

随机横场与晶场作用混合自旋系统的热力学性质^{*}

张雅男¹⁾ 晏世雷^{1) 2)}

¹⁾ 苏州大学物理系, 苏州 215006)

²⁾ 苏州大学薄膜材料江苏省重点实验室, 苏州 215006)

(2003 年 2 月 12 日收到, 2003 年 3 月 13 日收到修改稿)

利用有效场理论和切断近似, 在伊辛模型的框架内考虑随机横场与晶场作用的混合自旋 $1/2$ 和自旋 1 系统的热力学性质. 重点研究了晶场、横场和随机浓度对混合自旋系统相变的影响, 研究发现在随机横场条件下, 较小的晶场存在并不能改变临界横场阈值, 取较大横场值时在某些随机浓度的范围内出现重入相变现象, 而取较小横场值时则没有出现重入相变现象. 给出了有关相图并进行了讨论.

关键词: 混合自旋系统, 伊辛模型, 热力学性质, 随机横场

PACC: 7510D, 7510H, 7510J

1. 引 言

在最近的 10 多年里, 人们采用了多种模型对各种不同的磁性自旋系统进行研究, 证明在研究磁性系统中非常有效的一种模型称为伊辛模型. 该模型除了考虑了交换相互作用外, 还可以考虑晶场、量子效应(用内禀横场表示)和许多无序分布, 得到了十分丰富的热力学和磁学特性^[1-6]. 人们已经认识到丰富的物理特性不仅具有理论意义, 而且可以具体描述某些磁性材料^[7,8]. 在原有的研究工作中, 横场伊辛模型和 Blume-Capel(BC)模型在单自旋磁性系统的研究中发挥了重要作用^[9,10]. 此后, 人们又把上述两个模型应用于混合自旋系统, 取得很大成功, 得到一系列有价值的结果^[11,12]. Zhong 等人又将横场伊辛模型和 BC 模型进行了发展, 把两个模型统一起来用于单自旋 ($S = 1$) 铁磁系统的研究^[13], 即同时在系统中考虑横场和晶场的共同作用, 这一模型被认为是更适合于普遍情况. 本文作者之一又将这种模型扩展到混合自旋系统^[14], 在这一基础上进一步引入键稀疏和晶场无序分布^[15-17], 使这方面的研究工作取得重要进展, 如重入相变、三临界点、诱导磁有序、补偿温度和新的磁化行为等方面均取得新的成

果. 另一方面, 人们已经注意到磁性系统中的量子起伏效应对系统的热力学性质有很大影响, 而量子起伏可用三模随机横场分布函数来表示, 这一表征系统内量子起伏的随机分布已分别应用于单自旋横场伊辛模型^[18,19]和混合横场伊辛模型^[20,21], 也应用于量子 Hopfield 神经网络模型中^[22]. 然而, 到目前为止还没有研究随机横场和晶场作用的混合自旋系统的热力学性质. 在新的条件下, 系统的热力学性质可能呈现一些新的特性. 本文的计算结果表明, 在三模随机横场分布条件下, 较小的晶场存在并不能改变临界横场值, 取较大横场值时在某些随机浓度的范围内出现重入相变现象, 而取较小横场值时则没有重入相变现象产生, 这些新的热力学性质尚未见报道, 这些结果来自于横场、晶场和三模随机横场分布浓度之间的竞争. 它对丰富磁性相变行为的认识, 对激发进一步的实验工作有积极意义. 本文研究工作的理论框架是有效场理论, 并在磁化表达式的推导过程中利用了切断近似.

2. 理论计算

对于具有随机横场和晶场作用的 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 混合的自旋系统, 其哈密顿函数可表述为

^{*} 江苏省教育厅自然科学基金(批准号: 00SJB140003 和 03KJA140117)及薄膜材料江苏省重点实验室开放基金(批准号: K2022)资助的课题.

[†] E-mail: slyan@suda.edu.cn

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i \Omega_i \sigma_i^x - \sum_j \Omega_j S_j^x - D \sum_j (S_j^z)^2. \quad (1)$$

所给出的格子是由子格 A 和子格 B 两个子格相互嵌套而成. 其中子格 A 中为自旋为 $1/2$ 的磁性原子, σ_i^z 和 σ_i^x 为 z 方向和 x 方向的泡利矩阵, 而子格 B 中为自旋为 1 的磁性原子, S_j^z 和 S_j^x 分别为子格 B 磁性原子 z 方向和 x 方向的泡利矩阵. 这里 J 为最近邻格点之间的交换相互作用. D 为晶场的大小, 取 D 为负值. Ω_i 和 Ω_j 为两个子格内的内禀横场, 代表子格中量子隧道效应, 考虑到两个子格中量子起伏效应, 它们应满足下列三模随机分布:

$$P(\Omega_\alpha) = p\delta(\Omega_\alpha) + \frac{1}{2}(1-p) \times [\delta(\Omega_\alpha + \Omega) + \delta(\Omega_\alpha - \Omega)], \quad (2)$$

其中 $\alpha = i$ 或 j . 为了解方程 (1), 首先把哈密顿函数写成有效哈密顿函数, 并求出其本征值, 然后利用平衡态统计物理的方法写出配分函数. 这样在有效场理论的框架内, 引入微分算子技术, 得到子格 A 和子格 B 中自发磁化 σ 和 m 以及四极矩 q 的表达式:

$$\sigma = \langle\langle \sigma_i^z \rangle\rangle = \langle\langle \prod_{j=1}^z [(S_j^z)^2 \cosh(J\nabla) + S_j^z \sinh(J\nabla) + 1 - (S_j^z)^2] \rangle\rangle F(x)|_{x=0}, \quad (3)$$

$$m = \langle\langle S_j^z \rangle\rangle = \langle\langle \prod_{i=1}^z \left[\cosh\left(\frac{1}{2}J\nabla\right) + 2\sigma_i^z \sinh\left(\frac{1}{2}J\nabla\right) \right] \rangle\rangle G(x)|_{x=0}, \quad (4)$$

$$q = \langle\langle (S_j^z)^2 \rangle\rangle = \langle\langle \prod_{i=1}^z \left[\cosh\left(\frac{1}{2}J\nabla\right) + 2\sigma_i^z \sinh\left(\frac{1}{2}J\nabla\right) \right] \rangle\rangle H(x)|_{x=0}, \quad (5)$$

其中 $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}$ 为微分算子, Z 为晶格配位数, 而函数 $F(x)$, $G(x)$ 和 $H(x)$ 可定义为

$$F(x) = \int f(x, \Omega_i) P(\Omega_\alpha) d\Omega_\alpha, \quad (6)$$

$$G(x) = \int g(x, \Omega_j) P(\Omega_\alpha) d\Omega_\alpha, \quad (7)$$

$$H(x) = \int h(x, \Omega_j) P(\Omega_\alpha) d\Omega_\alpha, \quad (8)$$

$f(x, \Omega_i)$, $g(x, \Omega_j)$ 和 $h(x, \Omega_j)$ 可写成

$$f(x, \Omega_i) = \frac{1}{2} \frac{x}{(\Omega_i^2 + x^2)^{1/2}} \times \tanh\left(\frac{\beta}{2}(\Omega_i^2 + x^2)^{1/2}\right), \quad (9)$$

$$g(x, \Omega_j) = \sum_{n=1}^3 \left[E(n) \left[\frac{2x}{3C} \epsilon_1(n) + \frac{2}{27} \frac{D^3 x - Dx^3 + (7/2)D\Omega_j^2 x}{BC} \times \epsilon_2(n) \right] \right] \left[\sum_{n=1}^3 E(n) \right]^{-1}, \quad (10)$$

$$h(x, \Omega_j) = \sum_{n=1}^3 \left[E(n) \left[\frac{2D}{9C} \epsilon_1(n) + \frac{2}{27} \frac{\frac{1}{2}\Omega_j^2 x^2 - D^2 x^2 + x^4 - \frac{1}{2}\Omega_j^4}{BC} \times \epsilon_2(n) + \frac{2}{3} \right] \right] \left[\sum_{n=1}^3 E(n) \right]^{-1}, \quad (11)$$

其中

$$E(n) = \exp\left[2\beta C \epsilon_1(n) + \frac{2\beta D}{3}\right], \quad (12)$$

$$\epsilon_1(n) = \cos\left(\frac{(n-1)2\pi + \theta}{3}\right), \quad (13)$$

$$\epsilon_2(n) = \sin\left(\frac{(n-1)2\pi + \theta}{3}\right), \quad (14)$$

$$\theta = \arccos\left(\frac{A}{C^3}\right), \quad (15)$$

$$A = -\frac{1}{27}D^3 + \frac{1}{3}Dx^2 - \frac{1}{6}D\Omega_j^2, \quad (16)$$

$$B = \frac{1}{9} \left[\mathfrak{X}(D^2 x - x^3)^2 + \frac{3}{4}D^2 \Omega_j^4 \right]^{1/2} + 15D^2 \Omega_j^2 x^2 + 9\Omega_j^4 x^2 + 9\Omega_j^2 x^4 + 3\Omega_j^6, \quad (17)$$

$$C = \left[\frac{1}{9}D^2 + \frac{1}{3}\Omega_j^2 + \frac{1}{3}x^2 \right]^{1/2}. \quad (18)$$

显然方程 (3) (4) 和 (5) 均为多自旋相关的表达式, 在数学上难以处理, 通常引入切断近似进行计算. 虽然采用切断近似后, 其方程被简化, 但其物理的本质不会丧失. 这样可将方程 (3) (4) 和 (5) 等号右边展开, 并进行适当运算, 得到关于子格 A 平均自发磁化 σ 的自治方程, 即

$$\sigma = a\sigma + b\sigma^3 + c\sigma^5 \dots \quad (19)$$

根据朗道相变理论, 二级相变线附近的磁化 σ 足够小, 所以可略去高阶项, 仅保留线性项, 于是得到二级相变方程,

$$a = 1, \quad \text{且} \quad b < 0, \quad (20)$$

其中

$$a = 2z^2 L_1 [\sinh(J \nabla)] [Q_1 [\cosh(J \nabla)] + 1 - Q_1]^{-1} F(x) |_{x=0}, \quad (21)$$

$$b = \frac{4}{3} z^2 (z-1) (z-2) L_2 [\sinh(J \nabla)] \times [Q_1 [\cosh(J \nabla)] + 1 - Q_1]^{-1} F(x) |_{x=0} + \frac{3}{4} z^4 (z-1) (z-2) L_1^3 [\sinh(J \nabla)] \times [Q_1 [\cosh(J \nabla)] + 1 - Q_1]^{-3} F(x) |_{x=0} + 4z^3 (z-1) L_1 Q_2 [\sinh(J \nabla)] [\cosh(J \nabla) - 1] \times [Q_1 [\cosh(J \nabla)] + 1 - Q_1]^{-2} F(x) |_{x=0}. \quad (22)$$

系数 L_1, L_2, Q_1 和 Q_2 为

$$L_1 = \left[\sinh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right] \times \left[\cosh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^{z-1} \mathcal{A}(x) |_{x=0}, \quad (23)$$

$$L_2 = \left[\sinh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^3 \times \left[\cosh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^{z-3} \mathcal{A}(x) |_{x=0}, \quad (24)$$

$$Q_1 = \left[\cosh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^z \mathcal{H}(x) |_{x=0}, \quad (25)$$

$$Q_2 = \left[\sinh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^2 \times \left[\cosh\left(\frac{1}{2} J \nabla\right) \right]^{z-2} \mathcal{H}(x) |_{x=0}. \quad (26)$$

现在已推导了随机横场和晶场作用的混合自旋系统二级相变方程的一般表达式,原则上能研究任意配位数格子所构成的 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 的混合自旋系统,为了计算简单,这里研究二维蜂窝格子在随机横场和晶场作用的混合自旋系统的热力学性质,我们相信获得的结果对高配位数晶格具有指导意义。

3. 结果与讨论

图 1(a)-(c)为晶场分别固定为 $D/J = 0.0, -0.4$ 和 -0.5 时居里温度随横场变化的相图。曲线上的值是随机横场浓度 p 。从图 1(a)可以看到当系统中的晶场 $D/J = 0.0$,即没有晶场作用时,此时系统变为混合随机横场伊辛系统^[21],随机浓度 p 的增大,有序相范围扩大,这是合理的,因为横场的存在会抑制磁有序相,晶格内三模随机分布的存在使横场作用减弱,从而导致磁有序相范围的扩大。这样有可能存在一个临界随机浓度值和临界横场值,在大于临界值时,二级相变线与横轴没有交点,二级相变线趋于 $\Omega \rightarrow \infty$,根据我们的详细计算,当 $p = 0.630$

时, $\Omega_c/J = 21.053$ 。这样 $p > 0.630$ 时,系统在低温时始终处于磁有序态,这显然是随机分布和横场交互作用的结果。图 1(b)中晶场存在并是一个较小值,与图 1(a)比较,发现晶场存在时降低了系统的居里温度,磁有序相范围仍然随随机浓度 p 的增大而增大,与图 1(a)比较,磁有序相区域减小。当 $p > 0.630$ 时,二级相变线也趋于 $\Omega \rightarrow \infty$,临界横场值仍为 $\Omega_c/J = 21.053$,即一个小的晶场存在并没有改变临界横

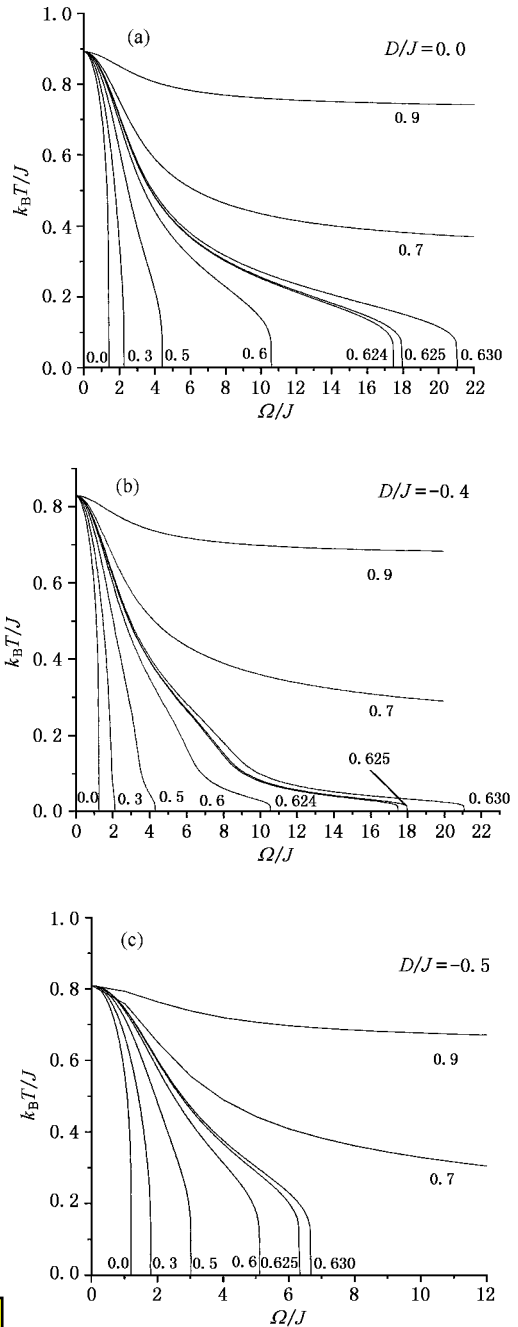


图 1 居里温度随横场的变化 曲线上方为三模随机横场分布浓度值

场值,在 $p \leq 0.630$ 的其他相变线也表现出相同现象,这一现象在以往的研究中并没有观察到.图 1(c)中将晶场增大到 $D/J = -0.5$,上述现象消失,临界横场值大大减小.

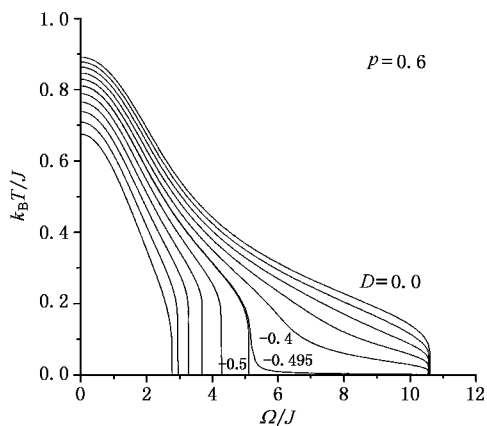


图 2 居里温度随横场的变化 曲线上为晶场值的变化

为了更清楚地研究图 1 中出现的热力学性质,图 2 给出固定随机浓度 $p = 0.6$,晶场改变时居里温度随横场的变化关系.从图 2 可以看到,随负晶场 D 的增大,系统磁有序相的范围相应减小,但在 $0.0 \geq D \geq -0.495$ 范围内,二级相变线与横轴的交点始终不变,临界横场值均为 $\Omega/J = 10.543$,即系统中小的晶场值并不能影响临界横场值.当晶场 D 增大到 $D = -0.5$ 时,居里温度趋于零时系统的横场值突然减小为 $\Omega/J = 5.112$,以后随负晶场的值进一步增大,临界横场值也进一步减小,图 2 与图 1 中的情形一致.

图 3(a)和(b)给出横场固定于 $\Omega/J = 1.0$ 和 $\Omega/J = 2.0$,改变随机浓度时居里温度随晶场的变化关系.图 3 有序相范围随随机浓度的增大而增大,这一变化的物理原因与图 1 中讨论的一致.但图 3(a)中横场固定为 $\Omega/J = 1.0$ 时,随机浓度在 $1.0 \geq p \geq 0.4$ 范围内变化,二级相变温度趋于零时晶场全部收敛于 $-D/J = 1.5$,即在基态时晶场存在一种简并模式.图 3(b)中横场取较大值,并固定为 $\Omega/J = 2.0$,从图 3(a)和(b)的比较中可以看出两者既有共同点又有不同之处,图 3(b)中,仍有二级相变线交于横轴 $-D/J = 1.5$,但随机浓度的变化范围减小为 $1.0 \geq p \geq 0.55$,而且在 $0.45 \geq p \geq 0.3$ 范围内,晶场又收敛于 $-D/J = 0.5$,表明在较大横场存在时,在基态晶场有两种简并模式.与图 3(a)比较另有一个非常显著的差异,图 3(b)中当随机浓度 $p = 0.5$ 时,温度

趋于零时系统的负晶场值减小到 $-D/J = 0.868$,同时出现重入现象,随机浓度进一步减小,重入现象变得更加明显(如 $p = 0.45$ 和 $p = 0.4$ 曲线).从以往工作知道横场的存在能抑制重入现象,横场越大对重入现象的抑制越明显.然而现在的情况恰好相反,在目前系统中由于三模随机分布的引入,使得较小横场的存在并没有重入现象的出现,而较大横场的存在,可以在一定的随机浓度范围内导致重入现象的出现,这与以往人们对这一问题的认识不一致,我们认为这一新的热力学特性来自于晶场、横场和随机浓度三者之间的相互竞争.随机横场和晶场的共同作用强烈地影响着系统的二级相变行为.

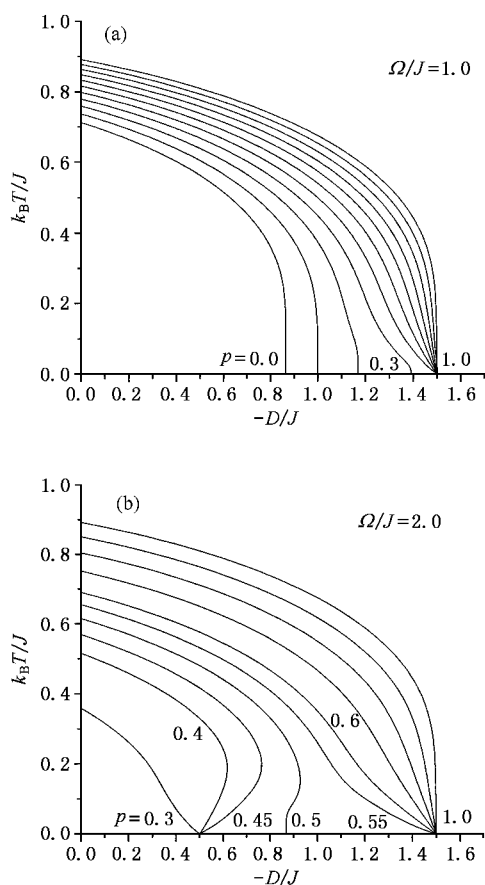


图 3 居里温度随晶场的变化 曲线说明同图 1

4. 结 论

本文利用有效场理论研究了随机横场和晶场作用下混合 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 伊辛系统的热力学性质,并给出了相应的相图.我们发现在三模随机横场分布存在时晶场对混合自旋系统中的磁有序相起抑制作用,但负晶场较小,且变化范围在 $0.0 \geq D \geq$

-0.495时,不会改变系统的随机临界浓度值和横场值,而 $p > 0.630$ 时,在低温区系统总是处于磁有序态,并且 $\Omega \rightarrow \infty$.当负晶场 $D < -0.495$ 时,系统磁有序相范围明显减小,系统的临界横场值随负晶场的增加而变小.另一方面,正如图3所描述,较小横场值($\Omega/J = 1.0$)时系统并不出现重入相变现象,基态时晶场存在一种简并模式,相反,系统有较大横场

值($\Omega/J = 2.0$)时,在一定的随机浓度变化范围内,可导致重入相变现象的产生,基态时晶场有两种简并模式出现.上述一些新的结果将有助于深化人们对随机横场(量子起伏效应)和晶场作用的全面认识.总之由于随机横场的引入以及三个重要因素之间的竞争,导致系统许多新的热力学性质出现.

- [1] Bobak A and Jascur M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 11533
- [2] Gao Z, Xu J H and Wang Z L 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 2131 (in China) [高 瞻、徐坚宏、王振林 1999 物理学报 **48** 2131]
- [3] Ni J and Gu B L 2000 *Chin. Phys.* **9** 469
- [4] Wu M Y, Ye A J, Li Z B and Zeng W G 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1168 (in Chinese) [吴木营、叶爱军、李志兵、曾文光 2000 物理学报 **49** 1168]
- [5] Deng L L and Yan S Y 2002 *Chin. Phys.* **11** 383
- [6] Jiang W, Wei G Z, Du A and Zhang Q 2002 *Chin. Phys.* **11** 823
- [7] Endl G, Bielmeyer B and Hoffmann H 1991 *Colloquium. Digest of 13th ICMFS Glasgow* p155
- [8] Carey R, Dieu L and Newman D M 1997 *J. Magn. Magn. Mater.* **175** 99
- [9] Kaufman M, Kluzinger P E and Khurana A 1986 *Phys. Rev. B* **34** 4766
- [10] Carneiro C E I, Henriques V B and Salinas S R 1989 *J. Phys.* **1** 3687
- [11] Kaneyoshi T, Sarmiento E F and Fittipaldi I P 1988 *Phys. Rev. B* **38** 2649
- [12] Zhang G M and Yang C Z 1993 *Phys. Rev. B* **48** 9452
- [13] Jiang X F, Li J L, Zhong J L and Yang C Z 1993 *Phys. Rev. B* **47** 827
- [14] Yan S L and Yang C Z 1997 *Z. Phys. B* **103** 93
- [15] Yan S L and Yang C Z 1998 *Phys. Rev. B* **57** 3512
- [16] Benayad N, Zerhouni R and Klumper A 1998 *Euro. Phys. J. B* **5** 687
- [17] Yan S L 2002 *Chin. Phys.* **11** 1066
- [18] Cassol T F, Figueiredo W and Plascak J A 1991 *Phys. Lett. A* **160** 518
- [19] Wang Y Q and Li Z Y 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 811 (in Chinese) [王永强、李振亚 1995 物理学报 **44** 811]
- [20] Weng X M and Li Z Y 1996 *Phys. Rev. B* **53** 12142
- [21] Laaboudi B, Saber M and Kerouad M 1999 *Phys. Stat. Sol. (b)* **212** 153
- [22] Qin X and Ma Y Q 1999 *Commun. Theor. Phys.* **34** 217

Thermodynamic properties of random transverse mixed Ising spin system with crystal field^{*}

Zhang Ya-Nan¹⁾ Yan Shi-Lei^{1,2)†}

¹⁾(*Department of Physics , Suzhou University , Suzhou 215006 ,China*)

²⁾(*Provincial Key Laboratory of Thin Film Materials , Suzhou University , Suzhou 215006 ,China*)

(Received 12 February 2003 ; revised manuscript received 13 March 2003)

Abstract

Making use of the effective field theory (EFT) and a cutting approximation , in the framework of Ising model , we investigate the thermodynamic properties of a random transverse mixed spin system with a crystal field. Special emphasis is placed on the influence of crystal field , transverse field and random concentration on phase transitions of the system. Our studies find that a smaller crystal field cannot change the percolation threshold of the critical transverse field in the presence of a random transverse field , and that the reentrant phenomena shall appear in the range of random concentration concerned when the transverse field takes a larger value , where as the reentrant phenomena do not occur and when the transverse field takes a smaller value . These new thermodynamic properties have not been reported in previous works so far as we know . We give a series of phase diagrams and discuss them in detail .

Keywords : mixed spin system , Ising model , thermodynamic properties , random transverse field

PACC : 7510D , 7510H , 7510J

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation from the Education Bureau of Jiangsu Province ,China(Grant Nos. 00SJB140003 and 03KJA140117) , and the Thin Film Materials Key Laboratory Open Foundation of Jiangsu Province , China (Grant No. K2022) .

[†] E-mail : slyan@suda.edu.cn