

自旋为 1/2 的 XY 模型亚铁磁棱型链的物性和有序 - 无序竞争*

成泰民^{1)2)†} 葛崇员¹⁾ 孙树生¹⁾ 贾维焯¹⁾ 李林³⁾ 朱林³⁾ 马琰铭²⁾

1) (沈阳化工大学数理系, 沈阳 110142)

2) (吉林大学超硬材料国家重点实验室, 长春 130012)

3) (东北大学物理系, 沈阳 110004)

(2012 年 1 月 19 日收到; 2012 年 3 月 11 日收到修改稿)

利用不变本征算符法, 计算低温下自旋为 1/2 的 XY 模型一维亚铁磁棱型链系统的元激发谱, 讨论在此系统中不同的特殊情形下的元激发能量, 从而给出体系的三个临界磁场强度的解析解 H_{C1} , H_{C2} , H_{peak} . 分析不同外磁场下体系的磁化强度随温度的变化规律, 发现三个临界磁场强度的解析解 H_{C1} , H_{C2} , H_{peak} 是正确的, 并从三个元激发对磁化强度的贡献进行了说明. 低温下磁化强度随外磁场的变化呈现 1/3 磁化平台. 体系的磁化率随温度或者外磁场的变化都出现了双峰现象. 这说明双峰源于二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能和二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能, 热无序能, 外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争.

关键词: 自旋为 1/2 的 XY 模型一维亚铁磁棱型链, 磁化强度, 磁化率, 不变本征算符法

PACS: 75.50.Gg, 68.65.-k, 75.60.-d, 33.15.Kr

1 引言

低维磁性系统存在许多奇异的特性, 因此这一领域研究引起了科学家们广泛的兴趣^[1-7]. 1997 年 Shiomi 等^[1] 从实验上合成出自旋为 1/2 交替的亚铁磁性复合物. 2005 年 Kikuchi 等^[2] 实验上发现 $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ 材料的磁化强度在低温下随外磁场的变化呈现 1/3 的磁化平台, 在低温区磁化率随温度变化出现双峰等特性, 并提出自旋 1/2 的阻挫棱型链模型. 有机分子磁性的特点是分子内部的自旋 - 自旋的相互作用具有多通道和多触点. 而且一般在晶态时, 一个自旋 1/2 有机分子内的相互作用强度在数量级上几乎相同. 密度矩阵重整化群 (DMRG) 技术^[8] 是十分有效的计算方法, 在低维强关联量子系统的计算中显示出极大的威

力. Gu 与 Su^[9] 利用 DMRG 技术研究了自旋 -1/2 的 Heisenberg 棱形链的基态的性质, 并利用量子转移矩阵重整化群 (TMRG) 技术研究了热力学性质和磁性质. Chen 等^[10] 通过解析和数值计算的方法, 研究了 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 的一维四面体链的反铁磁自旋交换模型, 并对不同条件下的体系的哈密顿量进行了 SU(N) 群对称性分析, 计算出对应体系的基态能量与解析的元激发能量.

长程相互作用对系统热力学性质的影响近年来也被人们广泛的关注^[11,12], 外场中具有长程相互作用自旋为 1/2 的 XY 模型亚铁磁棱型链的热力学性质也得到了相应的研究. 本文采用 Jordan-Wigner (J-W) 变换^[13] 分析方法对外场中 Z 方向具有均匀长程相互作用自旋为 1/2 的 XY 模型亚铁磁棱型链进行了研究. 我们利用不变本征算符法^[14-16] (invariant eigen-operator method, 简称 IEO

* 国家自然科学基金 (批准号: 10647138)、中国博士后科学基金 (批准号: 200904501018) 和国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB606404) 资助的课题.

† E-mail: ctm701212@126.com

法)得到了体系的元激发能谱以及对体系的哈密顿量进行了对角化,并利用量子统计理论推导出体系配分函数,从而导出体系的热力学量及磁学量. IEO 法的关键是如何根据体系的哈密顿量,构造相应的 IEO 算符. 并通过 IEO 算符与体系哈密顿量之间对易关系相关的 IEO 方程,求出体系的两个相邻能级间的能隙. 但是 IEO 法不易直接给出磁有序系统的基态能量,并且利用 IEO 法不易处理含有玻色子算符的三次项或者更高次项的哈密顿量体系(如磁振子-声子耦合体系,声子-声子耦合体系,磁振子-磁振子耦合体系等),在这一点 IEO 法不如格林函数理论及量子场论的费曼图技术. IEO 法的精确性或近似的好坏取决于把体系哈密顿量二次量子化形式表示的过程中算符的高次项取舍程度,并且还得能够构造出与二次量子化的哈密顿量对应的 IEO 算符才能采用此方法进行计算. 目前,范洪义等发展了 IEO 法^[16],可以解决含有微扰项的哈密顿量.

因为体系的任意么正变换联系着同一个量子体系的不同表象之间的变换,所以蕴涵着该量子体系的严格一致的物理内容,这些么正变换对该量子体系的描述是完全等价的. 因此,在磁性物理及量子力学中普遍采用不同的么正变换处理系统哈密

顿量的对角化,求出元激发能量及基态能量. 但是这一方法的关键是做出适合体系对角化的不同的么正变换,利用么正变换处理体系哈密顿量的过程也比较烦琐^[17-19]. 封闭链的格林函数的运动方程法^[4,5,20-24](切断近似法)也能够处理体系元激发能量. 在本文我们将看到 IEO 法处理线性近似下的哈密顿量体系的元激发能量,比上述两种方法简捷. 对于自旋为 1/2 的 XY 模型一维亚铁磁链型链的哈密顿量而言, J-W 变换后体系哈密顿量退化为量子算符的线性化形式(即只含算符的二次项). 从而我们可以利用 IEO 法简捷地推导出体系的元激发能量及基态能量. 系统的元激发谱计算是研究系统的自由能、内能、比热、磁化强度、磁化率等的前提.

2 系统的哈密顿对角化及元激发谱和 IEO 方法

如图 1 所示,双自由基分子和单自由基分子交替排列构成的自旋为 1/2 的一维 XY 模型亚铁磁链型链. 其中 $S_{2,l}$ 和 $S_{3,l}$ 表示双自由基分子的量子自由基, $S_{1,l}$ 表示单自由基分子的量子自由基.

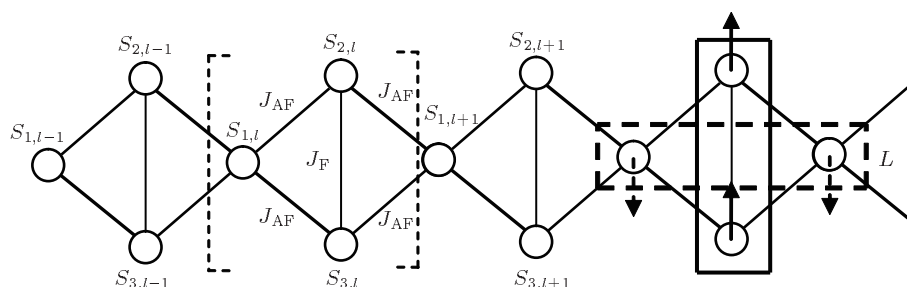


图 1 双自由基分子和单自由基分子交替排列构成的自旋为 1/2 的一维 XY 模型亚铁磁链型链系统模型

$J_F = -\eta J$ ($\eta, J > 0$) 表示双自由基分子内的铁磁相互作用, $J_{AF} = \mu J$ ($\mu, J > 0$) 表示双自由基分子与单自由基分子间的反铁磁相互作用, 并且假设这样的循环结构具有 N 个 ($l = 1, 2, \dots, N$). 上述相互作用利用 Heisenberg 相互作用理论模型描述, 那么系统的哈密顿量可用如下形式表示:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left\{ J \left[-\eta S_{2,l}^+ S_{3,l}^- + \mu (S_{1,l}^+ S_{2,l}^- \right.$$

$$\left. + S_{1,l}^+ S_{3,l}^- \right) + \frac{\mu}{2} (S_{2,l-1}^+ S_{1,l}^- + S_{2,l}^+ S_{1,l+1}^- + S_{3,l-1}^+ S_{1,l}^- + S_{3,l}^+ S_{1,l+1}^-) + \text{h.c.} \left. \right\} + 2g\mu_B H (S_{1,l}^z + S_{2,l}^z + S_{3,l}^z), \quad (1)$$

(1) 式中, $S_{i,l}$ 是自旋 1/2 的量子算符, $S_{2,l}$ 和 $S_{3,l}$ 由分子内的铁磁相互作用 $J_F < 0$ 连接, 其他作用都由表示分子之间的反铁磁相互作用 $J_{AF} > 0$

连接, μ_B 为玻尔磁子, g 为朗德因子, H 表示外磁场强度. 对于 (1) 式自旋升降算符进行 J-W 变换 [4,5,13] 如下

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{1,l}^+ = a_{1,l}^+ \exp \left[i\pi \sum_{r=1}^{l-1} (a_{1,r}^+ a_{1,r} + a_{2,r}^+ a_{2,r} + a_{3,r}^+ a_{3,r}) \right], \\ S_{2,l}^+ = a_{2,l}^+ \exp \left[i\pi \sum_{r=1}^l (a_{1,r}^+ a_{1,r}) + i\pi \sum_{r=1}^{l-1} (a_{2,r}^+ a_{2,r} + a_{3,r}^+ a_{3,r}) \right], \\ S_{3,l}^+ = a_{3,l}^+ \exp \left[i\pi \sum_{r=1}^l (a_{1,r}^+ a_{1,r} + a_{2,r}^+ a_{2,r}) + i\pi \sum_{r=1}^{l-1} (a_{3,r}^+ a_{3,r}) \right], \\ S_{m,l}^z = a_{m,l}^+ a_{m,l} - \frac{1}{2}, \quad (m = 1, 2, 3). \end{array} \right. \quad (2)$$

其中算符 $a_{i,r}^+$ 和 $a_{i,r}$ 是费米子算符, 它们满足反对易关系

$$\begin{aligned} [a_{i,r}, a_{j,r'}^+]_+ &= \delta_{i,j} \delta_{r,r'}, \\ [a_{i,r}, a_{j,r'}]_+ &= [a_{i,r}^+, a_{j,r'}^+]_+ = 0. \end{aligned}$$

对算符 $a_{m,l}$, $a_{m,l}^+$ 可以进行点阵傅里叶变换

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{m,l} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikl) a_{m,k}, \\ a_{m,l}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikl) a_{m,k}^+, \end{array} \right. \quad (m = 1, 2, 3), \quad (3)$$

(3) 式中的 $a_{m,k}$, $a_{m,k}^+$ 也满足反对易关系.

根据 (1)—(3) 式, 并利用 $N^{-1} \sum_{l=1}^N \exp[i(k' - k)l] = \delta_{k',k}$ 关系, 可得

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k - \frac{3g\mu_B H N}{2}, \quad (4)$$

其中

$$\begin{aligned} \hat{H}_k &= \frac{1}{2} \{ J[-\eta a_{2,k}^+ a_{3,k} + \mu(a_{1,k}^+ a_{2,k} + a_{1,k}^+ a_{3,k} \\ &\quad + \gamma_k a_{2,k}^+ a_{1,k} + \gamma_k a_{3,k}^+ a_{1,k})] + \text{h.c} \\ &\quad + 2h(a_{1,k}^+ a_{1,k} + a_{2,k}^+ a_{2,k} + a_{3,k}^+ a_{3,k}) \}, \quad (5) \end{aligned}$$

其中 $h = g\mu_B H$, $\gamma_k = \exp(ik)$.

根据 (4) 式, (5) 式及算符 $a_{m,k}$, $a_{m,k}^+$ 的反对易关系 ($[a_{i,k}, a_{j,k'}^+]_+ = \delta_{i,j} \delta_{k,k'}$, $[a_{i,k}, a_{j,k'}]_+ =$

$[a_{i,k}^+, a_{j,k'}^+]_+ = 0$) 可得

$$\left\{ \begin{array}{l} [a_{1,k}, \hat{H}]_- = [a_{1,k}, \hat{H}_k]_- = \frac{1}{2} \{ 2ha_{1,k} \\ \quad + \mu J(1 + \gamma_k^*)(a_{2,k} + a_{3,k}) \}, \\ [a_{2,k}, \hat{H}]_- = [a_{2,k}, \hat{H}_k]_- = \frac{1}{2} \{ \mu J(1 \\ \quad + \gamma_k) a_{1,k} + 2ha_{2,k} - \eta J a_{3,k} \}, \\ [a_{3,k}, \hat{H}]_- = [a_{3,k}, \hat{H}_k]_- = \frac{1}{2} \{ \mu J(1 \\ \quad + \gamma_k) a_{1,k} - \eta J a_{2,k} + 2ha_{3,k} \}. \end{array} \right. \quad (6)$$

相对于系统的哈密顿量 \hat{H} , 关于算符 $a_{i,k}$ ($i = 1, 2, 3$) 的 IEO^[14,15] 算符为 $\hat{O}_{e,\sigma}$, 并令

$$(\hat{O}_{e,1} \hat{O}_{e,2} \hat{O}_{e,3}) = (a_{1,k} a_{2,k} a_{3,k}) \mathbf{U}, \quad (7)$$

其中

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

(7) 式可以表示为

$$\begin{aligned} \hat{O}_{e,\sigma} &= \tau_{1,\sigma} a_{1,k} + \tau_{2,\sigma} a_{2,k} + \tau_{3,\sigma} a_{3,k} \\ &= (a_{1,k} a_{2,k} a_{3,k}) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \tau_{1,\sigma} \\ \tau_{2,\sigma} \\ \tau_{3,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (\sigma = 1, 2, 3), \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\hat{O}_{e,\sigma}, \hat{H})_- &= (\hat{O}_{e,\sigma}, \hat{H}_k)_- \\ &= \lambda_\sigma \hat{O}_{e,\sigma}, \quad (\sigma = 1, 2, 3) \quad (10) \end{aligned}$$

其中 $\tau_{1,\sigma}$, $\tau_{2,\sigma}$, $\tau_{3,\sigma}$ 是复数.

根据 (4)—(10) 式可得

$$\begin{aligned} (\hat{O}_{e,\sigma}, \hat{H})_- &= [a_{1,k} a_{2,k} a_{3,k}] \mathbf{A} \begin{pmatrix} \tau_{1,\sigma} \\ \tau_{2,\sigma} \\ \tau_{3,\sigma} \end{pmatrix} \\ &= (a_{1,k} a_{2,k} a_{3,k}) \lambda_\sigma \begin{pmatrix} \tau_{1,\sigma} \\ \tau_{2,\sigma} \\ \tau_{3,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (11) \end{aligned}$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} h & \mu J(1 + \gamma_k)/2 & \mu J(1 + \gamma_k)/2 \\ \mu J(1 + \gamma_k^*)/2 & h & -\eta J/2 \\ \mu J(1 + \gamma_k^*)/2 & -\eta J/2 & h \end{pmatrix}. \quad (12)$$

从而得

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} \tau_{1,\sigma} \\ \tau_{2,\sigma} \\ \tau_{3,\sigma} \end{pmatrix} = \lambda_\sigma \begin{pmatrix} \tau_{1,\sigma} \\ \tau_{2,\sigma} \\ \tau_{3,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

求解 (13) 式的久期方程, 可得自旋为 1/2 一维 XY 模型亚铁磁链型链系统的元激发能量如下:

$$\begin{cases} \lambda_1 = g\mu_B H + \eta J/2, \\ \lambda_2 = g\mu_B H + J[-\eta - \sqrt{\eta^2 + 16(1 + \cos k)\mu^2}]/4, \\ \lambda_3 = g\mu_B H + J[-\eta + \sqrt{\eta^2 + 16(1 + \cos k)\mu^2}]/4. \end{cases} \quad (14)$$

因为本文中利用 IEO 法处理磁有序系统时, 没有直接涉及某两个特定的不同的定态, 而是直接通过本征算符与其对应的 Heisenberg 方程计算的, 与体系的相邻能级的能量差的大小相对应, 这就是体系的能量量子化的量子. 因此, 体系的元激发能量应取

$$\hbar\omega_{\sigma,k} = \lambda_\sigma, \quad (\sigma = 1, 2, 3). \quad (15)$$

因为矩阵 \mathbf{A} 是厄米矩阵, 且 $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$, 所以对应的本征向量之间相互正交, 其本征向量如下:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \tau_{1,1} \\ \tau_{2,1} \\ \tau_{3,1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \tau_{1,2} \\ \tau_{2,2} \\ \tau_{3,2} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha_2/\sqrt{|\alpha_2|^2 + 2} \\ 1/\sqrt{|\alpha_2|^2 + 2} \\ 1/\sqrt{|\alpha_2|^2 + 2} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \tau_{1,3} \\ \tau_{2,3} \\ \tau_{3,3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha_3/\sqrt{|\alpha_3|^2 + 2} \\ 1/\sqrt{|\alpha_3|^2 + 2} \\ 1/\sqrt{|\alpha_3|^2 + 2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (16)$$

其中

$$\alpha_2 = \frac{2\lambda_2 - 2h + \eta J}{\mu J(1 + e^{-ik})}, \quad \alpha_3 = \frac{2\lambda_3 - 2h + \eta J}{\mu J(1 + e^{-ik})}.$$

(7) 式的逆变换, 并利用矩阵 \mathbf{U} 的么正性 ($\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+$) 可得

$$\begin{aligned} (a_{1,k} \ a_{2,k} \ a_{3,k}) &= (\hat{O}_{e,1} \ \hat{O}_{e,2} \ \hat{O}_{e,3})\mathbf{U}^{-1} \\ &= (\hat{O}_{e,1} \ \hat{O}_{e,2} \ \hat{O}_{e,3})\mathbf{U}^+, \end{aligned} \quad (17)$$

根据 (8) 式可知

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+ = \begin{pmatrix} \tau_{11}^* & \tau_{21}^* & \tau_{31}^* \\ \tau_{12}^* & \tau_{22}^* & \tau_{32}^* \\ \tau_{13}^* & \tau_{23}^* & \tau_{33}^* \end{pmatrix}. \quad (18)$$

(17) 式可以表示为

$$\begin{aligned} a_{i,k} &= \tau_{i,1}^* \hat{O}_{e,1} + \tau_{i,2}^* \hat{O}_{e,2} + \tau_{i,3}^* \hat{O}_{e,3} \\ &= (\hat{O}_{e,1} \ \hat{O}_{e,2} \ \hat{O}_{e,3}) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \tau_{i,1}^* \\ \tau_{i,2}^* \\ \tau_{i,3}^* \end{pmatrix}, \quad (i = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (19)$$

根据 (19) 式可得

$$\begin{aligned} a_{i,k}^+ &= \tau_{i,1} \hat{O}_{e,1}^+ + \tau_{i,2} \hat{O}_{e,2}^+ + \tau_{i,3} \hat{O}_{e,3}^+ \\ &= (\tau_{i,1} \ \tau_{i,2} \ \tau_{i,3}) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \hat{O}_{e,1}^+ \\ \hat{O}_{e,2}^+ \\ \hat{O}_{e,3}^+ \end{pmatrix}, \quad (i = 1, 2, 3), \end{aligned} \quad (20)$$

根据式 (9) 可得

$$\begin{aligned} \hat{O}_{e,\sigma}^+ &= \tau_{1,\sigma}^* a_{1,k}^+ + \tau_{2,\sigma}^* a_{2,k}^+ + \tau_{3,\sigma}^* a_{3,k}^+ \\ &= (\tau_{1,\sigma}^* \ \tau_{2,\sigma}^* \ \tau_{3,\sigma}^*) \\ &\quad \times \begin{pmatrix} a_{1,k}^+ \\ a_{2,k}^+ \\ a_{3,k}^+ \end{pmatrix}, \quad (\sigma = 1, 2, 3), \end{aligned} \quad (21)$$

根据 (9), (16), (21) 式可证 $[\hat{O}_{e,i}, \hat{O}_{e,j}^+]_+ = \delta_{i,j}$ 及 $[\hat{O}_{e,i}, \hat{O}_{e,j}]_+ = [\hat{O}_{e,i}^+, \hat{O}_{e,j}^+]_+ = 0$, 即系统的 IEO 算符 $\hat{O}_{e,i}$ 满足费米子算符的对易关系, 且满足 $(\hat{O}_{e,\sigma}^+ \hat{O}_{e,\sigma})^2 - \hat{O}_{e,\sigma}^+ \hat{O}_{e,\sigma} = 0$ (即 $\hat{n}_{e,\sigma}^2 - \hat{n}_{e,\sigma} = 0$). 因此 $\hat{n}_{e,\sigma}$ 的本征值为 $n_{e,\sigma} = 0$ 或者 $n_{e,\sigma} = 1$.

把 (19) 和 (20) 式代入到 (5) 式可得

$$\begin{aligned} \hat{H}_k &= \hbar\omega_{1,k} \hat{O}_{e,1}^+ \hat{O}_{e,1} + \hbar\omega_{2,k} \hat{O}_{e,2}^+ \hat{O}_{e,2} \\ &\quad + \hbar\omega_{3,k} \hat{O}_{e,3}^+ \hat{O}_{e,3}. \end{aligned} \quad (22)$$

根据 (4), (22) 式, 利用统计理论可推导出系统的配分函数如下

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}_r \{ \exp(-\beta \hat{H}) \} = \exp\left(\frac{3\beta g\mu_B H N}{2}\right) \\ &\quad \times \prod_k \prod_{\sigma=1}^3 [1 + \exp(-\beta \hbar\omega_{\sigma,k})] \end{aligned} \quad (23)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$.

由 (23) 式可得系统的自由能为

$$F = -\beta^{-1} \ln Z = -\frac{3g\mu_B H N}{2} - \beta^{-1} \sum_k \sum_{\sigma=1}^3 \ln[1 + \exp(-\beta \hbar \omega_{\sigma,k})], \quad (24)$$

由 (24) 式可得, 系统的磁化强度为

$$M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T = \frac{3g\mu_B N}{2} - g\mu_B \sum_k \sum_{\sigma=1}^3 \frac{1}{1 + \exp(\beta \hbar \omega_{\sigma,k})}, \quad (25)$$

由 (25) 式可得系统的磁化率为

$$\chi = \left(\frac{dM}{dH}\right)_T = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2}\right)_T = \sum_k \sum_{\sigma=1}^3 \beta (g\mu_B/2)^2 \operatorname{sech}^2(\beta \hbar \omega_{\sigma,k}/2). \quad (26)$$

3 讨论

我们从与温度相关的热无序能 ($k_B T/J$), 与外磁场强度相关的自旋磁矩势能 ($g\mu_B H/J$), 使二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能 ($J_F/J = -\eta$, $\eta > 0$), 使二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能 ($J_{AF}/J = \mu$, $\mu > 0$) 等, 利用上述能量之间的竞争分析自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁型链体系的磁性质. 并深入分析了体系中自发磁化相关的有序-无序竞争^[25]. 又从自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁型链体系的三支元激发谱 $\hbar \omega_{\sigma,k} = \lambda_{\sigma}$, ($\sigma = 1, 2, 3$) 的变化规律出发分析体系的量子态对磁性质的影响.

由 (14) 式可知, $\hbar \omega_{2,k} = \lambda_2 = g\mu_B H + J[-\eta - \sqrt{\eta^2 + 16(1 + \cos k)\mu^2}]/4$ 在第一布里渊区的最大值为 $(\hbar \omega_{2,k})_{\max} = g\mu_B H - \eta J/2$. 当约化外磁场强度小于 $g\mu_B H/J < \eta/2$ 时, 这支元激发能量在整个第一布里渊区小于零 ($\hbar \omega_{2,k} < 0$), 此临界磁场强度为

$$H_{C1} = \eta J/(2g\mu_B), \quad (27)$$

我们称之为 **BZ** 区基态完全失稳临界磁场强度, 这与在整个第一布里渊区 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发使体系基态完全失稳相关联.

$\hbar \omega_{2,k}$ 的最小值为 $(\hbar \omega_{2,k})_{\min} = g\mu_B H + J[-\eta - \sqrt{\eta^2 + 32\mu^2}]/4$, 当约化外磁场强度介

于 $\eta/2 < g\mu_B H/J < (\eta + \sqrt{\eta^2 + 32\mu^2})/4$ 时, 在第一布里渊区主要对称点 $\Gamma(k = 0)$ 点附近这支元激发能量出现 $\hbar \omega_{2,k} < 0$ 情况, 此临界磁场强度为

$$H_{C2} = J(\eta + \sqrt{\eta^2 + 32\mu^2})/(4g\mu_B), \quad (28)$$

我们称之为 **BZ** 区基态部分失稳临界磁场强度, 这与在 $\Gamma(k = 0)$ 附近的 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发使基态部分失稳相关联. 因此, 当 $g\mu_B H/J < (\eta + \sqrt{\eta^2 + 32\mu^2})/4$ 时, 这支 $\hbar \omega_{2,k}$ 元激发能量能够导致体系基态失稳, 从而 $\hbar \omega_{2,k}$ 元激发诱导体系自旋偏离转变^[26-30] (spin-flop transition).

当 $\hbar \omega_{2,k} = -\hbar \omega_{3,k}$ 时的外磁场强度为

$$H_{\text{peak}} = \eta J/(4g\mu_B), \quad (29)$$

当 $H_{\text{peak}} \leq H < H_{C2}$ 时, H_{peak} 是外磁场下体系的磁化强度随温度的变化曲线出现峰值的临界磁场强度 (请参见图 3 和图 4(b)).

当外磁场强度 $H < H_{C1}$ 时, $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发在整个第一 **BZ** 区 $\hbar \omega_{2,k} < 0$, 所以, 在此种情况下 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发的作用驱使体系的量子态从高能级往低能级跃迁, 并产生能隙. 当外磁场强度 $H_{C1} \leq H \leq H_{C2}$ 时, 在第一 **BZ** 区 $\Gamma(k = 0)$ 附近 $\hbar \omega_{2,k} \leq 0$, 但是在 **BZ** 区边界 ($k = \pm\pi/a$) 附近 $\hbar \omega_{2,k} \geq 0$, 所以, 此时 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发下不能产生能隙. 当 $H > H_{C2}$ 时, 在整个第一 **BZ** 区 $\hbar \omega_{2,k} > 0$, 从而在此种情况下 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发的作用驱使体系的量子态从低能级往高能级跃迁, 并产生能隙. 而其余的两支元激发能量 $\hbar \omega_{1,k}$ 和 $\hbar \omega_{3,k}$, 在整个第一布里渊区都大于零, 所以, 这两支元激发对体系的量子态从低能级往高能级跃迁, 并出现能隙. 并且体系的三支元激发满足费米-狄拉克统计分布规律.

根据 (14), (15), (23)—(29) 式通过数值计算可得如下结果:

从图 2 可知, 当 $\eta = 3.5$, $\mu = 1.42$ 时, 由 (27)—(29) 式可得三个约化临界磁场强度为如下 $g\mu_B H_{C1}/J = 1.75$, $g\mu_B H_{C2}/J = 3.06553$, $g\mu_B H_{\text{peak}}/J = 0.875$. 图 2—图 4 说明 $0 \leq H < H_{\text{peak}}$ 时, $\hbar \omega_{3,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献在整个温度变化区域大于 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献. 当外磁场强度 $H = H_{\text{peak}}$ 时, $\hbar \omega_{3,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献在整个温度变化区域等于 $\hbar \omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献 (参见图 4(a), (b)).

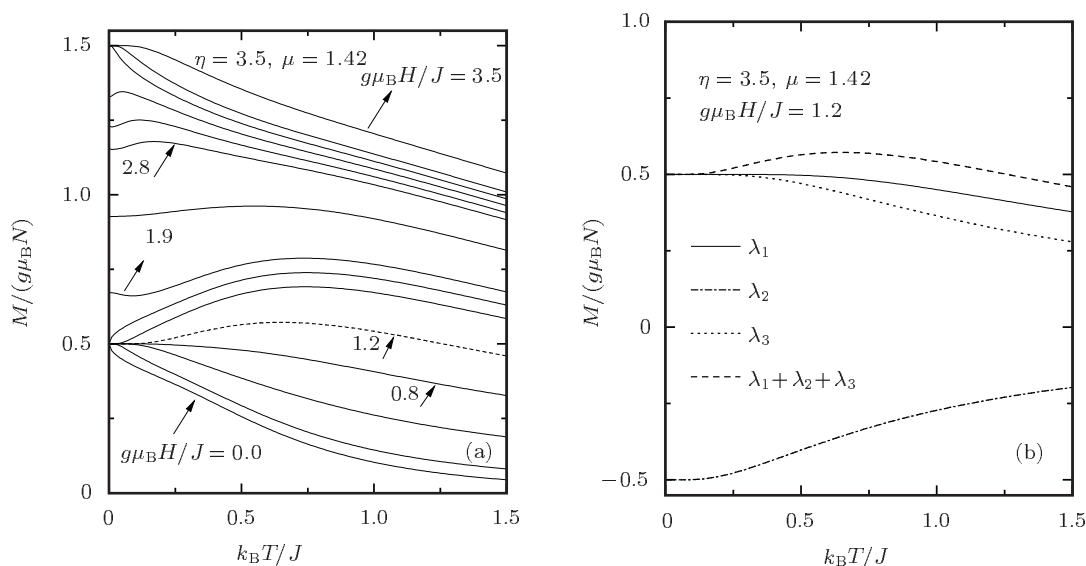


图2 (a) 约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在不同的外磁场下 (由下到顶外磁场强度按下列约化数据变化 $g\mu_B H/J = 0.0, 0.1, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 1.75, 1.9, 2.4, 2.8, 2.9, 3.0, 3.1, 3.2, 3.5$) 磁化强度随温度的变化; (b) 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在外磁场为 $g\mu_B H/J = 1.2$ 时, 三支元激发各自对磁化强度贡献及他们的共同作用对磁化强度贡献随温度的变化

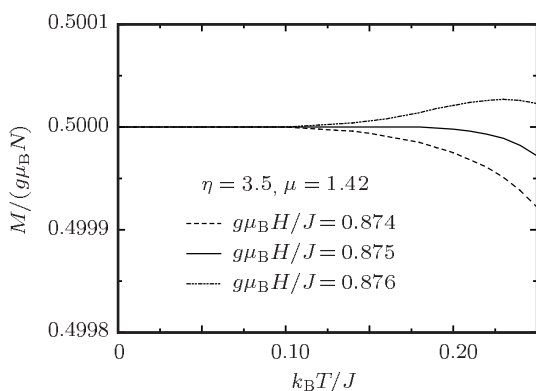


图3 约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在不同的外磁场下 (由下到顶外磁场强度按下列约化数据变化 $g\mu_B H/J = 0.874, 0.875, 0.876$) 磁化强度随温度的变化

当外磁场强度 $H \leq H_{C1}$ 时, 因为体系的三支元激发 $\hbar\omega_{1,k}$, $\hbar\omega_{2,k}$, $\hbar\omega_{3,k}$ 满足费米 - 狄拉克统计分布, 并且 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发在整个第一布里渊区能量都大于零, 而 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发在整个第一布里渊区都小于零. 因此, 在 $T = 0$ K, $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发的统计分布等于零, 而 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发的统计分布等于 1, 因此, 在 $T = 0$ K, 外磁场强度 $H \leq H_{C1}$ 时, 约化磁化强度等于 0.5. 在低温下, $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发的统计分布趋于零, 而 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发的统计分布趋于 1. 因此, 外磁场强度 $H \leq H_{C1}$ 时, 在低温下, 约化磁化强度趋

于 0.5 (参见图 2—图 4). 这也是体系在低温下随外磁场的变化下, 磁化强度出现饱和磁化强度的 1/3 平台的原因之一 (参见图 5).

由图 2 和图 4 可知, 在 $0 \leq H \leq H_{\text{peak}}$ 区域, $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发对磁化强度的贡献随温度的升高逐渐递减, 这说明无序的热运动能量 $k_B T$ 破坏了二聚体分子内的自旋平行有序 (铁磁有序), $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发的统计分布随温度的升高而增大, 从而导致 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发对磁化强度的贡献迅速减小. 但是 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献随温度的升高在低温区逐渐增大, 这说明热运动能量 $k_B T$ 破坏了单体与二聚体分子之间的自旋反平行有序 (反铁磁有序), 而且外磁场的诱导又使被热运动偏转的电子自旋朝外磁场方向排列, 使 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发的统计分布随温度的升高而减小, 从而导致 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献随温度的升高而增大. 但是, 在同一温度下 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发的贡献大于 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发的贡献, 所以外磁场 ($0 \leq H \leq H_{\text{peak}}$) 时, 磁化强度随温度的升高迅速降低为零.

当外磁场继续增大小于 BZ 区基态完全失稳临界磁场强度时 (即 $H_{\text{peak}} < H \leq H_{C1}$ 时), 在低温区外磁场诱导的 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度贡献随温度的增加而递增, $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发对磁化强度贡献随温度的增加而递减, 但

是在此低温区外磁场诱导的 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发贡献大于 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发的贡献, 因此在此低温区随温度的升高磁化强度增大, 直至增大到 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发贡献之和为止. 随着温度的继续升高, $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 两支元激发贡献之和大于外磁场诱导的 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发贡献, 随温度增加体系的磁化强度减小直至为零, 从而出现一个磁化强度随温度变化曲线的圆形峰 (参见图 2 和图 4).

这说明 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发的诱导下体系的量子

态引起失稳, 使较大外磁场的诱导下出现较大自旋量子态. 这与通常的铁磁系统不同, 一般而言温度的升高在铁磁系统中热无序能必然抑制体系的自发磁化, 并且扰乱铁磁性系统的自旋有序排布, 从而降低磁化强度. 但是在自旋为 1/2 的 XY 模型亚铁磁链型链体系, 热无序能与外磁场的联合作用下使体系状态往高自旋量子态跃迁, 从而增强了磁化强度. 在此 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发具有增强磁化强度的作用, 而 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 元激发具有减弱磁化强度的作用 (参见图 2(b) 和图 4).

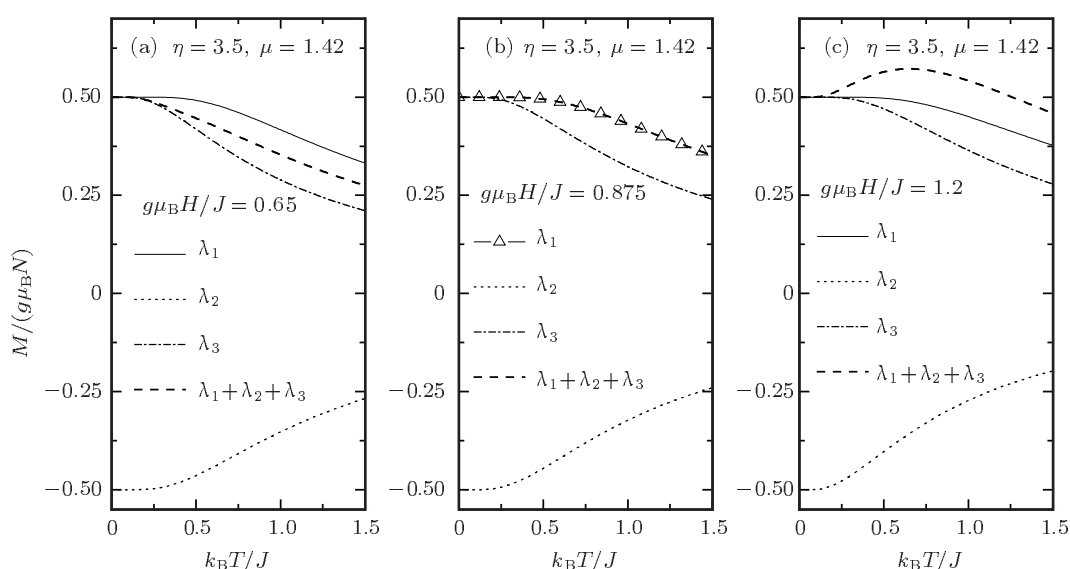


图 4 约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在不同的外磁场下 $g\mu_B H/J = 0.65$ (a), 0.875 (b), 1.2 (c), 三支元激发各自对磁化强度贡献及它们的共同作用对磁化强度贡献随温度的变化

当 $H_{C1} < H < H_{C2}$ 时, 由图 2(a) 可知, 在低温区 $\hbar\omega_{2,k}$ 支元激发对磁化强度的贡献大于 $\hbar\omega_{1,k}$ 和 $\hbar\omega_{3,k}$ 元激发对磁化强度的贡献, 从而磁化强度随温度的变化曲线出现峰, 并且在 $H_{C1} < H < H_{C2}$ 区间, 随外磁场的增大这个峰在更小的温度下出现 (就是说这个峰随外磁场的增大向左移). 当 $H_{C2} < H$ 时, $\hbar\omega_{1,k}$, $\hbar\omega_{2,k}$, $\hbar\omega_{3,k}$ 三支元激发都大于零. 因此, 在有限温度下这三支元激发都具有减弱磁化强度的作用, 所以磁化强度随温度的升高迅速单调递减.

由图 5, 不同的低温下磁化强度随外磁场的变化可知, 当外磁场 $H < H_{C1}$ 时的磁化强度是饱和磁化强度的 1/3, 出现饱和磁化强度的 1/3 平台. 这个平台宽度在低温下随温度的升高而减小. 临界磁场 H_{C1} 是与饱和磁化强度的 1/3 平台消失的零温

下外磁场大小相对应, 而临界磁场 H_{C2} 与零温下体系出现饱和磁化时的外磁场大小相对应. 低温下, 热运动能使得饱和磁化强度的 1/3 平台消失的临界磁场强度随温度的升高逐渐减小, 而出现饱和磁化的临界磁场强度逐渐增大. 并且有限温度下, 存在磁化强度随温度的变化曲线出现峰值的临界磁场强度 H_{peak} , $H_{C1} < H < H_{C2}$ 区间对应 spin-flop states 混乱区.

由图 6 可知, 当约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 不变, 随约化铁磁交换积分 η 增大, 饱和磁化强度的 1/3 平台消失的临界磁场强度 H_{C1} 和体系出现饱和磁化时的临界磁场强度 H_{C2} 都增大. 并且当约化铁磁交换积分 $\eta = 0$ 时, 不出现饱和磁化强度的 1/3 平台. 这说明, 出现饱和磁化强度的 1/3 平台是与二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换

作用能和二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能、热无序能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争所致。

由图 7 可知, 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$ 不变, 随约化反铁磁交换积分 μ 增大, 出现饱和磁化时的临界磁场强度 H_{C2} 增大, 但是饱和磁化强度的 $1/3$ 平台消失的临界磁场强度 H_{C1} 不变. 有限温度下 (如 $k_B T/J = 0.1$) 的 H_{C1} 小于零温下的 H_{C1} , 而且有限温度下 (如 $k_B T/J = 0.1$) 的 H_{C2} 大于零温下的 H_{C2} . 因此, 随着温度的升高饱和磁化强度的 $1/3$ 平台逐渐减小, 温度达到某一值后饱和磁化强度的 $1/3$ 平台将消失. 这说明出现饱和磁化强度的 $1/3$ 平台是主要与二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能、热无序能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争所致. 并且, 随约化反铁磁交换积分 μ 增大, spin-flop states 混乱区间扩大.

由图 8—图 10 可知, 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 无外磁场时 ($g\mu_B H/J = 0$), 体系的磁化率只有一个圆形峰, 在低温区零温附近磁化率随温度的变化曲线出现向上翘的行为. 在低外磁场下磁化率随温度的变化曲线出现双峰 (参见图 8 中 $g\mu_B H/J = 0.05, 0.07, 0.09$). 较大的外磁场 (参

见图 8 中 $g\mu_B H/J = 0.12, 0.15$) 下, 在低温区零温附近磁化率随温度的变化曲线不出现峰值, 只有较高温区出现一个圆形峰. 由图 8 可知, 随外磁场的增大圆形峰向右移 (即往较高温区移动), 并且其峰值也降低. 由图 10 可知, 低温零温附近的峰值源于二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能、热无序能三者之间的竞争. 图 10(a) 中 $\mu = 0$ 时的曲线, 就是体系只有二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能时的情况, 近似与铁磁系统的 Curie-Weiss 定律相符, 这正好能够说明上述观点.

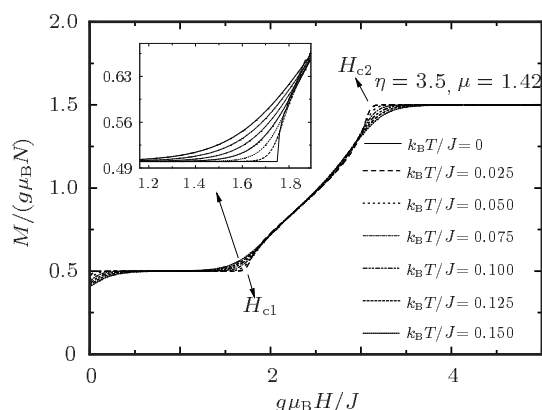


图 5 约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在不同的温度下磁化强度随外磁场的变化

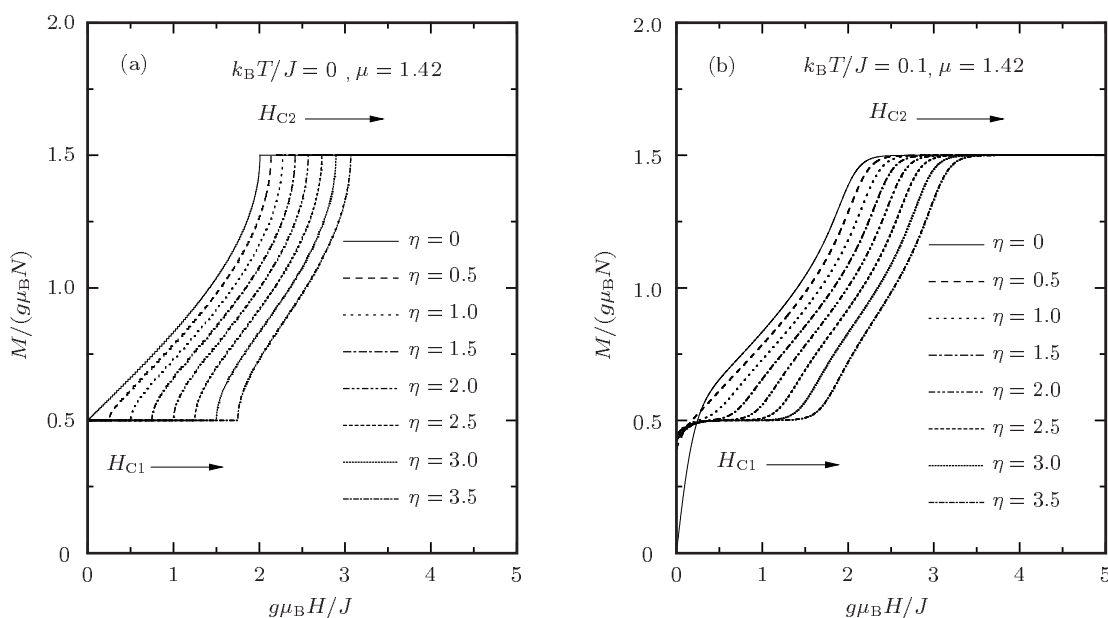


图 6 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 不变, 取不同的约化铁磁交换积分 η 时, 在绝对零度 $k_B T/J = 0$ (a) 与有限温度 $k_B T/J = 0.1$ (b) 下, 磁化强度随外磁场的变化

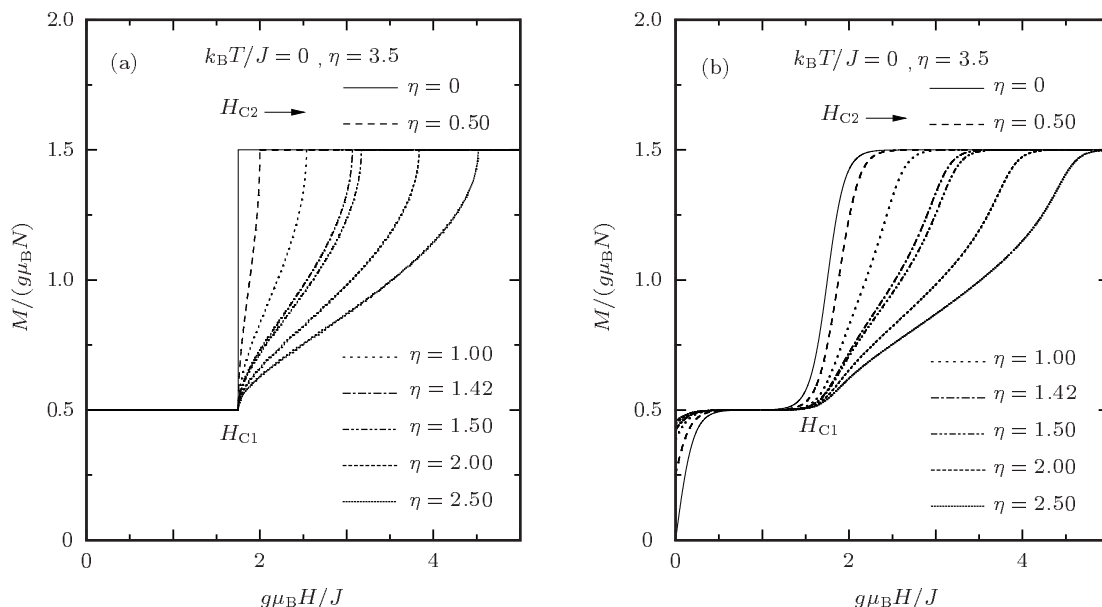


图 7 约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$ 不变, 取不同的约化反铁磁交换积分 μ 时, 在绝对零度 $k_B T/J = 0$ (a) 与有限温度 $k_B T/J = 0.1$ (b) 下, 磁化强度随外磁场的变化

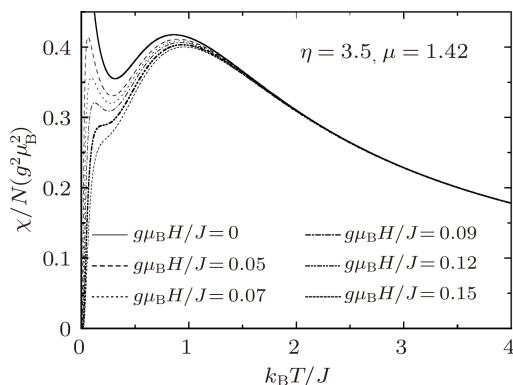


图 8 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在不同的外磁场下磁化率随温度的变化

由图 9 可知, 当约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 不变, 外磁场 $g\mu_B H/J = 0.05$ 下, 约化铁磁交换积分 η 较小 (参见图 9(a) $\eta = 0.4, 0.5, 0.9, 1.2$) 和较大 (参见图 9(c) $\eta = 5.5, 6.0, 6.5, 7.0$) 时, 只出现低温峰不出现较高温区的圆形峰. 约化铁磁交换积分 η (参见图 9(b) $\eta = 2.5, 3.0, 3.5, 4.3$) 适当之时, 磁化率随温度的变化曲线才出现双峰. 当 $\eta \leq 1.2$ 时, 随约化铁磁交换积分 η 的增大, 低温峰向较高温区移动 (向右移), 并且峰值逐渐减小 (参见图 9(a)). 当 $\eta \geq 2.5$ 时, 随约化铁磁交换积分 η 的增大, 低温峰值逐渐增大 (参见图 9(b) 和图 9(c)). 当约化铁磁交换积分 η (参见图 9(b) $\eta = 2.5, 3.0, 3.5, 4.3$) 适当之时, 随约化铁磁交换积分 η 的增大, 较高温区的

圆形峰往较高温区移动 (向右移动), 但是其峰值逐渐减小.

由图 10 可知, 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 有限外磁场 $g\mu_B H/J = 0.05$ 下, 约化反铁磁交换积分 μ 较小时 ($\mu = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$), 只有低温零温附近出现峰值. 当约化反铁磁交换积分 μ 较大时 ($\mu \geq 1.0$), 磁化率随温度的变化曲线出现双峰现象. 而且, 随约化反铁磁交换积分 μ 增大, 低温峰值与较高温区的圆形峰值都减小, 但是低温峰值减小的幅度大于圆形峰值的减小. 并且圆形峰随约化反铁磁交换积分 μ 增大, 往较高温区移动 (向右移). 由图 10(b)—(d) 可知, 较高温区的圆形峰主要与二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能, 热无序能, 外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争所致.

由图 11 可知, 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 在较低的温度下 (如 $k_B T/J = 0.05, 0.1, 0.15$), 自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链的约化磁化率随外磁场的变化曲线出现双峰, 左边的峰 (较低外磁场对应的峰) 值位置与临界磁场 H_{C1} 对应, 而右边的峰 (较高外磁场对应的峰) 值位置与临界磁场 H_{C2} 对应. 随着温度 ($k_B T/J \leq 0.15$) 的升高左边的峰向右移 (往高外磁场方向移动), 右边的峰向左移 (往低外磁场方向移动). 并且, 其双峰值也随温度的升高逐渐减小. 这

说明, 这个双峰源于二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能和二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能, 热无序能, 外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争. 在较高的温度下 (如 $k_B T/J = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.7$), 左边的峰被热无序能消失, 只存在与临界磁场 H_{C2}

对应的右边的峰, 并且随温度的继续升高其峰值也逐渐减小, 而且其峰向左移 (往低外磁场方向移动). 在更高的温度下 (如 $k_B T/J = 0.9$), 由于热无序能连与临界磁场 H_{C2} 对应的右边的峰也被消失, 体系的磁化率随外磁场的增大单调递减.

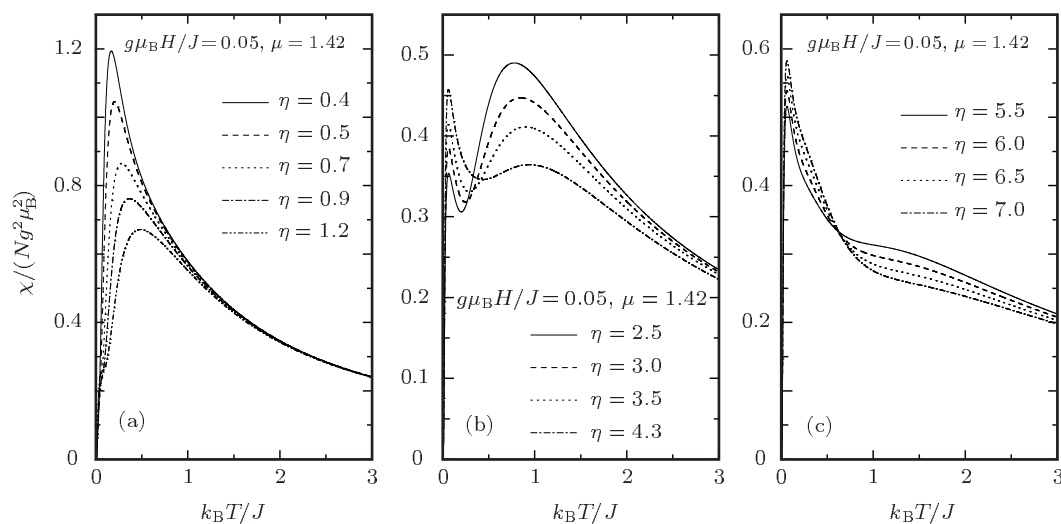


图 9 当约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 不变, 取不同的约化铁磁交换积分 η 时, 在外磁场 $g\mu_B H/J = 0.05$ 下磁化率随温度的变化

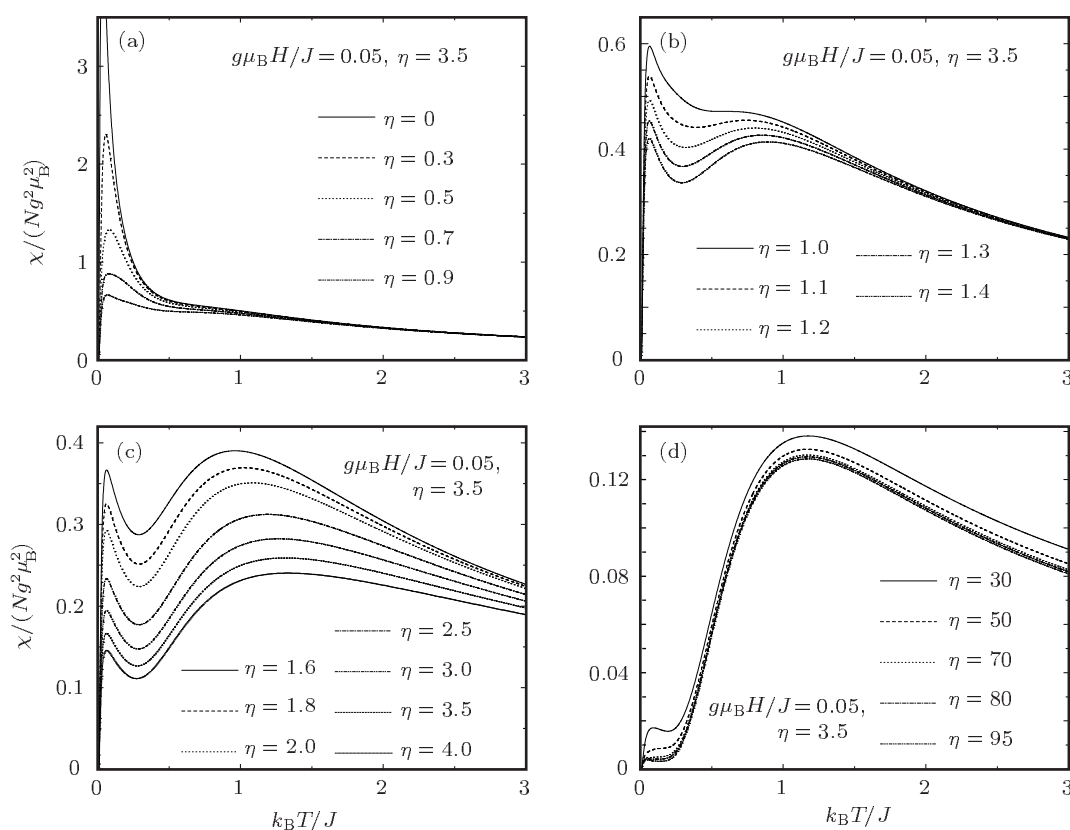


图 10 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$ 不变, 取不同的约化反铁磁交换积分 μ 时, 在外磁场 $g\mu_B H/J = 0.05$ 下磁化率随温度的变化

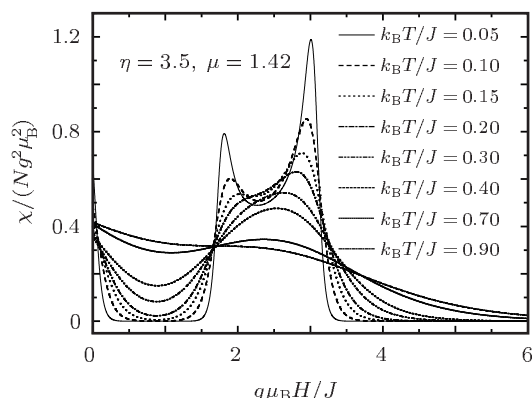


图 11 当约化铁磁交换积分 $\eta = 3.5$, 约化反铁磁交换积分 $\mu = 1.42$ 时, 体系在不同的温度下磁化率随外磁场的变化

4 结论

在有限温度与有限外磁场下, 对于自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链体系磁性的研究得出如下主要结果.

1) 不同的外磁场下, 自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链体系的磁化强度随温度的变化规律发现, 这个体系具有三个临界磁场分别为 $H_{\text{peak}} = J\eta/(4g\mu_B)$, $H_{C1} = \eta J/(2g\mu_B)$, $H_{C2} = J(\eta + \sqrt{\eta^2 + 32\mu^2})/(4g\mu_B)$. H_{peak} 对应外磁场下磁化强度随温度的变化曲线出现峰值的临界磁场强度, H_{C1} 对应 BZ 区基态完全失稳临界磁场强度, H_{C2} 对应 BZ 区基态部分失稳临界磁场强度. 上述

变化规律可以通过比较外磁场下的 $\hbar\omega_{2,k}$ 和 $\hbar\omega_{1,k}$, $\hbar\omega_{3,k}$ 三支元激发对体系磁化强度的贡献加以说明.

2) 不同温度下, 自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链体系的磁化强度随外磁场的变化规律发现, 在外磁场 $H < H_{C1}$ 时, 低温下在 H_{C1} 附近出现饱和和磁化强度的 $1/3$ 平台. 其中 H_{C1} 对应饱和磁化强度的 $1/3$ 平台消失的临界磁场强度, H_{C2} 对应出现饱和磁化时的临界磁场强度.

3) 自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链体系的磁化率随温度的变化规律发现, 在有限的低外磁场下磁化率随温度的变化曲线出现双峰. 其中, 低温零温附近的峰值源于二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能、热无序能三者之间的竞争. 而较高温度区的圆形峰主要与二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能、热无序能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争所致.

4) 自旋为 $1/2$ 的 XY 模型亚铁磁棱型链体系的磁化率随外磁场的变化规律发现, 在低温下磁化率随外磁场的变化曲线也出现双峰, 巧合的是左峰对应临界磁场强度 H_{C1} , 右峰对应临界磁场强度 H_{C2} . 这又一次说明, 这个双峰源于二聚体分子内电子自旋平行排列的铁磁交换作用能和二聚体与单基体分子间电子自旋反平行排列的反铁磁交换作用能、热无序能、外磁场强度相关的自旋磁矩势能之间的竞争.

- [1] Shiomi D, Nishizawa M, Sato K, Takui T, Itoh K, Sakurai H, Izuoka A, Sugawara T 1997 *J. Phys. Chem. B* **101** 3342
- [2] Kikuchi H, Fujii Y, Chiba M, Mitsudo S, Idehara T, Tonegawa T, Okamoto K, Sakai T, Kuwai T, Ohta H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 227201
- [3] Maekawa K, Shiomi D, Ise T, Sato K, Takui T 2005 *J. Phys. Chem. B* **109** 9299
- [4] Fu H H, Yao K L, Liu Z L 2006 *Phys. Rev. B* **73** 104454
- [5] Fu H H, Yao K L, Liu Z L 2006 *Phys. Lett. A* **358** 443
- [6] Jeschke H, Opahle I, Kandpal H, Valent R, Das H, Saha-Dasgupta T, Janson O, Rosner H, Brühl A, Wolf B, Lang M, Richter J, Hu S, Wang X, Peters R, Pruschke T, Honecker A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 217201
- [7] Rule K C, Wolter A U B, Sullow S, Tennant D A, Brühl A, Köhler S, Wolf B, Lang M, Schreuer J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 117202
- [8] Schollwöck U 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77**(1) 259
- [9] Gu B, Su G 2007 *Phys. Rev. B* **75** 174437
- [10] Chen S, Wang Y P, Ning W Q, Wu C J, Lin H Q 2006 *Phys. Rev. B* **74** 174424
- [11] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153
- [12] Maisinger K, Schollwöck U, Brehmer S, Mikeska H J, Shoji Y 1998 *Phys. Rev. B* **58** R5908
- [13] Batista C D, Ortiz G 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1082
- [14] Fan H Y, Li C 2004 *Phys. Lett. A* **321** 75
- [15] Fan H Y, Wu H 2005 *Mod. Phys. Lett. B* **19** 1361
- [16] Fan H Y, Yuan H C, Wu H 2011 *Invariant Eigen-Operator Method in Quantum Mechanics* (Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press) pp175–193 (in Chinese) [范洪义, 袁洪春, 吴昊 2011 量子力学的不变本征算符方法 (上海: 上海交通大学出版社) 第 175—193 页]
- [17] Schmidt K P, Uhrig G S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 227204
- [18] Derzhko O, Richter J, Krokhnalskii T, Zaburanyi O 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066112
- [19] Venuti L C, Roncaglia M 2010 *Phys. Rev. A* **81** 060101

- [20] Schwalm W A, Schwalm M K, Giona M 1997 *Phys. Rev. E* **55** 6741
 [21] Bao S Q, Hu Z, Shen J L, Yang G Z 1996 *Phys. Rev. B* **53** 735
 [22] Gildenblat G 1985 *Phys. Rev. B* **32** 3006
 [23] Cavallo A, Cosenza F, de Cesare L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 174439
 [24] Cavallo A, Cosenza F, de Cesare L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 240602
 [25] Wang Y Z, Zhang Z D 2002 *Solid State Commun.* **124** 215
 [26] Jacobs I S 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 61S
 [27] He Z Z, Yutaka U 2008 *Phys. Rev. B* **77** 052402
 [28] Wang X, Zotos X, Karadamoglou J, Papanicolaou N 2000 *Phys. Rev. B* **61** 14303
 [29] Karadamoglou J, Papanicolaou N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 9477
 [30] Sakai T 1999 *Phys. Rev. B* **60** 6238

Properties and order-disorder competition of spin-1/2 XY model in the ferrimagnetic diamond chain*

Cheng Tai-Min^{1)2)†} Ge Chong-Yuan¹⁾ Sun Shu-Sheng¹⁾ Jia Wei-Ye¹⁾
 Li Lin³⁾ Zhu Lin³⁾ Ma Yan-Ming²⁾

1) (Department of Mathematics and Physics, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142, China)

2) (National Laboratory of Superhard Materials, Jilin University, Changchun 130012, China)

3) (Department of Physics, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

(Received 19 January 2012; revised manuscript received 11 March 2012)

Abstract

The elementary excitation spectra of the one-dimensional spin-1/2 XY model in the ferrimagnetic diamond chain at low temperature are calculated by using invariant eigenvector in this paper. And the elementary excitation energies in different cases are discussed. Therefore, analytic solutions of the three critical magnetic field intensities H_{C1} , H_{C2} and H_{peak} in the system are given. It is found that the analytic solutions of three critical magnetic field intensities are correct from the law of the magnetization changing with temperature under different external magnetic fields, and it is explained by the contributions of the three elementary excitations to the magnetization. The external magnetic field dependent magnetization presents a 1/3 magnetized plateau at low temperature. The variation of magnetic susceptibility either with temperature or with external magnetic field shows a double peak structure, this phenomenon indicates that the double peak structure originates from the competition among the ferromagnetic exchange interaction energy of intramolecular electronic spin parallel arrangement in dimer, the antiferromagnetic exchange interaction energy of intermolecular electronic spin antiparallel arrangement in dimer-monomer, the thermal disorder energy and the spin magnetic moment potential energy related to external magnetic field.

Keywords: one-dimensional spin-1/2 XY model in the ferrimagnetic diamond chain, magnetization, magnetic susceptibility, invariant eigenvector method

PACS: 75.50.Gg, 68.65.-k, 75.60.-d, 33.15.Kr

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10647138), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 200904501018) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB606404).

† E-mail: ctm701212@126.com