

稀磁体系相变的相界关系

郑茂盛 刘云鹏 罗恩泽

西安电子科技大学物理系, 西安, 710071

1989 年 11 月 28 日收到

本文将纯键和纯座逾渗的普适关系作了推广, 建立了键座混合逾渗的相界关系, 并讨论了稀磁体系相变问题, 给出了稀磁体系相变的相界关系. 与以往文献中所给出的级数展开、有限集团近似, 以及数值模拟等方法相比较, 本文所给出的关系式简单、直观、物理概念清晰, 且较为精确.

PACC: 7530K; 7530; 7550K

一、引 言

键座混合逾渗可以看作是纯键和纯座逾渗的一个推广^[1]. 目前, 对于这一问题通常用两种方法处理, 即重整化群方法和数值模拟(如 Monte Carlo 法、级数展开法等)方法. 如所周知, 前一种方法对于计算逾渗阈值等是不精确的, 后者尽管较为精确, 但其工作量大, 且较复杂. 因此, 不管是从实际应用的角度, 还是从理论研究的角度, 有必要建立一个键座混合逾渗的相界关系.

稀磁体系的磁性——顺磁相变是一个典型的键座混合逾渗体系. 于此, 磁性单元处于座的地位, 而磁性单元间的耦合作用则起着键的作用. 对于这一键座混合逾渗问题的研究, 目前一般采用级数展开法、有限集团近似法, 以及数值模拟法等来完成. 这些方法较为复杂, 工作量大, 使用起来很不方便^[2].

本文中将纯键和纯座逾渗中的普适关系加以推广, 建立起键座混合逾渗的一般的相界关系, 并用 Monte Carlo 模拟结果作了检验, 发现二者相当符合. 接着给出了稀磁体系相变的相界关系式, 与文献中所给的实验结果相比, 这一关系式能较好地描述稀磁体系相变的相界关系.

二、键座混合逾渗的相界关系

在纯键逾渗中, 座是完全被占据的, 当键的占据概率 P_b 大于某一阈值 P_{bc} 时, 即 $P_b > P_{bc}$, 体系中就出现无限大的逾渗集团. 且 P_{bc} 依赖于体系的拓扑维数和体系的微观结构^[3]. 对于一个给定的结构, 某一座位的最近邻座数(下称配位数)如为 Z_{e0} , 则有如下普适关系^[4].

$$P_{bc} \cdot Z_{e0} = C. \quad (1)$$

其中 C 为一常数,对二维拓扑空间, $C = 2$, 对三维拓扑空间, $C = 1.45^{[1]}$.

(1)式反映出键逾渗阈值 P_{bc} 与其相应结构中座的配位数 Z_0 间的关系. 当 Z_0 减小时, P_{bc} 必须增加,以便形成无限大逾渗集团.

在键座混合逾渗中^[1], 键和座都不是被完全占据的. 如果座的占据概率为 P_s , 则对于任一被占据座,其最近邻的 Z_0 个座位中,被占据的座位数 Z 将随着 P_s 的增加而增加. Z 在整个体系中的平均值 Z_e (称有效配位数)也将随 P_s 的增加而增加. 在一级近似下,可以假定这种关系为线性的,即

$$Z_e = A \cdot P_s + B. \quad (2)$$

假定在一个有效配位数为 Z_e 的体系中,欲形成无限大的逾渗集团,则键概率 P_b 必须大于其阈值 P'_{bc} , 而 Z_e 与 P'_{bc} 间的关系具有(1)式的形式,即

$$Z_e \cdot P'_{bc} = (A \cdot P_s + B) \cdot P'_{bc} = C. \quad (3)$$

若(3)式能够成立,则它实际上就给出了 P_s 与 P'_{bc} 间的关系,即键座混合逾渗的相界关系. 且纯键逾渗和纯座逾渗都将成为它的特例. 这样,当我们把这两个特例代入(3)式时,(3)式应自动满足. 对于纯键逾渗, $P_s = 1$, $P'_{bc} = P_{bc}$, 代入(3)式,有

$$(A \cdot 1 + B) \cdot P_{bc} = C. \quad (4)$$

如以 P_{sc} 表示相应结构的纯座逾渗的逾渗阈值,则对于纯座逾渗, $P_s = P_{sc}$, $P'_{bc} = 1$, (3)式变成

$$(A \cdot P_{sc} + B) \cdot 1 = C. \quad (5)$$

显然,(4),(5)式即为关于 A, B 的方程组,其解为

$$A = (1 - P_{bc}) \cdot C / [P_{bc} \cdot (1 - P_{sc})], \quad (6)$$

$$B = [P_{bc} \cdot (1 - P_{sc}) - P_{sc} \cdot (1 - P_{bc})] \cdot C / [P_{bc} \cdot (1 - P_{sc})]. \quad (7)$$

对于一些典型结构,其 P_{bc} , P_{sc} , A, B 等的数值列于表 1 中. 其中 P_{bc} 和 P_{sc} 的值取自文献[1].

表 1 一些典型结构的 A, B 值

空间维数 D	体系结构	纯键逾渗阈值 P_{bc}	纯座逾渗阈值 P_{sc}	A	B	C
2	正 方 形	0.5	0.6	5	-1	2
2	三 角 形	0.3473	0.5	7.517	-1.759	2
2	蜂 房 形	0.6527	0.698	3.524	-0.460	2
2	Kagomé	0.45	0.6527	7.038	-2.594	2
3	面心立方	0.119	0.198	13.385	-1.2	1.45
3	体心立方	0.179	0.245	8.809	-0.708	1.45
3	简单立方	0.247	0.311	6.416	-0.545	1.45
3	金刚石型	0.388	0.428	3.998	-0.261	1.45

这样,如将上述 A, B, C 值代入(3)式,就可以预测键座混合逾渗的相界关系. 图 1 和图 2 分别给出了二维和三维情况下, (3)式的计算结果与我们用 Monte Carlo 模拟法比较的典型情况. 其中实线为(3)式的计算结果,实心圆点为 Monte Carlo 模拟结果. 可以看出,(3)式的计算结果与模拟结果相当符合,且误差小于 1%.

最近,文献[3]中也给出了一个键座混合逾渗的相界的经验关系

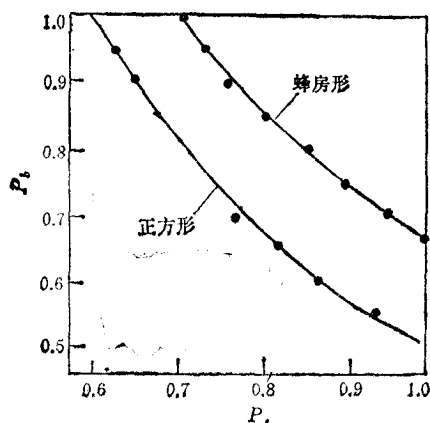


图1 二维相界关系

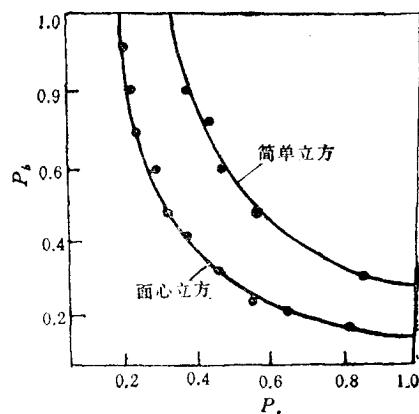


图2 三维相界关系

$$P'_{bc} \cdot P_i^x = P_{bc}, \quad x = \ln(P_{bc}) / \ln(P_{ic}). \quad (8)$$

然而,这一关系式不够精确,且物理意义也不清楚。

三、稀磁体系相变的相界关系

近来,稀磁体系 $A_p B_{1-p}$ 的相图虽然有不少报道^[2,4,5],且也有用键座混合逾渗机制进行处理的^[2],但这些处理一般用级数展开法、有限集团近似法,或数值模拟法进行的^[2],未见给出一个物理含义清晰的相界关系式。下面我们试图给出这一关系式。

如磁性单元 A 的概率(即座概率)为 P_i , 其间的耦合概率(即键概率)为 P_b , 则其普遍的相界关系应为(3)式。且对于稀磁体系, P_b 应为磁性单元 A 之间耦合能 J 和温度 T 的函数,即

$$P_b = P_b(J, T). \quad (9)$$

代入(3)式,则有

$$(A \cdot P_i + B) \cdot P'_{bc}(J, T) = C. \quad (10)$$

其中 A, B, C 的含义与(3)式相同。

进一步,可以从(10)式得到稀磁体系相变的居里温度 T'_c 的函数式,即

$$T'_c = T'_c(A \cdot P_i + B, C, J). \quad (11)$$

(10)和(11)式便是稀磁体系相变的相界关系。

对于具体的体系,(10)和(11)式可以写成较为简单的形式。

如磁性单元的自旋 $s = 1/2$, 则键概率 P_b 为^[1]

$$P_b = 1 - \exp(-J/k_B \cdot T). \quad (12)$$

其中 k_B 为 Boltzmann 常数。

若与 $P_i = 1$ 的“纯磁”体系相变相应的居里温度为 T_{c0} , 则

$$P_{bc} = 1 - \exp(-J/k_B \cdot T_{c0}). \quad (13)$$

将(12),(13)式代入(10),(11)式,得到

$$T_c'/T_{c0} = \left[\ln \left(\frac{A+B-C}{A+B} \right) \right] / \left[\ln \left(\frac{A \cdot P_i + B - C}{A \cdot P_i + B} \right) \right]. \quad (14)$$

此即自旋 $s = 1/2$ 稀磁体系相变的相界关系。

文献[2]给出了自旋 $s = 1/2$ 的简单立方和体心立方等结构的稀磁体系相变的实验结果。我们用(14)式对其作了处理,并同文献[2]中的实验数据一并示于图3和图4中。其中,实线为(14)式的计算结果;实心三角形表示简单立方结构的 $\text{FeL}_6(\text{ClO}_4)_2:\text{Zn}$ 的实验结果;实心圆点表示体心立方结构的 $\text{CoCs}_3\text{Cl}_5:\text{Zn}$ 的实验结果^[2]。可以看出,(14)式的计算结果与实验符合较好。

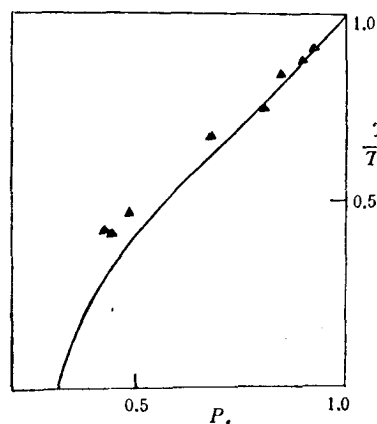


图3 $\text{FeL}_6(\text{ClO}_4)_2:\text{Zn}$ 的 $T_c'/T_{c0}-P_i$ 关系

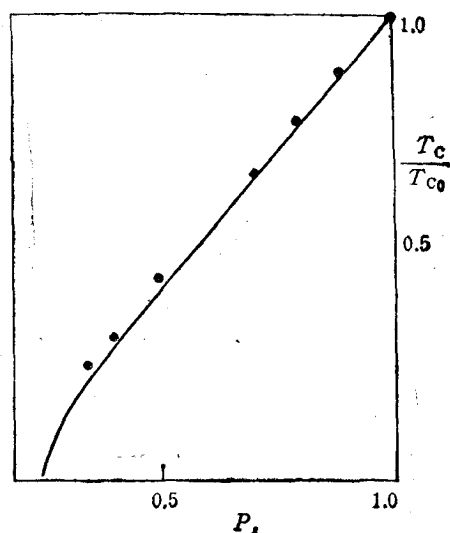


图4 $\text{CoCs}_3\text{Cl}_5:\text{Zn}$ 的 $T_c'/T_{c0}-P_i$ 关系

文献[2]还报道了许多作者用级数展开法、有限集团近似,以及数值模拟等方法得到的结果。这些结果与实验的符合程度与图3,图4中(14)式的情况基本相同。然而,很显然,(14)式简单、直观、物理含义清晰。

- [1] R. Zallen, *The Physics of Amorphous solids*, A Wiley-Interscience, New York, (1983), p. 4.
- [2] L. T. de Jough, In *Mag. Phase Transitions*, Springer-Verlag, Berlin, (1983), p. 3, Editors: M. Ausloos, R. Elliott.
- [3] R. L. Holtz, *J. Phys. A*, **21** (1988), 1303.
- [4] A. Aharony, *J. Mag. Mag. Mat.*, **7**(1978), 198.
- [5] K. C. Chang, T. Odagaki, *J. Stat. Phys.*, **35**(1984), 507.

THE SITE-BOND PERCOLATION OF PHASE TRANSITION IN DILUTED MAGNETIC SYSTEM

ZHENG MAO-SHENG LIU YUN-PENG LUO EN-ZE

Department of Physics, Xidian University, Xian, 710071

(Received 28 November 1989)

ABSTRACT

The phase boundary relationships for site-bond percolation and diluted magnetic system transition are established by generalizing the universal relationships of pure site and pure bond percolations. As compared with other methods used to treat the problems of site-bond percolation and diluted magnetic system transition, it can be found that the relationships given in the present paper has some advantages, such as, simplicity, convenient to use, and accuracy. Especially, it has a clearer physical meaning.

PACC: 7530K; 7530; 7550K