

双模随机同向晶场对 spin-1 和 spin-1/2 混合自旋纳米管中 Blume-Capel 模型平均磁化强度的影响

李晓杰[†], 曹凤, 李新军, 董明慧, 尹田田, 苑光明, 王学文

齐鲁理工学院, 济南 250200

收稿日期: 2019-03-24; 接收日期: 2019-06-14

【摘要】 利用有效场理论研究了纳米管上双模随机同向晶场中混合自旋 Blume-Capel 模型格点的平均磁化强度, 得到了系统格点的平均磁化强度与双模随机晶场的取值概率、外磁场、晶场参数和晶场强度比值的关系. 结果表明: 取值概率、外磁场、交换相互作用、晶场强度比值和晶场强度等诸多因素相互竞争, 使系统表现出比恒定晶场作用的 Blume-Capel 模型更为丰富的磁化现象; 双模随机同向晶场会抑制系统的平均磁化强度, 使其基态饱和值小于 5/6; 外磁场导致系统的二级相变消失; 一定条件下系统发生一级相变; 系统的平均磁化强度呈现部分缺失和负值现象.

关键词: 外磁场, 平均磁化强度, 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.2019.03.005

Effects of Two-mode Random Homotropic Crystal Fields on the Average Magnetization of the Blume-Capel Model in Spin-1 and Spin-1/2 Hybrid Spin Nanotubes

LI XiaoJie, CAO Feng, LI Xinjun, DONG Minghui,
YIN Tiantian, YUAN Guangming, WANG Xuewen

Qilu Institute of Technology, Jinan, 250200

Received date: 2019-03-24; accepted date: 2019-06-14

【Abstract】 The average magnetization of the lattice points in the hybrid spin Blume-Capel model in the dual-mode random homogeneous crystal field on the nanotube was studied by using the effective field theory, and the relationship between the average magnetization of the system lattice points and the value probability of the dual-mode random crystal field, the external magnetic field, the parameters of the crystal field and the intensity ratio of the crystal field was obtained. The results show that: the value probability, the external magnetic field, the exchange interaction, the ratio of crystal field strength and the strength of crystal field are in competition with each other, which makes the system show more abundant magnetization phenomenon than the constant crystal field effect of Blume-Capel model. The average magnetization of the system will be inhibited by the two-mode random homomorphic crystal field, and the saturation value of the ground state will be less than 5/6. The external magnetic

* 齐鲁理工学院校级课题(JG201858)资助的课题.

[†] 15263778001@163.com

field causes the second order phase transition of the system to disappear. Under certain conditions, the system undergoes a first order phase transition. The mean magnetization of the system showed partial missing and negative values.

Keywords: external magnetic field, average magnetization, effective field theory, Blume-Capel model, nanotube

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

DOI: 10.13380/j.ltpl.2019.03.005

Reference method: LI XiaoJie, CAO Feng, LI Xinjun, DONG Minghui, YIN Tiantian, YUAN Guangming, WANG Xuewen, Low. Temp. Phys. Lett. **41**,0179 (2019)

1 引言

自 1966 年, Blume-Capel (BC) 模型被创建之后^[1,2], 人们已经利用不同方法对多种晶格上的 BC 模型的磁化性质、热力学性质、磁滞回线和相图进行了研究. Y. F. Zhang 小组研究了外磁场和交换相互作用都遵循双模随机分布时, 简立方晶格中混合自旋系统的临界行为^[3]. 同年里, 该小组又研究了外磁场遵循三模随机分布时, 简立方晶格中混合自旋系统的相变行为^[4]. 文献[5]利用有效场理论研究了简立方晶格中 BC 模型的补偿行为和磁化过程. 文献[6]中研究了外磁场服从双峰离散分布时蜂巢晶格的相变性质, 发现外磁场、晶场和自旋间交换相互作用影响系统的相变并且系统出现重入现象; 文献[7]的研究表明稀释晶场对蜂巢晶格系统磁学性质和相变的影响, 结果显示当晶场满足稀释分布时对系统的相变没有影响并且系统不会出现三临界现象. 近几年来, 纳米管渐渐成为磁热性质研究领域的一个热点, 实验与理论方面都已经取得一定的研究成果. 实验上, 毛瑞等人以植物纤维素为模板, 制备出了纳米管状 SnO_2 材料, 测试结果显示, 此 SnO_2 纳米管状材料能够提高锂离子的扩散速率, 有效解决解充电过程中电极材料体积膨胀问题^[8]. 文献[9]中发现 Fe-Ni 磁性纳米管具有明显的各项异性; 理论上, Zaim 小组研究了外磁场满足三模分布时纳米管上自旋为 1 Ising 模型的磁性质和相图^[10], 结果表明该系统具有一阶相变、三相临界点和二阶相变并出现重入现象. Osman 等人分别讨论了纳米管中纯自旋系统的磁化强度、磁化率、热力学性质和相图^[11], 讨论了晶场对系统磁热性质的影响, 结果显示系统存在一阶相变和二阶相变. 文献[12]利用有效场理论研究混合自旋纳米管系统的磁热特性, 结果显示系统存在三临界点. 文献[13]研究了 Ising 纳米管系统中 BC 模型的磁滞行为. T. Kaneyoshi 讨论了纳米管系统中外壳层和内壳层最近邻自旋间交换相互作用对磁化率的影响^[14]. 文献[15]显示双模随机晶场中 BC 模型的磁化强度和相变性质, 得到了系统的磁化强度与温度和双模随机晶场的关系以及相图, 结果表明系统在双模随机晶场中会表现出不同的磁学性质和相变行为. 文献[16]讨论了纳米管上 BEG 模型的热力学和相变性质, 研究发现纳米管系统存在三临界点. 文献[17]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[18]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 La 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磁场、晶场参数比值和双模随机同向晶场对纳米管系统平均磁化强度的影响. 为了弄清楚外磁场、晶场参数比值和双模随机同向晶场对纳米管系统平均磁化强度的影响, 本文利用有效场理论对纳米管上混合自旋 BC 模型格点的平均磁化强度与双模随机同向晶场取值概率、外磁场、晶场参数比值和晶场的关系进行了研究, 给出了平均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_3 .

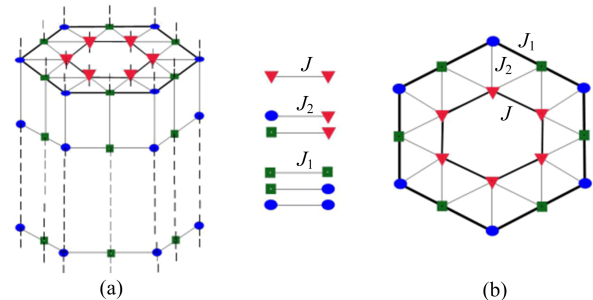


图 1 纳米管示意图. (a) 立体图, (b) 截面图, 圆圈和方块代表外壳层磁性原子, 三角代表内壳层磁性原子, 实线表示最近邻自旋间的交换相互作用.

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

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

其中 $S = -1, 0, +1$; $\sigma = \pm 1/2$. 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, h 代表外磁场, D_i 代表作用在格点 i 上的随机同向晶场, 它们都满足双模晶场分布

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

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

利用有效场理论^[19-21]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_c 的自治方程:

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

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

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

其中函数 $F(x)$ 定义为

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

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

函数 $f(x, D_i)$ 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学性质可引入平均磁化强度^[22], 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

为了便于研究, 不特别说明, 本文余下内容均取 $J_1/J = J_2/J = 1$. 为了不失一般性, 令外磁场 h 、晶场强度 D 和等效温度 k_B 以 J 为单位, 通过求解方程(3), 给出了双模随机同向晶场作用下系统平均磁化强度随温度的变化曲线.

3.1 $h/J = 0, \alpha = 0.8$ 时, 概率对系统平均磁化强度的影响

图 2(a)–(d) 给出了晶场满足双模随机同向晶场 ($\alpha = 0.8$) 分布时, 系统平均磁化强度随温度的变化曲线. 图 2 表明, 当外磁场 $h/J = 0$ 且晶场约化参数 D/J 不同时, 同向晶场会使系统表现出不同的磁化性质. 图 2(a) 显示当 $D/J = 2.7$ 时, 随着 p 逐渐增大, 相变温度 $k_B T_c/J$ 逐渐升高, 但变化不明显; 且系统仅发生二级相变. 这是因为 p 越大, $\bar{D} = (0.2p + 0.8)D$ 越强 (\bar{D} 表示平均晶场强度), 对系统平均磁化强度的促进作用就越明显, 即正晶场对系统磁化强度有促进作用. 图 2(b)–(d) 表明, 当负晶场作用于系统时, 系统发生一级和二级相变; 而且负晶场越强, 相变温度越低 (例如 $p = 1.0$ 时, 随着负晶场的增强, 相变温度逐渐降低), 说明负晶场对系统磁化强度具有抑制作用.

3.2 $\alpha = 0.8$ 时, 晶场参数和外磁场对系统平均磁化强度的影响

图 3 显示, 当负晶场较弱时, 平均磁化强度基态饱和值 $M_T^{\text{gss}} = 5/6$, 这是因为外壳层格点磁化强度 $m_1^{\text{gss}} = m_2^{\text{gss}} = 1$ 且内壳层格点磁化强度 $m_c^{\text{gss}} = 1/2$, 故 $M_T^{\text{gss}} = (m_1^{\text{gss}} + m_2^{\text{gss}} + m_c^{\text{gss}}) / 3 = 5/6$. 由于负晶场对系统磁化强度具有削弱作用, 所以负晶场较强时, 平均磁化强度基态饱和值会减小. 为了研究不同晶场强度下系统平均磁化强度随温度的变化情况, 图 3 (a) 和 (b) 分别给出了 $p = 0.25$ 和 0.5 时, 双模随机同向晶场分布下平均磁化强度随温度的变化曲线. 结果表明, p 越大, 负晶场对磁化强度阻碍作用越明显; 负晶场较弱时, 系统仅发生二级相变; 随着负晶场强度增强, 系统发生一级相变和二级相变; 平均

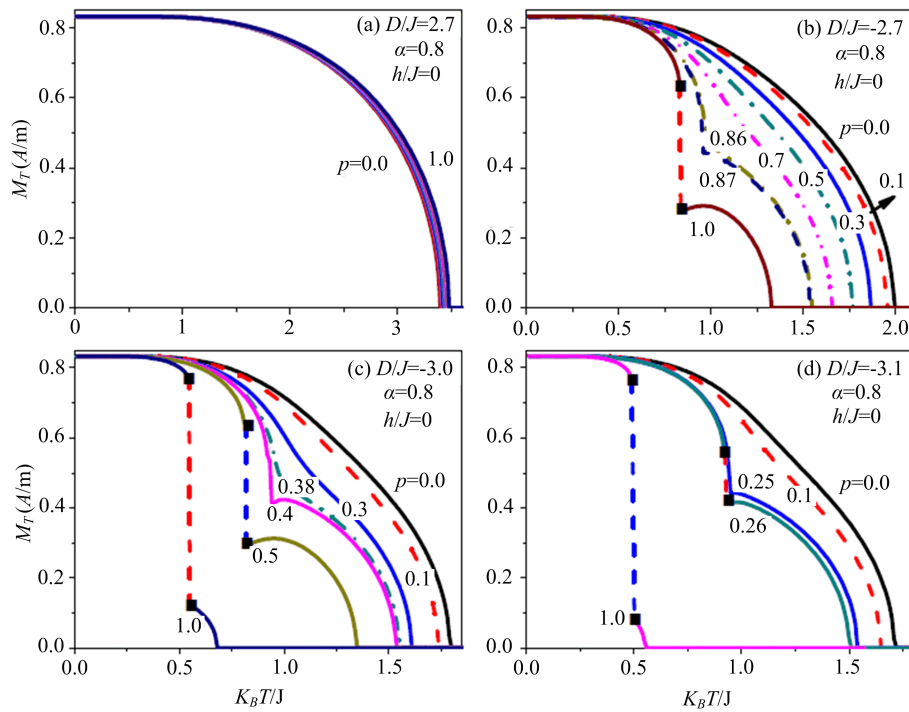


图 2 外磁场为 0,晶场强度比值为 0.8,晶场参数 D/J 分别为 (a) 2.7, (b) -2.7, (c) -3.0, (d) -3.1 时, 系统平均磁化强度随温度的变化曲线, 曲线上的值为随机晶场概率 p .

Fig. 2 The temperature dependence of the magnetization is presented with some selected values of crystal field (a) 2.7, (b) -2.7, (c) -3.0, (d) -3.1, when the external magnetic field is 0 and the value of $\alpha=0.8$. The real number on each curve denotes the value of p .

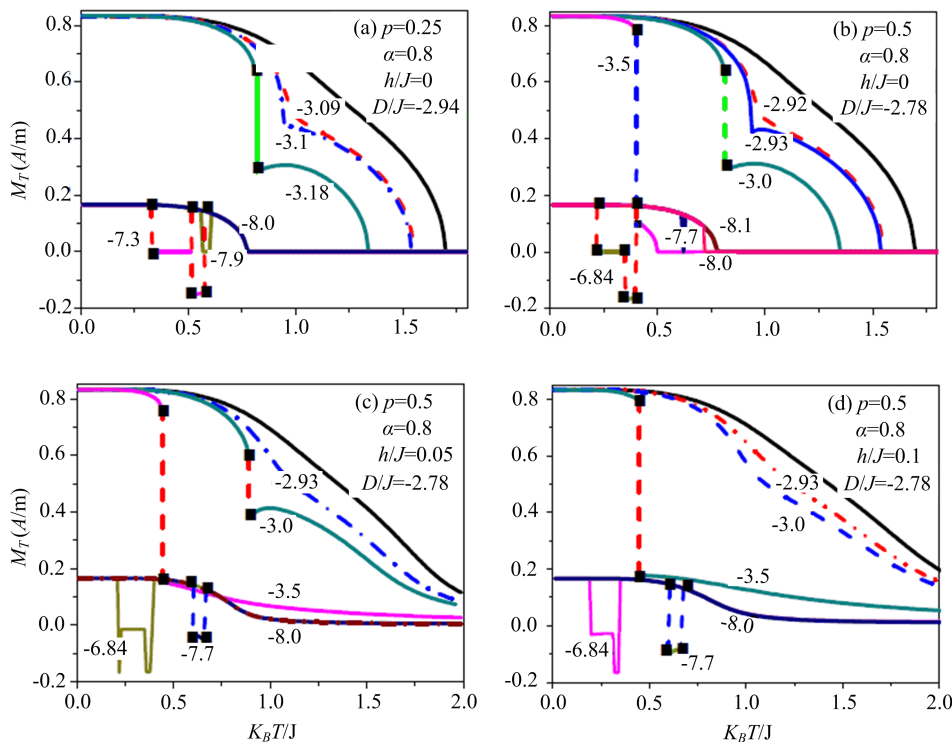


图 3 概率 $p=0.25$ 和 0.5 时,系统平均磁化强度随温度的变化曲线, 曲线上的值为晶场参数 D/J .

Fig. 3 The temperature dependence of the magnetization is presented with some selected values of crystal field D/J , when the external magnetic field is not zero. The real number on each curve denotes the value of D/J .

磁化强度出现缺失现象(平均磁化强度为零)并呈现负值. 显然不同晶场强度作用下,系统平均磁化强度呈现出不同的磁化现象,但总体变化趋势相似. 为了研究外磁场对平均磁化强度缺失现象的影响,我们给出了图 3(c)和(d). 从图中可以看出,外磁场能够减弱平均磁化强度缺失现象;随着外磁场增强,缺失部分平均磁化强度呈现负值.

3.3 $h/J=0, \alpha=0.4$ 时, 概率对系统平均磁化强度的影响

图 4(a)~(d) 给出了 $\alpha=0.4$ 时,系统平均磁化强度随温度的变化曲线. 图 4 显示,系统平均磁化强度随温度的变化曲线与图 2 相似,但相同条件下相变温度较高,说明晶场强度比值 α 影响系统的磁化性质,即原子掺杂会使系统呈现出不同的磁化现象.

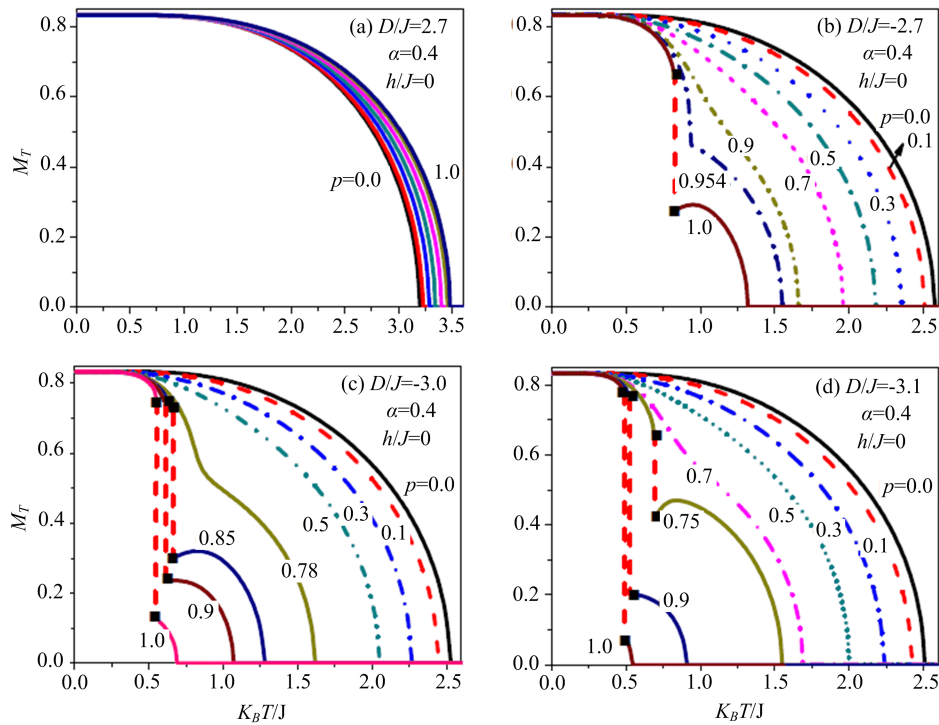


图 4 外磁场为 0,晶场参数 D/J 分别为 (a) 2.7, (b) -2.7, (c) -3.0, (d) -3.1 时,系统平均磁化强度随温度的变化曲线,曲线上的值为随机晶场概率 p

Fig. 4 The temperature dependence of the magnetization is presented with some selected values of $D/J=2.7, -2.7, -3.0, -3.1$, when the external magnetic field is 0. The real number on each curve denotes the value of p

3.4 $\alpha=0.4$ 时, 晶场参数和外磁场对系统平均磁化强度的影响

为了研究不同晶场强度比值对系统平均磁化强度的影响,图 5 给出了 $\alpha=0.4$ 时平均磁化强度随温度的变化曲线. 结果显示:概率较小时,系统存在一级相变和二级相变. 外磁场较弱时,没有对系统平均磁化强度产生明显的影响,但系统平均磁化强度出现缺失和负值的现象更加明显. 我们认为导致这种现象的物理原理是不同原子掺杂,使得系统在一定条件下平均磁化强度出现负值.

作用下 spin-1 和 spin-1/2 混合自旋 BC 模型系统的平均磁化强度随温度的变化情况. 结果表明,系统格点的平均磁化强度与随机同向晶场的取值概率 p 、晶场强度比值 α 、晶场参数 D/J 、外磁场、温度以及交换相互作用密切相关. 概率 P 、外磁场、晶场强度比值和 D 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:系统格点的平均磁化强度随温度的变化曲线呈现缺失和负值的现象; P 、 α 和 D/J 会影响系统的一级相变和二级相变.

4 结论

本文利用有效场理论研究了双模随机同向晶场

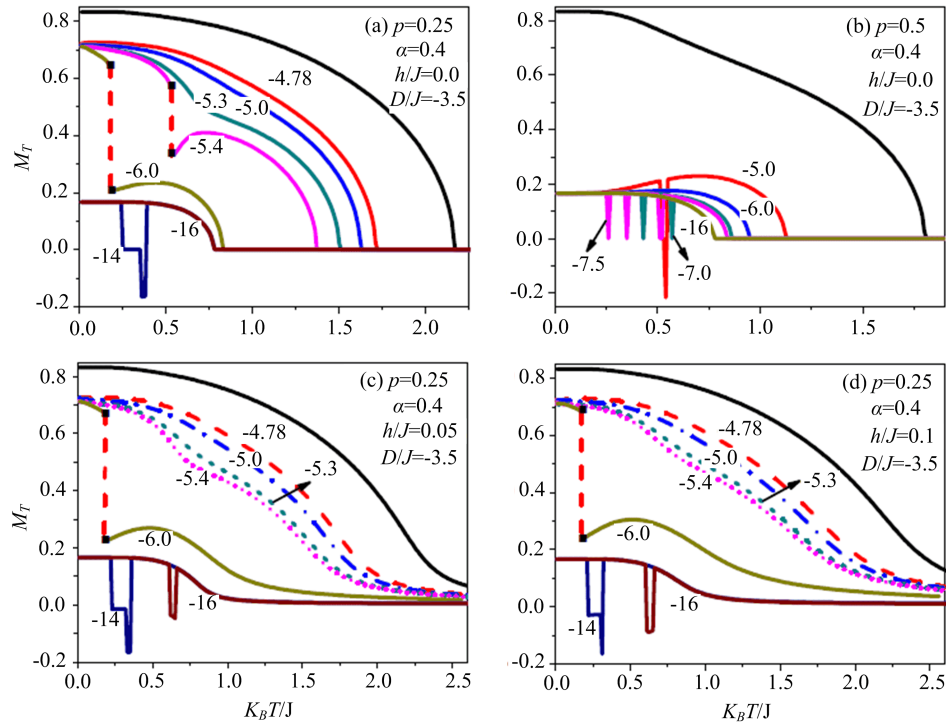


图 5 概率 p 分别为 0.25,0.5 时,系统磁化强度随温度的变化曲线,曲线上的值为晶场参数 D/J

Fig. 5 The temperature dependence of the magnetization is presented with some selected values of the probability of $p = 0.25, 0.5$, when the external magnetic field is not zero. The real number on each curve denotes the value of D/J

参 考 文 献

- [1] Blume M. *Phys. Rev.*, **141** (1966), 517
- [2] Capel H W. *Physica*, **32** (1966), 966
- [3] Zhang Y F, Yan S L. *Solid State Commun.*, **146** (2008), 478
- [4] Zhang Y F, Yan S L. *Phys. Lett. A*, **372** (2008), 2696
- [5] Li D R, Yan S L, Zhang Y F. *Solid State Commun.*, **150** (2010), 2186
- [6] Yüksel Y, Akıncı Ü, *Physica A*, **391**(2012), 415
- [7] Yigit A, Albayrak E. *J. Magn. Magn. Mater.*, **329** (2013), 125
- [8] Mao R, Guo H, Tian D X, et al. *J. Inorg. Mater.*, **28** (2013), 1213
- [9] Zhou D, Cai L H, Wen F S, et al. *Chinese J. Chem. Phys.*, **20** (2007), 821
- [10] Magoussi H, Zaim A, Kerouad M. *J. Magn. Magn. Mater.*, **344** (2013), 109
- [11] Canko O, Erdinç A, Taşkın F, et al. *Phys. Lett. A*, **375** (2011), 3547
- [12] Canko O, Erdinç A, Taşkın F, et al. *J. Magn. Magn. Mater.*, **324** (2012), 508
- [13] Taşkın F, Canko O, Erdinç A, et al. *Physica A*, **407** (2014), 287
- [14] Kaneyoshi T. *J. Magn. Magn. Mater.*, **323** (2011), 1145
- [15] 李晓杰,刘中强,王春阳,等. *物理学报* **64** (2015), 247501
- [16] 魏东,孔祥木. *原子与分子物理学报* **34** (2017), 515
- [17] 李晓杰,王渺渺,陈文龙. *原子与分子物理学报* **36** (2019), 527
- [18] 张宁超,任娟. *四川大学学报自然科学版* **55** (2018), 105
- [19] Kaneyoshi T, Fittipaldi I P, Honmura R, et al. *Phys. Rev. B*, **24** (1981), 481
- [20] Kaneyoshi T, Tucker J W, Jaśkur M. *Physica A*, **186** (1992), 495
- [21] Kaneyoshi T. *Acta Phys. Pol. A*, **83** (1993), 703
- [22] Keskin M, Şarlı N, Deviren B. *Solid State Commun.* **151** (2011), 1025