

半无限伊辛铁磁系统表面磁性的研究*

蒋 青 李振亚

苏州大学物理系

1988年10月11日收到

本文应用平均物重整化群方法对于具有非晶化表面的半无限伊辛铁磁系统,在有表面无规场存在的情形,其表面磁性的临界性质包括临界温度、三临界点以及重入现象的可能性作了详细的研讨。

一、引 言

多年来,表面磁性特别是表面磁性的临界行为的实验和理论研究日益受到重视^[1]. 对于半无限简单立方结构的磁性系统, 可以将表面近邻自旋的交换作用 J_s 和体内的 J_b 有所区别,其关系表示为 $J_s = J_b(1 + \Delta)$ ^[2,3]. 当表面层内的自旋互作用强于体内自旋间互作用,致使参量 Δ 达到或高于某临界值 Δ_c 时,表面将先于体内达到磁的有序,表面层的临界温度将高于体内的临界温度,形成表面处于铁磁相而体内处于顺磁相,系统展现出表面和体的两类不同的相变特征. 当 $\Delta < \Delta_c$ 时,表面仅在体内达到有序时成为有序态,表面效应并无贡献.

对于具有无序表面的磁性系统,是否也展现出表面磁性,这是近年来研究兴趣的热点之一. 实验和理论研究表明,磁性原子无规分布的表面,包括座稀释、键稀释以及座-键稀释的情形^[4,5], 组分混合无序的表面 (如二元无规混合合金表面)^[6,7], 存在横场的表面^[8,9] 等,都在一定的条件下表现出表面磁性和对系统相变的表面效应.

非晶化的表面可以用人工的覆盖、离子注入和原子聚集的实验手段来实现. 对于具有非晶表面的磁性系统,其表面的磁性有什么特点,是否也展现出非晶态系统可能存在的阻挫效应和重入现象呢^[10]? 无规场伊辛模型^[11]由于适用于研究处于磁场中的无规反铁磁体、电荷密度波和聚合物而受到实验及理论工作者的注意^[12,13]. 无规场的存在对于磁性系统的临界行为有很大的影响,系统可以展现三临界点,在那里发生从二级相变到一级相变的过渡^[14]. 对于有无规场作用的表面,其表面磁性能否也展现三临界现象的特征呢? 对于上述两个方面的研究目前还不完善,处于起始不久的阶段^[15].

对于表面磁性临界行为的理论研究,已发展了多种近似方法和技术,如平均场近似^[2], 重整化群方法^[16], 有效场近似^[17], 蒙特-卡罗技术^[18] 和级数展开方法^[19] 等. 近年来提出的平均场重整化群方法^[20] (Mean Field Renormalization Group), 是一种唯象的重整化方法,它是在对称破缺的边界条件下,以比较系统内两种不同大小集团的行为^[21]. 这种方法已

* 国家自然科学基金资助的课题.

成功地应用于各种自旋系统并得到发展^[22-24]。用平均场重整化群方法来估计半无限伊辛铁磁系统的表面参量 $\Delta_s = 0.64$, 与级数方法精确解值 0.6 ± 0.1 很接近^[22], 用它来研究无序表面的表面磁性的临界行为已取得一些有意义的结果^[25,26]。本文将应用平均场重整化群方法, 详细研究简单立方伊辛铁磁系统有无规场存在的非晶表面的表面磁性临界行为。

二、理论模型

考虑一个具有非晶化表面的半无限简单立方伊辛铁磁系统, 并假设无规场仅作用于表面。系统的约化哈密顿量可表示为

$$-\beta H = \sum_{ij} K_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i S_i, \quad (1)$$

其中 $S_i = \pm 1$ 为自旋变量; $K_{ij} = \beta J_{ij}$, J_{ij} 为格点 i 和最近邻格点 j 处自旋之间的交换相互作用 ($\beta \equiv 1/k_B T$)。如果格点 i 和 j 均属于表面层, 则 K_{ij} 取为 K_{ij}^s , 否则则取为 K_b 。对于非晶表面层, 我们仍沿用点阵模型, 并对结构的无序用自旋交换作用的无规分布来描述。因此 K_{ij}^s 可作为一个独立的无规变量并满足如下的分布:

$$P(K_{ij}^s) = \frac{1}{2} [\delta(K_{ij}^s - K_s - \Delta K_s) + \delta(K_{ij}^s - K_s + \Delta K_s)], \quad (2)$$

仅作用于表面的无规场 H_i ($h_i \equiv \beta H_i$) 满足下面的几率分布:

$$P(h_i) = \frac{1}{2} [\delta(h_i - h) + \delta(h_i + h)]. \quad (3)$$

应用严格的 Callen 等式, 可求得自旋的正则平均值

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \tanh \left(\sum_j K_{ij} S_j + h_i \right) \right\rangle. \quad (4)$$

由于表面的无序结构及无规场的存在, 需要对无序结构组态进行统计平均, 方可得到表面层的平均磁化

$$m_s = \langle S_i \rangle_s = \int \prod_{ij} dK_{ij}^s P(K_{ij}^s) \int \prod_i dh_i P(h_i) \langle S_i \rangle, \quad (5)$$

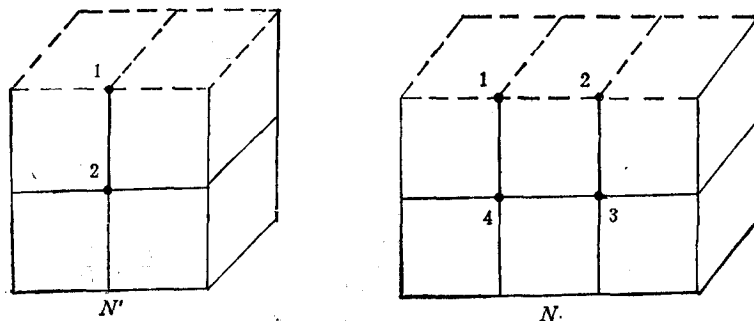


图1 集团 N' 和 N 虚线表示 $J_s(J_s)$; 实线表示 $J_b(J_b)$

其中 $\langle \cdots \rangle$, 表示对无序结构组态的统计平均.

为了研究表面层的相变, 所选取的两个不同大小的自旋集团必须同时包含表面层和体内格点的自旋. 我们所选取的是二自旋粒子 ($N' = 2$) 和四自旋粒子 ($N = 4$) 的两个集团, 如图 1 所示. 对于每个集团的边界格点自旋分别地固定等于 C'_s, C_s (格点在表面层) 和 C'_b, C_b (格点在体内), 它们分别对应于表面层和体内的自旋平均值^[22]. 对于 $N' = 2$ 和 $N = 4$ 的自旋集团, 其约化哈密顿量分别为

$$-\beta H_{N'} = K'_b S_1 S_2 + S_1 \sum_{j \neq 2} K'_{1j} C'_j + S_2 \sum_{j \neq 1} K'_b C'_j + h'_1 S_1, \quad (6)$$

$$-\beta H_N = K_b (S_1 S_4 + S_4 S_3 + S_3 S_2) + K'_{12} S_1 S_2 + h_1 S_1 + h_2 S_2 \\ + S_1 \sum_{j \neq 4, 3} K'_{1j} C_j + S_2 \sum_{j \neq 1, 3} K'_{2j} C_j + S_3 \sum_{j \neq 2, 4} K_b C_b + S_4 \sum_{j \neq 1, 3} K_b C_b. \quad (7)$$

当表面层自旋交换耦合足够强致使参量 $\Delta > \Delta_c$, 表面层将存在铁磁相 (SF) 到顺磁相 (P) 的转变. 在此相变点附近, 表面的平均磁化趋于零, 体内平均磁化等于零, 因而集团边界的自旋 $C'_s, C_s \rightarrow 0, C'_b = C_b = 0$. 表面自旋的正则平均值分别为

$$\langle S_1 \rangle_{N'} = \text{th} \left(\sum_{j \neq 2} K'_{1j} C'_j + h'_1 \right) \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} \langle S_1 + S_2 \rangle_N = \left\{ a \text{sh} \left(C_s \sum_{j \neq 2, 4} K'_{1j} + C_s \sum_{j \neq 1, 3} K'_{2j} + h_1 + h_2 \right) \right. \\ \left. + b \text{sh} \left(C_s \sum_{j \neq 2, 4} K'_{1j} - C_s \sum_{j \neq 1, 3} K'_{2j} + h_1 - h_2 \right) \right\} / \\ \left\{ a \text{ch} \left(C_s \sum_{j \neq 2, 4} K'_{1j} + C_s \sum_{j \neq 1, 3} K'_{2j} + h_1 + h_2 \right) \right. \\ \left. + b \text{ch} \left(C_s \sum_{j \neq 2, 4} K'_{1j} - C_s \sum_{j \neq 1, 3} K'_{2j} + h_1 - h_2 \right) \right\}. \quad (9)$$

其中

$$a = e^{K'_b + K'_{12}} + 3e^{-K'_b + K'_{12}}, \\ b = e^{-K'_b - K'_{12}} + 3e^{K'_b - K'_{12}}. \quad (10)$$

对于 N' 集团的自旋交换耦合和无规场分别标记为 K'_{ij} 和 h'_i . 通过对无序结构组态的平均, 计算得到表面自旋的平均磁化分别为

$$(m_s)_{N'} \equiv \langle \langle S_1 \rangle_{N'} \rangle = \frac{4K'_s}{\text{ch}^2 h'} C'_s, \quad (11)$$

$$(m_s)_N \equiv \frac{1}{2} \langle \langle S_1 + S_2 \rangle_N \rangle \\ = \frac{3K_s C_s}{2} \left\{ \frac{(a'_+ + b'_+)(\text{ch}^2 2h + 1) + 4a_+ b_+ \text{ch} 2h}{(a_+ \text{ch} 2h + b_+)^2 (a_+ + b_+ \text{ch} 2h)} a_+ \right. \\ \left. + \frac{(a'_- + b'_-)(\text{ch}^2 2h + 1) + 4a_- b_- \text{ch} 2h}{(a_- \text{ch} 2h + b_-)^2 (a_- + b_- \text{ch} 2h)} a_- \right\}. \quad (12)$$

其中

$$a_{\pm} = e^{K_b + K_s \pm \Delta K_s} + 3e^{-K_b + K_s \pm \Delta K_s}, \quad (13)$$

$$b_{\pm} = e^{-K_b - K_s \pm \Delta K_s} + 3e^{K_b - K_s \pm \Delta K_s}. \quad (14)$$

由重整化群的递推关系^[22]

$$\frac{\partial}{\partial C_s'} (m_s)_{N'}|_{C_s'=0} = \frac{\partial}{\partial C_s} (m_s)_N|_{C_s=0}, \quad (15)$$

得到相应的固定点方程 (让 $K'_b = K_b = K_b^c$, $K'_s = K_s = K_s^c$, $\Delta' = \Delta = \Delta_c$ 以及 $h' = h$) 为

$$\frac{8}{3} = \text{ch}^2 h \left\{ \frac{(a_+^2 + b_+^2)(\text{ch}^2 2h + 1) + 4a_+ b_+ \text{ch} 2h}{(a_+ \text{ch} 2h + b_+)^2 (a_+ + b_+ \text{ch} 2h)} a_+ \right. \\ \left. + \frac{(a_-^2 + b_-^2)(\text{ch}^2 2h + 1) + 4a_- b_- \text{ch} 2h}{(a_- \text{ch} 2h + b_-)^2 (a_- + b_- \text{ch} 2h)} a_- \right\}. \quad (16)$$

上面计算中我们已经运用了 $K_s = K_b(1 + \Delta)$ 的关系, 并且 $a_{\pm}$ 和 $b_{\pm}$ 表示式中已将 (13) 和 (14) 式中的 K_b 和 K_s 表示为 K_b^c 和 K_s^c . 从固定点方程 (16) 出发, 通过数值计算, 可以讨论表面的临界行为.

三、数值计算结果

为了估计体的临界温度 $T_c \equiv T_c(0, 0)$, 考虑把集团 N' 和 N 埋入立方体内, 同样采用平均场重整化群的方法, 得出体的固定点方程

$$\frac{K_b}{1 + e^{-2K_b}} = \frac{8K_b}{5} \cdot \frac{1 + e^{K_b}}{e^{K_b} + e^{-K_b} + 6}, \quad (17)$$

从而解出简单立方结构伊辛铁磁体的 $K_b^c = 0.206$, 即 $k_B T_c^b = 4.854 J_b$ ^[22]. 引入无量纲参量 $\alpha \equiv \Delta J_s / J_b = \Delta K_s / K_b$, 表示交换作用的起伏强弱程度. 将 K_b^c 代入固定点方程 (16), 可以求得

$$\Delta_c = \Delta_c(\alpha, H/J_b)$$

的临界线方程, 如图 2 所示. 图 2 表示在给定 α 值时, Δ_c 随外场 H/J_b 的变化. 图中曲线是体相变的等温线, 但曲线上各点对应于不同的表面相变温度. 由图 2 可以看出, 在 $\alpha < 1$ 的情形 (曲线 a, b, c), 表面非晶化的程度并不很强时, 无规场的作用比较明显, 此时曲线有终止点, 也即表面相变 (铁磁-顺磁) 温度的终止点, 这是二级相变的终点, 是一个三临界点, 而且三临界点所对应的 Δ_c 值随 α 的增大而升高. 在 $1 <$

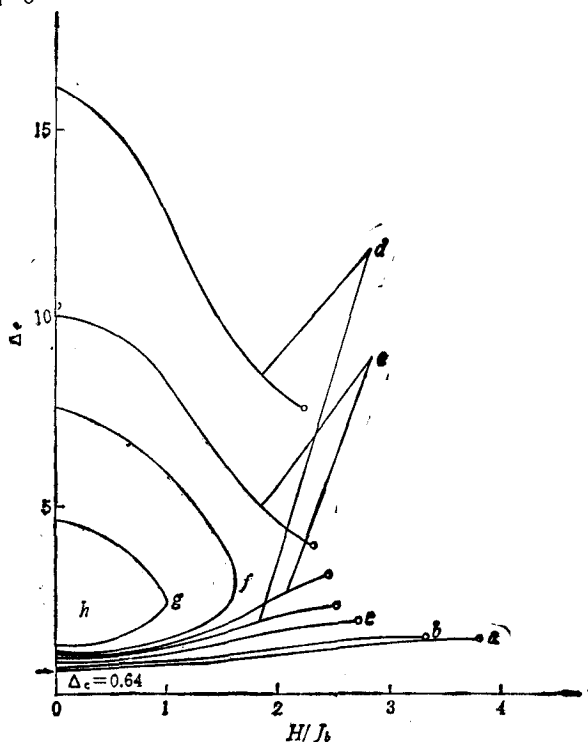


图 2 在选定 α 值下 Δ_c 随 H/J_b 的变化
曲线 a 为 $\alpha = 0.00$; 曲线 b 为 $\alpha = 0.60$; 曲线 c 为 $\alpha = 1.00$;
曲线 d 为 $\alpha = 1.10$; 曲线 e 为 $\alpha = 1.15$; 曲线 f 为 $\alpha = 1.20$;
曲线 g 为 $\alpha = 1.30$; 曲线 h 为 $\alpha = 1.40$

$\alpha < 1.153$ 的范围内(曲线 d, e), 交换作用的起伏已可导致阻挫效应和产生重入现象, 因

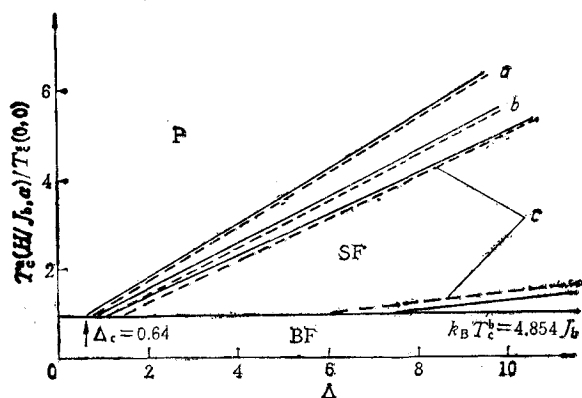
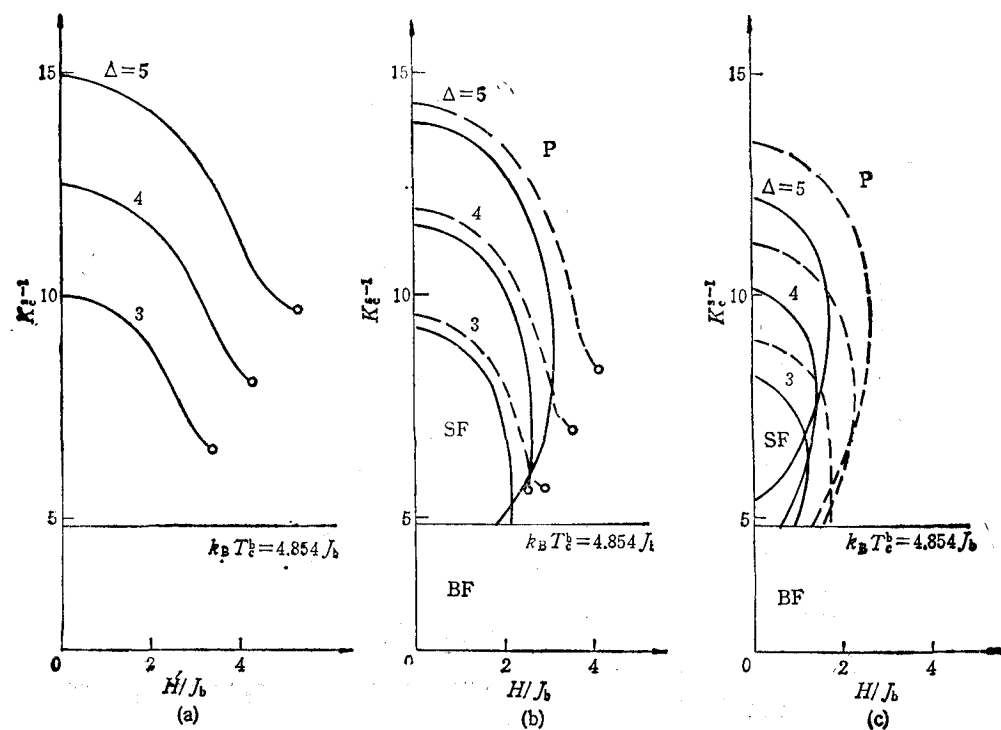


图 3 给定 $\alpha, H/J_b$ 值的相图 曲线 a 为 $\alpha = 0.0$; 曲线 b 为 $\alpha = 1.0$; 曲线 c 为 $\alpha = 1.2$; 实线代表 $H/J_b = 0$; 虚线代表 $H/J_b = 1$

因此在给定的外场 H/J_b 值时, 有两个 Δ_c 值与之对应, 表明存在两个表面相变温度, 这就是表面重入现象存在的表现, 但同时伴有三临界现象和存在三临界点. 随着 α 值的增大 (如曲线 $f, g, h, 1.153 < \alpha < 1.407$), 相应地无规场的作用减弱, 这时将仅出现重入现象而不出现三临界点. 当 $\alpha > 1.407$ 后, 重入现象不再出现, 而且 Δ_c 值也不存在, 即表面区别于体内的相变特征已经消失, 表面效应没有贡献.

当 $\Delta > \Delta_c$, 表面层在温度 T_c^s 达



(a) $\alpha = 1.00; \Delta = 5, 4, 3$ (b) $\alpha = 1.10, \Delta = 5, 4, 3$ (虚线); $\alpha = 1.15, \Delta = 5, 4, 3$ (实线)
(c) $\alpha = 1.20, \Delta = 5, 4, 3$ (虚线); $\alpha = 1.30, \Delta = 5, 4, 3$ (实线)

图 4 $(K_c^{-1}, H/J_b)$ 空间选定 α, Δ 值的相图

规场和表面非晶化的增强,都会导致表面相变温度的降低,图 4 中的曲线 c 表示了在一一定的 H/J_0 和 α 值范围内表面重入现象可以存在。

图 4 为 $(K_0^{-1}, H/J_0)$ 空间的相图,表示在给定 Δ 和 α 的情形下,表面相变温度随无规场 H/J_0 变化的关系。(a) 为给定 $\alpha = 1$ 的情形,那里表面的三临界点随着 Δ 的减小(表面交换耦合作用的减弱)而降低。数值计算表明, Δ 必须大于 1.9384 才有可能存在三临界现象;而 $\alpha = 0$ 时, Δ 大于 1.4796 时,就已可出现三临界点^[26],说明表面非晶化的增强,将抑制三临界点的出现。这些临界性质表明表面层可以具有与体内不同的相变特征。(b) 为对应 $\alpha > 1$ 的情形(虚线表示 $\alpha = 1.10$; 实线表示 $\alpha = 1.15$)。它既表示了三临界点及重入现象在表面层的存在,而且还可能存在有重入现象的三临界点(如 $\alpha = 1.15$, $\Delta = 4$)。从图 4 中还可以看出随着表面非晶化的增强,表面相变温度将导致下降。(c) 表示的是 $\alpha > 1.153$ 的情形,这时将不出现三临界点,而仅有重入现象发生。

四、结 论

本文研究了半无限简单立方结构的伊辛铁磁系统,其非晶的表面层处于无规场作用下的表面磁性。对于无规场和非晶化对系统相变的作用和影响已有作者进行过讨论,但对于同时存在于表面的情形尚未见报道。我们知道,无规场伊辛模型在理论上和实验上都表明相变的临界维数是二维,我们的讨论表明无规场存在同样会导致准二维的表面三临界现象的出现,但随着表面层交换作用与体内交换作用的接近(即 Δ 的减小),三临界点将随之降低而达到消失;另一方面表面非晶化程度的增强也会抑制三临界点的出现,在 $1.153 < \alpha < 1.407$ 范围内,三临界点就会消失,这是一个新的结果。

表面交换作用的起伏会导致表面层临界温度的下降,因而也降低三临界点,而导致三临界点的消失。另一方面,当 $\alpha > 1$ 时,同样可能导致重入现象,这是由于 $\alpha > 1$ 的情形有可能使 J_s 取负值,形成阻挫效应。所以仅有三临界点而无重入现象或仅存在重入现象而三临界点消失,或出现重入三临界点即既有重入现象又有三临界点,是无规场和非晶化作用互相竞争的结果。本文应用新近发展的平均场重整化群方法,研讨了表面磁化的临界性质,得到了一些新的结果,其目的是为了进一步促进关于非晶表面层临界磁性的理论和实验研究。

- [1] K. Binder, Phase Transition and Critical Phenomena, ed. C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic Press Inc., Vol. 8(1983), p. 1.
- [2] D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B3**(1971), 3887.
- [3] D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B3**(1973), 4424.
- [4] E. F. Sarmiento, I. Tamura and T. Kaneyoshi, *Z. Phys. B*, **54**(1984), 241.
- [5] C. Z. Yang (杨传章) and Z. Y. Li (李派亚), *Phys. Stat. Sol. (b)*, **136**(1986), 575.
- [6] J. M. Moran-Lopen and L. M. Falicov, Excitation in Disordered System, ed. by M. F. Thorpe, Plenum Press, (1981).
- [7] T. Kaneyoshi, *J. Phys. Soc. Jap.*, **56**(1987), 2675; 2886.
- [8] I. Tamura, E. F. Sarments and T. Kaneyoshi, *J. Phys. C*, **17**(1984), 3207.
- [9] W. J. Song (宋为基) and Z. Y. Li (李派亚), *Solid State Commun.*, **59**(1986), 747.
- [10] T. Kaneyoshi and I. Tamura, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 5246.

- [11] Y. Imry and S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **35**(1975), 1399.
- [12] S. Fishman and A. Aharony, *J. Phys. C*, **12**(1979), L729.
- [13] R. Bruinsma, *Nonlinearity in Condensed Matter*, ed. A. R. Boship *et al.*, (1987), p. 291, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [14] I. D. Lawrie and S. Sarbach, *Phase Transition and Critical Phenomena*, Vol. 9, p. 1, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic Press Inc. (London), LTD (1984).
- [15] T. Kaneyoshi, *J. Phys. C*, **21**(1988), L679.
- [16] T. W. Burkhard and E. Eisenrigle, *Phys. Rev.*, **B16**(1977), 3213.
- [17] T. Kaneyoshi and I. Tamura, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 6491.
- [18] K. Binder and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 318.
- [19] K. Binder and P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.*, **B9**(1974), 2194.
- [20] J. O. Indeku, A. Maritan and A. L. Stella, *J. Phys. A*, **15**(1982), L291.
- [21] M. Droz, A. Maritan and A. L. Stella, *Phys. Lett.*, **92A**(1982), 287.
- [22] M. C. Margues and M. A. Santos, *Phys. Lett.*, **118A**(1986), 41.
- [23] J. A. Plascake, *J. Phys. A*, **17**(1984), 1597; L279.
- [24] Z. Y. Li (李振亚) and C. Z. Yang (杨传章), *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 5744.
- [25] C. Z. Yang (杨传章) and Z. Y. Li (李振亚), *Phys. Stat. Sol. (b)*, **146**(1988), 223.
- [26] Q. Jiang (蒋青) and Z. Y. Li (李振亚), *Phys. Rev. B*, 待发表.

STUDY OF SURFACE MAGNETISM IN A SEMI-INFINITE ISING FERROMAGNETIC SYSTEM

JIANG QIN LI ZHEN-YA

Department of Physics, Suzhou University

(Received 11 October 1988)

ABSTRACT

We use the mean field renormalization group method to treat the semi-infinite Ising ferromagnetic system with the amorphization of the surface. The critical behavior of the surface with a surface random field, including critical temperature, the possibility of tricritical and reentrant phenomena, are investigated in detail.