

周期性调制稀释 **Ising** 体系的相变^{*}

高 红 王选章 吕树臣

(哈尔滨师范大学物理系, 哈尔滨 150080)

(1995 年 7 月 3 日收到; 1996 年 2 月 2 日收到修改稿)

利用关联有效场方法, 研究了正弦调制稀释 **Ising** 铁磁体系在无横场和有横场下的相变, 侧重于体系的临界温度随调制幅度的变化以及临界温度对横场的依赖关系. 有趣的结论是: 体系磁性原子浓度的这种非均匀性可以提高其临界温度. 但是, 调制幅度的进一步上升可以引起体系由整体磁有序向部分磁有序的跃变.

PACC: 7510; 7530K

1 引 言

在过去十几年中, 人们已对磁性多层膜及超晶格结构进行了广泛的理论和实验研究. 对磁性超晶格相变性质而言, 在理论描述上, 多采用局域自旋模型, 如 **Ising** 铁磁超晶格中的相变问题^[1-3], **Heisenberg** 磁性超晶格中的相图^[4-7]. 同时人们也就超晶格的表面磁性及相变性质进行了讨论^[1,8]. 最近人们还引入了具有侧向表面的磁性超晶格^[9]. 在众多的理论研究中人们均假设超晶格的两个组分层的界面是理想的, 即界面两侧的原了没有通过界面的扩散, 而从实际制备出的磁超晶格的样品来看, 事实并非如此, 一般地讲, 界面不是严格清晰的. 另一方面, 稀释磁性体系本身在磁学和统计模型中就是很有趣的, 特别是 **Ising** 自旋体系, 它的相变与渗流人们已做了大量的工作. 就我们这里所关心的, 如具有表面层磁性原子稀释的半无限体系的相图^[10], 稀释半无限 **Ising** 体系的相变^[11,12], 以及稀释 **Ising** 磁性膜^[13-15]等都存在一些有趣的性质. 在这类问题的研究中人们至多取表面层磁性原子浓度有别于内层的. 对于磁性原子浓度在空间上是非均匀的体系的研究尚未见报道.

我们研究一个磁性原子浓度周期性调制的 **Ising** 体系, 即每一个原子层的磁性原子浓度是均匀的, 但不同层上的磁性原子浓度是不同的, 它是层的位置的函数. 这种体系在制备磁性-非磁性超晶格中也许是现实的, 因为磁性原子与非磁性原子通过界面会扩散. 若超晶格周期较小, 且在超晶格中非磁性原子比重不大时, 就能形成比较理想的周期性磁性调制体系. 磁性原子的浓度作为层位置的周期函数也许在实际上很复杂, 这与制备条件和技术关系很大. 在此不准备考虑比较复杂的情况, 而只取磁原子浓度为层坐标的正弦函数, 将重点考察磁原子的非均匀性给体系的相变性质带来的影响. 由于近年来人们对横场

^{*} 国家自然科学基金和黑龙江省自然科学基金资助的课题.

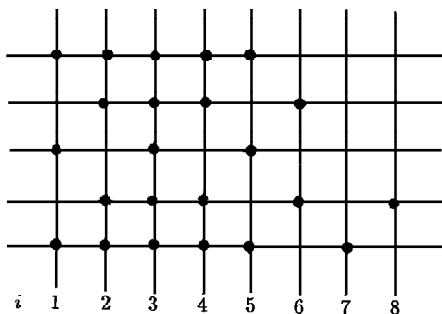
Ising 模型产生了很大的兴趣^[16-19],因而我们也将把这种体系放在横向磁场中,考察横场对相变的影响.

2 理 论

我们取简单立方晶格,晶格的格点可被磁性原子占据,此时认为该格点有一个自旋,也可被非磁性原子占据,此时认为格点为空格点.用 Ising 自旋 $s=1/2$ 模型来描写这种稀释磁性体系,并将其放在横向磁场中.当横场为零时,这就是一般的稀释 Ising 体系;当横场存在时,这个体系就是稀释横向 Ising 系统.体系的哈密顿量表示为

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z \xi_i \xi_j - F \sum_i S_i^z \xi_i, \quad (1)$$

其中 J_{ij} 为最近邻磁原子自旋之间的相互作用常数; S^z , S^x 是自旋算符 $\hat{S}$ 的分量; F 是作用在磁原子自旋上的横场; ξ_i 是在格点 i 上磁性原子的占有数,当格点 i 被磁性原子占据时 $\xi_i = 1$, 否则 $\xi_i = 0$. 我们所研究的体系示意图如图 1 所示,其中的曲线为磁性原子浓度的变化曲线, C_0 表示平均磁性原子浓度, C_m 为调制幅度, C_i 是第 i 层的磁性原子浓度.



按有效场方法,任意原子的自旋平均值为

$$\langle \sigma_i^z \rangle = \left\langle \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j^z \xi_j / H_i \right) \tanh \left(\frac{\beta}{4} H_i \right) \right\rangle, \quad (2)$$

其中已取 $\langle \sigma_i^z \rangle = 2 \langle S_i^z \rangle$, $\beta = 1/kT$, 式中 $\langle \dots \rangle$ 表示热力学平均. H_i 是作用于第 i 个磁性原子自旋上的等效场,表示式为

$$H_i = \left[(2F)^2 + \left(\sum_j J_{ij} \sigma_j^z \xi_j \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (3)$$

引入微分算符后(2)式变为

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^z \rangle &= \left\langle \exp \left(D \sum_j J_{ij} \sigma_j^z \xi_j \right) \right\rangle G(x) \Big|_{x=0} \\ &= \left\langle \prod_j \left[\xi_j (\cosh(DJ_{ij}) + \sigma_j^z \sinh(DJ_{ij})) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - \xi_j) \right] \right\rangle G(x) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $D = \partial / \partial x$, 而函数 $G(x)$ 为

$$G(x) = \frac{x}{(4F^2 + x^2)^{1/2}} \tanh \left[\frac{\beta}{4} (4F^2 + x^2)^{1/2} \right]. \quad (5)$$

对于稀释磁性体系,在对原子自旋求出热力学平均后还应进行位形平均,这样第 i 个原子磁矩为

图 1 本文研究体系的侧向示意图 表示格点被磁性原子占据;下方的曲线是在调制方向上磁性原子浓度的变化曲线

$$M_i = \langle \xi_i \sigma_i^z \rangle_r, \quad (6)$$

$\langle \cdots \rangle_r$ 指位形平均. 在(4)式中采用如下近似:

$$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \cdots \sigma_m^z \rangle = \langle \sigma_i^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle \cdots \langle \sigma_m^z \rangle, \quad (7)$$

$$\langle \xi_i \xi_j \cdots \xi_m \rangle = \langle \xi_i \rangle \langle \xi_j \rangle \cdots \langle \xi_m \rangle, \quad (8)$$

$$\langle \xi_i \sigma_i^z \rangle_r = \langle \xi_i \rangle_r \langle \sigma_i^z \rangle_r. \quad (9)$$

(7)式表示的近似是有效场理论在考虑一定关联效应后为了能对(4)式做计算而采取的步骤, 这种步骤在有效场理论处理各种 Ising 系统时都常采用, 如文献[10, 14, 20—23]. 注意到任意原子层中的磁性原子浓度是均匀的, 而不同层的浓度是不同的, 因而本文中的格点位形平均应在格点所在的层中进行. 在考虑到位形平均和热力学平均后, 每层中所有格点上的平均磁矩应相同. 这样, 利用(7)–(9)式和定义式(6)得到

$$M_i = C_i \prod_j [C_j \cosh(DJ) + M_j \sinh(DJ) + (1 - C_j)] G(x) \big|_{x=0}. \quad (10)$$

这里设所有磁性原子之间的近邻作用均相等, 即 $J_{ij} = J$. (10)式中下标 i 代表第 i 个原子层, 而 j 是指第 i 个原子层中的任意一个原子的第 j 个最近邻原子. 前面提到, 我们的体系磁性原子浓度是周期性调制的, 取第 i 层磁性原子浓度为

$$C_i = C_0 + C_m \sin \left[\frac{2\pi i a}{L} \right], \quad (11)$$

其中 a 为晶格常数, $L = na$ (n 是一个周期所含的原子层数) 是调制周期. C_0 是平均磁原子浓度, 而 C_m 是调制幅度. 在本文中只关心临界性质, 因而以 M_i ($i = 1, 2, \cdots, n$) 为小量对(10)式做线性展开并考虑到周期性, 有下列联立方程:

$$\begin{cases} A_1 M_2 + B_1 M_1 + E_1 M_n = 0, \\ A_i M_{i+1} + B_i M_i + E_i M_{i-1} = 0 \quad (i = 2, 3, \cdots, n-1), \\ A_n M_1 + B_n M_n + E_n M_{n-1} = 0. \end{cases} \quad (12)$$

此时临界温度由上述方程组的系数矩阵的行列式为零来决定

$$\begin{vmatrix} B_1 & A_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & E_1 \\ E_2 & B_2 & A_2 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & E_3 & B_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & E_{n-1} & B_{n-1} & A_{n-1} \\ A_n & 0 & 0 & \cdots & 0 & E_n & B_n \end{vmatrix} = 0. \quad (13)$$

(13)式中系数的表达式为

$$A_1 = C_1 [C_1 \cosh(DJ) + (1 - C_1)]^4 [C_n \cosh(DJ) + (1 - C_n)] \sinh(DJ) G(x) \big|_{x=0}, \quad (14)$$

$$B_1 = 4 C_1 [C_1 \cosh(DJ) + (1 - C_1)]^3 [C_2 \cosh(DJ) + (1 - C_2)] [C_n \cosh(DJ) + (1 - C_n)] \times \sinh(DJ) G(x) \big|_{x=0} - 1, \quad (15)$$

$$A_i = C_i [C_i \cosh(DJ) + (1 - C_i)]^4 [C_{i-1} \cosh(DJ) + (1 - C_{i-1})] \sinh(DJ) G(x) \big|_{x=0}$$

$$(i = 2, 3, \dots, n), \quad (16)$$

$$B_i = 4 C_i [C_i \cosh(DJ) + (1 - C_i)]^3 [C_{i+1} \cosh(DJ) + (1 - C_{i+1})] \\ \times [C_{i-1} \cosh(DJ) + (1 - C_{i-1})] \sinh(DJ) G(x) \Big|_{x=0} - 1 \quad (i = 2, 3, \dots, n-1), \quad (17)$$

$$E_i = C_i [C_i \cosh(DJ) + (1 - C_i)]^4 [C_{i+1} \cosh(DJ) + (1 - C_{i+1})] \sinh(DJ) G(x) \Big|_{x=0} \\ (i = 1, 2, \dots, n-1), \quad (18)$$

$$B_n = 4 C_n [C_n \cosh(DJ) + (1 - C_n)]^3 [C_1 \cosh(DJ) + (1 - C_1)] \\ \times [C_{n-1} \cosh(DJ) + (1 - C_{n-1})] \sinh(DJ) G(x) \Big|_{x=0} - 1, \quad (19)$$

$$E_n = C_n [C_n \cosh(DJ) + (1 - C_n)]^4 [C_1 \cosh(DJ) + (1 - C_1)] \sinh(DJ) G(x) \Big|_{x=0}. \quad (20)$$

方程(13)决定了临界温度和平均浓度 C_0 、浓度调制幅度 C_m 以及横场的关系。

3 结果与讨论

本文主要目的是研究临界温度与磁性原子浓度的变化幅度(C_m)的关系,换言之,就是考虑磁性原子浓度的这种非均匀性对体系相变的影响.此外,还将讨论这种非均匀磁性系统的相变温度随横场的变化.对(13)式进行数值计算时取调制周期 $L = 8a$.由于均匀大块稀释 Ising 体系的临界浓度约为 $C_c = 0.278$,因而在计算中保持平均磁性原子浓度 $C_0 > 0.30$.在外加横场的作用下,均匀大块稀释 Ising 体系的临界浓度 C_c 要提高.图 2 给出了在不同的横场下,均匀大块稀释 Ising 体系的临界温度作为磁性原子浓度的函数,可以看到横场对 C_c 的影响是明显的.在计算中还注意到 $C_m < C_0$,且每个原子层上的磁性原子浓度 $C_i \leq 1$.

图 3 给出了在不同的平均浓度下,临界温度随磁性原子浓度的调制幅度 C_m 的变化.由于在此已取横场为零,因而这是一个一般的周期调制稀释 Ising 体系.在平均磁性原子

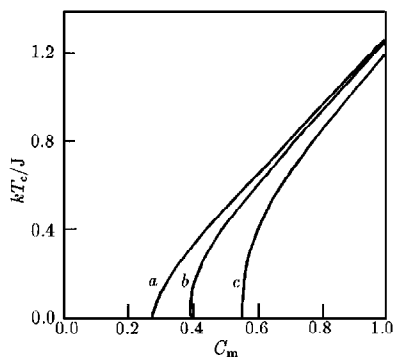


图 2 相同结构的均匀稀释 Ising 体系中,在不同横场下,临界温度随磁性原子浓度的变化.曲线 a 为 $F/J=0$;曲线 b 为 $F/J=0.5$;曲线 c 为 $F/J=1.0$

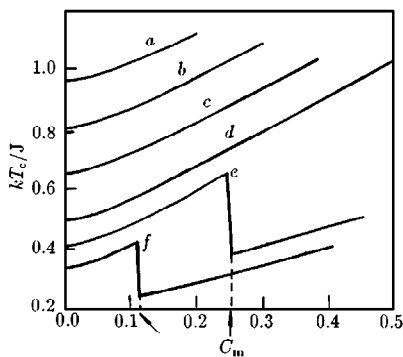


图 3 无横场时,临界温度随浓度调制幅度的变化.箭头表示从整体铁磁相向部分铁磁相转变时的临界 C_m 值;虚线左边是整体磁性相,右边为部分磁性相;曲线从 a 到 f 分别对应 $C_0 = 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.45$ 和 0.4

浓度较高时,即 $C_0=0.8, 0.7, 0.6$ 和 0.5 , 临界温度随 C_m 的增加而增加, 此时磁性原子分布的非均匀性使体系的临界温度上升. 在平均磁性原子浓度较低时, 即 $C_0=0.45$ 和 0.4 时, 在 C_m 开始增加时, 临界温度上升; 当 C_m 达到某一数值, 临界温度突然下落, 然后临界温度在一个较小值上随 C_m 的上升而继续上升. 上述现象的出现是不难理解的. 首先, 在平均磁性原子浓度 C_0 较高时, 随 C_m 增加, 体系内磁性原子分布不均匀, 某些层上磁性原子浓度增大, 而某些层上磁性原子浓度下降. 由于层与层之间的耦合, 尽管个别层上磁性原子浓度已经低于 0.3 , 体系仍保持整体磁有序相, 此时临界温度指的是整体磁有序相到顺磁相的转变点. 另外, 在这种磁非均匀体系中, 磁性原子浓度高的区域对磁性相存在有利, 而磁性原子浓度低的地方对磁性相存在不利. 但是, 由于体系内原子层之间的耦合, 体系仍保持统一的磁性相及相变温度是可以理解的. 有意义的是体系的磁性原子的非均匀性使临界温度增高. 其次, 当平均磁性原子浓度 C_0 比较低时, 随着 C_m 从零开始增加, 临界温度提高. 但是, 当 C_m 增加到某值之后, 这种非均匀磁性系统中的某些区域上的磁性原子浓度过低而不能满足在该区域上存在磁性相对浓度的要求, 因而体系只能存在部分磁性相. 这种部分磁性相的存在还可以通过半无限稀释 Ising 体系的表面相^[11,12]进一步理解, 那里当内部磁性原子浓度低于某一临界值而表面磁性原子浓度较高时, 就只有表面相的存在. 我们所说的部分磁性相仍然是一种长程序, 它存在于磁浓度最高的原子平面的近域上, 是准二维长程序. 由于空间中顺磁层的出现, 整个体系被分成一系列无耦合的非均匀磁性膜, 因而它们的相变温度低于整体磁相变温度也是合理的. 由于我们的体系是在调制方向上呈周期性的, 所以处理部分有序相可转化为处理磁非均匀膜. 在图 3 中已经给出了部分磁性相的相变温度.

当我们取横场不为零时, 这个体系就是一个相应的横向 Ising 体系. 图 4 表示在横场 $F/J=1.0$ 时, 临界温度随磁性原子浓度的调制幅度变化的关系. 基本特征与无横场时相似, 只不过对 C_0 的要求要高. 相应的理由可参照图 3 来理解.

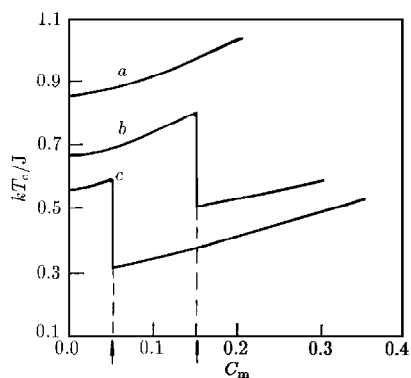


图 4 横场 $F/J=1.0$ 时, 临界温度随浓度调制幅度的变化 箭头表示从整体铁磁相向部分铁磁相转变的临界 C_m 值; 虚线左边是整体磁性相, 右边为部分磁性相; 曲线 a, b, c 分别对应 $C_0=0.8, 0.7$ 和 0.65

临界温度随横场的变化也是很有趣的, 在讨论横向 Ising 体系的相变时, 一般都考虑这一问题. 图 5 给出几种情况下体系的临界温度对横场的变化关系. 此时 C_0 和 C_m 都是被固定的参数. 对于平均磁性原子浓度较高的情况, 在横场较小时, 体系可保持整体铁磁相, 相变温度随外场的加大而下落, 继续增加横场达某一数值后, 体系的低磁性原子浓度区域首先变成顺磁相, 体系的铁磁相只在高浓度区域上存在, 在图 5 中我们清楚地看到从整体铁磁相到部分铁磁相的相变. 相变后的临界温度是部分铁磁相的相变温度. 当平均磁性原子浓度 ($C_0=0.4$) 比较低时, 体系已不可能存在整体铁磁相, 在图 5 中给出部分铁磁相的临界温度曲线. 在图 5 中, 临界温度曲线下虚线左侧为相应的整体铁磁相, 而右侧为部分磁性相.

我们已数值计算和讨论了由 Ising 模型描述的周期性稀释的磁性体系的相变性质, 计算时取磁性原子浓度在调制方向上是层坐标的正弦函数. 主要结果是, 磁性原子浓度的非均匀性在平均磁性原子浓度不变的条件下可使临界温度上升. 但是, 如果平均磁性原子浓度比较低时, 且当磁性原子浓度的调制幅度 C_m 超过某值后, 这种体系内只能存在部分磁性相. 已清楚地看到平均磁性原子浓度较低时, C_m 的增加使体系从整体磁性相到部分磁性相的转变. 横场的增加也可产生类似的结果, 即如果横场较低, 体系是整体磁性相, 当横场增加到某值后, 体系变为部分磁性相.

体非均匀稀释 Ising 铁磁体系的相变研究尚未见报道, 作为此类工作的第一步, 我们讨论的是磁性原子的非均匀性对体系临界温度的影响以及横场的作用.

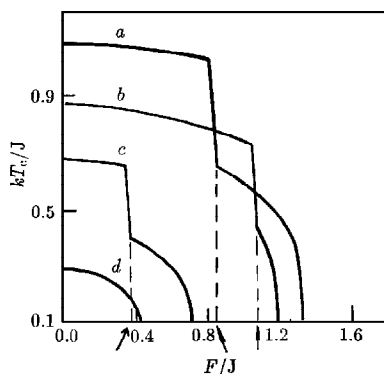


图5 临界温度随横场的变化 箭头表示从整体磁性相向部分磁性相转变的临界横场值;虚线左边是整体磁性相, 右边是部分磁性相;曲线 a, b, c, d 分别对应于 $(C_0, C_m) = (0.7, 0.3), (0.7, 0.1), (0.5, 0.2)$ 和 $(0.4, 0.2)$

曾与苏州大学李振亚、杨传章教授进行了有益的讨论, 特致谢意.

- [1] H. K. Sy, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 4454.
- [2] H. K. Sy and M. H. Ow, *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**(1992), 5891.
- [3] T. Hai, Z. Y. Li, D. L. Lin and Thomas F. George, *J. Magn. Magn. Mater.*, **97**(1991), 227.
- [4] L. L. Hinchey and D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 3329; *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 1689.
- [5] R. E. Camley, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 12316.
- [6] R. E. Camley, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 3608.
- [7] Xuan-Zhang Wang, Quan Liu, Shu-Chang Wang and Yan Zhao, *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**(1993), 3443.
- [8] R. E. Camley, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1993), 1152.
- [9] Xuan-Zhang Wang and D. R. Tilley, *Phys. Lett.*, **A187**(1994), 325; *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 13472.
- [10] T. Kaneyoshi, I. Tamura and E. F. Sarmiento, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 6491.
- [11] Qiang Hong, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 1010.
- [12] A. Benyoussef, N. Boccara and M. Saber, *J. Phys.*, **C18**(1985), 4275.
- [13] A. R. Ferchmin and W. Maciejewski, *J. Phys.*, **C12**(1979), 4311; A. Zagorski, W. Nazarewicz and A. R. Ferchmin, *Phys. Lett.*, **A19**(1982), 307.
- [14] Shu-Chen Lii and Xuan-Zhang Wang, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 6715.
- [15] J. C. Cressoni, J. W. Tucker and E. F. Sarmiento, *J. Appl. Phys.*, **75 Pt2A**(1994), 5841.
- [16] Xuan-Zhang Wang, Xiu-ye Jiao and Jing-Ju Wang, *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**(1992), 3651; Xuan-Zhang Wang and Yan Zhao, *Physica*, **A193**(1993), 133.
- [17] C. L. Wang, S. R. P. Smith and D. R. Tilley, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**(1994), 9633.
- [18] Jia-Lin Zhong, Chuan-Zhang Yang and Jia-Liang Li, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**(1991), 1301.
- [19] Sarmiento, E. F. and T. Kaneyoshi, *J. Phys.*, **C21**(1988), 3993.
- [20] Sarmiento, E. F. and T. Kaneyoshi, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 2529.

- [21] Xue-Fan Jiang, Jia-Liang Li, Jia-Lin Zhong and Chuan-Zhang Yang, *Phys. Rev.*, **B47**(1993),827.
[22] T.Kaneyoshi, *Phys. Rev.*, **B33**(1986),7688.
[23] T.Kaneyoshi, R.Honmura, I.Tamura and E.F.Sarmiento, *Phys. Rev.*, **B29**(1984),5121.

PHASE TRANSITION OF A PERIODICALLY DILUTED ISING MAGNET

GAO HONG WANG XUAN-ZHANG LÜ SHU-CHEN

(*Department of Physics, Harbin Normal University, Harbin 150080*)

(Received 3 July 1995; revised manuscript received 2 February)

ABSTRACT

Applying the effective-field theory with correlations, we study the phase transition of a periodically diluted Ising system in the presence or absence of a transverse field. We focus on the dependence of the critical temperature of the system on the modulation amplitude and transverse field. The interesting result is: the inhomogeneity of the concentration of magnetic atoms can cause an increase in the critical temperature of the system. However, as the modulation amplitude is increased, the bulk magnetic order of the system may change to a partial magnetic order.

PACC: 7510; 7530K