

自旋为 1 的双层平方晶格阻挫模型의相变研究^{*}

卿煜林, 彭小莉, 胡爱元[†]

重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 401331

摘 要

本文采用双时格林函数方法研究了自旋为 1 的双层平方晶格阻挫模型的相变行为. 详细探讨了层间耦合相互作用 J_c 和单离子各向异性参数 D 对奈尔态(AF1)和共线态(AF2)之间相转换的影响. 结果显示: 只要参数 J_c 和 D 不同时为零, 奈尔态(AF1)和共线态(AF2)在 $J_2=J_1/2$ (这里 J_1 和 J_2 分别描述的是系统自旋间最近邻和次近邻交换作用) 时的相变温度相等, 两个态共存. 在低于相变点的温度范围内, AF1-AF2 态之间可以发生相转换, 其相变类型为一阶相变. 当 $J_2 \neq J_1/2$ 时, 尽管 AF1-AF2 态有不同相变温度, 但它们也可以共存. 如果 AF1(AF2)态的相变温度大, 在低温, AF1(AF2)态更稳定; 在高温, AF2(AF1)态更稳定; 在中间温度范围内, AF1-AF2 态之间也可以发生一阶相转换.

关键词: 反铁磁, 磁各向异性, 磁序的一般理论和模型, 交换和超交换相互作用

PACS: 75.50.Ee, 75.30.Gw, 75.10.-b, 75.30.Et

基金: 国家自然科学基金(批准号: 11875010, 12175027)和重庆市自然科学基金(批准号: cstc2021jcyj-msxm3189cstc, 2019jcyj-msxmX0217, cstc2019jcyj-msxmX0251)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: huaiyuan@cqnu.edu.cn

第一作者. E-mail: yvlqing@163.com

1 引 言

平方晶格反铁磁体可采用 J_1-J_2 模型来描述. 在这个模型中, J_1 和 J_2 皆大于零, 为反铁磁交换作用. 因此, 它被认为是一个阻挫系统. 一些材料的磁性质可采用该模型来描述. 例如: 铜基高温超导材料的磁性质可以采用 J_2/J_1 较小时的

$J_1 - J_2$ 模型来描述^[1-3], 而铁基超导材料的磁性质则可采用 J_2 / J_1 较大时的 $J_1 - J_2$ 模型来描述^[4-6]. 需要注意的是: 实际材料一般是层状结构, 其层间耦合相互作用通常是不能忽略的, 这在以往的研究中已经得到了证实^[1-6].

理论上, 对于一个考虑了层间耦合相互作用的 $J_1 - J_2 - J_c$ (这里 J_c 是层间耦合相互作用) 模型是非常重要的. 根据 Mermin-Wagner 定理^[7], 各向同性的二维平方晶格 $J_1 - J_2$ 模型在有限温度时是不存在长程有序的, 但如果引入了层间耦合相互作用, 无论它多弱, 系统都将存在长程有序. 因此, 对于研究非零温度二维平方晶格 $J_1 - J_2$ 模型的磁性质, 引入 J_c 是重要的.

由于该模型的重要性, 人们已经采用不同方法对它进行了细致的研究. 如: 旋转不变格林函数法^[8]、有效场理论^[9]、线性自旋波理论^[10]、高温系列展开法^[11]、团簇平均场理论^[12]和耦合团簇方法^[13]. 这些研究都集中在其基态性质, 对其在有限温度时的研究非常有限. 基于此, 本文将聚焦其在有限温度的磁性质. 鉴于实际材料通常存在各向异性, 模型引入了单离子各向异性 D . 同时, 注意到已有的研究大多考虑层间耦合为反铁磁的情况^[9-12], 对于其铁磁情况很少涉及^[13], 本文将全面考虑这两种层间耦合相互作用对系统相变的影响. 结果显示: 只要参数 J_c 和 D 不同时为零, 当 $J_2 = J_1 / 2$ 时, AF1 态和 AF2 态具有相同的相变温度并且共存; 当 $J_2 \neq J_1 / 2$ 时, 尽管 AF1-AF2 态有不同相变温度, 但它们也可以共存. 对于这两种情况, 当温度低于相变点时, AF1-AF2 态之间可以发生相转换.

2 理论模型

本文考虑一个双层平方晶格阻挫模型, 其磁构型有四种, 见图1. 其哈密顿量可以采用如下形式来描述:

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j + J_2 \sum_{[ij]} S_i \cdot S_j + J_c \sum_{\{ij\}} S_i \cdot S_j - D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

这里, J_1 、 J_2 、 J_c 分别描述的是自旋间最近邻、次近邻和层间耦合相互作用参数. 令 J_1 和 J_2 取正值, 对应于反铁磁交换作用. J_c 的取值可正可负, 分别对应反铁磁和铁磁交换作用, 其中反铁磁交换作用对应的模型为图1(a)和(b), 铁磁交换

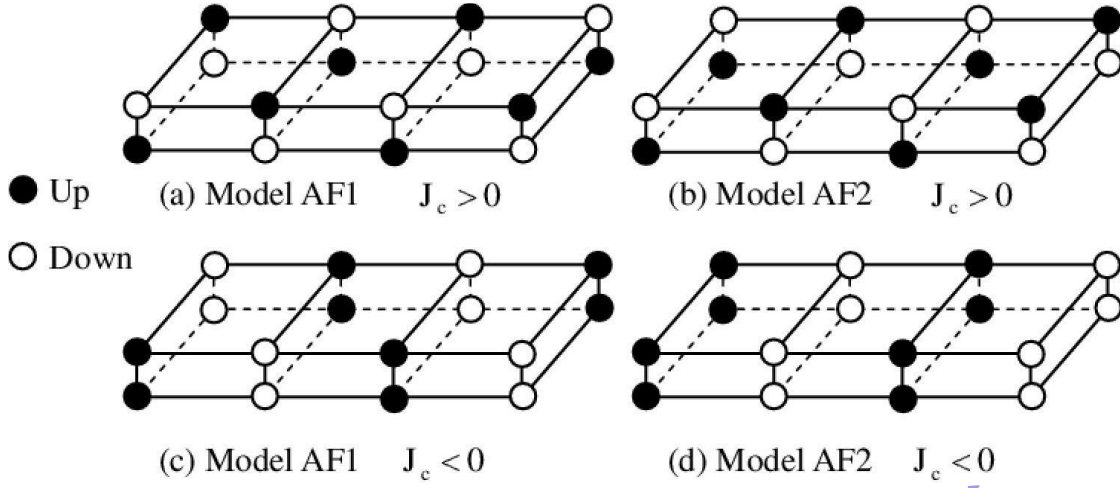


图1 奈尔态和共线态的磁构型. (a)、(b)和(c)、(d)分别对应层间耦合为反铁磁和铁磁相互作用. 实心 and 空心圆圈分别描述的是自旋取向相上和向下.

Fig.1. Spin configurations of the Néel and collinear states. (a), (b) and (c), (d) correspond to the interlayer coupling as antiferromagnetic and ferromagnetic interactions, respectively. The solid and empty circles represent the up-spins and down-spins, respectively.

作用对应的模型为图1(c)和(d). 在结果与讨论部分中, 我们取 $J_1=1$. $\langle ij \rangle$ 、 $[ij]$ 、 $\{ij\}$ 分别表示的是对最近邻、次近邻和层间最近邻格点求和. D 为单离子各向异性参数. 由于晶格中自旋取向向上和向下的数目相等, 于是根据晶格中自旋取向将其分成两个子晶格, 取向相同为一个子晶格. 选取 z 轴为量子化轴, 则子晶格磁化强度定义为自旋算符的统计平均, 即: $m_{up} = \langle S_{up}^z \rangle$, $m_{down} = \langle S_{down}^z \rangle$. 在没有外场的情况下, 它们之间存在如下关系: $m = m_{up} = -m_{down}$.

根据格林函数方法的一般步骤, 首先要构建格林函数. 由于本文研究的模型存在四种磁构型, 基于格林函数方法给出每一个模型的推导过程过于繁琐. 因此, 这里将以图1(a)的磁构型为例, 给出其磁化强度和相变温度解析表达式的推导过程, 其余三种磁构型将不再本文累述.

为了得到系统子晶格磁化强度, 构建如下格林函数^[14-15]:

$$\langle\langle S_i^+; e^{uS_j^z} S_j^- \rangle\rangle, \quad (2)$$

这里的 u 是Callen参数^[16]. 然后建立格林函数运动方程, 在推导运动方程的过程中,

将会出现一组不闭合的高阶格林函数方程组. 为了求得高阶格林函数, 继续推导其运动方程, 这样又会得到更高阶的格林函数组. 如此反复, 将会得到一系列不闭合高阶格林函数方程组. 为了使格林函数方程组闭合, 必须采用退耦使方程组闭合. 本文采用Tyablikov退耦近似^[14-15], 即:

$$\langle\langle S_i^z S_i^+; e^{uS_j^z} S_j^- \rangle\rangle = \langle S_i^z \rangle \langle\langle S_i^+; e^{uS_j^z} S_j^- \rangle\rangle; l \neq i. \quad (3)$$

对于单离子各向异性, 采用Anderson-Callen退耦近似^[17], 即:

$$\langle\langle S_i^z S_i^+ + S_i^+ S_i^z; e^{uS_j^z} S_j^- \rangle\rangle = C_F \langle\langle S_i^+; e^{uS_j^z} S_j^- \rangle\rangle; C_F = up, dwon. \quad (4)$$

这里:

$$C_F = 2m_F \{1 - \frac{1}{2S} [S(S+1) - \langle (S_F^z)^2 \rangle]\}, \quad (5)$$

这里 m_F 表示的是子晶格磁化强度.

令:

$$\Theta_F(u) = \langle [S_{Fi}^+, e^{uS_{Fj}^z} S_{Fj}^-] \rangle, \quad (6)$$

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle e^{uS_{Fj}^z} S_{Fj}^- S_{Fi}^+ \rangle(k) = \Theta_F(u) \phi_F. \quad (7)$$

这里 N 是晶格格点数. 对波矢 k 求和遍及第一布里渊区. 当 $u=0$ 时 $\Theta_F(0) = 2m_F$.

应用谱定理, 对 $\langle S_i^- S_i^+ \rangle$ 进行空间傅里叶变换得到 $\langle S_i^- S_i^+ \rangle(k)$, 即:

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle(k) = 2m \left[\frac{E_1}{2\omega_k} \coth \frac{\omega_k}{2\kappa_B T} - \frac{1}{2} \right], \quad (8)$$

这里:

$$\begin{aligned} E_1 &= 4J_1 m + 4J_2 m (\gamma_{2k} - 1) + 2J_c m + CD, \\ E_2 &= m(2J_1 \gamma_{1xk} + 2J_1 \gamma_{1yk} + 2J_c \gamma_{ck}), \\ \omega_k &= \sqrt{E_1^2 - E_2^2}, \\ C &= 2m \{1 - \frac{1}{2S^2} [S(S+1) - \langle (S_i^z)^2 \rangle]\}, \end{aligned} \quad (9)$$

这里 κ_B 是波尔兹曼常数. 为了方便, 令 $\kappa_B = 1$, 则系统所有的量, 包括交换常数、磁化强度、温度皆是一个无量纲的量. 晶格结构因子 $\gamma_{1xk} = \cos k_x$; $\gamma_{1yk} = \cos k_y$;

$\gamma_{2k} = \cos k_x \cos k_y$; $\gamma_{ck} = \cos k_z$. 利用关系: $\langle S_i^- S_i^+ \rangle = S(S+1) - \langle S_i^z \rangle - \langle (S_i^z)^2 \rangle$, 得到子晶格磁化强度的表达式^[14-19]:

$$m = \frac{(S-\phi)(1+\phi)^{2S+1} + (1+S+\phi)\phi^{2S+1}}{(1+\phi)^{2S+1} - \phi^{2S+1}}, \quad (10)$$

这里:

$$\phi = \frac{2}{N} \sum_k \frac{E_1}{2\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2} - \frac{1}{2}. \quad (11)$$

当温度趋于相变点时, m 是一个小量, 则 (11) 式的自旋波谱也是一个小量.

对 (11) 式右边进行泰勒展开得:

$$\phi = \frac{2}{N} \sum_k \frac{E_1}{\beta\omega_k^2}, \quad (12)$$

在这种情况下, (10) 式可近似为:

$$m = \frac{S(S+1)}{3\phi}, \quad (13)$$

联合 (12) 和 (13) 式, 可得系统相变温度的解析表达式:

$$T_N = \frac{S(S+1)}{3\kappa_B \frac{2}{N} \sum_k \frac{4J_1 + 4J_2(\gamma_{2k} - 1) + 2J_c + D \frac{4S-2}{3S}}{[4J_1 + 4J_2(\gamma_{2k} - 1) + 2J_c + D \frac{4S-2}{3S}]^2 - (2J_1\gamma_{1xk} + 2J_1\gamma_{1yk} + 2J_c\gamma_{ck})^2}}. \quad (14)$$

3 结果与讨论

从公式 (14) 可以看出, 系统相变温度的大小是依赖参数取值的. 为了详细理解参数对系统相变温度的影响, 图 2 给出了参数 J_c 和 D 取不同值时, 相变温度 T_N 与 J_2 之间的变化关系. 首先考虑系统是各向同性的情况, 即 $D=0$, 见图 2(a) 和(d). 它是系统的相图, 被分成了三个区域, 即: 每条实线是顺磁相 P 和 AF1 态的边界线, 每条虚线是顺磁相 P 和 AF2 态的边界线, 顺磁相 P 位于线上方. 只要 $|J_c| \neq 0$, AF1 与 AF2 态在 $J_2=0.5$ 处重叠. 注意: 由于本文取了 $J_1=1$, 它对应的

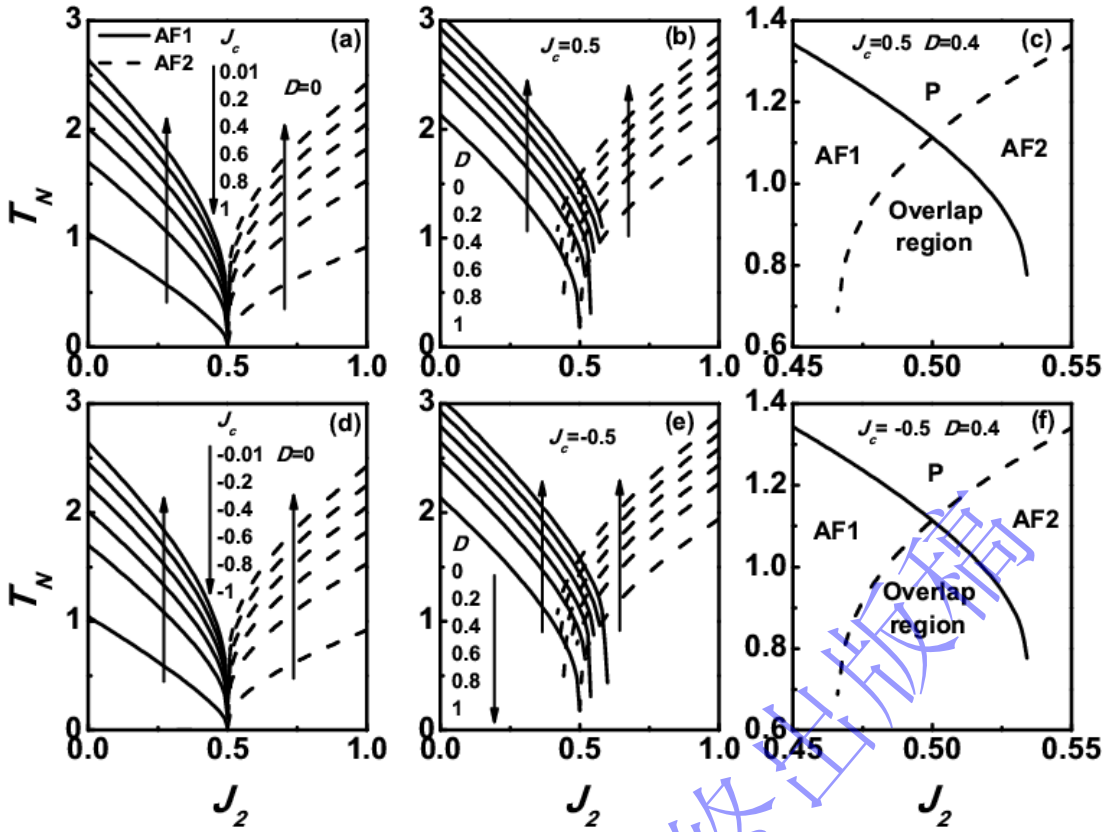


图 2 不同参数时的相变温度 T_N 与 J_2 之间的变化关系, (a) $D=0, J_c = 0.01, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (b) $J_c = 0.5, D = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (c) $J_c = 0.5, D = 0.4$; (d) $D=0, J_c = -0.01, -0.2, -0.4, -0.6, -0.8, -1$; (e) $J_c = -0.5, D = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (f) $J_c = -0.5, D = 0.4$.

Fig.2. The transition temperature T_N as a function of J_2 for different parameters. (a) $D=0, J_c = 0.01, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (b) $J_c = 0.5, D = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (c) $J_c = 0.5, D = 0.4$; (d) $D=0, J_c = -0.01, -0.2, -0.4, -0.6, -0.8, -1$; (e) $J_c = -0.5, D = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$; (f) $J_c = -0.5, D = 0.4$.

关系实际上是 $J_2 = J_1/2$. 从图可以看出, 当 $|J_c|$ 从 0.01 到 1 取值时 (注意: 对于各向同性系统, 当 $J_c = 0$ 时, 模型描述的是一个各向同性的二维平方晶格反铁磁体, 此时系统在有限温度时是不存在长程有序的^[7], 这也是图 2(a)和(d)中 J_c 取有限值的原因), 系统的相变温度 T_N 随着 $|J_c|$ 增大而升高. 这是因为, 当 $|J_c|$ 从 0 增加时, 不仅增多了最近邻键的数目, 而且也增强了其强度, 使得系统更加有序, 导致了一个大的相变温度. 对于确定 $|J_c|$ 值, AF1 态的 T_N 随着 J_2 的增大而减小,

而 AF2 态的 T_N 随着 J_2 的增大而增大. 这是因为, 当 $J_2 = 0$ 时, 哈密顿量描述的是一个普通的反铁磁体. 当 J_2 的值从零增加时, 系统引入了阻挫, J_1 和 J_2 之间开始出现相互竞争, 且它们之间相互竞争的强度会随着 J_2 的增大而增强, 这使得系统更加无序, 导致了一个较小的 T_N 值. 当 $J_2 = 0.5$ 时, 它们之间的竞争强度达到最大. 因此, 当 $0 \leq J_2 \leq 0.5$ 时, 此时系统对应的是 AF1 态. 当 J_2 从 0.5 进一步增大时, J_1 和 J_2 之间的竞争强度开始变弱, J_2 的作用将变得越发重要. 因此, T_N 随着 J_2 的增大而变大, 此时对于 $J_2 \geq 0.5$, 系统对应的是 AF2 态. 换言之, $J_2 = 0.5$ 是 AF1 态与 AF2 态的分界点.

图 2(b)和(e)分别讨论了当 $J_c = 0.5$ 和 $J_c = -0.5$ 时, 不同单离子各向异性 D 下的 T_N 与 J_2 之间的变化关系. 从图可以看出, 对于 $D \geq 0$, 两个态在 $J_2 = 0.5$ 处始终有相同的相变温度. 对于 $D > 0$ 时, 两个态的相变温度曲线交叉, 且交叉区域随着 D 的增大而变大. 这是因为各向异性抑制了系统的阻挫, 即越大的各向异性对应着越弱的阻挫. 因此, 当 D 增大时, 两个态的相变温度变大, 曲线的交点也随之提升, 其相应曲线交叉区域变大. 当各向异性变弱时, 曲线交叉区域消失.

图 2(b)和(e)也是系统的相图, 它被分成了四个区域. 为了更清楚这四个区域所对应的态, 这里给出了 $D = 0.4$ 时相图的放大图, 见图 2(c)和(f). 从图可以看出, 小的 J_2 值对应的是 AF1 态, 大的 J_2 值对应的是 AF2 态, 曲线上方对应顺磁相 P. 在 $J_2 = 0.5$ 附近, 两个态重叠, 重叠区域内两个态具有相同参数. 在重叠区域 $J_2 = 0.5$ 处, 两个态相变温度相等, 其它重叠区域则具有不同的相变温度. 尽管如此, 在重叠区域 AF1 态和 AF2 态都是系统可能的态.

图 2 呈现了一个事实: 只要参数 J_c 和 D 不同时为零, 两个态的曲线在 $J_2 = 0.5$ 处重叠. 既然两个态在此条件下皆系统可能的态, 那么哪一个态更稳定呢? 接下来将具体回答这个问题.

对于两个态在相同体积和熵的条件下，内能低的态更稳定。然而，AF1 态和 AF2 态在相同温度时的熵是不同的。因此，不能采用内能低来判断哪个态更稳定。在相同体积和温度下，自由能低的态更稳定。

系统的内能定义为 $E(T) = \langle H \rangle / N$ 。自由能 $F(T)$ 与内能 $E(T)$ 有如下关系：

$$F(T) = E(0) - T \int_0^T \frac{E(T') - E(0)}{T'^2} dT' \quad [19]$$
。如果得到内能的解析表达式，则可以通过数值计算得到自由能。推导内能的解析表达式必须首先求出横向 $\sum_{i,j} \langle S_i^- S_j^+ \rangle$ 和纵向 $\sum_{i,j} \langle S_i^z S_j^z \rangle$ 关联函数的解析表达式，前者可以通过谱定理直接求得，后者一般采用平均场近似得到，即： $\sum_{i,j} \langle S_i^z S_j^z \rangle \approx \sum_{i,j} \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle$ 。这里 z 为晶格配位数。显然，平均场近似是一种较粗糙方式。最近，文献 20 给出了一种更好的处理方法，本文采用此方式来求系统纵向关联函数。由于其推导过程和表达式过于冗繁，细节可参考文献 20。

图 2 显示了当 J_2 在 0.5 附近取值时，不同的两个态能共存，具体见图 2(c)和 (f)。接下来，在 $T \leq T_N$ 的温度范围内，通过对比两个态自由能低来探究重叠区域哪个态更稳定。重叠区域分两种情况：一种是两个态具有相同的相变温度，对应 $J_2 = 0.5$ 的情况；另一种是两个态相变温度不相等，对应 $J_2 \neq 0.5$ 的情况。

首先探讨 $J_2 = 0.5$ 的情况，即两个态具有相同相变温度。图 3 显示在 $D = 0.01$ 时， $J_c \geq 0$ 的自由能 F 与温度 T 之间的变化关系。从图可以看出， F 始终随着 T 的升高而单调减小。当 $J_c = 0$ 时，在温度低于相变点的温度范围内，AF2 态的自由能始终小于 AF1，这表明 AF2 态更稳定。当 J_c 从 0 开始增大时， $F_{AF1}(0)$ 与 $F_{AF2}(0)$ 之间的差异逐渐变小。在 $J_c = 0.153$ 时，两个态自由能在零温时相等，即 $F_{AF1}(0) = F_{AF2}(0)$ 。尽管如此，在 $0 < T \leq T_N$ 的范围内始终有 $F_{AF2} < F_{AF1}$ ，即在这种情况下 AF2 态更稳定。当 J_c 继续增大时，两个态的自由能曲线相交。例子见 $J_c = 0.7, 1$ 。在这种情况下， $F_{AF1}(0) < F_{AF2}(0)$ ，此时 AF1 态更稳定；在相变温度附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$ ，此时 AF2

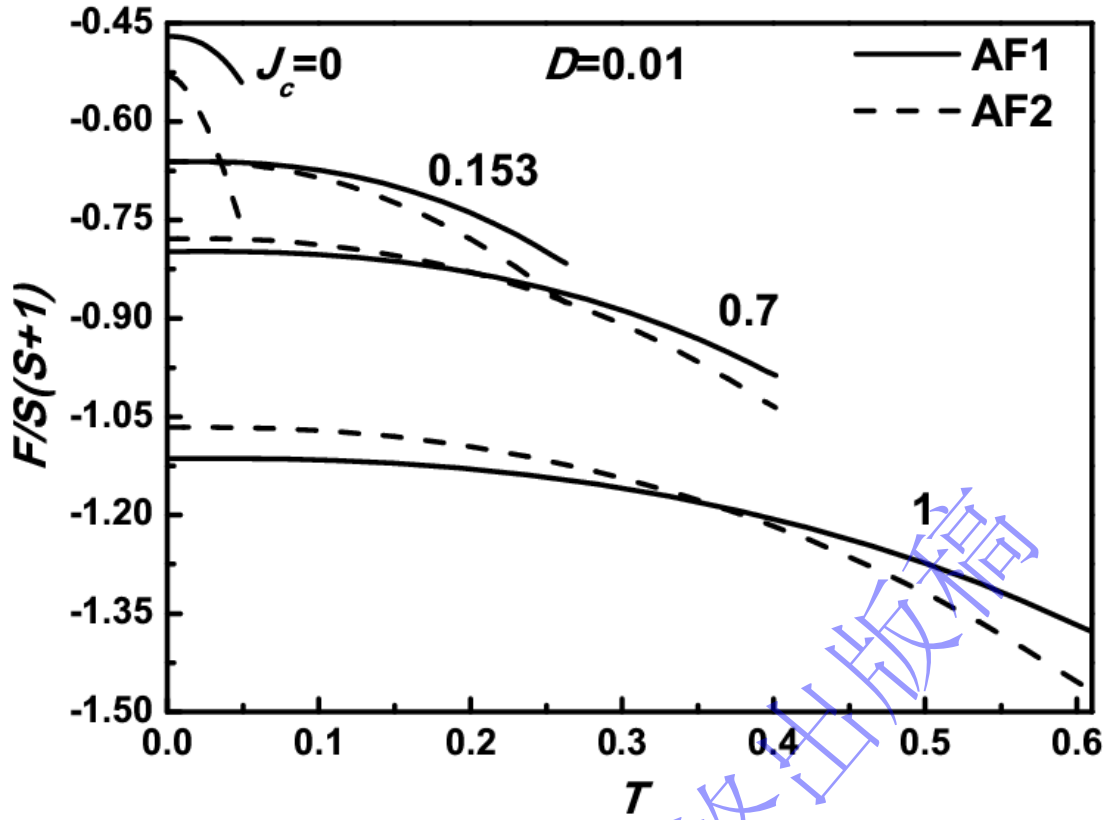


图 3 当 $D = 0.01$ 时, $J_c \geq 0$ 的自由能 F 与温度 T 之间的变化关系.

Fig.3. The free energy F as a function of temperature T for $J_c \geq 0$ when $D = 0.01$.

态更稳定; 在交点系统将会发生一个从 AF1 态向 AF2 态转换的相变. 由于在交点处两个态的内能不等(在这里没有给出其结果), 这表明两个态的热容在交点不连续, 即 AF1-AF2 之间发生的相变类型为一阶相变.

图 3 讨论了弱各向异性的情况, 图 4 显示了强各向异性的结果, 即: $D = 0.2$. 当 $J_c = 0$ 时, 两个态的自由能曲线在零温相切, 即 $F_{AF1}(0) = F_{AF2}(0)$, 在低于相变点的温度范围内始终有 $F_{AF2} < F_{AF1}$, 即在这种情况下 AF2 态更稳定. 当 J_c 从 0 (见图 4(b)) 开始增加时, 两个态的自由能曲线相交, 其结果与图 3 中的 $J_c = 0.7, 1$ 的结果完全类似, 即: 在零温附近 $F_{AF1}(0) < F_{AF2}(0)$, AF1 态更稳定; 在相变温度附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$, AF2 态更稳定; 在交点系统将会发生一个从 AF1 态向 AF2 态转换的一阶相变. 当 J_c 在从 0.1 增大时, 两个态自由能曲线在相变温度附近之间的差异开始减小. 当 J_c 增大到 0.17 时, $F_{AF1}(T_N) = F_{AF2}(T_N)$, 在 $0 \leq T < T_N$ 的温度范围内有 $F_{AF1} < F_{AF2}$. 在这种情况下, AF1 态更稳定. 当 J_c 从 0.17 继续增大, 直到 0.42,

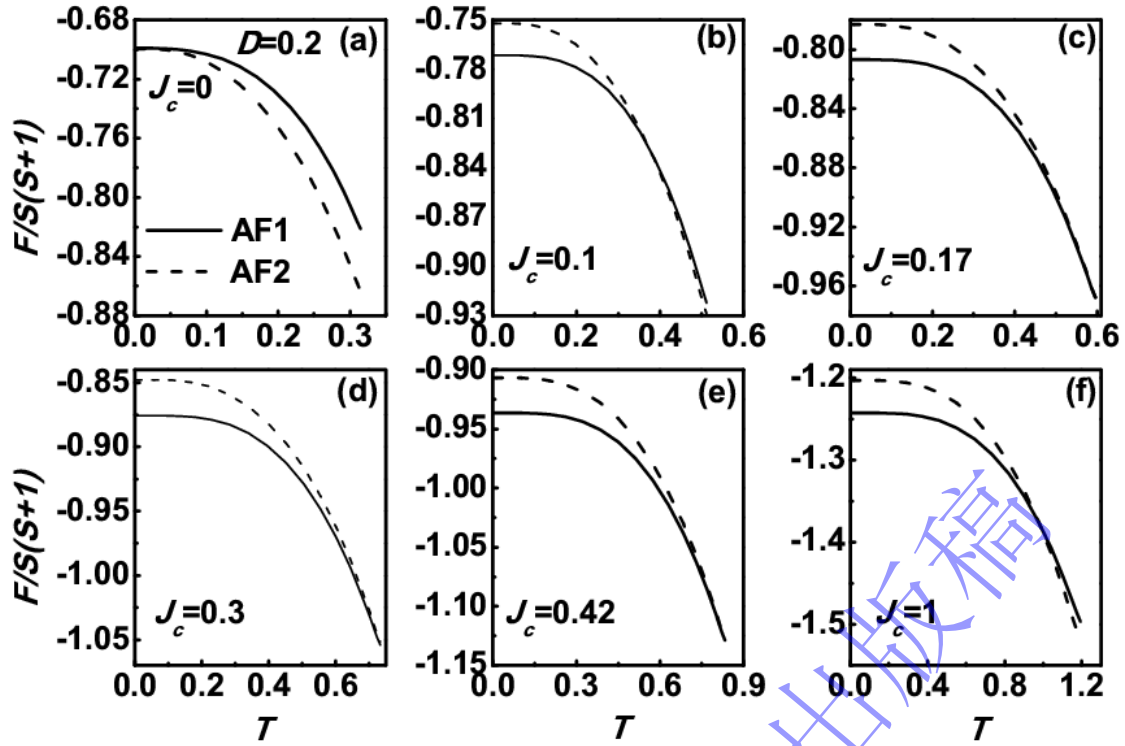


图4 当 $D=0.2$ 时, 不同 J_c 值时的自由能 F 与温度 T 之间的变化关系. (a) $J_c=0$; (b)

$J_c=0.1$; (c) $J_c=0.17$; (d) $J_c=0.3$; (e) $J_c=0.42$; (f) $J_c=1$.

Fig.4. The free energy F as a function of temperature T for different J_c values when $D=0.2$. (a)

$J_c=0$; (b) $J_c=0.1$; (c) $J_c=0.17$; (d) $J_c=0.3$; (e) $J_c=0.42$; (f) $J_c=1$.

在这个范围内始终有 $F_{AF1} < F_{AF2}$, 此时AF1态更稳定, 具体的例子见图4(d). 当 $J_c > 0.42$ 时, 两个态的自由能曲线相交, 即: 零温附近 $F_{AF1} < F_{AF2}$, AF1态更稳定; 相变温度附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$, AF2态更稳定; 在交点系统将会发生一个从AF1态向AF2态转换的一阶相变.

对于 $J_c < 0$ 的情况, 数值结果显示两个态自由能之间的曲线特征与 $J_c > 0$ 的情况完全类似. 因此, 其结果在这里就不再累述.

图(3)和图(4)只探讨了这一组参数中少量几组取值对两个态稳定性的影响, 人们可能期望得到这一组参数对两个态稳定性更全面的影响. 图5给出了在参数 J_c 和 D 空间中, 两个态自由能在温度低于相变温度范围内的大小关系. 从图可以看出, 在参数 J_c 和 D 空间所描述的平面内, 平面被分成了三个区域, 即区域 I、II 和 III.

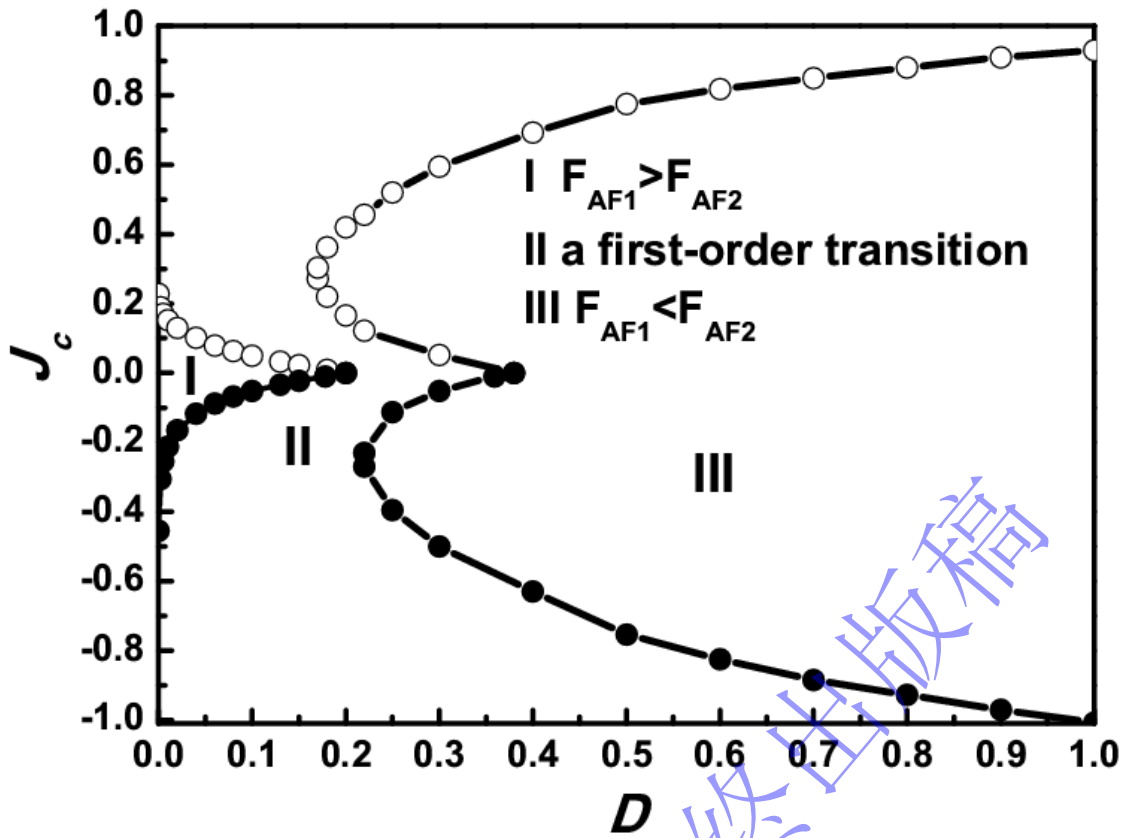


图 5 当 $J_2 = 0.5$ 时，两个态的自由能在参数 $J_c - D$ 空间中大小比较。

Fig.5. The comparison of the free energies of the two states in the J_c and D parameter space when $J_2 = 0.5$.

在区域I，AF2态的自由能总是小于AF1态。相应的例子见图3中 $J_c=0$ 的曲线。这个区域表示为 $F_{AF2} < F_{AF1}$ 。因此，在区域I，系统的状态是AF2态。在区域II，两个态的自由能曲线总是相交。相应的例子见图3、图4(b)和(f)。在零温附近有 $F_{AF1}(0) < F_{AF2}(0)$ ，在相变温度附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$ 。因此，在零温附近，系统的状态是AF1态。当温度升高，系统的状态将由AF1态向AF2态转换，其相变为一阶相变。区域III，AF1态的自由能总是小于AF2态。相应的例子见图4(d)。这个区域表示为 $F_{AF1} < F_{AF2}$ 。因此，在区域III，系统的状态是AF1态。

接下来探讨两个态具有不同相变温度时的稳定性，即 $J_2 \neq 0.5$ 的情况。

图6显示了当 $J_c = 0.5$ 和 $D = 0.4$ 时，不同 J_2 下两个态自由能与温度之间的变化关系。总体而言，在 J_2 值增大的过程中，图6显示了两个明显的特征：一个特征是AF1态的相变温度是减小的，而AF2态的相变温度是增大的，这一结果与图2(a)

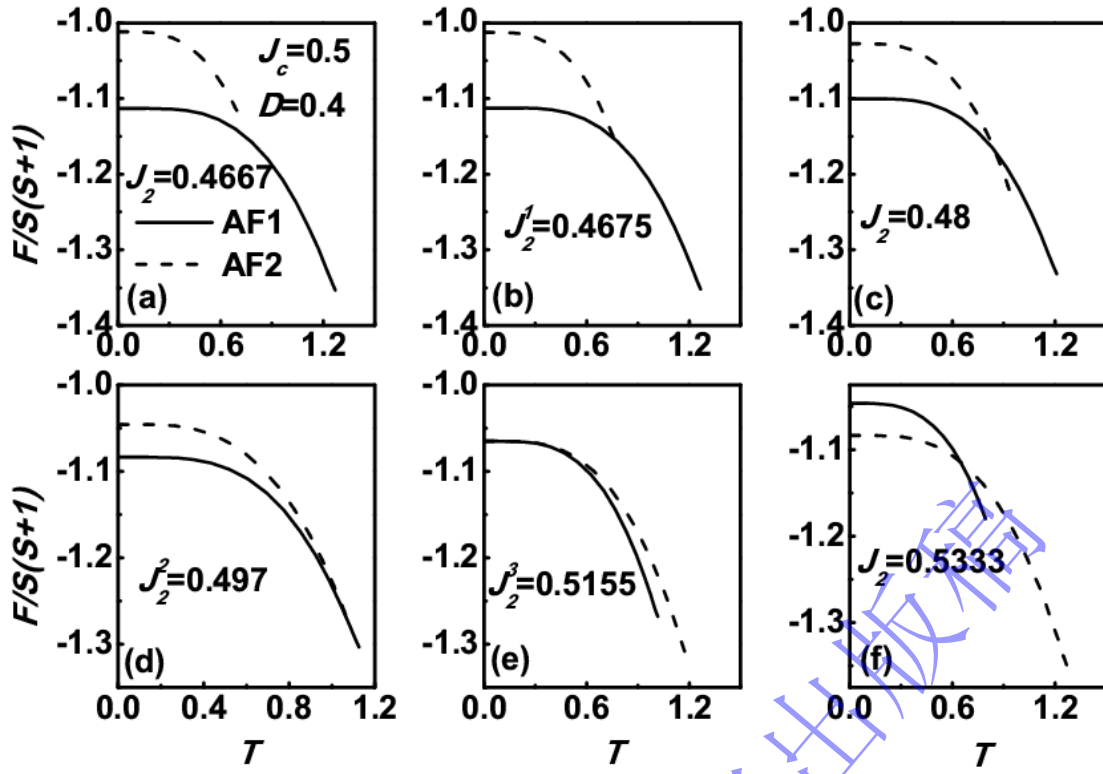


图 6 当 $J_c = 0.5$ 、 $D = 0.4$ 时, 不同 J_2 值时的自由能与温度之间的变化关系. (a) $J_2 = 0.4667$; (b) $J_2 = 0.4675$; (c) $J_2 = 0.48$; (d) $J_2 = 0.497$; (e) $J_2 = 0.5155$; (f) $J_2 = 0.5333$.

Fig.6. The free energy as a function of temperature for different J_2 values when $J_c = 0.5$ and $D = 0.4$. (a) $J_2 = 0.4667$; (b) $J_2 = 0.4675$; (c) $J_2 = 0.48$; (d) $J_2 = 0.497$; (e) $J_2 = 0.5155$; (f) $J_2 = 0.5333$.

的结果是一致的; 另一个特征是 AF1 态的自由能曲线呈整体向上提升, 而 AF2 态的自由能曲线呈整体下降. 当 $J_2 = 0.4667$ 时, 在低于相变温度的范围内, AF1 态的自由能总是小于 AF2 态, 即 AF1 态更稳定, 见图 6(a). 随着 J_2 增大, 两个态的自由能之间的差异逐渐减小. 当 $J_2 = 0.4675$ 时, AF2 态的自由能在其相变点与 AF1 态自由能汇合, 即在 $T < T_N(\text{AF2})$ 的温度范围内 $F_{\text{AF1}} < F_{\text{AF2}}$, 即 AF1 态更稳定, 见图 6(b). 当 $0.4675 < J_c < 0.497$ 时, 两个态的自由能曲线相交, 见图 6(c). 因此, 在零温附近有 $F_{\text{AF1}}(0) < F_{\text{AF2}}(0)$, 此时 AF1 态更稳定. 当温度升高, 系统的状态将发生由 AF1 态向 AF2 态转换的一阶相变. 当 J_2 值增大到 0.497 时, 其结果图 6(b) 类似, 即在 $T < T_N(\text{AF2})$ 的温度范围内有 $F_{\text{AF1}} < F_{\text{AF2}}$, 即 AF1 态更稳定, 见图

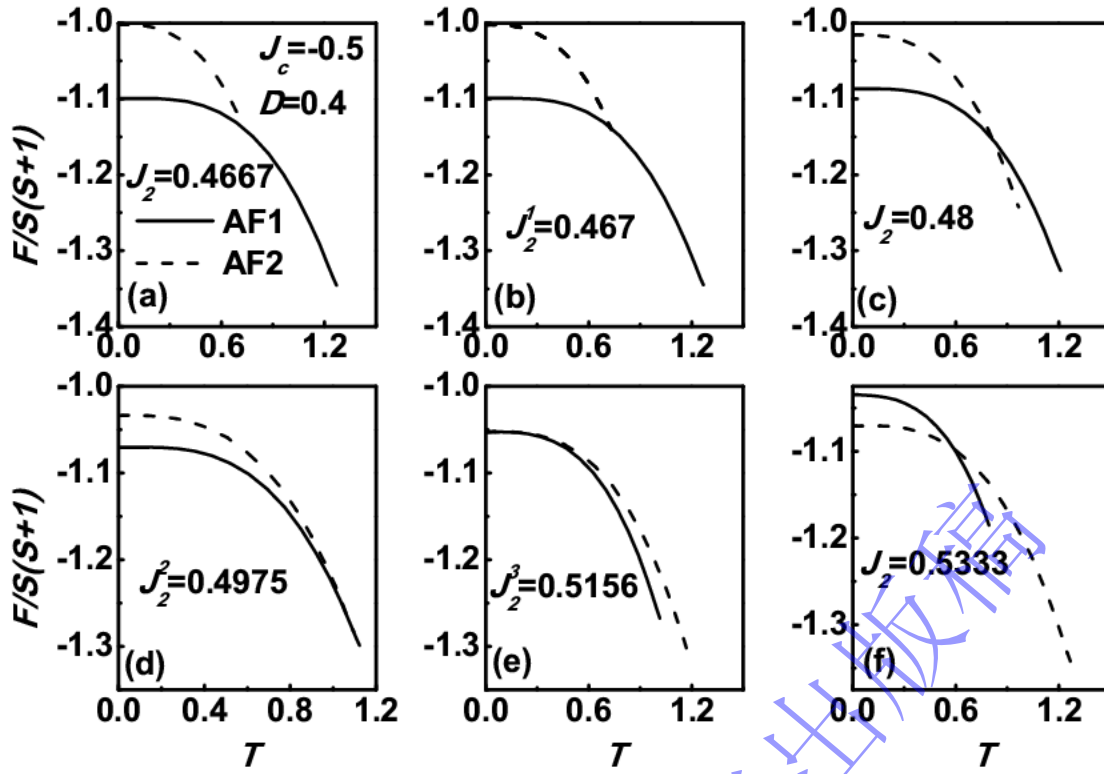


图 7 当 $J_c = -0.5$ 、 $D = 0.4$ 时，不同 J_2 值时的自由能与温度之间的变化关系。(a) $J_2 = 0.4667$ ；(b) $J_2 = 0.467$ ；(c) $J_2 = 0.48$ ；(d) $J_2 = 0.4975$ ；(e) $J_2 = 0.5156$ ；(f) $J_2 = 0.5333$ 。

Fig.7. The free energy as a function of temperature for different J_2 values when $J_c = -0.5$ and $D = 0.4$. (a) $J_2 = 0.4667$ ；(b) $J_2 = 0.467$ ；(c) $J_2 = 0.48$ ；(d) $J_2 = 0.4975$ ；(e) $J_2 = 0.5156$ ；(f) $J_2 = 0.5333$ 。

6(d). 在 J_2 的值从 0.497 增大到 0.5155 的过程中，AF2 态的自由能曲线是先远离，然后接近 AF1 态的，但 AF1 态的自由能始终是小于是 AF2 态.在这种情况下，AF1 态更稳定.但在 $J_2 = 0.5155$ 时，在零温时有 $F_{AF1}(0) = F_{AF2}(0)$ ，但 $0 < T \leq T_N$ 温度的范围内有 $F_{AF1} < F_{AF2}$ ，即在这种情况下，AF1 态更稳定，见图 6(e).当 $J_2 > 0.5155$ 时，两个态的自由能曲线相交，见图 6(f).在零温附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$ ，此时 AF2 态更稳定.当温度升高，系统的状态将发生由 AF2 态向 AF1 态转换的一阶相变.

图 7 显示了当 $J_c = -0.5$ 和 $D = 0.4$ 时，不同 J_2 下两个态自由能与温度之间的变化关系.由于其呈现的结果完全与图 6 的结果类似，这里就不再累述.

对于 $J_2 \neq 0.5$ 的情况，无论 J_c 值是大于零还是小于零，我们都能得到如下结

论：(1)相变温度越高的态，零温自由能越小；两个态的相变温度差异越大，其零温自由能的差异也越大。(2)两个态在重叠区域，其稳定性呈现四个特征：(i)当 $J_2 < J_2^1$ 时有 $F_{AF1} < F_{AF2}$ ，在这种情况下，AF1 态更稳定；(ii)当 $J_2^1 < J_2 < J_2^2$ 时，两个态自由能曲线相交。在这种情况下，零温附近有 $F_{AF1} < F_{AF2}$ ，AF1 态更稳定。当温度升高，系统的状态将发生由 AF1 态向 AF2 态转换的一阶相变；(iii)当 $J_2^2 < J_2 < J_2^3$ 时，AF1 态的自由能总是小于 AF2 态，此时 AF1 态更稳定；(iv)当 $J_2^3 < J_2$ 时，两个态自由能曲线相交。在这种情况下，零温附近有 $F_{AF2} < F_{AF1}$ ，AF2 态更稳定。当温度升高，系统的状态将发生由 AF2 态向 AF1 态转换的一阶相变。

4 结论

本文基于双时格林函数，在 Tyablikov 退耦近似下，研究了自旋为 1 的各向异性的双层平方晶格阻挫模型的相变行为。结果表明：只要参数 J_c 和 D 不同时为零，AF1 态和 AF2 态在 $J_2 = 0.5$ 处有相同的相变温度。当 $J_2 \neq 0.5$ 时，尽管 AF1 态和 AF2 态的相变温度不等，但它们也能共存。因此，我们分 $J_2 = 0.5$ 与 $J_2 \neq 0.5$ 两种情况探讨 AF1-AF2 态之间的稳定性以及它们之间可能发生的相变。

对于 $J_2 = 0.5$ ，参数 J_c 和 D 对两个态自由能的影响可以分成三个区域。在区域 I， $F_{AF2} < F_{AF1}$ ，AF2 态更稳定。在区域 II，系统的状态将发生由 AF1 态向 AF2 态转换的一阶相变。在零温附近，AF1 态更稳定。在相变温度附近，AF2 态更稳定。在区域 III， $F_{AF1} < F_{AF2}$ ，AF1 态更稳定。

对于 $J_2 \neq 0.5$ ，AF1 态和 AF2 态之间存在如下关系(见图 6 和图 7)，即：当 $J_2 < J_2^1$ 和 $J_2^2 < J_2 < J_2^3$ 时， $F_{AF1} < F_{AF2}$ ，AF1 态更稳定；当 $J_2^1 < J_2 < J_2^2$ 和 $J_2^3 < J_2$ 时，前者系统的状态将发生由 AF1 态向 AF2 态转换的一阶相变，且在零温时，AF1 态更稳定，相变温度附近，AF2 态更稳定；后者系统的状态将发生由 AF2 态向

AF1 态转换的一阶相变，且在零温时，AF2 态更稳定，相变温度附近，AF1 态更稳定.

参考文献

- [1] Manojlović M, Pavkov M, Škrinjar M, Pantić M, Kapor D and Stojanović S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 014435
- [2] Manojlović M, Pavkov M, Škrinjar M, Pantić M, Kapor D and Stojanović S 2005 *Phys. Rev. B* **73** 132510
- [3] Rutonjski M S, Radošević S M, Škrinjar M G, Pavkov-Hrvojević M V, Kapor D V and Pantić M R 2007 *Phys. Rev. B* **76** 172506
- [4] Liu Gui-Bin and Liu Bang-Gui 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 195701
- [5] Holt M, Sushkov O P, Stanek D and Uhrig G S 2011 *Phys. Rev. B* **83** 144528
- [6] Johnston D C, McQueeney R J, Lake B, Honecker A, Zhitomirsky M E, Nath R, Furukawa Y, Antropov V P and Yogesh Singh 2011 *Phys. Rev. B* **84** 094445
- [7] Mermin N D and Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133
- [8] Schmalfuß D, Darradi R, Richter J, Schulenburg J and Ihle D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 157201
- [9] Nunes W A, J Ricardo de Sousa, J Roberto Viana and Richter J 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 146004
- [10] Nunes W A, J Roberto Viana and J Ricardo de Sousa 2011 *J. Stat. Mech.* **P05016**
- [11] Onofre R, Hamer C J and Oitmaa J 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 416001
- [12] Zhuo Fan and Jie Quan-lin 2014 *Phys. Rev. B* **89** 054418
- [13] Bishop R F, Li P H Y, Göze O and Richter J 2019 *Phys. Rev. B* **100** 024401
- [14] Wang H Y 2012 *Green's Function in Condensed Matter Physics* (Beijing: Alpha Science International Ltd and Science Press) p348
- [15] Callen H B 1963 *Phys. Rev* **130** 890
- [16] Anderson F B, Callen H B 1964 *Phys. Rev.* **136** A1068
- [17] Fröblich P, Jensen P J, Kuntz P J 2000 *Eur. Phys. J. B.* **13** 477
- [18] Fröblich P, Jensen P J, Kuntz P J, Ecker A 2000 *Eur. Phys. J. B.* **18** 579
- [19] Fröblich P, Kuntz P J 2006 *Phys. Rep.* **432** 223
- [20] Wang H Y, Zhai L J and Qian M 2014 *J. Magn. Magn. Matter* **354(3)** 309

Phase transition of the spin-1 frustrated model on a square-lattice bilayer^{*}

Qing Yu-Lin, Peng Xiao-Li and Hu Ai-Yuan[†]

(College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing

401331, China)

Abstract

In this paper, we investigate the phase transition of the spin-1 frustrated model on a square-lattice bilayer by means of the double-time Green's function method. The effects of the interlayer coupling parameter J_c and single-ion anisotropy D on phase transformation between the Néel state (AF1) and collinear state (AF2) are explored. Our results show that, if only the parameters J_c and D are not equal to zero at the same time, the two states can exist and have the same critical temperature at $J_2 = J_1/2$. Where J_1 represents the nearest neighbor exchange. Under such parameters, a first-order phase transformation between these two states below the critical point can occur. For $J_2 \neq J_1/2$, although both states may exist, their Neel temperatures differ. If the Néel point of the AF1 (AF2) state is larger, then at very low temperature, the AF1 (AF2) state is more stable. Thus, in an intermediate temperature, a first-order phase transition between these two states may also occur.

Keywords: Antiferromagnetic, Magnetic anisotropy, General theory and models of magnetic ordering,

Exchange and superexchange interactions

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11875010,

12175027), and the Chongqing Natural Science Foundation (Grant No. cstc2021jcyj-msxm3189, cstc2019jcyj-msxmX0217, cstc2019 jcyj-msxmX0251).

录用稿件，
非最终出版稿