

磁场诱导的单离子各向异性反铁磁链的比热

石 玉^{1)†} 邢怀中²⁾ 张怀武¹⁾ 荆玉兰¹⁾ 刘颖力¹⁾

¹⁾ 电子科技大学微电子与固体电子学院, 成都 610054)

²⁾ 东华大学物理系, 上海 200051)

(2003 年 11 月 5 日收到, 2004 年 5 月 8 日收到修改稿)

利用改进的 Schwinger 玻色子平均场理论, 研究了横向外加磁场下自旋为 1 的单离子各向异性海森堡反铁磁链的热力学性质. 发现在外加磁场下预示这一体系中存在 Luttinger 液体相—完全极化相相变的比热奇性, 并给出了相应的相图. 研究还发现, 单离子各向异性对比热的影响较小, 这和纵向场的结果完全不同. 以上结果对整自旋的反铁磁链具有普适性, 对实验研究具有指导性.

关键词: 反铁磁链, 热力学性质, Schwinger 玻色子

PACC: 6740K, 7540C

1. 引 言

一维磁性系统的研究开始于 1931 年^[1], 虽然几十年过去了, 但低维反铁磁性的研究一直是当今世界理论和实验关注的焦点和难点之一. 在理论方面, 许多工作和方法, 如限元的标度技术^[2]、数值模拟计算^[3,4]、Monte Carlo 方法^[5]、精确解模型的分析^[6]等都是为了证明 Haldane's 的猜想^[7]: 单位整自旋海森堡反铁磁链有能隙, 而半整自旋海森堡反铁磁链无能隙. 现在这方面的工作已取得了很大的进展.

近年来, 外加磁场对热力学行为的影响引起了人们的广泛关注.^[8,9] 最近 Honda 等人^[10,11]报道了, 在外加磁场下, 自旋 $S = 1$ 的单离子各向异性海森堡反铁磁链样品 (NDMAP) 的比热曲线上有一个奇点, 认为这个奇性是场诱导的长程序的标志, 并认为它来自单离子各向异性的贡献. 这个模型的哈密顿为

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j + D \sum_i (S_i^z)^2 - \mu_B \sum_i S_i \cdot \bar{g} \cdot h, \quad (1)$$

式中 J 是交换积分, D 是单离子各向异性常数, μ_B 是 Bohr 磁子, \bar{g} 是带有两个矩阵元的张量 (g_{\parallel} , g_{\perp}).

根据实验的奇特结果, 我们利用改进的

Schwinger 玻色子平均场理论讨论了该系统在横向磁场下的热力学行为, 众所周知, Schwinger 玻色子平均场理论可以很好地适合 1D 海森堡反铁磁整自旋系统, 其中包括大 N 闲情点的量子涨落^[12-14], 考虑到有外场的情况下玻色子的简并, 大 N 将有所下降, 此时的 Schwinger 玻色子平均场理论仍能给出比较可信的结果.

2. Schwinger Bosons 理论模型

从方程(1)出发, 建立双子格反铁磁玻色子算符, 通过标准的玻色子算符运算,^[15]可以得到它的能量以及系统的磁化率和比热等热力学量.

系统的单位格点磁化率

$$\chi = \frac{\mu_B^2 g_{\perp}^2}{2N} \sum_k \left\{ \beta \frac{U^2(k)}{1 - U^2(k)} \left[n_{\alpha}(k) + 1 \right] n_{\alpha}(k) + [n_{\beta}(k) + 1] n_{\beta}(k) \right\} + \frac{(1 - U^2(k))^{-3/2}}{2\lambda} \times (n_{\alpha}(k) + n_{\beta}(k) + 1) \quad (2)$$

式中

$$U(k) = \eta \gamma_k - \frac{\mu_B g_{\perp}}{2\lambda} n_{\alpha\beta}(k) = \frac{1}{e^{\mu_k^{(\alpha\beta)}} - 1} \quad (3)$$

† E-mail: shiyu-aaa@163.com; 电话 028-83201810.

系统的单位格点比热 $C/2N$ 可以由下式得出：

$$C/2N = \frac{1}{2N} \frac{\partial E}{\partial T},$$

式中 E 为系统的内能,因解析解很难得出,下面主要讨论比热的数值解.

3. 比 热

图 1 给出 $D=0$ 的情况下,磁场对比热的影响.

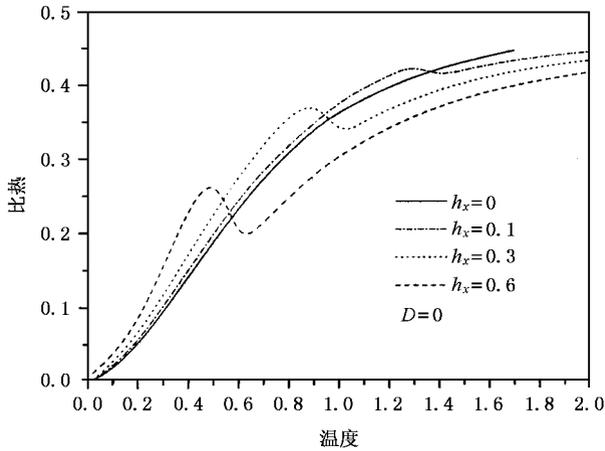


图 1 在 $D=0$ 不同场下的比热温度曲线

从图中可以看出,在低温下比热随磁场的增加而增加,但在高温下,比热随磁场的增加而减少.给定的磁场 $0 < h_x < 0.95$,明显的可以看到比热曲线上有一个奇点,如果磁场去掉,则奇点也会消失.可以断定,这种奇异性由磁场诱导而产生的相变.让我们回想在纵场的情况下,这种奇点是没有的^[15].从这个意义上讲,这种相变只有系统在横场的情况下, Schwinger 玻色子平均场理论的框架下才产生的.我们注意到对不同的纵向场,实验上观察到,几乎在同一个地方,低温区出现了奇点,但这个奇点的峰和横向场的比较要小得多.事实上 Schwinger 玻色子平均场理论在纵向场没能观察到这个奇点的峰,这可能是理论上的缺陷.随着磁场的增加,奇点出现处的峰温 T_c 移向低温的一侧,结合磁化率的结果,可以辨明这是一个从自旋无序相到自旋完全极化相的相变.我们可以从 Z_2 对称相的破缺的结果来理解这个现象,当磁场沿着 Z 方向时, XY 对称型被保留下来;相反,当外加磁场沿着垂直于 Z 方向时, XY 对称型被打破,而 Ising 类的各向异性产生^[10].在一个给定的磁场和温度下,由于 Z_2 对称相的破缺,比热的奇异性在一定温度下就

将出现,它是当外加横向磁场使得自旋排列垂直于易轴时,来自自旋无序相到自旋完全极化相的相变标志.这里应该指出,我们观察到的比热的奇异性是不同于无磁场存在的情况;在不同磁场下比热上出现的圆峰峰温 T_p 是不同的, T_p 随磁场的增加而减少,正像其他文献所指出的那样,这也可能是 Schwinger 玻色子平均场理论的局限.然而,在高温下我们观察到比热随磁场的增加而减少,显示了 $S=1$ 反铁磁海森堡链的正确趋势.另外一方面,我们注意到在高磁场下,比热上的奇异性在实验 NDMAP 上表现出随着磁场的增加向高温的方向移动^[10].可以看到实验结果和本文理论计算有一个分歧.这样的分歧可能来自于以下两个方面:一方面可能是前面所提到的玻色子理论的一些局限性所导致,另一方面可能是 NDMAP 材料需要一个更好的更理想的模型,而不是方程(1)所能够完全含概的模型.由于以上的原因,本文理论数据没能直接和实验的数据进行比较.但是,本文中改进的玻色子理论却抓住了整自旋反铁磁海森堡链在横向磁场下最基本的物理图像.不仅如此,玻色子理论结果定性的和有限链精确对角化的上枝结果相一致.而后者来自于摇摆磁化率的拓展^[16].

我们也研究了在给定的磁场 $h_x=0.3$ 下,单离子各向异性对比热的影响,结果如图 2 所示,从图中可以看出,单离子各向异性对比热影响不大,它仅能微小的改变比热的峰和谷.随 D 的增加,比热有较小的增加.这个结果和纵向场是完全不同的,纵向场下单离子各向异性使得比热具有多样性^[15].这一点是非常好理解的,因为单离子各向异性是 XY 类的,如果外加磁场垂直于 Z 轴,单离子各向

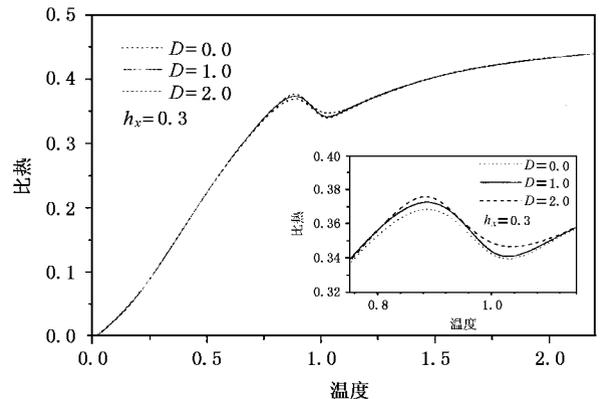


图 2 不同的单离子各向异性对比热的影响(内嵌的小图为放大的比热温度曲线)

异性对物理的观察量将不会有太大的影响,正像本文所描述的那些,而如果外加磁场沿 Z 轴方向,单离子各向异性对物理的观察量的影响是另外一回事,如文献 [15] 所描述的,有各种各样的影响.

在不同的温度下,磁场对比热的影响如图 3 所示,对给定的温度,比热随磁场的增加而增加,到达一个极大值后,比热随磁场的增加而减少,我们可以再次看到在比热和场的曲线上有一个奇点,很有趣的是这个奇点的温度和场与图 1 比热和温度曲线上发现的温度和场是一致的.

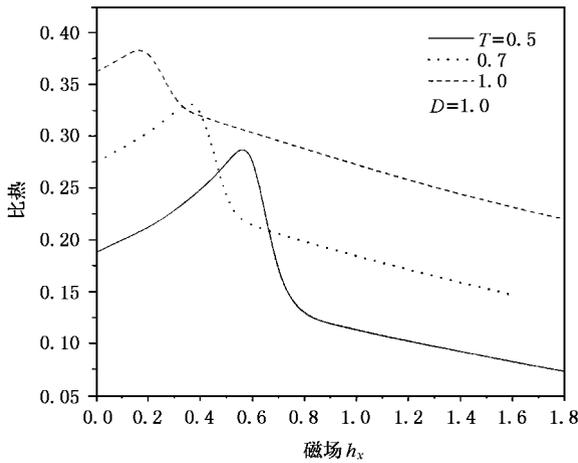


图 3 比热随磁场的变化曲线

4. 临界相图

作为对比热结果的总结,我们在 Schwinger 玻色子平均场理论的基础上,举荐了一个场 (h_x)-温

度 (T) 的平面相图,考虑到单离子各向异性对热力学观察量的影响不大,在不失去一般性的基础上,我们仅对 $D=0$ 的相图作为一个例子来讨论,如图 4 所示,对 $h_x < h_c$ 并在 h_c 附近,系统可能在 Luttinger liquid 相 (LL Phase), 被磁化率在 $T \rightarrow 0$ 时的有限值标志. 当 $h_x > h_c$, 系统进入了自旋完全极化相, 在 $h_x = h_c$, 比热奇异性将出现.

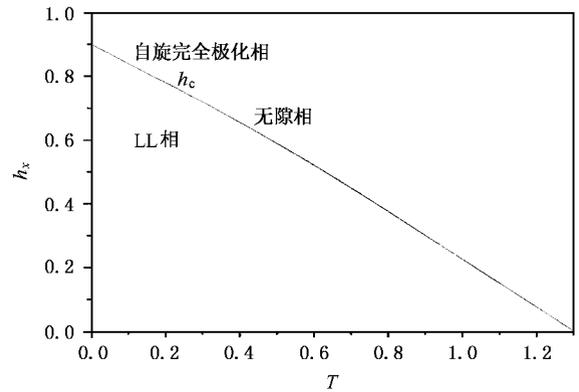


图 4 磁场 (h_x)-温度 (T) 相图

5. 结 论

利用改进的 Schwinger 玻色子平均场技术,讨论了 $1D$ 自旋为 1 的单离子各向异性反铁磁链在横向外场下的热学性质和外场诱导的相变,对比热实验上长久以来悬而未解的奇异性给出了新的解释,并给实验的理论模型提出了新的建议,对实验具有较好的指导性. 不仅如此,该方面的工作使得 Schwinger 玻色子理论的应用得到了发展.

- [1] Bethe H 1931 *Phys.* **71** 205
- [2] Botet R and Jullien R 1983 *Phys. Rev. B* **27** 613
- [3] Parkinson J B and Bonner J C 1985 *Phys. Rev. B* **32** 4703
- [4] Sakai T and Takahashi M 1990 *Phys. Rev. B* **42** 4573
- [5] Nightingale M P and Blote H W 1988 *Phys. Rev. B* **33** 659
- [6] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H and Tasaki H 1988 *Commun. Math. Phys.* **115** 477
- [7] Haldane F D M 1983 *Phys. Lett.* **93** A 464
- [8] Gao Y *et al* 2000 *Acta. Phys. Sin.* **51** 1571 (in Chinese) 高阳等 2000 *物理学报* **49** 1586]
- [9] Liu X B, Zhang S Y and Shen B G 2004 *Chin. phys.* **13** 397
- [10] Honda Z, Asakawa H and Katsumata K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2566
- [11] Honda Z, Katsumata K and Katori H A 1997 *J. Phys. Cond. Mat.* **9** L83
- [12] Arovas D P and Auerbach A 1991 *Phys. Rev. B* **38** 316
- [13] Sachdev S and Read N 1991 *Int. J. Mod. Phys. B* **5** 219
- [14] Read N and Sachdev S 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1773
- [15] Su G, Xing H, Xue D, Chen Z and Li F 2000 *Inter. J. Mod. Phys. B* **14** 2561
- [16] Sakai T 2000 *Phys. Rev. B* **62** R9240

Field-induced specific heat for the antiferromagnetic chain with single-ion anisotropy

Shi Yu¹⁾ Xing Huai-Zhong²⁾ Zhang Huai-Wu¹⁾ Jing Yu-Lan¹⁾ Liu Ying-Li¹⁾

¹⁾(*College of Microelectronics and Solid-state Electronics, University of Electronics Science and Technology of China, Chengdu 610054, China*)

²⁾(*Department of Physics, Donghua University, Shanghai 200051, China*)

(Received 5 November 2003 ; revised manuscript received 8 May 2004)

Abstract

The thermodynamic properties in one-dimensional $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet with single-ion anisotropy in the presence of a transverse magnetic field is obtained on the basis of the Schwinger boson mean-field theory. The anomalies of the specific heat at low temperatures, which might be an indicative of a field-induced transition from a Luttinger liquid phase to an ordered phase, are explicitly uncovered under the transverse field. A schematic phase diagram is proposed. The little effect of the single-ion anisotropy on specific heat is also observed, the result is very different from that obtained under a longitudinal field. All results above are expected to be helpful for the experimental investigation.

Keywords : antiferromagnet chain, thermodynamic property, Schwinger boson

PACC : 6740K, 7540C