第 34 卷 第 6 期　　物 理 学 报　　Vol. 34, No. 6
1985 年 6 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Jun., 1985

一维无规混合各向异性海森伯自旋系统的磁性质

李振亚　　杨传章
（苏州大学物理系）

1984 年 5 月 10 日收到

提　　要

本文扩展了文献 [1] 关于计算各向异性海森伯自旋系统配分函数的方法，计算了一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的比热和磁化率.

由一类磁原子和非磁原子无规混合组成的自旋系统，其磁学性质已有许多作者研究过[2,3]. 关于多种 Ising 自旋磁原子无规混合系统的磁性质，用联立线性方程[4]、高温级数展开方法[5]等已有很多有意义的结果. 对于由一类磁原子组成的一维和二维各向异性海森伯自旋系统的磁性质，也有作者作过计算和讨论[6,1]. 本文也仅考虑位置无序和最近邻磁原子间的相互作用，扩展文献[1]采用的方法，计算了由二类磁原子无规混合组成的，一维二元各向异性海森伯自旋系统的比热和磁化率，这些结果在约化到 Ising 链时，与已发表的工作符合得很好.

文献 [1] 提出的计算各向异性海森伯自旋系统配分函数的方法要点是：仅考虑最近邻磁原子的相互作用，在"对近似"方法中将第 i 和 $(i+1)$ 个自旋组成一对，在"$(q+1)$ 近似"方法中，将第 i，$(i+1)$ 和 $(i+2)$ 三个自旋组成一个集团；略去自旋算符的不可对易性，整个系统的配分函数认作为每一对或每一个集团的配分函数乘积的总和；通过适当的变量变换，系统的配分函数在形式上可写成 Ising 模型的形式，因而可采用对 Ising 自旋系统的计算方法求得各热力学量.

一

由二类磁原子 A 和 B 无规混合的一维自旋系统，分别用 $\lambda_i=1$ 和 -1 来表示 A 和 B 原子（i 是位置的标号，$i=1,2,\cdots,N$，N 也是原子的总数目），用 m_A 和 m_B 分别表示 A 和 B 原子的磁矩，它们之间的交换作用分别用 J_{AA}，J_{BB} 和 J_{AB} 表示. 对于这个系统的一定形式的结构 $\{\lambda_i\}$（即 A 和 B 原子无规混合的方式），系统的哈密顿量 $\mathscr{H}\{\lambda_i\}$ 可以写成

$$\frac{\mathscr{H}\{\lambda_i\}}{k_B T}=-\sum_{i=1}^{N-1}K_{i,\ i+1}\{\sigma_i^z\cdot\sigma_{i+1}^z+\gamma(\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x+\sigma_i^y\sigma_{i+1}^y)\}-\sum_{i=1}^{N}L_i\sigma_i^z, \tag{1}$$

其中 $0\leqslant\gamma\leqslant1$，取 $\gamma=0$ 时，上式为 Ising 模型，而 $\gamma=1$ 时为均匀海森伯模型；σ_i 为第

i 个原子的泡利自旋算符,并且

$$K_{i,i+1} = \left[\frac{1+\lambda_{i+1}}{2} \frac{1-\lambda_{i+1}}{2}\right]\begin{bmatrix} K_{AA} & K_{AB} \\ K_{BA} & K_{BB}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{1+\lambda_i}{2} \\ \dfrac{1-\lambda_i}{2}\end{bmatrix}, \tag{2}$$

$$L_i = \left[\frac{1+\lambda_i}{2} \frac{1-\lambda_i}{2}\right] \begin{bmatrix} L_A \\ L_B \end{bmatrix} = [L_A \quad L_B]\begin{bmatrix}\dfrac{1+\lambda_i}{2} \\ \dfrac{1-\lambda_i}{2}\end{bmatrix}, \tag{3}$$

$$K_{AA} = J_{AA}/2k_BT, \qquad L_A = m_A L, \qquad \cdots, \tag{4}$$

$$L = H/k_BT, \qquad m_i = g_i\mu_B, \qquad i = A,\ B. \tag{5}$$

这里H表示沿 z 轴方向的外加磁场，g_i 和 μ_B 分别是朗德因子和玻尔磁子。

定义算符

$$P_{ij} = \sigma_i^z\sigma_j^z + \gamma(\sigma_i^x\sigma_j^x + \sigma_i^y\sigma_j^y) \qquad 0 \leqslant \gamma \leqslant 1. \tag{6}$$

可以证明[1] $\exp[K_{i,i+1}\cdot P_{i,i+1}]$ 可写成下面的形式:

$$\exp[K_{i,i+1}\cdot P_{i,i+1}] = a_0(K_{i,i+1}) + a_1(K_{i,i+1})\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + a_2(K_{i,i+1})[\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y\sigma_{i+1}^y], \tag{7}$$

其中的系数为[1]

$$\begin{aligned} a_0(K_{i,i+1}) &= \frac{1}{2}[\exp(K_{i,i+1}) + \exp(-K_{i,i+1})\cosh(2\gamma K_{i,i+1})], \\ a_1(K_{i,i+1}) &= \frac{1}{2}[\exp(K_{i,i+1}) - \exp(-K_{i,i+1})\cosh(2\gamma K_{i,i+1})], \\ a_2(K_{i,i+1}) &= \frac{1}{2}\exp(-K_{i,i+1})\sinh(2\gamma K_{i,i+1}). \end{aligned} \tag{8}$$

应用文献 [1] 中的“对近似”方法,可得系统的配分函数

$$\begin{aligned} Z\{\lambda_i\} &= \mathrm{Tr}\left\{\prod_{i=1}^{N-1}(a_0 + a_1\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z)\exp\left(\sum_{i=1}^{N} L_i\sigma_i^z\right)\right\} \\ &= \mathrm{Tr}\left\{\prod_{i=1}^{N-1} f_{i,i+1}^{(1)}\cosh R_{i,i+1}^{(1)}[1 + \sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\tanh R_{i,i+1}^{(1)}] \right. \\ &\qquad \left. \prod_{i=1}^{N}\exp(L_i\sigma_i^z)\right\}. \end{aligned} \tag{9}$$

这里应用了关系式:

$$a_0(K_{i,i+1}) + a_l(K_{i,i+1})\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z = f_{i,i+1}^{(l)}\exp\{R_{i,i+1}^{(l)}\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\} \qquad l = 1,\ 2. \tag{10}$$

其中

$$\begin{aligned} a_0(K_{i,i+1}) &= f_{i,i+1}^{(l)}\cosh R_{i,i+1}^{(l)} \\ a_l(K_{i,i+1}) &= f_{i,i+1}^{(l)}\sinh R_{i,i+1}^{(l)} \end{aligned} \qquad (l = 1,\ 2) \tag{11}$$

类似于高温级数展开方法,将 $\ln Z\{\lambda_i\}$ 展开至 $O(L^2)$ 项

$$\ln Z\{\lambda_i\} = \sum_i \ln f_{i,i+1}^{(1)}\cosh R_{i,i+1}^{(1)} + \sum_i \ln\cosh L_i$$

$$+\ln\left\{1+\sum_i \tanh L_i\cdot\tanh R_{i,i+1}^{(1)}\cdot\tanh L_{i+1}\right.$$
$$\left.+\sum_i \tanh L_i\cdot\tanh R_{i,i+1}^{(1)}\cdot\tanh R_{i+1,i+2}^{(1)}\cdot\tanh L_{i+2}+\cdots\right\}. \tag{12}$$

在外场为零的情形有

$$\frac{1}{N}\ln Z\{\lambda_i\}\Big|_{L=0}=\frac{1}{N}\sum_i \ln f_{i,i+1}^{(1)}\cosh R_{i,i+1}^{(1)}$$
$$=\frac{1}{N}\sum_i\left[\frac{1+\lambda_i}{2}\quad\frac{1-\lambda_i}{2}\right]\begin{bmatrix}h_{\rm AA} & h_{\rm AB}\\ h_{\rm BA} & h_{\rm BB}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{1+\lambda_i}{2}\\ \dfrac{1-\lambda_i}{2}\end{bmatrix}, \tag{13}$$

这里

$$h_{\alpha\beta}=\ln\left\{\frac{1}{2}\left[e^{K_{\alpha\beta}}+e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]\right\}\qquad \alpha,\beta={\rm A},{\rm B}. \tag{14}$$

对(13)式进行统计平均,并注意到$\langle\lambda_i\rangle=2p_{\rm A}-1=1-2p_{\rm B}$,$\langle\lambda_i\lambda_j\rangle=(2p_{\rm A}-1)^2(i\neq j)$,$p_{\rm A}$和$p_{\rm B}$分别是磁原子A和B的浓度,可得到平均能量

$$\frac{\langle\varepsilon\rangle}{N}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\left\langle\frac{1}{N}\ln Z\{\lambda_i\}\right\rangle_{L=0}$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}J_{\alpha\beta}P_\alpha P_\beta\left[e^{K_{\alpha\beta}}+e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]^{-1}$$
$$\times\left[e^{K_{\alpha\beta}}-e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})+2\gamma e^{-K_{\alpha\beta}}\sinh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right] \tag{15}$$

和比热

$$\frac{c}{N}=k_{\rm B}\sum_{\alpha,\beta}K_{\alpha\beta}^2P_\alpha P_\beta\{\left[e^{K_{\alpha\beta}}+e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]^{-1}$$
$$\times\left[e^{K_{\alpha\beta}}+e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})-4\gamma e^{-K_{\alpha\beta}}\sinh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right.$$
$$\left.+4\gamma^2e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]-\left[e^{K_{\alpha\beta}}+e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]^{-2}$$
$$\times\left[e^{K_{\alpha\beta}}-e^{-K_{\alpha\beta}}\cosh(2\gamma K_{\alpha\beta})+2\gamma e^{-K_{\alpha\beta}}\sinh(2\gamma K_{\alpha\beta})\right]^2\}. \tag{16}$$

在(15)和(16)式中,令$\gamma=0$,就得到一维二元无规混合 Ising 链的平均能量和比热

$$\frac{1}{N}\langle\varepsilon\rangle_{\rm Ising}=-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}J_{\alpha\beta}P_\alpha P_\beta\tanh K_{\alpha\beta}, \tag{17}$$

$$\frac{1}{N}c_{\rm Ising}=k_{\rm B}\times\sum_{\alpha,\beta}P_\alpha P_\beta K_{\alpha\beta}^2{\rm sech}^2K_{\alpha\beta}. \tag{18}$$

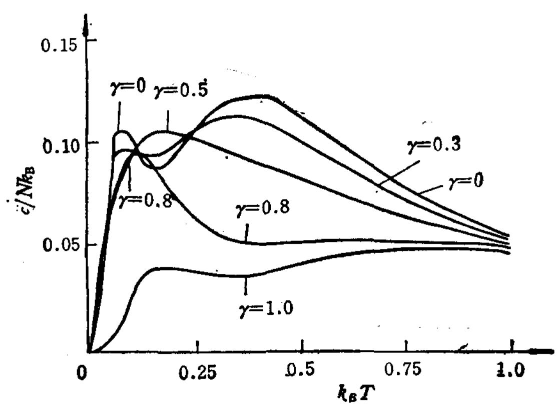


图 1　一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的比热曲线 $J_{\rm AA}=1$; $J_{\rm BB}=0.2$; $J_{\rm AB}=0$; $P_{\rm A}=P_{\rm B}=0.5$

上面的结果与文献[5]完全相同.图

1 表示的是一定浓度时,各种 γ 值的比热曲线.

对下式:

$$\frac{k_B T}{N}\chi\{\lambda_i\} = \frac{1}{N}\frac{\partial^2}{\partial L^2}\ln Z\{\lambda_i\} \tag{19}$$

作统计平均,求得系统的磁化率 χ

$$\begin{aligned}\frac{k_B T}{N}\chi = \frac{1}{\Sigma}\{&P_A m_A^2 + P_B m_B^2 + P_A(P_A m_A^2 - P_B m_B^2)\tanh R_{AA}^{(1)} \\ &+ P_B(-P_A m_A^2 + P_B m_B^2)\tanh R_{BB}^{(1)} + 4P_A P_B m_A m_B \tanh R_{AB}^{(1)} \\ &- P_A P_B(P_A m_A^2 + P_B m_B^2)(\tanh R_{AA}^{(1)}\cdot\tanh R_{BB}^{(1)} - \tanh^2 R_{AB}^{(1)})\},\end{aligned} \tag{20}$$

其中

$$\Sigma = 1 - P_A\tanh R_{AA}^{(1)} - P_B\tanh R_{BB}^{(1)} + P_A P_B(\tanh R_{AA}^{(1)}\tanh R_{BB}^{(1)} - \tanh^2 R_{AB}^{(1)}) \tag{21}$$

和

$$\tanh R_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{a_1(K_{\alpha\beta})}{a_0(K_{\alpha\beta})}. \tag{22}$$

注意到当 $\gamma = 0$ 时, $\tanh R_{\alpha\beta}^{(1)} = \tanh K_{\alpha\beta}$, (20) 式就是文献 [5] 关于一维二元无规混合 Ising 链的磁化率.

二

对于多元磁原子系统,必须区别不同种类磁原子间的相互作用。略去 $P_{i,i+1}$ 和 $P_{i+1,i+2}$ 之间的不可对易性,应用(7)式并采用下面的近似:

$$\begin{aligned}&\exp\{K_{i,i+1}P_{i,i+1} + K_{i+1,i+2}P_{i+1,i+2}\} \\ \cong\ &\exp\{K_{i,i+1}P_{i,i+1}\}\exp\{K_{i+1,i+2}P_{i+1,i+2}\} \\ =\ &a_0 a_0' + a_0 a_1'\sigma_{i+1}^z\sigma_{i+2}^z + a_1 a_0'\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + a_0' a_2(\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y\sigma_{i+1}^y) + a_2' a_0 \\ &\times(\sigma_{i+1}^x\sigma_{i+2}^x + \sigma_{i+1}^y\sigma_{i+2}^y) + a_1 a_1'\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z + a_2 a_2'(\sigma_i^x\sigma_{i+2}^x + \sigma_i^y\sigma_{i+2}^y),\end{aligned} \tag{23}$$

这里

$$\begin{aligned}&a_0 = a_0(K_{i,i+1}), \qquad a_1 = a_1(K_{i,i+1}), \cdots, \\ &a_0' = a_0'(K_{i+1,i+2}), \qquad a_1' = a_1'(K_{i+1,i+2}), \cdots.\end{aligned} \tag{24}$$

为简化符号,令

$$\begin{aligned}&b_0 = a_0 a_0', \qquad b_1 = a_1' a_0, \qquad b_1' = a_0 a_1, \\ &b_2 = a_0 a_2', \qquad b_3 = a_1 a_1', \qquad b_4 = a_2 a_2'.\end{aligned} \tag{25}$$

对于系统的一定形式的结构,用"$(q+1)$ 近似"方法得到系统的配分函数为

$$Z\{\lambda_i\} = \mathrm{Tr}\left\{\prod_{i\in\mathrm{odd}}[b_0 + b_1\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + b_1'\sigma_{i+1}^z\sigma_{i+2}^z + b_3\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z]\exp\left[\sum_i L_i\sigma_i^z\right]\right\}. \tag{26}$$

应用关系式:

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}\{[b_0 + b_1\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z + b_1'\sigma_{i+1}^z\sigma_{i+2}^z + b_3\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z]\exp[L_{i+1}\sigma_{i+1}^z]\}(\sigma_{i+1}^z) \\ =\ &f\exp\left\{R_{i,i+2}\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z + \frac{1}{2}Q_i\sigma_i^z + \frac{1}{2}\ Q_{i+2}\sigma_{i+2}^z\right\},\end{aligned} \tag{27}$$

则

$$Z\{\lambda_i\} = f^{(N-1)/2}\mathrm{Tr}\left\{\exp\left[\sum_{i\in\mathrm{odd}} R_{i,i+2}\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z + \sum_{i\in\mathrm{odd}}(Q_i^* + L_i)\sigma_i^z\right]\right\}, \tag{28}$$

其中

$$\begin{aligned} Q_i^* &= \frac{1}{2}(Q_i + Q_{i+2}), \\ 2(b_0 + b_3)\cosh L_{i+1} &= f e^{R_{i,i+2}}\cosh Q_i^*, \\ 2(b_0 - b_3)\cosh L_{i+1} &= f e^{R_{i,i+2}}\cosh\frac{1}{2}(Q_i - Q_{i+2}), \\ 2(b_0 + b_1')\sinh L_{i+1} &= f e^{R_{i,i+2}}\sinh Q_i^*, \\ 2(b_1 - b_1')\sinh L_{i+1} &= f e^{K_{i,i+2}}\sinh\frac{1}{2}(Q_i - Q_{i+2}). \end{aligned} \tag{29}$$

将 $\ln Z\{\lambda_i\}$ 展开至 $O(L^2)$ 项，有

$$\begin{aligned} \ln Z\{\lambda_i\} &= \sum_{i\in\mathrm{odd}} \ln f\cosh R_{i,i+2} + \sum_{i\in\mathrm{odd}} \ln(Q_i^* + L_i) \\ &+ \ln\Big[1 + \sum_{i\in\mathrm{odd}} \tanh(Q_i^* + L_i)\tanh R_{i,i+2}\tanh(Q_{i+2}^* + L_{i+2}) \\ &+ \sum_{i\in\mathrm{odd}} \tanh(Q_i^* + L_i)\tanh R_{i,i+2}\tanh R_{i+2,i+4}\cdot\tanh(Q_{i+4}^* + L_{i+4}) + \cdots\Big]. \end{aligned} \tag{30}$$

由此可得外场为零时系统的平均能量

$$\frac{\langle\varepsilon\rangle}{N} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_{\alpha,\beta} P_\alpha P_\beta \ln a_0(K_{\alpha\beta}) \qquad \alpha,\beta = \mathrm{A},\mathrm{B} \tag{31}$$

和比热

$$\frac{c}{N} = \frac{1}{k_\mathrm{B}T^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\sum_{\alpha,\beta} P_\alpha P_\beta \ln a_0(K_{\alpha\beta}) \qquad \alpha,\beta = \mathrm{A},\mathrm{B} \tag{32}$$

上面的结果，实际上就是对近似方法中的(15)式和(16)式，表明用“$(q+1)$ 近似”方法计算系统的平均能量和比热，并没有比“对近似”方法有什么改进。

应用(29)和(19)式来计算系统的磁化率时，必须考虑到第 $(i+1)$ 位置处磁原子的种类和矩阵乘积[5]，其结果为

$$\begin{aligned} \frac{k_\mathrm{B}T}{N}\chi = \frac{1}{2}\Big\{&P_\mathrm{A}\Big[P_\mathrm{A}^2\frac{a_0^2(K_\mathrm{AA}) - a_1^2(K_\mathrm{AA})}{a_0^2(K_\mathrm{AA}) + a_1^2(K_\mathrm{AA})}m_\mathrm{A}^2 + P_\mathrm{B}^2 m_\mathrm{B}^2 \\ &+ P_\mathrm{A}P_\mathrm{B}\frac{a_0^2(K_\mathrm{AA}) - a_1^2(K_\mathrm{AA})}{a_0^2(K_\mathrm{AA})}m_\mathrm{A}^2\Big] + P_\mathrm{B}\Big[P_\mathrm{B}^2\frac{a_0^2(K_\mathrm{BB}) - a_1^2(K_\mathrm{BB})}{a_0^2(K_\mathrm{BB}) + a_1^2(K_\mathrm{BB})}m_\mathrm{B}^2 \\ &+ P_\mathrm{A}^2 m_\mathrm{A}^2 + P_\mathrm{A}P_\mathrm{B}\frac{a_0^2(K_\mathrm{BB}) - a_1^2(K_\mathrm{BB})}{a_0^2(K_\mathrm{BB})}m_\mathrm{B}^2\Big]\Big\} + \frac{1}{2}\{P_\mathrm{A}^2(P_\mathrm{A}F_\mathrm{AA}^{+2}m_\mathrm{A}^2 \\ &+ P_\mathrm{B}F_\mathrm{AA}^{-2}m_\mathrm{B}^2) + P_\mathrm{B}^2(P_\mathrm{A}F_\mathrm{BB}^{+2}m_\mathrm{A}^2 + P_\mathrm{B}F_\mathrm{BB}^{-2}m_\mathrm{B}^2) \\ &+ P_\mathrm{A}P_\mathrm{B}(P_\mathrm{A}F_\mathrm{AB}^{+2}m_\mathrm{A}^2 + P_\mathrm{B}F_\mathrm{AB}^{-2}m_\mathrm{B}^2 + P_\mathrm{A}F_\mathrm{AB}^{+2}m_\mathrm{A}^2 \\ &+ P_\mathrm{B}F_\mathrm{BA}^{-2}m_\mathrm{B}^2) + P_\mathrm{A}m_\mathrm{A}^2 + P_\mathrm{B}m_\mathrm{B}^2 + 2P_\mathrm{A} \\ &\times[P_\mathrm{A}(P_\mathrm{A}F_\mathrm{AA}^{+}m_\mathrm{A} + P_\mathrm{B}F_\mathrm{AA}^{-}m_\mathrm{B}) + P_\mathrm{B}(P_\mathrm{A}F_\mathrm{BA}^{+}m_\mathrm{A} + P_\mathrm{B}F_\mathrm{BA}^{-}m_\mathrm{B})]m_\mathrm{A} \\ &+ 2P_\mathrm{B}[P_\mathrm{A}(P_\mathrm{A}F_\mathrm{AB}^{+}m_\mathrm{A} + P_\mathrm{B}F_\mathrm{AB}^{-}m_\mathrm{B}) + P_\mathrm{B}(P_\mathrm{A}F_\mathrm{BB}^{+}m_\mathrm{A} \end{aligned}$$

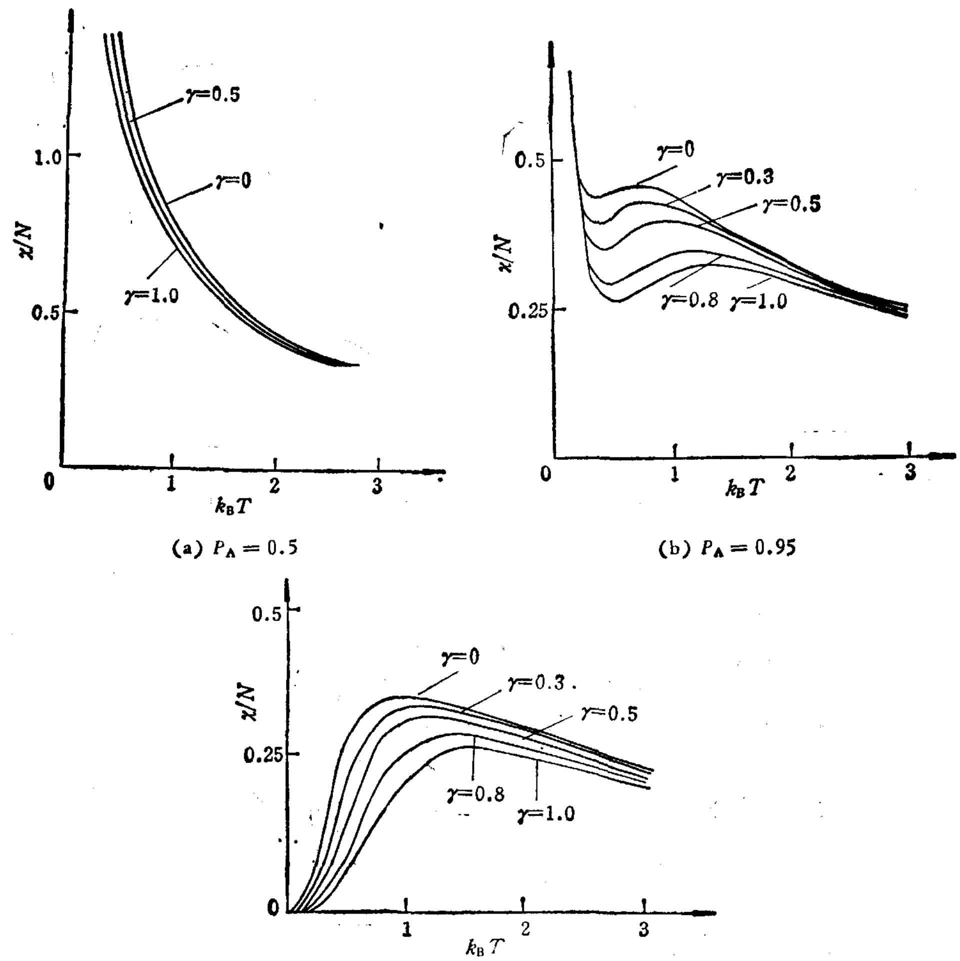
$$
\begin{aligned}
&+ P_{\mathrm{B}}F^{-}_{\mathrm{BB}}m_{\mathrm{B}})]m_{\mathrm{B}}\} + \begin{bmatrix} 1 - P_{\mathrm{A}}D_{\mathrm{AA}} & -P_{\mathrm{A}}D_{\mathrm{AB}} \\ -P_{\mathrm{B}}D_{\mathrm{BA}} & 1 - P_{\mathrm{B}}D_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix}^{-1} \\
&\cdot \left\{ [m_{\mathrm{A}} \quad m_{\mathrm{B}}] \begin{bmatrix} P_{\mathrm{A}} & \\ & P_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} C_{\mathrm{AA}} & C_{\mathrm{AB}} \\ C_{\mathrm{BA}} & C_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D_{\mathrm{AA}} & D_{\mathrm{AB}} \\ D_{\mathrm{BA}} & D_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \right) \right. \\
&\cdot \begin{bmatrix} P_{\mathrm{A}} & \\ & P_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{\mathrm{A}} \\ m_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} + [P_{\mathrm{A}} \quad P_{\mathrm{B}}] \begin{bmatrix} G_{\mathrm{AA}} & G_{\mathrm{AB}} \\ G_{\mathrm{BA}} & G_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{\mathrm{A}} & \\ & P_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} \\
&\cdot \left. \left(\begin{bmatrix} C_{\mathrm{AA}} & C_{\mathrm{AB}} \\ C_{\mathrm{BA}} & C_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{\mathrm{A}} \\ P_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D_{\mathrm{AA}} & D_{\mathrm{AB}} \\ D_{\mathrm{BA}} & D_{\mathrm{BB}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{\mathrm{A}} & \\ & P_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{\mathrm{A}} \\ m_{\mathrm{B}} \end{bmatrix} \right) \right\}. \qquad (33)
\end{aligned}
$$

其中

$$C_{\alpha\beta} = P_{\mathrm{A}}F^{+}_{\alpha\beta}m_{\mathrm{A}}\tanh R^{+}_{\alpha\beta} + P_{\mathrm{B}}F^{-}_{\alpha\beta}m_{\mathrm{B}}\tanh R^{-}_{\alpha\beta}, \qquad (34)$$

$$D_{\alpha\beta} = P_{\mathrm{A}}\tanh R^{+}_{\alpha\beta} + P_{\mathrm{B}}\tanh R^{-}_{\alpha\beta}, \qquad (35)$$

$$G_{\alpha\beta} = P_{\mathrm{A}}F^{+}_{\alpha\beta}m_{\mathrm{A}} + P_{\mathrm{B}}F^{-}_{\alpha\beta}m_{\mathrm{B}}, \qquad (36)$$



(a) $P_{\mathrm{A}} = 0.5$ (b) $P_{\mathrm{A}} = 0.95$

(c) $P_{\mathrm{A}} = 1.0$

图 2 一维二元无规混合反铁磁自旋系统的磁化率 [$(q+1)$ 近似]
$J_{\mathrm{AA}} = -1$; $J_{\mathrm{BB}} = -0.2$; $m_{\mathrm{A}} = m_{\mathrm{B}} = 1$

$$F^{\pm}_{\alpha\beta} = \frac{b^{\pm}_{1}(K_{\alpha\beta}) + b'^{\pm}_{1}(K_{\alpha\beta})}{b^{\pm}_{0}(K_{\alpha\beta}) + b^{\pm}_{3}(K_{\alpha\beta})}. \tag{37}$$

上面各式中 $R^{\pm}_{\alpha\beta}$, $b^{\pm}_{0}$, $b^{\pm}_{1}$, $\cdots$分别对应于 λ_{i+1} 取 1 和 -1的情形.

应用 (33) 式，可以得到 $\gamma = 0$ 和 $\gamma = 1$ 各种情形下的磁化率. 图 2 表示的是在一定浓度下，各种不同 γ 值的磁化率与温度的关系曲线. 在约化到 $\gamma = 0$ 的 Ising 链时，对于同一类磁原子组成的系统，数值计算表明磁化率与用“对近似”方法及文献 [5] 的计算结果完全一致. 对于一维二元无规混合的 Ising 自旋系统的磁化率，数值计算的结果表明与文献 [5] 符合得很好. 这些都说明用 “$(q+1)$近似” 方法计算一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的磁化率是有意义的.

三

本文中我们扩展了文献 [1] 提供的方法，分别用“对近似”和 “$(q+1)$ 近似” 计算了一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的比热和磁化率. 关于比热的计算，用“$(q+1)$ 近似”方法和用“对近似”方法得到的结果并没有什么改进，这与文献 [1] 是一致的. 用“$(q+1)$ 近似”方法计算的磁化率，有与用“对近似”方法不同的结果，而数值计算表明，将结果约化到一维二元 Ising 自旋系统时，都与文献 [5] 的结果符合得很好. 这样至少在不亚于“对近似”的近似程度上，“$(q+1)$ 近似” 方法也提供了计算一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的磁性质的途径. 从方法本身来看 “$(q+1)$ 近似”比“对近似”更优越，所以它的结果会更好些. 对于由同类磁原子组成的一维各向异性海森伯自旋系统，两种近似方法计算的比热和磁化率都相同，这是由于在本文的 “$(q+1)$ 近似” 方法中作了 (23) 式的近似处理，使得两种近似方法对于一维一元自旋系统是等价的. 同时，本文用两种方法计算的比热和磁化率，在约化到由一类磁原子组成的纯 Ising 链的情形时，与已有的研究工作完全一致，再次表明这两种近似方法对一维二元无规混合各向异性海森伯自旋系统的处理是恰当的和有意义的. 无疑，本文的工作也可推广到一维多元无规混合自旋系统，预计推广到二维和三维的多元无规混合系统也是可行的.

参　考　文　献

[1] Y. Tanaka and N. Uryu, *Physica* **105**A (1981), 493.
[2] F. Matsubara, K. Yoshimura and S. Katsura, *Can. J. Phys.*, **51**(1973), 1053.
[3] M. Thomsen and M. F. Thorpe, *J. Phys. C*, **16**(1983), 4191.
[4] F. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **51** (1974), 378.
[5] S. Katsura and F. Matsubara, *Can. J. Phys.* **52**(1974), 120.
[6] J. C. Bonner and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **135**(1964), A 640.

MAGNETIC PROPERTIES OF THE RANDOM MIXTURE OF THE ONE-DIMENSIONAL SYSTEM WITH ANISOTROPIC HEISENBERG EXCHANGE

LI ZHEN-YA YANG CHUAN-ZHANG
(Department of Physics, Suzhou University)

ABSTRACT

In this paper, we extend the method proposed in ref. [1] for the calculation of the partition function of the anisotropic Heisenberg spin system, and calculate the specific heat and magnetic susceptibility for random binary mixture of the one-dimensional system with anisotropic Heisenberg exchange.