

多层伊辛膜的磁学性质

周云松 陈金昌

(首都师范大学物理系, 北京 100037)

林多梁

(纽约州立布法罗大学物理系, 布法罗 14260, 美国)

(2000 年 1 月 26 日收到, 2000 年 6 月 23 日收到修改稿)

用变分累积展开(VCE)方法的一阶近似计算了包括最近邻和次近邻作用的多层伊辛膜的磁学性质, 导出了自发磁化强度、矫顽力、居里点、奈尔点、顺磁磁化率及分子场系数与层数的关系表达式, 并做了数值计算和讨论.

关键词: 多层膜, 伊辛模型, 磁化

PACC: 7570, 7510H

1 引 言

单层磁性薄膜的磁学性质可以借助多层伊辛膜来描述. 了解单层磁性膜的磁性对认识磁性多层膜也是很有帮助的. 但是伊辛模型只有在二维情况下有严格解, 三维情况的求解是困难的. 而多层伊辛膜(又称 $2+L$ 维伊辛模型, L 代表层数)比二维情况复杂, 若与三维情况相比, 对称性又降低了, 所以它的求解更加困难. 但是不论如何, 磁性多层膜材料制作技术的不断发展及其显示出的应用前景, 越来越吸引着人们的研究兴趣. 以伊辛模型为基础的研究仍是理论研究的一个重要方面, 与实际材料较接近的层状模型自然会引起人们更大的兴趣. 关于多层伊辛膜的工作大多是探讨临界点及相变的性质^[1-10]. 但是磁性薄膜及磁性多层膜在临界温度以下的磁学性质也是人们非常关心的, 所以随着研究的深入, 多层伊辛膜在临界点之下的磁化强度也被涉及到了^[11-14].

我们希望将温度范围进一步扩大, 在从低温到高温的连续区域内对多层伊辛膜的磁学性质进行系统研究, 而且包括铁磁与反铁磁耦合两种情况. 这两种情况分别对应磁性薄膜及多层膜的两个主要应用性质: 磁光和磁电阻. 当然, 磁性多层膜需要的模型比多层伊辛膜要复杂. 但是对多层伊辛膜的成功描述可以作为进一步研究的基础.

变分累积展开(简称 VCE)方法为本工作提供

了有利手段. 近年来发展起来的 VCE 方法在处理层状模型时显示了优势^[4-8]. 但是到目前为止, VCE 方法也是主要用于对临界点附近性质的研究. 本文则用 VCE 方法对多层伊辛膜自发磁化、磁滞回线、矫顽力、居里点、奈尔点、磁化率及分子场系数等性质进行了研究. 模型结构包括 $fcc(100)$, $fcc(111)$, $bcc(100)$, $bcc(111)$, $sc(100)$ 和 $sc(111)$ 膜面.

从定性讨论的目的看, VCE 方法的一阶近似已足够了, 因此本文不做高阶计算.

2 计算方法

系统哈密顿量为

$$H = -J_1 \sum_{(ij)} S_i S_j - J_2 \sum_{(lm)} S_l S_m - H_c \mu_0 \sum_i S_i, \quad (1)$$

(1) 式等号右边第一项对最近邻求和, 第二项对次近邻求和; J_1 , J_2 是相应的交换作用能. H_c 是外加磁场; μ_0 是一个格点的磁矩. (1) 式可改写为

$$S = -\frac{H}{k_B T} = \beta \left(J_1 \sum_{(ij)} S_i S_j + J_2 \sum_{(lm)} S_l S_m + h \sum_i S_i \right), \quad (2)$$

其中 k_B 是玻耳兹曼常量, T 是温度, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $h = H_c \mu_0$.

选试探函数

$$S_0 = \xi \sum_i S_i \quad \text{顺磁及铁磁耦合;}$$

$$S_0 = \left| \xi \sum_j^a S_i \right| + \left| \xi \sum_j^b S_j \right| \quad \text{反铁磁耦合,}$$

ξ 是变分参数; \sum_i^a, \sum_j^b 分别代表在两个反向磁化的子晶格中求和. 正则系综配分函数可表示为

$$Z = \text{Tr}(e^S) = \text{Tr}(e^{S-S_0}e^{S_0}) = Z_0 \langle S - S_0 \rangle_c,$$

其中 $Z_0 = \text{Tr}(e^{S_0}); \dots \rangle_c = Z_0^{-1} \text{Tr}(\dots e^{S_0})$. 所以系统自由能为

$$W = -\ln Z = W_0 - \ln \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (S - S_0)^n \right]_c$$

$$= W_0 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (S - S_0)^n \rangle_c,$$

$W_0 = -\ln Z_0; \dots \rangle_c$ 表示累积平均值. 上式包含一个无穷求和, 在一定的近似程度下可以做截断. 如果求和到 m , 叫做 m 阶近似, 即

$$W \doteq W_m = W_0 - \sum_{n=1}^m \frac{1}{n!} (S - S_0)^n \rangle_c,$$

表 1 对不同结构及不同生长方向的 L 层膜, p_1, p_2 的取值公式

| | sc(100) | sc(111) | fcc(100) | fcc(111) | bcc(100) | Bcc(111) |
|-------|---------|---------|----------|----------|-------------------------------|----------------------------------|
| p_1 | $3-1/L$ | $3-3/L$ | $6-4/L$ | $6-3/L$ | $4-4/L$ | $3-3/L, L < 4$ $4-6/L, L > 3$ |
| p_2 | $6-4/L$ | $6-3/L$ | $3-1/L$ | $3-3/L$ | $3-2/L, L \neq 1$ $2, L=1$ | $3-6/L, L \neq 1$ $0, L=1$ |

点的磁化强度为

$$m = \frac{-1}{N} k_B T \frac{\partial}{\partial H_c} W = \mu_0 \tanh \xi. \quad (5)$$

利用(4)和(5)两式可以计算自发磁化. 当外场 H_c 不为零时, 可得到正负两个值, 绝对值不相等. 分别表示与外场同向和反向的磁化. 当外场逐渐增大到某一值时, (5)式将只给出一个值. 这个临界的外场就是矫顽力. 矫顽力的解析表达式可以由(4)式求出: 由(4)(5)式得到磁化及外场随变分参数 ξ 的变化情况如图 1 所示. 在 ξ_1 到 ξ_2 的范围内显示

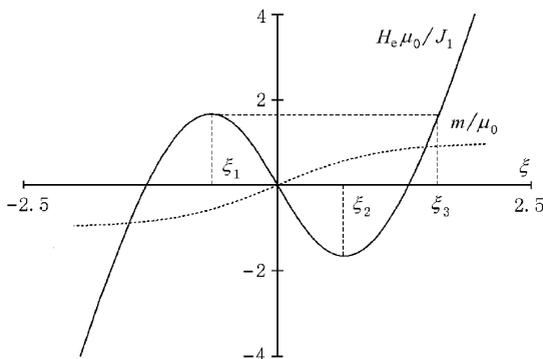


图 1 磁化、外场与变分参数的关系 取 $p_1=6, T k_B / J_1=8$

经具体计算, 得到自由能一阶近似表达式为

$$W = -N \ln(2 \cosh \xi) - \beta (\chi s J_1 \sigma_1 + J_2 \sigma_2) \tanh^2 \xi + [N \xi - (N_a + s N_b) \beta h] \tanh \xi, \quad (3)$$

其中 $s=1$ 表示顺磁及铁磁耦合; $s=-1$ 反铁磁耦合; N 是总格点数; N_a, N_b 分别是两个子晶格的格点数; σ_1 是最近邻对数; σ_2 是次近邻对数. 参数 ξ 满足 $\frac{\partial}{\partial \xi} W = 0$ 即

$$2(\chi s J_1 p_1 + J_2 p_2) \tanh \xi = \xi - (n_a + s n_b) \beta h, \quad (4)$$

其中 $p_1 = \sigma_1 / N, p_2 = \sigma_2 / N, m_a = N_a / N, m_b = N_b / N$.

以上结果不受维数限制. 当考虑 $2+L$ 维模型时, p_1, p_2 按表 1 给定公式取值.

由(3)和(4)式可确定自由能.

对于铁磁耦合, 取 $s=1$, 可以得到平均一个格

$dm/dH_c < 0$, 这对于铁磁相是不可能的, 这一段也是变分原理不允许的. 所以 $m(\xi)$ 在增大过程中会从 $m(\xi_1)$ 跃变到 $m(\xi_3)$. ξ_3 是 H_c 从 $H_c(\xi_1)$ 继续连续增大时, 变分参数的起始值. 所以 $H_c(\xi_1)$ 和 $H_c(\xi_2)$ 的绝对值就是矫顽力 H_c .

利用(4)式, 令 $\partial H_c / \partial \xi = 0$ 得到

$$\xi_c \equiv \xi_2 = -\xi_1 = \frac{1}{2} \ln [4a\beta - 1 + 2\sqrt{2a\beta(2a\beta - 1)}],$$

$$a = J_1 p_1 + J_2 p_2,$$

故

$$H_c = H_c(\xi_c) = \frac{1}{\mu_0 \beta} (\xi_c - 2a\beta \tanh \xi_c). \quad (6)$$

这就是矫顽力表达式.

利用(4)和(5)式可得到临界点之上的磁化率为

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H_c} = \frac{\mu_0^2 / k_B}{T - 2a / k_B} \equiv \frac{C}{T - \Delta}, \quad (7)$$

其中

$$C = \mu_0^2 / k_B; \quad \Delta = \chi (J_1 p_1 + J_2 p_2) / k_B. \quad (8)$$

对于反铁磁耦合, 取 $s=-1$. 由(4)式解出奈尔点为

$$T_N = \chi (J_2 p_2 - J_1 p_1) / k_B, \quad (9)$$

$T \geq T_N$ 时, 进入无序相, 应取 $s = 1$. 所以表示磁化率的(7)式仍适用, 只是温度限制在 T_N 之上, 即

$$\chi^a = \frac{C}{T - \Delta} \quad T \geq T_N. \quad (10)$$

将(7)式与分子场理论对比, 可得到分子场系数

$$\lambda = -\chi(J_1 p_1 + J_2 p_2) \mathcal{Y} \mu_0^2 \equiv (\lambda_{ab} + \lambda_{ii}) \mathcal{Y} 2; \\ \lambda_{ab} = -4J_1 p_1 / \mu_0^2; \lambda_{ii} = -4J_2 p_2 / \mu_0^2, \quad (11)$$

λ_{ab} 和 λ_{ii} 分别是不同子晶格和相同子晶格的分子场系数.

3 结果与讨论

3.1 仅考虑最近邻

图2是 L 层 $sc(100)$ 面模型的自发磁化曲线. 值得注意的是, 按照平均场理论的 Bragg-Williams 近似^[15], 可以得到(用本文符号表示)

$$m = \mu_0 \tanh(Z_q J_1 \beta m), \quad (12)$$

其中 Z_q 是配位数. 将二维和三维 sc 晶格的配位数分别代入(12)式后, 得到的 m 分别与图2中的 $L = 1$ 和块体的曲线完全重合. 实际上, 在只考虑最近邻的情况下, 由(4)和(5)式可严格导出(12)式. 这一事实表明, VCE 的一阶近似在 0 到 T_c 的范围内是完全等同于平均场近似的.

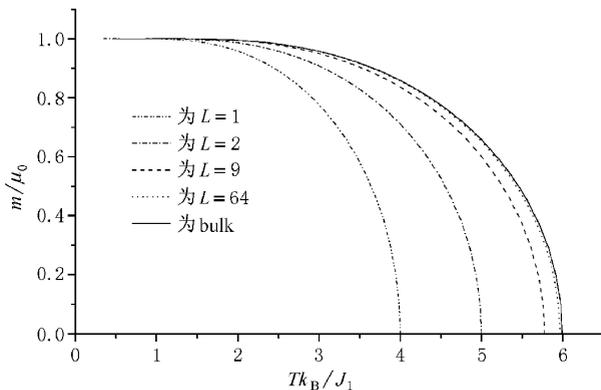


图2 $sc(100)$ 多层膜的自发磁化

图2中各条曲线与横轴的交点代表各个临界温度 $T_c k_B / J_1$, 一层膜的 $T_{c1} k_B / J_1 = 4$, 随着层数的增加 $T_c k_B / J_1$ 也不断增加. 可以看到, 层数越大时, 每增加一层引起的 $T_c k_B / J_1$ 变化越小, $T_c k_B / J_1$ 值最终趋近于 $T_{\infty} k_B / J_1 = 6$. $T_{c1} k_B / J_1$ 与 $T_{\infty} k_B / J_1$ 这两个值正是 Bragg-Williams 近似分别在二维和三维情况下的结果. 我们计算的有限层伊辛膜的 $T_c k_B / J_1$ 介

于这两个值之间.

VCE 方法在确定临界点时, 是基于这样一个假设^[4-8]: 自由能对变分参数的二阶导数在临界点为零. 这样假设其实是认为参数曲线的分叉点就是临界点. 而本文并未使用上述假设, 仅仅使用了变分原理(4)式, 由此计算出的自发磁化所给出的 T_c 与 VCE 方法的一阶近似完全一致^[4-8]. 这从另一个方面说明, 参数曲线的分叉点确实对应临界点.

图3是沿 $fcc(111)$ 面的3层格子在加了外磁场 H_c 时的磁化曲线. a, b, c 和 d 分别表示 H_c 从 0 逐渐增大的情况, 所以 a 表示自发磁化. 在 m 大于 0 的部分表示原自发磁化与外场同向, H_c 的增强使得磁化增强. 显然最终也不会超过 1. m 小于 0 的部分表示原自发磁化与外场反向. 可以看到, 各条曲线都比自发磁化曲线高, H_c 越大上升的越多, 这是由于外场抑制了反向自发磁化. b, c, d 的虚线部分对应自由能极大, 没有物理意义. 在给定(折合)温度 T_1 时, b 曲线与代表 T_1 的虚线有两个交点, 显示磁化有两个可能状态, 一个顺着外场, 一个逆着外场. 如果初始磁化是逆外场的, 加不太大的外场后, 磁化仍应逆外场. 但是当外场较大时, 如 d 曲线所示, 与 T_1 虚线只有一个交点, 是顺外场的状态, 表示强大的外场可使磁化从逆向转成顺向. 那么 c 曲线表示的就是临界状态, 此时的外场就是矫顽力 H_c .

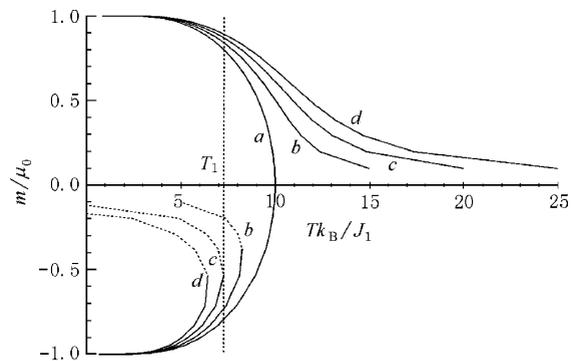


图3 $fcc(111)$ 三层膜的磁化强度随外场的变化. a, b, c 和 d 分别表示外场 $H_c \mu_0 / J_1$ 为 0, 0.5, 1.0, 1.5 的情况, 折合温度 $T_1 = T_k B / J_1 = 7.284$

磁化随外场往复变化的情况如图4所示, 这是对 $fcc(100)$ 多层膜的计算结果. 由于计算时所取的温度 $T k_B / J_1 = 6$ 介于一层膜与二层膜的临界温度之间, 所以一层膜显出顺磁性, 二层膜开始出现磁滞回线. 层数越大磁滞回线越宽, 既矫顽力越大. 矫顽力随层数的变化如图5所示. $fcc(100)$ 线在单层膜

时与 $sc(100)$ 线重合, 当层数增加时, 它与 $fcc(111)$ 趋近. 这是由于单层膜时, $fcc(100)$ 与 $sc(100)$ 是没有区别的, 而当层数较大时, 接近块体, 晶体取向的影响逐步消除. 另一方面, 虽然 $fcc(100)$ 的每一层都可看做正方格子, 但是各层间的距离比 $sc(100)$ 的要小, 所以近邻对数多了很多, 使 H_c 的增加比 $sc(100)$ 的快很多.

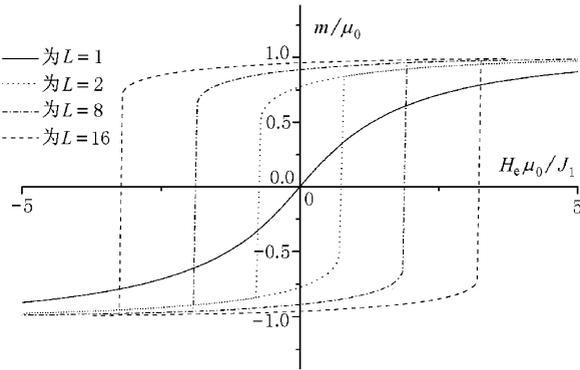


图4 $fcc(100)$ 多层膜的磁滞回线 $Tk_B/J_1 = 6$

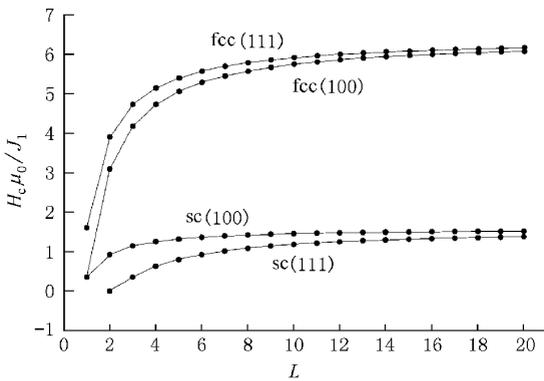


图5 矫顽力随层数的变化 图中连线是为了看得清楚, $Tk_B/J_1 = 3$

3.2 考虑次近邻

图6是反铁磁模型的 T_N, Δ 及分子场系数等参量随层数的变化. 它反映了顺磁磁化率的变化情况. 由于 Δ 变化不太大, 结合(10)式可以断定, 对于不同的层数, 磁化率倒数随温度变化图 ($\chi^{-1}-T$ 图) 将是一束平行的且相距较近的直线, 每条直线的起点就是相应层数所确定的奈尔点. 其实, 这些直线总是平行的, 即使结构及取向都不同, 因为(10)式反映出它们都有相同的斜率 k_B/μ_0^2 . 所以对于实际薄膜材料, 可以通过实验确定 $\chi^{-1}-T$ 图上的斜率,

而确定局域磁矩 μ_0 . 如果实际薄膜材料在 $\chi^{-1}-T$ 图上的斜率随厚度而变, 则与上述结论不符. 这时应当考虑厚度对于局域磁矩的影响. 这种影响当然不是伊辛模型所能描述的, 需要更加微观的理论. 但是可以定性地得到层数与局域磁矩的粗略关系.

结合表1和(8)式, 可以得到一个有趣的现象: 对反铁磁 $sc(100)$ 膜, 若取 $J_2/J_1 = -0.25$ 则 $\Delta = 2J_1[(3 - 1/L) - 0.25(6 - 4/L)]/k_B = 3J_1/k_B$, 与层数无关. 即膜与块体的磁化率是一样的, 只是 T_N 不同. 在 $\chi^{-1}-T$ 图上表示为同一条直线只是起始点 T_N 不同. 以上说法未见实验报道, 仅仅是理论上的一个推测.

以前 VCE 方法主要是用来讨论临界点及其附近的性质. 而本文的图2, 3, 4和5把温度范围扩大到了从临界点到零的温区, 并通过对图2及(12)式的讨论证明了 VCE 一阶近似完全等同于平均场理论. 由于(12)式是可以从(4)和(5)式严格导出的, 所以上述结论是严格的. 但是图6是讨论的临界点及其以上温区中的性质, 在此温区中 VCE 方法的适用性当然也需要证明. 限于篇幅, 本文只给一个定性说明: 从自由能 W 的一般展开式可以看出, 每一项都与 $S - S_0$ 有关. S_0 的表达式说明它实际上是一个序参量, 无外场时, 无序相中 S_0 近于零. 同时, 由(2)式也可看出, S 此时也近于零, 所以 $S - S_0$ 是小量, 高阶修正是收敛的, 计算阶数越高越接近严格值. 所以在临界点之上 VCE 方法理应适用. 同理, 若只保留一阶近似而舍弃高阶项, 与严格解不会相差很大. 即 VCE 一阶近似在临界点之上也是适用的.

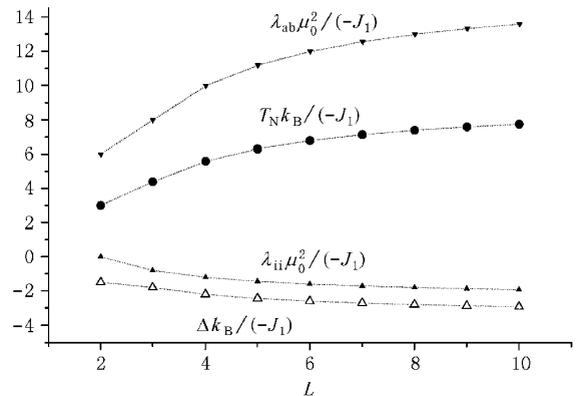


图6 $bcc(111)$ 膜的 T_N, Δ 及分子场系数随层数的变化 $J_2/J_1 = -0.2$

4 结 语

1. 本文用 VCE 方法,从自发磁化的途径得到了临界温度表达式,这与过去文献的结果是一致的.这支持了 VCE 方法中的参数曲线分叉点就是临界点的假设.

2. 得到了层状伊辛模型的自发磁化强度、矫顽力、居里点、奈尔点、顺磁磁化率及分子场系数的表达式,并做了一些讨论.这些表达式可以用于定性

分析实际的磁性薄膜.

3. 虽然对于反铁磁薄膜仅仅讨论了顺磁磁化率,但本文所用理论方法可以用于处理具有应用价值的亚铁磁薄膜.

4. 本文将 VCE 方法用到了整个温区.在临界点之下,严格证明了 VCE 一阶近似等同于平均场结果.在临界点之上,从物理意义上定性说明了 VCE 方法的适用性.因此我们相信,至少是一阶近似,VCE 方法在可以在全温区应用.

- [1] Q. Hong, *Phys. Rev.* **B41**(1990) 9621.
 [2] T. Kaneyoshi, T. Balcerzak, *Physica* **A197**(1993) 667.
 [3] X. Z. Wang, Y. Zhao, *Physica* **A193**(1993) 133.
 [4] D. L. Lin, Hoo Che, Yu Xia, *Phys. Rev.* , **A46** (1992), 1805.
 [5] D. L. Lin, H. Che, W. Lai, Tomas F. George, *Phys. Rev.* , **E49**(1994) 2155.
 [6] D. L. Lin, J. T. Ou, *Chinese J. Phys.* , **32**(1994) 703.
 [7] X. F. Ou, J. T. Ou, D. L. Lin, *Moder. Phys. Lett.* , **B10** (1996) 531.
 [8] J. T. Ou, W. Lai, D. L. Lin, F. L. Lee, *J. Phys. :Condens. Mat.* **9**(1997) 3687.
 [9] J. H. Zhou, C. Z. Yang, *Solid State Commun.* **101**(1997), 639.
 [10] T. Kaneyoshi, *Physica* , **A272**(1999) 545.
 [11] X. Z. Wang, Z. Y. Jiao, J. J. Wang, *J. Phys. :Condens Mat.* , **4**(1992) 3651.
 [12] T. Kaneyoshi, M. Jascur, *Physica* **A195**(1993) 474.
 [13] E. F. Sarmiento, J. C. Cressoni, R. J. V. dos Santos, *J. Appl. Phys.* , **75**(1994) 5280.
 [14] T. Balcerzak, T. Kaneyoshi, *Physica* **A206**(1994) 176.
 [15] W. L. Bragg, E. J. Williams, *Proc. Roy. Soc.* , **A145**(1934) 699; **A151**(1935) 540.

MAGNETIC BEHAVIOUR OF ISING MULTILAYERS

ZHOU YUN-SONG CHEN JIN-CHANG

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100037, China)

LIN DUO-LIANG

(Department of Physics, State University of New York at Buffalo, Buffalo 14260, USA)

(Received 26 January 2000; revised manuscript received 32 June 2000)

ABSTRACT

The magnetic behavior of Ising multilayer system including nearest neighbor and next nearest neighbor interactions is investigated by use of variational cumulant expansion (VCE) method. The formulae for spontaneous magnetization, coercivity, Curie point, Neel point, susceptibility and molecular field parameters responding to the number of layers are deduced and discussed numerically. It is exactly demonstrated that, in 2-dimensional and 3-dimensional systems, the spontaneous magnetization calculated by first order of the VCE is the same as the results of mean field theory. This means that the first order of VCE is valid in low temperature. The validity of VCE in high temperature (above the critical point) is explained by the physical meaning of VCE method.

Keywords : multilayer, Ising, magnetization

PACC : 7570, 7510H