

# 基于幂次相互作用的二维磁性团簇耦合能研究<sup>\*</sup>

许晓军<sup>1)†</sup> 王凤飞<sup>2)</sup> 蔡萍根<sup>1)</sup> 魏高尧<sup>1)</sup> 隋成华<sup>1)</sup>

1) 浙江工业大学应用物理系, 杭州 310023)

2) 浙江教育学院物理系, 杭州 310023)

(2007 年 3 月 17 日收到, 2007 年 4 月 13 日收到修改稿)

在扩散限制凝聚模型基础上, 采用 Monte Carlo 方法模拟了磁耦合作用随粒子间距离幂次变化的磁性粒子动力学凝聚过程. 重点研究了在不同幂指数  $\alpha$  值下团簇在生长过程中, 即随着粒子数  $N$  的增加, 团簇平均耦合能  $E_c(N)$  的演化过程. 模拟结果表明: 对于  $\alpha \geq 5$  时,  $E_c(N)$  随着粒子数  $N$  的增加变化较小; 当  $\alpha = 2$  时,  $E_c(N)$  随着  $N$  的增加先缓慢减小并最终趋于稳定值, 而随着  $\alpha$  的继续减小,  $E_c(N)$  逐渐演变至线性变化行为. 此外, 还研究了在不同幂指数  $\alpha$  值下团簇耦合能  $E_c$  随耦合系数的演化规律.

关键词: 扩散限制凝聚模型, 幂次相互作用, 耦合能

PACC: 0555, 3420F, 7540M

## 1. 引 言

在薄膜生长的研究中, 计算机模拟有着重要的作用. 基于 Monte Carlo 方法, 人们发展了多种模型, 用于模拟不同情况下薄膜的生长<sup>[1,2]</sup>. 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<sup>[3]</sup>. 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均是其中的典型例子<sup>[1,2]</sup>.

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, 如偶极相互作用和 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)相互作用, 它们均正比于  $1/r^3$ . 此类以  $1/r^\alpha$  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<sup>[4-11]</sup>, 有时还可作为实际相互作用的近似而被广泛采用.

本文在 DLA 模型的基础上, 采用 Monte Carlo 模拟方法研究在二维正方格点上具有幂次耦合作用的

磁性粒子的动力学团聚过程, 重点研究团簇耦合能随幂指数和耦合系数的演化规律. 而在此前的研究中, 我们已对团簇的分形结构、自旋取向分布、磁化强度及其随幂指数和耦合系数的演化规律等作了详细的报道<sup>[10,11]</sup>.

## 2. 模型模拟过程

模型表述如下<sup>[10,11]</sup>: 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, 种子的自旋均设为向上. 定义  $r_{\text{cluster}}$  为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, 对于仅含一颗种子的团簇, 其半径  $r_{\text{cluster}} = a$ , 其中  $a$  为正方点阵的最小单元. 在以种子所在的位置为圆心, 半径为  $r_{\text{cluster}} + 20a$  的圆的附近格点上随机产生一个粒子, 其自旋取向随机选定. 该扩散粒子从初始位置和初始自旋运动到最后位置和自旋时相关的扩散概率正比于  $\exp[-\Delta(\beta E)]$ . 这里  $\Delta(\beta E)$  是粒子扩散前后团簇耦合能量的差值, 其中耦合能定义为

$$E = -\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} \frac{C}{r_{ij}^\alpha} S_i S_j \quad (\alpha \geq 0), \quad (1)$$

式中  $r_{ij}$  是粒子  $i$  和粒子  $j$  之间的距离;  $S_i, S_j$  为粒子

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10574109)、浙江省自然科学基金(批准号: Y604064)和浙江工业大学科研基金(批准号: 20060028)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: xxj@zjut.edu.cn

自旋,并定义自旋向上时取为 +1,自旋向下时取为 -1.(1)式是对扩散粒子和团簇所组成系统中的所有粒子对求和.在进行 Monte Carlo 模拟生长时,我们分别计算出粒子扩散到其 8 个邻近状态(4 个最近邻和自旋向上或向下)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.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,在半径为  $r_{\text{cluster}} + 20a$  的圆的附近格点上重新随机产生一个粒子.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  $N$  增加了 1,需重新计算团簇的半径  $r_{\text{cluster}}$ .

参数  $\beta C$  和  $\alpha$  为模型的可调参数.磁性粒子间的耦合系数  $\beta C$  为负数时,团簇以反铁磁方式凝聚;反之则为铁磁方式生长.参数  $\alpha$  表征了磁耦合作用随粒子间距离衰减的关系.较小的  $\alpha$  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,与距离  $r$  无关.而较大的  $\alpha$  值则反映了短程相互作用的行为,即粒子只与最近邻的粒子有较强的相互作用,并随粒子间距离  $r$  的增大而迅速衰减.通过改变  $\alpha$  值,上述模型可以较好地模拟具有幂次磁性相互作用系统的凝聚过程,为实验现象的解释以及设计和制造具有特殊性能要求的功能薄膜、器件等提供参考<sup>[10-17]</sup>.

### 3. 结果及讨论

为了更好地分析基于此类幂次自旋耦合作用的分形团簇动力学凝聚行为,研究团簇耦合能量的演化规律,我们计算了团簇的平均耦合能量  $E_c = E/N$ ,其中团簇的总耦合能  $E$  是团簇中所有粒子对耦合作用的累加结果, $N$  为团簇所包含的粒子数.

图 1 给出了在不同幂指数  $\alpha$  值下团簇平均耦合能  $E_c$  随耦合系数  $\beta C$  的变化曲线,图中所有数据点对应于粒子数  $N = 2000$  ( $\beta C > 0$ ) 以及  $N = 1000$  ( $\beta C < 0$ ) 的团簇.很明显,对于不同的幂指数  $\alpha$  值,团簇平均耦合能  $E_c$  随耦合系数  $\beta C$  均呈现线性变化规律.模拟结果还发现,当  $\beta C$  为负值时,即粒子自旋间以反铁磁方式耦合,不同的  $\alpha$  值所对应的  $E_c$  随  $\beta C$  的变化规律除了在数值上略有差异外极其相似,而且  $E_c$  随  $\beta C$  的变化率(即曲线的斜率)也基本相

同.这说明在反铁磁生长过程中,由于磁耦合作用导致团簇中的自旋取向分布为自旋向上和向下交替排列的结构<sup>[10,11]</sup>,因而平均耦合能量  $E_c$  正比于耦合系数  $\beta C$ ,而与团簇具体的分形结构以及幂指数  $\alpha$  值关系不明显.相反,对于铁磁方式生长的系统,即  $\beta C$  为正值时,图 1 中  $\alpha \geq 5$  的两条曲线( $\alpha = 5$  和  $\alpha = 10$ )基本重合.这是由于较大的  $\alpha$  值使得粒子间的耦合作用表现为短程相互作用行为,所得团簇形貌随  $\beta C$  的变化较小,并且团簇的磁结构也类似<sup>[10,11]</sup>,因此  $E_c$  与  $\alpha$  值无关,而只与耦合系数  $\beta C$  成正比关系.当  $\alpha \leq 1$  时,图 1 中的曲线也能较好地重合在一起,但与较大  $\alpha$  值情形不同的是,图 1 中  $E_c(\beta C)$  的曲线斜率明显偏大.由于较小的  $\alpha$  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耦合作用强度基本等效.同时,由于耦合能  $E$  是团簇中所有粒子对耦合的累加结果,因此在耦合系数  $\beta C$  相同时,较小的  $\alpha$  值对应的团簇平均能要比短程相互作用时大得多,如图 1 所示.而当  $\alpha = 2$  时,此时  $E_c$  随  $\beta C$  的变化虽然仍为线性,但与  $\alpha \geq 5$  和  $\alpha \leq 1$  时不同,其数值介于两者之间.这说明  $\alpha = 2$  对应的作用力是介于短程和长程相互作用之间,粒子不仅受到其最近邻粒子的耦合作用,而且还受到其周边范围内粒子对它的作用.需要说明的是,由于随着幂指数  $\alpha$  的减小,在利用(1)式计算扩散粒子的扩散概率时,对于相同的粒子数  $N$ ,计算机所能允许的最大耦合系数  $\beta C$  是逐渐变小的.因此在图 1 中,对于  $N = 2000$  的团簇系统,其最大的  $\beta C$  值由  $400$  ( $\alpha = 10$ ) 降为  $0.5$  ( $\alpha = 0.1$ ).

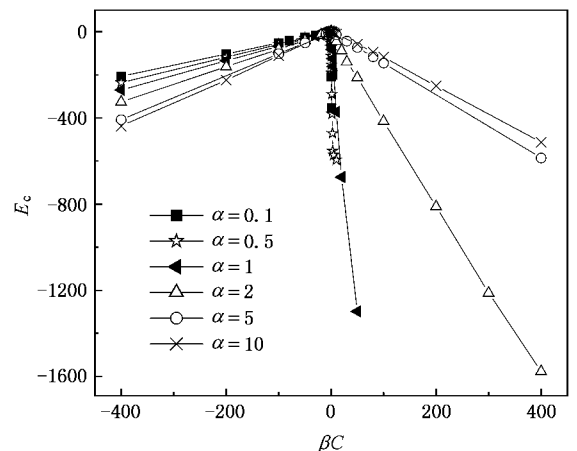


图 1 团簇平均耦合能  $E_c$  随耦合系数  $\beta C$  的变化曲线

图 2 给出了当  $\alpha \geq 5$  时团簇在生长过程中平均

耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化曲线.从图 2 可以看出,对于固定的耦合系数  $\beta C$  值,平均耦合能  $E_c$  在团簇生长过程中随着粒子数  $N$  的增加变化甚小.这说明粒子在凝聚过程中由于受到最近邻粒子的磁耦合作用,使得其凝聚的位置和自旋的取向确保了所生成的团簇在粒子数逐渐增多的过程中维持  $E_c$  为一稳定值.而且还发现,对于  $\alpha = 5$  和  $\alpha = 10$  这两种磁耦合凝聚过程,  $E_c$  随  $N$  的演化规律极其类似,如图 2(a)(b)所示.并且耦合系数  $\beta C$  相同时所对应的  $E_c$  值也基本相同.这表明在幂指数  $\alpha \geq 5$  的团簇过程中,磁耦合作用表现为最近邻相互作用,即短程作用行为.团簇在生长过程中,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方向以及自旋取向产生明显的影响.可以认为,磁耦合作用对扩散粒子黏附上团簇的位置影响较小,对粒子在黏附上团簇后的自旋取向却起着决定性的作用,而这种决定性的作用又正比于耦合系数  $\beta C$ .因此,平均耦合能  $E_c$  与团簇的大小即粒子数  $N$  无关而只与耦合系数  $\beta C$  有关.

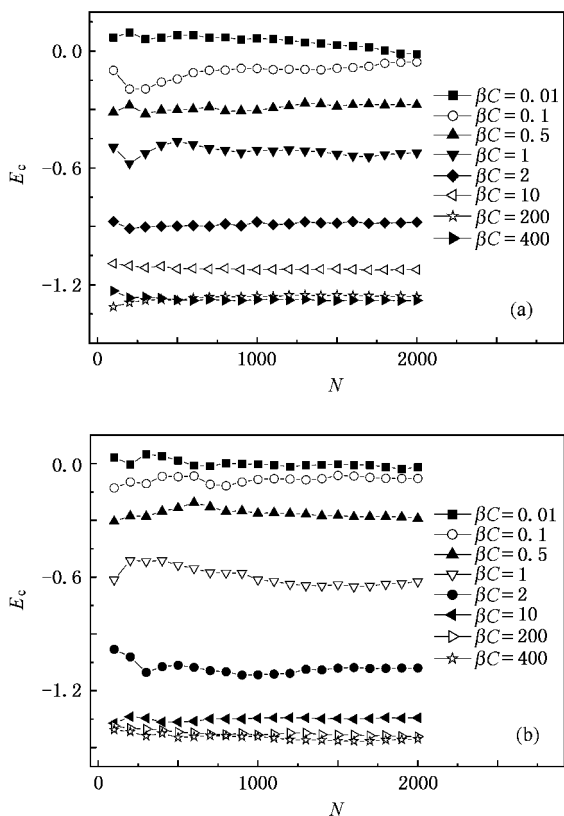


图 2  $\alpha = 5, 10$  时团簇平均耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化曲线 (a)  $\alpha = 10$ , (b)  $\alpha = 5$

图 3 给出了  $\alpha = 2$  时团簇平均耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化曲线.从图 3 可以看出,对于较小的耦合系数  $\beta C$ ,  $E_c$  在团簇生长过程中与粒子数  $N$  无关.这与图 2 所描绘的情形类似.然而对于较大的  $\beta C$ ,在团簇生长初期( $N < 500$ ),  $E_c(N)$  随粒子数  $N$  的增加缓慢减小.而在团簇的后续生长过程中,  $E_c(N)$  逐渐趋于一稳定值.比较图 2 和图 3 我们可以看出,随着幂指数  $\alpha$  值的减小,自旋间的磁耦合相互作用由最近邻的短程作用逐渐演变为中程相互作用,即粒子不仅受到其最近邻粒子的耦合作用,而且还受到其周边范围内粒子对它的作用力,平均耦合能  $E_c(N)$  在团簇生长过程中由稳定值演变为与粒子数  $N$  有关并趋向稳定值的过程.

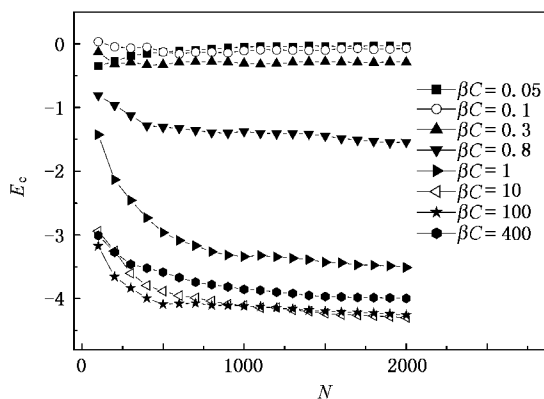


图 3  $\alpha = 2$  时团簇平均耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化曲线

对于较小的  $\alpha$  值,图 4 给出了  $\alpha = 1, 0.5, 0.1$  团簇平均耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化关系.从图 4 可以看出,当  $\beta C$  较小时,团簇的平均耦合能在整个生长过程中(即随着粒子数  $N$  的增加)近似为零.然而随着  $\beta C$  值的增大(如图 4(b)中  $\beta C = 0.03$ ),其早期的近 1500 颗粒子所对应的平均耦合能也为零,但随着生长过程的继续,平均能开始逐渐减小.很显然,这一结果与长程磁相互作用导致的反常自旋分布有关<sup>[10,11]</sup>.由于团簇早期的生长是自旋向上和向下近似交替排列的反铁磁结构,使得团簇平均耦合能近似为零.而在其后生长的粒子中,某一种自旋(向上或向下)开始占优势并最终形成单一自旋的铁磁结构,这又使得平均耦合能逐渐减小.随着  $\beta C$  值的继续增大,团簇中心区域保持其平均耦合能约为零的粒子数逐渐减少,并最终使整个团簇成为单一的自旋取向<sup>[10,11]</sup>,即随着粒子数的改变,团簇平均耦合能的值呈线性减小,如图 4(b)中  $\beta C = 0.3$  时  $E_c$

随  $N$  的变化关系.

与图 3 不同的是,图 4 所描绘的递减变化曲线在模拟范围内( $N \leq 2000$ )并未出现饱和趋势.这是由于在幂指数  $\alpha$  值较小时,粒子间的磁耦合作用为长程相互作用,参数  $\alpha$  值越小,耦合作用随粒子间

距离的变化越不明显.而团簇平均能是团簇中所有粒子间作用的累加结果,因而  $E_c$  的大小除了与耦合系数  $\beta C$  有关外还依赖于粒子数  $N$ .且  $\alpha$  越小, $E_c$  与  $N$  的关系越接近线性,如图 4(c)中  $\beta C = 0.5$  时  $E_c$  随  $N$  的变化关系.

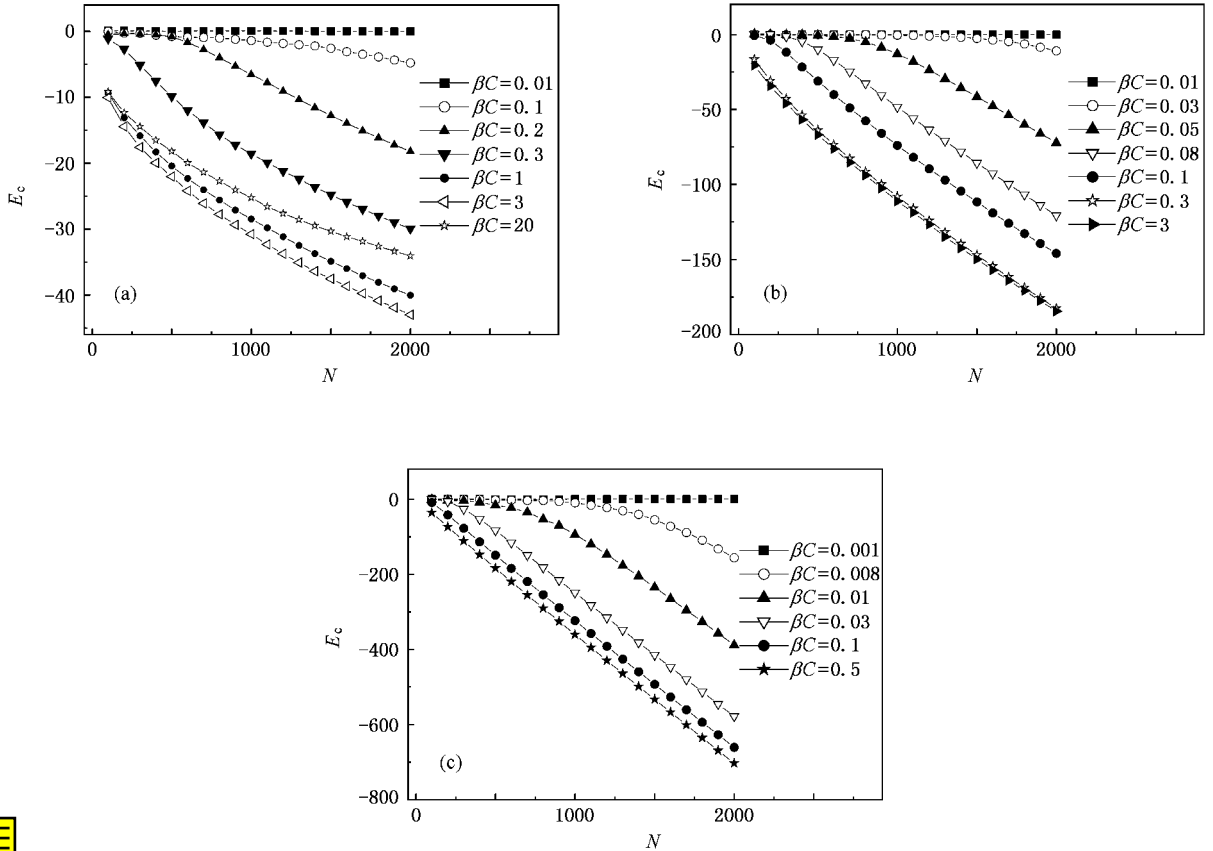


图 4  $\alpha = 0.1, 0.5, 1$  时团簇平均耦合能  $E_c$  随粒子数  $N$  的变化曲线 (a)  $\alpha = 1$ , (b)  $\alpha = 0.5$ , (c)  $\alpha = 0.1$

### 4. 结 论

本文在 DLA 模型基础上引入粒子的自旋自由度,将磁耦合系数扩展为随自旋间距离幂次变化的非常数项,采用 Monte Carlo 模拟方法研究了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)在不同的幂指数  $\alpha$  值下,模拟形成的团簇平均耦合能  $E_c$  随耦合系数  $\beta C$  值的演化规律均呈现

线性变化.  $E_c(\beta C)$  的变化率与  $\alpha$  值有关.

2)幂指数  $\alpha \geq 5$  时,团簇平均耦合能  $E_c$  随着粒子数  $N$  的增加变化较小.当  $\alpha = 2$  时, $E_c$  随着  $N$  的增加先缓慢减小并最终趋于一稳定值.当  $\alpha \leq 1$  时,对于较小的  $\beta C$  值,团簇在早期生长过程中  $E_c(N)$  近似为零,随着粒子数的增加,平均耦合能开始逐渐减小.而随着  $\beta C$  值的增加,团簇在生长过程中, $E_c(N)$  随着  $N$  的增加呈线性减小.

[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, Scalas E, Mohwald H 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 ] Xu X J , Cai P G , Ye Q L , Xia A G , Ye G X 2005 *Phys. Lett. A* **338** 1
- [ 11 ] Xu X J , Wei G Y , Cai P G , Jin J S , Xia A G , Ye G X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4039 ( in Chinese ) [ 许晓军、魏高尧、蔡萍根、金进生、夏阿根、叶高翔 2006 物理学报 **55** 4039 ]
- [ 12 ] 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 ]
- [ 13 ] Luo M B , Ye G X , Tao X M , Xu J M , Jiao Z K 2000 *Chin. Phys.*

9 414

- [ 14 ] Gao G L , Qian C J , Li H , Huang X H , Gu W J , Ye G X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2600 ( in Chinese ) [ 高国良、钱昌吉、李洪、黄晓虹、谷温静、叶高翔 2005 物理学报 **54** 2600 ]
- [ 15 ] 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 ]
- [ 16 ] Gao G L , Qian C J , Li H , Gu W J , Huang X H , Ye G X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3349 ( in Chinese ) [ 高国良、钱昌吉、李洪、谷温静、黄晓虹、叶高翔 2006 物理学报 **55** 3349 ]
- [ 17 ] Gao G L , Qian C J , Zhong R , Luo M B , Ye G X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4460 ( in Chinese ) [ 高国良、钱昌吉、钟瑞、罗孟波、叶高翔 2006 物理学报 **55** 4460 ]

## Study on the coupling energy of two-dimensional magnetic clusters with power-law interaction \*

Xu Xiao-Jun<sup>1)†</sup> Wang Feng-Fei<sup>2)</sup> Cai Ping-Gen<sup>1)</sup> Wei Gao-Yao<sup>1)</sup> Sui Cheng-Hua<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> Department of Applied Physics , Zhejiang University of Technology , Hangzhou 310023 , China )

<sup>2)</sup> Department of Physics , Zhejiang Institute of Education , Hangzhou 310023 , China )

( Received 17 March 2007 ; revised manuscript received 13 April 2007 )

### Abstract

Based on the diffusion-limited aggregation model , the kinetic aggregation process of magnetic particle with power-law coupling interaction is investigated by Monte Carlo method in this paper. The evolution of the average coupling energy  $E_c$  of clusters with particle number  $N$  for different values of exponent  $\alpha$  during the growth process is studied in detail. The simulation shows that , for  $\alpha \geq 5$  ,  $E_c(N)$  almost does not vary with  $N$  ; for  $\alpha = 2$  ,  $E_c(N)$  decreases slowly and then approaches a steady value as  $N$  further increases. For smaller values of  $\alpha$  , however ,  $E_c(N)$  varies linearly with  $N$ . The influence of the coupling parameter on the average coupling energy  $E_c$  for different values of  $\alpha$  is also studied.

**Keywords** : diffusion-limited aggregation model , power-law interaction , coupling energy

**PACC** : 0555 , 3420F , 7540M

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10574109 ) , the Natural Science Foundation of Zhejiang Province , China ( Grant No. Y604064 ) and the Scientific Research Foundation of Zhejiang University of Technology , China ( Grant No. 20060028 ).

† E-mail : xxj@zjut.edu.cn