STUDI BANDING SIFAT STATIK MAGNETIK DALAM SISTEM SPIN KUANTUM NH_4CuCl_3

Wahyu Rudi Hartono dan Budhy Kurniawan
Jurusan Fisika , Universitas Indonesia, Depok 16424
e-mail : bkuru@fisika.ui.ac.id

ABSTRAK

STUDI BANDING SIFAT STATIK MAGNETIK DALAM SISTEM SPIN KUANTUM NH_4CuCl_3
Sebuah sistem kuantum NH_4CuCl_3 memiliki ruang grup monoklinik P_{21}/c dan terdiri dari rantai ganda pada sisi batas yang ditempati oleh oktahedra $CuCl_6$ sepanjang sumbu-a. Rantai ganda terletak pada sudut-sudut dan pusat dari unit sel dalam bidang bc dan dipisahkan oleh ion-ion NH_4^+. Gambaran dari interaksi pertukaran dalam rantai ganda diilustrasikan sebagai sebuah spin alternasi Heisenberg terdiri dari interaksi J_1 dan J_3 dengan interaksi Antar-Tetangga-Terdekat J_2. Plateau magnetisasi dari sistem ini dipelajari dengan teknik bosonisasi. Untuk mendapatkan gambaran fisis dan untuk menjelaskan fenomena plateau pada NH_4CuCl_3, kami menghitung energi keadaan dasar E_0 (N,δ) dan eksitasi pertama E_1 (N,δ).

Kata kunci : Sistem spin kuantum NH_4CuCl_3, teknik bosonisasi, Interaksi antar-tetangga-terdekat

ABSTRACT

A COMPARATIVE STUDY OF STATIC MAGNETIC PROPERTIES IN QUANTUM SPIN SYSTEM NH_4CuCl_3. A quantum spin system NH_4CuCl_3 belongs to the monoclinic space group P_{21}/c and comprises double chain of edge sharing $CuCl_6$ octahedra along the a-axis. The double chains are located at the corners and center of the unit cell in the bc plane and are separated by NH_4^+ ions. The feature of exchange interactions in the double chain are described as a spin-1/2 alternating Heisenberg chain consisting of J_1 and J_3 interactions with the Next-Nearest-Neighbour interaction J_2. Magnetization plateau of this feature interactions is investigated using Bosonization technique. In order to get information about the physical features and to explain plateaus phenomena on NH_4CuCl_3, we analytically calculate the exact ground state energy Eo (N, δ) and the lowest excited energy E_1 (N, δ).

Key words : Quantum spin system NH_4CuCl_3, bosonization technique, next-nearest-neighbour interaction.

PENDAHULUAN

NH_4CuCl_3 merupakan suatu sistem spin kuantum yang dimodelkan sebagai sistem spin-½ tangga Heisenberg yang terdiri dari dua pasang rantai *Heisenberg* (Gambar 1) dan dituliskan dalam *Hamiltonian*

$$H = J_2 \sum_i (S_i^u . S_{i+1}^u + S_i^l . S_{i+1}^l) + (1+\delta) \sum_i S_i^u . S_i^l + (1+\delta) \sum_i S_i^u . S_{i+1}^l \quad \text{..... (1)}$$

Di mana S_i^α (α = upper atau lower) adalah operator spin dengan spin ½. Dalam Hamiltonian ini, sistem dianggap sebagai dua rantai identik via interaksi vertikal (1 + δ) dan diagonal (1 - δ). Di sini kopling vertikal disebut "anak tangga " dalam sistem tangga.

Untuk sebuah sistem *Heisenberg* dengan interaksi

$$S_i . S_{i+1} = S_i^z . S_{i+1}^z + \tfrac{1}{2}\left(S_i^+ . S_{i+1}^- + S_i^- . S_{i+1}^+\right) \quad \text{..... (2)}$$

pertama kali, kami simpan matrik m x m reperesentasi dari S_i^z, S_i^+, S_i^- (matriks S_i^- merupakan konjugate *Hermitian* S_i^+) di mana i adalah kedudukan spin pada posisi kiri dan kanan, atas dan bawah rantai ganda. Dalam kerangka kerja dari Teori Medan Kontinum, alternasi ikatan (δ) memainkan peranan penting. Di bawah ini, kami akan menurunkan teori tersebut untuk menyelesaikan *Hamiltonian* sistem di atas.

PROSEDUR PENELITIAN

Sejak sistem kami tidak berubah (invarian) setelah dirotasi pada sumbu – z, komponen z dari total spin $S_{tot}^z = \sum_i S_i^z$ adalah sebuah bilangan kuantum yang baik. Sebagai fungsi medan magnet eksternal H, tingkat-tingkat energi dari *Hamiltonian* terbagi menjadi kelompok garis lurus dengan kemiringan $-M^z = -S_{tot}^z$. Dari sekian

Volume 3 No. 2, Februari 2002, hal : 59 - 62
ISSN : 1411-1098

banyak garis, hanya garis terendah yang berperan dalam proses magnetisasi. Kurva magnetisasi ditentukan dengan menentukan titik pertemuan antara garis terendah dengan pertambahan medan eksternal H. Oleh sebab itu, medan magnet H pada saat M^z berubah dari M-1 ke M adalah

$$H = H_M = E(M,0) - E(M-1,0) \quad \ldots\ldots (3)$$

Di mana E(M,0) merupakan energi terendah dari H dalam M tertentu. Untuk M^z order pada sistem berukuran L, $H_M z$ akan tetap hingga (*finite*) bahkan sampai batas termodinamikanya. Oleh karena itu, sebuah gap antara E(M,0) dan E(M+1,0) tidaklah menggambarkan keberadaan *plateau*, yang berlawanan dengan fakta yang menunjukkan bahwa medan kritis pada sistem magnetik berhubungan dengan gap. Diberikan variabel-variabel kerapatan :

$$m^z = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} M^z, \; (m^z) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} E(M^z,0),$$
$$(m^z = M^z = \text{konstan})$$

Persamaan (3) dapat ditulis :

$$H = \frac{d}{dm^z} \varepsilon(m^z)$$

dalam batas volume yang tak terhingga. Untuk menentukan H secara tunggal , ε (m^z) haruslah analitik pada m^z. Jika dua limit $\frac{d}{dm}\varepsilon(m)|_{m\to m^z+0}$ dan $\frac{d}{dm}\varepsilon(m)|_{m\to m^z-0}$ berbeda, maka plateau muncul pada m^z.
Berikut ini metoda standar dalam sistem fermion :

$$E(M^z, 0) - HM^z$$

sebagai energi *eigenvalue*
Pertama, kami ubah pusat koordinat medan H ke Ho pada saat magnetisasi $M^z = M$:

$$H = Ho + H'$$

di mana

$$Ho = H_M = E(M,0) - E(M-1,0)$$

Umumnya , untuk melihat bagaimana kurva magnetisasi berlaku dalam batas titik (Ho,M), reduksi tingkat energi

$$E_M(M^z\text{-}M) \equiv E(M^z,0) - E(M,0) - Ho\,(M^z - M)$$

Perbedaan energinya

$$[E(M^z,0) - HM^z] - [E(M,0) - HM] =$$
$$E_M(M^z - M) - H'(M^z - M)$$

yang hanya melibatkan kuantitas yang *finite* bahkan untuk L >> 1 selama dianggap eksitasi - eksitasi yang *finite* memenuhi ($M^z - M$) / L << 1. Jika *gap* berhubungan dengan eksitasi satu partikel.

$$E_M(1) \equiv E(M+1,0) - E(M,0) - Ho$$

akan tetap *finite* dalam batas termodinamika, sehingga dimungkinkan sebuah *plateau* magnetisasi muncul di sekitar H = Ho. Dengan kata lain keberadaan sebuah *gap* dalam eksitasi pertama menunjukkan keberadaan *plateau* pada kurva magnetisasi.

Kasus J_2 Besar

Terdapat lebih dari satu daerah di mana Teori Medan berdasarkan *weak-coupling perturbation* diperbolehkan: $J_2 >> |1+\delta|, |1-\delta|$. Inilah permasalahan rantai ganda yang terkopel via interaksi zig-zag. Karena perhitungannya sama dengan [2] [3], kami hanya memberikan hasil akhir. Kami berikan lima interaksi yang penting :

1. $\cos k_f$
   $X : \cos\left[(6-4k_f)X + 2\sqrt{2}R_{sym}\phi_{sym} - k_f\right]$
   $-\delta \sin k_f$
   $X : \sin\left[(6-4k_f)X + 2\sqrt{2}R_{sym}\phi_{sym} - k_f\right]$
2. $\cos k_f : \cos\left[2\sqrt{2}R_{diff}\phi_{diff} + k_f\right]$
   $\delta \sin k_f : \sin\left[2\sqrt{2}R_{diff}\phi_{diff} + k_f\right]$
3. $\delta : \cos\left[\frac{\sqrt{2}}{R_{diff}}\phi_{dif}\right]$

di mana boson ϕ_{sym} dan ϕ_{diff} dipenuhi dengan cara merekombinasi dua boson ϕ_u dan ϕ_l yang berhubungan dengan rantai atas dan bawah (*upper* dan *lower*).

$$\phi_{sym} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_u + \phi_l), \quad \phi_{diff} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_u + \phi_l)$$

Catatan bahwa hanya bagian ϕ_{sym} yang penting dalam proses magnetisasi. Dengan pendekatan *weak-coupling*, parameter R_{sym} dan R_{diff} adalah

$$R_{sym} = \left[1 + \frac{2}{\pi J 2 \sin k_f} + \frac{4\Delta}{\pi}\sin k_f\right]^{1/4}$$

$$R_{diff} = \left[1 - \frac{2}{\pi J 2 \sin k_f} + \frac{4\Delta}{\pi}\sin k_f\right]^{-1/4}$$

di sini diperkenalkan anisotropi pada sumbu – z ke dalam interaksi NNN. Pada $m^z = 0$ ($K_f = \pi/2$), kelima interaksi di atas hilang jika δ = 0. Jika J_2 dan Δ positif, nilai δ menyebabkan sebuah *gap* pada bagian ϕ_{sym} saja pada

$m^z = 0$.

Untuk $m^z \neq 0$, tipe (1) interaksi yang ada tidak berkontribusi dan bagian ϕ_{sym} tetap tanpa *gap*. Tanpa memperhatikan nilai δ, ketika bagian ϕ_{diff} menjadi *gap* karena adanya *backscattering*.

Sebuah pernyataan di sini tentang interaksi order yang lebih tinggi (interaksi 3-D). Sedikit perhitungan menunjukkan bahwa interaksi.

$$\cos\left[8k_f x - 4\sqrt{2}R_{sym}\phi_{sym}\right]$$

berasal dari bagian xy dari *interchain coupling*. Hal ini sebanding pada $m^z = 1/4$ dan akan menghasilkan sebuah *gap* pada bagian ϕ_{sym} jika radius memenuhi $R_{sym} < 1/2$. Untuk J >>, di mana pendekatan *weak – coupling* berlaku, R_{sym} lebih luas dibandingkan nilai kritis ½ . Pergeseran 1-*site* dalam arah tangga adalah diskrit simetri dari medan ϕ_{sym}:

$$\phi_{sym} \rightarrow \phi_{sym} - \frac{\sqrt{2}}{4R_{sym}}$$

$\frac{\sqrt{2}}{4R_{sym}}$ sebanding dengan periode *cosine* : $\cos\left[4\sqrt{2}R_{sym}\phi_{sym}\right]$. Di sisi lain , periode ϕ_{sym} sendiri adalah dua kali lebih luas dari potensial *pin*. Oleh karena itu , simetri pergeseran dalam arah tangga secara spontan pecah menjadi 2- *site* (dalam rantai, pergeseran 4–*site*). Hasilnya, ada dua keadaan dasar yang muncul.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dalam bagian ini, kami menerangkan bagaimana interaksi antara J_2 dan δ dapat menstabilkan *plateau* pada $m^z = 1/4$. Untuk kondisi di mana $|1-\delta|, J_2 << 1+\delta$, digunakan model tangga dari *Hamiltonian* di mana sistem dianggap sebagai penjumlahan antara interaksi vertikal (1+δ) dan diagonal (1-δ). Kami mengasumsikan bahwa panjang L dari rantai adalah dua kali dari jumlah seluruh anak tangga (2N) yang terdapat pada tangga (Gambar 1) di mana L = 4N. Sejumlah N dari 2N anak tangga diisi oleh ikatan-ikatan *singlet* dan yang lainnya *triplet* dengan $S^z = 1$. Jadi, ada $\binom{2N}{N}$ keadaan kembar (degenerasi). *Hamiltonian* yang dihasilkan dapat dipandang sebagai model 1-D yang terdiri dari 2N kedudukan untuk masing-masing dari empat fungsi keadaan $|s\rangle$, $|t(1)\rangle$, $|t(0)\rangle$, $|t(-1)\rangle$. Energi total dan komponen z dari total *spin* adalah

$$E = (1+\delta)(2N - N(s)) \text{ dan}$$

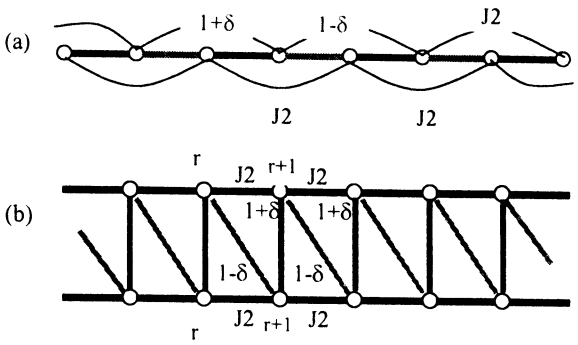
$$M^z = N(T(1) - N(T(-1)).$$

Kami batasi *Hamiltonian* hingga *pertubasi* orde pertama untuk keadaan dasar pada M^z tertentu dan *Hamiltonian* dapat ditulis :

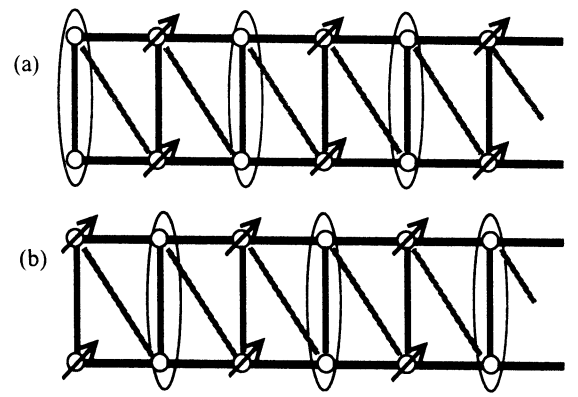
$$H_{eff} = \tfrac{1}{4}[2J_2 - (1-\delta)] \sum_{r=anaktangga}^{2N} \left(d_r^+ . d_{r+1} + d_{r+1} . d_r\right) +$$

$$\tfrac{1}{4}[2J_2 + (1-\delta)] \sum_{r=anaktangga}^{2n} n_r . n_{r+1}$$

di mana $d_r^+(d_r)$ = operator fermion, yang menghasilkan sebuah *triplet* $|t(1)\rangle$ *singlet* $|s\rangle$ pada anak tangga yang ke –r , dan operator jumlah n_r Untuk *Hamiltonian* H_{eff}



Gambar 1. (a) *Hamiltonian* Model rantai [1], (b) *Hamiltonian* Model tangga [1]



Gambar 2. (a), (b) Dua keadaan dasar kembar.Tanda oval menyatakan *Dimer Singlet* [1]

dengan jumlah *fermion* tetap dan kasus di mana $|2J_2 - (1-\delta)| << 2J_2 + (1-\delta)$, keadaan dasarnya dinyatakan oleh :

$$|G.S.-A\rangle = \prod_{r=ganjil} d_r^+ |0\rangle_F$$

atau

$$|G.S.-B\rangle = \prod_{r=genap} d_r^+ |0\rangle_F$$

Yang menunjukkan adanya *simetri breaking* pada keadaan dasar dalam volume tak terhingga. Satu di antaranya berhubungan dengan *plateau*.

Volume 3 No. 2, Pebruari 2002, hal : 59 - 62
ISSN : 1411-1098

KESIMPULAN

Kami telah menunjukkan analisis bosonisasi dalam batas $|J_2|, |\delta| << 1$ dimana interaksi Antar-Tetangga-Terdekat (J_2) dan alternasi (δ) sebagai gangguan kecil terhadap spin-1/2 rantai *Heisenberg*. Hasil tersebut menunjukkan adanya dua keadaan dasar pada pusat dan batas *Brillouin zone* dari *Hamiltonian* model tangga. Kami dapat menyimpulkan bahwa dua keadaan dasar terletak pada $q = 0$ dan $q = \pi/2$. Hasil dari kesimpulan ini konsisten dengan *Oshikawa* et.al [4].

DAFTAR ACUAN

[1]. KEISUKE TOTSUKA, *Phys.Lett.A* **228** (1997)
[2]. K.KATSUMATA, H.HORI, T. TAKEUCHI, M.DATE, A.YAMAGISHI, AND J.P.RENARD, *Phys.Rev.Lett.*, **63** (1989) 86
[3]. K.Hida, *J.Phys.Soc.Jpn.*, **63** (1994) 2359; K.OKAMOTO, *Solid State Com.*, **98** (1995) 245
[4]. M.OSHIKAWA, M.YAMANAKA,and I.AFFLECK, *Phys.Rev.Lett.*, **78** (1987) 1984