

关于海森堡反铁磁链材料 LiVGe_2O_6 有限温度相变的理论研究*

黄海 李伟锋†

(华北电力大学数理学院, 北京 102206)

(2013年6月28日收到; 2013年8月7日收到修改稿)

自旋 $s = 1$ 的海森堡反铁磁链材料 LiVGe_2O_6 的磁化率以及核磁共振实验表明该材料在临界温度约为 22 K 时由顺磁相转变为反铁磁 Néel 相, 且低温磁激发谱存在能隙. 本文在已有模型哈密顿量的基础上提出了一个低能场论模型——Ginzburg-Landau 理论来描述这一反铁磁链材料, 并运用这一理论讨论了 LiVGe_2O_6 由于自发对称性破缺导致的有限温度相变及相应的磁化率变化情况, 理论计算很好地解释了现有的实验结果.

关键词: 海森堡模型, $O(3)$ 非线性 σ 模型, 有限温度相变

PACS: 75.10.Pq

DOI: 10.7498/aps.62.217501

1 引言

1983年, Haldane 预言整数自旋的海森堡反铁磁链体系的第一激发态与基态之间存在能隙, 而半整数自旋的海森堡反铁磁链的磁激发谱由于拓扑项的存在导致能隙消失^[1,2]. 此后, 整数自旋的海森堡反铁磁链系统逐渐成为凝聚态物理的研究热点. 实验上, Haldane 所预言的能隙已在多种自旋 $s = 1$ 的反铁磁链材料中被观测到, 例如 CsNiCl_3 ^[3], NENP ^[4,5], AgVP_2S_6 ^[6] 以及 Y_2BaNiO_5 ^[7,8]. 最近, $s = 1$ 的反铁磁链材料 LiVGe_2O_6 表现出一些特殊的性质, 引起了人们的极大兴趣. LiVGe_2O_6 属于碱金属辉石族化合物. X 射线衍射实验表明 LiVGe_2O_6 属于单斜晶系, 空间群为 $P2_1/c$. 晶格参数 $a = 9.863 \text{ \AA}$, $b = 8.763 \text{ \AA}$ 以及 $c = 5.409 \text{ \AA}$ ^[9,10]. 从 Li^+ , Si^{4+} 和 O^{2-} 的最常见氧化态考虑, V 离子显示 +3 价. V 的外层电子排布为 $3d^3 4s^2$, 除去被氧化的三个电子, 根据洪特定则, V^{3+} 的 3d 壳层的两个电子的总自旋 $s = 1$. 在 LiVGe_2O_6 中, 正八面体原子

团 VO_6 通过共边键连接形成链状结构, 而相邻链之间则通过正四面体原子团 GeO_4 共点键连接, 因此链间相互作用相对链内相互作用来说很小, 两者之比约为 0.03^[11,12].

LiVGe_2O_6 粉末的磁化率测量结果显示, 磁化强度经过转变温度约 22 K 后迅速下降, 且在低温下磁激发谱存在能隙^[9]. Millet 等人建议, 材料 LiVGe_2O_6 中可能存在异常大的四次交换相互作用导致磁激发谱的 Haldane 能隙消失, 然后这个无能隙的整数自旋链体系在温度为 22 K 时通过二聚作用产生自旋 Peierls 相变^[9]. 自旋 Peierls 相变的发生与系统晶格畸变紧密相关, 近年来反铁磁链材料中的自旋 Peierls 相变日益受到人们的重视^[13-15]. 但是最近 ^7Li 核磁共振 (NMR) 实验结果表明, 所观察到的相变不是自旋 Peierls 相变, 且得到的低温相是反铁磁相^[16]. 在转变温度附近的中子衍射以及 X 射线衍射实验也表明在转变温度以下 LiVGe_2O_6 确实具有反铁磁长程序, 且没有证据表明相变伴随着结构畸变^[11]. 为了解释 LiVGe_2O_6 的这些奇特性质, Vonlanthen 等人提出了一个新的理论模型^[17].

* 中央高校基本科研业务费专项基金 (批准号: 12ZP11, 13TD03) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: lwf19870715@163.com

系统的哈密顿量为

$$H = J \sum_i S_i \cdot S_{i+1} + J' \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - E_z \sum_i S_{i,z}^2, \quad (1)$$

其中 J 和 J' 分别代表链内和链间交换能的耦合常数. 对于 LiVGe_2O_6 , 我们有 $J \approx 45 \text{ K}$ 和 $J' \approx 1.4 \text{ K}$. 由于 $J' \approx 0.03J$, 我们将在以下分析中略去链间耦合的影响. E_z 为伊辛项系数且 $E_z > 0$. 我们将基于系统哈密顿量 (1) 式提出描述 LiVGe_2O_6 的低能场论模型——Ginzburg-Landau (GL) 理论. 然后我们从 GL 理论出发, 研究这一材料由于自发对称性破缺导致的有限温度相变问题. 理论计算表明, LiVGe_2O_6 在 22 K 左右发生一级相变, 体系从顺磁相转变为反铁磁 Néel 相且在低温下磁激发谱存在约 15 K 的能隙. 我们根据得到的 LiVGe_2O_6 的有限温度能隙计算了这一材料的磁化率, 结果与实验事实相符.

2 低能场论模型

系统哈密顿量 (1) 式中的第一项为反铁磁海森堡模型. 对于反铁磁链材料, 由于 $J > 0$, 故在经典情形下相邻格点自旋取向相反时能量最低. 虽然由于量子扰动的影响, 反铁磁 Néel 态不再是海森堡模型的基态, 但在 4—5 个格点范围内, 相邻格点间自旋仍呈一定的反铁磁相关^[18,19]. 由此我们可以把每个格点的自旋算符写为 $S_i = (-1)^i s \boldsymbol{\varphi}_i + l_i$. 其中 $\boldsymbol{\varphi}_i$ 为局域 Néel 序参量, l_i 代表平均磁化密度. 由于 $\boldsymbol{\varphi}_i$ 和 l_i 为缓变函数, 在低能近似下我们可以把这两个量进行连续化, 并且反铁磁海森堡模型可以用一个量子场论模型——O(3) 非线性 σ 模型来描述^[1,2,18]. 相应的哈密顿量为

$$H = \frac{v}{2} \int dx \left[g l^2 + \frac{v}{g} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x} \right)^2 \right], \quad (2)$$

其中 $g = 2/s$, v 为自旋波速, 密度矩阵重整化群计算给出 $v \approx 2.5J$ ^[20,21]. 我们设 x 轴为链方向, 且 $\boldsymbol{\varphi}(x)$ 场满足约束条件 $\boldsymbol{\varphi}^2 = 1$. 由于自旋算符满足 $SU(2)$ 代数, 算符 l 可写为

$$l = \frac{1}{vg} \boldsymbol{\varphi} \times \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t}. \quad (3)$$

相应的拉格朗日量为

$$L = \frac{g}{2} \left[\frac{1}{v} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} \right)^2 - v \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x} \right)^2 \right]. \quad (4)$$

由于约束 $\boldsymbol{\varphi}^2 = 1$ 的存在, O(3) 非线性 σ 模型是一个相当复杂的非线性理论. 该理论存在一个守恒的旋转对称性, 与之相对应的守恒自旋算符为 $S = \int dx l$, 因此在 O(3) 非线性 σ 模型中 l 代表守恒自旋密度. 关于 O(3) 非线性 σ 模型的理论分析表明, 该模型有一个唯一的自旋为零的基态, 最低激发态为自旋为 1 的三重态, 且基态与最低激发态之间存在 Haldane 能隙 $\Delta \approx 0.41J$ ^[21-24]. 该理论没有束缚态解, 描述低能激发的准粒子之间为排斥相互作用.

事实上, 我们可以通过重整化群分析将 O(3) 非线性 σ 模型映射到一个相对简单的理论——GL 理论, 这一理论保留了 O(3) 非线性 σ 模型的上述所有特征^[25,26]. 在 GL 理论中, 约束 $\boldsymbol{\varphi}^2 = 1$ 不复存在, 拉格朗日量代之以

$$L = \frac{1}{2v} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} \right)^2 - \frac{v}{2} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x} \right)^2 - \frac{\Delta^2}{2v} \boldsymbol{\varphi}^2 - \lambda \boldsymbol{\varphi}^4, \quad (5)$$

λ 表征激发态准粒子之间的排斥相互作用强度. 此时, 平均磁化密度算符可表为 $l = (1/v) \boldsymbol{\varphi} \times (\partial \boldsymbol{\varphi} / \partial t)$.

在系统哈密顿量 (1) 式中, 除了反铁磁海森堡模型以外, 我们还需考虑伊辛项 $-E_z S_z^2$ 的影响. 由于 $\boldsymbol{\varphi}_z$ 和 l_z 的交叉项对 x 轴求和后的总贡献为零, 且 l_z^2 项在重整化群变换下是非关涉算符. 故在考虑伊辛项后, 我们只需在拉格朗日量 (5) 式中添加 $E_z \boldsymbol{\varphi}_z^2$, 相应的拉格朗日量改为

$$L = \frac{1}{2v} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} \right)^2 - \frac{v}{2} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x} \right)^2 - \frac{\Delta_x^2}{2v} \boldsymbol{\varphi}_x^2 - \frac{\Delta_y^2}{2v} \boldsymbol{\varphi}_y^2 - \frac{\Delta_z^2}{2v} \boldsymbol{\varphi}_z^2 - \lambda \boldsymbol{\varphi}^4, \quad (6)$$

其中 $\Delta_x = \Delta_y = \Delta$ 及 $\Delta_z^2 = \Delta^2 - 2vE_z$.

在一维量子体系中, 伴随产生的 Goldstone 粒子的红外发散会破坏连续对称性的自发破缺, 从而导致长程序的消失^[27]. 因此, 如果不考虑链间耦合, 具有 $SU(2)$ 或 $U(1)$ (在引入晶体场各向异性项后) 连续对称性的一维链海森堡模型是会产生自发对称性破缺的. 但在我们讨论的 (6) 式中, 如果 $\Delta_z^2 < 0$, 系统基态破坏的是分立而非连续的 Z_2 对称性 ($\boldsymbol{\varphi}_z \rightarrow -\boldsymbol{\varphi}_z$). 这一对称性的自发破缺不伴随产生无质量的 Goldstone 粒子, 因此我们讨论的一维模型在低温下能够实现自发对称性破缺, 从而导致链内 Néel 序参量不为零. 同时由于链间反铁磁耦

合的作用, 材料 LiVGe_2O_6 的基态为三维的反铁磁 Néel 态. 随着温度的逐渐升高, 体系将发生从反铁磁态到顺磁态的有限温度相变. (6) 式即为描述海森堡反铁磁链材料 LiVGe_2O_6 的低能场论模型.

3 有限温度相变研究

由 (6) 式的拉格朗日量, 我们可以得到相应的势能函数为

$$V(\varphi) = \frac{1}{2\nu} \Delta_x^2 \varphi_x^2 + \frac{1}{2\nu} \Delta_y^2 \varphi_y^2 + \frac{1}{2\nu} \Delta_z^2 \varphi_z^2 + \lambda \varphi^4. \quad (7)$$

对于量子场 φ_x 和 φ_y 而言, 因为 $\Delta^2 > 0$, 势能极小值点出现在 $\varphi_x = \varphi_y = 0$ 处. 而对于 φ_z 场, 如果 $\Delta_z^2 < 0$, 势能极小值点出现在 $\varphi_0 = \sqrt{-\Delta_z^2/4\lambda\nu}$ 处, 在低温下 φ_z 场会发生自发对称性破缺. 此时由于 Néel 序参量 $\varphi_0 \neq 0$, 系统处于反铁磁相. 将势能函数 $V(\varphi)$ 在 $\varphi_z = \varphi_0$ 附近展开, 容易得到 φ_x 和 φ_y 场的准粒子质量为 $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y = \sqrt{\Delta^2 - \Delta_z^2}$, 而 φ_z 场的准粒子质量为 $\bar{\Delta}_z = \sqrt{-2\Delta_z^2}$.

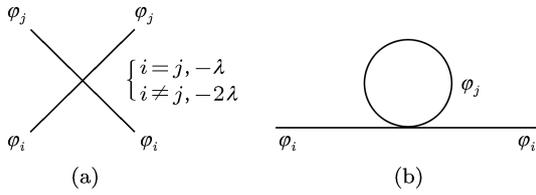


图 1 (a) 费曼规则; (b) 自能修正费曼图 ($i, j = x, y, z$)

现在我们开始计算 φ 场在有限温度下的自能修正. 在零温下, 对于一维量子场的圈图积分可以通过对场算符做正规乘积消去 [28]. 但是在有限温度下, 我们必须保留这些圈图贡献. 拉格朗日量 (6) 式所对应的费曼规则见图 1(a). 精确到 λ 的一次方, 我们可以得到图 1(b) 中所示的自能修正费曼图.

具体的自能计算结果为

$$\Pi_i = \sum_{j=x,y,z} \left[4(1+2\delta_{ij})\lambda\nu T \times \sum_n \int \frac{vdk}{2\pi} \frac{1}{\omega_n^2 + \omega_{jk}^2} \right], \quad (8)$$

其中 $\omega_{jk} = \sqrt{\bar{\Delta}_j^2 + v^2k^2}$ 及 $\omega_n = 2\pi n/T$ ($n \in \mathbb{Z}$). 我们可以通过标准的围道积分方法计算 (8) 式中的级数求和, 结果可得

$$\Pi_i = \Pi_i^{\text{vac}} + \Pi_i^{\text{ther}}, \quad (9)$$

其中

$$\Pi_i^{\text{vac}} = \sum_{j=x,y,z} \left[4(1+2\delta_{ij})\lambda\nu \int \frac{vdk}{2\pi} \frac{1}{2\omega_{jk}} \right], \quad (10)$$

$$\Pi_i^{\text{ther}} = \sum_{j=x,y,z} \left[4(1+2\delta_{ij})\lambda\nu \times \int \frac{vdk}{2\pi} \frac{1}{\omega_{jk}(e^{\omega_{jk}/T} - 1)} \right]. \quad (11)$$

自能的真空贡献 Π_i^{vac} 是对数发散的, 它的作用是对 φ 场的裸质量进行重整化. 而 Π_i^{ther} 则是对物理质量的有限温度修正, 故在有限温度下 φ 场的有效势能函数可表为

$$V_{\text{eff}}(\varphi) = \frac{1}{2\nu} \Delta_x^2(T) \varphi_x^2 + \frac{1}{2\nu} \Delta_y^2(T) \varphi_y^2 + \frac{1}{2\nu} \Delta_z^2(T) \varphi_z^2 + \lambda \varphi^4, \quad (12)$$

其中 $\Delta_i^2(T) = \Delta_i^2 + \Pi_i^{\text{ther}}$. 在低温下由于 $\Delta_z^2(T) < 0$, φ_z 场发生自发对称性破缺, 有效势的极小值处于 $\varphi_0(T) = \sqrt{-\Delta_z^2(T)/4\lambda\nu}$. 将势能函数 $V_{\text{eff}}(\varphi)$ 在 $\varphi_z = \varphi_0(T)$ 附近展开, 可得 φ_x 和 φ_y 场的准粒子有效质量为 $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y = \sqrt{\Delta_x^2(T) - \Delta_z^2(T)}$, 以及 φ_z 场的有效质量为 $\bar{\Delta}_z(T) = \sqrt{-2\Delta_z^2(T)}$. 当温度大于临界温度 T_c 时, 由 (12) 式显见 φ_x 和 φ_y 场的有效质量为 $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y = \Delta_x(T)$, φ_z 场的有效质量为 $\bar{\Delta}_z(T) = \Delta_z(T)$.

我们取 $E_z = 2.0$ K 和 $\lambda = 0.16$ K, φ 场有效质量的数值计算结果如图 2 实线所示. 从图中可以看出, φ 场在低温反铁磁相仍存在能隙. 在零温附近, 有 $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y \approx 21$ K 及 $\bar{\Delta}_z \approx 15$ K, 其中低能模 φ_z 的有效质量与实验测得的低温能隙对应且两者相符 [10]. 随着温度的逐渐升高, φ 场的能隙逐渐减小, 在临界温度 $T_c = 22$ K 时 φ_z 场的准粒子有效质量降为零, 即体系在 T_c 处发生了二级相变. 在临界温度 T_c 以上, φ 场的能隙随着温度的升高而增大. 在温度

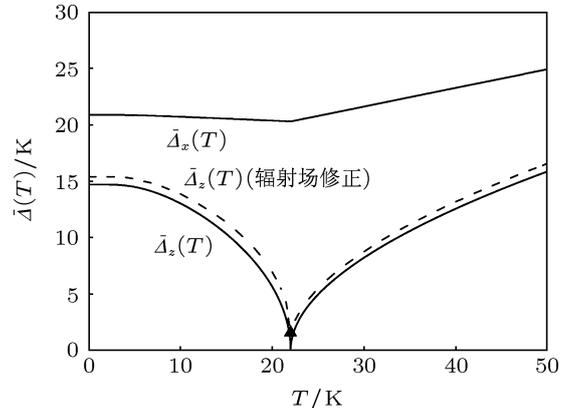


图 2 φ 场的能隙随温度的变化曲线

$T = 50 \text{ K}$ 时, 我们有 $\bar{\Delta}_x = \bar{\Delta}_y \approx 25 \text{ K}$ 和 $\bar{\Delta}_z \approx 16 \text{ K}$.

需要指出的是, 如果考虑单圈的辐射场修正, 在一维情形下有效势 (12) 式应添加项 $-\left[(\Delta_x^2 + 4\lambda v\varphi_z^2)/4\pi\right] \ln\left[(\Delta_x^2 + 4\lambda v\varphi_z^2)/\mu^2\right]$ ^[29]. 其中 μ 为重整化后的物理参量所对应的能阶, 在本文中可取 $\mu \approx 10 \text{ K}$. 经具体计算, φ_x 和 φ_y 场的准粒子有效质量与修正前相比基本不变, 而修正后的 φ_z 场的有效质量如图 2 虚线所示. 最大的不同是, 在临界温度 T_c 即三角形标注处, φ_z 场的有效质量仍为非零值, 约为 1.5 K . 这预示着在考虑辐射场的量子修正后, 系统由二级相变转化为一二级相变.

4 有限温度磁化率的计算

现在我们来计算 LiVGe_2O_6 在有限温度下的磁化率. 在外加磁场中, 相应的哈密顿量应添加 $g_L\mu_B h \cdot S$, 在 GL 理论中此项可表为 $\int dx g_L\mu_B h \cdot l$. 其中 h 代表外加磁场, g_L 表示朗德因子且有 $g_L \approx 1.79$ ^[9].

由磁化率的定义, 我们可以得到零场下沿三个轴向的磁化率分别为^[26,30]

$$\chi_z(T) = \frac{1}{Z} \frac{(g_L\mu_B)^2}{T} \sum_{a,b} |\langle a|S_z|b\rangle|^2 e^{-E_a/T} \quad (13)$$

和

$$\chi_x(T) = \chi_y(T) = \frac{1}{Z} (g_L\mu_B)^2 \times \sum_{a,b} |\langle a|S_x|b\rangle|^2 \frac{(e^{-E_b/T} - e^{-E_a/T})}{E_a - E_b}, \quad (14)$$

式中对 a, b 的求和符号是对所有的粒子态求和, Z 表示系统相应的配分函数.

我们可以用湮灭产生算子 a_{ik} 和 a_{ik}^\dagger 对量子场 φ 进行傅里叶展开:

$$\varphi_i(x,t) = \sum_k \sqrt{\left(\frac{v}{2L\bar{\omega}_{ik}}\right)} \times [e^{-i(\bar{\omega}_{ik}t - kx)} a_{ik} + \text{H.c.}], \quad (15)$$

式中 L 表示自旋链长度. 此时, 在不考虑外磁场且精确到 φ 场的二次方项, 哈密顿量可写为 $H = \sum_{i,k} \bar{\omega}_{ik} (a_{ik}^\dagger a_{ik} + 1/2)$. 由 (15) 式, 我们可以算得沿各轴向的平均磁化强度为

$$\int dx l_z = i \sum_k (a_{xk}^\dagger a_{yk} - a_{yk}^\dagger a_{xk}) \quad (16)$$

以及

$$\int dx l_x = \frac{i}{2} \sum_k \left[\left(\sqrt{\frac{\bar{\omega}_{yk}}{\bar{\omega}_{zk}}} + \sqrt{\frac{\bar{\omega}_{zk}}{\bar{\omega}_{yk}}} \right) (a_{yk}^\dagger a_{zk} - a_{zk}^\dagger a_{yk}) + \left(\sqrt{\frac{\bar{\omega}_{yk}}{\bar{\omega}_{zk}}} - \sqrt{\frac{\bar{\omega}_{zk}}{\bar{\omega}_{yk}}} \right) (a_{yk}^\dagger a_{z,-k} - a_{y,-k}^\dagger a_{z,k}) \right]. \quad (17)$$

然后将 (16) 和 (17) 式分别代入 (13) 和 (14) 式, 用 $\int dx l$ 代替总自旋算符 S 并对 k 进行连续化, 我们得出磁化率的平均场结果为^[26]

$$\chi_z(T) = \frac{2}{T} (g_L\mu_B)^2 \int dk \frac{n_{xk}(n_{xk} + 1)}{2\pi} \quad (18)$$

和

$$\chi_x(T) = (g_L\mu_B)^2 \int dk \left[\frac{(1 + n_{yk} + n_{zk})(\bar{\omega}_{yk} - \bar{\omega}_{zk})^2}{(\bar{\omega}_{yk} + \bar{\omega}_{zk})} + \frac{(n_{yk} - n_{zk})(\bar{\omega}_{yk} + \bar{\omega}_{zk})^2}{(\bar{\omega}_{zk} - \bar{\omega}_{yk})} \right] \times \left(\frac{1}{4\pi\bar{\omega}_{yk}\bar{\omega}_{zk}} \right), \quad (19)$$

式中 n_{ik} 代表波色子占有数 $n_{ik} = 1/(e^{-\bar{\omega}_{ik}/T} - 1)$. 最后, 我们对各个轴向的磁化率取平均, 得出粉末样品的有效磁化率^[10]

$$\chi(T) = \frac{1}{3}\chi_z(T) + \frac{2}{3}\chi_x(T). \quad (20)$$

磁化率的数值计算结果如图 3 所示. 图中的空心圆点是实验测得的磁化率, 杂质的贡献已用 Curie-Weiss 形拟合低温磁化率加以扣除^[9,31]. 从图中可以看出, 在很宽的温度范围内, 理论计算均与实验结果符合得极好. 需要指出的是, 为较好地拟合磁化率实验数据, 我们发现必须选取经过辐射场修正的 φ 场有效质量, 这说明体系在临界温度 22 K 发生的是量子扰动引发的一级相变.

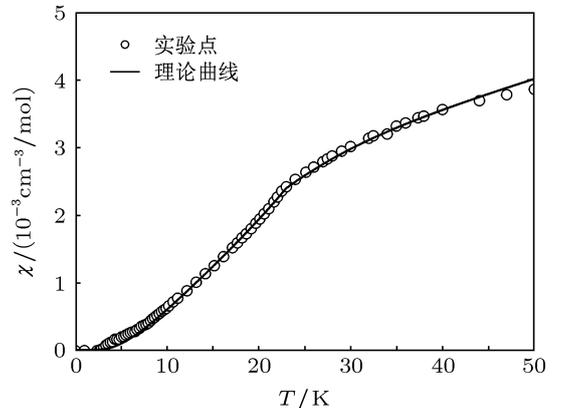


图 3 有限温度磁化率的计算

5 结 论

本文在已有模型哈密顿量的基础上提出了一个低能场论模型——GL 理论来描述自旋 $s = 1$ 的海森堡反铁磁链材料 LiVGe_2O_6 。然后, 我们运用 GL

理论讨论了 LiVGe_2O_6 由于自发对称性破缺导致的有限温度相变及磁化率的变化情况, 理论计算结果与已有实验事实相符。此外, 我们希望 LiVGe_2O_6 的能隙随温度变化曲线能够在这一材料的中子散射实验中得到证实。

- [1] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153
- [2] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **93A** 464
- [3] Buyers W J L, Morra R M, Armstrong R L, Hogan M J, Gerlach P, Hirakawa K 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 371
- [4] Renard J P, Verdaguier M, Regnault L P, Erkelens W A C, Rossat-Mignod J, Stirling W G 1987 *Europhys. Lett.* **3** 945
- [5] Lu W, Shen X, Liu P, von Ortenberg M, Tuschendler J, Renard J P, Zheng F 1995 *Chin. Phys. Lett.* **12** 313
- [6] Mutka H, Soubeyroux J L, Bourleaux G, Colombet P 1989 *Phys. Rev. B* **39** 4820
- [7] Xu G, DiTusa J F, Ito T, Oka K, Takagi H, Broholm C, Aeppli G 1996 *Phys. Rev. B* **54** R6827
- [8] Kong H Y, Zhang L, Song Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4865 (in Chinese) [孔红艳, 张林, 宋筠 2006 物理学报 **55** 4865]
- [9] Millet P, Mila F, Zhang F C, Mambrini M, Van Oosten A B, Pashchenko V A, Sulpice A, Stepanov A 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4176
- [10] Pedrini B, Wessel S, Gavilano J L, Ott H R, Kazakov S M, Karpinski J 2007 *Eur. Phys. J. B* **55** 219
- [11] Lumsden M D, Granroth G E, Mandrus D, Nagler S E, Thompson J R, Castellan J P, Gaulin B D 2000 *Phys. Rev. B* **62** R924
- [12] Scalapino D J, Imry Y, Pinkus P 1975 *Phys. Rev. B* **11** 2042
- [13] Wang Z G, Ding G H, Xu B W 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 296 (in Chinese) [王治国, 丁国辉, 许伯威 1999 物理学报 **48** 296]
- [14] Liu H L, Wang Z G, Yang C Q, Huang X S, Shi Y L 2007 *Chin. Phys.* **16** 3858
- [15] Wang Q B, Xu X F, Tao Q, Wang H T, Xu Z A 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3490
- [16] Gavilano J L, Mushkolaj S, Ott H R, Millet P, Mila F 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 409
- [17] Vonlanthen P, Tanaka K B, Goto A, Clark W G, Millet P, Henry J Y, Gavilano J L, Ott H R, Mila F, Berthier C, Horvatic M, Tokunaga Y, Kuhns P, Reyes A P, Moulton W G 2002 *Phys. Rev. B* **65** 214413
- [18] Affleck I 1989 *J. Phys.: Condens. Matter* **1** 3047
- [19] Takahashi M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 2313
- [20] Sorensen E S, Affleck I 1994 *Phys. Rev. B* **49** 15771
- [21] Sorensen E S, Affleck I 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1633
- [22] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [23] White S R 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [24] White S R, Huse D A 1993 *Phys. Rev. B* **48** 3844
- [25] Affleck I 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 474
- [26] Affleck I 1990 *Phys. Rev. B* **41** 6697
- [27] Coleman S 1973 *Commun. Math. Phys.* **31** 259
- [28] Coleman S 1975 *Phys. Rev. D* **11** 2088
- [29] Huang K 1992 *Quarks, Leptons and Gauge Fields* (2nd Ed.) (Singapore: World Scientific) Chapter 10
- [30] Huang H, Affleck I 2004 *Phys. Rev. B* **69** 184414
- [31] Lou J, Xiang T, Su Z 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 2380

Analysis of the finite-temperature phase transition of Heisenberg antiferromagnetic compound $\text{LiVGe}_2\text{O}_6^*$

Huang Hai Li Wei-Feng[†]

(*Mathematics and Physics Department, North China Electric Power University, Beijing 102206, China*)

(Received 28 June 2013; revised manuscript received 7 August 2013)

Abstract

The susceptibility and nuclear magnetic resonance measurements on quasi-one-dimensional spin-1 Heisenberg antiferromagnet LiVGe_2O_6 indicate that this material shows a phase transition from paramagnetic state to antiferromagnetic Néel state at about 22 K, and there exists a gap in the low-temperature magnetic excitation spectrum. Based on the model Hamiltonian of LiVGe_2O_6 , we propose a low-energy field theory—Ginzburg-Landau theory for this compound. From this theory, we study the finite-temperature phase transition induced by spontaneous symmetry breaking and then calculate the finite-temperature susceptibility of LiVGe_2O_6 . All the theoretical calculations are consistent with the experimental results.

Keywords: Heisenberg model, $O(3)$ non-linear σ model, finite-temperature phase transition

PACS: 75.10.Pq

DOI: 10.7498/aps.62.217501

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China (Grant Nos. 12ZP11, 13TD03).

[†] Corresponding author. E-mail: lwf19870715@163.com