第 55 卷 第 9 期 2006 年 9 月
1000-3290/2006/55(09)/4865-08
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.55,No.9,September,2006

混合自旋反铁磁材料 Y_2BaNiO_5 的磁学和热力学性质*

孔红艳[1)†] 张 林[1)] 宋 筠[2)]

1)(宝鸡文理学院物理系非线性物理研究所,宝鸡 721007)

2)(北京师范大学物理系,北京 100875)

(2005 年 6 月 17 日收到;2006 年 3 月 23 日收到修改稿)

在格林函数的理论框架下,采用一维自旋为 1 的各向异性 Heisenberg 模型来讨论 Y_2BaNiO_5 材料的磁学和热力学性质.得到了它的自旋关联函数、低激发谱、基态能(E_g)、比热(C)和静态磁化率(χ)在不同交换各向异性因子下的性质,所得结果与实验和数值模拟结果完全一致.

关键词:Heisenberg 模型,格林函数理论,Haldane 能隙,反铁磁长程序

PACC:7340Q,7550B,7550P

1. 引 言

1983 年,Haldane 预言整数自旋链的自旋波谱存在一个有限的能隙而半整数自旋链的激发谱却是无能隙的.Haldane 猜测的提出引起了人们研究低维磁性材料的极大兴趣.对 $S=1$ 的一维 Heisenberg 链,Haldane 关于有限能隙的猜测已经得到了数值模拟的肯定和实验结果的证实.因此整数自旋反铁磁链中 Haldane 能隙的存在已被人们普遍接受[1,2]. Y_2BaNiO_5 是最新发现的被确认为是 Haldane 态物质.其中 Y 为非磁性稀土元素钇,Ni 链间的相互作用可以忽略,低温时无长程铁磁序,整个系统呈现为一个很好的 Haldane-gap 反铁磁体.实验上对其磁性的测量表明它可以由一维 $S=1$ 的 Heisenberg 反铁磁链很好地描述[3].在链上最近邻的 Ni 自旋之间存在较大的超交换相互作用 $J\approx 332$K.磁化率测量发现其自旋能隙 $\Delta\approx 100$K.另外,三重态激发谱的劈裂表明了单离子各向异性常数 $D\approx 0.2$J 的存在或交换各向异性 γ 常数的存在[4].

2. 理论推导

下面给出一维自旋为 1 的具有交换各向异性和单离子各向异性的反铁磁链的哈密顿量为

$$H = J\sum_{i=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}}\left[S_i^zS_{i+1}^z + \frac{\gamma}{2}(S_i^+S_{i+1}^- + S_i^-S_{i+1}^+)\right] + D\sum_{i=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}}(S_i^z)^2, \tag{1}$$

γ 和 D 分别为交换各向异性常数和单离子各向异性常数.

我们先构造格林函数《S_0^z;S_n^z》,由格林函数的运动方程可以得到

$$\begin{aligned}\omega《S_0^z;S_n^z》 &= \frac{1}{2\pi}\langle[S_0^z,S_n^z]\rangle + 《S_0^z,H];S_n^z》\\ &= J\sum_n《\Big[S_0^z,S_n^zS_{n+1}^z + \frac{\gamma}{2}(S_n^+S_{n+1}^- + S_n^-S_{n=1}^+) + D'(S_n^z)^2\Big];S_n^z》,\end{aligned} \tag{2}$$

其中 $JD'=D$,利用对易关系

$$[S_i^{\pm},S_j^z] = \mp S_i^{\pm}\delta_{ij},[S_i^+,S_j^-] = 2S_i^z\delta_{ij}, \tag{3}$$

不难得出

$$\omega《S_0^z;S_n^z》 = \frac{J}{2}\gamma《S_0^+S_1^- - S_{-1}^+S_0^- - S_0^-S_1^+ + S_{-1}^-S_0^+;S_n^z》. \tag{4}$$

* 宝鸡文理学院重点科研基金(批准号:ZK2406,ZK2550)资助的课题.

† E-mail:kongyan21th@tom.com

由于一维磁系统中不存在长程序,不能按 Tyablibov 的一级格林函数方法退耦近似,而需按二级格林函数方法作退耦近似.进一步地,(4)式右边的各个格林函数的运动方程可以同上求出.如对于格林函数,其运动方程为

$$
\begin{aligned}
&(\omega - J + 2JD')\langle\langle S_0^+ S_1^- ; S_n^z\rangle\rangle \\
&= \frac{1}{2\pi}(-\delta_{0n} + \delta_{1n})\langle S_0^+ S_1^-\rangle \\
&\quad + 2J\gamma\langle\langle S_0^z - S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle \\
&\quad + J\langle\langle - S_0^+ S_1^- S_1^z - S_{-1}^z S_0^+ S_1^- + \gamma S_{-1}^+ S_0^z S_1^- \\
&\quad - \gamma S_0^z S_1^{z^2} - 2D' S_0^+ S_0^z S_1^- ; S_n^z\rangle\rangle \\
&\quad + J\langle\langle S_0^+ S_1^- S_2^z + S_0^+ S_0^z S_1^- - \gamma S_0^+ S_1^z S_2^- \\
&\quad + \gamma S_1^z S_0^{z^2} + 2D' S_0^+ S_1^- S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle,
\end{aligned}
\tag{5}
$$

其中利用了 $S=1$ 的自旋算符所满足的性质

$$
S_i^- S_i^+ = 2 - S_i^z - (S_i^z)^2 . \tag{6}
$$

在计算格林函数$\langle\langle S_0^+ S_i^- ; S_n^z\rangle\rangle$的运动方程时,遇到了四算符的高级格林函数,如 $J\langle\langle S_0^+ S_1^z S_1^- ; S_n^z\rangle\rangle$,利用对易关系式,有

$$
\begin{aligned}
J\langle\langle S_0^+ S_1^z S_1^- ; S_n^z\rangle\rangle &= - J\langle\langle S_0^+ S_1^- S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle \\
&\quad + J\langle\langle S_0^+ S_1^- ; S_n^z\rangle\rangle,
\end{aligned}
\tag{7}
$$

式中的最后一项正是(5)式左边的 J 项.下面将会看到,正是这个 J 项使 $S=1$ 的反铁磁链的能谱发生 Haldane 能隙.因此在我们推广的二级格林函数理论中,Haldane 能隙被自然得出,而且 Haldane 能隙值是严格的,没有作任何近似.

用同样的方法可以得出(4)式右边各格林函数的运动方程,接着用如下的规则对(4)式右边各格林函数作退耦近似[5]:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle S_0^z S_0^z S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle &\to \alpha_1\langle S_0^z S_0^z\rangle\langle\langle S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle \\
&\quad + \alpha_1\langle S_0^z S_1^z\rangle\langle\langle S_0^z ; S_n^z\rangle\rangle,
\end{aligned}
\tag{8}
$$

$$
\langle\langle S_0^+ S_1^- S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle \to \alpha_2\langle S_0^+ S_1^-\rangle\langle\langle S_1^z ; S_n^z\rangle\rangle, \tag{9}
$$

其中由于各向异性,引入了两个参数 α_1,α_2.并且作如下的定义:

$$
\begin{aligned}
&C_n^z = \langle S_0^z S_n^z\rangle, C_n^\pm = \langle S_0^+ S_n^-\rangle = \langle S_0^- S_n^+\rangle \\
&\qquad (n = 0,1,2,\cdots),
\end{aligned}
\tag{10}
$$

此时方程(4)成为

$$
\begin{aligned}
&(\omega - J + 2JD')\omega\langle\langle S_0^z ; S_n^z\rangle\rangle \\
&= \frac{J}{2}\gamma\Big\{\frac{1}{2\pi}A_n + A_0\langle\langle S_0^z ; S_n^z\rangle\rangle \\
&\quad + A_1\langle\langle S_1^z + S_{-1}^z ; S_n^z\rangle\rangle + A_2\langle\langle S_2^z + S_{-2}^z ; S_n^z\rangle\rangle\Big\},
\end{aligned}
\tag{11}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
A_n &= (-4\delta_{0n} + 2\delta_{1n} + 2\delta_{-1n})\langle S_0^+ S_1^-\rangle, \\
A_0 &= 4J[2\gamma - \gamma\alpha_1 C_0^z + 2\gamma\alpha_1 C_1^z \\
&\quad + (1 - 2D')\alpha_2 C_1^\pm + \gamma\alpha_2 C_2^\pm], \\
A_1 &= 2J[-2\gamma + \gamma\alpha_1 C_0^z - 2\gamma\alpha_1 C_1^z \\
&\quad - 2(1 - D')\alpha_2 C_1^\pm - \gamma\alpha_2 C_2^\pm], \\
A_2 &= 2J\alpha_2 C_1^\pm .
\end{aligned}
\tag{12}
$$

格林函数$\langle\langle S_0^z ; S_n^z\rangle\rangle$的傅里叶变换为

$$
G(k,\omega) = \sum_n e^{ikna}\langle\langle S_0^z ; S_n^z\rangle\rangle, \tag{13}
$$

其中 a 为格点常数,令它为 1.因此从方程(11)和(13)中可以得到

$$
G(k,\omega) = \frac{Q_n}{(\omega - \omega_{k1})(\omega - \omega_{k2})}, \tag{14}
$$

其中

$$
Q_n = 2\gamma(\cos k - 1)C_1^\pm/\pi, \tag{15}
$$

$$
\begin{aligned}
\omega_{k1,2} &= \frac{1}{2}(1 - 2D') \pm \frac{1}{2}\{(1 - 2D')^2 \\
&\quad + 2\gamma(A_0 + 2A_1\cos k + 2A_2\cos 2k)\}^{1/2},
\end{aligned}
\tag{16}
$$

这里取 $J=1$.从(16)式可以看出,有两支激发谱存在.

下面由谱定理,就可以得到自旋关联函数$\langle S_0^z S_n^z\rangle$为

$$
\begin{aligned}
C_n^z = \langle S_0^z S_n^z\rangle &= \frac{1}{N}\sum_k e^{-ikn}\frac{\gamma(\cos k - 1)C_1^\pm}{\omega_{k1} - \omega_{k2}} \\
&\quad \times\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k1}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k2}}{2k_B T}\right)}\right],
\end{aligned}
\tag{17}
$$

此为自洽方程组之一.

利用相同的方法可以讨论格林函数$\langle\langle S_0^+ ; S_n^-\rangle\rangle$,所用的切断近似为

$$
\langle\langle S_i^z S_j^z S_k^+ ; S_n^-\rangle\rangle \to \alpha_1\langle S_i^z S_j^z\rangle\langle\langle S_k^+ ; S_n^-\rangle\rangle, \tag{18a}
$$

$$
\langle\langle S_i^+ S_j^+ S_k^- ; S_n^-\rangle\rangle \to \alpha_2\langle S_i^+ S_k^-\rangle\langle\langle S_j^+ ; S_n^-\rangle\rangle, \tag{18b}
$$

$$
\langle\langle S_i^- S_j^+ S_k^+ ; S_n^-\rangle\rangle \to \alpha_2\langle S_i^- S_k^+\rangle\langle\langle S_j^+ ; S_n^-\rangle\rangle, \tag{18c}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\langle S_i^+ S_j^+ S_j^- ; S_n^-\rangle\rangle &\to \alpha_2\langle S_i^+ S_j^-\rangle\langle\langle S_j^+ ; S_n^-\rangle\rangle \\
&\quad + \alpha_2\langle S_j^+ S_j^-\rangle\langle\langle S_i^+ ; S_n^-\rangle\rangle,
\end{aligned}
\tag{18d}
$$

从而得到格林函数$\langle\langle S_0^+ ; S_n^-\rangle\rangle$的运动方程为

$$
\begin{aligned}
&(\omega - JD')(\omega - 3JD')(\omega - J - JD')\langle\langle S_0^+ ; S_n^-\rangle\rangle \\
&= J\Big\{\frac{1}{2\pi}E_n + B_0\langle\langle S_0^+ ; S_n^-\rangle\rangle \\
&\quad + B_1\langle\langle S_1^+ + S_{-1}^+ ; S_n^-\rangle\rangle \\
&\quad + B_2\langle\langle S_2^+ + S_{-2}^+ ; S_n^-\rangle\rangle\Big\},
\end{aligned}
\tag{19}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
E_n &= E_0\delta_{0n} + E_1(\delta_{1n} + \delta_{-1n}),\\
E_0 &= -4(\omega - 3JD')\langle S_0^z S_1^z\rangle\\
&\quad - 8D'(\omega - J - JD')\\
&\quad - 2[2\gamma(\omega - JD') - 3D'(\omega - JD')]\langle S_0^+ S_1^-\rangle,\\
E_1 &= (\omega - 3JD')\langle S_0^+ S_1^-\rangle\\
&\quad + 2\gamma(\omega - JD')\langle S_0^z S_1^z\rangle,
\end{aligned}
\tag{20}
$$

以及

$$
\begin{aligned}
B_0 &= -2J(\omega - 3JD')\\
&\quad\times\left(-2 + \alpha_2 C_0^{\pm} - 2D'\alpha_1 C_1^z - \frac{\gamma}{2}\alpha_2 C_1^{\pm} - \alpha_1 C_2^z\right)\\
&\quad + J\gamma(\omega - JD')\\
&\quad\times(\gamma\alpha_2 C_0^{\pm} + 2\gamma\alpha_1 C_1^z + 2\alpha_2 C_1^{\pm} + \gamma\alpha_2 C_2^{\pm})\\
&\quad - 2JD'(\omega - J - JD')\\
&\quad\times(-4D' + 4D'\alpha_2 C_0^{\pm} - 2\alpha_1 C_1^z - \gamma\alpha_2 C_1^{\pm}),
\end{aligned}
\tag{21a}
$$

$$
\begin{aligned}
B_1 &= -\frac{J}{2}(\omega - 3JD')\\
&\quad\times(\gamma\alpha_2 C_0^{\pm} + 4\gamma\alpha_1 C_1^z + 2\alpha_2 C_1^{\pm} + \gamma\alpha_2 C_2^{\pm})\\
&\quad + J\gamma(\omega - JD')\\
&\quad\times(-2 + \alpha_2 C_0^{\pm} - 2D'\alpha_1 C_1^z - \gamma\alpha_2 C_1^{\pm} - \alpha_1 C_2^z)\\
&\quad - JD'(\omega - J - JD')(4 - 3\alpha_2 C_0^{\pm}),
\end{aligned}
\tag{21b}
$$

$$
\begin{aligned}
B_2 &= \frac{J}{2}\gamma(\omega - 3JD')\\
&\quad\times\alpha_2 C_1^{\pm} + J\gamma^2(\omega - JD')\alpha_1 C_1^z.
\end{aligned}
\tag{21c}
$$

接着对格林函数《S_0^+ ;S_n^-》作傅里叶变换,可以得到

$$
g(k,\omega) = \frac{P_n}{(\omega - JD')(\omega - 3JD')(\omega - J - JD') - J(B_0 + 2B_1\cos k + 2B_2\cos 2k)},
\tag{22}
$$

其中

$$
P_n = \frac{J}{2}(E_0 + 2E_1\cos k)/\pi.
\tag{23}
$$

对于 Y_2BaNiO_5 材料,如果不考虑单离子各向异性 $D\approx0.2J$ 的存在,只计入交换各向异性 γ 的存在,这时 $g(k,\omega)$可以写为

$$
g(k,\omega) = \frac{P_n}{\omega(\omega - J) - J(B_0 + 2B_1\cos k + 2B_2\cos 2k)},
\tag{24}
$$

此时 P_n,B_0,B_1,B_2 变为

$$
P_n = \frac{2\{2(\gamma\cos k - 1)C_1^z + (\cos k - \gamma)C_1^{\pm}\}}{\pi},
\tag{25}
$$

$$
\begin{aligned}
B_0 &= 4\{4 + (-2 + \gamma^2)\alpha_2 C_0^{\pm} + 2\gamma^2\alpha_1 C_1^z\\
&\quad + 3\gamma\alpha_2 C_1^{\pm} + 2\alpha_1 C_2^z + \gamma^2\alpha_2 C_2^{\pm}\},
\end{aligned}
\tag{26a}
$$

$$
\begin{aligned}
B_1 &= 2\{-4\gamma + \gamma\alpha_2 C_0^{\pm} - 4\gamma\alpha_1 C_1^z - 2(1 + \gamma^2)\alpha_2 C_1^{\pm}\\
&\quad - 2\gamma\alpha_1 C_2^z - \gamma\alpha_2 C_2^{\pm}\},
\end{aligned}
\tag{26b}
$$

$$
B_2 = 2\gamma\{2\gamma\alpha_1 C_1^z + \alpha_2 C_1^{\pm}\}.
\tag{26c}
$$

这里同样取 $J=1$,从(24)式可以得到

$$
\omega_{k3,4} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\{1 + B_0 + 2B_1\cos k + 2B_2\cos 2k\}^{1/2}.
\tag{27}
$$

同样,由谱定理就可以得到自旋关联函数$\langle S_n^- S_0^+\rangle$为

$$
\begin{aligned}
C_n^{\pm} &= \langle S_n^- S_0^+\rangle = \frac{1}{N}\sum_k e^{-ikn}\\
&\quad\times\frac{2(\gamma\cos k - 1)C_1^z + (\cos k - \gamma)C_1^{\pm}}{\omega_{k3} - \omega_{k4}}\\
&\quad\times\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k3}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k4}}{2k_B T}\right)}\right],
\end{aligned}
\tag{28}
$$

此为自洽方程组之二.

由(17)和(28)式并结合(6)式就可以得到下面一组自洽的方程:

$$
\frac{2}{3} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{\gamma(\cos k - 1)C_1^{\pm}}{\omega_{k1} - \omega_{k2}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k1}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k2}}{2k_B T}\right)}\right],
\tag{29a}
$$

$$
C_1^z = \frac{1}{N}\sum_k \cos k\,\frac{\gamma(\cos k - 1)C_1^{\pm}}{\omega_{k1} - \omega_{k2}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k1}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k2}}{2k_B T}\right)}\right],
\tag{29b}
$$

$$
C_2^z = \frac{1}{N}\sum_k \cos 2k\,\frac{\gamma(\cos k - 1)C_1^{\pm}}{\omega_{k1} - \omega_{k2}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k1}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k2}}{2k_B T}\right)}\right],
\tag{29c}
$$

$$
\frac{4}{3} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{2(\gamma\cos k - 1)C_1^{\pm} + (\cos k - \gamma)C_1^{\pm}}{\omega_{k3} - \omega_{k4}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k3}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k4}}{2k_B T}\right)}\right],
\tag{29d}
$$

$$C_1^{\pm} = \frac{1}{N}\sum_k \cos k \frac{2(\gamma\cos k - 1)C_1^z + (\cos k - \gamma)C_1^{\pm}}{\omega_{k3} - \omega_{k4}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k3}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k4}}{2k_B T}\right)}\right], \tag{29e}$$

$$C_2^{\pm} = \frac{1}{N}\sum_k \cos 2k \frac{2(\gamma\cos k - 1)C_1^z + (\cos k - \gamma)C_1^{\pm}}{\omega_{k3} - \omega_{k4}}\left[\frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k3}}{2k_B T}\right)} - \frac{1}{\tanh\left(\frac{\omega_{k4}}{2k_B T}\right)}\right]. \tag{29f}$$

注意此时 $\omega_{k1,2}$ 中的 D 亦为 0.通过自洽的求解方程(29),就可以得到不同温度下关联函数的数值解,并由此可以讨论该材料在不同交换各向异性因子 γ 下的低激发、基态能、比热、静态磁化率等物理性质.

3. 关联函数的数值解

通过程序自洽地求解方程(29),就可以得到不同温度下退耦参数、关联函数的数值解.

图 1 画出了 $\gamma = 1$ 时退耦参数 α_1 和 α_2 随温度的变化关系.很明显,各向同性时 $\alpha_1 = \alpha_2$,此时的退耦方案等同于 Kondo 和 Yamaji 的退耦方案.当温度升高时 α_1(或 α_2)单调上升,在热力学极限 $T\to\infty$ 时,退耦因子趋于 1,其范围在 $0.5 < \alpha < 1$.

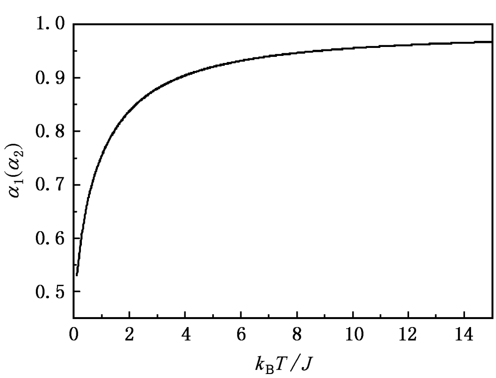

图 1 当 $\gamma = 1$ 时退耦参数 α_1,α_2 随温度的变化

图 2 给出了各向同性时,最近邻关联函数〈$S_0^z S_1^z$〉和〈$S_0^+ S_1^-$〉随温度的变化以及次近邻关联函数〈$S_0^z S_2^z$〉和〈$S_0^+ S_2^-$〉随温度的变化.我们发现关联函数〈$S_0^+ S_1^-$〉基本上是〈$S_0^z S_1^z$〉的二倍,〈$S_0^+ S_2^-$〉是〈$S_0^z S_1^z$〉的二倍.从(17)和(28)式中也可以求出这样的关系式:〈$S_n^+ S_0^-$〉$= 2$〈$S_n^z S_0^z$〉.这显然是正确的,因为对于各向同性的 Heisenberg 自旋链,存在这样的旋转对称性:$z\leftrightarrow x$ 和 $z\leftrightarrow y$.我们得出的〈$S_0^z S_1^z$〉的温度行为与 Fisher[6] 的经典模型得出的结果一致.我们的计算结果表明,当 $T\to\infty$ 时,关联函数值为〈$S_0^z S_1^z$〉$= -0.38478$,〈$S_0^z S_2^z$〉$= 0.11731$,这些结果与 Takahashi[7] 和 Lin[8] 的结果一致.在高温下,通过对方程(17)作高温展开,可以得出〈$S_0^z S_1^z$〉$\approx -2/(3\theta)$,〈$S_0^z S_2^z$〉$\approx 1/(3\theta^2)$,其中 $\theta = k_B T/J$.从图 2 可以看出,关联函数具有如上高温展开所预言的高温行为,而且 T 很大时,〈$S_0^z S_2^z$〉$\to 0$.

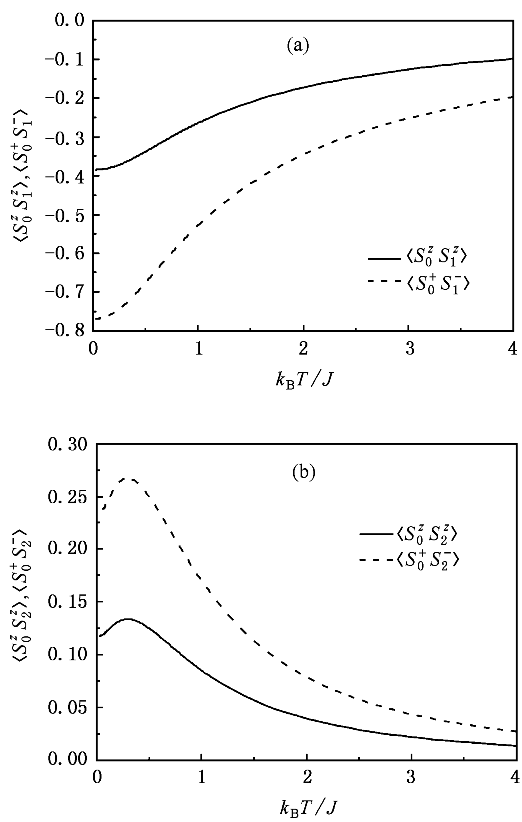

图 2 (a)$\gamma = 1$ 时关联函数〈$S_0^z S_1^z$〉和〈$S_0^+ S_1^-$〉随温度的变化;(b)$\gamma = 1$ 时关联函数〈$S_0^z S_2^z$〉和〈$S_0^+ S_2^-$〉随温度的变化

我们知道 Y_2BaNiO_5 材料的性质主要由自旋 $S = 1$ 的 Ni-Ni 关联决定,所以在图 3(a)中给出了 Y_2BaNiO_5 材料其最近邻关联〈$S_0^z S_1^z$〉在不同 γ 值下与温度的关系.可以看到当温度升高时所有的 |〈$S_0^z S_1^z$〉| 单调下降,且随着 γ 值的减小这种下降趋势越明显.图 3(b)为 Y_2BaNiO_5 材料其次近邻关联〈$S_0^z S_2^z$〉在不同 γ 值下随温度的变化.

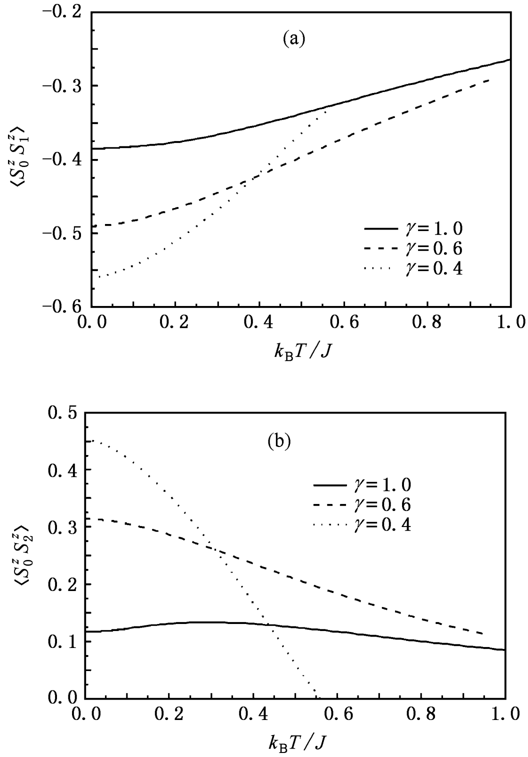

图 3　(a),(b)分别为关联函数 $\langle S_0^z S_1^z\rangle$ 和 $\langle S_0^z S_2^z\rangle$ 在不同 γ 值下与温度的关系(实线对应 $\gamma = 1$,长划线对应 $\gamma = 0.6$,虚线对应 $\gamma = 0.4$)

很明显,随着温度的升高所有的 $\langle S_0^z S_2^z\rangle$ 都趋于 0,并且 γ 值越小下降越快.

4. 结果与讨论

4.1. 低激发谱 $\omega(k)$

图 4 给出了 $\gamma = 1$ 时一维自旋为 1 的反铁磁链

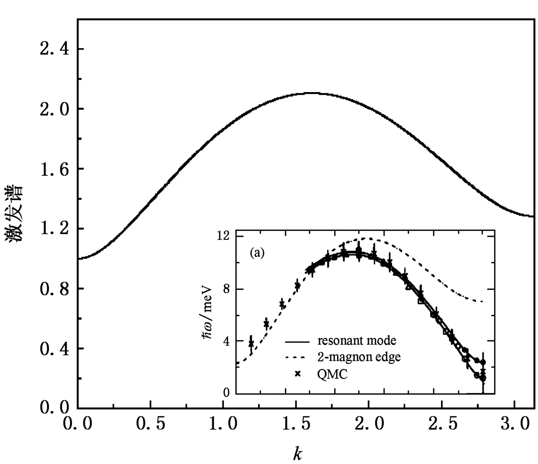

图 4　$\gamma = 1$ 时自旋为 1 的一维反铁磁链在零温时的激发谱

的低激发谱[5]. 内插图是通过对 NENP 的非弹性中子散射实验[9] 给出的 $S = 1$ 的反铁磁链的激发谱. 从图中可以清楚地看出 $k = 0$ 时,$S = 1$ 的一维反铁磁链存在能隙 2Δ,$\Delta = 0.5$J. 这一结果与 White 和 Huse[9],Takahashi[11] 等人的严格的数值计算结果和实验结果[10] 接近. 为了便于比较,把一些数值模拟结果和我们的结果列于表 1 中.

表 1　不同方法得到的 $\gamma = 1$ 时自旋为 1 的一维反铁磁链的能隙

文献	能隙 Δ/J	方法
[12]	~0.25	严格对角化方法
[13]	~0.41049(2)	严格对角化方法
[14]	~0.41	直接迭代的随机执行方法
[8]	~0.4097(5)	实空间重正化群的方法
[9]	~0.41050(2)	密度矩阵重正化群的方法
本工作	0.5	格林函数方法

图 5(a)为 $\gamma = 1$ 时的低激发谱或 $\omega(k)$ 或 $\omega_z(k)$($\omega(k) = \omega_z(k)$) 图 5(b),(c),(d)分别为 $\gamma = 0.4, 0.6, 0.8$ 时的低激发谱 $\omega(k)$ 或 $\omega_z(k)$. 从图中可以清楚地看到在温度 $T = 0$ 的情况下,Y_2BaNiO_5 只存在 Haldane 激发谱,不存在比它能量还低的激发谱 E_k^-,由于 E_k^- 的消失,不存在玻色凝聚现象,所以实验上发现它的基态是无序的自旋液体态. 温度即使降到 $T = 1.5$K,也未出现三维长程序,体现了完全一维系统的物理性质. 对于 $\gamma \neq 1$ 的情况,最低的稳定的激发态的能谱劈裂成了两部分:一部分为 Z 方向的激发谱($S_Z = 0$);另一部分是简并的 xy 平面上的激发谱($S_Z = \pm 1$).

4.2. 基态能 E_g

从哈密顿量(1)式出发,内能定义为

$$E = \langle H\rangle = JNZ(\langle S_0^z S_1^z\rangle + \gamma\langle S_0^+ S_1^-\rangle), \quad (30)$$

其中 Z 为配位数,这里 $Z = 2$. 当 $\gamma = 1$,即各向同性时作出一维自旋为 1 的反铁磁链的内能和温度的关系曲线[5] (见图 6). 我们发现,当温度 T 趋于零时,内能值趋于 -1.15542J,即一维自旋为 1 的反铁磁晶格系统每个格点的基态能为 $E_g = -1.15542$J. 内插图为 Yamamoto 和 Miyashita[15] 利用蒙特卡罗模拟方法得到的结果,以及 Betsuyaku 和 Yokota[16] 利用转移矩阵法得到的结果. 我们的结果比他们的结果稍低. 为便于比较,把一些数值模拟结果和我们的结果列于表 2.

图 7 为内能在不同 γ 值下与温度的关系(实线对应 $\gamma = 1$,长划线对应 $\gamma = 0.6$,虚线对应 $\gamma = 0.4$).

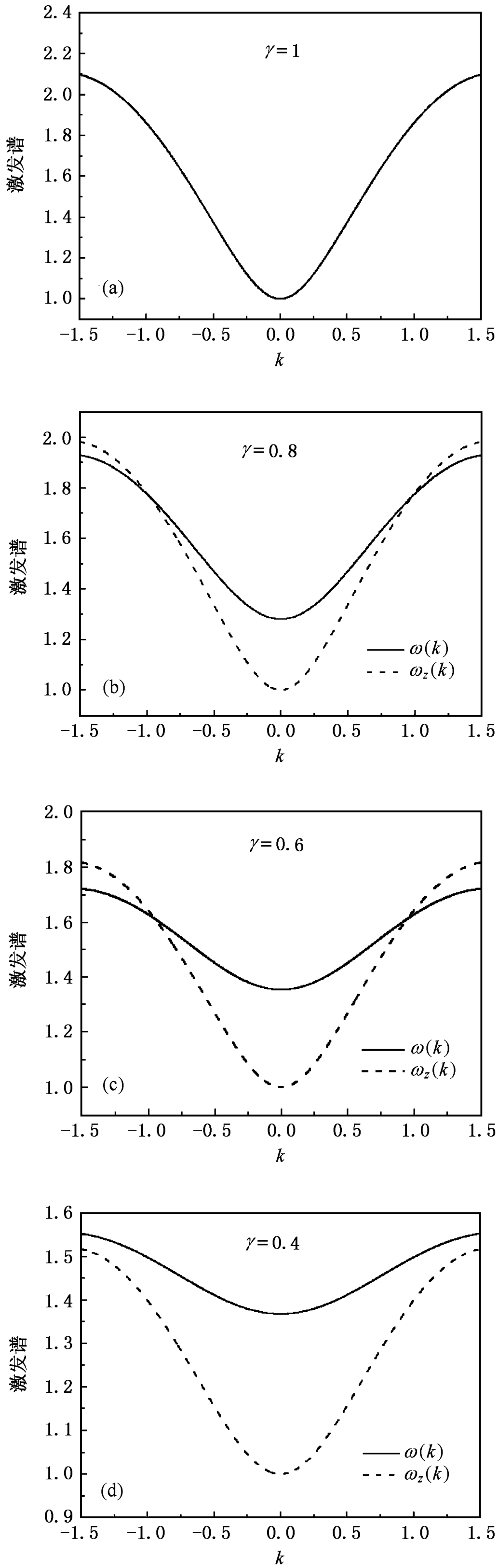

图5 (a)为 $\gamma=1$ 时的低激发谱或 $\omega(k)$ 或 $\omega_z(k)$ ($\omega(k)=\omega_z(k)$);(b),(c),(d)分别为 $\gamma=0.8$,0.6,0.4 时的低激发谱 $\omega(k)$ 和 $\omega_z(k)$ 实线对应 $\omega(k)$,虚线对应 $\omega_z(k)$.

很明显,随着温度的升高内能都表现为单调递增.当 T 趋于0时,基态能的值与 γ 值成反比.从本质上讲,γ 的增大实际上会增大系统单位体积的自由度,这自然会使内能表现为图中单调变化的趋势.

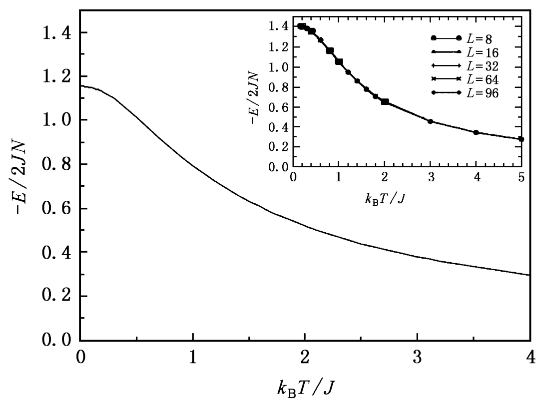

图6 $\gamma=1$ 时 Y_2BaNiO_5 的内能随温度的变化(内插图中的●线是蒙特卡罗模拟方法得到的结果,□线是转移矩阵法得到的结果)

表2 不同方法得到的 $\gamma=1$ 时一维自旋为1的反铁磁链的基态能

文献	基态能($E_g/2JN$)	方法
[13]	−1.41485(2)	严格对角化方法
[9]	−1.401484038971(4)	密度矩阵重整化群方法
本工作	−1.15542	格林函数方法

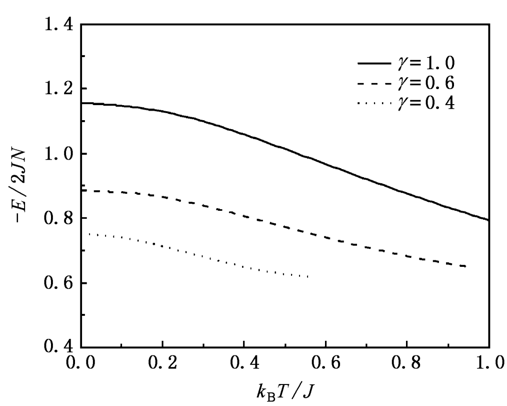

图7 内能在不同 γ 值下与温度的关系(实线对应 $\gamma=1$,长划线对应 $\gamma=0.6$,虚线对应 $\gamma=0.4$)

4.3. 比热 C 和静态磁化率 χ

为了更好地了解 Y_2BaNiO_5 材料,我们还对其热力学性质进行了研究.其中比热和静态磁化率是非常重要的两个热力学量.其中比热定义为

$$C=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T}=\frac{\mathrm{d}\left\{JNZ\left(\langle S_0^z S_1^z\rangle+\gamma\langle S_0^+ S_1^-\rangle\right)\right\}}{\mathrm{d}T}. \tag{31}$$

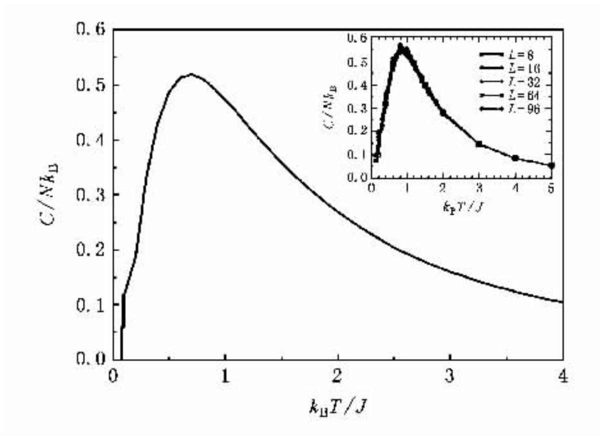

图 8　$\gamma=1$ 时一维 $S=1$ 的反铁磁链的内能随温度的变化(内插图中的●线是蒙特卡罗模拟方法得到的结果,■线是对角化方法得到的结果)

图 8 画出了 $\gamma=1$ 时一维自旋为 1 的反铁磁链的比热随温度的变化[2](内插图为利用蒙特卡罗模拟方法以及对角化方法得到的结果).我们的结果表明在低温时,比热随温度的增加迅速上升,但在高温时却随着温度的上升缓慢下降.另外,在比热与温度的关系曲线上出现了一个峰,这个峰值出现在 $k_BT\approx J$ 处.

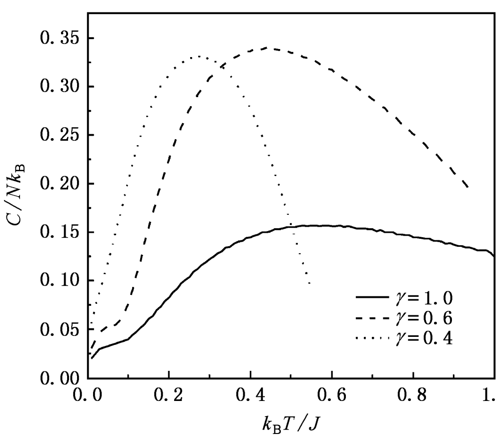

图 9　比热在不同 γ 值下随温度的变化(实线 $\gamma=1$,长划线 $\gamma=0.6$,虚线 $\gamma=0.4$)

图 9 为 Y_2BaNiO_5 材料在低温时其比热与温度的变化关系(实线对应 $\gamma=1$,长划线对应 $\gamma=0.6$,虚线对应 $\gamma=0.4$).从图中可以看出,各向异性时比热随温度的变化趋势与各向异性时相同.另外,在比热与温度的关系曲线上都出现了一个峰,随着 γ 的增大该峰对应的温度在增大,这些峰的出现是由于在我们的退耦近似中,已经包括了磁振子"束缚态"(bound states)的贡献[17].

另外,静态磁化率的倒数可以表示为[18]

$$\chi^{-1} = Nk_BT/\left(g^2\mu_B^2\sum_{ij}\langle S_i^zS_j^z\rangle\right), \tag{32}$$

其中 g 是朗道因子,μ_B 是玻尔磁子.图 10 给出了一维材料 Y_2BaNiO_5 的磁化率随温度的变化关系,内插图为实验结果.对比可知,利用自洽格林函数理论得出的结果较好地符合了实验结果.

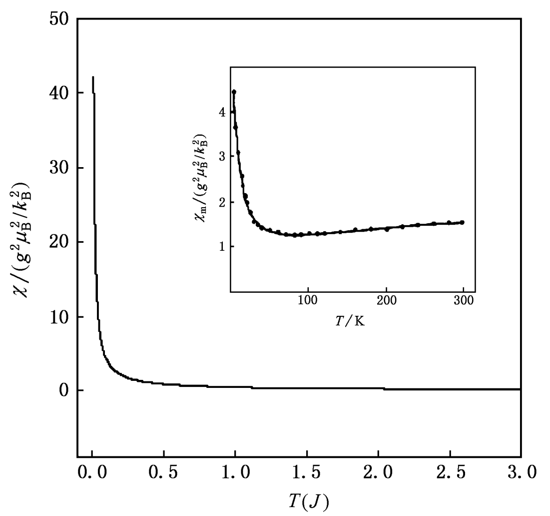

图10　静磁化率与温度的依赖关系(内插图为一维材料 Y_2BaNiO_5 的实验结果)

[1] Xing H Z, Su G, Gao S *et al* 2002 *Phys. Rev.* B **66** 054419
[2] Su G, Xing H Z, Xue D S, Chen Z Y, Li F S 2000 *J. Mod. Phys.* B **14** 2561
[3] Sulewski P E, Cheong S W 1995 *Phys. Rev.* B **51** 3021
[4] Zhang L G, Shen B G, Zhang S Y, Zhang H W 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 817 (in Chinese) [张立刚、沈保根、张绍英、张宏伟 1998 物理学报 **47** 817]
[5] Bao S Q, Zhao H, Shen J L, Yang G Z 1996 *Phys. Rev.* B **53** 737
[6] Fisher M F 1964 *Am. J. Phys.* **32** 343
[7] Takahashi M 1988 *Phys. Rev.* B **38** 5188
[8] Lin H Q, Pan C Y 1988 *J. Phys.* (Pairs) Collog. C **8** 1415
[9] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
White S R, Huse D A 1993 *Phys. Rev.* B **48** 3844
White S R 1993 *Phys. Rev.* B **48** 10345
[10] Ma S L, Broholm C, Reich D H, Sternlieb B J, Erwin R W 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 3571
[11] Takahashi M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 2313
1993 *Phys. Rev.* B **48** 311

[12] Botet R, Jullian R 1983 *Phys. Rev.* B **27** 613
Botet R, Jullien R, Kolb M 1983 *Phys. Rev.* B **28** 3914
[13] Gollinelli O, Jolicoeur Th, Lacaze R 1994 *Phys. Rev.* B **50** 3037
[14] Nightingale M P, Blote H J 1986 *Phys. Rev.* B **33** 659
[15] Yamamoto S, Miyashita S 1993 *Phys. Rev.* B **48** 9528
[16] Betsuyaku H, Yokota T 1986 *Prog. Theor. Phys.* **75** 808
[17] Bonner J C, Fishr M E 1964 *Phys. Rev.* A **135** 640
[18] Yu W Q, Feng S P 2000 *Eur. Phys. J.* B **13** 265

Magnetic and thermodynamic properties of the mixed-spin antiferromagnet Y_2BaNiO_5 *

Kong Hong-Yan[1)†] Zhang Lin[1)] Song Yun[2)]

1)(*Nonlinear Research Institute, Department of Physics, Baoji University of Arts and Science, Baoji* 721007, *China*)

2)(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing* 100875, *China*)

(Received 17 June 2005; revised manuscript received 23 March 2006)

Abstract

In this paper, within the frame of Green's function theory, we study the magnetic and thermodynamic properties of the mixed-spin antiferromagnet Y_2BaNiO_5 in the spin-1 one-dimensional anisotropic Heisenberg model. We find the correlation function, low-lying excitation, ground-state energy, specific heat and static susceptibility of Y_2BaNiO_5 for different values of exchange anisotropic parameter γ, and the results are in good agreement with experimental and numerical results.

Keywords: Heisenberg model, Green's function theory, Haldane gap, antiferromagnetic long-range order

PACC: 7340Q, 7550B, 7550P

* Project supported by the Science Foundation of Baoji University of Arts and Science (Grant Nos. ZK2406, ZK2550).

† E-mail: kongyan21th@tom.com