

双二次交换作用和各向异性对反铁磁体相变温度的影响

文林 胡爱元

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

Wen Lin Hu Ai-Yuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 107501 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200077

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200077>

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

Verwey相变处 Fe_3O_4 的结构、磁性和电输运特性

Structure, magnetic and transport properties of Fe_3O_4 near verwey transition

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

铁基合金薄带多次等温回火特性的研究

The characteristics of multiple isothermal tempered Fe-based alloy ribbons

物理学报. 2019, 68(13): 137501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190017>

N^+ 注入修复外延Fe膜面内六重磁对称

Recovering in-plane six-fold magnetic symmetry of epitaxial Fe films by N^+ implantation

物理学报. 2019, 68(12): 126102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190131>

氮化铁薄膜晶相合成热分析及其磁性

Thermal analysis on crystal phase synthesis of iron nitride film and its magnetic properties

物理学报. 2019, 68(11): 118101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182195>

铁基超导体中的反铁磁序和自旋动力学

Antiferromagnetic order and spin dynamics in iron-based superconductors

物理学报. 2018, 67(20): 207407 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181543>

双二次交换作用和各向异性对反铁磁体相变温度的影响*

文林 胡爱元†

(重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 401331)

(2020年1月12日收到; 2020年3月24日收到修改稿)

本文基于双时格林函数方法, 通过对不同格点和同格点的高阶格林函数分别采用 Tyablikov 和 Callen 退耦近似, 系统研究了双二次型交换作用和各向异性对简单立方晶格反铁磁模型相变的影响. 得到了相变温度的解析表达式, 发现相变温度随着各向异性的增强而升高, 但随着双二次型相互作用的增强而下降.

关键词: 反铁磁, 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.69.20200077

1 引言

双二次型 (biquadratic) 交换相互作用可以通过对双线性 (bilinear) 相互作用进行高阶展开来得到, 其强度比双线性相互作用弱^[1-3]. 实验上可以通过微波共振技术手段观察到^[4], 对材料的性质有着重要的影响. 例如: 一维材料 LiVGe_2O_6 的磁化率^[5,6] 以及超导材料 $\text{Ca}(\text{Ba})\text{Fe}_2\text{As}_2$ ^[7,8,9], FeSe ^[10,11] 的磁激发需要引入双二次相互作用才能合理解释. 化合物 GdMg 中的双二次型相互作用导致系统磁化强度不是按布洛赫定理的 $T^{3/2}$ 减小 (T 为温度), 而是 T^2 减小^[12,13]. 最近, Yu 和 Nevidomskyy^[14] 在研究超导材料的配对状态时发现: 适度的双二次相互作用不仅会导致掺杂的配对对称性、配对强度和能隙各向异性发生显著变化, 而且是调节掺杂下各种超导态稳定性的关键因素.

在以往的研究中, 研究者采用不同的方法探讨了双二次型交换相互作用对铁磁模型的磁化强度、

居里温度、磁化率的影响, 如: 平均场理论^[15]、自旋波理论^[16]、高温展开法^[17]、格林函数方法^[18,19] 等. 相比铁磁模型, 研究双二次型交换相互作用对反铁磁模型相变温度影响的工作较少^[19,20]. 除此以外, 在实际材料中存在各向异性, 它在磁性系统相变中也扮演着至关重要的角色. 因此, 本文将采用双时格林函数方法研究双二次型相互作用和各向异性共同对反铁磁模型相变的影响. 结果显示: 交换各向异性在 0 到 1 取值时, 反铁磁模型的相变温度总是随着双二次型交换作用的增强而下降. 而铁磁模型却存在一个临界的各向异性, 其相变温度的大小不受双二次型相互作用的影响, 大于临界各向异性, 相变温度随着双二次型相互作用的增强而升高, 反之下降^[19].

2 理论模型

理论模型是一个三维简单立方晶格, 它由两个子晶格构成, 不同子晶格自旋方向相反, 每个子晶

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

† 通信作者. E-mail: huaiyuanhuyuanai@126.com

格中磁性离子的自旋量子数为 1, 即 $S = 1$. 因此, 该晶格的磁结构是一个 Néel 型结构. 在这里, 采用字母 a 和 b 来分别标识这两个子晶格, 其相应子晶格的自旋算符分别用 S_{ai}^α 和 S_{bj}^α 来标识, $\alpha = x, y, z$ 表示自旋算符的三个分量. 因此, 一个包含了双二次型相互作用和各向异性的简单立方晶格反铁磁体模型的哈密顿量可以表示为

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

这里 J_1 和 J_2 分别描述的是最近邻自旋间双线性及双二次型交换相互作用. $\langle i, j \rangle$ 表示对最近邻格点求和. η 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, 越小的 η 对应着越强的交换各向异性. D 描述的是两个子晶格的单粒子各向异性. 选 z 轴为量子化轴, 取子格 a 的自旋方向为正, 则子晶格磁化强

度定义为自旋算符的统计平均, 即: $m = \langle S_a^z \rangle = -\langle S_b^z \rangle$. 本文不作特别说明, 均取 $J_1 = 1$, 探讨其它参数改变时对系统性质的影响.

接下来, 采用双时格林函数方法推导模型子晶格磁化强度的解析表达式, 基于这个目的, 构建了如下的格林函数:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle S_{am}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle &= -\iota \Theta(t) \langle\langle S_{am}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle, \\
 \langle\langle S_{bm}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle &= -\iota \Theta(t) \langle\langle S_{am}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle. \quad (2)
 \end{aligned}$$

这里

$$\begin{aligned}
 \langle A(t) \rangle &= \text{Tr}[A(t)e^{-\beta H}] / \text{Tr}[e^{-\beta H}], \\
 A(t) &= e^{\iota H t} A e^{-\iota H t}, \quad \beta = 1/(\kappa_B T),
 \end{aligned}$$

κ_B 是玻尔兹曼常数. 为了方便, 令 $\kappa_B = 1$, 则系统所有的量, 包括交换常数、磁化强度、温度皆是一个无量纲的量. u 是 Callen 参数^[21], 在求解格林函数的运动方程中, 其值会取零, 以此得到子晶格磁化强度的自治方程. $\Theta(t)$ 是阶跃函数. 根据双时格林函数的标准步骤^[21], (2) 式的两个格林函数的运动方程可以写为

$$\begin{aligned}
 & \iota \frac{d}{dt} \langle\langle S_{am}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle \\
 = & \theta(u) \delta(t) \delta_{ml} + \sum_\rho \left[\eta \left(J_1 + \frac{1}{2} J_2 \right) \langle\langle S_{am}^z S_{bm+\rho}^+; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle - \left(J_1 - J_2 \frac{\eta^2}{2} \right) \langle\langle S_{am}^+ S_{bm+\rho}^z; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle \right] \\
 & + J_2 \sum_\rho \left\{ \left\langle \left\langle \left[\frac{\eta^2}{2} S(S+1) - \frac{\eta^2+2}{2} (S_{bm+\rho}^z)^2 \right] (S_{am}^z S_{am}^+ + S_{am}^+ S_{am}^z); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \right\rangle \right\rangle \right. \\
 & \left. + \left\langle \left\langle \frac{\eta}{2} [3(S_{am}^z)^2 - S(S+1)] (S_{bm+\rho}^z S_{bm+\rho}^+ + S_{bm+\rho}^+ S_{bm+\rho}^z); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \right\rangle \right\rangle \right\} \\
 & + D \langle\langle S_{am}^+ S_{am}^z + S_{am}^z S_{am}^+; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle, \quad (3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \iota \frac{d}{dt} \langle\langle S_{bm}^+(t); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle \\
 = & \sum_\rho \left[\eta \left(J_1 + \frac{1}{2} J_2 \right) \langle\langle S_{bm}^z S_{am+\rho}^+; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle - \left(J_1 - J_2 \frac{\eta^2}{2} \right) \langle\langle S_{bm}^+ S_{am+\rho}^z; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle \right] \\
 & + J_2 \sum_\rho \left\{ \left\langle \left\langle \left[\frac{\eta^2}{2} S(S+1) - \frac{\eta^2+2}{2} (S_{am+\rho}^z)^2 \right] (S_{bm}^z S_{bm}^+ + S_{bm}^+ S_{bm}^z); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \right\rangle \right\rangle \right. \\
 & \left. + \left\langle \left\langle \frac{\eta}{2} [3(S_{bm}^z)^2 - S(S+1)] (S_{am+\rho}^z S_{am+\rho}^+ + S_{am+\rho}^+ S_{am+\rho}^z); e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \right\rangle \right\rangle \right\} \\
 & + D \langle\langle S_{bm}^+ S_{bm}^z + S_{bm}^z S_{bm}^+; e^{uS_{al}^z} S_{al}^- \rangle\rangle. \quad (4)
 \end{aligned}$$

这里 $\theta(u) = \langle [S_{am}^+; e^{uS_{ai}^z} S_{al}^-] \rangle$. 当 $u = 0$ 时, 有 $\theta(0) = 2m$. 为了得到子晶格磁化强度的自洽方程, 必须对 (3) 和 (4) 式的高阶格林函数采取退耦近似. 对不同格点的高阶格林函数, 采用 Tyablikov 退耦近似 [22], 即:

$$\langle \langle S_i^+ S_j^z; e^{uS_i^z} S_l^- \rangle \rangle \simeq \langle S_j^z \rangle \langle \langle S_i^+; e^{uS_i^z} S_l^- \rangle \rangle, \quad i \neq j. \quad (5)$$

对同格点的高阶格林函数, 采用 Callen 退耦近似 [23], 即:

$$\langle \langle S_i^+ S_i^z + S_i^z S_i^+; e^{uS_i^z} S_l^- \rangle \rangle \simeq C_1 \langle \langle S_i^+; e^{uS_i^z} S_l^- \rangle \rangle. \quad (6)$$

这里,

$$C_1 = 2 \langle S_i^z \rangle \left\{ 1 - \frac{1}{2S^2} [S(S+1) - \langle (S_i^z)^2 \rangle] \right\}. \quad (7)$$

注意: 对于同格点退耦, 两个子晶格 C_1 的表达式不一样, 但它们的大小相差一个负号, 即 $C_{1a} = -C_{1b}$.

对于类似 (3) 式中的高阶格林函数 a ,

$$\langle \langle (S_{bm+\rho}^z)^2 (S_{am}^z S_{am}^+ + S_{am}^+ S_{am}^z); e^{uS_{ai}^z} S_{al}^- \rangle \rangle$$

首先近似为

$$\langle \langle (S_{bm+\rho}^z)^2 \rangle \rangle \langle \langle S_{am}^z S_{am}^+ + S_{am}^+ S_{am}^z; e^{uS_{ai}^z} S_{al}^- \rangle \rangle,$$

然后再采用 Callen 退耦近似.

采用上面的退耦近似后, 对格林函数进行空间和时间傅里叶变换, 得到两组代数方程, 易求得傅里叶变换后的格林函数 $g_k(\omega)$ 和 $f_k(\omega)$, 即:

$$g_k(\omega) = \frac{\theta(u)}{2\omega_k} \left(\frac{\omega_k - E_2}{\omega - \omega_k} + \frac{\omega_k + E_2}{\omega + \omega_k} \right),$$

$$f_k(\omega) = \frac{\theta(u)E_4}{2\omega_k} \left(\frac{1}{\omega - \omega_k} - \frac{1}{\omega + \omega_k} \right), \quad (8)$$

这里,

$$\omega_k = \sqrt{E_1^2 - E_2^2},$$

$$E_1 = \left(J_1 - J_2 \frac{\eta^2}{2} \right) zm + J_2 z C_1 \left[\frac{\eta^2}{2} S(S+1) - \frac{\eta^2 + 2}{2} \langle (S_{ai}^z)^2 \rangle \right] + DC_1,$$

$$E_2 = z\eta\gamma_k \left\{ m \left(J_1 + \frac{1}{2} J_2 \right) - \frac{1}{2} J_2 C_1 [3 \langle (S_{ai}^z)^2 \rangle - S(S+1)] \right\}. \quad (9)$$

其中 γ_k 是结构因子, 对于简单立方晶格, $\gamma_k = (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)/3$; z 是最近邻格点数.

令

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle e^{uS_{am}^z} S_{am}^- S_{am}^+ \rangle(k) = \theta(u)\phi. \quad (10)$$

这里 N 是晶格格点数, 求和遍及第一布里渊区. 通过谱定理 [21], 可以求得等时关联函数 $\langle e^{uS_{am}^z} S_{am}^- S_{am}^+ \rangle(k)$. 对 $u = 0$, 则关联函数可以表示为

$$\langle S_{am}^- S_{am}^+ \rangle(k) = 2m \left[\frac{E_1}{2\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2} - \frac{1}{2} \right]. \quad (11)$$

将 (11) 式代入 (10) 式得

$$\phi = \frac{2}{N} \sum_k \frac{E_1}{2\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2} - \frac{1}{2}. \quad (12)$$

利用 $\langle S_i^- S_i^+ \rangle = S(S+1) - \langle S_i^z \rangle - \langle (S_i^z)^2 \rangle$ 的关系, 则子晶格磁化强度的解析表达式可写为

$$m = \frac{(S - \phi)(1 + \phi)^{2S+1} + (S + 1 + \phi)\phi^{2S+1}}{(1 + \phi)^{2S+1} - \phi^{2S+1}}. \quad (13)$$

当温度趋于相变点时, m 是一个小量, 则 (12) 式的自旋波谱也是一个小量. 对 (12) 式右边进行泰勒展开得

$$\phi = \frac{2}{N} \sum_k \frac{E_1}{\beta\omega_k^2}. \quad (14)$$

在这种情况下, (13) 式可近似为

$$m = S(S+1)/(3\phi). \quad (15)$$

联合 (14) 和 (15) 式, 可得系统相变温度的解析表达式, 即:

$$T_N = \frac{S(S+1)}{\frac{2D}{3S} + \left(J_1 - J_2 \frac{\eta^2}{2} \right) z + \frac{2}{9} J_2 z (\eta^2 - 1)} \cdot \frac{1}{\frac{2D}{3S} + \left(J_1 - J_2 \frac{\eta^2}{2} \right) z + \frac{2}{9} J_2 z (\eta^2 - 1) - (z\eta\gamma_k)^2 \left(J_1 + \frac{1}{2} J_2 \right)^2}. \quad (16)$$

3 结果与讨论

由于晶格格点数 N 很大, 因此 (16) 式对 k 在第一布里渊区 ($k_{x,y,z} \in [-\pi, \pi]$) 的求和可以变换为对 k 的连续积分, 即:

$$\frac{1}{N} \sum_k (\dots) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x dk_y dk_z (\dots).$$

接下来, 通过对 (16) 式积分来探讨双二次型交换作用和各向异性对自旋量子数 $S = 1$ 的简单立方晶格反铁磁模型相图的影响.

首先探讨在各向异性确定的条件下, 双二次型交换作用对系统相变温度的影响. 图 1 描述了单粒子各向异性 D 取 0, 1 时, 不同 η (交换各向异性) 值下的相变温度 T_N 与双二次型交换作用 J_2 之间的变化关系. 从总体看, 无论各向异性取何值, T_N 值随着 J_2 增大而变小. 对于确定的 J_2 值, 系统各向异性越强 (即 η 值越小、 D 值越大), T_N 值越大. 当 $\eta = 0$ 时, T_N 与 J_2 之间呈线性关系, 且系统各向异性越强, 它们之间线性关系越明显, 见图 1(b). 当 $\eta \neq 0$ 时, 在 J_2 的临界值 J_2^c 附近 (见图 1(b)), 相变温度曲线下降迅速.

对比铁磁模型的结果发现: 它们之间的差异显著. 对于铁磁模型^[19], 当 D 值确定时, 存在一个 η_c 值, 此时系统 T_N 值不受 J_2 影响, 即在这种情况下,

T_N 值随着 J_2 的增大保持不变. 当 $\eta < \eta_c$ 时, T_N 随着 J_2 的增大而升高; 当 $\eta > \eta_c$, T_N 值随着 J_2 增大而变小. 而反铁磁模型的 T_N 值在 $0 \leq \eta \leq 1$ 的范围内总是随着 J_2 的增大而减小. 同时, 不论各向异性取何值, 铁磁模型的 T_N 与 J_2 之间始终成线性关系^[19]. 而反铁磁模型仅在 $\eta = 0$ 时, 这种线性关系才存在.

下面讨论其它理论在 $J_2 = 0$ 时的相变温度. 当 $D = 0.01$, $\eta = 0$ 时, 相变温度值为 4.005, 其结果比 Linked-cluster series expansion 方法的 3.19^[24] 和 Ratio method 的 3.19^[25] 要大, 比平均场得到的 4.007 略小^[24]. 这是因为, 对于 Ising 模型, 基于格林函数的 Tyablikov 近似与平均场近似是等价的, 但由于本文的单粒子各向异性采用了更精确的 Callen 近似, 所以本文的相变温度值要稍小于平均场的结果. 当 $D = 0$ 时, 本文得到的相变温度 4.0 与平均场近似的结果是相等的. 对于 $D = 0$, $\eta = 1$, 本文得到的相变温度值为 2.64, 其结果接近 Linked cluster series expansion (2.74)^[24], Ratio method (2.72)^[25] 和 High-temperature series expansion method (2.73)^[26].

从图 1 可以发现, 对于确定的各向异性, 存在一个临界的 J_2^c 值. 类似地, 对于确定的 J_2 , 也存在一个临界的各向异性 (本文没有给出 T_N 与 η 的相图, 原因是其结果与图 1 的结果重复). 这意味着对于一个确定 D , 存在一组 η 和 J_2 数据, 这组数据得到的曲线是系统从有序向无序转变的临界曲线.

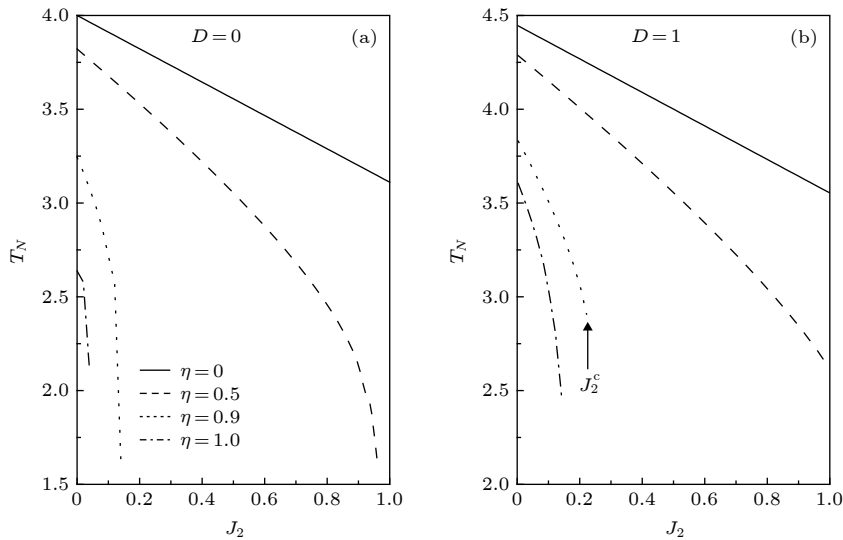


图 1 当单粒子各向异性参数 D 取 0 和 1 时, 交换各向异性参数 η 为 0, 0.5, 0.9, 1 下相变温度 T_N 与双二次型交换作用 J_2 之间的关系曲线

Fig. 1. Néel temperature as a function of biquadratic exchange for the exchange anisotropic parameter $\eta = 0, 0.5, 0.9, 1$ when the single-ion anisotropic parameter $D = 0$ and 1.

图 2 给出了当 D 取 0, 1 时, 系统在参数 η 和 J_2 空间中的相图, 它清晰地给出了不同 η 和 J_2 值时, 系统有序和无序转变的边界. 对于确定的 η 和 J_2 , 系统有序区域会随着单粒子各向异性增强而变大. 这是因为各向异性越强, 其抑制系统扰动能力越强, 导致了越大的相变温度 (见图 1), 这意味着系统有序区域变大. 正是由于这个原因, 对于确定的单粒子各向异性, 有序区域会随着 η 的变小 (越小的 η 对应着越强的各向异性) 而增大. 而系统的相变温度随着 J_2 增大而下降, 这表明 J_2 增大使得系统有序区域变小. 这表明对于确定的单粒子各向异性, 系统有序区域的大小实际上是 η 与 J_2 之间相互竞争的结果, 即: 在 J_2 值比较小时, 系统各向异性 η 占据主导作用, 于是图 2 中的有序区域随着 η 的变小而增大. 当它们之间竞争达到最大时, 系统有序区域大小也随之达到最大. 之后随着 J_2 的增大, 系统有序区域变小, 此时 J_2 占据主导作用. 于是系统各向异性在达到最强的过程中 (即 $\eta \rightarrow 0$), 有序区域一直在变小.

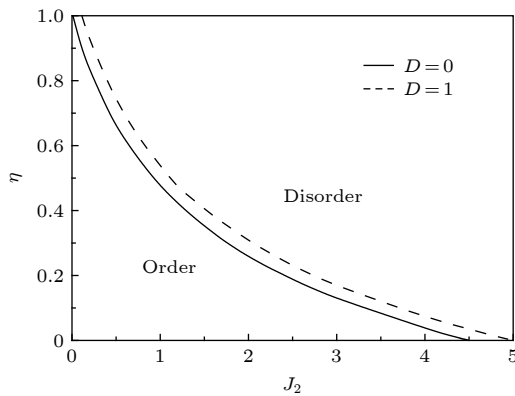


图 2 当 $D = 0, 1$ 时, 系统在参数 η 和 J_2 空间中的相图
Fig. 2. Phase diagram of the $D = 0, 1$ in the η and J_2 parameter space.

4 结 论

本文采用双时格林函数方法, 对不同格点的高阶格林函数采用 Tyablikov 退耦近似, 对于同格点的高阶格林函数采用 Callen 退耦近似, 推导得到了子晶格磁化强度和相变温度的解析表达式. 通过

数值计算, 详细探讨了双二次型交换作用和各向异性对系统相图的影响. 结果表明: 相变温度随着各向异性的增强而升高, 但随着双二次型相互作用的增强而下降. 当 $J_2 = 0$ 时, 本文的相变温度值与其它理论结果一致.

感谢清华大学物理系王怀玉教授的讨论.

参考文献

- [1] Anderson P W 1959 *Phys. Rev.* **115** 2
- [2] Huang N L, Orbach R 1964 *Phys. Rev. Lett.* **12** 275
- [3] Allan G A T, Betts D D 1967 *Proc. Phys. Soc. London* **91** 341
- [4] Joseph R I 1965 *Phys. Rev.* **138** 1441
- [5] 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
- [6] Mila F, Zhang F C 2000 *Eur. Phys. J. B* **16** 7
- [7] Luo C, Datta T, Yao D X 2016 *Phys. Rev. B* **93** 235148
- [8] Wysocki A L, Belashchenko K D, Antropov V P 2011 *Nat. Phys.* **7** 485
- [9] Ergueta P B, Nevidomskyy A H 2015 *Phys. Rev. B* **92** 165102
- [10] Zhuo W Z, Qin M H, Dong S, Li X G, Liu J M 2016 *Phys. Rev. B* **93** 094424
- [11] Yu R, Si Q M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 116401
- [12] Köbler U, Mueller R M, Schmelle W, Fischer K 1998 *J. Magn. Magn. Mater.* **188** 333
- [13] Köbler U, Hoser A, Kawakami M, Chatterji T, Rebizant J 1999 *J. Magn. Magn. Mater.* **205** 343
- [14] Yu R, Nevidomskyy A H 2016 *J. Phys. Condens. Matter* **28** 495702
- [15] Chen H H, Levy P M 1973 *Phys. Rev. B* **7** 4267
- [16] Iwashita T, Uryu N 1976 *Phys. Rev. B* **14** 3090
- [17] Oitmaa J, Hamer C J 2013 *Phys. Rev. B* **87** 224431
- [18] Rabuffo I, De Cesare L, D'Auria A C, Meraldo M T 2019 *Eur. Phys. J. B* **92** 154
- [19] Chaddha G S, Sharma A 1999 *J. Magn. Magn. Mater.* **191** 373
- [20] Stanek D, Sushkov O P, Uhrig G S 2011 *Phys. Rev. B* **84** 064505
- [21] Wang H Y 2012 *Green's Function in Condensed Matter Physics* (Beijing: Alpha Science International Ltd and Science Press) p348
- [22] Wang H Y, Xia Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5466 (in Chinese) [王怀玉, 夏青 2007 物理学报 **56** 5466]
- [23] Callen H B 1963 *Phys. Rev.* **130** 890
- [24] Pan K K 2009 *Phys. Rev. B* **79** 134414
- [25] Gaunt D S, Guttman A J. 1974 *Phase Transitions and Critical Phenomena* (New York: Academic Press) p456
- [26] Pan K K 2005 *Phys. Rev. B* **71** 134524

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

Wen Lin Hu Ai-Yuan[†]*(College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)*

(Received 12 January 2020; revised manuscript received 24 March 2020)

Abstract

The existence of biquadratic exchange had been well established by Anderson, Huang and Allen. Early investigations indicated that the biquadratic exchange term in spin Hamiltonian was found to have significant effects on the magnetic properties of compounds containing iron-group ions or rare-earth metal ions. Recently, studying the anisotropic magnetic excitation of iron-based superconducting materials indicated that the experimental phenomenon cannot be explained well only by a simple collinear Heisenberg antiferromagnetic model. However, if the nearest neighbor biquadratic spin coupling is introduced, the experiment can be well explained. Similar results had also been obtained in the investigation of the superconducting material FeSe. As a result, exploring the effect of biquadratic exchange interactions on the magnetic properties of magnetic systems is significance. In this paper, we use the double-time Green's function method to study the properties of the spin-1 Heisenberg antiferromagnets with biquadratic exchange interactions and anisotropy on a three-dimensional lattice. We derive the equation of motion of the Green's function by a standard procedure. In the course of this, the higher order Green functions have to be decoupled. For the higher order Green functions of different lattice points, a Tyablikov or random phase approximation decoupling are used to decouple. For the higher order Green functions of the same lattice points, we adopt the Anderson-Callen decoupling to decouple. Based on the above procedures, the analytic expressions of the magnetization and critical temperature are obtained. The effects of biquadratic exchange interactions and anisotropy on the critical temperature are discussed in detailed. Our results show that the critical temperature increases with the increase of the anisotropy for a given biquadratic interaction. Regardless of the value of the anisotropy, the critical temperature always decreases with the increase of the biquadratic interaction. As the value of anisotropic parameter $\eta = 0$, there is an obvious linear relationship between the critical temperature and the biquadratic interaction. However, when the anisotropy of the system becomes weaker, there is no such linear relationship between them. By comparing similar ferromagnetic models, it is found that the results of this paper are significantly different from those of the ferromagnetic model. When the biquadratic interaction is equal to 0, our results agree with other theoretical results.

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.69.20200077

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11875010), and the Chongqing Natural Science Foundation (Grant Nos. cstc2019jcyj-msxmX0217, cstc2019jcyj-msxmX0251).

[†] Corresponding author. E-mail: huaiyuanhuyuanai@126.com