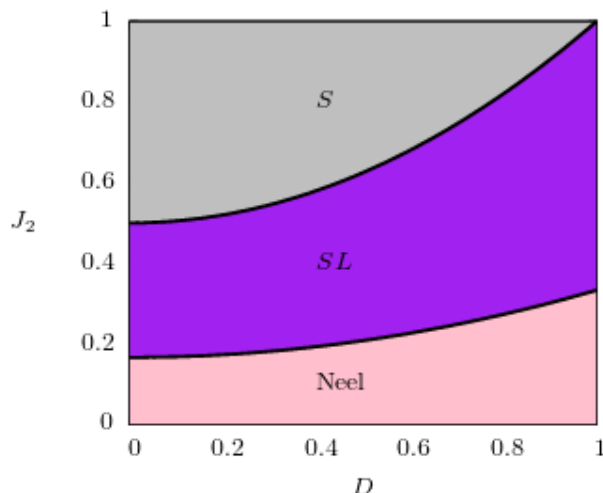
$$\alpha_k = A_k^2 - C_k^2 + |B_k|^2 - |D_k|^2, \quad (35)$$

$$\beta_k = \sqrt{4|A_k B_k - C_k D_k|^2 + (D_k B_k^* - B_k D_k^*)^2},$$

محاسبه می شوند. اگر حالت کلاسیکی فرض شده برای دستگاه مغناطیسی درست باشد انتظار داریم از نظریه موج اسپینی به نتایج فیزیکی برسیم. نتایج غیر فیزیکی نشان دهنده اشتباه در فرض نوع نظم مغناطیسی است. طبق رابطه (۳۳) برای این که انرژی کوانتومی فیزیکی و حقیقی باشد، باید ویژه مقادیر ماتریس هامیلتونی روی کل ناحیه اول بریلوئن حقیقی باشند. به عنوان مثال در ناحیه نل، مقدار  $Q$  و  $\Phi$  مشخص و یکتا است و می توان با رابطه ۳۳ تا ۳۵ انرژی حالت پایه و برانگیختگی های مدل را حساب کرد. این مقادیر که معرف طیف برانگیختگی مغناطیسی مدل هستند برای کل ناحیه اول بریلوئن حقیقی هستند. حقیقی بودن این طیف به معنای پایداری نظم نل در حضور افت و خیزهای کوانتومی است. همچنین بر طبق نظریه گلدستون این طیف در نقطه گاما بدون گاف است.

اما در ناحیه واگنی کلاسیک مدل،  $Q$  باید از روی منحنی واگنی کلاسیک انتخاب شود و با توجه به  $Q$  انتخاب شده فاز نسبی دو اسپین از روابط (۱۷) و (۱۸) تعیین شود. در قسمتی از فاز واگنی کلاسیک که شکل منحنی های واگنی کلاسیک به صورت منحنی های بسته حول نقطه  $\Gamma$  هستند (ناحیه  $\lambda_D(I)$ ) جمله مختلط در رابطه (۱۰) حذف نمی شود. بنابراین نمی توانیم فاز نسبی حقیقی برای اسپین های یک یاخته را از رابطه (۱۸) محاسبه کنیم. این فاز غیر حقیقی یک انرژی غیر حقیقی تولید می کند. این انرژی غیر حقیقی را به عنوان ناپایداری نظم اسپینی در این ناحیه تعبیر می کنیم. به عبارت دیگر، هیچ فرضی برای نظم مغناطیسی در این ناحیه وجود ندارد که به نتایج فیزیکی در نظریه موج اسپینی ختم شود. در این ناحیه بردار پیچش مشخصی انرژی را کمینه نمی کند و اسپین ها تقارن خود را حفظ می کنند. بنابراین این ناحیه می تواند گزینه مناسبی برای یافتن مایع اسپینی باشد.





شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) سیمای فاز مدل پس از اعمال تصحیحات کوانتومی. در این شکل فاز اسپین مایع با SL و فاز پیچشی با S مشخص شده است.

در سیمای فاز کلاسیکی را در سیمای فاز کوانتومی با  $\lambda_D(II)$  نشان داده‌ایم که معرف نظم پیچشی است و ناحیه اسپین مایع  $\lambda_D(I)$  با SL معرفی شده است.

### ۵. نتایج

نتایجی که با استفاده از تقریب نیمه کلاسیکی لاتینجر-تیزا برای سیمای فاز مدل هایزنبرگ  $J_1-J_2$  پادفرومغناطیس شبکه لانه زنبوری با برهم‌کنش ژیاوشینسکی-موریا به دست آمد، نشان دهنده دو فاز نل پیچیده شده و واگنی کلاسیکی در این سیمای فاز است. خط  $J_2 = (1+D^2)/6$  این دو فاز را از هم دیگر جدا می‌کند. در فاز نل پیچیده شده، میزان پیچش جهت اسپین‌های زیرشبکه دوم نسبت به فاز نل، وابسته به بزرگی  $D$  است. در فاز واگنی کلاسیکی، واگنی مانع ایجاد نظم کلاسیکی معین برای اسپین‌ها در حالت پایه مدل می‌شود. در ادامه برای بررسی اثر افت و خیزهای کوانتومی بر روی پایداری فازهای کلاسیک به دست آمده، از روش موج اسپینی خطی هولشتاین-پریماکوف استفاده می‌شود. این محاسبات، علاوه بر تایید پایداری نظم نل در برابر افت و خیزهای کوانتومی، نشان می‌دهد که در ناحیه واگنی که  $J_2 > (1+D^2)/2$  است، وارد کردن افت و خیزهای کوانتومی باعث ایجاد باعث ایجاد نظم در

۹۰ درجه می‌رسد. با تغییر پارامترهای مدل در ناحیه  $\lambda_D(II)$ ، منحنی‌های واگنی کلاسیکی حول نقاط K کوچک‌تر می‌شوند و نقاط تقاطع آنها با مرز ناحیه بریلوئن از M تا K تغییر می‌کند. به هرحال، مقدار بردار موج پیچش در کل این ناحیه به شکلی است که باعث پیچش اسپین‌های یک زیرشبکه نسبت به هم می‌شود (شکل ۵). بنابراین اسم این فاز را فاز پیچشی می‌نامیم. این فاز در حضور برهم‌کنش ژیاوشینسکی-موریا به فاز پیچشی پیچیده شده تبدیل می‌شود.

این محاسبات نشان می‌دهد که بعد از وارد کردن افت و خیزهای کوانتومی با استفاده از محاسبات موج اسپینی از مجموعه همه نقاطی که انرژی کلاسیکی را کمینه می‌کنند یکی از آنها انتخاب می‌شود. این انتخاب یکتا از منحنی واگنی کلاسیک، باعث می‌شود اسپین‌ها با یک جهت گیری معین انرژی حالت پایه را کمینه کنند. به این پدیده که افت و خیز در دستگاه نظم ایجاد می‌کند، ایجاد نظم توسط بی‌نظمی می‌گویند. پدیده ایجاد نظم توسط بی‌نظمی در ناحیه  $\lambda_D(II)$  از سیمای فاز اتفاق می‌افتد. این پدیده ناحیه واگنی کلاسیک را به دو قسمت تقسیم می‌کند. ناحیه  $\lambda_D(II)$  با ایجاد نظم مغناطیسی به ناحیه نظم پیچشی تبدیل می‌شود و ناحیه  $\lambda_D(I)$  که با حفظ تقارن  $SU(2)$  گزینه وجود فاز اسپین مایع باقی می‌ماند. ناحیه

تایید وجود فاز اسپین مایع کوانتومی در این ناحیه بهتر است با استفاده از روش‌های عددی، شکست تقارن‌های انتقالی و دورانی شبکه بررسی شود. همچنین بررسی نوع برانگیختگی‌ها اسپینی در این ناحیه مهم است.

دستگاه اسپینی می‌شود. اما برای  $J_4 < (1+D^2)/6 < (1+D^2)/2$  افت و خیزهای کوانتومی هیچ نظمی را نمی‌توانند پایدار کنند و همچنان این ناحیه گزینه مناسبی برای یافتن فاز اسپین مایع کوانتومی باقی می‌ماند. برای

### مراجع

1. A Y Kitaev, *Ann. Phys.*, **303** (2003) 2.
2. Y-C He, D N Sheng, and Y Chen, *Phys. Rev. Lett.*, **112** (2014) 137202.
3. A Koga and N Kawakami, *Phys. Rev. B*, **63** (2001) 144432.
4. P Chandra and B Doucot, *Phys. Rev. B*, **38** (1988) 9335.
5. B K Clark, D A Abanin, and S L Sondhi, *Phys. Rev. Lett.*, **107** (2011) 087204.
6. A Mattsson., P Frojdh, and T Einarsson, *Eur. Phys. J. B*, **49** (1994) 3997.
7. H Mosadeq, F Shahbazi and S A Jafari, *J. Phys. Cond. Mat.*, **23** (2011) 226006.
8. A Mulder, R Ganesh, L Capriotti, and A Paramekanti, *Phys. Rev. B*, **81** (2010) 214419.
9. L Balents, *Nature*, **404**, (2010) 199.
10. S Okubo, *et. al.*, *Phys. Rev. B*, **86** (2012) 140401.
11. I Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Solids* **4** (1958) 241.
12. T Moriya, *Phys. Rev.* **120** (1960) 91.
13. F Keffer, *Phys. Rev.* **126** (1962) 896.
14. J M Luttinger and L Tisza, *Phys. Rev.* **70** (1946) 954.
15. D H Lyons and T A Kaplan, *Phys. Rev.* **120** (1960) 1580.
16. T A Kaplan and N Menyuk, *Philos. Mag.* **87** (2006) 3711.
17. M H Zare, F Fazileh, and F Shahbazi, *Phys. Rev. B*, **87** (2013) 224416.
18. T Holstein and H Primakoff, *Phys. Rev.*, **58** (1940) 1098.
19. P Fazekas, "Magnetism and electron correlations in strongly correlated systems", World scientific (2010).
20. M -W Xiao, *Arxiv.org:math-ph/0908.0787*.