

Давхар вольфрамит $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ кристалл дахь солилцлын үйлчлэл ба квант корреляц

Х.Цоохүү^{1*}, Л.Ням-Очир²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Онолын физикийн тэнхим

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим

*Э-шуудан Tsookhuu@yahoo.com

Нам температурт орших давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристаллд хол зайнаас антиферро соронзон үзэгдэл илэрдэг нь соронзон бүтцийн өнөөгийн онолуудаар тайлбарлагдахгүй байгаа юм. Бид энэхүү ажилд уг үзэгдлийг микроертөнцийн локаль бус чанар – квант корреляцийн үүднээс тайлбарлах таамаглал дэвшүүлсэн болно. Үүнтэй холбоотойгоор бодисын соронзны үзэгдлүүдийг квант корреляц, декогеренцийн үзэл баримтлалын үүднээс шинээр авч үзэх шаардлагатай гэж үзэж байна.

I. ОРШИЛ

Давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристалл нь тасалгааны температурт парасоронзон шинж чанартай ба 10К-ээс доош температурт фазын хувирал явагдан антиферросоронзон шинж чанартай болж соронзон бүтэц үүсгэдэг байна [1,2]. Нейтроны дифракцын спектр дэхь соронзон бүтцэд харгалзах пикүүдийг индекслэхэд $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллд k вектор нь $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ бүтцэд $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ утгуудтай болохыг туршлагаар судалж тогтоосон [3,4]. Тус k вектор нь дифракцын спектр дэхь кристалл бүтцийн хавтгайнуудын Миллерийн индексийг ашиглан соронзон бүтцийн хавтгайг илэрхийлэхэд ашиглагддаг. Эдгээр үр дүнд үндэслэн соронзон атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн геометрийг тогтооход $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ кристаллуудад $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ болон $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн дүнд тэдгээрийн спинүүд нь торын bc хавтгайд харилцан эсрэг чиглэхийн зэрэгцээ a тэнхлэгийн дагуу 10 Å зайд хосолсон зүй тогтол үүсгэж байгааг илрүүлсэн [3,4].

Нам температур дахь эдгээр нэгдлүүдийн $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ болон $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн механизмийг онолын үүднээс авч үзвэл кристалл торын bc хавтгайн хувьд солилцлын харилцан үйлчлэлийн хэлбэр ашиглагдах ба харин торын a тэнхлэгийн хувьд соронзон харилцан үйлчлэл атомуудын хооронд тогтох бололцоогүй

байдалд орно.

Иймд давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристаллын соронзон бүтцийг туршлагаар судалсан ажлын үр дүнгээс тооцсон атом хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн онолын асуудлыг авч үзэх нь сонирхолтой юм.

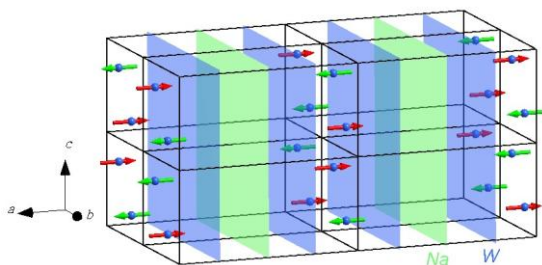
II. $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ КРИСТАЛЛ ДАХЬ $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ БОЛОН $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ АТОМУУДЫН ХООРОНДЫН СОРОНЗОН ҮЙЛЧЛЭЛ БА КВАНТ КОРРЕЛЯЦ

Нам температур дахь нейтроны дифракцын спектрээс соронзон бүтцийг $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллд k вектор нь $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ бүтцэд $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ утгуудтай гэж тогтоосон нь соронзон эгэл торын хэмжээсийг илэрхийлнэ. Тус кристаллуудын соронзон бүтцийг Зураг 1-д дүрслэв.

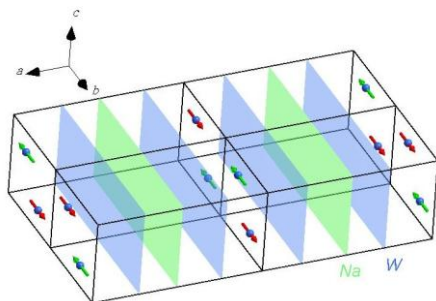
Соронзон бүтэц үүсгэж байгаа механизм нь торын bc хавтгайд хувьд Fe-Fe, Cr-Cr хооронд хүчилтөрөгчийн атомуудаар дамжсан супер солилцлын болон, супер-супер солилцлын харилцан үйлчлэл байх тухай өмнө нь тодорхойлогдсон [3]. Энэ нь вольфрамит төст бүтцүүдэд үүсэх соронзон бүтцийн судалгааны ажлуудын үр дүнтэй тохирч байгаа юм [5,6].

Харин торын a тэнхлэг дагуу соронзон атомуудын спиний хослол үүсч, соронзон эгэл торын хэмжээ уг чиглэлд кристалл торынхоос 2 дахин илүү байх үр дүн гарсан байгаа нь сонирхол татсан асуудал юм. $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ бүтцийн кристалл торын a

тэнхлэг нь 10 Å орчим урттай бөгөөд соронзон атомуудын хооронд диасоронзон давхаргууд байрласан байна.



Зураг 1а. $\text{NaFe(WO}_4)_2$ -ын соронзон эгэл тор. $k=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ба Fe^{3+} ионы соронзон моментууд нь a тэнхлэг дагуу чиглэнэ. Зурагт Fe^{3+} ионуудыг дүрсэлж бусад Na-O болон W-O холбоосуудыг хавтгайгаар тоймлон үзүүлэв.



Зураг 1б. $\text{NaCr(WO}_4)_2$ -ийн соронзон эгэл тор. $k=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ба Cr^{3+} ионы соронзон момент нь b тэнхлэг дагуу чиглэнэ. Зурагт Cr^{3+} ионуудыг дүрсэлж бусад Na-O болон W-O холбоосуудыг хавтгайгаар тоймлон үзүүлэв.

Ийм зайнаас, мөн хоорондоо соронзон нэвтрэх чадвар нь сөрөг утгатай байх диасоронзон давхаргаар дамжин Fe-Fe, Cr-Cr атомууд хоорондоо хэрхэн харилцан үйлчилж спиний эрэмбэ тогтсон талаар тайлбарлахад өнөөгийн соронзон харилцан үйлчлэлийн талаарх онолын загварууд хангалтгүй юм.

Алсын эрэмбийн солилцлын харилцан үйлчлэл нь зөвхөн $[\text{NaO}_6]$ -октаэдрээр соронзон үйлчлэл дамжсан тохиолдолд л боломжтой юм. Гэвч энэ нь диасоронзон шинж чанартай давхарга тул шууд солилцлын үйлчлэлийг дамжуулна гэж үзэх үндэслэл байхгүй.

Ийм учраас энэхүү ажилд уг үзэгдэлд тайлбар өгөх нэгэн таамаглалыг дэвшүүлж байна. Таамаглал квант корреляцийн үзэгдэлд тулгуурлаж байгаа юм. Квант корреляц, локаль бус чанарыг 1935 онд Эйнштейн, Подольски, Розен нар физикийн ертөнцөд “ЭПР парадокс” хэмээн алдаршсан өгүүлэлдээ анх хөндөж тавьсан байдаг [7]. Тухайн үед А.Эйнштейн, Н.Бор

хоёрын квант механикийг тойрсон халуухан маргаанаас хэн нэг нь ялагчаар тодроогүйгээс квант корреляцийн асуудал нэг үе намдуу төлөвт шилжиж орсон байсан юм. Харин 1962 онд Ирландын физикч Жон Белл классик корреляцтай холбоотой цуврал тэнцэтгэл бус бичиж квант корреляц байх эсэхийг туршлагаар шалгах боломжтойг үзүүлснээр асуудал дахин босч ирсэн түүхтэй [8].

Гэвч Беллийн санал болгосон туршлага нарийн ур дүй шаардсан, классик ба квант бодит байдлын торгон хил дээр үйлдэгдэх байсан тул Жон Беллээс хойш бараг хорин жилийн дараа тавигдсан байна. Энэ бол 1982 онд хийсэн Аспектийн туршлага бөгөөд микро ертөнцөд явагдах үзэгдлүүдийн хооронд классик корреляцаас гадна нэмэлт корреляц оршин байгааг илрүүлсэн юм [9]. Үүний дараагаар Зейлингер, Гринбергер нарын удирдсан хэд хэдэн группт уг үзэгдэл үнэхээр оршин байгааг давхар баталсан байна [10]. Ийнхүү туршлагаар шууд илрэхгүй, материаллаг ертөнцөөс далд, чанагуух ертөнцөд бидэнд хараахан таньж мэдэгдээгүй байгаа хүчний бус үйлчлэл байх боломжийг нотлон харуулжээ.

Квант корреляц, локаль бус чанарын дотоод механизм нь одоогоор тодорхойгүй байгаа ба математикийн талаас авч үзвэл системийн дэд хэсгүүдийн хооронд ороолдоон төлөв үүсдэгтэй холбоотой юм.

Авч үзэж буй давхар вольфрамтын антиферросоронзон үзэгдэл бол ЭПР туршлагын нэг хувилбар гэж үзэж байна. Юу гэвэл, ЭПР туршилтанд анхны синглет төлөв задарч спинээрээ харилцан эсрэг хос үүсгэн бие биенээсээ алслан холддог. Тэгвэл вольфрамит төст бүтцүүд анх яг л адилхан парасоронзон (синглет) төлөвт оршин байсан. Бидний таамаглалаар нам температурт фазын хувирал явагдаж парасоронзон төлвөөс антиферросоронзон төлөвт шилжин орох нь ЭПР туршилтанд гардаг спиний момент хадгалагдах хуулийн илрэл гэж үзэж болохоор байна. Түүнчлэн кристаллын a тэнхлэгийн дагуух зай 10 Å орчим байгаа нь ЭПР туршилтанд дэд хэсгүүдийн хоорондох зай хангалттай хол байх шаардлагатай нийцэж байгаа юм.

Торын хавтгайнуудын хооронд үүсэх спины корреляцийг тайлбарлах солилцол, супер солилцол, супер-супер солилцлын онолууд байсаар байтал заавал квант

корреляц, локаль бус шинж дээр тулгуурласан шинэ таамаглал дэвшүүлэх шаардлага юу вэ гэдэг асуулт тавьж болох юм. Хариулт нь квант корреляц бол орчлон ертөнцийн хаа сайгүй илрэх түгээмэл үзэгдэл гэж үзэж байгаад оршино. Хэрэв ийм бол дээр дурьдсан солилцол, супер солилцол, супер-супер солилцлын үед ч квант корреляцийн хандив байгаа бөгөөд онцлог нь нөгөөдүүл нь давамгайлж, харьцангуй сул квант корреляц “фон”-д сууж байгаад оршино. Харин хол зайд солилцлын бүх төрлийн механизм “унтарч” зөвхөн квант корреляц үлдэх учраас анх синглет (парасоронзон) байсан давхар вольфрамтийн төлөв ЭПР механизмаар антиферро болох ёстой. Энэ санал хол зайд үүссэн антиферро соронзон үзэгдэл зарчмын тайлбар өгч байгаа бөгөөд онолын тооцоог дараагийн ажилд авч үзнэ.

Бидний таамаглалаар зохиомол туршилт (Gedanken experiment) ЭПР-ийг практикт бодитой хэрэгжүүлэх нэг хувилбар нь бодисын соронзон хувирал явуулах арга гэж үзэж байна. Ийм учраас бодисын соронзон шилжилт, спинтроникийн үзэгдэл, эффектгүйг цахилгаан харилцан үйлчлэлийн гаралтай солилцлын механизмын үүднээс авч үзэх төдийгүй хүчний бус үйлчлэл – квант корреляц, ороолдоон төлвийн үзэл баримтлалаас шинээр авч үзэх шаардлагатай гэж үзэж байна.

III. ДҮГНЭЛТ, ҮР ДҮН

Давхар вольфрамит $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллын нам температурт үүсэх соронзон бүтцийн судалгаанаас тодорхойлсон Fe – Fe болон Cr – Cr атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн хэд хэдэн хэлбэр дунд солилцлын, супер солилцлын, супер-супер солилцлын үүднээс тайлбарлах боломжгүй алсын зайн харилцан үйлчлэл илэрсэн. Тус өвөрмөц хэлбэр нь ЭПР парадоксын практикт илэрсэн нэг хэлбэр байж болох тухай таамаглалыг тус ажилд дэвшүүлсэн бөгөөд квант корреляц, локаль бус чанар тус таамаглалын үндэс болж байгаа юм. ЭПР парадоксыг практикт хэрэгжүүлэх нэг боломж нь соронзон фазын шилжилтийн судалгаа байж болох юм гэж энэхүү ажлаас дүгнэж байна.

АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. J.Hanuza, M.Maczka, K.Hermanowicz, P.J.Deren, W.Strek, L.Folcik, and H.Drulis (1999). “Spectroscopic Properties and Magnetic Phase Transitions in Scheelite $\text{M}(\text{Cr}(\text{MoO}_4)_2)$ and Wolframite $\text{M}(\text{Cr}(\text{WO}_4)_2)$ Crystals, where $\text{M}=\text{Li, Na, K, and Cs. J.}” \text{Sol. St. Chem. 148, 468-478.}$
2. K.G.Dergachev, M.I.Kobets and E.N.Katsko (2006). “Local Modes in Low Dimensional Magnetic $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$.” Ukr. J. Phys. 2006. V. 51, N 3
3. L.Nyam-Ochir, H.Ehrenberg, A.Buchsteiner, A.Senyshyn, H.Fuess, D.Sangaa. “The magnetic structures of double tungstates, $\text{NaM}(\text{WO}_4)_2$, $\text{M} = \text{Fe, Cr: Examples for superexchange couplings mediated by [NaO}_6\text{]-octahedra.}” \text{Journal of Magnetism and Magnetic Materials (2008). Volume: 320, Issue: 23, Pages: 3251-3255}$
4. Л.Ням-Очир. “Давхар вольфрамитын кристалл болон соронзон бүтцийн судалгаа.” Докторын диссертаци. 2011. Улаанбаатар хот
5. H.Ehrenberg, H.Weitzel, C.Heid, H.Fuess, G.Wltschek, T.Kroener, J.Van Tol and M.Bonnet (1997). “Magnetic phase diagrams of MnWO_4 .” J. Phys. Condens. Matter 9 3189-3203
6. H. Ehrenberg, K. G. Bramnik, E. Muessig, T. Buhrmester, H. Weitzel and C. Ritter (2003). “The ferrimagnetic structure of $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$: dependence of Fe-O-O-Fe Supersuperexchange coupling on geometry.” J. Magn. Mater. 261, 353-359.
7. A.Einstein, N.Rosen and B.Podolsky. “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?” Phys. Rev. 47, 777 (1935)
8. Bell, J. S. "On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox." Physics 1, 195-200, 1964.
9. A. Aspect, P.Grangier and G.Roger, Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequalities, Phys. Rev. Lett 49, 91-94 (1982)
10. A.Zeilinger, Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation , Nature 427, 711 (2004)

Quantum Correlation and Exchange Interaction in Double Tungstate $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ and $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$

Kh.Tsookhuu¹ and L.Nyam-Ochir²

¹*Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

²*Department of General Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

Long-range magnetic superexchange interactions between magnetic ions in double tungstate $\text{Na}(\text{Fe}/\text{Cr})(\text{WO}_4)_2$ at low temperature are necessary to explain by theory. At present it is not clear, which mechanism is responsible for these antiferromagnetic interactions between magnetic ions with a distance of about 10\AA from each other. In this work, we proposed explanation using non-locality and quantum correlation for the long-range magnetic interaction.