第 37 卷 第10期　　物 理 学 报　　Vol. 37, No. 10
1988 年 10 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Oct., 1988

混合自旋（$S=1, 1/2$）模型具有再次近邻反铁磁相互作用晶格基态

王 选 章
（哈尔滨师范大学物理系）
1988 年 1 月 3 日收到

本文发展文献[1]的方法到两种不同自旋的原子（$S_a=1$，$S_b=1/2$）构成的晶格中，计算了简单立方晶格在具有再次近邻反铁磁相互作用下在外磁场中的基态自旋结构、能量和相界. 从文中给出的相图可知：这种晶格有两种反铁磁自旋结构，有四种亚铁磁自旋结构.

一、引　　言

铁氧体的亚铁磁性可以粗略地由混合自旋模型[2]来描述. 这一模型的重整化群计算已在文献[2，3]做过，但是这一模型在外磁场中的基态的工作未见报道. 本文发展文献[1]的方法到不同自旋的原子构成的晶格中，计算了一个由 a，b 两种原子（$S_a=1$，$S_b=1/2$）构成的简单立方晶格的基态. 具体做法是对 a 原子的自旋算符按文献[1]变换，使之相应于两种粒子数不守恒的费密子体系. 对 b 原子的自旋算符则另引入一种变换，使之相对应另一种粒子数不守恒的费密子体系. 这样不同自旋的相互作用系统就变换为三种粒子数不守恒的相互作用的费密子体系.

二、模型与方法

如图 1 所示的晶格具有两种不等价格点 a，b，其自旋分别是 $S_a=1$，$S_b=1/2$，格点的配位数是最近邻数 6 个次近邻数 12 个，再次近邻数 8 个. 系统的H量为

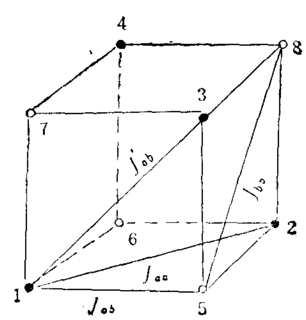


图　1

● 代表 a 种原子的位置；
○ 代表 b 种原子的位置；
数字是子格标号

$$H_M = J_{ab}\sum_{l_\alpha, l'_\beta}^{n,n} \hat{S}_a^z(l_\alpha)\hat{S}_b^z(l'_\beta) + J_{aa}\sum_{\substack{l_\alpha, l''_\beta \\ \alpha<\beta}}^{n,n,n} \hat{S}_a^z(l_\alpha)\hat{S}_a^z(l''_\beta)$$

$$+ J_{bb}\sum_{\substack{l_\alpha, l''_\beta \\ \alpha>\beta}}^{n,n,n} \hat{S}_b^z(l_\alpha)\hat{S}_b^z(l''_\beta)$$

$$+ J'_{ab}\sum_{l_\alpha, l'''_\beta}^{an,n,n} \hat{S}_a^z(l_\alpha)\hat{S}_b^z(l'''_\beta) - h_a\sum_{l_\alpha}\hat{S}_a^z - h_b\sum_{l_\alpha}\hat{S}_b^z.$$

其中 $J_{ab}, J_{aa}, J_{bb}, J'_{ab} > 0$，求和号 $\sum\limits^{an,n,n}$ 表示再次近邻取和，其余符号的意义可参阅文献[1,4].

对 a 种格点上的自旋算符，按文献[1]引入如下变换：

$$\hat{S}^z_a(l_\alpha) \Longrightarrow \begin{cases} \hat{S}^z_{+1}(l_\alpha) = 1 - \hat{n}_1(l_\alpha) - \hat{n}_2(l_\alpha); \\ \hat{S}^z_0(l_\alpha) = \hat{n}_1(l_2) - \hat{n}_2(l_\alpha); \\ \hat{S}^z_{-1}(l_\alpha) = \hat{n}_1(l_\alpha) + \hat{n}_2(l_\alpha) - 1. \end{cases}$$
$$(l_\alpha \in a)$$

在 a 种格点上引入上述变换需引入如下投影算符 $\hat{P}_{\pm1}(l_\alpha) = 1-(1-\hat{n}_1(l_\alpha))\hat{n}_2(l_\alpha)$, $\hat{P}_0(l_\alpha) = 1 - \hat{n}_1(l_\alpha)\hat{n}_2(l_\alpha)$.

对 b 种格点上的自旋算符，由于 $S_b = 1/2$ 可引入如下变换：

$$\hat{S}^z_b(l_\alpha) \Longrightarrow \begin{cases} \hat{S}^z_{+\frac{1}{2}}(l_\alpha) = \dfrac{1}{2} - \hat{n}_3(l_\alpha); \\ \hat{S}^z_{-\frac{1}{2}}(l_\alpha) = \hat{n}_3(l_\alpha) - \dfrac{1}{2}. \end{cases}$$
$$(l_\alpha \in b)$$

引入上述两种变换后这个混合自旋体系变换为粒子数不守恒的三种不同费密子混合体系

$$\begin{aligned} \hat{H}_F = J_{ab} &\sum_{l_\alpha \in a, l'_\beta \in b}^{n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta', l'_\beta)\hat{P}(\eta, l_\alpha) \\ &+ J_{aa} \sum_{\substack{l_\alpha, l''_\beta \in a \\ \alpha<\beta}}^{n,n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta, l''_\beta)\hat{P}(\eta, l_\alpha)\hat{P}(\eta, l''_\beta) \\ &+ J_{bb} \sum_{\substack{l_\alpha, l''_\beta \in b \\ \alpha<\beta}}^{n,n,n} \hat{S}(\eta', l_\alpha)\hat{S}(\eta', l''_\beta) \\ &+ J'_{ab} \sum_{l_\alpha \in a, l'''_\beta \in b}^{an,n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta', l'''_\beta)\hat{P}(\eta, l_\alpha) \\ &- h_a \sum_{l_\alpha \in a} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{P}(\eta, l_\alpha) - h_b \sum_{l_\alpha \in b} \hat{S}(\eta', l_\alpha). \end{aligned}$$

同样可证

$$\begin{aligned} \hat{H}'_F = J_{ab} &\sum_{l_\alpha \in a, l'_\beta \in b}^{n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta', l'_\beta) + J_{aa} \sum_{l_\alpha, l''_\beta \in a}^{n,n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta, l''_\beta) \\ &+ J_{bb} \sum_{l_\alpha, l''_\beta \in b}^{n,n,n} \hat{S}(\eta', l_\alpha)\hat{S}(\eta', l''_\beta) + J'_{ab} \sum_{l_\alpha \in a, l'''_\beta \in b}^{an,n,n} \hat{S}(\eta, l_\alpha)\hat{S}(\eta', l'''_\beta) \\ &- h_a \sum_{l_\alpha \in a} \hat{S}(\eta, l_\alpha) - h_b \sum_{l_\alpha \in b} \hat{S}(\eta', l_\alpha). \end{aligned}$$

其中 $\hat{S}(\eta, l_\alpha)$ 可取 $\hat{S}^z_{+1}(l_\alpha)$, $\hat{S}^z_0(l_\alpha)$, $\hat{S}^z_{-1}(l_\alpha)$，而 $\hat{S}(\eta', l_\alpha)$ 可取 $\hat{S}^z_{+\frac{1}{2}}(l_\alpha)$, $\hat{S}^z_{-\frac{1}{2}}(l_\alpha)$. 当

外磁场满足一定条件时 $\hat{H}'_F$ 的真空态 $|0\rangle_{F'}$ 是 $\hat{H}_M$ 的基态.

三、基态能量及相界

将整体晶格分为 8 套子格，子格 1，2，3，4 $\in a$，子格 5，6，7，8 $\in b$. 做与文献[1]相似的计算及讨论，我们求出了各基态的能量及相界.

A 相　全部子格的自旋向上(即子格 1，2，3，4 的自旋取 $\hat{S}^z_{+1}$，子格 5，6，7，8 的自旋取 $\hat{S}^z_{+\frac{1}{2}}$). N 代表总格点数.

基态能量　$E_0=\frac{N}{8}(12J_{ab}+24J_{aa}+6J_{bb}+16J'_{ab}-4h_a-2h_b)$,

相界　$h_a>3J_{ab}+12J_{aa}+4J'_{ab}$, $h_b>6J_{ab}+6J_{bb}+8J'_{ab}$,

B_1 相　子格 1 自旋向下，其余子格自旋向上(即子格 1 的自旋取 $\hat{S}^z_{-1}$，子格 2，3，4 的自旋取 $\hat{S}^z_{+1}$，子格 5，6，7，8 的自旋取 $\hat{S}^z_{+\frac{1}{2}}$. 以下略)，4 度简并.

基态能量　$E_0=\frac{N}{8}(6J_{ab}+6J_{bb}+8J'_{ab}-2h_a-2h_b)$,

相界　$3J_{ab}+12J_{aa}+4J'_{ab}>h_a>3J_{ab}+4J_{aa}+4J'_{ab}$,

$h_b>(2J_{ab}+6J_{bb}+8J'_{ab},\ 6J_{ab}+6J_{bb}-8J'_{ab})$,

$h_b-2h_a+24J_{aa}-6J_{bb}>0$, $h_b-h_a+12J_{aa}-3J_{ab}-4J'_{ab}-4J_{bb}>0$,

$2h_b-h_a-9J_{ab}+12J_{aa}-12J'_{ab}$, $3h_b-2h_a-12J_{ab}+24J_{aa}-6J_{bb}-16J'_{ab}>0$,

B_2 相　子格 5 自旋向下，其余子格自旋向上，4 度简并.

基态能量　$E_0=\frac{N}{8}(6J_{ab}+24J_{ab}+8J'_{ab}-4h_a-h_b)$,

相界　$h_a>(J_{ab}+12J_{aa}+4J'_{ab},\ 3J_{ab}+12J_{aa}-4J'_{ab})$,

$6J_{ab}+6J_{bb}+8J'_{ab}>h_b>6J_{ab}+2J_{bb}+8J'_{ab}$, $2h_a-h_b+6J_{bb}-24J_{aa}>0$,

$4h_a-h_b-6J_{ab}-32J_{aa}+6J_{bb}-8J_{ab}>0$, $8h_a-h_b-18J_{ab}+6J_{bb}-24J'_{ab}>0$,

$6h_a-h_b-12J_{ab}-24J_{aa}+6J_{bb}-16J'_{ab}>0$,

C_1 相　子格 1，2 自旋向下，其余子格自旋向上，6 度简并.

基态能量　$E_0=\frac{N}{8}(-8J_{aa}+6J_{bb}-2h_b)$,

相界　$3J_{ab}+4J_{aa}+4J'_{ab}>h_a>3J_{ab}-4J_{aa}+4J'_{ab}$,

$h_b>(-2J_{ab}+6J_{bb}+8J'_{ab},2J_{ab}+6J_{bb}-8J'_{ab})$,

$2h_b-h_a-3J_{ab}+4J_{aa}-4J'_{ab}>0$,

$h_b-2h_a>(-8J_{aa}-4J_{ab}+6J_{bb},\ -8J_{aa}+6J_{bb}-16J'_{ab},\ -16J_{aa}+4J_{bb})$,

$h_b-h_a>(-J_{ab}-4J_{aa}+4J_{bb}+4J'_{ab},\ J_{ab}-4J_{aa}+4J_{bb}-4J'_{ab},$

$3J_{ab}-8J_{aa}+4J'_{ab})$,

$3h_b-2h_a>(4J_{ab}-8J_{aa}+6J_{bb},\ -8J_{aa}+6J_{bb}+16J'_{ab})$,

$3h_b-4h_a+32J_{aa}-6J_{ab}-6J_{bb}-8J'_{ab}>0$,

$h_b-4h_a+6J_{ab}+32J_{aa}-6J_{bb}+8J'_{ab}>0$,

C_2 **相** 子格 5，6 自旋向下，其余子格自旋向上，6 度简并．

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(24J_{aa} - 2J_{bb} - 4h_a)$，

相界 $h_a > (-J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab},\ J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab})$，
$6J_{ab} + 2J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 6J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，
$2h_a - h_b > (-4J_{ab} - 2J_{bb} + 24J_{aa},\ 24J_{aa} - 2J_{bb} - 16J'_{ab},\ 16J_{aa} - 4J_{bb})$，
$4h_a - h_b > (2J_{ab} + 32J_{aa} - 2J_{bb} - 8J'_{ab},\ -2J_{ab} + 32J_{aa} - 2J_{bb} + 8J'_{ab},$
$6J_{ab} - 4J_{bb} + 8J'_{ab})$，$h_a - h_b > -3J_{ab} + 12J_{aa} - 4J_{bb} - 4J'_{ab}$，
$3h_a - h_b > 3J_{ab} + 12J_{aa} - 4J_{bb} + 4J'_{ab}$，$8h_a - h_b > 6J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，
$6h_a - h_b > (4J_{ab} + 24J_{aa} - 2J_{bb},\ 24J_{aa} + 16J'_{ab} - 2J_{bb})$，

C_3 **相** 子格 1，5 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并．

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(4J_{ab} - 2h_a - h_b)$，

相界 $J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > 3J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$，
$2J_{ab} + 6J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 6J_{ab} + 2J_{bb} - 8J'_{ab}$，$4J'_{ab} - J_{ab} > 0$，
$-4J_{ab} + 24J_{aa} - 2J_{bb} > 2h_a - h_b > 4J_{ab} + 8J_{aa} - 6J_{bb}$，
$h_b - h_a - 5J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab} > 0$，$4h_a - h_b - 10J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab} > 0$，
$6h_a - h_b - 16J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab} > 0$，

C_4 **相** 子格 1，8 自旋向下，其余子格自旋向上，4 度简并．

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(16J'_{ab} - 2h_a - h_b)$，

相界 $3J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab} > h_a > J_{ab} + 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，
$6J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab} > h_b > 2J_{ab} + 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，$J_{ab} - 4J'_{ab} > 0$，
$-8J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab} > h_b - 2h_a > -24J_{aa} + 2J_{bb} + 16J'_{ab}$，
$h_b - h_a > 3J_{ab} - 12J_{aa} + 12J'_{ab} > 0$，$3h_b - 2h_a > 12J_{ab} - 24J_{aa} + 6J_{bb} - 32J'_{ab}$，
$4h_a - h_b > 6J_{ab} - 6J_{bb} + 24J'_{ab}$，$6h_a - h_b > 12J_{ab} - 24J_{aa} - 6J_{bb} + 32J'_{ab}$，

D_1 **相** 子格 1，2，3 自旋向下，其余子格自旋向上，3 度简并．

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(-6J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab} + 2h_a - 2h_b)$，

相界 $3J_{ab} - 4J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > 3J_{ab} - 12J_{aa} + 4J'_{ab}$，
$h_b > (-6J_{ab} + 6J_{bb} + 8J'_{ab},\ -2J_{ab} + 2J_{bb} - 8J'_{ab})$，
$h_b - 6h_a > -12J_{ab} - 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab}$，
$h_b - 2h_a > (-4J_{ab} + 8J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab},\ -8J_{ab} + 8J_{aa} + 6J_{bb},\ -2J_{ab} + 4J_{bb}$
$- 8J'_{ab},\ -4J_{ab} + 4J_{bb},\ -8J_{aa} + 2J_{bb})$，$h_b - h_a > (-J_{ab} + 4J_{aa} + 4J_{bb}$
$- 12J'_{ab},\ -5J_{ab} + 4J_{aa} + 4J_{bb} + 4J'_{ab})$，
$3h_b - 2h_a > (-4J_{ab} + 8J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab},\ -8J_{ab} + 8J_{aa} + 6J_{bb})$，$2h_b - h_a >$
$-3J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$，
$h_b - 4h_a > (-6J_{ab} + 6J_{bb} - 24J'_{ab},\ -10J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab})$，$2h_b - 3h_a > 3J_{ab}$
$+ 12J_{aa} - 4J'_{ab}$，

$3h_b - 4h_a > (-2J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab},\ -6J_{ab} + 6J_{bb} + 8J'_{ab})$，$h_b - 3h_a > -3J_{ab} - 12J_{aa} + 4J_{bb} - 4J'_{ab}$，

D_2 相　子格 1，2，5 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并。

基态能量　$E_0 = \frac{N}{8}(2J_{ab} - 8J_{aa} - 8J'_{ab} - h_b)$，

相界　$J_{ab} + 4J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > 3J_{ab} - 4J_{aa} - 4J'_{ab}$，$4J'_{ab} - J_{ab} > 0$，

$-2J_{ab} + 6J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 2J_{ab} + 2J_{bb} - 8J'_{ab}$，$3h_b - 4h_a > 14J_{ab} - 32J_{aa} - 6J_{bb} + 8J'_{ab}$，

$(-2J_{bb} + 8J_{aa},\ -4J_{ab} + 16J_{aa}) > 2h_a - h_b > 8J_{ab} - 8J_{aa} - 6J_{bb}$，

$-2J_{ab} + 32J_{aa} - 2J_{bb} + 8J'_{ab} > 4h_a - h_b > 14J_{ab} - 32J_{aa} - 6J_{bb} + 8J'_{ab}$，

$h_b - h_a > J_{ab} - 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，

D_3 相　子格 1，2，7 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并。

基态能量　$E_0 = \frac{N}{8}(-2J_{ab} - 8J_{aa} + 8J'_{ab} - h_b)$，

相界　$J_{ab} + 4J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > J_{ab} - 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，$J_{ab} - 4J'_{ab} > 0$，

$2J_{ab} + 6J_{bb} - 8J'_{ab} > h_b > -2J_{ab} + 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，$h_b - h_a > J_{ab} - 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，

$(-2J_{ab} + 16J_{aa} - 8J'_{ab},\ -2J_{bb} + 8J_{aa}) > 2h_a - h_b > 4J_{ab} - 6J_{bb} - 8J_{aa} + 16J'_{ab}$，

$3h_b - 2h_a > 4J_{ab} - 8J_{aa} - 6J_{bb} + 16J'_{ab}$，$4h_a - h_b > 10J_{ab} - 32J_{aa} - 6J_{bb} + 24J'_{ab}$，

$3h_b - 4h_a > 10J_{ab} - 32J_{aa} - 6J_{bb} + 24J'_{ab}$，

D_4 相　子格 5，6，7 自旋向下，其余子格自旋向上，3 度简并。

基态能量　$E_0 = \frac{N}{8}(-6J_{ab} + 24J_{aa} - 8J'_{ab} - 4h_a + h_b)$，

相界　$h_a > (-3J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab},\ -J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab})$，

$2h_a - h_b > (-8J_{ab} + 24J_{aa} + 2J_{bb},\ -4J_{ab} + 24J_{aa} + 2J_{bb} - 16J'_{ab},\ -4J_{ab} + 16J_{aa},\ -2J_{bb} + 8J_{aa},\ -2J_{ab} + 16J_{aa} - 8J'_{ab})$，$h_a - h_b > (-5J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab},\ -3J_{ab} + 12J_{aa} - 12J'_{ab})$，

$4h_a - h_b > (-10J_{ab} + 32J_{aa} + 2J_{bb} + 8J'_{ab},\ -2J_{ab} + 32J_{aa} + 2J_{bb} - 24J'_{ab},\ 0)$，

$6h_a - h_b > (-8J_{ab} + 2J_{bb} + 24J_{aa},\ -4J_{ab} + 24J_{aa} + 2J_{bb} - 16J'_{ab})$，

$3h_a - h_b > (-3J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab},\ -J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab})$，$2h_a - 3h_b > -12J_{ab} + 24J_{aa} - 6J_{bb} - 16J'_{ab}$，

$4h_a - 3h_b > -6J_{ab} + 32J_{aa} - 6J_{bb} - 8J'_{ab}$，

D_5 相　子格 1，5，6 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并。

基态能量　$E_0 = \frac{N}{8}(2J_{ab} - 2J_{bb} - 8J'_{ab} - 2h_a)$，

相界　$-J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > -J_{ab} + 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，$4J'_{ab} - J_{ab} > 0$，

$2J_{ab} + 2J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，$-8J_{ab} + 2J_{bb} + 24J_{aa} > 2h_a - h_b > 8J_{aa} - 2J_{bb}$，

$-7J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 4J'_{ab} > h_a - h_b > J_{ab} + 4J_{aa} - 4J_{bb} - 4J'_{ab}$，

D_6 相　子格 3，5，6 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并。

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(-2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab} - 2h_a)$,

相界 $J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab} > h_a > J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$, $J_{ab} - 4J'_{ab} > 0$,
$2J_{ab} + 2J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$, $4h_a - h_b > 2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$,
$-4J_{ab} + 24J_{aa} + 2J_{bb} - 16J'_{ab} > 2h_a - h_b > (2J_{ab} - 4J_{bb} + 8J'_{ab}, 8J_{aa} - 2J_{bb})$,
$-5J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 12J'_{ab} > h_a - h_b > (-J_{ab} + 4J_{aa} - 4J_{bb} + 4J'_{ab})$,

$\boldsymbol{E_1}$ **相** 子格 5，6，7，8 自旋向下，其余子格自旋向上.

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(-12J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab} - 4h_a + 2h_b)$,

相界 $h_a > -3J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab}$, $h_b < 6J_{ab} - 6J_{bb} + 8J'_{ab}$,

$$2h_a - h_b > \Big(-8J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab},\ -12J_{ab} + 24J_{aa} - 6J_{bb},\ -4J_{ab} + 16J_{aa} + 4J_{bb} - 16J'_{ab},\ -8J_{ab} + 16J_{aa} + 4J_{bb},\ -4J_{ab} + 8J_{aa} + 2J_{bb},\ -\frac{8}{3}J_{ab} + 8J_{aa} + 2J_{bb} - \frac{16}{3}J'_{ab},\ 0\Big),$$

$h_a - h_b > (-5J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 12J'_{ab}, -7J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 4J'_{ab}, -3J_{ab} + 8J_{aa} - 4J'_{ab})$,
$2h_a - 3h_b > (-12J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 32J'_{ab}, -16J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab})$,
$4h_a - h_b > (-10J_{ab} + 32J_{aa} + 6J_{bb} - 24J'_{ab}, -14J_{ab} + 32J_{aa} + 6J_{bb} - 8J'_{ab}, -6J_{ab} + 4J_{bb} - 8J'_{ab})$,
$4h_a - 3h_b > (-10J_{ab} + 32J_{aa} + 6J_{bb} - 24J'_{ab}, -14J_{ab} + 32J_{aa} + 6J_{bb} - 8J'_{ab})$,
$3h_a - h_b > (-5J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 12J'_{ab}, -7J_{ab} + 12J_{aa} + 4J_{bb} - 4J'_{ab})$,
$6h_a - h_b > (-12J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 32J'_{ab}, -16J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab})$,
$h_a - 2h_b > -9J_{ab} + 12J_{aa} - 12J'_{ab}$, $3h_a - 2h_b > -3J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab}$,

$\boldsymbol{E_2}$ **相** 子格 1，5，6，7 自旋向下，其余子格自旋向上，4 度简并.

基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(-16J'_{ab} - 2h_a + h_b)$,

相界 $-3J_{ab} + 12J_{aa} + 4J'_{ab} > h_a > -J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$, $4J'_{ab} - J_{ab} > 0$,
$-12J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} > 2h_a - h_b > (-4J_{ab} + 8J_{aa} + 2J_{bb}, 0, 4J_{ab} - 8J_{aa} - 2J_{bb})$,
$h_a - h_b > -J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$, $4h_a - h_b > -2J_{ab} + 2J_{bb} - 8J'_{ab}$, $2h_a - 3h_b > 8J_{aa} - 6J_{bb} - 16J'_{ab}$,
$4h_a - 3h_b > 6J_{ab} - 6J_{bb} - 8J'_{ab}$,

$\boldsymbol{E_3}$ **相** 子格 1，6，7，8 自旋向下，其余子格自旋向上，12 度简并.

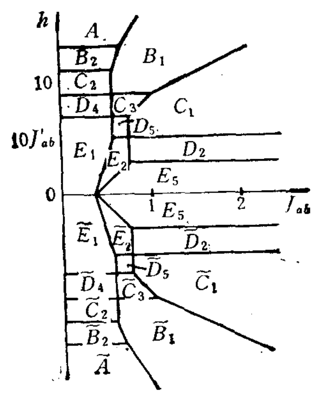
基态能量 $E_0 = \frac{N}{8}(-4J_{ab} - 2h_a + h_b)$,

相界 $-J_{ab} + 12J_{aa} - 4J'_{ab} > h_a > -J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$, $J_{ab} - 4J'_{ab} > 0$,
$2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab} > h_b > 2J_{ab} - 6J_{bb} + 8J'_{ab}$, $h_a - h_b > -J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab}$,
$-8J_{ab} + 24J_{aa} + 6J_{bb} - 16J'_{ab} > 2h_a - h_b > 8J_{aa} + 2J_{bb} - 16J'_{ab}$, $2h_a - 3h_b > -4J_{ab} + 8J_{aa} - 6J_{bb}$,

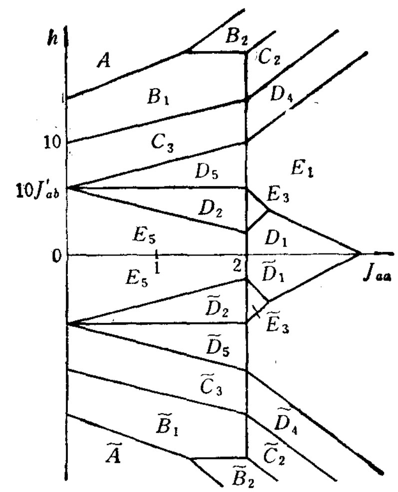
$\boldsymbol{E_4}$ **相** 子格 1，2，7，8 自旋向下，其余子格自旋向上，6 度简并.

基态能量　$E_0 = \frac{N}{8}(-4J_{ab} - 8J_{aa} - 2J_{bb} + 16J'_{ab})$，

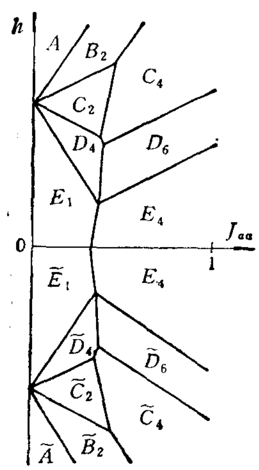
相界　$J_{ab} + 4J_{aa} - 4J'_{ab} > h_a > -J_{ab} - 4J_{aa} + 4J'_{ab}$，$J_{ab} - 4J'_{ab} > 0$，
$2J_{ab} + 2J_{bb} - 8J'_{ab} > h_b > -2J_{ab} - 2J_{bb} + 8J'_{ab}$，$-J_{ab} + 4J_{aa} + 4J_{bb} - 12J'_{ab} > h_a - h_b > J_{ab} - 4J_{aa} - 4J_{bb} + 12J'_{ab}$，
$(8J_{aa} + 2J_{bb} - 16J'_{ab},\ -4J_{ab} + 16J_{aa} + 4J_{bb} - 16J'_{ab}) > 2h_a - h_b > (-8J_{aa} - 2J_{bb} + 16J'_{ab},\ 4J_{ab} - 16J_{aa} - 4J_{bb} + 16J'_{ab})$



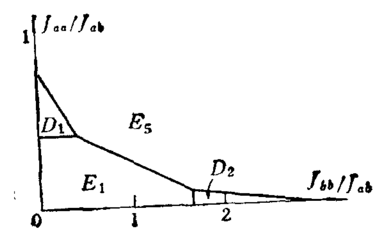
(a) 取 $h_a = h_b = h$，$J_{aa} = J_{bb} = 2J'_{ab}$ = 常数



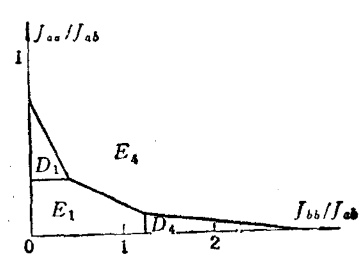
(b) $h_a = h_b = h$，$J_{ab} = 2J_{bb} = 2J'_{ab}$ = 常数



(c) $h_b = \frac{3}{2}h_a = \frac{3}{2}h$，$J_{bb} = 3J_{aa}$，$J_{ab} = 5J'_{ab}$ ($J_{ab} > 4J'_{ab}$)



(d) 取 $h_a = h_b = 0$，$J'_{ab}/J_{ab} = \frac{1}{6}$，($J_{ab} > 4J'_{ab}$)



(e) 取 $h_a = h_b = 0$，$J'_{ab}/J_{ab} = \frac{1}{2}$ ($J_{ab} < 4J'_{ab}$)

图 2

$-2J_{ab}+32J_{ab}+2J_{bb}-24J'_{ab}>4h_a-h_b>2J_{ab}-32J_{aa}-2J_{bb}+24J'_{ab}$,

E_5 相 子格 1, 2, 5, 6 自旋向下，其余子格自旋向上，6 度简并.

基态能量 $E_5=\frac{N}{8}(4J_{ab}-8J_{aa}-2J_{bb}-16J'_{ab})$,

相界 $-J_{ab}+4J_{aa}+4J'_{ab}>h_a>J_{ab}-4J_{aa}-4J'_{ab}$, $4J'_{ab}-J_{ab}>0$,

$-2J_{ab}+2J_{bb}+8J'_{ab}>h_b>2J_{ab}-2J_{bb}-8J'_{ab}$, $h_b-4h_a>10J_{ab}-32J_{aa}-2J_{bb}-8J'_{ab}$, $-4J_{ab}+8J_{aa}+2J_{aa}>2h_a-h_b>4J_{ab}-8J_{aa}-2J_{bb}$, $-5J_{ab}+4J_{aa}+4J_{bb}+4J'_{ab}>h_a-h_b>5J_{ab}-4J_{aa}-4J_{bb}-4J'_{ab}$,

E_6 相 子格 1, 2, 5, 7 自旋向下，其余子格自旋向上，24 度简并. 由于在相边界中同时出现 $4J_{ab}-16J'_{ab}>0$, $16J'_{ab}-4J_{ab}>0$. 故 E_6 相不存在. 上述的各种相均有其对称相（E_5, E_4 相的对称态为其本身的一个简并态），其基态能及相界可在上述各种相中以 $-h_a$, $-h_b$ 取代 h_a, h_b 而得到. 由于本文中晶格上的自旋不等价，加之考虑了第三阶近邻相互作用的贡献，使相关系比较复杂，其相图是高维数的. 为了考查其相关系，我们给出其相图的几个截面图（见图 2 (a) 至 (e)）. 从其中的 (d), (e) 可见这种晶格具有两个反铁磁态 E_5, E_4 和四种亚铁磁态 E_1, D_1, D_2, D_3. 另外，我们还看到给定不同的参数关系（选择不同的截面截多维相图）可得到截然不同的图形. 这和晶格中所有的格点都等价的情况不同[1].

本工作得到复旦大学陶瑞宝教授的支持和帮助，谨致谢意.

[1] 王养璞，物理学报，**32**(1983)，875.
[2] S. L. Schofield and R. G. Bowers, *J. Phys. A*, **13**(1980), 3697.
[3] 唐坤发、胡嘉桢，物理学报 **35**(1986)，1048.
[4] 钟健、杨瑞青、熊诗杰，低温物理学报，**9**(1987)1; 17.

THE GROUND STATE OF MIXED SPIN ($S=1,1/2$) SYSTEM OF THE LATTICE WITH THIRD NEAREST NEIGHBORS ANTIFERROMAGNETIC INTERACTION

WANG XUAN-ZHANG
(*Department of Physics, Harbin Normal University*)

ABSTRACT

The transformation method in reference [1] is extended to treat the lattice composed of different spin atoms ($S_a=1$, $S_b=1/2$), the ground state's spin structure, energy and phase boundary of the simply cubic lattice with third nearest neighbors, next nearest neighbors and nearest neighbors antiferromagnetic interaction have been calculated in an arbitrary magnetic field. We conclude that the lattice possesses two antiferromagnetic spin structures and four subferromagnetic spin structures from the phase diagrams.