

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

量子霍爾系統中的自旋 - 軌道交互作用及其對磁性與傳輸
性質之研究

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2112-M-029-008-

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

執行單位：東海大學物理學系

計畫主持人：楊楊楊

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 8 月 30 日

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

量子霍爾系統中的自旋－軌道交互作用及其對磁性與傳輸性質之研究

spin-orbit interaction in quantum Hall systems--its effects on magnetic and transport properties

計畫編號：NSC 94－2112－M－029－008－

執行期限：94 年 8 月 1 日至 95 年 7 月 31 日

主持人：楊明峰 執行機構及單位名稱：東海大學物理系
電子信箱(E'mail)位址：mfyang@thu.edu.tw

一、中文摘要

我們研究了二腳 (two-leg) 的樓梯模型。由先前的研究得知，該模型如果引進了反鐵磁的次近鄰，則系統擁有兩個相：Haldane 相和單態相 (rung-singlet)。但不久前，Starykh 等人提出了，除了前面提到的兩個相，還有第三個相：二聚化相 (columnar dimer)。在我們的研究中，我們計算了二聚化序參量，發現其序參量在熱力學極限下是不存在的。而且，我們還利用其他間接的數值證明，如分析 rung 自旋關聯函數的交點，string 關聯函數，和能隙等結果，均發現只有一個相變點的存在，而非兩個。因此，我們結論在 two-leg 的樓梯模型裏，並不存在二聚化相。

關鍵詞：二聚化相，自旋樓梯模型

Abstract

In this work, we investigate two-leg spin ladders. As is well known, if the next nearest neighboring couplings are considered, there are two phases existing in this model: Haldane phase and Rung-singlet (RS) phase. However, O. A. Starykh et. al. proposed that there should be another phase, called columnar dimer (DC) phase, lying between the Haldane phase and the RS phase. We firstly calculated the dimer order parameter to detect the existence of the DC phase. We found that the order parameter disappears in the thermodynamic limit. We also proved the inexistence of the DC phase in other indirect ways. Through careful transition analysis on rung spin correlations, string correlations and the gaps, we inferred that only a phase boundary does exist in the model with the entire parameter range, but not two. Therefore we concluded that the DC phase is not present in the two-leg spin ladder.

Keywords: dimer phase, spin ladder

二、緣由與目的、結果與討論

自旋樓梯模型 (spin ladder model) 一直是人們感興趣的問題。不僅是因為實驗上，有此模型可類比的材料^[1]，而且在幾何結構上，這個模型是介於一維系統和二維系統，是連接一維系統和二維系統的橋樑。

樓梯模型可以有兩支腳 (two-leg)，三支腳 (three-leg) 或四支腳等。如果只有一支腳，那麼系統

就簡化成標準的一維鏈。如果在垂直梯腳的方向上有無限多支腳，那就成了標準的二維系統。對於 n -leg 的自旋樓梯模型，其哈密頓量寫成

$$H_n = J \sum_{\alpha=1, n} \sum_i S_{\alpha, i} \cdot S_{\alpha, i+1} + J_{\perp} \sum_{\alpha=1, n-1} \sum_i S_{\alpha, i} \cdot S_{\alpha+1, i} \quad (1)$$

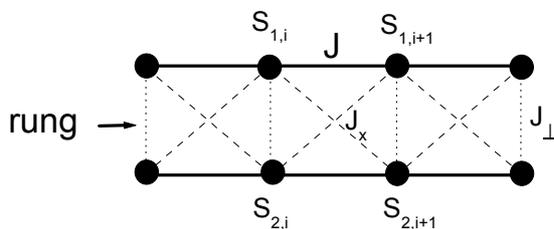


圖 1 自旋樓梯模型。

自旋樓梯模型在某方面和一維自旋模型具有相同的特徵。比如說，當梯腳的數目為奇數時，系統是沒有能隙的。反之，當梯腳的數目為偶數時，系統是有能隙的^[2]。首先，S. R. White 利用 DMRG 的數值結果顯示了 two-leg 自旋樓梯模型 ($J_{\perp} = J, n = 2$) 和一維反鐵磁 $S=1$ 自旋系統的關係。發現 two-leg 自旋樓梯模型中的兩個次近鄰自旋，可視為一個有效的 $S=1$ 自旋。整個系統的基態是非簡併的，被稱為 rung-singlet (以後簡稱 RS 相)。這個系統有能隙， $\Delta \sim 0.41$ ，而且其 string 關聯函數在熱力學極限下仍然存在^[3]。而 X. Q. Wang 研究了 three-leg 的自旋樓梯模型。他們利用的 DMRG 數值結果來比較此樓梯模型和一維 $S=3/2$ 自旋系統^[4]。

當自旋樓梯模型中加入次近鄰時，其基態物理性質也吸引了許多人的研究。之前提到，在沒有次近鄰作用時，兩個次近鄰自旋，可視為一個有效的 $S=1$ 自旋。其經典的圖像如圖 2 (a) 所示

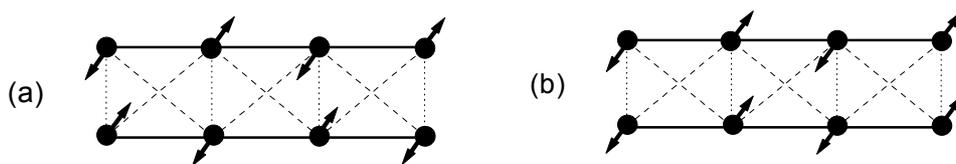


圖 2 RS 相和 Haldane 相的經典圖像。

另一方面，考慮次近鄰相互作用 J_x 而且其強度非常大，我們可以想像，受到次近鄰相互作用的影響，同一個 rung 兩端的自旋將同向，因此兩個近鄰自旋，可視為一個有效的 $S=1$ 自旋。其圖像如圖 2 (b) 所示。此時的基態被稱為 Haldane 相。但是，如果慢慢的降低次近鄰作用相互作用，由於次近鄰作用和近鄰作用都是反鐵磁，因此自旋面臨了阻挫問題，基態可能不再像我們描述得那麼簡單，而且會有相變發生。

X. Q. Wang 利用 DMRG 精確地給出了 two-leg 的相圖^[5] 和相邊界。其相邊界的關係約為 $J_{\perp} \sim 2J_x$ (在

小 J_x 時)，顯示在圖3。他的研究還發現，當 $J_x \geq 0.287$ 時，這兩個相的相變點是屬於一階相變。當 $J_x \leq 0.287$ 時，相變點是屬於二階相變，而且如果系統處在相變點時，是沒有能隙的。此外，文章[6]還利用了是兩個次近鄰自旋或兩個最近鄰自旋可視為有效的 $S=1$ 自旋的性質，建立了其對應的 string 關聯函數來研究這兩個相的特性。

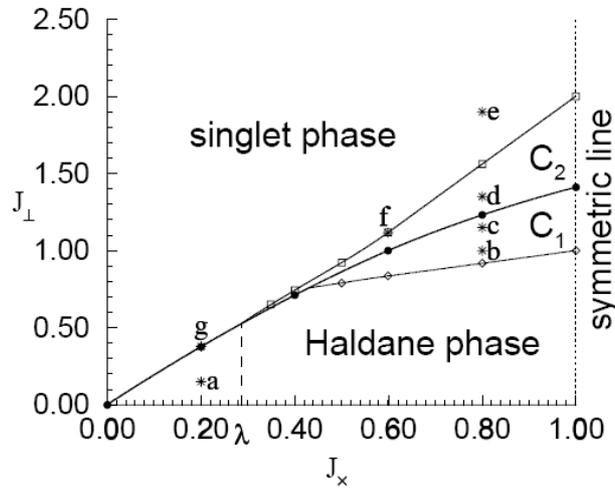


圖 3 Wang 對 two-leg 自旋樓梯給的相圖。

然而，在兩年前的一篇文章中^[7]，作者宣稱，除了這兩個相，還存在第三個相，被稱為 columnar dimer 相 (DC)。這個相處在 RS 相和 Haldane 相之間。由於這個相的範圍很小，所以之前的研究並沒有發現這個相的存在。其基態的圖像為 (虛線的方框代表了二聚化的形成)

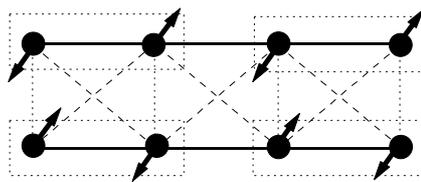


圖 4 文獻[7]提出的 DC 相。

我們對這個相是否存在表示疑問。因為這個結果和之前的許多結果並不一致。這個問題提起了我們的興趣。本章就是以這個觀點為出發點討論這第三個相，DC 相，是否存在。我們將展示我們的數值結果，然後很謹慎地對研究的結果來做分析。

考慮加入次近鄰的反鐵磁相互作用後，其哈密頓量為式 (1) 的 $n=2$ 再加上 J_x 的交叉項

$$H' = H_{n=2} + J_x \sum_i (S_{1,i} \cdot S_{2,i+1} + S_{1,i+1} \cdot S_{2,i}) \quad (2)$$

所有的自旋 $S_{\alpha,i}$ 均為 $S=1/2$ 自旋。其基態的相圖如圖 3 所示。由先前的工作得知，實際上的相邊界 (phase

boundary) 稍微的向曲線 $J_{\perp} = 2J_{\times}$ 下偏一點，也就是 RS 相的區域稍微大一點^[5,8]。然而，O. A. Starykh 指出有個 columnar dimer 相 (DC)，介於 RS 相和 Haldane 相之間。他們的工作也明確地給出來兩條相邊界。RS 相和 DC 相的相邊界為 $(J_{\perp})_{c,S} = 2J_{\times} - J_{\times}^2/\pi^2$ ；Haldane 相和 DC 相的相邊界為 $(J_{\perp})_{c,T} = 2J_{\times} - 5J_{\times}^2/\pi^2$ ^[7]。其相圖如圖 5 所示。我們的工作是在尋找這個相存在的可能性。

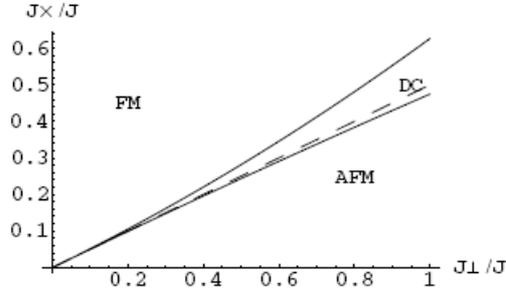


圖 5 文獻[7]新提出的相圖。

我們主要都討論 $J_{\times} = 0.2$ 的情形。因此，帶入 $(J_{\perp})_{c,S}$ 和 $(J_{\perp})_{c,T}$ 的公式後，我們得到，在此情形下，DC 相應存在於 $0.38 \leq J_{\perp} \leq 0.396$ 的區域。注意到相變點 $(J_{\perp})_{c,T}$ 是文獻中[5]曾給出來的相變點，是區分 RS 相和 Haldane 相的點。只考慮 $J_{\times} = 0.2$ 的情形已足夠，因為這條條件滿足了文獻 [7] 中使用的弱耦合場論的條件。在 DMRG 的計算中，我們採取開放邊界條件。我們在每個方塊中至少保存了 500 個態，而截斷誤差在 10^{-7} 的數量級。L 代表系統長度， $N = 2 \times L$ 為整個系統的自旋數目。

最直接檢測二聚化相的方法，是計算二聚化序參量的平均值。其定義如下

$$D \equiv \left\langle \left| \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} (S_{\alpha,i} \cdot S_{\alpha,i+1} - S_{\alpha,i+1} S_{\alpha,i+2}) \right| \right\rangle \quad (3)$$

在式 (3) 中，為了避免兩端的邊界效應，我們只取 i 為最中間的格點。 $\langle \dots \rangle$ 指的是對基態求平均值。我們取的點從 $J_{\perp} = 0.33$ 到 $J_{\perp} = 0.45$ 。其數值結果在圖 6。

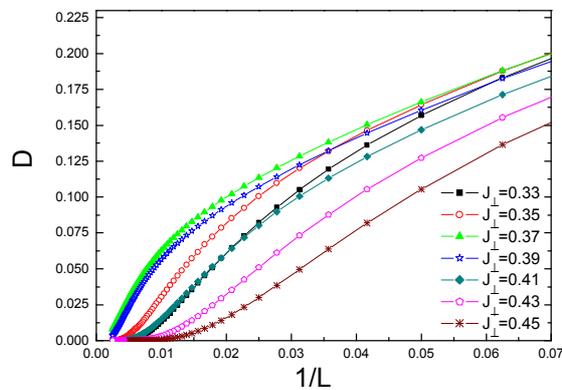


圖 6 不同 J_{\perp} 的二聚化序參量隨著系統大小的變化。

我們發現，所有的點，即使是 $J_{\perp} = 0.39$ ，（這個點顯然地處在 Starykh 所預言的 DC 相區域內。）序參量 D 在熱力學極限下 $L \rightarrow \infty$ 均不存在。而且，對於較大的系統，還有 $D \sim ce^{-L/\xi}$ 關係。 c 是某一個常數，而 ξ 是一種關聯長度。圖 7 就明顯地說明了其指數關係。我們更進一步地測量其斜率來決定關聯長度 ξ 。

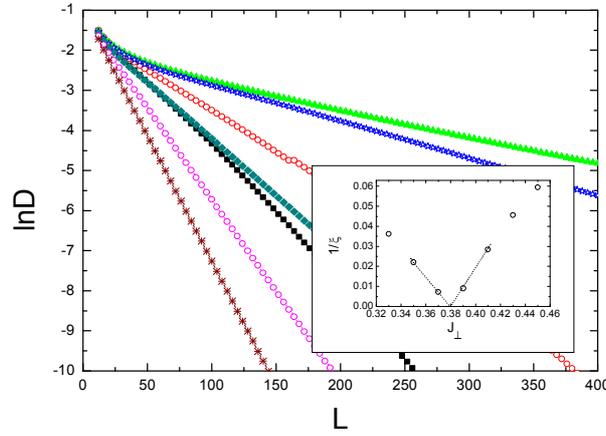


圖 7 不同 J_{\perp} 的二聚化序參量與長度 L 的指數關係。

在圖 7 中，我們還對 ξ 的倒數作圖。我們發現， $1/\xi$ 在 $J_{\perp} = 0.38$ 附近逐漸趨向於 0。也就是說，在這點附近的 ξ 發散，而這點剛好位於 RS 相和 Haldane 相的相邊界上（ $(J_{\perp})_{c,T} \sim 0.378$ ⁽⁵⁾），而不是 Starykh 所預言的另一個相變點 $(J_{\perp})_{c,S}$ 。從這類行為來看，在 $J_{\times} = 0.2$ 時，樓梯模型只有一個相變點，並非兩個，而且在 $J_{\perp} = 0.378$ 附近。

為了確認是否我們會錯失掉另一個相變點，我們使用另一種用來觀察其二階相變點的方法。這個方法被稱為有限尺度交叉法（finite-size crossing method）⁽⁹⁾。基本上，這方法是先將系統的哈密頓量拆成兩部分， $H \equiv H_0 + gV$ ，且假設系統相變是與參數 g 有關。基於有限尺度標度分析，兩個有不同大小系統的平均值曲線 $\langle v \rangle / L$ 會有一個交叉點 g_L 。而系統在熱力學極限下的相變點 g_c 可由不同的 g_L 來做外插得出。對於式 (2)，我們改寫為

$$H' = H_0 + J_{\perp} \sum_i S_{1,i} \cdot S_{2,i}$$

因此， $S_{1,i} \cdot S_{2,i}$ 對應於 $H \equiv H_0 + gV$ 的 v ，而 J_{\perp} 對應於 $H \equiv H_0 + gV$ 的 g 。同樣地，為了避免兩端的邊界效應，我們只取 $i=L/2$ 為最中間的格點。我們選了幾個不同大小尺寸的系統對 J_{\perp} 作圖。結果在圖 8。

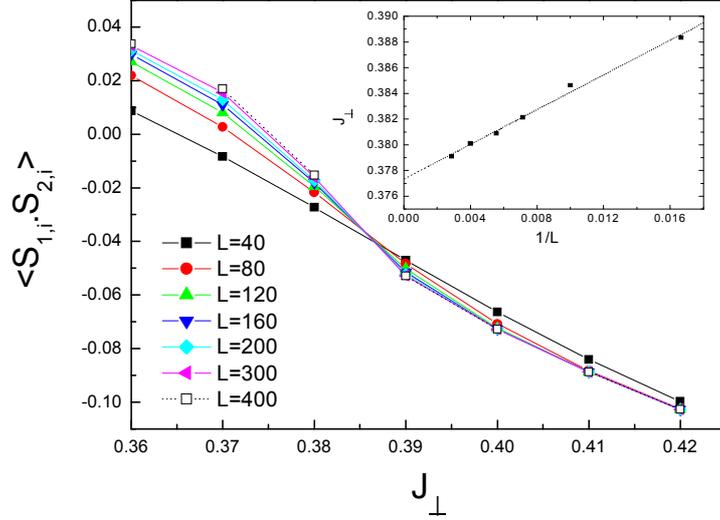


圖 8 不同尺寸下 $S_{1,i} \cdot S_{2,i}$ 與 J_{\perp} 的關係。

可以發現，對於不同曲線 L_1 和 L_2 ，都有一個交叉點 $g_L = J_{\perp,L}$ ，且都在 $J_{\perp,N} = 0.38 \sim 0.39$ 之間。如果我們對 $J_{\perp,L}$ 於 $1/L$ ($L = L_1 + L_2$) 作外插 (圖 8 的插圖)，其結果 $J_{\perp,c}$ 約為 0.378，與 Wang 所給於的一致。同樣地，其 $J_{\perp,L \rightarrow \infty}$ 的外插結果也說明，只有一個相變點，而非兩個。我們的數值結果再一次的否定了另一個相變點的存在。

到目前，我們的研究結果一直針對於尋找 DC 相的存在。現在，我們間接地利用兩種序參量來研究 RS 相和 Haldane 相的相變行為。前面說過，這兩種相，可分別視兩個次近鄰自旋或兩個在同一個 rung 上的近鄰自旋為一個有效的 $S=1$ 自旋。因此，這兩個相應能由 string 關聯函數來描述。我們定義兩種 string 關聯函數 \mathcal{G}_{even} 和 \mathcal{G}_{odd} 為

$$\mathcal{G}_P = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left\langle \tilde{S}_{P,i}^z \exp \left(i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} \tilde{S}_{P,k}^z \right) \tilde{S}_{P,j}^z \right\rangle \quad (4)$$

$P=\text{odd}$ 或 $P=\text{even}$ 。組合自旋 $\tilde{S}_{P,i}^z$ 被定義為 $\tilde{S}_{odd,i}^z = S_{1,i}^z + S_{2,i}^z$ ， $\tilde{S}_{even,i}^z = S_{1,i}^z + S_{2,i+1}^z$ 。文獻[10]提到，string 關聯函數可以被用來檢查 Haldane 相和 RS 相的相變點。同樣，我們只取 $j=L/2$ 為最中間的格點，而 i 是第二十個格點^[11]。圖 9 為不同尺寸大小的 string 關聯函數 \mathcal{G}_{even} 和 \mathcal{G}_{odd} 和 J_{\perp} 的關係。

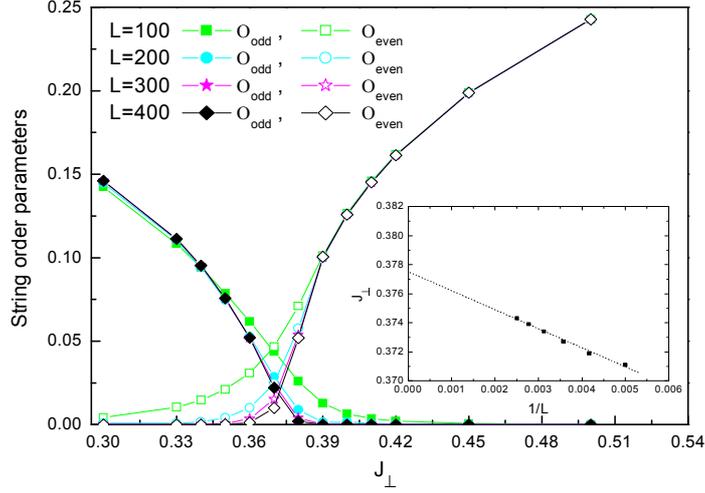


圖 9 不同尺寸下 string 關聯函數 \mathcal{G}_{even} 和 \mathcal{G}_{odd} 與 J_{\perp} 的關係。

我們可以看到，在 J_{\perp} 較小的區域， $\mathcal{G}_{odd} \neq 0$ 但 $\mathcal{G}_{even} = 0$ ，此時基態為 Haldane 相；但在 J_{\perp} 較大的區域， $\mathcal{G}_{even} \neq 0$ ， $\mathcal{G}_{odd} = 0$ ，此時基態為 RS 相。注意到因為我們研究的系統是有限尺寸，在圖 9 中每一組 L 會有明顯的 \mathcal{G}_{even} 和 \mathcal{G}_{odd} 交點 $J_{\perp,L}$ 。然後對熱力學極限作外推後， $J_{\perp,L \rightarrow \infty} \sim 0.378$ 與 Wang 給的相吻合。還是說明了只有一個相變點，並非兩個。

最後，我們對另一個相變點 $(J_{\perp})_{c,S}$ 的存在做進一步的確認。根據現象學重整化群 (phenomenological renormalization-group)，一個二階相變點應該能夠由尺寸為 L 和 $L+2$ 系統的 scaled gap， $L\Delta E_{\nu}$ ，的交點所決定^[12]。 ΔE_{ν} 代表激發能，當系統處在單態 (singlet) 時， $\nu = S$ ；當系統處在自旋三重態 (triplet) 時， $\nu = t$ 。這裏的數值結果是由嚴格對角化所得到的。我們在此考慮系統為週期邊界條件。系統大小為從 $L=6$ 到 $L=16$ 。在現討論的系統中，對於任何參數 J_{\perp} 和 J_{\times} ，基態是非簡併的。它的總自旋為 0，而且其動量 $K=0$ 。我們將 ΔE_t 定義為介於基態能量和在 $S_{tot}^z = 1$ 子空間中的最低能量（這個能級的總自旋為 1）的能量差；而 ΔE_S 定義為介於基態能量和在 $K=\pi$ 子空間中的最低能量且總自旋為 0 的能量差。

其數值結果分別在圖 10 和圖 11。如果系統處在 DC 相，則對於在 $K=0$ 和 $K=\pi$ 子空間中的最低能量且總自旋為 0 的兩個能級，應該是簡併的。原因是雖然二聚化破壞了平移對稱性，但是在系統平移了兩次之後，系統仍然恢復原狀。因此如果有二聚化情形出現，在熱力學極限下， ΔE_S 應該為 0。

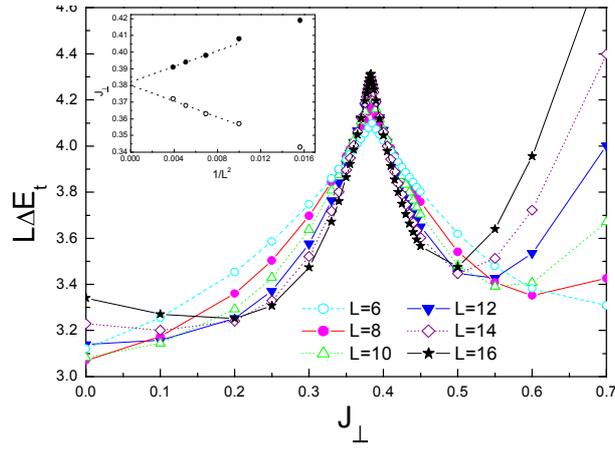


圖 10 不同尺寸的 $L\Delta E_t$ 與 J_{\perp} 的關係。

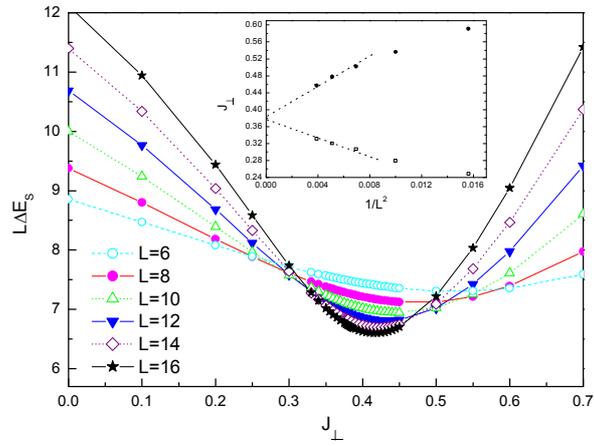


圖 11 不同尺寸的 $L\Delta E_s$ 與 J_{\perp} 的關係。

在圖 10 和圖 11 中，很明顯地，雖然不論是 ΔE_t 還是 ΔE_s ，不同的 L 之間都有兩個交叉點。但在我們利用外插法在熱力學極限下的交點後，（結果分別在圖 10 和圖 11 中的插圖）兩個交叉點結合在一個點，不是兩個點，而這個點在 $J_{\perp}=0.38$ 附近，仍然符合 Wang 給出的相變點。而且，我們對 ΔE_s 和 L^2 的關係求外插，其結果在圖 12 中。我們發現，在熱力學極限下 ΔE_s 仍然是有限的。而不是像之前說的， ΔE_s 在熱力學極限下會有消失的情形。因此，就從目前的分析結果來看，DC 相是不存在的。

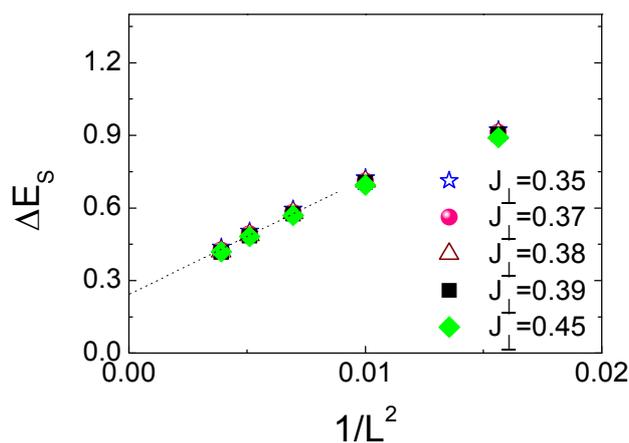


圖 12 不同 J_{\perp} 的 ΔE_s 對 $1/L^2$ 作外插。

三、計畫成果自評

由上述的結果可以看出，我們的工作釐清了早先的研究工作的一些矛盾。這對於國內外相關的後續研究工作有著相當程度的幫助。

此外，相關的研究成果[13] 已刊登於 Phys. Rev. B。

四、參考文獻

- [1] E. Dagotto and T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996); E. Dagotto, Rep. Prog. Phys. **62**, 1525 (1999); T. M. Rice, Z. Phys. B**103**, 165 (1997).
- [2] H. G. Evertz, Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics IX, Vol. **82** (1997).
- [3] S. R. White, Phys. Rev. B**53**, 52 (1996).
- [4] Xiaoqun Wang et. al, Phys. Rev. B**66**, 172405 (2002).
- [5] X. Q. Wang, Mod. Phys. Lett. B**14**, 327 (2000).
- [6] G. Fáth et. al., Phys. Rev. B**63**, 134403 (2001).
- [7] O. A. Starykh and L. Balents, Phys. Rev. Lett. **93**, 127202 (2004).
- [8] Z. Weihong et. al., Phys. Rev. B**57**, 11439 (1998).
- [9] L. Campos et. al, Phys. Rev. A**73**, R010303 (2006).
- [10] M. Nakamura, Physica B**329-333**, 1000 (2000).
- [11] 我們也計算了 $i=50$ 。即圖像和外差結果和 $i=20$ 相同。
- [12] H. H. Roomany and H. W. Wyld, Phys. Rev. D**21**, 3341 (1980).
- [13] H.-H. Hung, C.-D. Gong, Y.-C. Chen, and M.-F. Yang, "Search for quantum dimer phases and transitions in a frustrated spin ladder", Phys. Rev. B **73**, 2224433 (2006).