

铁 磁 材 料

磁有序物质特性手册

卷 I

E. P. WOHLFARTH 主编

刘增民 林后植
章思俊 王绪彬 潘尊五 译
张 熙 张寿恭 校

电子工业出版社

(京)新登字 055 号

内 容 提 要

《铁磁材料》一书是关于磁有序物质特性的手册,由欧美各国具有广泛影响的专家分章撰写。本书总括了已发表的各类有关铁磁材料领域的新成就、重要实验数据及图表,是一部既是工具书又是教科书的专著。全书现已出版六卷,第一卷包括铁、钴、镍,稀释过渡金属合金,稀土金属和合金,稀土化合物,铜系元素和化合物,非晶铁磁体和磁致伸缩稀土铁化合物的基本理论、磁性能和应用。

本书可作为从事磁学研究,磁性材料及器件开发和生产,磁学教学以及从事电子电气、冶金、化学工作的各级科技人员、大专师生的必备参考书。

* * *

铁 磁 材 料

磁有序物质特性手册

卷 I

E. P. WOHLFARTH 主编

刘增民 林后植 译
章思俊 王绪彬 潘尊五

张 熙 张寿恭 校

责任编辑 丁光末

电子工业出版社出版(北京市万寿路)

电子工业出版社发行 各地新华书店经售

中国科学院印刷厂 印刷

开本: 787×1092 毫米1/16 印张: 26.5 字数: 695 千字

1993 年 8 月第 1 版 1993 年 8 月第 1 次印刷

印数: 0001—2000册 定价: 26 元

ISBN 7-5053-2060-2/TN·618

译 者 前 言

本书由各国几十位著名教授、科学家集体编著,原文书名为: Ferromagnetic Materials; 副标题是: A handbook on the properties of magnetically ordered substances。

本书总括了有关铁磁学早期的经典理论、重要实验数据及图表与现代磁学科学技术的新成就,并进行了系统的阐述,兼有教科书和工具书的特点,是继三十多年前由 Bozorth 编著的《铁磁学》之后又一划时代的磁学专著。因而,本书是从事磁学研究,磁性材料及器件开发和生产,磁学教学以及从事电子电气、冶金、化学工作的各级科技人员、大专师生必备的参考书。

本卷由机械电子工业部第九研究所负责组织翻译,承担翻译工作的有: 刘增民、林后植、章思俊、王绪彬和潘尊五等五同志;张熙、张寿恭二同志担任总校对,刘增民同志担任第二章、第四章和第七章的校对工作。

本书中文版出版过程中,得到了机械电子工业部第九研究所、磁性材料及器件专业情报网、全国磁性元件与铁氧体材料标准化技术委员会和电子工业出版社的大力支持,对此表示衷心感谢。

序 言

《铁磁材料》一书是关于磁有序物质特性的手册。作者拟将本书写成一部既是参考书又是教科书的全面著作。为此,在内容上将尽量概括已发表各类有关图表和专著的成就。作者的目的之一就是要继承 Bozorth 的《铁磁学》再出版一部有价值的著作。Bozorth 的《铁磁学》是三十年前发表的独具匠心的经典著作,内容极其丰富,包括了科学技术上的很多基础知识,早已广泛地用作参考书,其中很多内容至今仍很有价值。

现在单靠一人已无法再写出这样全面的著作了,因而本书只能分卷编辑出版,各卷分别包括相应的评述性篇章。各章的作者都要具备如下条件:现在仍积极从事研究开发工作、对本专业作出过显著贡献并对准备在本专业担负重要任务的理论和实验工作者有重要影响。至于这样的抉择是否成功,本书的读者和使用者自当作出判断。

这样一部大著作分卷编辑出版也有一个明显的困难,那就是不可能在很短的时间内把全书的各个章节同时写好,而又使其内容保持最新颖。实际上,正如已经预料的那样,每当作者进行所承担的工作时,就会发生这类困难,现在,此种情况尤为明显。因此,决定根据到1978年底为止所收集到的文章首先编辑出版前两卷。从整体上看,这两卷出版的及时性和内容上的重要性是否弥补了各个章节缺乏完善逻辑顺序的缺点,也请读者去判断。本书的前景将由作者们决定。加上计划中的后面几卷,本书将全面而广泛地包括整个铁磁材料领域的全部内容。

每位作者都面临这样一个任务:对材料的性能在从物理、化学、冶金、结构乃至工程的角度上进行广泛讨论的基础之上,再用图表等形式作出描述。这样才有希望编辑出符合同时代作为参考书和教科书要求的、内容全面的著作。本书的成功与否将主要根据前者而不是后者决定。铁磁材料已广泛应用于很多技术领域,但从事本专业研究和开发的人们往往又感到似乎在与其它学科(如半导体)争夺高低。愿本书在这场争夺中能作为一种适用而有效的武器。

我以极其愉快的心情对很多有关人员表示感谢。我们得到了北荷兰出版公司的密切合作。这里只举出 P.S. H. Bolman 的名字,但这并不意味着低估对本书出版有过帮助的其他人员的作用。同时,我也深切感谢埃德霍温菲力浦研究室的很多工作人员,他们早就向我提出了这种有益的建议。这里值得特别提出的是 H. P. J. Wijn 和 A. R. Miedema。最后还要感谢本书的全体作者,尤其感谢那些如期完稿的作者。

E. P. WOHLFARTH

于皇家学院

目 录

第一章 铁、钴、镍	1
1.1 理论基础概要	1
1.1.1 引言	1
1.1.2 能带和费米面的计算	1
1.1.3 Stoner 模型 能级分裂的起因	6
1.1.4 非 Stoner 模型的结果 多体效应	10
1.1.5 自旋波	11
1.2 基本磁特性	12
1.2.1 在 0K 和有限温度时的磁化强度	12
1.2.2 超精细场	14
1.2.3 居里温度	15
1.2.4 $T > T_c$ 时的磁化率 居里-外斯常数	15
1.2.5 高磁场效应 高场磁化率	17
1.2.6 居里温度附近的临界指数	18
1.2.7 动态磁化率 自旋波色散和劲度系数	19
1.2.8 中子测量的自旋密度	22
1.3 其他磁特性	22
1.3.1 g 和 g' 因子	22
1.3.2 线性磁致伸缩	23
1.3.3 磁晶各向异性	25
1.3.4 磁弹效应	29
1.3.4.1 基本磁特性与压力的关系	29
1.3.4.2 体磁致伸缩	29
1.3.4.3 热膨胀	30
1.3.4.4 弹性常数	30
1.3.5 热学特性	32
1.3.5.1 比热	32
1.3.5.2 磁热效应	34
1.3.6 输运特性	34
1.3.6.1 电阻	34
1.3.6.2 霍尔效应	36
1.3.6.3 其他效应	36
1.3.7 光学特性	38
1.4 有关的电子特性	38
1.4.1 固体光谱	38
1.4.1.1 紫外线发射光谱	38
1.4.1.2 X 射线光谱	40
1.4.1.3 软 X 射线研究	40
1.4.1.4 光电子的自旋极化	41

1.4.1.5 其他有关技术	41
1.4.2 费米面 de Haas-Van Alphen 技术	42
1.4.3 其他技术	43
1.4.3.1 等离子体损耗 功函数	43
1.4.3.2 康普顿截面	43
1.4.3.3 正电子湮没	43
参考文献	44
第二章 稀释过渡金属合金: 自旋玻璃	50
2.1 引言和术语	50
2.1.1 近藤效应和弱磁矩	50
2.1.2 巨磁矩	51
2.1.3 自旋玻璃	52
2.1.4 混磁性和簇玻璃	54
2.1.5 渗透作用和长程磁有序	54
2.2 合金系统一览表	55
2.2.1 含过渡金属杂质的贵金属	55
2.2.2 过渡金属-过渡金属组合	56
2.2.3 三元和特殊过渡金属合金	57
2.2.4 浓度范围	58
2.3 实验性能	60
2.3.1 巨磁矩铁磁性	60
2.3.1.1 宏观特性	62
2.3.1.2 微观特性	68
2.3.1.3 其它巨磁矩系统的特性和居里温度的确定	73
2.3.2 自旋玻璃冻结	76
2.3.2.1 宏观特性	77
2.3.2.2 微波特性	78
2.3.2.3 冻结过程	88
2.4 无序合金理论	91
2.4.1 随机分子场模型	91
2.4.2 其它理论概述	95
2.4.2.1 巨磁矩	95
2.4.2.2 自旋玻璃合金	99
2.4.3 结论和今后的方向	100
附录 2A	100
参考文献	122
第三章 稀土金属和合金	130
3.1 引言	130
3.1.1 摘要和表格	130
3.1.2 间接相互作用、广义磁化率和自旋波	134
3.1.3 能带、费米面和电阻率	139
3.1.4 晶场	145
3.2 Eu、Gd、Tb、Dy、Ho、Er 和 Tm 的磁性	147
3.2.1 铕	148
3.2.2 钬	149

3.2.3 铽	152
3.2.4 镝	154
3.2.5 钬	157
3.2.6 铒	160
3.2.7 铥	162
3.3 Ce、Pr、Nd、Pm 和 Sm 的磁性	164
3.3.1 铈	165
3.3.2 镨	168
3.3.3 钕	171
3.3.4 钐	174
3.3.5 铕	174
3.4 Sc、Y、Lu、La 和 Yb 的磁性	176
3.4.1 钪	176
3.4.2 钇	177
3.4.3 镧	177
3.4.4 铈	177
3.4.5 铈	178
3.5 二元稀土合金	178
3.5.1 钕基合金	184
3.5.2 钐基合金	185
3.5.3 铽基合金	188
3.5.4 镝基合金	190
3.5.5 钬基合金	191
3.5.6 铒基合金	191
3.5.7 铥基合金	192
3.5.8 轻稀土合金	193
3.6 磁晶各向异性能和磁致伸缩	194
参考文献	199
第四章 稀土化合物	205
4.1 引言	205
4.2 稀土与非磁性元素的化合物	208
4.2.1 局域 4f 磁矩之间的相互作用	208
4.2.2 晶场效应	210
4.2.3 磁性	213
4.2.3.1 与 III 族元素的化合物	213
4.2.3.2 与 IV 族元素的化合物	218
4.2.3.3 与 IA 族元素的化合物	220
4.2.3.4 与 Be、Mg 和 IIA 族元素的化合物	222
4.2.3.5 讨论	225
4.3 稀土与 d 过渡金属的化合物	227
4.3.1 含有 d 电子的金属系中的交换相互作用	227
4.3.2 磁性	230
4.3.2.1 与 3d 过渡元素的化合物	230
4.3.2.2 与 4d 和 5d 过渡元素的化合物	236

4.3.3 讨论	238
4.4 稀土三元化合物或氢化物	241
附录 4A	244
参考文献.....	278
第五章 铜系元素及其化合物	293
5.1 引言	293
5.1.1 铜系元素的电子结构	293
5.1.2 在固体状态下 5f 电子的特征	294
5.1.3 铜系元素及其化合物的晶体结构同铜系元素及其化合物的晶体结构的比较	294
5.1.4 铜系元素及其化合物的制备	296
5.2 磁性概述	296
5.2.1 铜系元素的磁性	296
5.2.2 铜系化合物的磁性	297
5.3 铜系元素和铜系化合物的磁有序	298
5.3.1 铜系元素	298
5.3.2 铜系化合物	298
5.3.2.1 铜系氢化物	298
5.3.2.2 铜系硫属化合物	299
5.3.2.3 铜系磷属化合物	301
5.3.2.4 铜系元素和 IIIA 及 IVA 族元素的化合物.....	301
5.3.2.5 三元铜系化合物	304
5.3.2.6 铜系元素金属间化合物	304
5.3.2.7 固溶体	309
5.3.2.8 本章结束语	312
参考文献.....	312
第六章 非晶态铁磁物质	319
6.1 引言	319
6.1.1 历史	319
6.1.2 理论上和技术上的意义	320
6.1.3 文献评述	321
6.1.4 本章的主要内容	321
6.2 制备技术	321
6.2.1 真空淀积	322
6.2.2 溅射淀积	323
6.2.3 电解淀积和化学淀积	323
6.2.4 熔液淬火	323
6.2.4.1 喷注器	323
6.2.4.2 活塞与砧以及双活塞	324
6.2.4.3 离心旋转急冷机	324
6.2.4.4 扭转弹射器	324
6.2.4.5 等离子喷雾	325
6.2.4.6 带材甩铸	325
6.2.4.7 熔体抽取技术	326
6.2.4.8 自由喷射旋转抛射	327
6.3 非晶金属合金的结构	327

6.3.1	结构描述	327
6.3.2	实验技术	327
6.3.2.1	X射线、电子散射和中子散 射	327
6.3.2.2	电子显微镜技术	328
6.3.2.3	量热法	329
6.3.2.4	密度	329
6.3.2.5	电阻率	330
6.3.3	结构研究结果	333
6.3.4	稳定性	334
6.3.4.1	结晶	334
6.3.4.2	结构弛豫	337
6.3.4.3	方向有序弛豫	338
6.4	基本磁学性质	338
6.4.1	磁矩和饱和磁化强度	338
6.4.2	居里温度	345
6.4.3	磁化强度同温度的关系	350
6.4.4	磁致伸缩	353
6.4.5	穆斯堡尔谱结果	355
6.5	磁畴结构	356
6.6	磁各向异性	357
6.6.1	结构和成分各向异性	357
6.6.2	应变-磁致伸缩各向异性	360
6.6.3	方向有序各向异性	360
6.6.3.1	磁有序各向异性的大小	360
6.6.3.2	重新取向动力学	361
6.6.3.3	应力感生有序	362
6.6.4	交换各向异性	362
6.7	矫顽力	363
6.8	剩磁比	364
6.9	磁化率和磁导率	366
6.10	损耗	366
6.11	用作软磁材料	368
	参考文献	370
第七章	磁致伸缩稀土-Fe₂ 化合物	375
7.1	引言	375
7.2	磁致伸缩的唯象理论	376
7.3	二元稀土-铁合金的磁致伸缩	381
7.4	二元 RFe ₂ 化合物的磁化强度及其次晶格的磁化强度	389
7.5	二元 RFe ₂ 化合物的磁晶各向异性	392
7.6	赝二元系 RFe ₂ 化合物的磁致伸缩	394
7.7	RFe ₂ 化合物的弹性特性	398
7.8	RFe ₂ 化合物的磁机械耦合	404
7.9	非晶 RFe ₂ 合金	408
7.10	小结	409

附录 7A	立方型和六角型晶体的磁致伸缩和磁各向异性	409
附录 7B	单离子模型磁致伸缩和磁各向异性与温度的关系	411
参考文献		412

第一章 铁、钴、镍

(E. P. WOHLFARTH)

1.1 理论基础概要

1.1.1 引言

铁、钴、镍三种过渡金属的磁性是整个金属磁性的基础。了解这些纯金属的性质尽管不是了解它们的合金性质的充分条件，至少也是必要条件。多年来围绕这三种金属曾有过很大的争论，争论的中心问题是载磁子是局域化的还是巡游的。两种观点都有著名的代表者。例如，Van Vleck 持一种观点，而 Slater 持另一种观点。自本世纪五十年代以来，这些热烈的争论逐渐平静下来。但是，直到现在还决不能说对铁、钴、镍的性质已有了充分的了解。令人惊异的是，很多合金的磁性比纯金属的磁性更容易得到合理的简单解释。产生这种情况的原因有如下几个：

(1) 这三种金属是强的(镍、钴)或较强的(铁)巡游电子铁磁体，所以在正负自旋之间交换分裂较大(见 1.1.3)。单电子理论即 Stoner 理论应用于纯金属的确切程度不如应用于较弱的巡游电子合金。而且因为自由能不能作 Landau 展开，故此理论在数学式及计算方法上也不够精确；(2) 与较弱的巡游合金相比，在纯金属中，诸如自旋波和自旋涨落等集体和多体效应对磁性的影响可能更为重要且不易作理论处理；(3) 由于铁、钴、镍的问题是如此明显，所以对它们的注意力超过了其他材料，因而需要做出解释的实验事实就比较多。

但是，现在的争论已不如以前热烈，而更为关心的问题已变为巡游和局域化两者的相对重要性、在低于居里温度时单粒子效应和多体效应的相对重要性以及在高于居里温度时出现的表观有序程度。Slater 的观点认为居里温度本身与交换分裂无关，这种观点已逐渐被某些人承认，但仍继续有人提出异议。因此，铁、镍、钴的铁磁性问题的仍然是金属磁性领域中主要的复杂的课题。和过去一样，对纯金属这个难题的了解取得任何进展都将肯定有助于对较弱的巡游电子合金的了解。本章在简短讨论能带和费米面计算之后将介绍单电子理论即 Stoner 理论。这个理论的中心参数是 Stoner-Hubbard 参数 I 。本章还将叙述对这个能量参数有贡献的一些因素(交换和相关)，而此能量参数决定了正负自旋间的交换分裂。对铁、钴、镍还将列出这些参数的理论值，后边将对利用各种可能的测量方法所获得的实验值做出归纳。因为 Stoner 理论在某些方面过于简单，故本章还简要地讨论了超出这一理论模式的某些结果，特别是那些涉及自旋波及自旋涨落的效应。在简短介绍自旋波理论的同时还列表给出了自旋波劲度系数 D 的计算值。在 1.2.7 中给出了 D 的实验值。本书是手册性的，故文字将力求简短，不作广泛的理论处理，而只着重对磁性材料的物理问题作叙述性的讨论并以此作为用图表说明材料实际性能的依据。

1.1.2 能带和费米面的计算

对铁、镍能带的计算结果已有很多，而对钴能带的计算结果还很少。Callaway 和 Wang

(1977a)给出了有关铁和镍的一些数据,其中包括他们用巡游电子磁性的局域交换模型得出的计算结果。他们用了两种交换势近似,即所谓 Kohn-Sham-Gaspar 势 (KSG) 和所谓 von Barth-Hedin 势 (vBH)。前者基本上是从 Slater 交换 ($X\alpha$) 导出的,其中参数 α 近于 $2/3$ 。后者包括了相关效应。直到选写本书之时,对上述金属的这几种处理方法都认为是最可靠的。表 1.1 列出了镍能带的计算结果。参阅后面的讨论还可以和实验值作详细的比较。值得注意的是: (i) 用两种方法计算的磁矩都是合理的,但 vBH 方法效果较好; (ii) 交换分裂 ΔE 对于交换势十分敏感。后面的论述表明: ΔE 的计算值可比某些实验值大得多,有关 ΔE 大小的问题仍然是过渡金属铁磁理论的中心; (iii) 态密度 $N(E_F)$ 比由比热获得的值低,即相当于乘上一个电子-声子增强因子 $\lambda = 0.60$,这是很合理的; (iv) 与实验值相比较(见 1.2.2),有效超精细场也是合理的。

表 1.1 镍的能带计算结果 (Callaway 和 Wang 1977a)

势	磁矩 (μ_B)	ΔE	$N(E_F)$	H_i
KSG ($\alpha = \frac{2}{3}$)	0.65	0.88	22.9	-69.7
vBH	0.58	0.63	25.4	-57.4

ΔE : 能带顶部的交换分裂 (eV)
 $N(E_F)$: 费米能上的态密度(态数/原子/Ry)
 H_i : 在原子核处的正负自旋密度差,用有效超精细场 (kG) 表示

1977 年, Wang 和 Callaway 根据这两种交换势计算了镍的态密度曲线。图 1.1 给出了用 vBH 势计算的结果,该曲线适用于两种自旋方向。图 1.2 表示镍在 (100) 平面中费米面的截面。一般说来,计算结果和实验符合良好,尽管还没有观察到由轮廓线 b 所表示的 $d\downarrow$ 重空穴包,这可能是被认为各向异性不明显的势形成的一种结果。

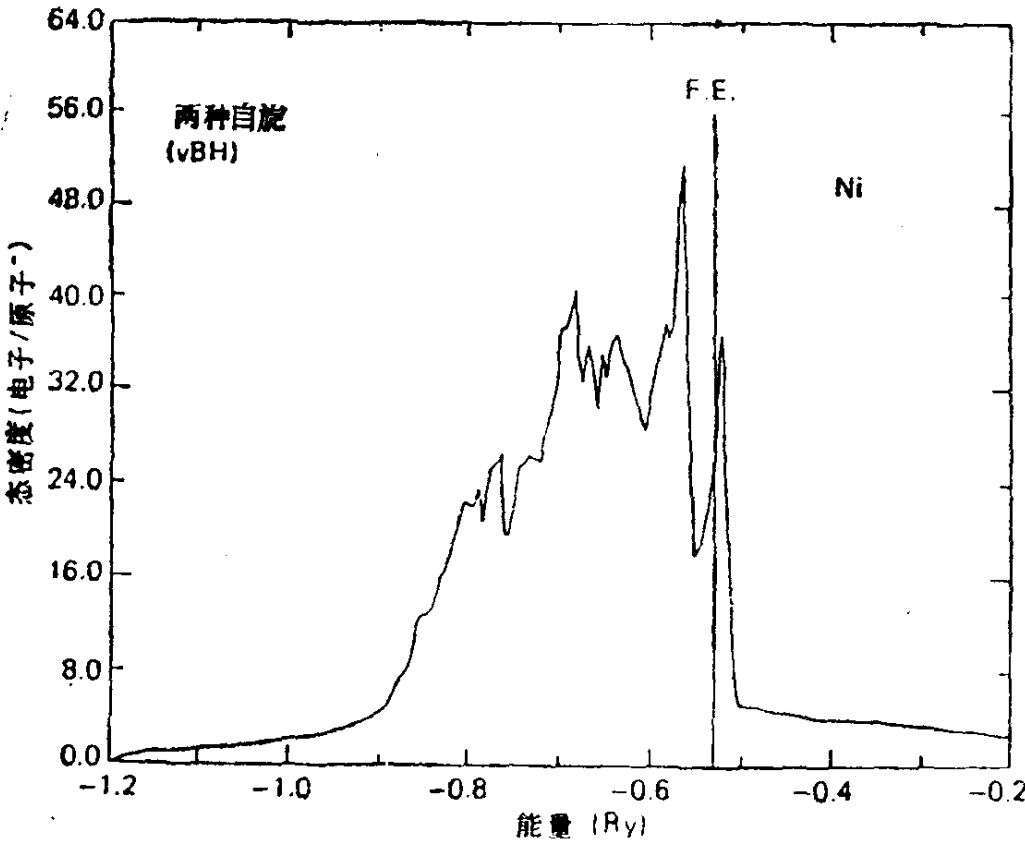


图 1.1 用 vBH 势计算的镍的两种自旋方向的态密度曲线 (Wang 和 Callaway 1977)

Marshall 和 Bross (1978) 利用内插法和铁磁金属的 Hubbard 哈密顿量(1963)对镍的能带作了另一种计算,其结果比 Wang 和 Callaway 的计算更符合实验值。比如,不存在重

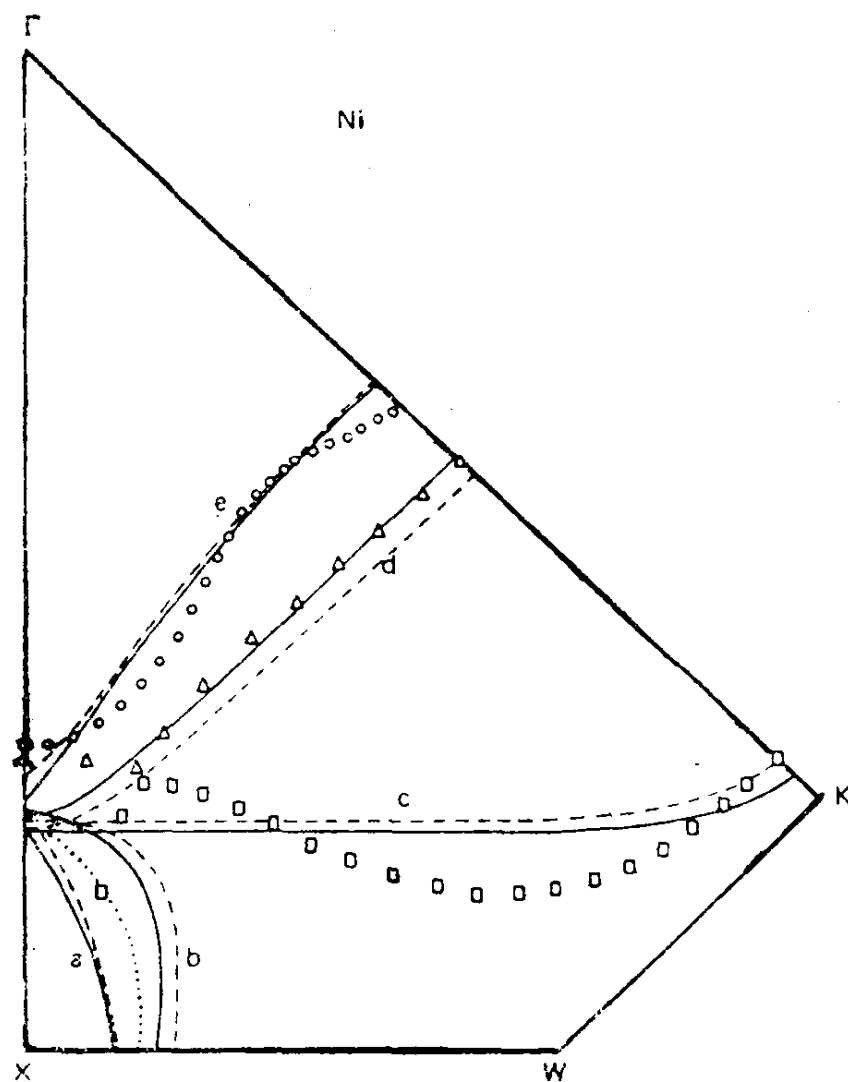


图 1.2 镍在(100)面中费米面的截面 (Wang 和 Callaway 1977), 虚线对应 KSG 势, 实线对应 vBH 势, Δ 、 $\square$ 、点线是 Stark (见 Gold 1974) 和 Tsui (1967) 的实验数据。
(a) $X_1\downarrow$ 空穴包; (b) $X_2\downarrow$ 空穴包; (c) 主 $d\downarrow$ 空穴面; (d) $sp\uparrow$ 表面; (e) $sp\downarrow$ 表面

空穴包。由式(1.9)定义的能隙 Δ 为 175meV, 显得较小, 但仍比由 1.4.1 节讨论的自旋极化光发射数据及 1.2.7 节的中子数据所给出的能隙值大一倍。作者认为他们可以解释这种差别。

表 1.2 给出了对铁算出的类似结果, 后面在可能的地方还与实验作了比较。对于铁来说, 交换分裂 ΔE 的问题比对镍还要重要。与前面一样, 计算值对交换势敏感, 而且有高于后面叙述的各种可能的实验值的趋势, 但不完全肯定。电子-声子增强因子 λ 约为 0.70。

表 1.2 bcc 铁能带的计算 (Callaway 和 Wang 1977a,b)

势	磁矩 (μ_B)	ΔE	$N(E_F)$	H_1
KSG ($\alpha = \frac{2}{3}$)	2.30	2.68	15.4	-343
vBH	2.25	2.21	16.0	-237

图 1.3 是铁的态密度曲线, 图 1.4 是费米面在(100)面中的截面。在原始文献 (Callaway 和 Wang 1977 a,b) 中, 还与实验结果作了比较。

这里只提一下 fcc 铁 (Dalton 1970, Madsen 等 1975) 和 hcp 铁的能带计算。hcp 相是在 100kbar 量级的高压下产生的物相 (Madsen 等 1975, Fletcher 和 Addis 1974)。虽然后者的计算和 Callaway 的计算一样, 不包括交换势和相关势, 但费米面处于态密度曲线中一个非常明显的凹陷位置, 因而几乎可以肯定高压相的铁完全没有自旋有序排列并且和实验观察结果一致 (Williamson 等 1972)。

对于 hcp 钴尚未有比较精确的能带计算。Wang 等在 1969 年和 Wokoh 等在 1970 年

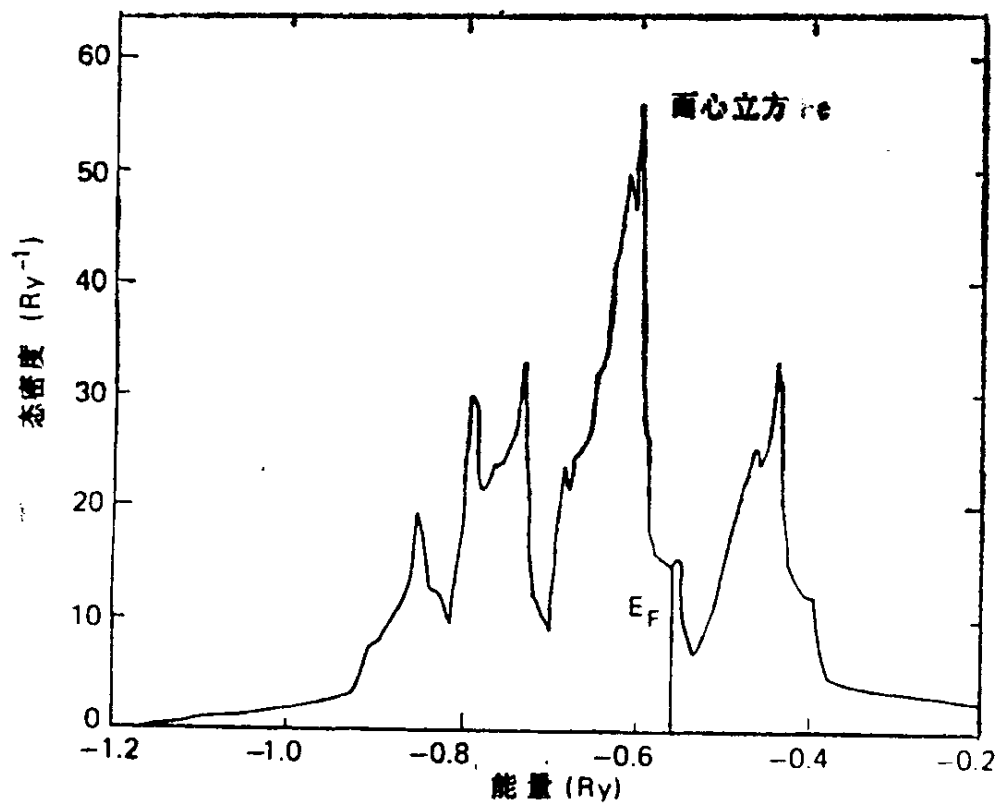


图 1.3 用 vBH 势算出的 bcc 铁两种自旋方向上的态密度曲线
(Callaway 和 Wang 1977a,b)

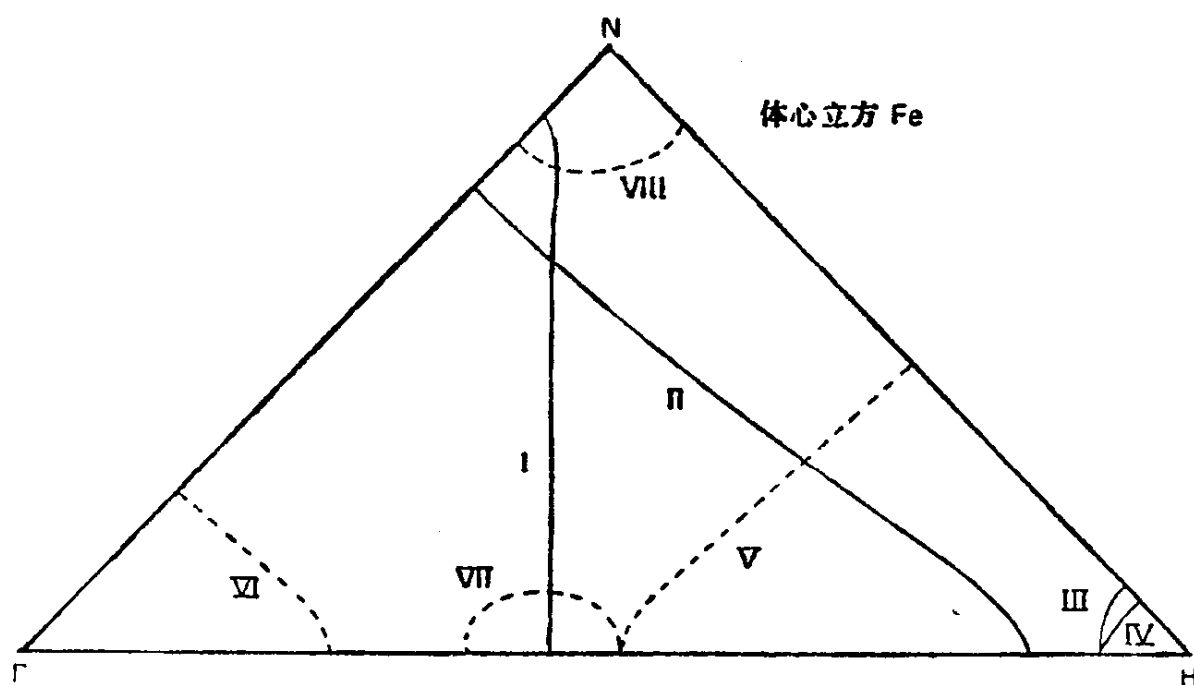


图 1.4 用 vBH 势算出 bcc 铁的费米面在(100)面中的截面(Callaway 和 Wang 1977a,b)。
实线对应于多数自旋，虚线对应于少数自旋。符号见原文和图 1.23

分别基于两种不同的原理而又都采用 KKR 方法作过这方面的计算，Wohlfarth (1970)对这两种计算作了对照比较。由于交换势有差别，两种计算得出的交换分裂值分别为 1.35 eV 和 1.7 eV。对 Wohlfarth 的论文进行分析后表明，有理由认为这两个数值过大，因而提出了一个“最佳”估计值 1.05 eV。1972 年，Ishida 报导了对 hcp 钴作的一个能带计算结果，再次使用了 KKR 方法。顺磁能带的刚性分裂结果虽然显得过分简单，但仍然得出交换分裂值为 1.13 eV，很符合最佳估计值。图 1.5 给出了顺磁性 hcp (实线)和 fcc (虚线)钴的态密度曲线。由于两种晶体都是密堆积结构，故其态密度曲线非常相似。hcp 曲线和较早的计算符合得很好。在两个计算中，电子-声子增强因子 λ 反常地低到 0.14。图 1.6 为对 hcp 钴多数自旋能带计算的费米面。

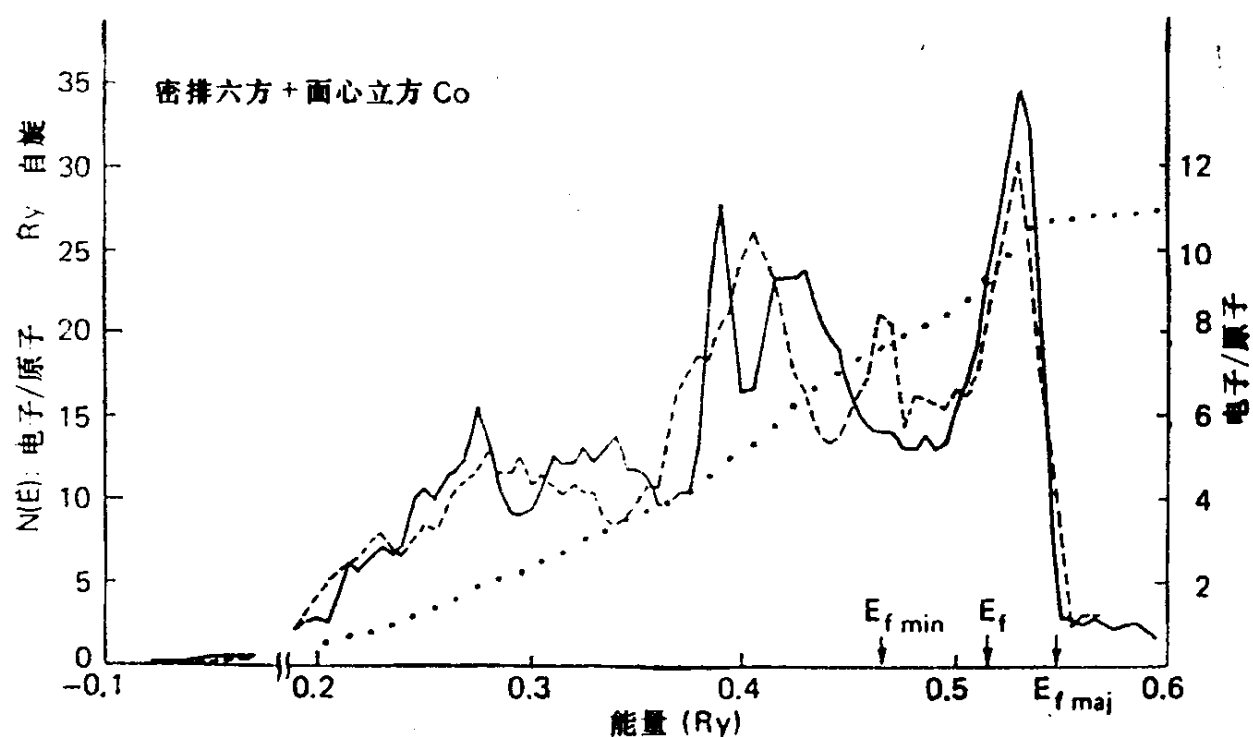


图 1.5 顺磁性 hcp 钴的态密度曲线(实线)和顺磁性 fcc 钴的态密度曲线(虚线) (Ishida 1972)

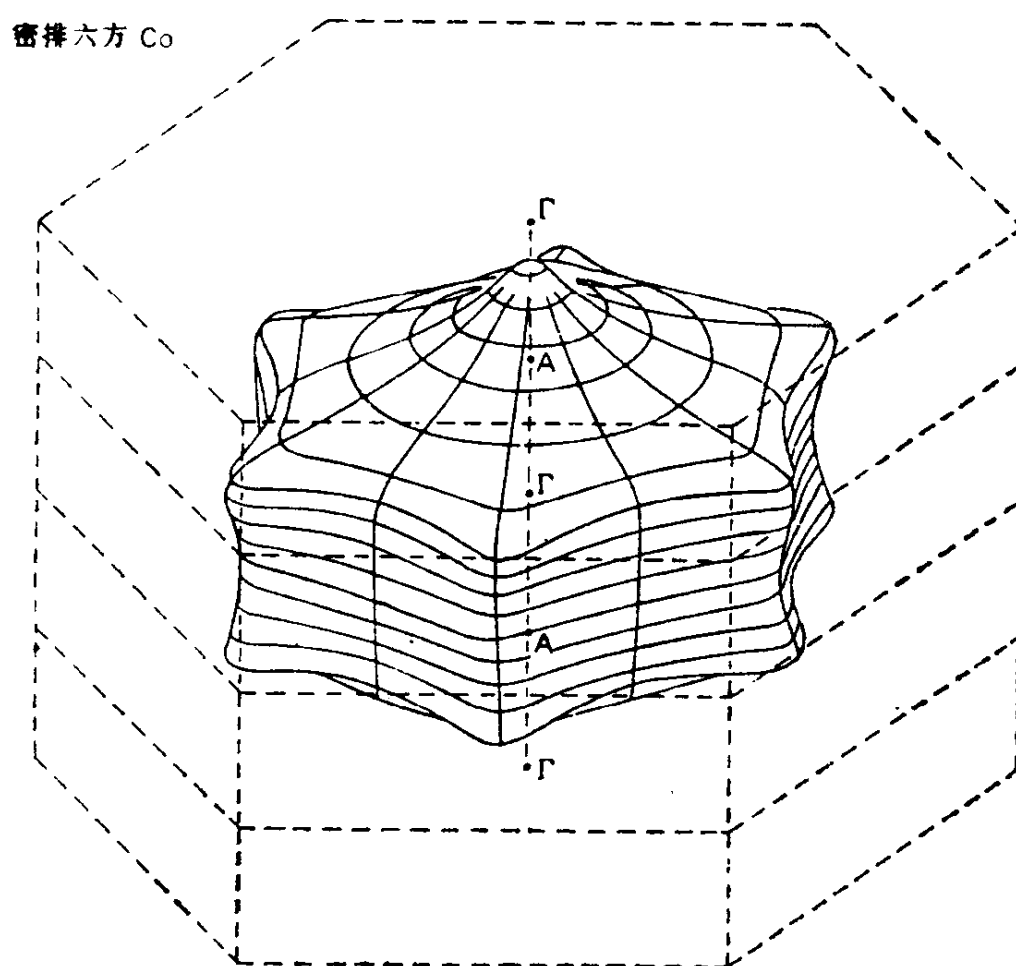


图 1.6 hcp 钴的多数自旋能带的费米面 (Ishida 1972)

表 1.3 收集了根据铁、钴、镍的能带计算认为是最合理的 ΔE 值, 还给出了 Stoner-Hubbard 参数 $I = \Delta E / \mu_s$ 的数值, μ_s 是以 μ_B 为单位的饱和磁化强度。与后来从实验结果导出的数值作了对照, 认为表 1.3 给出的 ΔE 及 I 值可能太高; 不过它还是清楚地表明三种金属的 I 值变化是很小的。下一节将简单地讨论 I 的起因问题。

表 1.3 根据能带计算得出的 ΔE 和 I 值④

金 属	Fe	Co	Ni
$\Delta E(\text{eV})$	2.2①	1.1②	0.6③
$I(\text{eV})$	1.0	0.65	1.0

① 取自表 1.2 vBH 势

② 取自 Wohlfarth (1970) 和 Ishida (1972) 文献

③ 取自表 1.1 vBH 势

④ Eastman (1979) 势的工作

1.1.3 Stoner 模型 能级分裂的起因

Stoner 模型用于铁磁金属与合金时是说明其磁性能的简单理论基础。在 1.1.4 节还将介绍非 Stoner 模型的几种近似方法, 1.1.5 节将专门讲自旋波。Stoner 模型是根据下面三个假设建立起来的:

(1) 巡游电子分布于由态密度曲线描述的能级之中, 这种态密度曲线由 1.1.2 节的能带计算得出。铁、钴、镍的载磁子是 3d 带中的空穴。

(2) 巡游电子之间的相互作用可用一种分子场近似描述, 分子场 H_m 正比于磁化强度, 即

$$H_m = \frac{1}{2} n I \zeta / \mu_B \quad (1.1)$$

每一个原子的分子场能为:

$$E_m = -\frac{1}{4} n^2 I \zeta^2 \quad (1.2)$$

式中 n 是每个原子的空穴数, ζ 是相对磁化强度, I 是 Stoner-Hubbard 参数, 其起源以后讨论。

(3) 在一些有限的温度上, 粒子在各能级之间的分布由费米-狄喇克统计决定。

根据这些假定, 用很简单的方法便可导出一些重要的物理结果。下面先作出一个最基本的归纳, 至于 Stoner 模型导出的其它结果将在以后讨论。

(1) 在 0K 的饱和磁化强度用每个原子的玻尔磁子表示为:

$$\mu_s = n \zeta_0 \quad (1.3)$$

式中 ζ_0 是在 0K 时的相对饱和磁化强度, 对强巡游电子铁磁体 (Ni, Co), $\zeta_0 = 1$, 对较弱的巡游电子铁磁体 (Fe), $\zeta_0 < 1$ 。

(2) 在居里温度 T_c 以下, 自发磁化强度与温度 T 的关系由 Stoner 方程表示:

$$\frac{1}{2} n(1 \pm \zeta) = \int_0^\infty N(E) dE \left[\exp \left\{ \left(E - \mu \mp \frac{1}{2} n I \zeta \right) / kT \right\} + 1 \right]^{-1} \quad (1.4)$$

式中 $N(E)$ 为态密度, μ 是化学势。式 (1.4) 在消去 μ 之后可以对 $\zeta(T)$ 作出数值解或解析解。Stoner (1938), Wohlfarth (1951) 和 Shimizu 等 (1965) 分别对不同的 $N(E)$ 曲线得出了方程式 (1.4) 的解。计算发现, $\zeta(T)$ 曲线对 $N(E)$ 很不敏感, 很相似于铁磁过渡金属已得到的曲线。但是, 在细节上还有显著的并且是严重的差别 (见 1.2.1 和 1.2.2 节)。现将可能产生这些差别的原因归纳如下 (Shimizu (1977) 的文章中还有更详细的讨论): (i) 分子场 E_m 与磁化强度 ζ 的函数关系比式 (1.1) 更复杂, 实际上

$$E_m = -\frac{1}{4} n^2 I \zeta^2 \left(1 + \frac{1}{2} A \zeta^2 + \frac{1}{4} B \zeta^4 + \dots \right) \quad (1.5)$$

系数 A 首先由 Humt (1953) 引入, 后来由 Wohlfarth (1953) 和 Bradbury 及 Edwards (1969) 对镍作了理论上的计算, A 的值具有 0.1 的量级。但是, Shimizu (1977) 提出, 要想使对铁和钴所观察到的 $\zeta(T)$ 曲线一致, 要求 B 值非常大。对他这种数值反常的论点仍有待讨论。

(ii) 这里所用的 Stoner 模型没有包含自旋波激发的作用, 而自旋波激发是巡游电子模型的一种自然结果 (见 1.1.5 节)。这些激发作用在有限的温度上会使磁化强度降低, 但是正如 1.2.1 和 1.2.2 节中讨论的那样, 现在还不可能对铁、钴和镍中自旋波激发与 Stoner 激发的相对重要性作出估价。

(3) 居里温度 T_c 由下式给定:

$$I \int_0^\infty N(E) \left| \frac{\partial f(T_c)}{\partial E} \right| dE = 1 \quad (1.6)$$

式中 f 是按式 (1.4) 给出的费米函数, 但 $\zeta = 0$ 。下面谈一下式 (1.6) 在决定铁、钴、镍的居里温度方面的有效性 (见表 1.4)。虽然还不能完全肯定但似乎可以说, 铁磁性过渡金属的居里温度 T_c 主要由自旋波激发而不是主要由式 (1.6) 决定。与此相反, Wohlfarth (1977) 曾提出弱巡游铁磁体的居里温度可以由式 (1.6) 用其低温形式较确切地表达。

(4) 在 $T > T_c$ 时, 顺磁磁化率 χ 由下式决定:

$$\chi^{-1} = \left[2 \mu_B^2 \int_0^\infty N(E) \left| \frac{\partial f}{\partial E} \right| dE \right]^{-1} - \frac{I}{2 \mu_B^2} \quad (1.7)$$

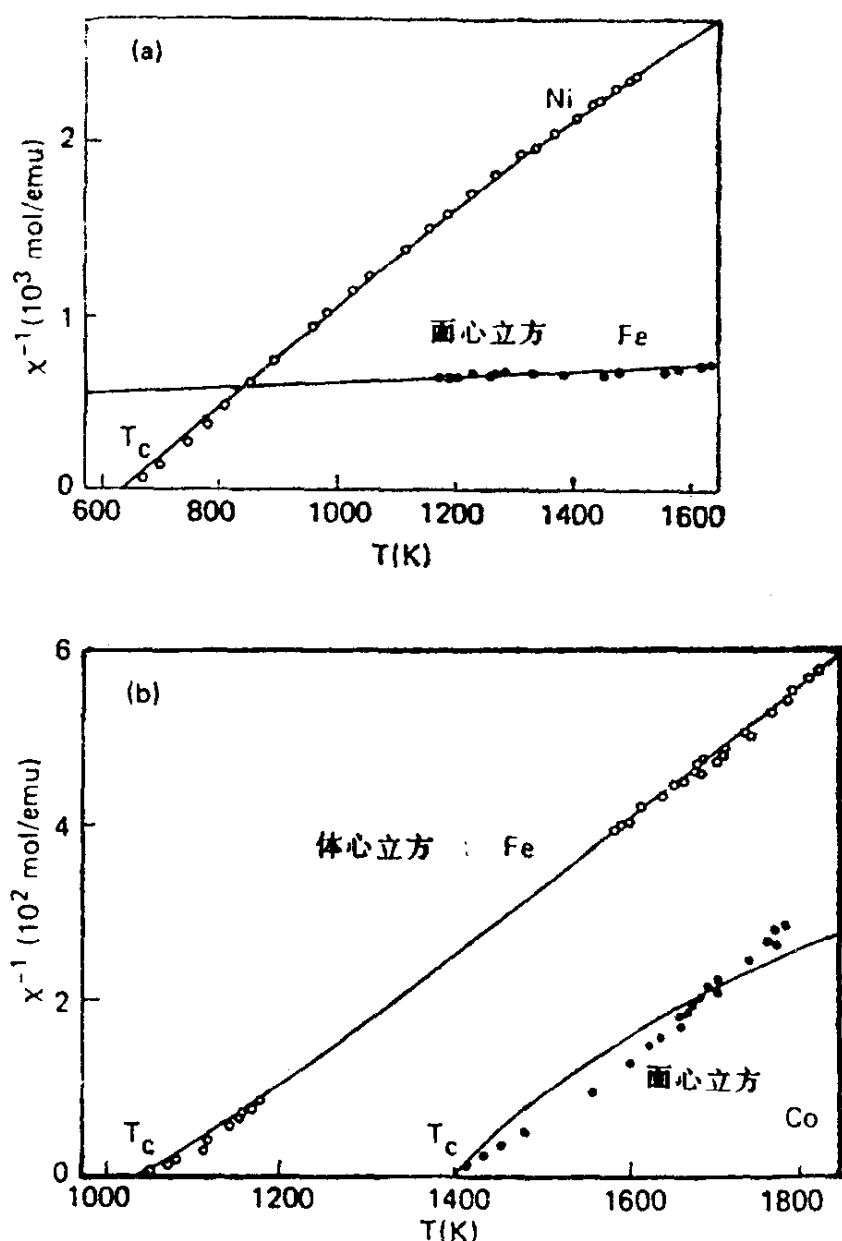


图 1.7 (a) 镍及 fcc 铁; (b) bcc 铁及 fcc 钴的顺磁磁化率 (Shimizu 1977)

图中圆点和圆圈是测量值。进一步讨论见 1.2.4 节