文章编号: 1000-5862(2012)04-0376-03

具有 Dzyaloshinskii-Moriya 作用和晶体场作用的 Heisenberg 模型的临界性质

孙光厚, 刘坚强, 潮兴兵, 谢卫军

(九江学院理学院, 江西 九江 332005)

摘要: 利用平均场近似的方法, 研究了具有 Dzyaloshinskii-Moriya(DM)作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 Heisenberg 模型的临界性质, 得到了该系统的相图. 研究结果表明: 所研究系统存在三临界点, 并且约化晶体场作用参量和约化 DM 作用参量分别连续变化时, 系统的三临界温度不随相应参量单调变化, 约化三临界温度分别存在一个最小值. 系统的这种临界性质可以解释为系统的交换耦合作用、晶体场作用 DM 作用之间相互竞争的结果.

关键词: Heisenberg 模型; Dzyaloshinskii-Moriya 作用; 晶体场作用; 三临界点; 平均场近似
中图分类号: O 414.13 文献标志码: A

0 引言

量子 Heisenberg 模型是一种典型的自旋模型, 在研究磁性材料的临界性质时得到广泛应用, 很多学者对该模型进行了研究[1-4]. 实验表明, 各向异性作用在磁性材料中是普遍存在的, 对系统的性质有重要影响. 因此, 为了更好地研究自然界中物理系统的相变问题, 可以在 Heisenberg 哈密顿量中引入不同的各向异性作用. 具有 Dzyaloshinskii-Moriya(DM) 作用[5-6]的 Heisenberg 模型被广泛研究, 得到了丰富的临界现象[7-8]. 另外单粒子单轴各向异性作用也称为晶体场作用在磁性材料中也往往存在, 它们互相制约和影响, 对系统的临界性质都有重要的作用, 因此在 Heisenberg 模型中同时考虑这 2 种各向异性很有必要.

本文利用平均场理论的方法研究了简立方晶格上具有 DM 作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 Heisenberg 模型的临界性质, 研究了各向异性作用对临界性质的影响和作用, 并得到了系统的相图.

1 模型与计算

具有 DM 作用和纵向晶体场作用的 Heisenberg 模型的哈密顿量可写为

$$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}\left[\gamma\left(S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\right)+S_i^zS_j^z\right]-\sum_{\langle ij\rangle}\vec{D}_{ij}\cdot\left(\vec{S}_i\times\vec{S}_j\right)+\varDelta\sum_i\left(S_i^z\right)^2,$$

其中 J 是最近邻自旋对的耦合系数, γ 是各向异性参量, $\vec{S}_i$ 和 $S_i^\alpha(\alpha=x,y,z)$ 分别表示格点 i 上自旋 $S=1$ 的自旋算符和自旋分量, $\sum_{<ij>}$ 表示晶格上所有的最近邻自旋求和, $\varDelta$ 是晶体场作用参量, $\vec{D}_{ij}$ 为 DM 作用参量.

根据平均场理论, 沿着 $\hat{z}$ 方向的平均磁矩 $m=\left\langle\left(S_1^z+S_2^z\right)/2\right\rangle$, 并且取 $\vec{D}_{ij}=D\hat{z}$, 又因 $\vec{D}_{ij}=-\vec{D}_{ji}$, 则二自旋集团的哈密顿量可写为

$$H_{12}^{\mathrm{MFA}}=-J\left[\gamma\left(S_1^xS_2^x+S_1^yS_2^y\right)+S_1^zS_2^z\right]-D\left(S_1^xS_2^y-S_1^yS_2^x\right)+\varDelta\left[\left(S_1^z\right)^2+\left(S_2^z\right)^2\right]-J\left(q-1\right)m\left(S_1^z+S_2^z\right),$$

其中 q 表示自旋配位数.

在 S_1^z 与 S_2^z 的直积表象中, 可计算得到二自旋集团的配分函数

收稿日期: 2012-03-19
基金项目: 江西省自然科学基金(20114BAB212001)资助项目.
作者简介: 孙光厚(1981-), 男, 山东阳谷人, 讲师, 硕士, 主要从事相变与临界现象的研究.

$$Z(m,T)=\exp(-2K\Delta_0)\Big\{\exp(-K)+$$
$$2\exp(K\Delta_0)\cosh\Big[K\Big((q-1)m+\sqrt{D_0^2+\gamma^2}\Big)\Big]+$$
$$2\exp(K)\cosh\big[2K(q-1)m\big]+$$
$$2\exp(K\Delta_0)\cosh\Big[K\Big((q-1)m-\sqrt{D_0^2+\gamma^2}\Big)\Big]+$$
$$2\exp\Big[\frac{K}{2}\sqrt{8\big(D_0^2+\gamma^2\big)+(2\Delta_0-1)^2}\Big]\cosh\Big[K\Big(\Delta_0-\frac{1}{2}\Big)\Big]\Big\},$$

其中 $K=\beta J$ ($\beta=(k_BT)^{-1}$， k_B 为玻尔兹曼常量), $D_0=D/J$ 和 $\Delta_0=\Delta/J$ 分别是约化 DM 作用参量和约化晶体场作用参量.

系统中一个二自旋集团的自由能可写为

$$F(m,T)=J(q-1)m^2-\beta^{-1}\ln Z(m,T),$$

无量纲化的自由能为

$$f(m,T)=F(m,T)/J=(q-1)m^2-K^{-1}\ln Z(m,T).\quad(1)$$

在磁化强度 $m=0$ 邻域把(1)式右边按照朗道序参量级数展开, 自由能表达式可写为

$$f(m_0,T)\approx f(0,T)+\frac{1}{2}(1-a)m_0{}^2-\frac{1}{4}bm_0{}^4-\frac{1}{6}cm_0{}^6+\cdots$$

利用朗道相变理论分析可知, 当 $a=1$， $b<0$ 时系统存在二级相变, 当 $a=1$， $b>0$ 时系统存在一级相变. 则点 $a=1$， $b=0$ 是系统发生二级相变和一级相变的过渡点, 即 $a=1$， $b=0$ 对应系统的三临界点.

2　结果及讨论

现在讨论简立方晶格($q=6$)上具有 DM 作用和纵向晶体场作用的 Heisenberg 模型的临界性质.

通过前面平均场近似和朗道相变理论的分析, 可知当 $a=1$， $b=0$ 时系统出现三临界点. 研究发现, 当约化晶体场参量 Δ_0 取确定值时, 改变各向异性参量 γ, 系统的约化三临界温度 k_BT_t/J 不变, 但是约化三临界 DM 作用参量 D_t/J 发生相应的变化, 如当 $\Delta_0=0$， $\gamma=1$ 时， $D_t/J=4.301$， $k_BT_t/J=1.708$;当 $\Delta_0=0$, $\gamma=0$ 时， $D_t/J=4.416$， $k_BT_t/J=1.708$, 该结果与平均场理论研究具有 DM 作用的 Heisengberg 模型的结果是一致的[6].

现在讨论当 $\gamma=1$ 时(各向同性 Heisenberg 模型)所研究系统的临界性质. 当约化晶体场参量 Δ_0 取不同值时, 通过解关系式 $a=1$ 且 $b<0$ 可得到所对应的系统的二级相变线, 当 $\Delta_0=-1.0$、0、1.27、2.0 时, 二级相变线如图 1 中实线所示. 另外, 当 Δ_0 取连续的一系列值时, 根据 $a=1$ 和 $b=0$ 可以得到一系列的三临界点, 这些三临界点组成一条三临界线, 如图 1 中的虚线所示, 从图 1 可看出三临界点不随约化晶体场作用参量 Δ_0 单调变化, 三临界线是一条曲线, 并且约化三临界温度存在一个最小值, 该值为 1.265. 另外, 当 $\Delta_0=0$ 时, 三临界点对应的参量为($k_BT_t/J=1.708$, $D_t/J=4.301$), 该结果与文献[6]的结果一致.

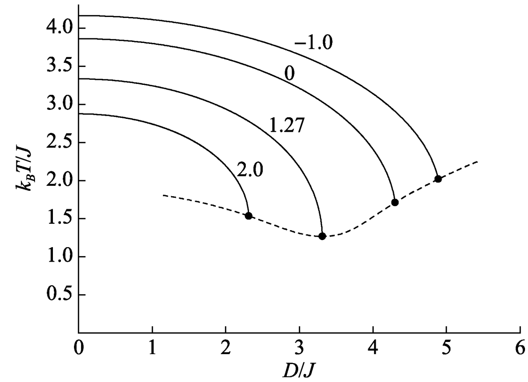

图 1　对于不同Δ/J, 具有 **DM** 作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 **Heisenberg** 模型的相图

通过解关系式 $a=1$ 且 $b<0$ 也可得到具有大小不同的约化 DM 作用时系统的二级相变线, 当 D_0=0、2.0、3.31、4.0 时, 系统的二级相变线如图 2 中的实线所示. 此时, 可得到系统相应的三临界点, 当 D_0 从零开始取连续的一系列值时, 得到一条三临界线为曲线, 如图2 中的虚线所示, 约化三临界温度也是有一个最小值, 其值也为 $k_BT_t/J=1.265$.

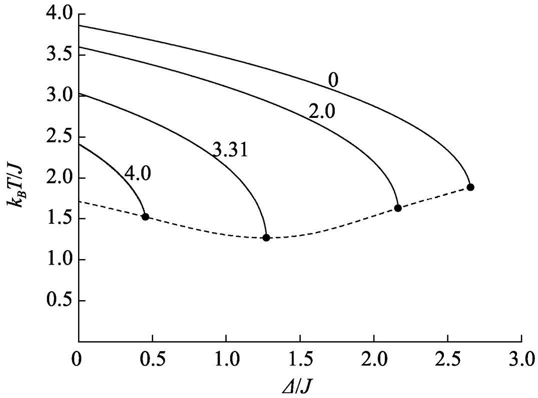

图 2　对于不同Δ/J, 具有 **DM** 作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 **Heisenberg** 模型的相图

3　结论

本文应用平均场近似的方法, 研究了具有 DM

作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 Heisenberg 模型的临界性质，得到了系统的相图．研究发现，具有 DM 作用和纵向晶体场作用的自旋 S=1 的 Heisenberg 模型有丰富的临界性质，系统存在三临界点，并且约化晶体场作用参量 Δ/J 和约化 DM 作用参量 D/J 分别连续变化时，系统的三临界温度不随约化相应参量单调变化，约化三临界温度存在一个最小值．系统的这种热力学性质可以解释为系统的交换耦合作用、晶体场作用和 DM 作用之间相互竞争的结果，特别是各向异性作用(晶体场作用和 DM 作用)对系统的临界性质有重要影响.

4 参考文献

[1] Leptit M B, Manousakis E. Real-space renormalization-group studies of low-dimensional quantum antiferromagnets [J]. Physical Review B, 1993, 48(2): 1028-1035.

[2] Fishman R S, Liu S H. Nonlinear dynamics of a Heisenberg ferromagnet [J]. Physical Review B, 1992, 45(10): 5414-5427.

[3] Liu Ruijie, Chen Tianlun. Study of the quantum spin Heisenberg model with variational-cumulant expansion to the third order [J]. Physical Letter A, 1994, 194(1/2): 137-140.

[4] Suzuk N. Phase transition of the S=1/2 quantum anisotropic Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice [J]. Physical Review B, 1995, 51(10): 6402-6410.

[5] Dzyaloshinsky I. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics [J]. Journal of Physical Chemistry Solids, 1958, 4(4): 241-245.

[6] Moriya T. New mechanism of anisotropic superexchange interaction [J]. Physical Review Letter, 1960, 4(5): 228-230.

[7] Ricardo de Sousa J, de Albuquerque D F, Fittipaldi I P. Tricritical behavior of a heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction [J]. Physical Letter A, 1994, 191(3/4): 275-278.

[8] Sun Guanghou, Kong Xiangmu. Phase diagram and tricritical behavior of the spin-1 Heisenbergmodel with Dzyaloshinskii–Moriya interactions [J]. Physica A, 2006, 370(2): 585-590.

The Critical Properties of the Heisenberg Model with the Dzyaloshinskii-Moriya and Crystal Field Interactions

SUN Guang-hou, LIU Jian-qiang, CHAO Xing-bing, XIE Wei-jun

(School of Science, Jiujiang University, Jiujiang Jiangxi 332005, China)

Abstract: Using the mean-field method, the Heisenberg model with the Dzyaloshinskii-Moriya (DM) and crystal field interactions has been studied. The phase diagrams of this system are obtained, and it is found that the system exhibits the tricritical point. When the reduced DM interaction parameter and the reduced crystal field interaction parameter change separately and continuously, the tricritical temperature doesn’t monotonously change, and has a minimum. The critical properties of the system may be interpreted as a result of a competition among the exchange interaction, the crystal field interaction and the DM interaction.

Key words: Heisenberg model; Dzyaloshinskii-Moriya interaction; crystal interaction; tricritical point; mean-field method

(责任编辑：冉小晓)