

中国加拿大高等教育项目资助

材料科学翻译丛书

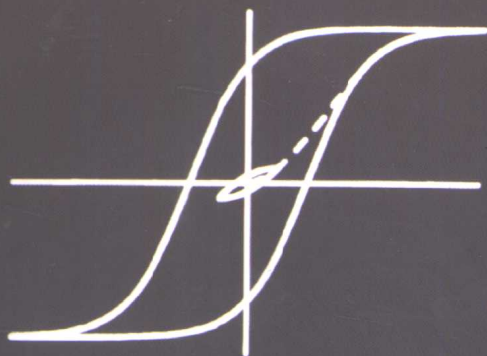
[以色列] A.Aharoni 著

杨正译

INTRODUCTION TO THE THEORY

铁磁性理论导论

OF FERROMAGNETISM



兰州大学出版社

中国加拿大高等教育项目资助 材料科学翻译丛书

铁磁性理论导论

[以色列] A. Aharoni 著

杨 正 译

兰 州 大 学 出 版 社

图书在版编目(CIP)数据

铁磁性理论导论/(以色列)阿哈欧尼(Aharoni, A.)著:
杨正译. —兰州:兰州大学出版社, 2002
ISBN 7-311-02029-8

I. 铁… II. ①阿…②杨… III. 铁磁性—理论
IV. 0482.52

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 049224 号

铁磁性理论导论

[以色列]A·Aharoni 著

杨正译

兰州大学出版社出版发行

兰州市天水路 308 号 电话:8617156 邮编:730000

E-mail: press@onbook.com.cn

http://www.onbook.com.cn

兰州大学出版社激光照排中心照排

兰州残联福利印刷厂印刷

开本: 787×1092 1/16 印张:14.25

2002 年 7 月第 1 版 2002 年 7 月第 1 次印刷

字数:358 千字 印数:1~1000 册

ISBN7-311-02029-8/O·162 定价:21.50 元

内 容 提 要

本书主要介绍铁磁性理论的基础。全书共分十一章。系统讲述了分子场近似、Heisenberg 哈密顿量、磁化强度的温度依赖关系、磁各向异性及时间效应、其它能量项、微磁学基础、能量极小化、成核理论、解析微磁学及数字微磁学。作者用五章的篇幅深入介绍了微磁学的基础理论、已取得的结果及存在的问题。

本书可作为高等院校本科生高年级和研究生《铁磁学》课程的教材或教学参考书，也可供从事凝聚态物理、材料科学及磁性材料方面的科研人员参考。

Introduction to the Theory of Ferromagnetism

AmikaM Aharoni

Weizmann Institute of Science

Rehovoth Israel

The International Series of Monographs on Physics

General Editors

J. Birma, S.F. Edwards, R.H. Friend, C.H. Llewellyn Smith, M. Rees, D. Sherrington,
G. Veneziano

ABD 69/06

序 言

编写本书的主要宗旨是为物理系和工程系的一年级研究生及高年级本科生提供一部教科书。当然，在编写时也考虑到为从事磁学研究的专业人员提供一本参考书，如果他们想补充以前学过的东西，或者想更深入地了解自己从事的研究工作的基础。本书是根据作者在 Weizmann 科学研究院的 Feinberg 研究生院所讲课程的教材编写成的。不过书中扩充了有关微磁学的部分。

本书重点强调基本原理的解释，并不深入讨论各种国际磁学会议不同分会上通常讨论的那些专门的领域。想法是在一部厚薄适中的书中给初学者介绍尽可能宽广的知识面，同时给在某个领域中已是成熟的研究者粗略地介绍一下其它领域的状况。只是对微磁学这个领域，改变了上述的做法，阐述了一些前沿课题的最新研究情况。因为，对此课题目前尚无一部论述完整的著作。在某种意义上，也可认为，本书是一部关于微磁学的较高深的评论。即使对于微磁学的问题，我也是着重讲述基础，而避免过多地涉及一些技术细节。这样做有助于研究者，而不至于困惑大学生的学习。

本书是一部理论性的书，但是，这绝不意味着本书只供那些想成为理论工作者的人们阅读。在我心中总是记着这样一个事实，即所有从事实际工作的工程师和实验物理的工作者往往能成功地完成实验，但对与该实验有关的理论却了解不深。他们通常很崇敬那些理论工作者，但不能读懂他们的论文。这主要是因为这些论文是用不易理解的语言写成的。我希望他们能读懂这本书，同时能够领悟到，在很多情况下并没有什么重要的东西隐藏在含糊不清的表达中，而只是理论工作者们自己声称他们知道自己在做什么。由于这个原因，书中总是特别强调指出每一种理论的缺点和不利之处。至于其优点是说不自明的。我总是指出理论所做的近似。而某些理论工作者却忽略它，甚至试图遮掩它，并声称某个特定的计算或者结果是完全正确的。

认为读者已经学习过有关电磁场的课程，熟悉 Maxwell 方程组及其推导方法。但是在此对这一课程的某些内容（当然不是全部内容）做了复习。不过是用不同的角度、更加完善的观点进行论述的。我希望这样的复习会帮助读者比本科生的课程更深入地理解静磁学。通常在本科学习时，往往由于急迫地想通过课程，而没有化足够的时间理解它。即使对这一很基础性的静磁学问题，我也总是力图给学生讲解那些建立理论所必需的知识，以便给他们打好基础。而不是罗列一大堆内容，也不是讲述每个特定问题的细节。

本书大部分章节均应用了经典物理学，因为别无他法。不管某些热心者怎么断言，磁性的量子力学理论尚未建立。目前的理论只涉及到本学科的少数角落，同时在解决这些课题时还采用了很粗略的近似。我认为很有必要讨论一下 Bohr-Van Leeuwen 定理（§ 1.3 节）。因为量子力学的专家们经常引用它。他们轻视其他人，并声称他们的理论才是真正的物理学。尚

未由于这种观点而产生自卑情节的磁学工作者，可以略读 § 1.3 节，而不必仔细研究。从来没有人告诉那些量子力学专家们，应该在他们的理论中避免采用某些近似。即使假定有人告诉了他们，他们也会满不在乎。我一直在鼓励经典力学的理论工作者也采取同样的态度。

在 Feinberg 研究生院，要求所有的本科生必修一门量子力学的高级课程。本来我可以按以上要求，安排我的这门课程。但是，考虑到这不是普遍的情况，在一些别的地方，特别是工程学院，大部分大学生在考入研究生院之前，从未接触过量子力学。为了照顾这部分学生，我把所有量子力学的论述都集中安排在第三章。全书其它章节的写法，并不需要实质性地参考第三章。所以，甚至在删去第三章的情况，仍能学习其它章节。对于量子力学有些了解的学生，学习第三章中关于基本原理的论述是有帮助的。而对于不了解量子力学的学生，略去第三章后仍可以无困难地继续学习。

我没有按照传统的次序写这本书。而是从交换作用开始，之后引进各向异性及时间效应。在这些问题的论述中，根本没有涉及静磁学的问题。一直到讲述超顺磁性之后，才引入静磁相互作用。我相信，这样的讲授次序，要比我的同事们所建议的讲授次序，对于学生们来说更容易学懂。并能帮助他们领会隐藏在各种方程式后面的基本原理。

给出参考文献的目的仅仅是为了能让读者能找到有关论文的更多信息，而不是讲述本门学科的历史。尽管有时候我也会提到某人首先开始了这类研究。所以，如果已有新的论文引用了早期的论文，那就不必再引用早期的论文。除非在新的论文中找不到相关的信息时，才援引早期的文献。我真的搞不懂，为什么有些人爱一些原著，譬如 Maxwell 的原著。实际上，没有人会耐心地去阅读这些原著。另外，我只限于引用英文的参考文献。好些年以前，曾要求大学生具有别的语言的阅读能力。但现在情况变了，这样的要求已经过时。所以，我认为，没有理由列出谁都不会去看的其他语言的文献。下面的两点似乎有些古怪：讨论 Néel 的工作时，没有引用它的任何原著；甚至在 § 10.4 节中讨论 Döring 的畴壁质量时，连 Döring 的名字都没有提及。不过我倾向于这样做是有原因的。如果谁想阅读 Néel 的法文原著的话，他会很容易从我们引用的参考文献中找到该原著的出处。此外，我也没有引用早期的老的英文文献。因为如果这样做，会列出几千篇论文。对于 Dietze 和 Thomas 的模型 (§ 8.1.1 节)，我尝试性地采用了例外的做法，即先仔细的讨论这个模型，然后决定反对它。

那些习惯于几乎完全没有参考文献的教科书的读者，觉得似乎没有必要给出太多的参考文献。所以，我争取给出尽可能最少的参考文献。不过，参考文献对于研究工作者毕竟是有指导作用的，同时，对本书中的一些课题，我也尽可能地引用一些涉及面更广泛的评述性论文以及在“Physics Today”上发表的半通俗性的论文。初学者比较容易读懂这类文献。并没有能完全遵守上面的规则，因为，在很多场合，没有别的办法，只能引用原始文献和一些难读懂的论文。偶尔，我也会失去自制力，而引用一些高深的论文，这些论文虽然与本书设定的水平不相符。不过，必须记住，并不期望初学者阅读所有的参考文献，而希望想更深入了解的、那些从事实际工作的研究者阅读其中的一部分论文。

在参考文献中我尽量避免引用不是期刊副刊的那些会议论文集以及在很多图书馆不容易查阅到的期刊。除非没有更合适的来源，譬如，Brown 在发表全文[171]以前，曾在 J. Appl.

phys.34, 1319-20 (1963)发表过这篇论文的缩写版。其内容全部包括在原先的论文中。所以，没有必要引用后者。有关 Brown 的论文还有另一个例子。Brown 在文献[508]中发表了全文，而在文献[507]中发表了该文的缩写版。但是，其全文发表在很多人不容易得到的、不著名的期刊[508]上。在此情况下，我同时也引用了缩写版[507]。有些查阅不到文献[508]的读者至少可以从文献[507]读到某些内容。

阿. 阿哈罗尼
雷霍沃恩 以色列
1995年2月

目 录

第一章 绪论

§1.1 命名法	1	§1.3 Bohr—Van Leeuwen 定理	4
§1.2 Weiss 磁畴	3	§1.4 抗磁性	6

第二章 分子场近似

§2.1 顺磁性	9	§2.4 Curie—Weiss 定律	16
§2.2 铁磁性	12	§2.5 亚铁磁性	20
§2.3 反铁磁性	15	§2.6 其它情况	23

第三章 Heisenberg 哈密顿量

§3.1 自旋和轨道	26	§3.4 非局域电子	32
§3.2 交换相互作用	26	§3.5 自旋波	35
§3.3 交换积分	31		

第四章 磁化强度与温度的关系

§4.1 磁畴	43	§4.4 Ising 模型	50
§4.2 Landau 理论	45	§4.5 低维问题	54
§4.3 临界指数	47	§4.6 Arrott 作图法	56

第五章 各向异性和时间效应

§5.1 各向异性	59	§5.1.5 表面各向异性	63
§5.1.1 单轴各向异性	60	§5.1.6 实验方法	64
§5.1.2 立方各向异性	61	§5.2 超顺磁性	65
§5.1.3 磁致伸缩	62	§5.3 磁粘滞性	70
§5.1.4 其它类型的各向异性	62	§5.4 Stoner-Wohlfarth 模型	74

第六章 另一能量项

§6.1 静磁学基础	77	§6.2.1 畴壁	85
§6.1.1 唯一性	78	§6.2.2 长程和短程作用	86
§6.1.2 举例	79	§6.3 磁荷	88
§6.1.3 均匀磁化的椭球体	80	§6.3.1 一般情况下的退磁场	90
§6.2 磁畴的起源	82	§6.4 单位制	92

第七章 微磁学基础

§7.1 “经典”的交换作用	94	§7.3.2 避免产生磁荷的原则	102
§7.2 Landau-Lifshitz 畴壁	97	§7.3.3 互易性原理	104
§7.3 静磁能	100	§7.3.4 静磁能的上下限	105
§7.3.1 物理意义上的小球	100	§7.3.5 矩形薄片	107

第八章 能量极小化

§8.1 Bloch 畴壁和 Néel 畴壁	111	§8.3 Brown 静态方程	121
§8.2 二维畴壁	116	§8.4 自治性	125
§8.2.1 大块材料	120	§8.5 动态方程	127

第九章 成核问题

§9.1 定义	129	§9.4 第三种模式	141
§9.2 两种本征模式	132	§9.5 Brown 佯谬	144
§9.2.1 一致转动 (Coherent Rotation)	132	§9.5.1 硬磁材料	146
§9.2.2 涡旋式转动 (Magnetization Curling)	133	§9.5.2 软磁材料	147
§9.3 无限大平板	137	§9.5.3 微小粒子	149

第十章 解析微磁学

§10.1 铁磁共振	151	§10.5 剩磁状态	157
§10.2 初积分	152	§10.5.1 球形粒子	158
§10.3 边界条件	155	§10.5.2 伸长椭球	161
§10.4 畴壁质量	156	§10.5.3 立方体	162

第十一章 数值微磁学

§11.1 静磁能	166	§11.3.3 伸长椭球	177
§11.2 能量极小化	169	§11.3.4 薄膜	178
§11.3 计算结果	173	§11.3.5 棱柱体	179
§11.3.1 畴壁	173	§11.3.6 圆柱体	183
§11.3.2 球体	175	参考文献	185

第一章 绪论

§ 1.1 命名法

从实验得知, 放置在磁场 \vec{H} 中的任何材料都获得一磁矩。将单位体积内的偶极矩定义为磁化强度, 并用矢量 \vec{M} 表示。在大多数材料中 \vec{M} 正比于外加磁场 \vec{H} 。这种关系可用下式表示:

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (1.1.1)$$

χ 称为材料的磁化率。

在 Maxwell 方程组中通常不用 \vec{M} , 而用下列矢量代替:

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \gamma_B \vec{M}) \quad (1.1.2)$$

式中 γ_B 是 Brown 为了适应不同单位制而引入的一个符号。对于教科书中已普遍采用的 SI 单位制, $\gamma_B = 1$; 而对于磁学界更为流行的高斯制或 cgs 制, $\gamma_B = 4\pi$, $\mu_0 = 1$ 。如果(1.1.1)式成立, 则可将(1.1.2)式改写为以下形式:

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (1.1.3)$$

其中:

$$\mu = \mu_0 (1 + \gamma_B \chi) = \mu_0 \mu_r \quad (1.1.4)$$

μ 称为磁导率。依照 χ 和 μ_r 可对材料进行分类: 如果 $\chi > 0$ 或 $\mu_r > 1$, 称为“顺磁性材料”; 如果 $\chi < 0$ 或 $\mu_r < 1$, 则称为“抗磁性材料”。

但是, 某些材料不符合这种分类, 因为其磁化强度 \vec{M} 不正比于外加磁场 \vec{H} 。譬如说, 在 $\vec{H} = 0$ 时磁化强度不等于零。事实上, 这种材料的磁化强度甚至不是磁场 \vec{H} 的单值函数, 而与外加磁场的历史有关。典型的情况如图 1.1 所示。它给出了磁化强度 \vec{M} 在外加磁场 \vec{H} 方向的分量 M_H 与磁场值之间的关系曲线。最外面的回线称为极限磁滞回线。它是用下述方法得到的, 即首先沿一个方向加一足够大的磁场, 接着减小至零, 再反向加至最大磁场。当外加磁场从正到负, 连续、循环变化时, 极限磁滞回线的形状不变。

从原点开始的曲线称为起始磁化曲线。每次样品退磁后(即处在 $\vec{H} = 0$, $\vec{M} = 0$ 的状态)只能测绘一次起始磁化曲线。退磁的方法有两种, 即将样品加热至高温后, 在零磁场中冷却; 或者使外加磁场沿正负方向往返循环变化, 同时逐渐减小磁场幅值为零。如果增大磁场, 在尚未达到极限磁滞回线之前, 减小磁场至零并反向, 则得到所谓的小磁滞回线。图 1.1 给出了这种回线的一个例子, 实际上, 可测出一整套连续的小回线。适当选择外加磁场的历史, 就可以达到极限磁滞回线内的任意点。特别是可以得到 $H = 0$ 时, 在 $-M_r$ 和 $+M_r$ 之间的任何 M_H 值。 M_r 是极限磁滞回线上 $H = 0$ 所对应的 M_H 值(图 1.1), 称为剩磁(Remance)或剩余磁化强度。

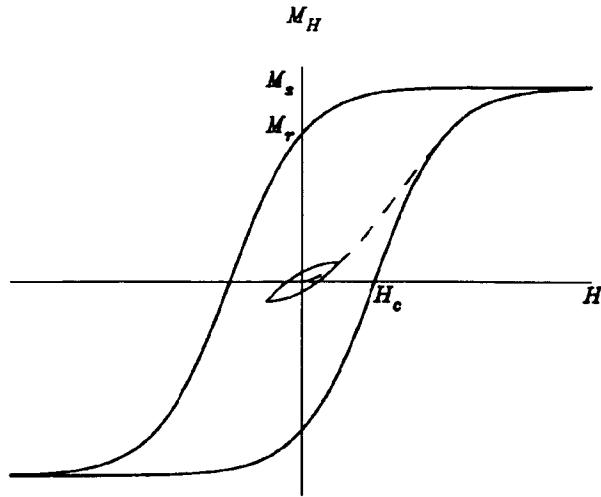


图 1.1 典型铁磁材料的“极限”磁滞回线、起始磁化曲线及一个小回线的示意图 (M_s —饱和磁化强度; M_r —剩余磁化强度; H_c —矫顽力)

为了使铁磁材料在某些方面形式上类似于顺磁性材料, 虽然并不是真正需要, 但可以对定义磁导率。不论(1.1.1)式, 还是(1.1.2)式在铁磁材料的场合均不满足, 所以磁导率的定义不是唯一的。不过习惯上仍然引入在某些特定磁场时的有效磁导率:

$$\mu_{eff} = \partial B_H / \partial H \quad (1.1.5)$$

或者某个磁场范围内的有效磁导率:

$$\mu_{eff} = \ddot{A}B_H / \ddot{A}H \quad (1.1.6)$$

在上述两种场合, 可以作某种近似, 将适用于顺磁材料的 Maxwell 方程组应用于有效磁导率描述的铁磁材料。但是, 不同于顺磁材料, 此处磁导率 μ 不是常数。整个的表述至多只能用于一特定的磁场。

从图 1.1 所示的极限磁滞回线, 还可以定义另外两个重要的磁参数。一是矫顽力 (Coercivity 或 Coercive force), 位于 $M_H = 0$ 对应的磁场, 它实际上是磁场, 并不是力。另一参数是饱和磁化强度或自发磁化强度 M_s 。暂时, 将很强磁场中测得的 M 值或 M_H 定义为饱和磁化强度。这一定义是不准确的, 但此处只能先这样作, 在 § 4.1 节中将作修正。

饱和磁化强度是材料的内禀性质, 如果测量方法适当, 则与样品无关。它是温度的函数。图 1.2 给出此函数的典型形式。图中 M_s 和 T 均分别以零度时的饱和磁化强度 $M_s(0)$ 及居里温度 T_c 归一化的。所谓居里温度是零磁场中 M_s 变为零所对应的温度。当用归一化的形式表示时, 不同铁磁材料的曲线几乎都是一样的(如图 1.2)。所有的铁磁体在温度高于 T_c 时均转变为正常的顺磁体。因为测量 T_c 时, 往往需要外加磁场, 所以高于居里温度时仍有不为零的磁化强度, 图 1.2 中强调了这一行为。图中给出了在小磁场中实际测得的曲线, 在居里温度 M_s 并没有等于零。有关 Ni 和 Fe 的实验曲线可以参阅文献, 譬如 Potter 的图 9[2]。

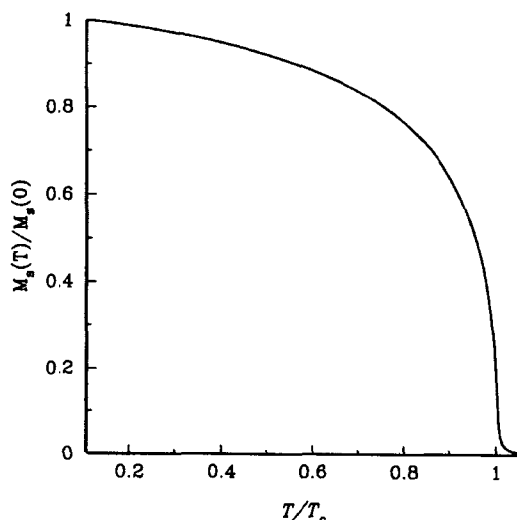


图 1.2 铁磁体的饱和磁化强度对温度的函数关系（温度用 T/T_c 的形式给出，假设外磁场比较小但是仍然存在，这个情形和实际中的测量相符合）

§ 1.2 Weiss 磁畴

任何一种铁磁理论，原则上都必须对别的材料中未曾碰到的两种罕见的现象加以注意，即必须对图 1.1 所示的滞后现象和图 1.2 所示的温度依赖性给予解释。然而，大多数理论工作者只研究其中之一，而忽略另一现象。他们甚至在理论结果与实验比较时，仍然只研究一种现象，而实际中往往是二者并存的。这是不可避免的，因为普遍的定量问题对现有的知识来说是太复杂了。

由于 1907 年 Weiss 所给的解释，定性地讲，对于上述两种现象已经有了一定程度的了解。Weiss 假设在铁磁材料中存在着某种内场(或分子场)，它力图使原子的磁偶极矩反抗热涨落，而取向排列。热涨落倾向于使这些偶极矩排列完全无序，由第二章将会看到，用分子场足以解释图 1.2 所示的温度依赖性以及高于居里温度时的顺磁性。不过，这种模型导致的结果是低于居里温度 T_c 的任意温度下，磁化强度 \bar{M} 是一常数。为了解释图 1.1 所示的不寻常的磁场依赖性，Weiss 假设铁磁体是由很多磁畴组成，每个磁畴均磁化至饱和 $M_s(T)$ (图 1.2)，但每个磁畴的磁化方向却不同。磁化强度的测量值是对这些磁畴的平均值。如果磁化矢量平行和反平行于某一特定方向的磁畴数目相等时，磁化强度沿此方向的平均值就等于零。如果这两类磁畴的数目不相等，则可以得到数值上小于 $M_s(T)$ 的不为零的磁化强度值。外加磁场使每个磁畴的磁化强度矢量转向它的方向。当磁场足够大时，所有磁畴的磁化矢量均沿磁场取向，则测得的平均值就等于 $M_s(T)$ 。不做详细的考虑，就可以清楚的看到，这一假设至少足以定性地解释图 1.1 所示的磁场依赖性。

Weiss 未对其两个随意的假设给出证明，未能阐明分子场的起源和磁畴的存在。同时，用他的原理进行定量的估计时也遇到一些困难，例如在其理论中采用居里温度的实测值时，给出铁中的分子场高达 10^6 [奥斯特]。然而，量级为 1 [奥斯特] 的磁场又能使铁中的磁畴重新

排列, 10^3 [奥斯特] 的磁场能使磁畴完全消失。为什么 10^6 [奥斯特] 的磁场不能使铁的所有磁矩平行排列, 而额外只要 10^3 [奥斯特] 的磁场就能做到? 为什么甚至 1 [奥斯特] 的磁场都能显著地改变磁畴的分布, 而 10^6 [奥斯特] 的磁场却不能?

尽管有这些困难(以后还会提及), Weiss 的两个假设事实上是有效的、正确的。它包含了对铁磁性的基本认识。现在已经阐明分子场是自旋间耦合作用的某种近似, 可以从更基本的原理推导出。对这些基本原理, 下面将在不同层次上给予说明。沿不同方向磁化的磁畴的存在问题已不再是假设。已经用 § 4.1 节所列的各种技术观察到了磁畴。磁畴的存在现已成为确定的实验事实。现已证明, 唯一的差别是磁畴只能沿某些特定的方向磁化, 而不是 Weiss 当初想象的无规取向。虽然, 磁畴的存在已是实验事实, 但这并不是让我们停止去阐明为什么会出现磁畴? 为什么 10^6 [奥斯特] 的磁场不能作 1 [奥斯特] 的磁场能完成的工作? 本书的部分内容就是致力于回答这些问题。

虽然, 铁磁体的基本性质在本质上属于量子力学效应, 本书在大多数场合将采用经典物理学的方法处理, 以便使在学校没有学过量子力学的学生能够听懂。这不仅仅是本书的选择。近年来谁都知道经典理论充其量只能是正确量子力学处理的一种近似, 特别是磁性问题。但是, 很多铁磁理论的发展仍然是利用经典的概念完成的。这样作的理由是纯量子理论尚未发展到足以解决实际问题的程度, 而能解决的只是一些很少有实际应用的简单情况。不过在采用铁磁性的经典处理方法之前, 必须思考一个著名的、经常引用的 Bohr—Van Leeuwen 定理, 依照这个定理, 经典物理学不可能导出磁性, 因为在纯经典的物理学材料中的电子不会与外加磁场发生作用。

§ 1.3 Bohr—Van Leeuwen 定理

讨论 N 个电子组成的经典体系。它具有 $3N$ 个自由度, 可以用 $3N$ 个坐标 q_i 和 $3N$ 个动量 p_j 来描述。每个电子具有电荷 $e = -|e_e|$ 。在 cgs 单位制中, 一个速度为 \vec{v} 的电子产生的电流密度 $\vec{j} = e\vec{v}$, 并在空间 \vec{r} 处产生磁矩:

$$\vec{m} = \frac{1}{2c} \vec{r} \times \vec{j} = \frac{e}{2c} \vec{r} \times \vec{v} \quad (1.3.7)$$

c 为光速。由此看出一个重要的特征, 即 \vec{m} 是每一个电子的速度 \vec{v} 的线性函数。这意味着, 无论所有电子的运动图象如何, 其总磁矩依然是所有电子速度的线性函数。所以, 所有电子总磁矩的 z 分量必须是下列形式的函数:

$$m_z = \sum_{i=1}^{3N} a_i^z(q_1, \dots, q_{3N}) \dot{q}_i \quad (1.3.8)$$

式中 \dot{q}_i 表示 q_j 对时间的微商; 系数 a_i^z 是所有 q_j 坐标的函数, 与 p_j 无关。

经典运动的正则方程为:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (1.3.9)$$

其中:

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2m_e} \left(\vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}_i \right)^2 + eV(q_1, \dots, q_{3N}) \quad (1.3.10)$$

为哈密顿量, m_e 为电子质量, \vec{A} 为磁场的向量势及 eV 为势能。

将(1.3.9)式代入(1.3.8)式, 则得:

$$m_z = \sum_{i=1}^{3N} a_i^z(q_1, \dots, q_{3N}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad (1.3.11)$$

若 k_B 为 Boltzman 常数, T 为温度,

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.3.12)$$

则磁矩的经典统计平均值, 即测量值为:

$$m_z = \frac{\int m_z e^{-\beta \mathcal{H}} dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}}{\int e^{-\beta \mathcal{H}} dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}} \quad (1.3.13)$$

根据(1.3.11)式, (1.3.13)式的分子是很多项的和, 而每一项都正比于下式:

$$\int \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} e^{-\beta \mathcal{H}} dp_i = [-k_B T e^{-\beta \mathcal{H}}]_{p_i=-\infty}^{\infty} \quad (1.3.14)$$

这一积分等于零。因为根据(1.3.10)式, 当 $|p_j|$ 很大时 \mathcal{H} 与 p_i^2 成正比。所以, $M_z = 0$, 即在任何矢量势中(即在任何磁场中), 材料的磁矩恒等于零, 而与电子在材料中具体的运动形式无关。换句话说, 如果材料中的电子遵循经典物理学的定律, 则外加磁场与任何材料中的电子之间无相互作用。这就是说经典物理学既不能阐明抗磁性, 也不能阐明顺磁性, 铁磁性当然不在话下了。

这个定理是很普遍的, 其证明也是严格的。但是, 它不排除应用经典物理学的所有可能性, 应该排除的只是纯经典物理学的应用。当然, 在今天已无人会以任何形式这样作。经典电子不可能围绕原子核作圆周轨道运动, 而会释放能量, 并失陷于原子核。而当今的很多“经典”理论只应用量子力学的结果, 使电子作轨道运动, 再用经典的方法计算轨道半径。从下一节将会看到, 抗磁性经典理论的建立, 事实上是以电子的圆周轨道运动为前提的。经典电子不具有自旋。但是, 只要对电子引入自旋的量子力学概念, 就可以建立铁磁性的经典理论了。在物理学的其它领域, 将经典理论看作是量子力学的一种极限。但铁磁性的经典理论仅仅是一种准经典的处理方法, 并不是真正的经典理论。它采纳了自旋的量子力学概念, 而在运算时将自旋又视为经典矢量。从本质上讲, 它只是采用了经典形式表达量子力学的结果。某些量子力学的结果乍看起来似乎不令人喜爱。

从原则上讲, 用纯量子力学的方法处理磁学各领域的问题, 特别是铁磁性的问题, 那是最好不过的了。某些书, 譬如 Wagner 的书[3]以及每年发表的很多研究论文均采用了这种处理方法。不过量子力学只能应用于一些很有限的铁磁性问题。对于此领域的所有其他问题, 几乎是别无选择, 不是忽略不计, 就是用准经典的技术研究。正如本书在大多数情况下所采用的方法。此外, 经典的计算能给出有用的、直观的导向性结果。就这一点就足以使人们甚至在量子力学可能, 不过比较复杂的场合, 宁愿采用准经典的方法。另外, 由第三章将会看到很多已报道的量子计算中使用了比较粗略的近似。而从未证实这种近似要比应用经典物理

更好。

§ 1.4 抗磁性

作为例证, 本节中将同时用量子力学的观点和准经典的处理方法研究抗磁性。在准经典方法中引入了电子的 Bohr 轨道。

首先从量子力学的观点讨论一个孤立的, 具有 Z 个电子的原子, 其哈密顿量为:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^Z [\vec{p}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i)]^2 + \text{其他项} \quad (1.4.15)$$

式中其他项包含电子与原子核、电子与电子间的相互作用。这些项对于抗磁性不起作用。如果外加磁场沿 z 轴方向, 并不随位置和时间变化, 则矢量势为:

$$\vec{A} = \frac{H}{2}(-y, x, 0) \quad (1.4.16)$$

及

$$\vec{p}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i) = \frac{H}{2}(xp_y - yp_x)_i = \frac{H}{2} \hbar l_{zi} \quad (1.4.17)$$

式中 l_{zi} 为轨道角动量的 z 分量。

将(1.4.16)式及(1.4.17)式代入(1.4.15)式, 则哈密顿量的期望值为:

$$\overline{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^Z [\overline{p_i^2} - \frac{eH\hbar}{c} \overline{l_{zi}} + \frac{e^2 H^2}{4c^2} \overline{(x^2 + y^2)_i}] + \text{其他项} \quad (1.4.18)$$

由此得出磁矩为:

$$\overline{m_z} = -\frac{\partial \overline{\mathcal{H}}}{\partial H} = \frac{e}{2m_e c} \sum_{i=1}^Z [\hbar \overline{l_{zi}} + \frac{eH}{2c} \overline{(x^2 + y^2)_i}] \quad (1.4.19)$$

对于一克分子的材料, 其磁化率为:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{e^2 N}{4m_e c^2} \sum_{i=1}^Z \overline{(x^2 + y^2)_i} \quad (1.4.20)$$

式中 N 为 Avogadro 常数, 即一克分子材料中的原子数。

为了用准经典的估计获得相同的结果, 试讨论一电子围绕原子核作频率为 ω_0 的圆周运动, 其半径为 r 。原子核的电荷为 $Z|e|$ 。在平衡状态电子所受的离心力等于电子与原子核之间的库仑吸引力, 即

$$m_e \omega_0^2 r = \frac{Ze^2}{r^2} \quad (1.4.21)$$

于是:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{Ze^2}{m_e r^3}} \quad (1.4.22)$$

如果, 外加一磁场 \vec{H} , 则在以前已有的作用力上附加一 Lorentz 力 $(e/c)\vec{v} \times \vec{H}$, 频率变为 ω , 则新的平衡方程式变为:

$$m_e \omega^2 r = \frac{Ze^2}{r^2} + \frac{|e| \omega r H}{c} \quad (1.4.23)$$

采用记号:

$$\omega_L = \frac{|e| H}{2m_e c} \quad (1.4.24)$$

则(1.4.23)式变为:

$$\omega^2 - 2\omega\omega_L - \omega_0^2 = 0 \quad (1.4.25)$$

即使在技术上能获得的最大磁场下, $\omega_L \ll \omega_0$, 所以, 将二次方程式(1.4.25)的解可写成下列形式:

$$\omega = \omega_L + \sqrt{\omega_L^2 + \omega_0^2} \approx \omega_L + \omega_0 \quad (1.4.26)$$

可以看出, 外加磁场使频率偏移了 ω_L . 称此 ω_L 为 Larmor 频率。

频率的这一变化意味着电子另外获得了每秒 $\omega_L/2\pi$ 的转数, 产生了附加电流:

$$j = \frac{e\omega_L}{2\pi} \quad (1.4.27)$$

在 cgs 单位制中, 磁矩等于 j/c 与轨道面积的乘积, 即

$$m_z = \frac{j}{c} \pi(x^2 + y^2) = -\frac{e^2 H}{4m_e c^2} (x^2 + y^2) \quad (1.4.28)$$

上式给出与(1.4.20)式相同的磁化率。

这一结果与 Bohr—Van Leeuwen 定理并不矛盾, 因为一个真正的经典电子不可能象这一“经典”计算中假设的那样维持在轨道上。不过它的确证实了用准经典的方法同样可以得到正确的结果, 只要人为地附加某些量子力学要求的東西, 正如此处的电子维持圆周轨道一样。用同样的方式, 使电子具有自旋, 并在自旋间存在某种形式的交换作用的方法, 可以对铁磁性进行准经典的研究。

在结束本节之前, 做某些注释是适宜的。首先, 电子完全局域于一个原子位的图象, 对大多数固体来说是过于简单化, 无疑是不能用于金属。因为金属中简并化 Fermi 电子气占有一定的能带。在磁场作用下分裂为所谓的 Landau 能级。这是一个完全不同性质的课题, 已超出本书所讨论的范围。上面的计算实际上只适用于稀有气体或者被电离至具有闭合电子壳层的气体。在这样的场合, 材料完全是各向同性的, 所以 $\overline{x^2} = \overline{y^2} = \frac{1}{3} \overline{r^2}$ 。在这样的情况下,

文献中通常可以看到(1.4.20)式为下列形式:

$$\chi = -\frac{e^2 N}{6m_e c^2} \sum_{i=1}^Z \overline{r_i^2} \quad (1.4.29)$$

进一步的问题是计算 $\overline{r_i^2}$ 的数值。对于氢原子比较简单, 但对别的材料并不简单。

其次, 抗磁性[即(1.4.20)式或(1.4.19)式给出的负磁化率]存在于所有的材料中, 包括顺磁材料。不过顺磁材料的正磁化率远大于上述的负磁化率部分, 相比之下可以忽略。在 cgs 单位制中(1.4.19)式方括弧中第一项 $\overline{h l_z}$ 的典型值的数量级为 10^{-27} , 而第二项