

ВПЛИВ ПОЗДОВЖНЬОГО МАГНЕТНОГО ПОЛЯ НА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ XXZ -МОДЕЛІ З МАГНЕТНОЮ АНІЗОТРОПІЄЮ ТИПУ ЛЕГКА ВІСЬ. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Р. Р. Левицький, О. Р. Баран

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

вул. Свєнцицького, 1, 79011, Львів

(Отримано 4 грудня 2003)

У кластерному наближенні досліджено вплив поздовжнього магнетного поля на термодинамічні характеристики XXZ -моделі феромагнетика з анізотропією типу легка вісь. Установлено межі застосовності наближення двочастинкового кластера для цієї моделі на різних типах ґраток.

Ключові слова: XXZ -модель, поздовжнє магнетне поле, кластерне наближення.

PACS number: 75.10.Jm

I. ВСТУП

У цій статті автори продовжують дослідження термодинамічних характеристик спін-1/2 XXZ -моделі, гамільтоніян якої має вигляд:

$$H = - \sum_{i=1}^N h S_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\delta=1}^{\Delta} K \left[S_i^z S_{i+\delta}^z + \alpha (S_i^x S_{i+\delta}^x + S_i^y S_{i+\delta}^y) \right]. \quad (1.1)$$

Тут h — поздовжнє зовнішнє магнетне поле, K — короткосяжна взаємодія, α — параметр магнетної анізотропії, Δ — число найближчих сусідів, S_i^a ($a = x, y, z$) — a компоненти оператора спіну на вузлі i . У попередніх публікаціях [1, 2] встановлено, що для XXZ -моделі феромагнетика ($K > 0$) з анізотропією типу легка вісь ($0 \leq \alpha \leq 1$) при інфінітезимальному поздовжньому полі ($h \rightarrow 0$) задовільний опис основних термодинамічних функцій у позакритичній ділянці для одновимірного ланцюжка ($\Delta = 2$), двовимірних сотовидної ($\Delta = 3$) та квадратної ($\Delta = 4$) ґраток, а також тривимірних ґраток ($\Delta \geq 6$) можна отримати в наближенні двочастинкового кластера (НДК). Винятком є лише вузька низькотемпературна ділянка при значеннях магнетної анізотропії, коли модель близька до ізотропної моделі Гайзенберга. Чим більше значення параметра α наближається до одиниці, тим ширшою є ця низькотемпературна ділянка, на якій НДК дає нефізичні результати. Це пов'язано з тим, що кластерне наближення некоректно враховує квантові флюктуації, які є суттєвими при низьких температурах [1–3]. Слід зауважити, що при значеннях параметрів Δ та α , за яких у системі зі зменшенням температури відбувається фазовий перехід із парамагнетної у феромагнетну фазу (для $\Delta \geq 6$ при $\alpha \leq 1$; для $\Delta = 3$ та $\Delta = 4$ при $\alpha < 1$), температура, нижче від якої недоцільно використовувати кластерне наближення, є суттєво меншою від температури цього фазового переходу [1, 2].

Важливим є те, що НДК, яке є простим двочастинковим узагальненням наближення молекулярного поля, на відміну від нього, у випадку вказаних типів ґраток коректно реагує на зміну параметра магнетної анізотропії та розмірності системи [1, 4] (див. також рис. 1). Зокрема у випадку інфінітезимального магнетного поля в НДК не передбачається феромагнетного впорядкування при ненульових температурах для одновимірного ланцюжка при $0 \leq \alpha \leq 1$ і двовимірних сотовидної та квадратної ґраток при $\alpha = 1$, що є точним результатом.

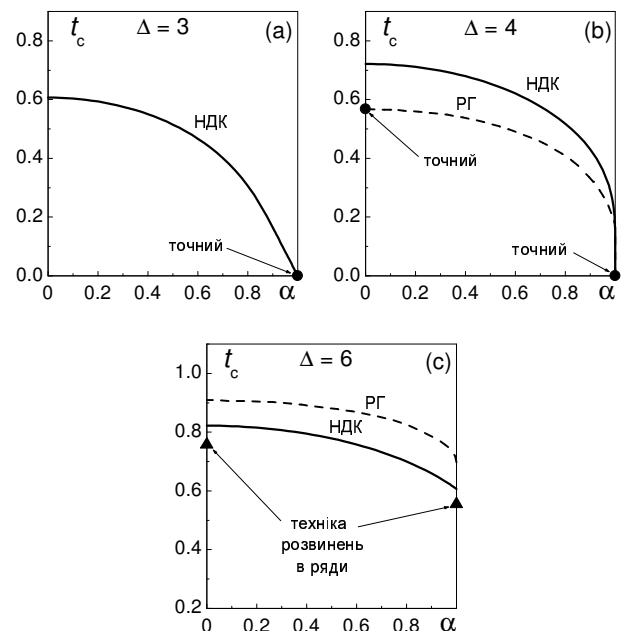


Рис. 1. Фазові діаграми в площині температура ($t = 4 \frac{k_B T}{K \Delta}$) — магнетна анізотропія для сотовидної, квадратної та простої кубічної ґраток при інфінітезимальному поздовжньому полі, отримані в НДК [1, 4] (суцільні лінії) та методом ренормалізаційних груп [5, 6] (штрихи). Температури фазових переходів для моделі Ізинґа та ізотропної моделі Гайзенберга, отримані на основі техніки розвинень у ряди (трикутники, див. [5]) та точні (кружечки, див. [6, 7]).

У цій роботі ми дослідимо вплив поздовжнього магнетного поля на термодинамічні властивості XXZ -моделі феромагнетика з анізотропією типу легка вісь.

II. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Вільна енергія XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь в НДК має вигляд [1]:

$$F = -k_B T N \left[(1 - \Delta) \ln \left(2 \cosh \left(\frac{1}{2} \beta \tilde{\chi} \right) \right) \right. \quad (2.2)$$

$$\left. + \frac{\Delta}{2} \ln \left(2 e^{\beta K/4} L(\tilde{\chi}) \right) \right];$$

$$L(\tilde{\chi}) = \cosh(\beta \tilde{\chi}) + e^{-\beta K/2} \cosh(\beta \alpha K/2). \quad (2.3)$$

Тут $\beta = (k_B T)^{-1}$, $\tilde{\chi} = h + \varphi \Delta$, $\tilde{\tilde{\chi}} = h + \varphi(\Delta - 1)$. Для кластерного поля (варіаційного параметра) φ маємо рівняння [1]:

$$\text{th} \left(\frac{1}{2} \beta \tilde{\tilde{\chi}} \right) = \frac{\sinh(\beta \tilde{\chi})}{L(\tilde{\chi})}, \quad (2.4)$$

а для параметра порядку $m = 2 \langle S^z \rangle$ — вираз:

$$m = \text{th} \left(\frac{1}{2} \beta \tilde{\tilde{\chi}} \right). \quad (2.5)$$

Розгляньмо тепер результати числового дослідження впливу поздовжнього магнетного поля h на термодинамічні характеристики XXZ -моделі з магнетною анізотропією типу легка вісь. При наборах параметрів моделі, за яких у випадку $h \rightarrow 0$ у системі відбувається температурний фазовий перехід із феромагнетної фази в парамагнетну, включення магнетного поля розмиває цей фазовий перехід (див. рис. 2). При низьких температурах поведінка термодинамічних характеристик є властивою феромагнетній фазі ($m(T)$ — спадна, опукла вгору функція; $\chi^{-1}(T)$ — спадна; $C(T)$ — зростаюча), а при високих — “парамагнетній” ($m(T)$ — спадна, опукла вниз функція; $\chi^{-1}(T)$ — зростаюча; $C(T)$ — спадна).

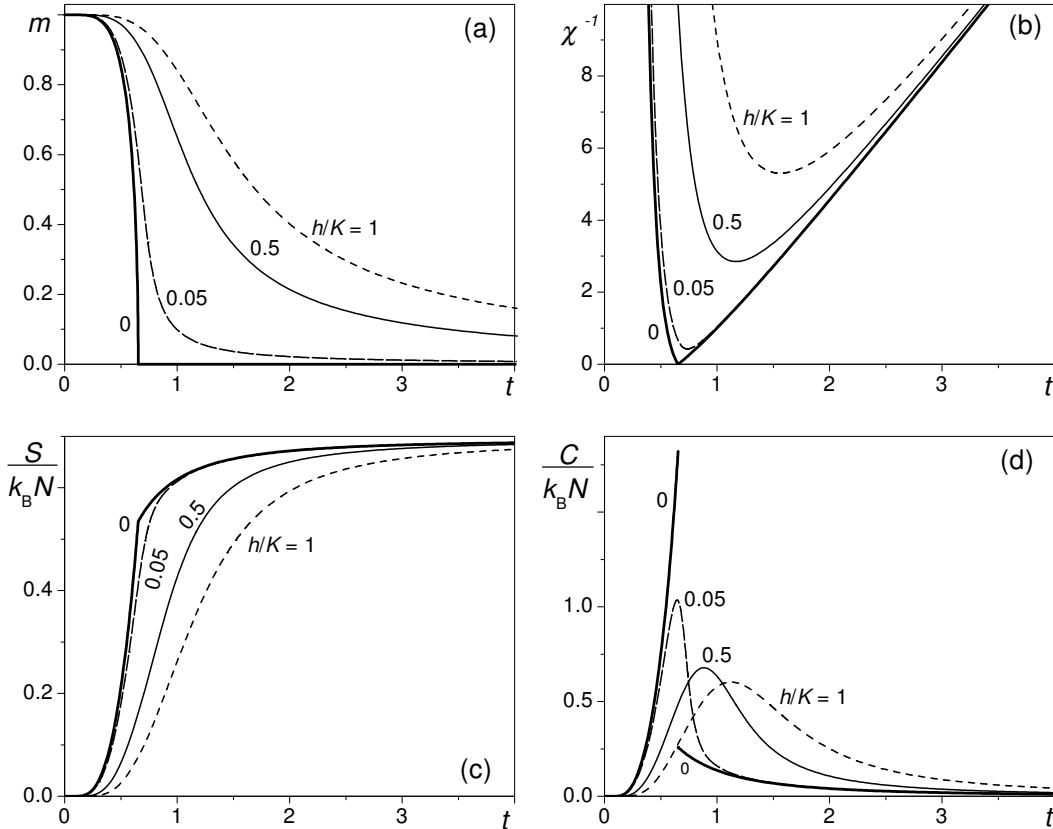


Рис. 2. Температурні ($t = 4 \frac{k_B T}{K \Delta}$) залежності намагненості $m = 2 \langle S^z \rangle$, оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1} , ентропії S та теплоємності C для $\alpha = 0.5$, $\Delta = 4$ при різних значеннях магнетного поля $h/K \rightarrow 0, h/K = 0.05, 0.5, 1.0$. Результати НДК.

При наборах параметрів моделі, за яких у випадку інфінітезимального магнетного поля система при ненульових температурах перебуває в парамагнетній

фазі, включення магнетного поля індукує ненульову намагненість при ненульових температурах (див. рис. 3). Причому, як і у попередньому випадку, за ни-

зьких температур поведінка термодинамічних характеристик є притаманною феромагнетній фазі, а при високих — “парамагнетній”. На рис. 3 (а) наведено також результати моделювання Монте-Карло [8] для намагченості. З нього видно, що за високих температур при будь-яких значеннях поздовжнього магнетного поля та при великих значеннях h навіть за достатньо низьких температур результати кластерного наближення добре кількісно узгоджуються з результатами моделювання Монте-Карло [8].

Слід зауважити, що при значеннях магнетної анізотропії, коли модель близька до ізотропної моделі Гайзенберга, при малих полях кластерне наближення передбачає нефізичні результати на низькотемпературній ділянці. Наприклад, див. рис. 3, у випадку ізотропної моделі Гайзенберга на квадратній ґратці при $h \rightarrow 0$ ентропія не прямує до нуля при $T \rightarrow 0$; при $h/K = 0.05$ теплоємність за низьких температур не є зростаючою функцією температури.

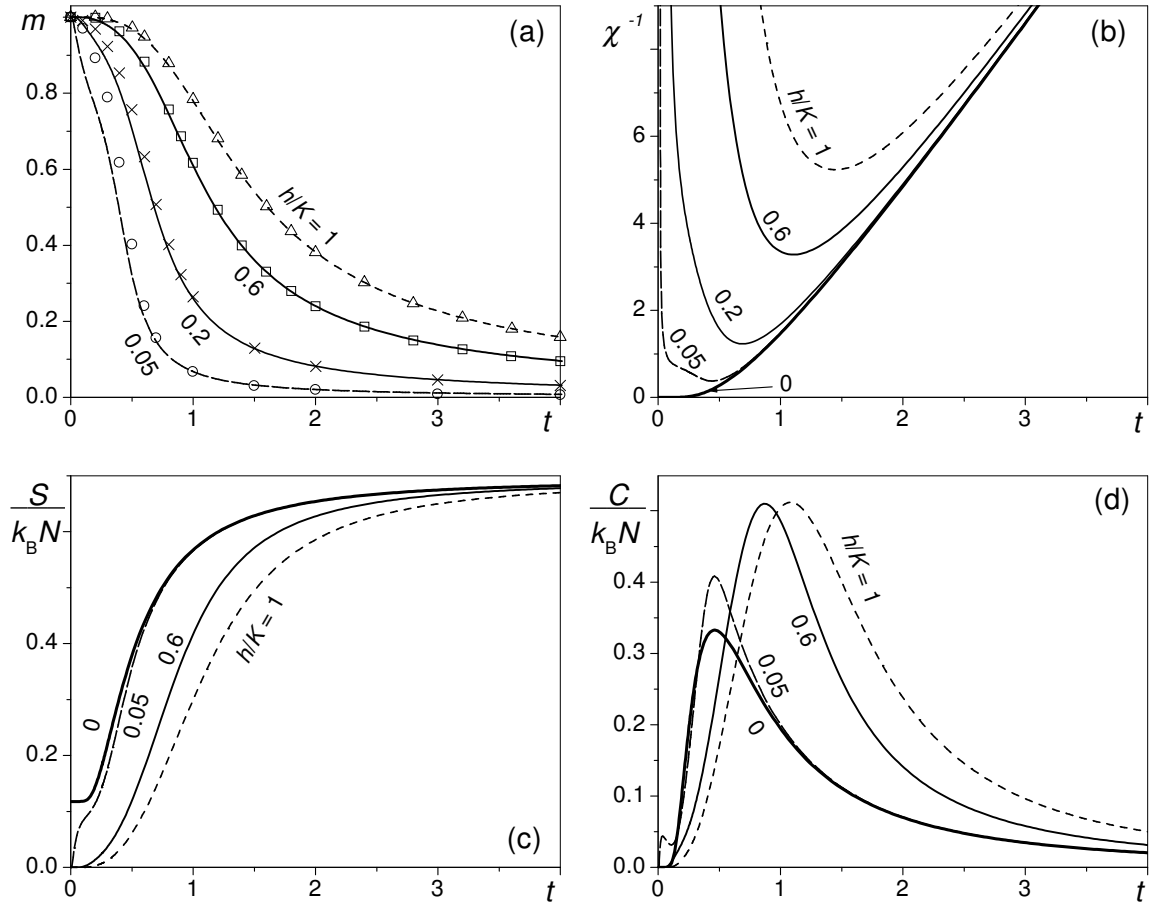


Рис. 3. Температурні ($t = 4 \frac{k_B T}{K \Delta}$) залежності намагченості $m = 2\langle S^z \rangle$, оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1} , ентропії S та теплоємності C для $\alpha = 1.0$, $\Delta = 4$ при різних значеннях магнетного поля $h/K \rightarrow 0$, $h/K = 0.05$, 0.2 , 0.6 , 1.0 . Результати НДК (лінії) та методу моделювання Монте-Карло [8] (кружечки, трикутники, і т. д.).

III. ВИСНОВКИ

Досліджено вплив поздовжнього магнетного поля на термодинамічні характеристики XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь. Установлено, що наближення двочастинкового кластера якісно правильно описує температурні та польові залежності основних термодинамічних функцій моделі для одновимірного ланцюжка, двовимірних сотовидної та квадратної

ґраток і тривимірних ґраток. Винятком є лише вузька низькотемпературна ділянка при значеннях магнетної анізотропії, коли модель близька до ізотропної моделі Гайзенберга. Чим більшим є поздовжнє магнетне поле, тим вузьча є ця низькотемпературна ділянка, на якій кластерне наближення передбачає нефізичні результати через некоректне врахування ним квантових флюктуацій.

- [1] Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, О. Р. Баран, И. М. Пиндзин, Журн. фіз. досл. **2**, 391 (1998).
- [2] Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, О. Р. Баран, И. М. Пиндзин, препринт ICMP-97-21U (1997).
- [3] В. Г. Вакс, Н. Е. Зейн, Журн. эксп. теор. физ. **67**, 1082 (1974).
- [4] J. A. Plascak, Phys. Status Solidi (b) **124**, K35 (1984).
- [5] A. M. Mariz, R. M. Zorzenon Dos Santos, C. Tsallis, R. R. Dos Santos, Phys. Lett. A **108**, 95 (1985).
- [6] A. M. Mariz, C. Tsallis, A. O. Caride, J. Phys. C **18**, 4189 (1985).
- [7] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [8] P. Henelius, A. W. Sandvik, C. Timm, S. M. Girvin, preprint cond-mat/9903148 (1999).

**LONGITUDINAL MAGNETIC FIELD EFFECT ON THERMODYNAMIC
PROPERTIES OF THE XXZ -MODEL WITH EASY-AXIS TYPE MAGNETIC
ANISOTROPY. THE TWO-PARTICLE CLUSTER APPROXIMATION**

R. R. Levitskii, O. R. Baran
Institute for Condensed Matter Physics
1 Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine
e-mail: ost@icmp.lviv.ua

Within cluster approximation the longitudinal magnetic field effect on thermodynamic characteristics of the ferromagnetic XXZ -model with the easy-axis type anisotropy was studied. Applicability region of the two-particle cluster approximation was established for different lattice types.