

无规场非晶化表面的临界行为

高 瞻 徐坚宏

(江南学院数理部, 无锡 214062)

王振林

(南京大学物理系, 南京 210093)

(1998 年 8 月 3 日收到; 1999 年 2 月 22 日收到修改稿)

应用平均场重整化群方法, 讨论表面无规场和非晶化存在对 $S=1$ 和 $\sigma=1/2$ 混合自旋伊辛系统表面磁性临界行为的影响, 得到在各种情况下系统的表面相图. 计算结果表明, 非晶化在一定范围内与无规场竞争仍可出现三临界点和重入现象.

PACC: 7510H; 7530T; 7540

1 引 言

一般情况下, 表面原子在系统中所占的比例极小, 系统性质受表面的影响甚小. 表面作为体与外界的界面, 系统和外部环境的作用是通过表面进行的. 在一些特殊体系的人工材料中, 表面效应显得非常重要. 对于磁性系统, 研究表面的临界行为及其对体的相变的影响(尤其是在相变点附近) 在实验和理论上都具有重要的研究价值^[1-3].

另一方面, 磁性系统总或多或少存在无序结构. 无序可以有多种形式, 如座无序、键无序、组分混合无序、存在无规场以及非晶化等不同形式. 而非晶化表面可通过多种人工方法形成, 如离子注入、中子轰击、短激光脉冲辐照等. 在非晶化表面, 格点位置不再有序, 原子之间相互作用也是无规分布的. 由于格点之间自旋交换作用的起伏, 在非晶化表面相图上出现重入现象^[4]. 研究表明, 半无限混合自旋无规场表面相图可出现三临界点^[5,6]. 如果在无规场再引入非晶化表面, 则由于两者之间的竞争, 在表面相图中可得到一些有趣的结果.

本文应用平均场重整化群方法, 研究存在无规场(三峰分布)的非晶化表面对相变的影响, 得到非晶化在一定范围内与无规场竞争仍可出现三临界点和重入现象. 这是系统表面临界行为的新的特点.

2 模型与方法

考虑一自旋为 $1/2$ 的半无限简单立方伊辛铁磁体, 覆盖着一自旋为 1 的表面层, 构成一混合自旋伊辛体系. 对于具有非晶化表面的混合伊辛系统, 若考虑无规场仅作用于表面, 则系统的哈密顿量为

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i H_i S_i - \sum_i D_i' S_i^2, \quad (1)$$

其约化哈密顿量可表示为

$$- \beta H = \sum_{ij} K_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i S_i + \sum_i D_i S_i^2. \quad (2)$$

当 i 处于表面时, $S_i = \pm 1, 0$; 当 i 处于体内时, $S_i = \pm 1$; $K_{ij} = \beta J_{ij}$, J_{ij} 为格点 i 和最邻近格点 j 上自旋之间的交换作用 ($\beta \equiv 1/k_B T$). 如果格点 i 和 j 均处于表面层, 则 $J_{ij} = J_{ij}^s$ ($K_{ij}^s = \beta J_{ij}^s$), 否则为 J_b ($K_b = \beta J_b$). 表面层原子间交换作用不同于体内交换作用, 为此引入参量 $\Delta = J_s/J_b - 1$ 来表征这个差别. H_i ($h_i = \beta H_i$) 为无规场; D_i 为晶场, 仅作用于表面, 且暂不考虑其涨落, 即取 $D_i = D$ ($D_i = \beta D_i'$).

非晶化表面的特征依赖于晶格原子之间相互作用的分布形式. 为简化起见, 仍采用晶格点阵模型. 非晶化用表面原子之间键的无规分布来描述, K_{ij}^s 满足如下分布:

$$P(K_{ij}^s) = \frac{1}{2} [\delta(K_{ij} - K_s - \Delta K_s) + \delta(K_{ij}^s - K_s + \Delta K_s)], \quad (3)$$

并引入无量纲参量 $\alpha \equiv \Delta K_s / K_s (= \Delta J_s / J_s)$, 表示交换作用起伏强弱程度. 无规场 H_i 仅作用于表面, 并满足下面的概率分布:

$$P(h_i) = p \delta(h_i) + \frac{1}{2}(1-p) [\delta(h_i - h) + \delta(h_i + h)], \quad (4)$$

式中 $0 < p < 1$, p 对应于表面层中磁性原子稀释或非磁原子掺入的浓度. 当 $p = 0$ 时, 即过渡到双峰分布情形.

为研究表面层的相变, 在平均场重整化群的框架内, 选取两个 ($N' = 2$) 自旋粒子和 4 个 ($N = 4$) 自旋粒子两个集团, 如图 1 所示. 每个集团边界格点上的自旋分别固定为 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^[7].

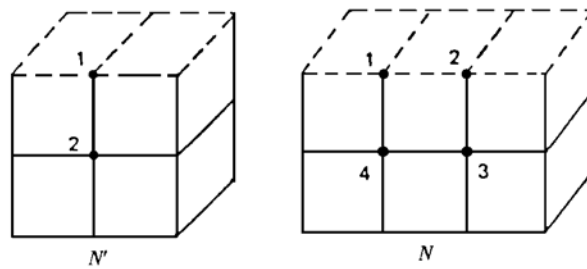


图 1 自旋粒子集团 N' 和 N --- 为 $J_s(J_s)$, — 为 $J_b(J_b)$

对于 $N' = 2$ 和 $N = 4$ 的自旋粒子集团, 其约化哈密顿量分别为

$$- \beta H_{N'} = K'_b S_1 S_2 + 4K'_s C'_s S_1 + 5K'_b C'_b S_2 + h'_1 S_1 + D S_1^2, \quad (5)$$

$$- \beta H_N = K_s S_1 S_2 + K_b (S_1 S_4 + S_2 S_3) + h_1 S_1 + h_2 S_2 + D S_1^2 + D S_2^2 + K_b S_3 S_4 + 3K_s C_s (S_1 + S_2) + 4K_b C_b (S_3 + S_4). \quad (6)$$

在表面铁磁-顺磁(SF-P)相变点附近, $C'_s(C_s) \rightarrow 0$, $C'_b(C_b) = 0$, 则可分别得到表面自旋的

正则平均值

$$\langle S_1 \rangle_{N'} = \frac{\text{Tr}(S_1 e^{-\beta H_{N'}})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_{N'}})} = \frac{2a_0 e^D \sinh(4K'_s C'_s + h'_1)}{2a_0 e^D \cosh(4K'_s C'_s + h'_1) + 1} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \langle S_1 \rangle_N &= \frac{\text{Tr}(S_1 e^{-\beta H_N})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_N})} \\ &= \frac{a \sinh(6K_s C_s + h_1 + h_2) + b \sinh(3K_s C_s + h_1) + c \sinh(h_1 - h_2)}{a \cosh(6K_s C_s + h_1 + h_2) + b \cosh(3K_s C_s + h_1) + b \cosh(3K_s C_s + h_2) + c \cosh(h_1 - h_2) + d} \end{aligned} \quad (8)$$

式中

$$\begin{aligned} a_0 &= \cosh K_b, \quad a = e^{2D+K_s}(e^{3K_b} + 3e^{-K_b}), \\ b &= e^D(e^{2K_b} + 2 + e^{-2K_b}), \quad c = e^{2D-K_s}(e^{-3K_b} + 3e^{K_b}), \quad d = 2\cosh K_b. \end{aligned}$$

将(7)和(8)式对无序结构和无规场求平均, 分别得两个自旋粒子和 4 个自旋粒子两个集团表面磁化

$$(m_s)_{N'} = \int P(h'_1) dh'_1 \prod_{j \neq 2} P(K'_{ij}) dK'_{ij} \langle S_1 \rangle_{N'}, \quad (9)$$

$$(m_s)_N = \int \prod_{i,j} P(K^s_{ij}) dK^s_{ij} \int \prod_i P(h_i) dh_i \langle S_1 \rangle_N. \quad (10)$$

在 SF-P 相变点附近, 将表面磁化 $(m_s)_{N'}$ 和 $(m_s)_N$ 按 C'_s, C_s 展开, 并取一级近似, 则

$$(m_s)_{N'} = \left[\frac{8a_0 e^D}{2a_0 e^D + 1} p + (1-p) \frac{8a_0 e^D [2a_0 e^D + \cosh(h')]}{[2a_0 e^D \cosh(h') + 1]^2} \right] K'_s C'_s, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} (m_s)_N &= \left[\frac{3}{2}(A_{++} - A_{--})p^2 + \frac{3}{2}p(1-p)(B_{++} - B_{--}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{4}(1-p)^2(E_{++} - E_{--} + F_{++} - F_{--}) \right] K_s C_s. \end{aligned} \quad (12)$$

由重整化群递推关系

$$\left. \frac{\partial}{\partial C'_s} (m_s)_{N'} \right|_{C'_s=0} = \left. \frac{\partial}{\partial C_s} (m_s)_N \right|_{C_s=0} \quad (13)$$

得固定点方程

$$\begin{aligned} &6(A_{++} - A_{--})p^2 + 6p(1-p)(B_{++} - B_{--}) + 3(1-p)^2(E_{++} - E_{--} + F_{++} - F_{--}) \\ &- 32Gp - 32R(1-p) = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

式中

$$\begin{aligned} A_{\pm\pm} &= \frac{2a_{\pm\pm} b}{a_{\pm\pm} + 2b + c_{\pm\pm} + d}, \\ B_{\pm\pm} &= [(a_{\pm} b + 2a_{\pm} c_{\pm}) \cosh^2 h + (2a_{\pm} c_{\pm} + bc_{\pm}) \sinh^2 h \\ &\quad + (5a_{\pm} b + 4a_{\pm} d + bd + bc_{\pm} + 2b^2) \cosh h \\ &\quad + (4a_{\pm}^2 + 4a_{\pm} b + 2a_{\pm} c_{\pm} + bc_{\pm} + bd + 2b^2)] / [(a_{\pm} + b + c_{\pm}) \cosh h + b + d]^2, \\ E_{\pm\pm} &= \frac{2(a_{\pm}^2 + b^2) + (4a_{\pm} b + bc_{\pm} + bd) \cosh h + a_{\pm} b \cosh h \cosh 2h + 2a_{\pm} (c_{\pm} + d) \cosh 2h}{(a_{\pm} \cosh 2h + 2b \cosh h + c_{\pm} + d)^2}, \end{aligned}$$

$$F_{\pm} = \frac{2a_{\pm} + b \cosh h}{a_{\pm} + 2b \cosh h + c_{\pm} \cosh 2h + d}, \quad G = \frac{a_0 e^D}{2a_0 e^D + 1},$$

$$R = \frac{a_0 e^D (2a_0 e^D + \cosh h')}{(2a_0 e^D \cosh h' + 1)^2},$$

$$a_{\pm} = e^{2D + (1 + \Delta_s)(1 \pm \alpha)K_b} (e^{3K_b} + 3e^{-K_b}), \quad c_{\pm} = e^{2D - (1 + \Delta_s)(1 \pm \alpha)K_b} (3e^{K_b} + e^{-3K_b}).$$

上面计算中运用了如下关系:

$$K'_b = K_b = J_b / \beta T_c^s, \quad \Delta'_s = \Delta_s, \quad \Delta = J_s / J_b - 1,$$

$$K'_s = K_s = (1 + \Delta_s) K_b, \quad h' = h.$$

3 计算结果与讨论

从固定点方程(14)出发, 通过数值计算, 可以讨论表面临界行为. 根据文献[7]的结果, 用平均场重整化群方法可得简单立方伊辛铁磁体的临界耦合常数 $K_b^c = 0.206$. 将 $K_b = K_b^c$ 代入方程(14), 可得临界参数 Δ_s^c 与 H, p, α, D 的关系.

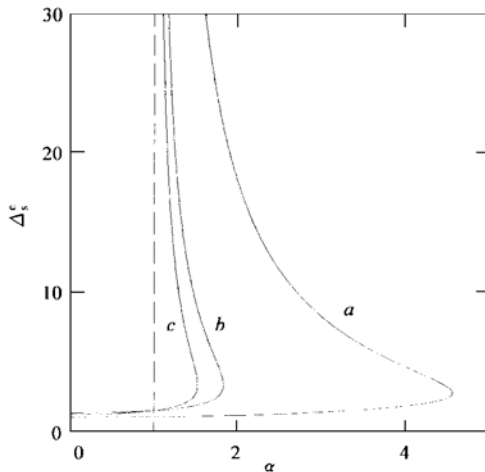


图2 临界值 Δ_s^c 随 α 变化 曲线 a 为 $p = 0.05, D = 2, H = 0$; 曲线 b 为 $p = 0.05, D = 2, H = 2$; 曲线 c 为 $p = 0.05, D = 4, H = 2$

图2为给定 p, H, D 时, $\Delta_s^c = \Delta_s(\alpha)$ 的临界线方程. 从图2可看出, $\alpha \in [0, \alpha_{\max}]$. 当 $\alpha = 0$, 即不存在表面涨落时, 由数值计算知, Δ_s^c 值随无规场 H 增大而增大 ($H = 0, \Delta_s^c = 1.041; H = 2, \Delta_s^c = 1.296$), 这一结果与文献[5]一致. 而 α_{\max} 值随 H 或 D 增大而减小 ($H = 0, D = 2, \alpha_{\max} = 4.57; H = 2, D = 2, \alpha_{\max} = 1.83$). 当 $1 < \alpha < \alpha_{\max}$ 时, 对应每一个 α 值, 存在两个不同的临界值 Δ_s^c , 意味着 α 在这个范围内变化时将出现重入现象. 出现这一现象的原因是在 $\alpha > 1$ 时, 方程(3)中的一个键 K_s 取负值, 系统中出现阻挫效应. 从图2还可看出, 重入范围随 H 增大而减小. 这表明当无规场 H 增大时, 对于较小的表面层结构涨落, 表面仍能维持铁磁有序.

图3为给定 D, p , 取不同 α 值时 $\Delta_s^c = \Delta_s(h)$ 的临界线方程. 图中曲线是表面相变温度等于体相变温度的等温线. 由图3可看出, 当 $\alpha \leq 1$, 即表面非晶化程度不很强时(图中曲线 a 和 b), 无规场作用较明显, 此时存在三临界点, 且三临界点所对应的 Δ_s^c 值随 α 增大而增大. 当 $1 < \alpha < 1.58$ 时(图中曲线 c 和 d), 交换作用的起伏存在阻挫效应, 导致重入现象. 因而对给定的外场, 对应着两个 Δ_s^c 值, 表明存在两个表面相变温度, 同时伴有三临界点; 而当 $1.58 < \alpha < 1.83$ 时(图中曲线 e 和 f), 仅出现重入现象, 而无三临界点出现, 无规场作用相对地减弱. 当 $\alpha > 1.83$ 时, 重入现象消失.

将 $K_b = K_b^c T_c^b / T_c^s$ 代入固定点方程(14), 通过数值计算, 可得给定 Δ_s, D, p, α 时 T_c^s / T_c^b 与 H / J_b 的关系. 图 4 为给定 Δ_s, D, p , 取不同 α 值时系统在 $(T_c^s / T_c^b, H / J_b)$ 空间的相图. 给定 $\Delta_s = 5$ (图中曲线 a', b', c'), 当 H 较小时, α 变化对相变温度无影响. 随 H

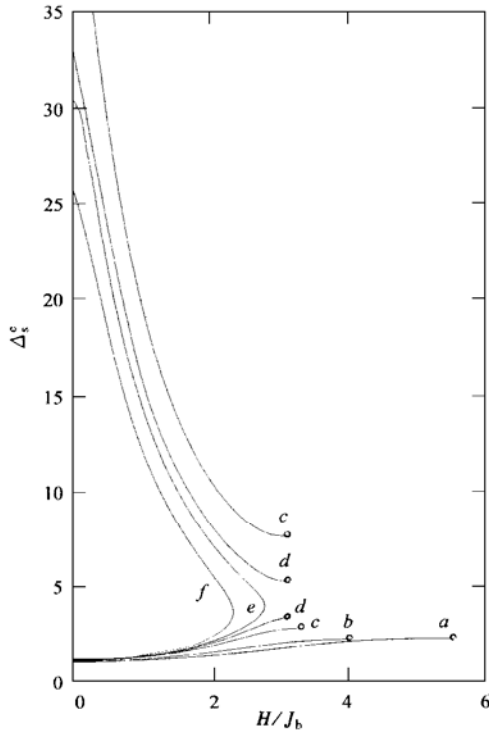


图 3 临界值 Δ_s^c 随 H / J_b 变化 $D = 2, p = 0.05$.
曲线 a 为 $\alpha = 0.4$; 曲线 b 为 $\alpha = 1$; 曲线 c 为 $\alpha = 1.45$;
曲线 d 为 $\alpha = 1.55$; 曲线 e 为 $\alpha = 1.6$; 曲线 f 为 $\alpha = 1.7$

的增大, 不同 α 值相变温度发生变化. 当 $\alpha = 1.55$ 和 1.6 时, 相图出现三临界点, 且随 α 的增大, 相变温度及三临界点降低. 当 $\alpha = 1.7$ 时, 三临界点消失, 出现重入现象. 当 Δ_s 减小时 ($\Delta_s = 4$, 图中曲线 a, b, c), 相变温度及三临界点降低较明显.

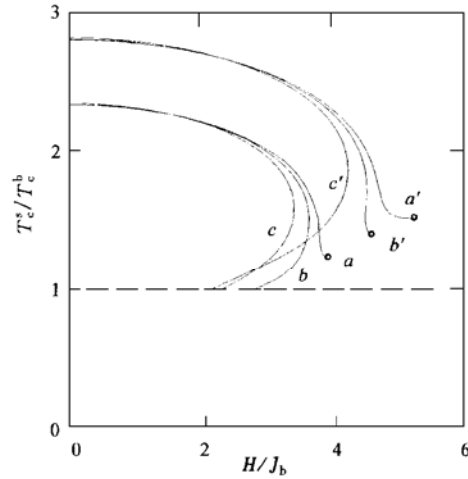


图 4 给定 Δ_s, D, p 时的相图 曲线 a', b', c' : $\Delta_s = 5, D = 2, p = 0.05$, (a') $\alpha = 1.55$, (b') $\alpha = 1.6$, (c') $\alpha = 1.7$; 曲线 a, b, c : $\Delta_s = 4, D = 2, p = 0.05$, (a) $\alpha = 1.55$, (b) $\alpha = 1.6$, (c) $\alpha = 1.7$

4 结 论

本文应用平均场重整化群方法, 对 $S = 1$ (面) 和 $\sigma = 1/2$ (体) 的混合自旋系统, 讨论了三峰分布的无规场及表面非晶化存在的情况下, 系统表面的临界行为.

1. 临界等温线 $\Delta_s^c = \Delta_s(\alpha)$ 显示 $\alpha \in [0, \alpha_{max}]$, 重入现象只有在 $1 < \alpha < \alpha_{max}$ 范围内出现, 且 α_{max} 值随 H 或 D 的增大而减小, 表明相对于较小的表面层结构涨落, 表面仍能维持铁磁有序. 当 $\alpha > \alpha_{max}$ 时, 表面区别于体的特征消失, 表面效应无贡献.

2. 临界等温线 $\Delta_s^c = \Delta_s(h)$ 显示, 当表面非晶化程度不很强时 ($\alpha \leq 1$), 系统仅出现三临界点. 随表面非晶化程度的增强 ($\alpha > 1$), 系统可出现三临界点, 或三临界点和重入现象并存, 或仅出现重入现象. 这是无规场和非晶化作用相互竞争的结果.

3. 无规场的存在会导致系统表面相图出现三临界现象, 但随表面层交换作用与体内

交换作用的接近(即 Δ_s 减小), 或表面非晶化程度的增强($\alpha > 1$), 表面的相变温度及三临界点随之降低, 直至三临界点消失.

4. 本文在重整化群框架内, 选取了两个自旋粒子和 4 个自旋粒子两个集团, 若计算中考虑集团包含更多的粒子, 所得结果会更精确些.

- [1] Y. Imry, *J. Stat. Phys.*, **34**(1984), 849.
- [2] T. Natterman, J. Villain, *Phase Trans.*, **11**(1988), 5.
- [3] A. R. King, V. Jaccarino, D. P. Belanger *et al.*, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 503.
- [4] Q. Jing, Z. Y. Li, *J. Magn. Magn. Mater.*, **80**(1989), 178.
- [5] Sen-lin Xu, Z. Y. Li, *J. Magn. Magn. Mater.*, **87**(1990), 279.
- [6] Z. Y. Li *et al.*, *Physica*, **B182**(1992), 249.
- [7] M. C. Margues, M. A. Santos, *Phys. Lett.*, **118A**(1986), 41.

CRITICAL BEHAVIOR AT THE SURFACE OF A SEMI-INFINITE MIXED-SPIN ISING SYSTEM WITH SURFACE RANDOM FIELD AND AMORPHISM

GAO ZHAN XU JIAN-HONG

(*Department of Physics & Mathematics, Jiangnan College, Wuxi 214062*)

WANG ZHEN-LIN

(*Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093*)

(Received 3 August 1998; revised manuscript received 22 February 1999)

ABSTRACT

In this paper, a renormalization group scheme within the framework of the mean field theory is used to investigate the critical behavior at the surface of a semi-infinite Ising system with mixed spins, i. e., $S = 1$ at the surface and $\sigma = 1/2$ in the bulk. The effects of the random field and amorphism on the surface phase diagrams are obtained and discussed. The numerical results show that the surface tricritical points and reentrant phenomena exist due to the competition between the surface random field and certain magnitude of surface amorphization.

PACC: 7510H; 7530T; 7540