

具有幂次相互作用的磁性粒子凝聚过程的数值研究*

许晓军^{1)†} 魏高尧¹⁾ 蔡萍根¹⁾ 金进生²⁾ 夏阿根²⁾ 叶高翔²⁾

1) 浙江工业大学应用物理系, 杭州 310014)

2) 浙江大学物理系, 杭州 310027)

(2005 年 11 月 14 日收到, 2006 年 4 月 10 日收到修改稿)

在扩散限制凝聚模型的基础上引入粒子的自旋自由度(包括自旋向上和向下),并假设粒子间存在幂次 Ising 磁相互作用,采用 Monte Carlo 方法研究了在不同相互作用力程情况下磁性粒子的分形生长规律.模拟结果表明,当粒子间以反铁磁方式耦合时,凝聚体中的粒子自旋交替凝聚.当粒子间以铁磁方式耦合时,凝聚体中粒子的自旋分布与相互作用力程有关.对于短程作用系统,凝聚体中存在大小不同的自旋畴块,即为铁磁生长,而对于长程相互作用系统,凝聚体中的自旋出现反常分布,即中心区域是近似反铁磁生长的结构,其外围后续生长的粒子却保持相同自旋取向.此外,还研究了在不同相互作用力程情况下磁性分形凝聚体的形貌、磁化强度及其演化过程.

关键词:幂次相互作用,扩散限制凝聚模型,自旋

PACC: 0555, 3420F, 7540D

1. 引言

在过去近半个世纪中,动力学生长模型一直受到人们的广泛关注^[1,2].在这些模型中,扩散限制凝聚(DLA)模型是人们最为重视的生长模型之一^[3].以此模型为基础,附加适当的运动学或动力学过程,可以产生具有标度不变特性的诸多自相似分形结构,从而建立起分形理论和实验测量之间的桥梁,在一定程度上揭示了实际系统中分形生长的物理机理.例如胶体中的悬浮系统、枝晶生长以及聚合物的聚合过程等都是其中的典型例子^[1,2].

在很多的物理系统中,两物体之间的相互作用是随着两体间距离 r 逐渐衰减的.万有引力和库仑相互作用是最典型的两个例子,它们均正比于 $1/r^2$.另外,在凝聚态物理中,如偶极相互作用(包括电偶极和磁偶极相互作用)和 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)相互作用,它们均正比于 $1/r^3$.此类以 $1/r^n$ 方式衰减的相互作用在很多相互关联的多体系统中也是很常见的^[4-10],有时还可作为实际相互作用的近似而被广泛采用.

在 DLA 模型的基础上,本文引入了粒子的自旋(包括自旋向上和自旋向下)自由度,并假设粒子间

存在长程的 Ising 磁相互作用,其变化规律正比于 $1/r^a$ ^[4-9].采用 Monte Carlo 模拟方法,模拟生长了在不同幂次相互作用情况下的磁性分形凝聚体,并研究了其动力学演化过程,例如团簇的形貌随模型参数的变化、自旋取向分布及凝聚体的磁化过程等.

2. 模型模拟过程

先将一个具有初始自旋的粒子作为 DLA 模型的种子放在二维正方点阵的中间格点上.为了便于比较,对于所有的情况,种子的初始自旋均设为向上.定义 r_{cluster} 为凝聚团簇中诸粒子距种子粒子的最大距离,即团簇的半径.根据上述定义,对于仅含一颗粒子的种子团簇,其半径 $r_{\text{cluster}} = a$,其中 a 为正方点阵的最小单元.

模拟过程共分为 4 个步骤.

步骤 1 在以种子所在的位置为圆心,在半径为 $r_{\text{cluster}} + 20a$ 的圆的附近格点上随机产生一个扩散粒子,粒子的自旋取向随机选定.

步骤 2 扩散粒子在格点上扩散.根据系统能量变化所给出的概率来决定该扩散粒子的下一个位置和自旋取向.4 个最近邻位置及每个位置上粒子

* 国家自然科学基金(批准号:10174063)和浙江省自然科学基金(批准号:Y604064)资助的课题.

† E-mail: xxj@zjut.edu.cn

自旋向上或向下共 8 个状态之一. 系统的能量定义为

$$\beta E = -\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} \mathcal{K}(r_{ij}) S_i S_j, \quad (1)$$

式中

$$\mathcal{K}(r_{ij}) = \frac{C}{r_{ij}^\alpha} \quad (\alpha \geq 0). \quad (2)$$

这里 r_{ij} 是粒子 i 与粒子 j 之间的距离, βC 和 α 为模型的可调参数. (1) 式是对扩散粒子和团簇所组成的系统中所有粒子对求和. 扩散粒子扩散到下一个状态的概率正比于 $\exp[-\Delta(\beta E)]$, 这里 $\Delta(\beta E)$ 是扩散前后系统能量的差值. 在进行 Monte Carlo 模拟生长时, 我们分别计算出粒子扩散到这 8 个状态的 $\exp[-\Delta(\beta E)]$ 值, 然后进行归一化, 最后由一个随机数生成器来决定扩散粒子的位置及自旋.

步骤 3 如果扩散粒子运动到半径为 $r_{\text{cluster}} + 30a$ 的圆之外, 则取消该粒子. 模型返回到步骤 1. 如果粒子扩散到团簇的边缘位置, 即与团簇相连时, 那么该粒子就不可逆地黏附在团簇上, 黏附粒子的自旋取向也不再发生变化, 即自旋被冻结. 对所形成的新团簇, 团簇的粒子数增加 1, 并重新计算团簇的半径 r_{cluster} , 同时程序返回至步骤 1. 如果粒子没有扩散到团簇的最近邻位置, 那么继续执行步骤 2.

步骤 4 在生长过程中, 步骤 1、步骤 2、步骤 3 重复进行, 直至团簇中的粒子数达到我们预先所设定的值为止.

通过改变 α 值, 可以得到粒子间不同的幂次相互作用, 而调节 βC 值可以模拟团簇在不同温度下的生长过程. 上述模型可以较好地模拟具有幂次相互作用系统的生长过程, 为实验现象的解释和设计制造具有特殊性能要求的功能薄膜、器件等提供参考^[11-13].

3. 结果及讨论

参数 α 表征了磁性相互作用随距离衰减的关系. 较小的 α 值代表长程的相互作用, 团簇中不同位置的粒子对扩散粒子的作用强度基本等效; 而较大的 α 值则反映了短程相互作用的行为, 即自旋粒子在扩散过程中, 只与最近邻的粒子有较强的相互作用, 并随着粒子间距离的增大而迅速衰减. 模拟发现, 对于不同的 α 值, 凝聚体形貌随 βC 的演化规律是不同的, 同时凝聚体中的自旋分布也有很大差别.

3.1. 凝聚体形貌

图 1 给出了 $\alpha = 1$, $\beta C = -100, 0.05, 1, 50$ 时典

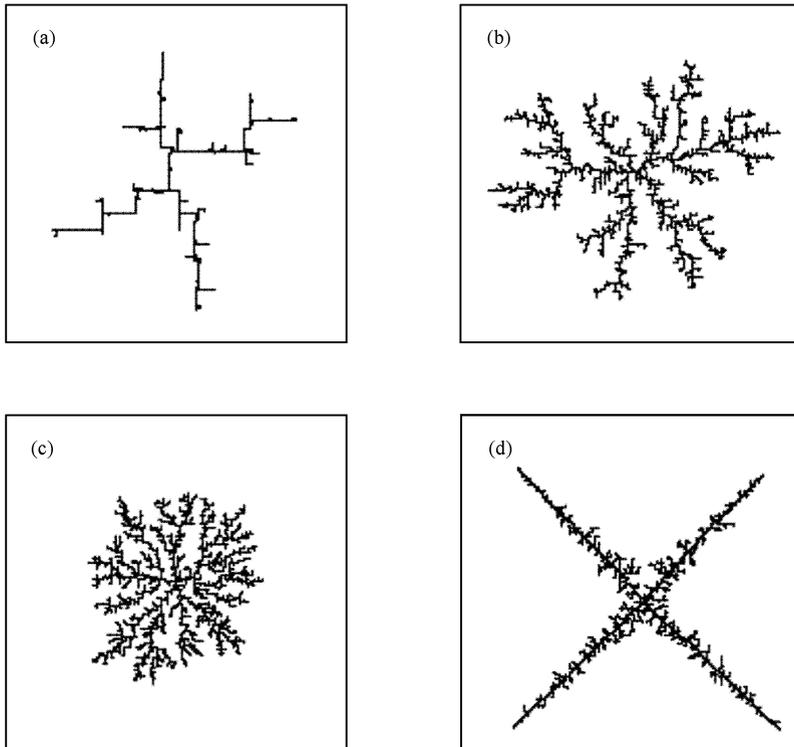


图 1 $\alpha = 1$ 时磁性凝聚体的形貌图 (a) $\beta C = -100$, (b) $\beta C = 0.05$, (c) $\beta C = 1$, (d) $\beta C = 50$

型的凝聚体形貌图.从图 1 可以看出,由于生长过程中的长程磁相互作用,随着 βC 值的增加,所得凝聚体的形貌比经典的 DLA 凝聚体更稀疏、更规则,且有很好的对称性,如图 1(c)所示,其四度对称结构与四度对称的正方基底格点相对应.如果基底为六角格点,那么当 βC 足够大时所形成的凝聚体就具有六度对称性.模拟结果发现,类似图 1(c)中的四度对称结构在长程(含中程)磁相互作用系统中(即 $\alpha = 2, 1, 0.5, 0.1$)是普遍存在的.相反,对于短程相互作用的系统,即 $\alpha \geq 5$ 时,如图 2 所示,当 βC 值很大时仍然没有出现如图 1(c)那样明显的四度对称形貌.另外,由于短程相互作用,凝聚体的分支尖端具有不稳定性,常常会出现分叉现象,如图 2(d)所示.在图 2 中,如果 βC 继续增大,凝聚体的形貌基本上不发生变化.

当 $|\beta C|$ 趋近于零时,8 个状态之间的能量差距很小,粒子向其 8 个邻近状态扩散的概率基本相同,其运动近似为随机行走过程,所以最后形成的凝聚体形貌与 DLA 类似,如图 1(b)及图 2(b)所示.在 βC 值等于零的极限情况下,粒子往四个方向行走以及自旋向上和向下的概率是一样的,其结果与随机行走的经典 DLA 模型完全一致.

模拟结果发现,对于长程相互作用的系统(即 α

≤ 1) 在 βC 从较大值逐渐减小的过程中,凝聚体的形貌发生明显演化,即从四度对称结构到 DLA 凝聚体形貌之间可出现一种非常致密的形貌结构,如图 1(c)所示.然而对于短程相互作用的系统($\alpha \geq 5$),如图 2 所示,并没有此类致密的凝聚体形貌出现.由于在短程相互作用系统中,扩散粒子在远离团簇的运动中近似为随机运动,而只有当粒子扩散到团簇边缘位置时这种磁相互作用才对粒子的运动产生明显的影响.对于具有长程相互作用的系统,扩散粒子从一开始就受到团簇的作用,当取适当的 βC 值时,这种磁相互作用可使粒子间凝聚得更紧密以减小系统的能量,从而出现图 1(c)的结构.

当 βC 为负值时,对于不同的 α 值,分形凝聚体的形貌随 βC 值的变化趋势是一致的,即均是从 DLA 凝聚体($|\beta C|$ 趋于零)逐渐演化至如图 1(a)和图 2(a)所示的形貌($|\beta C|$ 增大). $|\beta C|$ 的值越大,即 $\beta C \ll 0$,反铁磁耦合强度增大,从而导致磁性分形凝聚体变得疏散,凝聚体的分支更加单一化,如图 1(a)和图 2(a)所示.

3.2. 铁磁与反铁磁凝聚

在(1)式中,我们未考虑粒子自旋在“外磁场”下的能量,而只考虑粒子间自旋耦合对凝聚体的生长

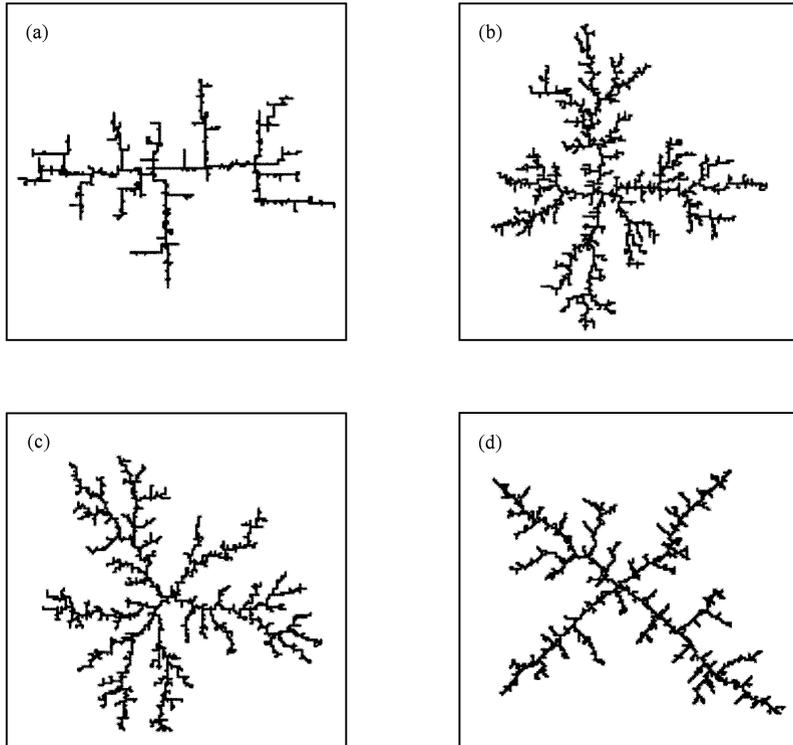


图 2 $\alpha = 5$ 时磁性凝聚体的形貌图 (a) $\beta C = -100$, (b) $\beta C = 1$, (c) $\beta C = 10$, (d) $\beta C = 400$

过程及自旋分布的影响.在这种不计外场的情况下,模拟结果发现, βC 为负值时凝聚体以反铁磁形式生长,而 βC 为正值时则以铁磁生长方式凝聚.

图3是一张典型的反铁磁生长的形貌图,图中实心圆和空心圆分别对应自旋向上和自旋向下两种状态(下同).从图3可以看出,对于 βC 为负值的情况,这种磁相互作用导致了反铁磁的结构,即后续生长的粒子自旋取向总是试图与其相连粒子的自旋取向相反,凝聚体中粒子自旋是向上和向下交替生长的.应该指出的是,当 βC 为负值时,对于不同的 α 值,即不同的相互作用力程,这种反铁磁生长的凝聚体形貌是相似的.当 βC 为正值时,模拟结果显示凝聚体的自旋分布与相互作用的力程有关.

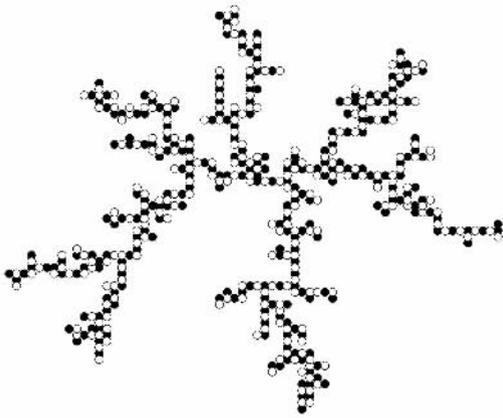


图3 以反铁磁方式生长的凝聚体 $N = 500$, $\alpha = 0.1$, $\beta C = -50$

模拟结果发现,对于短程相互作用的系统,若固定 $\alpha = 5$,当 $\beta C < 0.5$ 时,由于生长过程中粒子往其邻近位置的扩散概率基本相同,且粒子黏附至团簇时,自旋的两个取向的概率也基本一致,因此具有随机的行走规律和随机的自旋分布,所得到的凝聚体的自旋分布具有无规性;当 $0.8 < \beta C < 3$ 时,如图4(a)所示,磁相互作用导致明显的铁磁生长规律,即存在一些不规则的铁磁畴块或片断,每个畴块中的自旋取向是相同的,并且畴块的大小随着 βC 的增大而增大;当 $5 < \beta C < 8$ 时,畴块结构消失,凝聚体中整个分支的所有粒子呈现同一自旋取向,不同的分支可能具有不同的自旋取向结构.换言之,由于在生长过程中,自旋翻转的概率变小,一旦粒子的自旋取向出现翻转,生长在其后的粒子就会和该粒子的自旋保持一致,使得该粒子后的整个分支具有与该粒子相同的自旋取向.随着 βC 的继续增大,整个凝聚体中的粒子自旋趋于一种取向,即种子的自旋

方向.

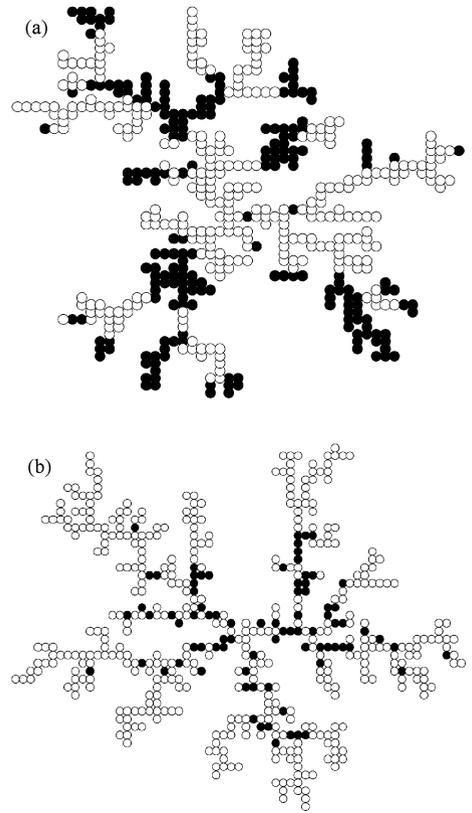


图4 以铁磁方式生长的凝聚体 (a) $N = 500$, $\alpha = 5$, $\beta C = 2$; (b) $N = 500$, $\alpha = 0.5$, $\beta C = 0.08$

对于具有长程相互作用的系统,如图4(b)所示,即 $\alpha = 0.5$, $\beta C = 0.08$, $N = 500$,凝聚体的自旋取向与上述短程相互作用的情况完全不同.凝聚体的中心区域是近似反铁磁生长的结构,而其外围后续生长的粒子却保持同一种自旋取向(向上或向下).模拟结果发现,当 $\beta C < 0.003$ 时,由于粒子的各扩散方向以及自旋取向的概率近似相等,凝聚体中粒子自旋的取向几乎是随机分布的;当 $0.003 < \beta C < 0.5$ 时,凝聚体出现如图4(b)所示的反常自旋分布,并且随着 βC 值的增大,中心区域反铁磁生长的粒子数逐渐减小.例如当 $\beta C = 0.5$ 时,只有初始生长的近10个粒子是处于近似反铁磁结构.随着 βC 值的进一步增大,反铁磁生长的中心区域消失,整个凝聚体中的粒子自旋取向趋于一致.

3.3. 凝聚体的磁化强度

为了分析两种自旋的竞争机制,我们研究了分形凝聚体总磁化强度 M 随耦合参数 βC 以及相互作用力程参数 α 的变化关系.凝聚体的磁化强度 M 定

义为自旋向上和向下粒子数的差值与总粒子数比值的绝对值,即

$$M = \left| \frac{N_{\text{up}} - N_{\text{down}}}{N} \right|. \quad (3)$$

图 5(a) 和 (b) 分别为 $\alpha = 0.5$ 和 $\alpha = 5$ 的磁化强度 M 随 βC 的变化曲线. 从图 5 可以看出, 随着 βC 的变化, 磁化强度 M 有一个从 0 到 1 的变化过程, 出现转变所对应的 βC 值与相互作用力程有关: 当 α 值较小时, βC 值很小时 M 就出现非零值, 并随着 βC 的增大而迅速增加至 1, 如图 5(a) 所示. 当 α 较大时, 即对于具有短程相互作用的系统, 如图 5(b) 所示, M 的转变点所对应的 βC 值明显比图 5(a) 中的相应值大, 而且在从 0 到 1 的变化中, M 值的涨落也比较大. 分析表明, 在以短程相互作用为主导的生长过程中, 虽然粒子自旋出现翻转的概率很小, 但自旋一旦翻转, 则后续粒子的自旋也会随之翻转, 从而导致了如图 5(b) 所示的磁化强度涨落现象.

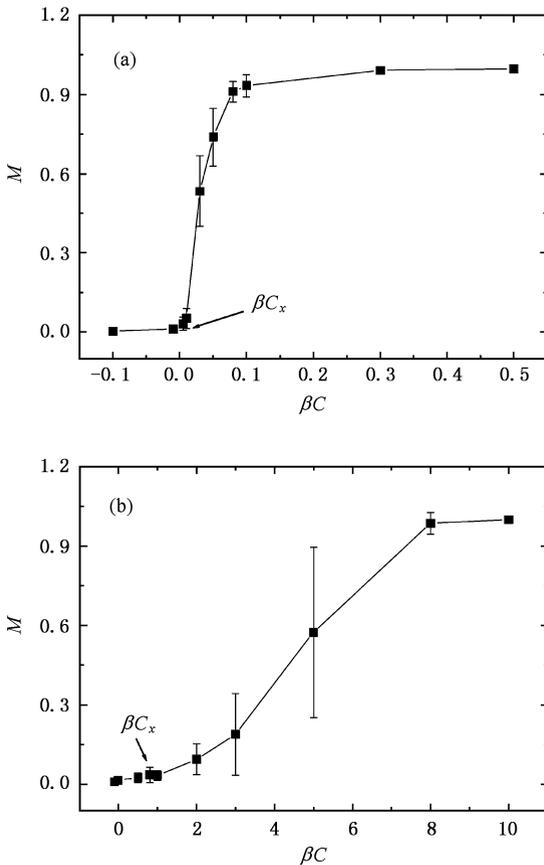


图 5 凝聚体的磁化强度 M 随 βC 的变化曲线 (a) $\alpha = 0.5$, (b) $\alpha = 5$

在图 5 中, 磁化强度 M 从零到非零值的转变所对应的 βC 值定义为 βC_x . 模拟结果发现, 该临界值

βC_x 是随参数 α 而变化的. 图 6 给出了 βC_x 随相互作用力程参数 α 的变化关系: 当 $\alpha = 0.1$ 时, βC_x 的值接近于零; 随着 α 值的增大, βC_x 迅速增大; 当 $\alpha \geq 5$ 时, βC_x 趋向一饱和值. 很明显, 参数 α 越小, 粒子间的磁相互作用随两者之间的距离变化越不明显, 对扩散粒子而言, 是团簇中所有粒子作用的累加结果, 所以临界值 βC_x 就很小. 随着 α 值的增大, 粒子间的相互作用随距离的衰减变得越来越明显, 特别是对于短程相互作用的系统, 即 $\alpha \geq 5$ 时, 粒子间的相互作用强度随距离急剧减小, 扩散粒子相当于只受到其最近邻粒子的作用, 因此其对应的 βC_x 值较大, 并且随着 α 值的增大趋于饱和.

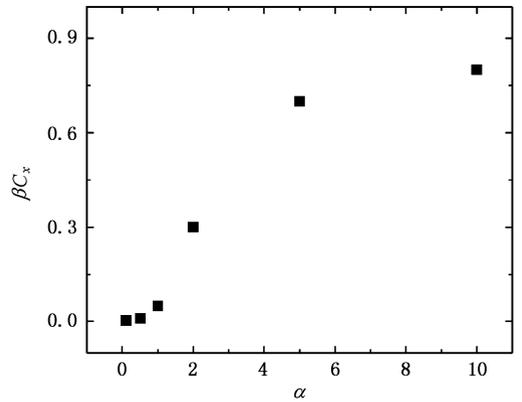


图 6 临界值 βC_x 随相互作用力程 α 的变化关系

另一方面, 图 4(b) 所示的长程相互作用系统的反常自旋分布也可以在凝聚体的磁化强度随粒子数的变化关系中得到反映. 图 7 分别给出了在 $\alpha = 0.5$, βC 从 0.01 到 0.8 时的凝聚体的磁化强度 M 随粒子数 N 的变化关系. 从图 7 可以看出, 当 $\beta C = 0.01$ 时, 凝聚体的磁化强度在整个生长过程中(即随着粒子数 N 的增加)近似为零. 然而随着 βC 值的增大, 如 $\beta C = 0.03$, 其早期的近 1000 颗粒子所对应的磁化强度也为零, 但随着生长过程的继续, 磁化强度开始逐渐增大. 这意味着在其后生长的粒子中, 某一种自旋(向上或向下)开始占主导优势, 从而出现如图 4(b) 所示的近似反铁磁结构的中心区域的外围粒子为某一自旋方向占优势并最终形成单一自旋的反常自旋分布. 随着 βC 值的继续增大, 凝聚体中心区域保持其磁化强度约为零的粒子数逐渐减少, 并最终使整个凝聚体成为单一的自旋取向, 即随着粒子数的改变, 凝聚体磁化强度的值均为 1, 如图 7 中 $\beta C = 0.8$ 时 M 随 N 的变化关系.

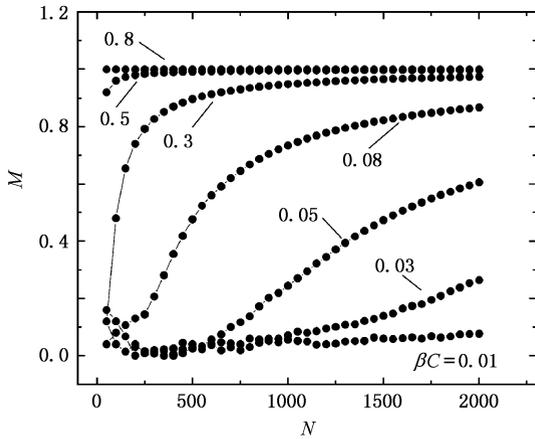


图7 凝聚体的磁化强度 M 随粒子数 N 的变化曲线 ($\alpha = 0.5$)

4. 结 论

在 DLA 模型基础上,采用 Monte Carlo 模拟方法研究了具有幂次相互作用的磁性粒子分形生长规

律. 所得主要结论如下:

(1) 在不同的磁相互作用力程情况下,模拟形成的凝聚体形貌随参数 βC 值的演化规律是不同的. 对于长程相互作用系统,随着 βC 值的变化,凝聚体从四度对称结构向 DLA 凝聚体形貌演化,中间可出现非常致密的形貌结构. 对于短程相互作用的系统,所得凝聚体形貌随 βC 的变化较小.

(2) 当 βC 为负值时,凝聚体以反铁磁形式生长,即粒子自旋交替凝聚. 而 βC 为正值时,凝聚体的自旋分布与相互作用力程有关. 对于短程作用系统,凝聚体中存在大小不同的畴块. 对于长程相互作用系统,凝聚体出现反常自旋分布,即中心区域是近似反铁磁生长的结构,其外围后续生长的粒子却保持同一种自旋取向.

(3) 凝聚体的磁化强度 M 随 βC 的变化关系反映了两种自旋在幂次相互作用系统中的竞争机制. 当 $\alpha = 0.5$ 时, M 随 βC 的增大迅速从 0 增加至 1. 当 $\alpha = 5$ 时,粒子间自旋的短程相互作用导致了较大的磁化强度涨落现象.

- [1] Zhang J Z 1995 *Fractal* (Beijing : Tsinghua University Press) (in Chinese) [张济忠 1995 分形 (北京 : 清华大学出版社)]
- [2] Vicsek T 1992 *Fractal Growth Phenomena* (Singapore : World Scientific)
- [3] Witten T A , Sander L M 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1400
- [4] Indiveri G , Levi A C , Gliozzi A *et al* 1996 *Thin Solid Films* **284—285** 106
- [5] Cannas S A , Magalhães A C N , Tamarit F A 2000 *Phys. Rev. B* **61** 11521
- [6] Pastor-Satorras R , Rubi J M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5373

- [7] Krech M , Luijten E 2000 *Phys. Rev. E* **61** 2058
- [8] Curilef S 2002 *Phys. Lett. A* **299** 366
- [9] Glumac Z , Uzelac K 2002 *Physica A* **310** 91
- [10] Di G Q , Zhang B J , Ye G X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1557 (in Chinese) [翟国庆、张邦俊、叶高翔 2005 物理学报 **54** 1557]
- [11] Luo M B , Ye G X , Tao X M *et al* 2000 *Chin. Phys.* **9** 414
- [12] Gao G L , Qian C J , Li H *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2600 (in Chinese) [高国良、钱昌吉、李洪等 2005 物理学报 **54** 2600]
- [13] Lu H J , Wu F M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 414 (in Chinese) [陆杭军、吴锋民 2006 物理学报 **55** 414]

Numerical study on the aggregation of magnetic particles with power law interactions^{*}

Xu Xiao-Jun^{1)†} Wei Gao-Yao¹⁾ Cai Ping-Gen¹⁾ Jin Jin-Sheng²⁾ Xia A-Gen²⁾ Ye Gao-Xiang²⁾

¹⁾ *Department of Applied Physics, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China*

²⁾ *Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*

(Received 14 November 2005 ; revised manuscript received 10 April 2006)

Abstract

We introduce in the diffusion-limited aggregation model an internal degree of freedom, i. e., a spin taking two states (up and down) with power-law Ising interaction. The fractal aggregation of magnetic particles with different ranges of interaction is investigated by Monte Carlo simulation. The simulation shows that for the antiferromagnetic coupling, the spins of the particles in the aggregates tend to be oriented alternately. For the ferromagnetic coupling, however, the spin orientation distribution of the aggregates depends on the interaction range: for the short-range interaction, domains with different sizes are observed in the aggregates, i. e., the aggregates exhibit ferromagnetic structure; for the long-range interaction, during the earlier stage of the growth process, the aggregates exhibit approximately antiferromagnetic structure, then, in subsequent growth of the outer part of the aggregates, the spin states of all particles are similar. The morphology and magnetization of the magnetic fractal aggregates as well as their evolutions with different ranges of interaction are also studied.

Keywords : power-law interactions, diffusion-limited aggregation, spin

PACC : 0555, 3420F, 7540D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10174063) and the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. Y604064).

[†] E-mail : xxj@zjut.edu.cn