

双模随机交错晶场中最近邻弱交换 相互作用对重入现象的影响^{*}

李晓杰¹, 王渺渺¹, 李新军¹, 刘萍^{2†}, 陈文龙³

1. 齐鲁理工学院, 济南 250200;

2. 齐鲁师范学院 文学院, 济南 250200;

3. 临邑师范学校, 德州 251500

收稿日期: 2019-10-13; 接收日期: 2020-06-11

【摘要】 利用有效场理论研究了双模随机交错晶场中混合自旋 Blume-Capel 模型纳米管系统的重入现象, 发现了系统的重入现象与晶场取值概率、晶场强度和外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用的关系. 结果表明: 取值概率、交换相互作用、晶场强度和温度等诸多因素相互竞争, 使系统表现出丰富的磁化现象: 正(负)晶场较弱时, 系统只发生二级相变; 随着正(负)晶场增强, 系统的二级相变消失, 呈现一级相变; 一定条件下, 系统会出现重入现象.

关键词: 重入现象, 磁化强度, 有效场理论, Blume-Capel 模型, 纳米管

PACS: 75.10.Hk, 75.75.-c, 73.73.Fg

DOI: 10.13380/j.ltpl.2020.01.005

The Effect of the Nearest Neighbor Weak Exchange Interaction on the Reentrant Phenomenon in the Bimodal Random Interleaved Crystal Field

LI XiaoJie¹, WANG Miaomiao¹, LI Xinjun¹, LIU Ping^{2†}, CHEN Wenlong³

1. Qilu Institute of Technology, Jinan, 250200;

2. Qilu Normal University Chinese Literature, Jinan, 250200;

3. Linyi normal school, Dezhou, 251500

Received date: 2019-10-13; accepted date: 2020-06-11

【Abstract】 The reentrant phenomenon of hybrid spin Blume-Capel nanotube system in a bimodal random staggered crystal field is studied by using the effective field theory. The results show that the system exhibits abundant magnetization due to the competition among various factors, such as value probability, exchange interaction, crystal field strength and temperature. With the enhancement of the positive (negative) crystal field, the second-order phase transition disappeared and the first-order phase transition appeared. Under certain conditions, the system will present the reentrant phenomenon.

Keywords: reentrant phenomenon, magnetization, effective field theory, Blume-Capel model, nanotube

PACS: 75.10.Hk, 75.75.-c, 73.73.Fg

^{*} 齐鲁理工学院科技计划项目(QL19K060)资助的课题.

[†] 416010952@qq.com

DOI: 10.13380/j.ltpl.2020.01.005

Reference method: LI XiaoJie, WANG Miaomiao, LI Xinjun, LIU Ping, CHEN Wenlong, Low. Temp. Phys. Lett. **42**, 38 (2020)

1 引言

在 1966 年, Blume 和 Capel 创建了新的物理模型, 被命名为 Blume-Capel 模型^[1,2], 简称 BC 模型. 多种晶格上 BC 模型的磁化性质、热力学性质和相图被研究. 然而最近几年来, 磁性纳米材料逐渐成为科学研究的一个焦点. Zaim 等人研究了外磁场满足三模分布时纳米管上 Ising 模型的磁化性质、热力学性质和相图^[3], 结果显示纳米管外壳层和内壳层自旋间交换相互作用强度和外磁场影响系统的磁化强度、热力学性质及相变. Osman 等人分别讨论了纳米管中单自旋系统和混合自旋系统的磁化强度、磁化率、热力学性质和相图^[4-6], 研究了晶场强度对系统磁化性质的影响, 发现系统存在一级相变和二级相变. T. Kaneyoshi 讨论了纳米管中磁化率随温度的变化^[7], 发现最近邻自旋间交换相互作用会影响系统的磁化率. 文献[8]结果显示双模随机晶场中 BC 模型的磁化强度和相变性质, 发现了系统的磁化强度与温度和随机晶场的关系, 结果表明系统在稀释晶场、交错晶场和同向晶场中会表现出不同的磁学性质和相变行为. 文献[9]讨论了纳米管上 BEG 模型的热力学和相变性质, 研究发现系统存在三临界点. 文献[10]研究了稀释晶场作用下纳米管中 BC 模型的磁化性质, 结果表明, 稀释晶场作用下系统的内能、比热和自由能呈现出不同的磁学性质. 文献[11]利用基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了稀土金属 L_n 吸附掺杂 BN 纳米管的储氢性能. 据我们所知, 迄今人们还没有研究外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用和双模随机交错晶场对纳米管系统重入现象的影响. 本文利用有效场理论对纳米管上混合自旋 BC 模型中重入现象与晶场取值概率、最近邻交换相互作用和晶场强度的关系进行了研究, 给出了磁化强度随温度的变化曲线.

2 模型和方法

无限长纳米管由内壳层和外壳层两部分组成, 见图 1. 图 1(a) 为纳米管的立体示意图, 图 1(b) 给出其横截面示意图. 为了更清晰地显示不同格点上具有相同配位数的磁性原子, 用圆圈、方块和三角形分别代表配位数为 5、6 和 7 的磁性原子. 外壳层每个磁性原子的自旋为 1, 内壳层每个磁性原子的自旋为 $1/2$. 图中原子间的连线代表最近邻磁性原子之间存在交换

相互作用, 它们的大小分别为 J_1 、 J_2 和 J .

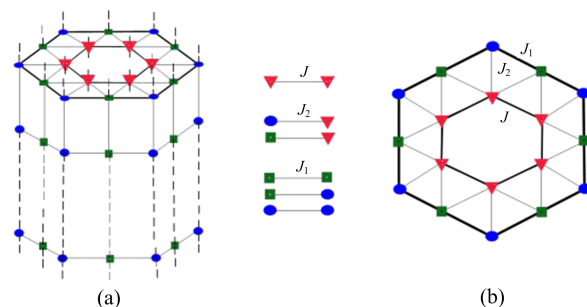


图 1 纳米管示意图. (a) 立体图, (b) 截面图, 圆圈和方块代表外壳层磁性原子, 三角代表内壳层磁性原子, 实线表示最近邻自旋间的交换相互作用.

Fig. 1 The schematic pictures of nanotube: (a) perspective view of the cylindrical nanotube, (b) its cross section. The circles and squares respectively represent magnetic atoms at the surface shell. The triangles are magnetic atoms constituting the core shell. The bonds connecting the magnetic atoms represent the nearest-neighbor exchange interactions.

纳米管上 BC 模型的哈密顿量可表述为

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle kl \rangle} S_k S_l - J \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n - \sum_i D_i S_i^2 \quad (1)$$

其中 $S = -1$; $\sigma = \pm 1/2$. J_1 代表外壳层最近邻自旋间的交换相互作用, J 代表内壳层最近邻自旋间的交换相互作用, J_2 代表外壳层和最近邻的内壳层自旋间的交换相互作用, D_i 代表作用在格点 i 上的随机晶场, 它们都满足双模随机交错晶场分布

$$P(D_i) = p\delta(D_i - D) + (1-p)\delta(D_i - \alpha D), \quad (2)$$

其中 p ($0 \leq p \leq 1$) 表示随机晶场取值为 D 的概率, $1-p$ 代表稀释晶场取值为 αD 的概率, α ($-1 \leq \alpha < 0$) 为一无量纲参数, 代表晶场强度的比值. 当 $p=1$ 或 0 时, 含双模随机交错晶场的 BC 模型退化为含恒定晶场的 BC 模型.

利用有效场理论^[12-14]可以得到外壳层格点自旋磁化强度 m_1 和 m_2 , 内壳层格点自旋磁化强度 m 的自洽方程:

$$m_1 = [m_2^2 \cosh(J_1 \nabla) + m_2 \sinh(J_1 \nabla) + 1 - m_2^2]^2 \times [m_1^2 \cosh(J_1 \nabla) + m_1 \sinh(J_1 \nabla) + 1 - m_1^2]^2 \times \left[\cosh\left(\frac{J_2}{2} \nabla\right) + 2m_c \sinh\left(\frac{J_2}{2} \nabla\right) \right] F(x) \Big|_{x=0}, \quad (3a)$$

$$m_2 = [m_2^2 \cosh(J_1 \nabla) + m_2 \sinh(J_1 \nabla) + 1 - m_2^2]^2 \times [m_1^2 \cosh(J_1 \nabla) + m_1 \sinh(J_1 \nabla) + 1 - m_1^2]^2 \times \left[\cosh\left(\frac{J_2}{2} \nabla\right) + 2m_c \sinh\left(\frac{J_2}{2} \nabla\right) \right]^2 F(x) \big|_{x=0}, \quad (3b)$$

$$m_c = [m_2^2 \cosh(J_2 \nabla) + m_2 \sinh(J_2 \nabla) + 1 - m_2^2]^2 \times [m_1^2 \cosh(J_2 \nabla) + m_1 \sinh(J_2 \nabla) + 1 - m_1^2]^2 \times \left[\cosh\left(\frac{J}{2} \nabla\right) + 2m_c \sinh\left(\frac{J}{2} \nabla\right) \right]^4 f(x) \big|_{x=0}. \quad (3c)$$

其中函数 $F(x)$ 定义为

$$F(x) = \int P(D_1) f(x, D) dD_i = pf(x, D) + (1-p)f(x, \alpha D), \quad (4)$$

$$f(x) = \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x + h) \right], \quad (5)$$

函数 $f(x, D)$ 的表达式为

$$f(x, D_i) = \frac{2 \sinh [\beta(x + h)]}{2 \cosh [\beta(x + h)] + e^{-\beta D_i}}, \quad (6)$$

其中 $\beta = 1/k_B T$, T 是绝对温度, k_B 是玻尔兹曼常数. 另外, 为了整体上描述系统的磁化性质可引入平均磁化强度^[15], 它的定义为

$$M_T = \frac{1}{18} (6m_1 + 6m_2 + 6m_c) = \frac{1}{3} (m_1 + m_2 + m_c) \quad (7)$$

3 结果与讨论

为不失一般性, 令晶场强度 D 和等效温度 k_B 以 J 为单位, 通过求解方程(3), 给出了外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用和晶场作用下系统格点磁化强度随温度的变化曲线.

3.1 $J_2/J=0.001$, 系统的重入现象

图 2 为晶场取值概率 $p=0$, 外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用 $J_2/J=0.001$ 时, 系统格点磁化强度随温度的变化曲线. 研究发现若外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用比较弱时, 一定条件下, 系统会呈现重入现象. 从图 2(b)~(c) 可以看出, 系统同时具有两个铁磁——顺磁二级相变温度, 但重入现象不明显. 研究过程我们发现, 系统出现重入现象, 要求的晶场强度精确度比较高. 即 $3.7297 \leq D/J \leq 3.7307$, 系统才会表现出重入现象. 随着正晶场强度的增强, 系统的重入现象和二级相变逐渐消失, 系统只呈现一级相变, 见图 2(d), 说明正晶场对系统重入现象影响比较明显. 由于双模随机交错晶场分布的影响, 当晶场参数满足 $-1.86535 \leq D/J \leq -1.86482$ 时, 系统也表现出重入现象. 通过对比文献[5]发现, 外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用显著影响系统重入现象.

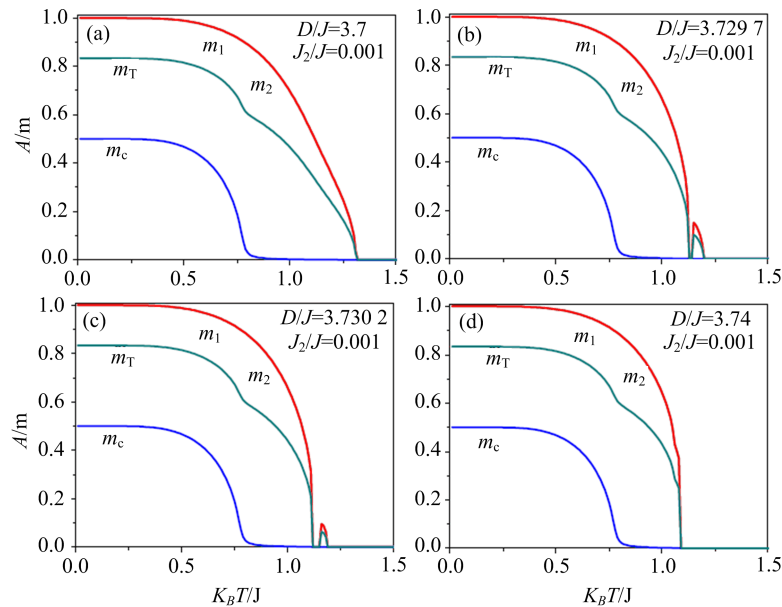


图 2 晶场概率 $p=0$, $J_2/J=0.001$ 时, 系统磁化强度随温度的变化曲线.

Fig. 2 The temperature dependence of the magnetization is presented, when $p=0$, $J_2/J=0.001$.

为了研究晶场取值概率对系统重入现象的影响,我们给出了 $p=0.2$ 时,系统格点磁化强度随温度的变化曲线,如图 3 所示.从图中可以看出,当正晶场强度较弱时,系统仅表现出二级相变,如图 3 (a).研究发现,当 $D/J=5.30402$ 时,系统开始出现重入现象并呈现一级相变,然而二级相变消失.当晶

场强度参数取值范围为 $5.30402 \leq D/J \leq 5.61348$, $-2.64402 \leq D/J \leq -2.56535$,系统都会出现重入现象.对比图 3 与图 2 发现,晶场取值概率,对系统重入现象的影响比较大.图 3 呈现出的重入现象要比图 2 明显.结合文献[8]表明,晶场取值概率也影响系统的重入现象.

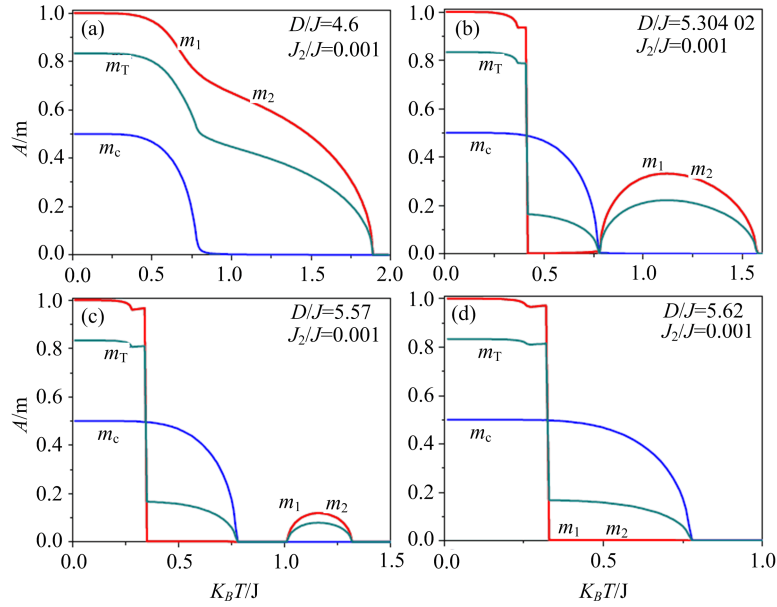


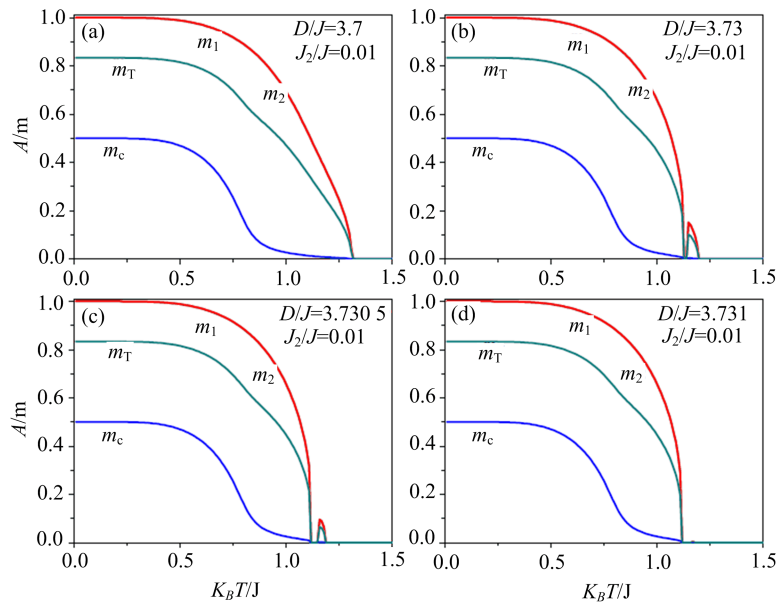
图 3 晶场概率 $p = 0.2$, $J_2/J = 0.001$ 时,系统磁化强度随温度的变化曲线.

Fig. 3 The temperature dependence of the magnetization is presented, when $p = 0.2$, $J_2/J = 0.001$.

3.2 $J_2/J=0.01$,系统的重入现象

为了进一步研究外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用对系统重入现象的影响,我们给出了

$J_2/J=0.01$ 时,系统格点磁化强度随温度的变化曲线,如图 4 和图 5 所示.



(图 4 晶场概率 $p = 0$, $J_2/J = 0.01$ 时,系统磁化强度随温度的变化曲线.

Fig. 4 The temperature dependence of the magnetization is presented, when $p = 0$, $J_2/J = 0.01$.

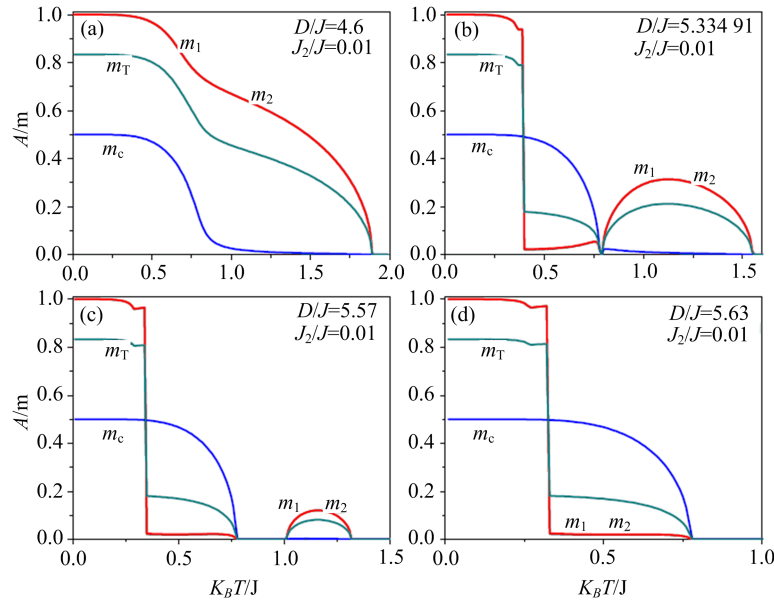


图 5 晶场概率 $p = 0.2$, $J_2/J = 0.01$ 时, 系统磁化强度随温度的变化曲线.

Fig. 5 The temperature dependence of the magnetization is presented, when $p = 0.2$, $J_2/J = 0.01$.

图 4 为晶场取值概率 $p = 0$, 外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用 $J_2/J = 0.01$ 时, 系统格点磁化强度随温度的变化曲线. 经研究发现, 图 4 呈现出与图 2 相似的重入现象. 当 $3.73 \leq D/J \leq 3.7309$, $-1.86549 \leq D/J \leq -1.86498$ 时, 系统出现重入现象, 但是重入不明显. 随着晶场强度增强, 系统的重入现象逐渐消失.

图 5 为晶场取值概率 $p = 0.2$, 外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用 $J_2/J = 0.01$ 时, 系统格点磁化强度随温度的变化曲线. 经研究发现, 图 5 呈现出与图 3 相似的重入现象. 当 $5.33491 \leq D/J \leq 5.61415$, $-2.64439 \leq D/J \leq -2.57781$ 时, 系统出现重入现象. 随着晶场强度增强, 系统的二级相变和重入现象逐渐消失, 如图 5(b)~(d). 然而, 从

图 5(b) 可以发现, 内壳层磁化强度 m_c 也表现出微弱的重入现象. 结合文献[3]中相图研究结果显示, 交换相互作用影响系统重入现象.

4 结论

本文利用有效场理论研究了双模随机交错晶场作用下 spin-1 和 spin-1/2 混合自旋 BC 模型的重入现象. 结果表明, 系统的重入现象与交错晶场的取值概率 p 、晶场强度 D 以及外壳层与内壳层格点间最近邻交换相互作用密切相关. P 、 D 和 J_2/J 等诸多因素相互竞争, 使系统表现出比恒定晶场作用的 BC 模型更为丰富的磁化现象: 系统格点的磁化强度随温度的变化曲线呈现重入现象; P 、 D 和 J_2/J 会影响系统的一级相变和二级相变.

参 考 文 献

- [1] Blume M. *Phys. Rev.*, 1966, 141: 517.
- [2] Capel H W. *Physica*, 1966, 32: 966.
- [3] Magoussi H, Zaim A, Kerouad M. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2013, 344: 109.
- [4] Canko O, Erdinc A, Taskın F, et al. *Phys. Lett. A*, 2011, 375: 3547.
- [5] Canko O, Erdinc A, Taskın F, et al. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2012, 324: 508.
- [6] Taskın F, Canko O, Erdinc A, et al. *Physica A*, 2014, 407: 287.
- [7] Kaneyoshi T. *J. Magn. Magn. Mater.*, 2011, 323: 1145.
- [8] 李晓杰, 刘中强, 王春阳, 等. *物理学报*, 2015, 64: 247501
- [9] 魏东, 孔祥木. *原子与分子物理学报*, 2017, 34: 515
- [10] 李晓杰, 王渺渺, 陈文龙. *原子与分子物理学报*, 2019, 36: 527
- [11] 张宁超, 任娟. *四川大学学报: 自然科学版*, 2018, 55: 105
- [12] Kaneyoshi T, Fittipaldi I P, Honmura R, et al. *Phys. Rev.*

B, 1981, 24: 481.

[14] Kaneyoshi T. *Acta Phys. Pol. A*, 1993, 83: 703.

[13] Kaneyoshi T, Tucker J W, Jašur M. *Physica A*, 1992, 186: 495.

[15] Keskin M, Şarlı N, Deviren B. *Solid State Commun.* 2011, 151: 1025.