

自旋为1/2的双层平方晶格阻挫模型的基态相变

卿煜林 彭小莉 文林 胡爱元

Ground state phase transition of spin-1/2 frustration model on stacked square lattice

Qing Yu-Lin Peng Xiao-Li Wen Lin Hu Ai-Yuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 037501 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211584

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211584>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

双二次交换作用和各向异性对反铁磁体相变温度的影响

Effect of biquadratic exchange and anisotropy on the critical temperature of antiferromagnet

物理学报. 2020, 69(10): 107501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200077>

高通量制备的 $\text{Sm}_x\text{Pr}_{1-x}\text{FeO}_3$ 晶体中反铁磁自旋模式和晶体场跃迁的太赫兹光谱

Terahertz spectroscopic characterization of spin mode and crystal-field transition in high-throughput grown crystals

物理学报. 2020, 69(20): 209501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200732>

Verwey相变处 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 的结构、磁性和电输运特性

Structure, magnetic and transport properties of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  near verwey transition

物理学报. 2020, 69(4): 040505 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191763>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

二维双金属铁磁半导体 $\text{CrMoI}_6$ 的电子结构与稳定性

Electronic structure and stability of two-dimensional bimetallic ferromagnetic semiconductor  $\text{CrMoI}_6$

物理学报. 2021, 70(20): 207301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210949>

稀土正铁氧体中THz自旋波的相干调控与强耦合研究进展

Research progress of coherent control of terahertz spin waves and strong coupling in rare-earth orthoferrites

物理学报. 2019, 68(16): 167501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190706>

## 自旋为 1/2 的双层平方晶格阻挫模型的基态相变\*

卿煜林 彭小莉 文林 胡爱元†

(重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 401331)

(2021 年 8 月 27 日收到; 2021 年 10 月 2 日收到修改稿)

基于线性自旋波理论, 研究了二维各向异性双层平方晶格阻挫模型的基态性质. 探讨了各向异性和自旋间交换作用对基态相图及系统可能发生相变的影响. 结果显示: 对于各向同性, 当层间耦合相互作用  $J_c \geq 0.21$  或  $J_c \leq -0.175$  时, Néel 态 (NS) 和 Collinear 态 (CS) 能共存; 对于各向异性, NS 和 CS 也可以共存. 对弱的各向异性, NS 更稳定; 对于强的各向异性, 系统将发生由 NS 向 CS 转换的一阶相变.

**关键词:** 反铁磁, 各向异性, 磁序的一般理论和模型, 交换和超交换相互作用

**PACS:** 75.50.Ee, 75.30.Gw, 75.10.-b, 75.30.Et

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211584

## 1 引言

由于阻挫模型中最近邻和次近邻交换作用之间的相互竞争, 导致系统出现了一些新奇的相, 因此在过去 30 年里, 海森伯阻挫模型已被广泛的研究. 其中最著名的例子是自旋为 1/2 的二维平方晶格阻挫模型, 也称  $J_1$ - $J_2$  模型<sup>[1-13]</sup>, 其哈密顿量为

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i \cdot S_j, \quad (1)$$

其中  $J_1$  和  $J_2$  分别描述的是自旋间最近邻和次近邻交换作用参数.  $\langle i, j \rangle$  和  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  分别表示的是对最近邻和次近邻格点求和. 目前这个模型的基态性质已经被很好地理解: 当  $\alpha < \alpha_1 \sim 0.4$  ( $\alpha = J_2/J_1$ ) 时, 系统是 Néel 态 (NS), 即最近邻自旋取向反平行, 相应的波矢为  $\mathbf{Q}(\pi, \pi)$ ; 当  $\alpha > \alpha_2 \sim 0.6$  时, 系统是 Collinear 态 (CS), 即最近邻自旋取向沿  $x$  ( $y$ ) 轴取向平行 (反平行), 沿  $y$  ( $x$ ) 轴取向反平行 (平行), 其相应的波矢为  $\mathbf{Q}(0, \pi)$  和  $\mathbf{Q}(\pi, 0)$ , 系统是二重简并; 当  $\alpha_1 < \alpha < \alpha_2$  时, 系统对应的是一个顺磁相<sup>[1-13]</sup>.

该模型的重要性还体现在实验上制备出的化合物, 如  $\text{LiVO}(\text{Si}, \text{Ge})$ ,  $\text{VOMoO}_4$  和  $\text{BaCdVO}(\text{PO}_4)_2$ , 可以采用该模型来描述其磁性质<sup>[14-16]</sup>. 需要指出的是: 实际材料一般是层状结构, 完全忽略层间耦合的可能性极小. 因此, 理论研究一般需要考虑层间耦合相互作用才能更好地描述化合物的磁性质, 这在以往的研究中已经得到了证实<sup>[17-20]</sup>.

众所周知, 量子磁体的相变性质是依赖晶格维度的. 对于二维平方晶格的  $J_1$ - $J_2$  模型, 当引入层间耦合相互作用后, 其顺磁相会随着其耦合强度的增强而消失. 目前众多理论, 如: 团簇平均场近似<sup>[21]</sup>、旋转不变格林函数和耦合团簇方法<sup>[22]</sup>、有效场理论<sup>[23]</sup>、自旋波理论<sup>[20,24,25]</sup>、系列展开法<sup>[26]</sup>、分层平均平均场方法<sup>[27]</sup>、耦合团簇方法<sup>[28]</sup>等, 给出了层间耦合相互作用在 0.12—0.6 范围内取值时, 顺磁相消失. 同时, 这些研究发现: 当层间耦合参数值大于无序相消失所对应的值时, NS 与 CS 出现了重叠, 这意味着在重叠区域 NS 和 CS 皆是系统可能的态, 即 NS 和 CS 可以共存. 一个自然的问题是: 共存区域内哪个态更稳定呢? 目前还没有研究回答这个问题, 需要进一步的研究.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11875010, 12175027) 和重庆市自然科学基金 (批准号: cstc2021jcyj-msxmX0168, cstc2019jcyj-msxmX0217, cstc2019jcyj-msxmX0251) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: huaiyuan@cqu.edu.cn

基于上述问题, 本文采用自旋波理论, 以自旋为  $1/2$  的双层平方晶格阻挫模型为研究对象, 探究零温下不同态重叠时哪个态更稳定. 考虑到实际材料存在各向异性, 模型引入了交换各向异性. 同时注意到研究多考虑层间耦合为反铁磁交换作用<sup>[21–27]</sup>, 对其铁磁交换作用的研究相对匮乏<sup>[28]</sup>. 因此本文将全面探讨这两种层间耦合相互作用对系统相变性质的影响.

## 2 模型与方法

图 1 描述的是 NS 和 CS 型基态磁结构, 其中图 1(a) 和图 1(b) 对应层间耦合为反铁磁交换作用, 图 1(c) 和图 1(d) 对应的是层间耦合为铁磁交换作用. 实心 and 空心圆圈分别描述的是磁性离子自旋取向向上和向下. 从图 1 可以看出, 无论是 NS 型还是 CS 型, 自旋向上和自旋向下的磁性离子数目相等. 为了方便, 将晶格分成两个子晶格, 即自旋取向相同的为一子晶格, 分别采用阿拉伯数字 1 和 2 来标识这两个子晶格. 本文采用线性自旋波理论推导系统磁化强度和基态能的解析表达式. 由于推导 4 种磁结构的过程过于冗繁, 因此本文以图 1(a) 为例, 给出其具体推导, 其他 3 种磁结构的推导不再赘述. 图 1(a) 模型的哈密顿量为

$$\begin{aligned}
 H = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{\eta}{2} (S_{1i}^+ S_{2j}^- + S_{1i}^- S_{2j}^+) + S_{1i}^z S_{2j}^z \right] \\
 & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[ \frac{\eta}{2} (S_{1i}^+ S_{1j}^- + S_{1i}^- S_{1j}^+) + S_{1i}^z S_{1j}^z \right] \\
 & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[ \frac{\eta}{2} (S_{2i}^+ S_{2j}^- + S_{2i}^- S_{2j}^+) + S_{2i}^z S_{2j}^z \right] \\
 & + J_c \sum_{[i,j]} \left[ \frac{\eta}{2} (S_{1i}^+ S_{2j}^- + S_{1i}^- S_{2j}^+) + S_{1i}^z S_{2j}^z \right], \quad (2)
 \end{aligned}$$

式中  $[i, j]$  表示对层间最近邻格点求和.  $J_c$  为层间耦合交换作用参数.  $\eta$  是交换各向异性参数, 其取值范围为  $0 \leq \eta \leq 1$ . 当  $\eta = 0$  时, 模型退化为 Ising 模型. 显然,  $\eta$  值越小交换各向异性越强. 选  $z$  轴为量子化轴, 则子晶格磁化强度定义为自旋算符的统计平均, 即:  $m_1 = \langle S_1^z \rangle$ ,  $m_2 = \langle S_2^z \rangle$ . 无外场时, 它们之间存在如下关系:  $m = m_1 = -m_2$ .

根据自旋波理论的一般步骤<sup>[29]</sup>, 首先采用 Dyson-Maleev 变换<sup>[30]</sup>, 将哈密顿量 (2) 式映射成一个等价的玻色相互作用的哈密顿量, 即: 将哈密顿量

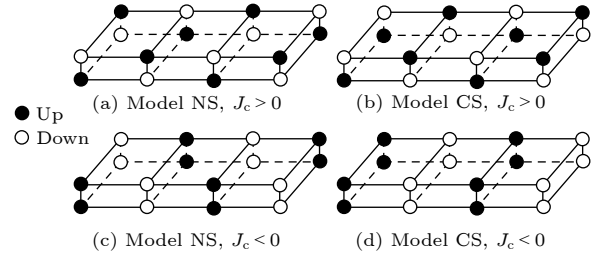


图 1 NS 和 CS 的磁构型 (a), (b) 层间耦合为反铁磁相互作用; (c), (d) 层间耦合为铁磁相互作用. 实心 and 空心圆圈分别描述的是自旋取向向上和向下

Fig. 1. Spin configurations of the NS and CS: (a), (b) Inter-layer coupling as antiferromagnetic interactions; (c), (d) inter-layer coupling as ferromagnetic interactions. The solid and empty circles represent the up-spins and down-spins, respectively.

中的自旋算符采用玻色湮灭算符和产生算符来表示, 具体形式如下:

$$\begin{aligned}
 S_{1i}^+ &= \sqrt{2S} \left( a_i - \frac{1}{2S} a_i^+ a_i a_i \right), \\
 S_{1i}^- &= \sqrt{2S} a_i^+ S_{1i}^z = S - a_i^+ a_i, \\
 S_{2j}^+ &= \sqrt{2S} \left( b_j^+ - \frac{1}{2S} b_j^+ b_j^+ b_j \right), \\
 S_{2j}^- &= \sqrt{2S} b_j S_{2j}^z = b_j^+ b_j - S, \quad (3)
 \end{aligned}$$

这里 Dyson 玻色算子  $a_i^+$  和  $b_j^+$  分别是  $a_i$  和  $b_j$  的厄米算子, 满足如下对易关系:

$$[a_i, a_{i'}^+] = \delta_{ii'}, \quad [b_j, b_{j'}^+] = \delta_{jj'}, \quad (4)$$

将方程 (3) 代入 (2) 式得

$$\begin{aligned}
 H = & (-J_1 z_1 + J_2 z_2 - J_c z_c) NS^2 \\
 & + J_1 \sum_{\langle ij \rangle} [\eta_1 S(a_i b_j + a_i^+ b_j^+) + S(a_i^+ a_i + b_j^+ b_j)] \\
 & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} [\eta_2 S(a_j^+ a_i + a_i^+ a_j) - S(a_i^+ a_i + a_j^+ a_j)] \\
 & + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} [\eta_2 S(b_i^+ b_j + b_j^+ b_i) - S(b_i^+ b_i + b_j^+ b_j)] \\
 & + J_c \sum_{[ij]} [\eta_3 S(a_i b_j + a_i^+ b_j^+) + S(a_i^+ a_i + b_j^+ b_j)], \quad (5)
 \end{aligned}$$

其中  $z_1$ ,  $z_2$  和  $z_c$  分别为最近邻、次近邻和层间最近邻格点配位数. 对于线性自旋波理论, (5) 式忽略了算符的四次项. 然后对玻色算符进行空间傅里叶变换, 即将坐标空间的哈密顿量转换到动量空间. 傅里叶变换形式如下:

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{-ik \cdot R_i} a_k, \quad b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik \cdot R_j} b_k, \quad (6)$$

式中,  $N$  是晶格格点数. 对波矢  $\mathbf{k}$  求和遍及第一布里渊区. 将 (6) 式代入 (5) 式, 得到了一个非对角的哈密顿量. 接下来采用博戈留波夫变换对动量空间的哈密顿量进行对角化, 即:

$$\begin{aligned} a_k &= u_k \alpha_k + v_k \beta_k^+, & a_k^+ &= u_k \alpha_k^+ + v_k \beta_k, \\ b_k &= u_k \beta_k + v_k \alpha_k^+, & b_k^+ &= u_k \beta_k^+ + v_k \alpha_k, \end{aligned} \quad (7)$$

这里  $\alpha_k$  和  $\beta_k$  是玻色算符. 对角化后的哈密顿量可以表示为

$$H = E_0 + \sum_k \omega_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k), \quad (8)$$

其中,

$$\begin{aligned} E_0 &= (-J_1 z_1 + J_2 z_2 - J_c z_c) N S^2 - \sum_k A_k + \sum_k \omega_k, \\ \omega_k &= \sqrt{A_k^2 - B_k^2}, \\ A_k &= S[J_1 z_1 - J_2 z_2(1 - \eta \gamma_{k2}) + J_c z_c], \\ B_k &= S(2J_1 \eta \gamma_{kx} + 2J_1 \eta \gamma_{ky} + J_c z_c \eta \gamma_{kc}), \\ \gamma_{kx} &= \cos k_x, \quad \gamma_{ky} = \cos k_y, \\ \gamma_{k2} &= \cos k_x \cos k_y, \quad \gamma_{kz} = \cos k_z, \end{aligned} \quad (9)$$

这里  $E_0$  是系统基态能.  $\gamma_{kx}$ ,  $\gamma_{ky}$ ,  $\gamma_{k2}$  和  $\gamma_{kz}$  是晶格的结构因子.

系统子晶格磁化强度定义为:  $m = \frac{2}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = S - \frac{2}{N} \sum_i \langle a_i^+ a_i \rangle$ . 首先采用 (6) 式, 将其由坐标空间变换到动量空间, 然后使用 (7) 式对其进行对角化. 应用玻色统计关系:  $\langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle = \langle \beta_k^+ \beta_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \omega_k} - 1}$ , 得到零温时子晶格磁化强度的表达式为

$$m = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{2}{N} \sum_k \left( \frac{A_k}{\omega_k} - 1 \right). \quad (10)$$

### 3 结果与讨论

首先讨论各向同性的情况, 即:  $\eta = 1$ . 图 2 显示了各向同性时, 不同  $J_c$  值下磁化强度  $m$  与  $J_2$  之间的变化关系, 其中图 2(a) 和图 2(b) 分别对应  $J_c \geq 0$  和  $J_c \leq 0$ . 对于确定的  $J_2$ ,  $m$  随着  $|J_c|$  的增大而增大. 这是因为, 当  $|J_c|$  从 0 开始增大时, 不仅增多了最近邻键的数目, 而且也增大了其强度, 使得系统更加有序. 对于确定的  $|J_c|$ , NS 的  $m$  随着  $J_2$  的增大而减小, 而 CS 的  $m$  随着  $J_2$  的增大而增大. 这是因为, 当  $J_2 = 0$  时, 哈密顿量描述的是一个普通

的反铁磁体, 即 NS. 当  $J_2$  从 0 开始增大时, 系统引入了阻挫,  $J_1$  和  $J_2$  之间出现了相互竞争, 且它们之间的相互竞争强度随着  $J_2$  的增大而变得越加激烈, 这使得系统更加无序. 对于  $J_c = 0$ , 竞争在  $J_2 = 0.378$  时 (由于已经取  $J_1 = 1$ , 此时  $J_2$  的值实际上是  $0.378 J_1$ ) 达到最大, 于是系统将从有序态向顺磁相转变. 当  $J_c \geq 0.21$  或  $J_c \leq -0.175$  时, 此时竞争皆在  $J_2 = 0.5$  达到最大. 在这种情况下, 当  $|J_c|$  进一步增大时,  $J_1$  和  $J_2$  之间的相互竞争开始减弱, 导致系统更有序, 此时系统对应的是 CS. 对比  $J_c > 0$  和  $J_c < 0$  的结果 (见图 2(a) 和图 2(b)) 发现: 在  $J_c$  相等的条件下, 后者的磁化强度要大于前者. 这主要是由于反铁磁交换作用的量子扰动大于铁磁交换作用, 导致前者更容易无序.

图 2(c) 和图 2(d) 对比了不同方法得到的  $m$  与  $J_2$  的关系. 由图 2(c) 可知, 当  $J_c = 0$  时, SE I, SE II 和 CCM 的结果彼此符合较好, 表明这 3 种方法得到的结果是可靠的. 当  $J_2$  值较小时, 这 5 种方法得到的结果一致. 尽管对于大  $J_2$  值, 本文结果与其他 4 种方法存在较大差异, 但在一些参数值下, 本文结果与 SE I, SE II, CCM 仍然一致. 对比 LSW 与 SOSW 的结果表明高阶关联校正是显著的. 分析认为, SOSW 考虑了自旋波之间的相互作用, 因此对仅考虑非相互作用自旋波的 LSW 带来了一些修正. 当  $J_c = 1$  时, 本文与 SE II 结果一致, 见图 2(d).

为更清楚理解参数  $J_2$  与  $J_c$  对系统相变的影响, 图 3 显示了模型在  $J_2$  与  $J_c$  参数空间中的相图. 从图 3 可以看出, 相图被分成了 3 个区域, 即 NS, CS 和顺磁相. 由于层间耦合相互作用抑制了系统的顺磁相, 导致顺磁相区域随着  $|J_c|$  增大而减小, 并在  $J_c^* = 0.21$  或  $-0.175$  时完全消失, 此时 NS 和 CS 的相变点在  $(J_c^*, J_2 = 0.5)$  处汇合. 对比其他理论结果, 本文  $J_c^* = 0.21$  的结果与二阶自旋波理论 ( $J_c^* = 0.3$ )<sup>[25]</sup>、耦合团簇方法 ( $J_c^* = 0.2 - 0.3$ )<sup>[22]</sup>、分层平均平均场方法 ( $J_c^* = 0.28 - 0.3$ )<sup>[24]</sup> 和系列展开方法 ( $J_c^* = 0.54 \pm 0.03, J_2 = 0.16 \pm 0.03$ )<sup>[26]</sup> 的结果一致. 尽管如此, 与自洽自旋波方法 ( $J_c^*/J_2 \approx 0.25$ )<sup>[20]</sup>、团簇平均场理论 ( $J_c^* = 0.12$ )<sup>[21]</sup> 和有效场方法 ( $J_c^* = 0.67$ )<sup>[23]</sup> 存在较大的差异. 对于本文  $J_c^* = -0.175$  的结果则偏离了耦合团簇方法 ( $J_c^* = -0.45, J_2 = 0.547$ )<sup>[28]</sup> 的结果. 当  $|J_c| \geq |J_c^*|$  时, NS 和 CS 在  $J_2 = 0.5$  处重叠, 这意味着 NS 和 CS 皆是系统可能的态, 它表明 NS 和 CS 在这种情况下可以共存.

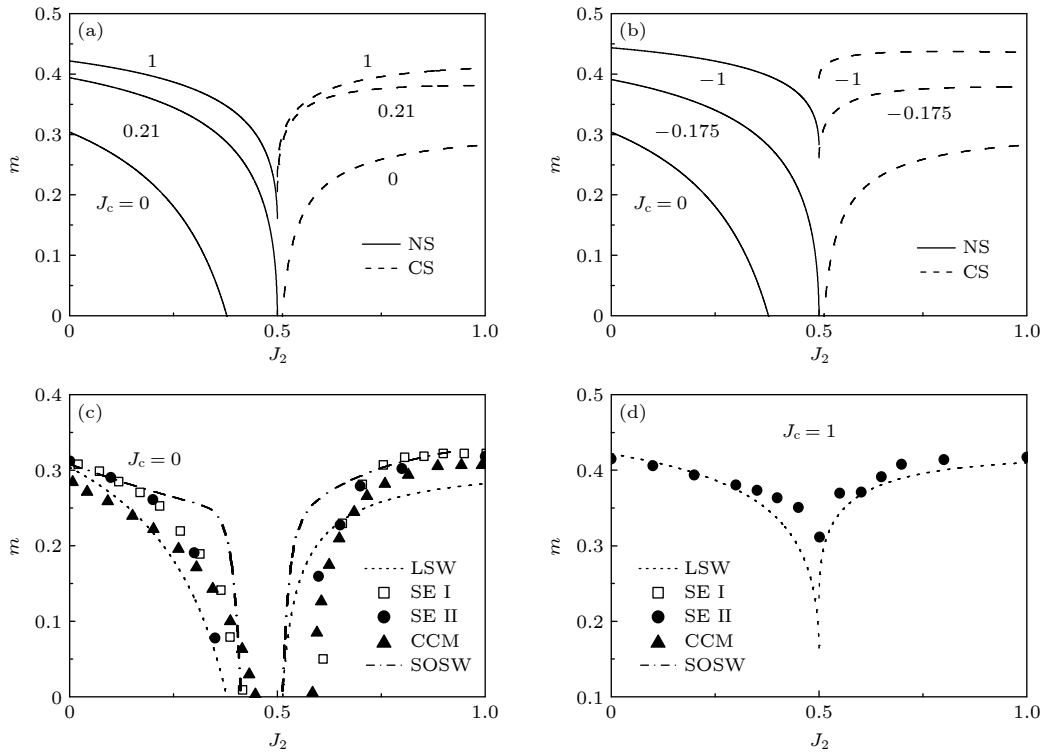


图 2 当  $\eta = 1$  时, 不同  $J_c$  下的子晶格磁化强度  $m$  与  $J_2$  之间的关系 (a)  $J_c = 0, 0.21, 1$ ; (b)  $J_c = 0, -0.175, -1$ ; (c)  $J_c = 0$ ; (d)  $J_c = 1$ . 图 (c) 和 (d) 中, 短划线、空心方格、实心圆、实心三角形和破折号分别描述的是线性自旋波理论 (本文的结果, LSW)、系列展开法到 9 阶 (SE I)<sup>[31]</sup>、系列展开法到 12 阶 (SE II)<sup>[26]</sup>、耦合团簇方法 (CCM)<sup>[31]</sup> 和二阶自旋波理论 (SOSW)<sup>[32]</sup> 的结果

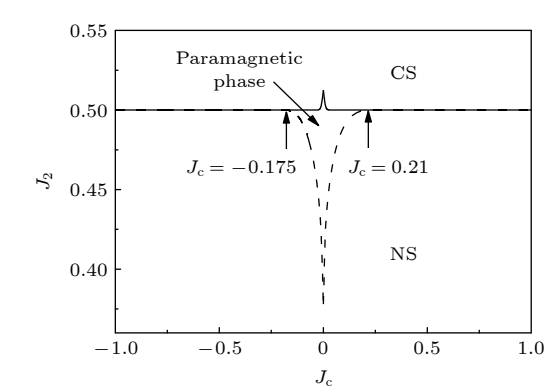


图 3 当  $\eta = 1$  时, 系统在参数  $J_2$  和  $J_c$  空间的基态相图  
Fig. 3. Ground state phase diagram in the  $J_2$ - $J_c$  plan for  $\eta = 1$ .

接下来讨论各向异性的情况, 即:  $\eta \neq 1$ . 图 4 显示了不同  $\eta, J_c$  值下磁化强度  $m$  与  $J_2$  之间关系. 从图 4 可以看出, 当  $J_c = 0$  时, 系统顺磁相区域随着各向异性的增强而变小, 当  $\eta = \eta_1 = 0.956$  时两个态在  $J_2 = 0.488$  处重叠, 见图 4(a). 这是因为各

向异性抑制了系统的扰动, 导致系统更有序. 最近蒙特卡罗模拟的结果显示: 在 Ising 极限下, 即:  $J_c = 0, \eta = 0$ , 系统在  $J_2/J_1 = 0.5$  是简并的, 但此时系统并没有出现无序相<sup>[33]</sup>. 这意味着, 当  $\eta < \eta_1$  时, 无论  $J_c$  取何值, 系统将不会出现顺磁相. 如果  $\eta > \eta_1$ , 要想使顺磁相消失,  $J_c$  必须取有限值, 见图 4(b) 和图 4(c). 图 4(a)–(c) 结果表明: 存在一组  $(\eta, J_c)$  值对应着系统有序与无序的分界线. 图 4(d) 显示了当  $J_c = 0.3$  时, 不同  $\eta$  值下  $m$  与  $J_2$  之间的关系. 它呈现出 3 个特征: 1) 两个态的磁化强度随着各向异性 ( $\eta$  越小, 各向异性越强) 的增强而变大, 其原因已在图 4(a) 进行了说明; 2) 当  $\eta = 0$  时, 两个态的磁化曲线完全重合, 且磁化强度是饱和的. 这是因为在这种情况下, 两个态退化成一个普通的 Ising 模型, 系统没有横向关联. 因此, 在零温, 系统磁化强度趋于饱和; 3) 当  $\eta < 1$  时, 两个态的磁化强度曲线开始出现重叠. 当各向异性增强到一定程度时, 其曲线交叉, 且交叉区域随着  $\eta$  值的减小

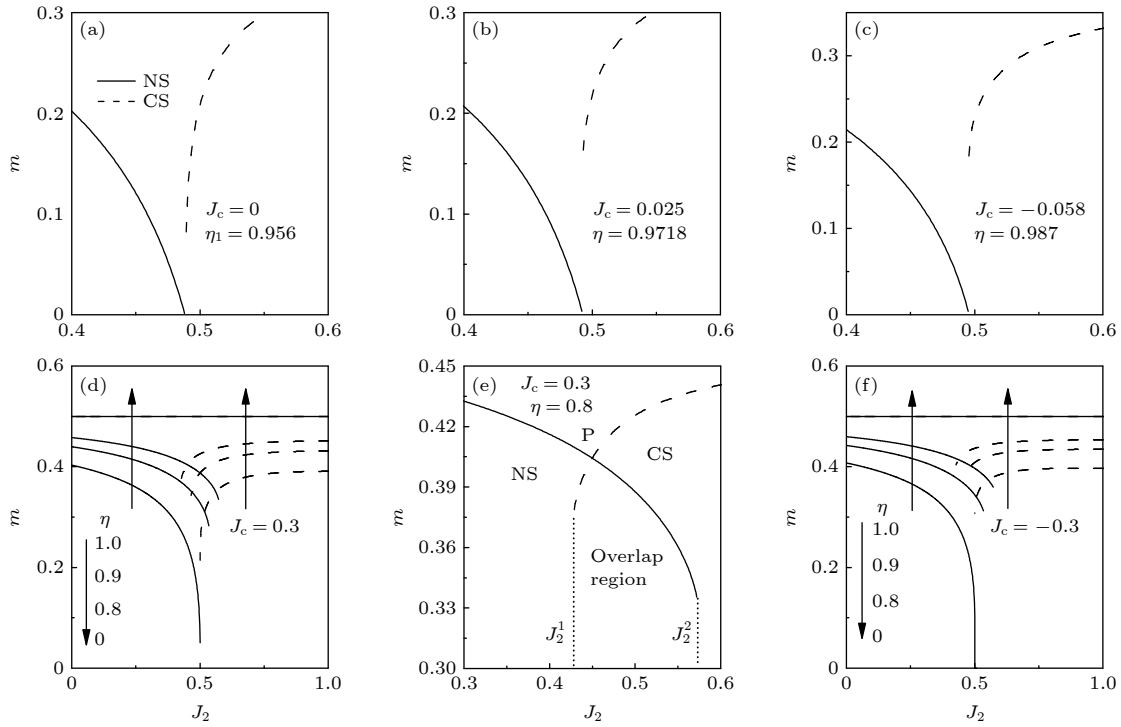


图 4 不同参数时的磁化强度  $m$  与  $J_2$  的关系 (a)  $J_c = 0, \eta = 0.956$ ; (b)  $J_c = 0.025, \eta = 0.9718$ ; (c)  $J_c = -0.058, \eta = 0.987$ ; (d)  $J_c = 0.3, \eta = 0.8$ ; (e)  $J_c = 0.3, \eta = 0.8$ ; (f)  $J_c = -0.3, \eta = 0, 0.8, 0.9, 1$

Fig. 4. Sublattice magnetization  $m$  as a function of  $J_2$  for different parameter values: (a)  $J_c = 0, \eta = 0.956$ ; (b)  $J_c = 0.025, \eta = 0.9718$ ; (c)  $J_c = -0.058, \eta = 0.987$ ; (d)  $J_c = 0.3, \eta = 0.8$ ; (e)  $J_c = 0.3, \eta = 0.8$ ; (f)  $J_c = -0.3, \eta = 0, 0.8, 0.9, 1$ .

而变大. 这是因为  $\eta$  的减小, 系统各向异性的增强, 它抑制了自旋沿  $XY$  方向的阻挫, 系统有序度增强 [34]. 因此, 当  $\eta$  减小时, 两个态的磁化强度变大, 其曲线的交点也随之提升, 其相应曲线交叉区域变大. 当各向异性变弱时, 曲线交叉区域消失.

为了更清楚地显示出两个态的磁化曲线交叉, 图 4(e) 显示了当  $\eta = 0.8, J_c = 0.3$  时的放大图. 可以看出, 平面分成了 4 个区域, 即 NS、CS、顺磁相 P 和 NS 与 CS 的重叠区域. 它显示: 当  $J_2 \leq J_2^1$  时, 系统对应的是 NS; 当  $J_2 \geq J_2^2$  时, 系统对应的是 CS; 当  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$  时, NS 和 CS 皆是系统可能的态, 即在这情况下 NS 和 CS 可共存. 图 4(f) 显示的是  $J_c < 0$  的情况, 其结果与  $J_c > 0$  的情况完全类似.

为了更好地理解  $(\eta, J_2, J_c)$  这一组参数对两个态共存的影响, 图 5 在参数  $\eta$  和  $J_c$  空间内给出了两个态共存所对应的区域. 可以看出, 平面分成了两个区域, 一个是顺磁相区域, 另一个是 NS 和 CS 共存区域. 实线是系统有序-无序分界线. 这里需要指出的是: 当  $\eta = 1$  时, 两个态共存所对应的  $J_2$  值是 0.5, 如图 3 所示; 而当  $0 \leq \eta < 1$  时,  $J_2$  在  $[J_2^1, J_2^2]$  范围内取值时, 两个态共存, 如图 4(e) 所示.

图 3—图 5 显示了在一定条件下, 两个态可以共存. 一个自然的问题是: 在共存区域, 两个态中哪种状态更加稳定呢? 接下来将详细回答这个问题. 根据热力学理论, 在零温, 内能低的态更稳定.

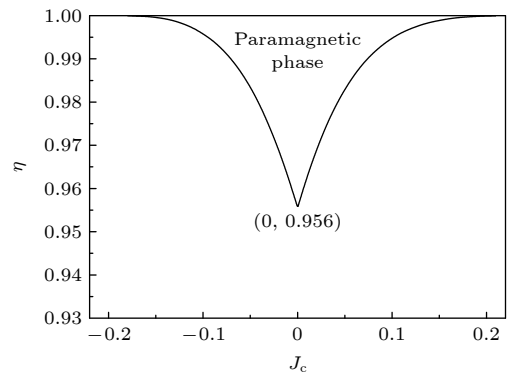


图 5 在参数  $\eta - J_c$  空间中两个态共存所对应的区域. 平面分成了两个区域: 顺磁相和两个态共存的区域. 在共存区域  $J_2$  的取值范围是  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$ . 相应的例子是图 4(e).  
Fig. 5. Area corresponding to the coexistence of the two states in the  $\eta - J_c$  space. The plane is divided into the two areas: paramagnetic phase and the coexistence of the two states. In the coexistence area of the two states, the value range of  $J_2$  is  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$ . The corresponding example is Fig. 4(e).

对于  $\eta = 1$ , 系统在  $|J_c| \geq |J_c^*|$  时, NS 和 CS 在  $J_2 = 0.5$  处重叠. 图 6(a) 给出了在这种情况下, 两个态的基态能  $E_0$  与  $J_c$  的关系. 从图 6 可以看出, NS 的基态能始终小于 CS, 即对于各向同性系统, NS 更稳定. 图 6(b) 显示了在  $J_c = 0$  和 1 时 LSW 与 SE II<sup>[26]</sup> 的基态能  $E_0$  与  $J_2$  的关系. 它显示了在这两种情况下, LSW 与 SE II 的结果完美一致.

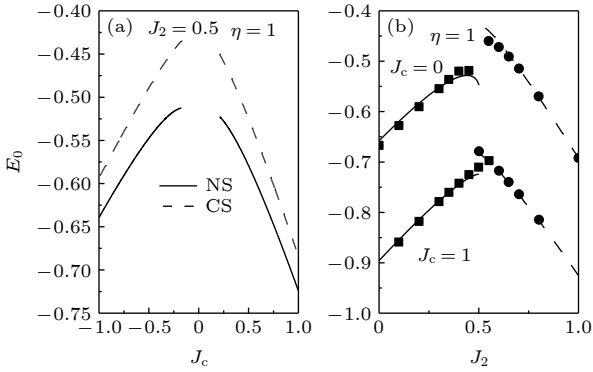


图 6 (a) 当  $J_2 = 0.5$  时, NS 和 CS 的基态能  $E_0$  与  $J_c$  的关系; (b) 当  $J_c = 0, 1$  时, NS 和 CS 的基态能  $E_0$  与  $J_2$  的关系. 实心方块和实心圆是系列展开法 (SE II)<sup>[26]</sup> 的结果

Fig. 6. (a) Ground state energy  $E_0$  of the Néel and collinear states as a function of  $J_c$  for  $J_2 = 0.5$ ; (b) ground state energy  $E_0$  of the Néel and collinear states as a function of  $J_2$  for  $J_c = 0, 1$ . The filled squares and filled circles are the results of the series expansion up to the 12<sup>th</sup> order (SE II)<sup>[26]</sup>.

对于  $\eta < 1$ , 两个态在  $[J_2^1, J_2^2]$  范围内共存. 图 7 显示了在这种情况下,  $J_c = 0.03$  时, 不同  $\eta$  值下系统基态能  $E_0$  与  $J_2$  的关系. 从图 7(a) 可以看出, 当各向异性很弱时, 即  $\eta = 0.97$ , NS 的基态能小于 CS, 即 NS 更稳定. 随着各向异性增强, NS 的基态能随着  $J_2$  的增大而变大, 而 CS 的基态能随着  $J_2$  的增大而变小. 当  $\eta = 0.7703$  时, 两个态基态能在  $J_2^2$  汇合, 即  $J_2^1 \leq J_2 < J_2^2$  的范围内,  $E_{AF1} < E_{AF2}$ , 表明 NS 更稳定, 见图 7(b). 在  $J_2 = J_2^2$  处, 系统可能是 NS, 也有可能是 CS, 或者两者共存. 当  $\eta > 0.7703$  时, 两个态的基态能曲线开始出现相交, 见图 7(c) 和图 7(d). 为了方便, 令交点所对应的  $J_2$  标识为  $J_2^*$ . 当  $J_2 < J_2^*$  时,  $E_{AF1} < E_{AF2}$ , 即 NS 更稳定; 当  $J_2 > J_2^*$  时,  $E_{AF1} > E_{AF2}$ , 即 CS 更稳定. 在  $J_2 = J_2^*$  时, 系统将发生由 NS 向 CS 转换. 由于此时两个态磁化强度曲线的交点所对应的  $J_2$  值为 0.436, 它不等于  $J_2^* = 0.52$ , 这意味着系统由 NS 向 CS 转换所对应的磁化强度变化不连续, 表明这两

个态之间的相转换为一阶相变. 对于强的层间耦合 (在这里没有呈现其结果), 其结果与弱的层间耦合完全类似.

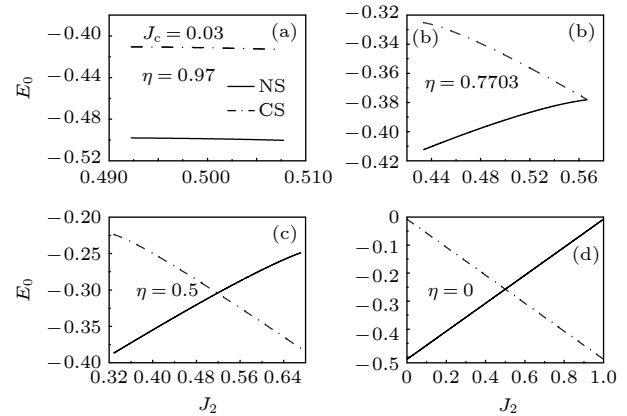


图 7 当  $J_c = 0.03$  时, 不同  $\eta$  值下两个态的基态能  $E_0$  与  $J_2$  的关系 (a)  $\eta = 0.97$ ; (b)  $\eta = 0.7703$ ; (c)  $\eta = 0.5$ ; (d)  $\eta = 0$

Fig. 7. Ground state energy  $E_0$  of the two states as a function of  $J_2$  for different  $\eta$  values when  $J_c = 0.03$ : (a)  $\eta = 0.97$ ; (b)  $\eta = 0.7703$ ; (c)  $\eta = 0.5$ ; (d)  $\eta = 0$ .

图 6 和图 7 只展示了在  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$  范围内, 几组  $(\eta, J_c)$  参数值对两个态稳定性的影响, 可能期待这一组参数对其稳定性更全面的理解. 图 8 显示了在  $\eta$ - $J_c$  参数空间中, 两个态的基态能在  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$  范围内的大小关系. 由图 8 可知, 平面分成了 3 个区域, 采用字母 A, B 和 C 进行标识. 在区域 A, 系统的状态是顺磁相, 与图 5 中的顺磁相对应. 在区域 B, NS 的基态能始终小于 CS, 即在这种情况下, 系统的状态是 NS, 见图 6 和图 7(a). 在区域 C, 两个态的基态能曲线相交, 见图 7(c) 和

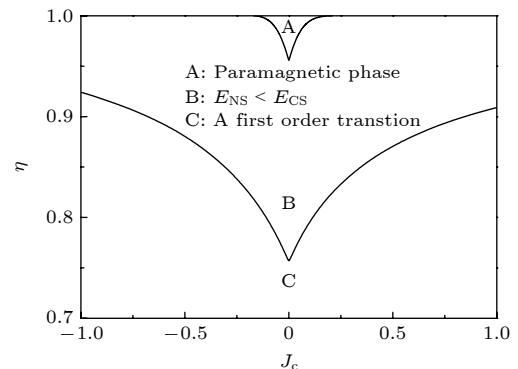


图 8 当  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$  时, 两个态的基态能在参数  $J_c$ - $\eta$  空间中的比较

Fig. 8. Comparison of the ground state energy of the two states in the  $J_c$ - $\eta$  space when  $J_2^1 \leq J_2 \leq J_2^2$ .

图 7(d). 当  $J_2 < J_2^*$  时,  $E_{AF1} < E_{AF2}$ , 此时系统的状态是 NS; 当  $J_2 > J_2^*$  时,  $E_{AF1} > E_{AF2}$ , 系统的状态是 CS. 在  $J_2 = J_2^*$  时, 即两个态基态能曲线交点, 系统将发生由 NS 向 CS 转换的一阶相变. 区域 B 与区域 C 的分界线描述的是两个态基态能曲线在  $J_2 = J_2^*$  汇合的情况, 见图 7(b). 在这种情况下, 系统的状态可能是 NS, 也有可能是 CS, 或者两者共存.

## 4 结 论

本文基于线性自旋波理论, 研究了二维双层立方晶格海森伯阻挫模型的基态性质. 探讨了各向异性与层间耦合对系统基态相变的影响. 结果显示: 对于  $\eta = 1$ , 当  $J_c \geq 0.21$  或  $J_c \leq -0.175$  时, NS 和 CS 在  $J_2 = 0.5$  处可以共存. 当  $\eta < 1$  时, 两个态在  $J_2^* \leq J_2 \leq J_2^*$  范围内也可以共存. 因此, 本文探讨了在这两种情况下, NS-CS 之间的稳定性以及它们之间可能发生的相变. 结果显示: 对于  $\eta = 1$ , NS 的基态能始终小于 CS, 即在这种情况下系统的状态是 NS. 对于  $\eta < 1$ , 在  $J_2^* \leq J_2 \leq J_2^*$  范围内, 参数  $\eta$  和  $J_c$  对两个态基态能的影响可以分成两个区域, 即图 8 中的区域 B 和区域 C. 在区域 B, NS 的基态能始终小于 CS, 即此时系统的状态是 NS. 在区域 C, 当  $J_2 < J_2^*$  时,  $E_{AF1} < E_{AF2}$ , 此时系统的状态是 NS; 当  $J_2 > J_2^*$  时,  $E_{AF1} > E_{AF2}$ , 系统的状态是 CS. 在  $J_2 = J_2^*$  时, 系统将发生由 NS 向 CS 转换的一阶相变.

## 参考文献

[1] Chubukov A V, Jolicoeur T 1991 *Phys. Rev. B* **44** 12050  
 [2] Bishop R F, Farnell D J J, Parkinson J B 1998 *Phys. Rev. B* **58** 6394  
 [3] Metavitsiadis A, Sellmann D, Eggert S 2014 *Phys. Rev. B* **89** 241104  
 [4] Haghshenas R, Sheng D N 2018 *Phys. Rev. B* **97** 174408

[5] Sadrzadeh M, Haghshenas R, Langari A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 144414  
 [6] Choo K, Neupert T, Carleo G 2019 *Phys. Rev. B* **100** 125124  
 [7] Doretto R L 2020 *Phys. Rev. B* **102** 014415  
 [8] Roscher D, Gneist N, Scherer M M, Trebst S, Diehl S 2019 *Phys. Rev. B* **100** 125130  
 [9] Bishop R F, Li P H Y, Darradi R, Schulenburg J, Richter J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 054412  
 [10] Wang L, Sandvik A W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 107202  
 [11] Haghshenas R, Lan W W, Gong S S, Sheng D N 2018 *Phys. Rev. B* **97** 184436  
 [12] Sadrzadeh M, Haghshenas R, Jahromi S S, Langari A 2016 *Phys. Rev. B* **94** 214419  
 [13] Ferrari F, Becca F 2020 *Phys. Rev. B* **102** 014417  
 [14] Carretta P, Papinutto N, Azzoni C B, Mozzati M C, Pavarini E, Gonthier S, Millet P 2002 *Phys. Rev. B* **66** 094420  
 [15] Carretta P, Melzi R, Papinutto N, Millet P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 047601  
 [16] Nath R, Tsirlin A A, Rosner H, Geibel C 2008 *Phys. Rev. B* **78** 064422  
 [17] Zhao J, Yao D X, Li S, Hong T, Chen Y, Chang S, Ratcliff W, Lynn J W, Mook H A, Chen G F, Luo J L, Wang N L, Carlson E W, Hu J, Dai P 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 167203  
 [18] Ewings R A, Perring T G, Bewley R I, Guidi T, Pitcher M J, Parker D R, Clarke S J, Boothroyd A T 2008 *Phys. Rev. B* **78** 220501  
 [19] Johnston D C, McQueeney R J, Lake B, Honecker A, Zhitomirsky M E, Nath R, Furukawa Y, Antropov V P, Singh Y 2011 *Phys. Rev. B* **84** 094445  
 [20] Holt M, Sushkov O P, Stanek D, Uhrig G S 2011 *Phys. Rev. B* **83** 144528  
 [21] Fan Z, Jie Q L 2014 *Phys. Rev. B* **89** 054418  
 [22] Schmalfuß D, Darradi R, Richter J, Schulenburg J, Ihle D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 157201  
 [23] Nunes W A, Ricardo de Sousa J, Roberto Viana J, Richter J 2010 *J. Phys.: Condens. Matter.* **22** 146004  
 [24] Majumdar K 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 046001  
 [25] Thalmeier P, Zhitomirsky M E, Schmidt B, Shannon N 2008 *Phys. Rev. B* **77** 104441  
 [26] Rojas O, Hamer C J, Oitmaa J 2011 *J. Phys.: Condens. Matter.* **23** 416001  
 [27] Isaev L, Ortiz G 2012 *Phys. Rev. B* **86** 100402  
 [28] Bishop R F, Li P H Y, Götze O, Richter J 2019 *Phys. Rev. B* **100** 024401  
 [29] Holstein T, Primakoff H 1940 *Phys. Rev.* **58** 1098  
 [30] Dyson F J 1956 *Phys. Rev.* **102** 1217  
 [31] Oitmaa J, Zheng W H 1996 *Phys. Rev. B* **54** 3022  
 [32] Majumdar K 2010 *Phys. Rev. B* **82** 144407  
 [33] Kalza A, Honecker A, Fuchs S, Pruschke T 2008 *Eur. Phys. J. B* **65** 533  
 [34] Jin S, Sen A, Sandvik A W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 045702

# Ground state phase transition of spin-1/2 frustration model on stacked square lattice\*

Qing Yu-Lin Peng Xiao-Li Wen Lin Hu Ai-Yuan<sup>†</sup>

(College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

(Received 27 August 2021; revised manuscript received 2 October 2021)

## Abstract

In this paper, we investigate the ground state phase transition of the spin-1/2 frustrated model on a stacked square lattice by the linear spin wave method. The effects of the anisotropy and the interplay of neighboring couplings on phase diagram and phase transformation between the Néel state and collinear state are explored. Our results show that both the Néel state and collinear state can exist due to the interplay of interlayer coupling  $J_c \geq 0.21$  or  $J_c \leq -0.175$  for an isotropic system. For an anisotropic system, both the Néel state and collinear state may also exist. In this case, for the weak anisotropy, the Néel state is more stable. For the strong anisotropy, the system will undergo a first-order phase transition from the Néel state to the collinear state.

**Keywords:** antiferromagnetic, magnetic anisotropy, general theory and models of magnetic ordering, exchange and superexchange interactions

**PACS:** 75.50.Ee, 75.30.Gw, 75.10.-b, 75.30.Et

**DOI:** [10.7498/aps.71.20211584](https://doi.org/10.7498/aps.71.20211584)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 11875010, 12175027) and the Chongqing Natural Science Foundation, China (Grant Nos. cstc2021jcyj-msxmX0168, cstc2019jcyj-msxmX0217, cstc2019jcyj-msxmX0251).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [huaiyuan@cqnu.edu.cn](mailto:huaiyuan@cqnu.edu.cn)