

ANALISIS MODEL HEISENBERG UNTUK BAHAN ANTIFERROMAGNET DENGAN KEKISI SEGITIGA ANISOTROPIK

Denny Darmawan

Laboratorium Komputasi Fisika, Jurdik Fisika, FMIPA
Universitas Negeri Yogyakarta

darmawan@uny.ac.id

Abstrak

Telah ditinjau model Heisenberg untuk bahan antiferromagnet yang memiliki bentuk kekisi segitiga anisotropik dimana terdapat kompetisi interaksi antara tetangga terdekat (*nearest neighbour*), tetangga terdekat berikutnya (*next nearest neighbour*) dan kopling antar rantai.

Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa interaksi tetangga terdekat berikutnya cenderung meningkatkan keteraturan (*ordering*) dalam model Heisenberg untuk bahan tersebut. Interaksi ini menurunkan ketakteraturan (*disordering*) pada fase transisi antara fase Neel dengan fase spiral yang dibangkitkan oleh kompetisi antara interaksi kopling antar rantai dengan interaksi tetangga terdekat.

Kata kunci: sistem terfrustrasi, antiferromagnet

PENDAHULUAN

Dalam kekisi antiferromagnetik, spin-spin pada dua titik kekisi yang berdekatan akan cenderung saling berjajar berlawanan arah untuk meminimalkan energi sistem yang disebut sebagai interaksi tukar. Fenomena yang menarik terjadi untuk kasus kekisi antiferromagnetik 2 dimensi yang berbentuk segitiga. Ketika spin-spin pada dua titik kekisi yang berdekatan telah berjajar berlawanan arah, maka spin pada titik ketiga pada kekisi segitiga tidak dapat menemukan arah yang dapat memenuhi interaksi tukar. Peristiwa ini dikenal sebagai frustrasi magnetik.

Kajian teoretik mengenai sistem terfrustrasi pada bahan antiferromagnetik pertama kali dilakukan pada sistem kekisi segitiga dengan menggunakan model Ising (Wannier, 1950). Fenomena ini secara eksperimental teramati untuk bahan antiferromagnetik seperti Cs_2CuCl_4 (Coldea, *et. al.*, 2003) dan keluarga bahan superkonduktor organik $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{X}$ (Merino *et. al.*, 1999).

Dalam makalah ini akan ditinjau sistem terfrustrasi pada model Heisenberg untuk bahan antiferromagnetik dengan kekisi segitiga anisotropik yang dibangkitkan oleh kompetisi antara interaksi tetangga terdekat pada rantai spin dengan interaksi antar-rantai dan interaksi tetangga terdekat berikutnya sepanjang rantai spin. Metode yang digunakan adalah dengan menerapkan teori gelombang spin linear pada model Heisenberg spin setengah.

MODEL HEISENBERG

Model Heisenberg menyatakan interaksi antar spin pada titik-titik kekisi yang berbeda. Hamiltonan dari sistem ini dinyatakan dengan:

$$H = \sum_{RR'} J(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \mathbf{S}_R \cdot \mathbf{S}_{R'} \quad (1)$$

dimana \mathbf{S}_R dan $\mathbf{S}_{R'}$ merupakan operator spin dan $J(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ merupakan tetapan tukar untuk interaksi antara spin \mathbf{S}_R yang berada di \mathbf{R} dan spin $\mathbf{S}_{R'}$ yang berada di \mathbf{R}' . Tetapan ini bersifat simetrik

sehingga $J(\mathbf{R}' - \mathbf{R}) = J(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ dan bernilai negatif untuk bahan antiferromagnet.

Dalam model ini, spin dinyatakan sebagai operator vektor yang memiliki arah sebarang pada ruang 3 dimensi, sehingga dapat dinyatakan dalam bentuk komponennya sebagai:

$$\mathbf{S}_R = S_R^x \hat{x} + S_R^y \hat{y} + S_R^z \hat{z} \quad (2)$$

dimana komponen spin akan mematuhi relasi komutasi spin.

Hamiltonan sistem ini dapat juga dinyatakan dalam operator kenaikan dan penurunan spin sebagai:

$$H = \sum_{RR'} J(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \left\{ \frac{1}{2} (S_R^+ S_{R'}^- + S_R^- S_{R'}^+) + S_R^z S_{R'}^z \right\} - g \mu_B B \sum_R S_R^z \quad (3)$$

dengan

$$\begin{aligned} S_R^+ &= S_R^x + iS_R^y \\ S_R^- &= S_R^x - iS_R^y \end{aligned} \quad (4)$$

TEORI GELOMBANG SPIN LINEAR

Pada kasus bahan ferromagnetik ideal (tanpa impuritas) dengan suhu nol mutlak, semua spin akan berjajar pada satu arah yang dimisalkan sebagai arah $+z$. Ketika suhu mulai dinaikkan, spin-spin tersebut mulai berosilasi di sekitar arah keteraturannya dan selanjutnya membangkitkan gelombang pada kekisi magnetik yang disebut sebagai gelombang spin. Gelombang ini terkuantisasi sebagai *magnon* yang merupakan partikel kuasi bertipe boson.

Dalam teori gelombang spin, model Heisenberg diselesaikan dengan operator penciptaan dan pemusnahan boson yang dikenal sebagai wakilan Holstein-Primakoff yang didefinisikan sebagai (Holstein dan Primakoff, 1940):

$$\begin{aligned} S_R^+ &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_R^+ a_R}{2S} \right)^{1/2} a_R \\ S_R^- &= \sqrt{2S} a_R^+ \left(1 - \frac{a_R^+ a_R}{2S} \right)^{1/2} \\ S_R^z &= S - a_R^+ a_R \end{aligned} \quad (5)$$

Dengan mengabaikan interaksi antar boson, bentuk wakilan Holstein-Primakoff pada persamaan (5) dapat dinyatakan dalam bentuk linear sebagai :

$$\begin{aligned} S_R^+ &= \sqrt{2S} a_R \\ S_R^- &= \sqrt{2S} a_R^+ \\ S_R^z &= S - a_R^+ a_R \end{aligned} \quad (6)$$

dimana a^+ dan a merupakan operator penciptaan dan pemusnahan boson dan mematuhi aturan komutasi boson: $[a, a^+] = 1$.

Terdapat dua cara untuk menerapkan wakilan Holstein-Primakoff pada model Heisenberg bahan antiferromagnet. Cara pertama adalah dengan menggunakan notasi wakilan Holstein-

Primakoff yang berbeda untuk subkekisi yang berbeda. Untuk subkekisi dengan spin naik, digunakan persamaan (6), sedangkan untuk subkekisi dengan spin turun, digunakan persamaan:

$$\begin{aligned} S_R^+ &= \sqrt{\gamma S} b_R \\ S_R^- &= \sqrt{\gamma S} b_R^+ \\ S_R^z &= S - b_R^+ b_R \end{aligned} \quad (7)$$

Cara kedua adalah dengan merotasikan subkekisi spin turun ke kerangka lokal sehingga pada kerangka lokal ini seluruh spin berarah pada arah +z. Melalui rotasi ini, persamaan (6) dapat diterapkan pada seluruh subkekisi. Untuk kekisi berbentuk persegi, transformasi rotasi tersebut dinyatakan sebagai:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_R^z &= -S_R^z \\ \tilde{S}_R^x &= S_R^x \\ \tilde{S}_R^y &= -S_R^y \end{aligned} \quad (8)$$

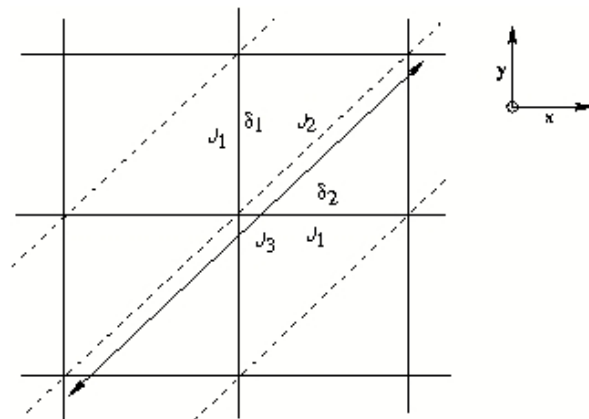
sehingga

$$\begin{aligned} \tilde{S}_R^z &= S_R^+ \\ \tilde{S}_R^x &= S_R^- \end{aligned} \quad (9)$$

KEKISI SEGITIGA ANISOTROPIK ANTIFERROMAGNET

Ditinjau kekisi segitiga anisotropik yang ditunjukkan pada Gambar 1. Interaksi tukar dari titik kekisi tetangga terdekat dinyatakan oleh J_2 , interaksi tukar antar rantai spin terdekat (kopling antar rantai) dinyatakan oleh J_1 , dan interaksi tukar dari tetangga terdekat berikutnya dinyatakan oleh J_3 .

Interaksi tukar J_2 berusaha menyusun pasangan spin dalam arah yang sejajar dan saling berlawanan, namun interaksi tukar J_3 akan memaksa salah satu dari pasangan spin tersebut untuk sejajar berlawanan arah dengan tetangga terdekat berikutnya. Kompetisi antar interaksi tukar ini selanjutnya memicu munculnya frustrasi magnetik.



Gambar 1. Kekisi segitiga anisotropik. δ_1 dan δ_2 menyatakan jarak antar titik kekisi, J_1 menyatakan interaksi tukar antar rantai, J_2 menyatakan interaksi tukar dengan tetangga terdekat, dan J_3 menyatakan interaksi tukar dengan tetangga terdekat berikutnya.

Hamiltonan dari model ini dinyatakan sebagai:

$$H = \sum_R J_3 S_R \cdot S_{R+2(\delta_1+\delta_2)} + J_2 S_R \cdot S_{R+\delta_1+\delta_2} + J_1 S_R \cdot S_{R+\delta_1} + J_1 S_R \cdot S_{R+\delta_2} \quad (10)$$

Untuk mendapatkan keadaan dasar dari sistem, spin akan dianggap sebagai vektor klasik dengan panjang S dan meminimkan energinya.

Dalam kekisi balik, interaksi tukarnya dapat dinyatakan sebagai:

$$J(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} J(\delta) e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta} \quad (11)$$

dimana \mathbf{k} merupakan vektor gelombang pada zona Brillouin. Berdasarkan bentuk kekisinya, maka interaksi tukar dari model yang ditinjau mengambil bentuk

$$J(\mathbf{k}) = J_3 \cos(2k_x + 2k_y) + J_2 \cos(2k_x + 2k_y) + J_1 \cos(k_x) + J_1 \cos(k_y) \quad (12)$$

Sistem akan memiliki energi terendah ketika $k = Q$ yang disebut dengan vektor gelombang keteraturan (*ordering wave vector*) yang diperoleh dengan meminimkan $J(k = Q)$:

$$\frac{\partial J(\mathbf{Q})}{\partial Q_x} = 0 \quad \text{dan} \quad \frac{\partial J(\mathbf{Q})}{\partial Q_y} = 0 \quad (13)$$

Dari persamaan (13) diperoleh bahwa $Q_x = Q_y$ sehingga vektor gelombang keteraturan merupakan salah satu penyelesaian dari

$$J_1 \sin(Q_x) + J_2 \sin(2Q_x) + 2J_3 \sin(4Q_x) = 0 \quad (14)$$

Untuk mendapatkan energi sistem, seluruh spin ditransformasikan ke dalam kerangka acuan lokal sehingga seluruh spin akan sejajar pada arah z di setiap titik kekisi. Transformasinya mengambil bentuk:

$$\begin{aligned} S_R^x &= S_R^{\bar{x}} \\ S_R^y &= S_R^{\bar{y}} \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) - S_R^{\bar{z}} \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) \\ S_R^z &= S_R^{\bar{y}} \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) + S_R^{\bar{z}} \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (15)$$

Setelah ditransformasikan dengan persamaan (15), Hamiltonan dari sistem selanjutnya ditransformasikan dengan wakilan Holstein-Primakoff untuk menerapkan teori gelombang spin pada sistem. Untuk mendapatkan Hamiltonan dalam wakilan ruang momentum, dilakukan transformasi Fourier untuk kekisi yang didefinisikan sebagai:

$$\begin{aligned} a_R &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} a_k \\ a_R^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} a_k^+ \end{aligned} \quad (16)$$

Selanjutnya dilakukan transformasi Bogoliubov yang didefinisikan sebagai:

$$\begin{aligned} a_k &= u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^+ \\ a_k^+ &= v_k \alpha_k + u_k \alpha_{-k}^+ \end{aligned} \quad (17)$$

untuk mendapatkan Hamiltonan terdiagonalisasi yang berbentuk:

$$H = N S^2 J_Q + N S J_Q - N B S - \frac{1}{2} N B + \sum_k \omega_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \frac{1}{2}) \quad (18)$$

dimana

$$\omega_k = 2S \sqrt{A_k^2 - B_k^2} \quad (19)$$

merupakan relasi dispersi magnon dengan A_k dan B_k didefinisikan sebagai:

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{2} J_k + \frac{1}{4} J_{Q-k} + \frac{1}{4} J_{Q+k} - J_Q + \frac{1}{2} (B/S) \\ B_k &= \frac{1}{2} J_k - \frac{1}{4} J_{Q-k} - \frac{1}{4} J_{Q+k} \end{aligned} \quad (20)$$

Energi dasar (*ground state*) dapat ditentukan ketika magnon belum muncul dalam sistem ($\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = 0$) sehingga

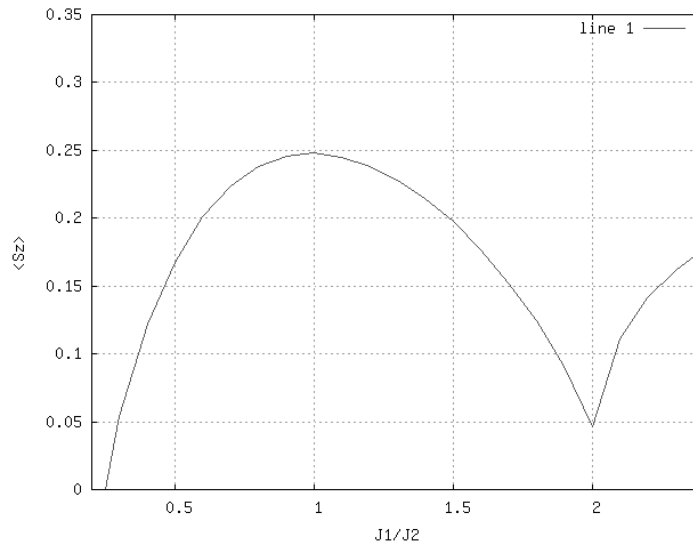
$$E_0(B) = N S^2 J_Q + N S J_Q - N B S - \frac{1}{2} N B + \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \quad (21)$$

Sedangkan magnetisasi subkeksi diperoleh dengan menurunkan nilai harap keadaan dasar dari Hamiltonan sistem terhadap medan magnet sehingga diperoleh

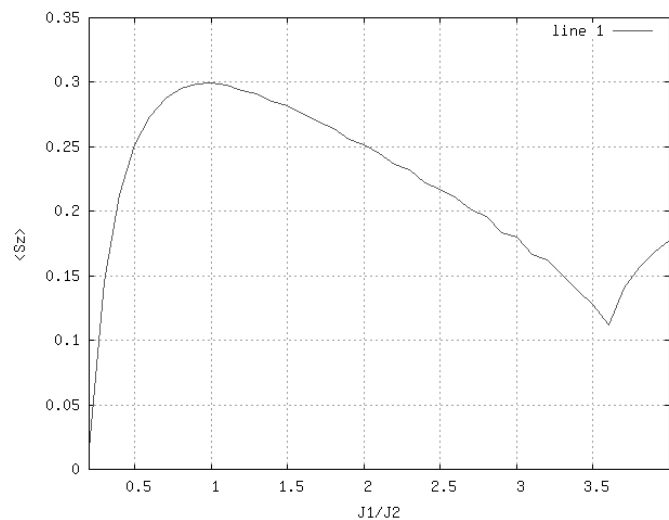
$$\langle S_R^z \rangle = -\frac{1}{N} \lim_{B \rightarrow 0} \frac{dE_0}{dB} \quad (22)$$

PEMBAHASAN

Plot magnetisasi terhadap rasio interaksi tukar J_1/J_2 dengan $J_3 = 0$ (tanpa interaksi tetangga terdekat berikutnya) ditunjukkan pada gambar 2. Nampak bahwa pada fase keteraturan spiral, magnetisasi mencapai maksimum ketika $J_1 = J_2$ dan minimum ketika $J_1/J_2 = 2$ yang merupakan fase transisi antara fase keteraturan Neel dengan fase keteraturan spiral. Untuk $J_1/J_2 < 0,3$, sistem mulai mengalami ketakteraturan (disordered). Magnetisasi ini akan terus membesar dengan meningkatnya interaksi antar rantai dan mencapai nilai tetap 0,31 ketika J_1/J_2 menuju tak hingga yang merupakan nilai magnetisasi untuk kekisi bujursangkar.



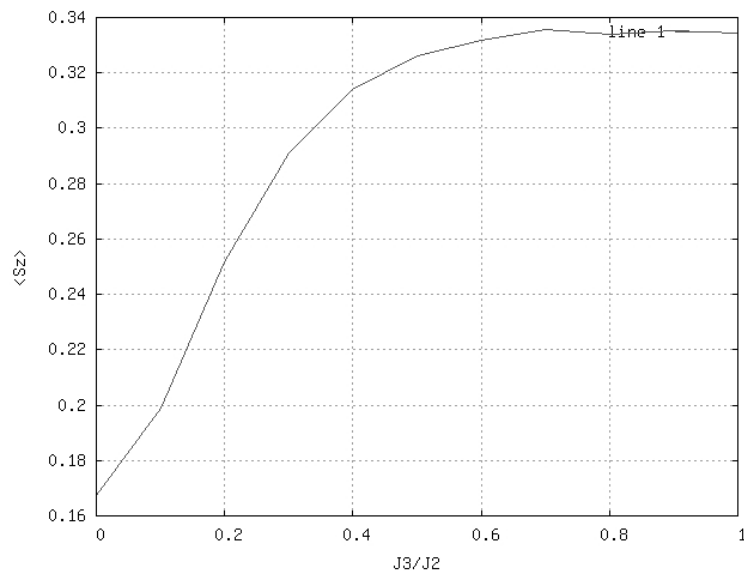
Gambar 2. Plot magnetisasi kekisi segitiga anisotropik bahan antiferromagnet tanpa kehadiran interaksi tukar dengan tetangga terdekat berikutnya ($J_3 = 0$).



Gambar 3. Plot magnetisasi kekisi segitiga anisotropik bahan antiferromagnet dengan nilai rasio $J_3/J_2 = 0,2$.

Ketika interaksi tetangga terdekat berikutnya mulai muncul, ketakteraturan yang terjadi pada $J_1/J_2 = 2$ saat $J_3 = 0$ berkurang (Gambar 3). Meningkatnya J_3 menghilangkan ketakteraturan pada transisi fase antara fase Neel dan fase spiral. Nilai magnetisasi maksimum masih tetap berada pada fase spiral di $J_1 = J_2$ namun dengan nilai yang lebih besar. Ketakteraturan pada $J_1/J_2 < 0,3$ terjadi untuk J_1 yang semakin kecil ketika nilai J_3 membesar yang berarti bahwa interaksi tetangga terdekat berikutnya membantu meningkatkan keteraturan dari rantai spin yang terkopel lemah.

Dengan meningkatkan nilai J_3 , magnetisasi sistem akan terus meningkat hingga mencapai nilai maksimum dimana magnetisasi tidak lagi bertambah dengan membesarnya nilai J_3 (Gambar 4).



Gambar 4. Plot magnetisasi kekisi segitiga anisotropik bahan antiferromagnet terhadap rasio J_3/J_2 dengan $J_1/J_2 = 0,5$.

KESIMPULAN

Telah ditinjau kompetisi interaksi antara interaksi tetangga terdekat, interaksi antar rantai, dan interaksi tetangga terdekat berikutnya pada model Heisenberg untuk bahan antiferromagnet dengan kekisi berbentuk segitiga anisotropik yang membangkitkan sistem terfrustasi magnetik.

Ketika interaksi tetangga terdekat berikutnya diabaikan, kompetisi antara interaksi dengan tetangga terdekat dan interaksi antar rantai menyebabkan ketakteraturan sistem pada fase transisi antara fase Neel dengan fase spiral. Begitu juga ketika kopling antar rantai cukup lemah. Pada kondisi dimana kedua interaksi sama kuat, magnetisasi sistem menjadi maksimum dan sistem berada pada fase spiral.

Dengan hadirnya interaksi tetangga terdekat berikutnya, ketakteraturan yang muncul pada fase transisi antara fase Neel dan fase spiral menjadi lenyap. Ketakteraturan juga ditemui pada kopling antar rantai yang semakin lemah jika interaksi tetangga terdekat berikutnya semakin kuat, sehingga secara umum interaksi ini cenderung meningkatkan keteraturan dari sistem.

DAFTAR PUSTAKA

- Coldea, R., Tennant, D.A., Tylczynski, Z., (2003), *Physical Review B*, vol. 68, hal. 134424
Holstein, T. dan Primakoff, H., (1940), *Physical Review*, vol 58, hal. 1094
Merino, J., McKenzie, R.H., Marston, J.B., dan Chung, C.H., (1999), *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol 11, hal. 2965
Wannier, G.H., (1950), *Physical Review*, vol 79, hal. 357