

混合 Heisenberg 自旋体系动态相变的滞后标度^{*}

邵元智 蓝 图 林光明

(中山大学物理系,凝聚态物理研究所,广州 510275)

(2000 年 8 月 1 日收到)

采用 Monte Carlo 方法对离散混合经典 Heisenberg 自旋体系在周期性外场驱动下动态相变行为进行了模拟计算. 在典型 Heisenberg 自旋体系的哈密顿量基础上,引入表征非晶相的随机各向异性能项(比例为 X)和表征晶体相的单轴各向异性能项(比例为 $1 - X$),考察了该混合自旋体系磁滞回线面积 A_{area} 随 X 和单轴各向异性常数 A 及随机各向异性常数 D 的变化规律,并确定了该类自旋体系动态相变新的滞后标度关系 $A_{\text{area}} \sim A^{\delta} D^{\eta} X^{\sigma}$. 主要计算结论:1)在某个 X_{min} 值,磁滞回线面积取得极小值;2)上述滞后标度指数 δ, η, σ 为常数,其中 $\delta + \eta = 0.9$,与二类纯自旋体系的相应值相同;3) X_{min} 随 $\log(A/D)$ 值变化,有很好的 S 型关系. 混合 Heisenberg 自旋体系的动态相变理论模型对于目前得到广泛重视的非晶/纳米晶双相体系磁性材料应用研究有一定的理论指导意义.

关键词:海森堡模型, Monte Carlo 模拟, 磁滞标度, 非晶/纳米晶

PACC: 7510J, 7115Q, 6140, 6146

1 引 言

自 20 世纪 90 年代以来,针对强各向异性二维非晶/纳米晶磁性薄膜应用而提出的外磁场驱动下 Ising 单自旋(single spin)系统的非平衡动态相变的滞后标度及相关动态顺磁铁磁转变的对称性破缺的理论研究得到国内外物理界广泛重视^[1-5],目前已比较清楚的是 Ising 自旋系统的相变滞后对外场频率 ω , 振幅 h_0 及体系约化温度 t 的响应均存在一定的普适标度关系 $\omega^{\alpha} h_0^{\beta} t^{\gamma}$, 并且在一定的临界值(ω_c, h_{0c} 及 t_c)下,动态的铁磁有序/顺磁无序转变引起体系对称性破缺的突变. 近期开展的针对具有更为广泛意义的各向同性及引入可变中等各向异性三维 Heisenberg 团聚(cluster spins)自旋体系的相变滞后标度研究^[6-8],表明存在如下的滞后标度关系 $\omega^{\alpha'} h_0^{\beta'} (1-t)^{\gamma'}$, 其中普适指数 α', β', γ' 不同于 Ising 系统的相应指数 α, β, γ , 此外,在纳米尺度范围,团聚自旋系统的各向异性能 E 与团聚尺寸 d 具有幂指数关系 $E \sim d^n$, 但 n 绝非由简单统计物理导出的普适常数^[9,10].

区别于上述的单一纯自旋体系, Fisch^[11-13]在各

向同性 Heisenberg 自旋体系中引入比例为 X 的部分随机各向异性自旋点阵,考察稀释自旋点阵的引入对介于铁磁/顺磁相之间准长程有序相(QLRO)存在及稳定性问题. 由于未引入驱动外场,严格地讲 Fisch 的工作属于静态相变范畴,考察的自旋点阵由表征非晶比例为 X 的随机各向异性自旋和表征晶体比例为 $(1 - X)$ 的单轴各向异性自旋二部分组成. 而且由初期 $X \ll 1$ 区域和筒立方 6 个 {100} 方向自旋取向的稀释处理拓展到最近的整个 $0 < X < 1$ 范围和 12 个 {110} 自旋取向(O12 体系),因此称得上解决真正的纳米晶相/非晶相双相混合静态相变问题. 特别是在精确界定 QLRO 在相图上存在的稳定区域具有十分重要的意义.

上述二个方向的研究成果对于相变理论、磁学理论都带来了较深远的影响,遗憾的是尚未见有关稀释混合自旋点阵的动态相变行为的研究工作报告. 针对我们目前进行的大块状非晶/纳米晶双相磁性材料的动态磁性研究,将上述二个相关方向有机结合,本文报道了我们近期最新的一些模拟计算结果,这些模拟结果部分已得到实验的证实(实验结果另文发表).

* 广东省自然科学基金(批准号 990213)资助的课题.

2 模型符号及模拟参数说明

设定存在一平行于系统易磁化轴 z 轴方向的周期性驱动外磁场 $H = h_0 \sin \omega t$, 考察自旋阵点与最近邻、次近邻自旋阵点之间的交换相互作用, 并引入单离子类单轴各向异性及随机各向异性项, 则系统的哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{立方}} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - g\mu \sum_i (\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i) \\ & - A \sum_{i'} \sum_{\alpha=1}^3 (S_{i'}^\alpha)^4 - D \sum_{i'} ((\mathbf{S}_{i'} \cdot \mathbf{n}_{i'})^2 - 1), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{六方}} = & -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - g\mu \sum_i (\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i) \\ & - A \sum_{i'} (S_{i'}^z)^2 - D \sum_{i'} ((\mathbf{S}_{i'} \cdot \mathbf{n}_{i'})^2 - 1), \end{aligned} \quad (2)$$

其中

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = a S_i^x S_j^x + b S_i^y S_j^y + c S_i^z S_j^z. \quad (3)$$

系统的哈密顿量由 4 项组成. 第一项为自旋交换作用能项; 第二项为驱动外场与自旋作用能项; 第三项为单轴各向异性能项; 第四项为随机各向异性能项. 立方与六立点阵的差别仅表现在第三项单离子各向异性的组成上. 符号 S_i, S_j 分别代表阵点 i, j 的自旋, $S_i^\alpha (\alpha = 1, 2, 3)$ 是自旋在 x, y, z 轴方向的投影, g 为兰德因子, μ 为磁矩, 交换常数 J 取值为 J_{NN} 和 J_{NNN} , 分别代表阵点与最近邻 (NN) 间和次近邻 (NNN) 间的相互作用强度, 取决于 J_{NN} 还是 J_{NNN} 被选取, $\sum_{\langle i,j \rangle} (\)$ 分别代表最近邻 (NN) 间求和及次近邻 (NNN) 间求和. 自旋交换各向异性常数 a, b, c 取值介于 0—1 之间. 当 $a = b = c = 1$ (1)(2) 式为典型的 Heisenberg 模型; 当 $a = b = 0, c = 1$, 则为典型的 Ising 模型; 当 $a = b = 1, c = 0$, 则为平面 $X-Y$ 模型. 在我们的模拟计算中, 设定 $a = b = c = 1$, A 为单轴各向异性常数, D 为随机各向异性常数. 需要说明的是表征晶体特征的第三项 (单轴各向异性能项) 由浓度为 $1-X$ 的 i' 阵点组成, 而表征非晶特征的第四项 (随机各向异性能项) 由浓度为 X 的 i'' 阵点组成, 整个模拟点阵 i 由 i' 和 i'' 构成, $\mathbf{n}_{i'}$ 是随机方向单位矢量, 在每一阵点上取向各异, 在模拟中我们采用如下关系式来初步计算 J_{NN} 值^[14]:

$$\frac{kT_c}{J_{NN}} = \frac{5}{96} (R-1) [11S(S+1) - 1], \quad (4)$$

式中 R 为最近邻数, J_{NNN} 随阵点间距离呈指数下降^[15], 通常取值在 $0.1-0.25J_{NN}$ ^[16], 本文中选取 $J_{NNN} = 0.2J_{NN}$, J 参数的选取及其合理性证明可参见文献 [17]. 采取周期性边界条件以消除边界效应对模拟计算结果的影响. 模拟点阵为 3 维, 大小为 N^3 , 在本文中 $N = 60$. 依次重复对整个点阵的每个阵点扫描, 扫描次数用 Monte Carlo Step (MCS) 来表示. 相关宏观磁性参量的平均值为独立 10 次模拟之后的统计平均, 其中每次独立模拟扫描次数达到 10000MCS, 以确保达到平衡.

3 模拟计算结果

3.1 模拟参数 X, D 和 A 对磁滞回线面积的影响

模拟参数 $X, 1-X$ 分别表明了二类各向异性阵点的份额大小, 而参数 D, A 则表明了这两类点阵的各向异性强弱, 它们取值的变化将对所考察的自旋体系的磁滞后 (磁滞回线面积) 带来明显的变化.

图 1 给出不同 A, D 值下的磁滞回线面积 A_{area} 的 X 变化曲线. 由图可见, 当 $A = D = 0$ 时, $A_{\text{area}} = 0$, 这与完全各向同性的 Heisenberg 自旋体系的情形相符. 随 A, D 值的增加, A_{area} 明显增加.

值得注意的是在一定 X 值时, A_{area} 出现极小值, 表明此种非晶/晶相双相混合组态对应的磁滞后损耗最小. 在 A, D 相等并维持相同比例增加时, A_{area} 出现极小值的位置 (定义为 X_{min}) 保持在 0.4 不变. 在 $A \neq D$ 时, 出现二种情况. $A > D$ 时, 随 A/D 比值增加, $X_{\text{min}} \rightarrow 1$, 而 $A_{\text{area}} - X$ 呈单调下降趋势; 相反, $A < D$ 时, 随 A/D 比值减小, $X_{\text{min}} \rightarrow 0$, $A_{\text{area}} - X$ 呈单调增加趋势.

3.2 磁滞后损耗标度

为了与以往的发表结果相比较, 同时考虑到图 1(a) 展示 $A = D$ 时, 无论 A, D 怎样变化, X_{min} 保持 0.4 不变的有趣结果, 对磁滞后回线面积 A_{area} 对参量 A, D 和 X 按如下关系式作标度处理

$$A_{\text{area}} - A^2 D^{\eta} X^{\sigma}, \quad (5)$$

其中 X 是采取在 X_{min} 两端分别标度, 标度变换处理后结果见表 1.

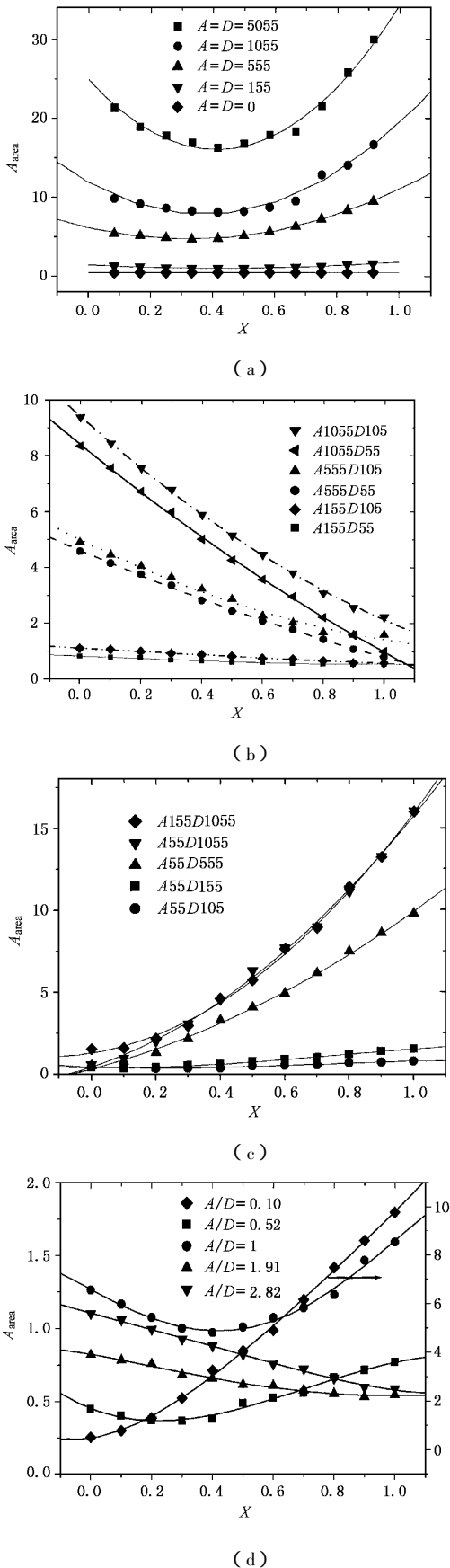


图 1 不同 A/D 值下的 $A_{\text{area}} - X$ 曲线

表 1 磁滞后标度指数

点阵类型/参考文献	δ	η	σ	标度关系式
纯单轴各向异性点阵 $X = 0$	0.90 ± 0.05	0	0	$A_{\text{area}} - A^\delta$
纯单轴各向异性点阵 $X = 1$ (本文结果)	0.90 ± 0.1			
纯随机各向异性点阵 $X = 1$ (本文结果)	0	0.88 ± 0.1	0	$A_{\text{area}} - D^\eta$
稀释混合点阵 $0 < X < 1.0$ (本文结果)	0.71 ± 0.04	0.20 ± 0.04	-0.25 ± 0.02	$A_{\text{area}} - A^\delta D^\eta X^\sigma$
	0.23 ± 0.04	0.70 ± 0.04	0.30 ± 0.03	

由表 1 可见, 两类纯点阵 ($X = 0$ 或 $X = 1$) 的滞后标度指数 δ 和 η 都极为相近, 约为 0.9, 而稀释混合点阵的标度指数之和为 $\delta + \eta \approx 0.9$.

3.3 X_{min} 与 A/D 的关系

前面结果表明 A_{area} 出现最小值时对应的 X 值, 也即 X_{min} 随 A/D 比值变化分别出现 $X_{\text{min}} \rightarrow 0$ 和 $X_{\text{min}} \rightarrow 1$ 的两种极端情形. 对 X_{min} 与 $\log(A/D)$ 作曲线拟合得到图 2, 显然 X_{min} 与 $\log(A/D)$ 符合很好的“sigmoidal”型变化趋势.

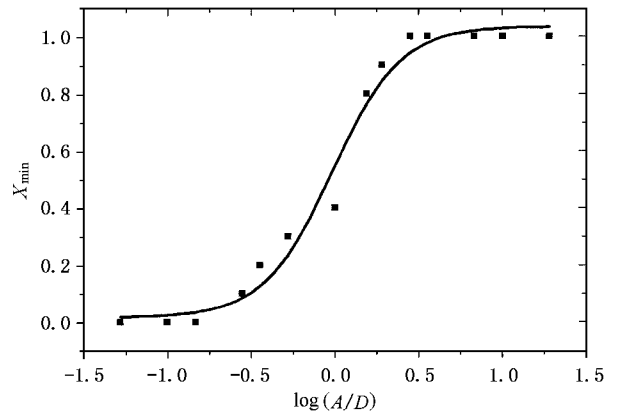


图 2 X_{min} 与 $\log(A/D)$ 的变化趋势

3.4 磁滞回线形状

图 3 给出两类各向异性纯点阵及中间混合状态的磁滞回线形状. 对于 $X = 0$ 纯单轴各向异性点阵, 回线接近矩形, 具有较大的矩形比; 而 $X = 1$ 纯随机各向异性点阵回线为典型纺锤形, 矩形比较小, 介于二者之间的混合点阵磁滞回线, 形状居于二者之间, 但回线面积小于二者.

4 讨 论

Herzer^[9,40]采用有效磁各向异性理论,通过简单的统计力学推导,处理了非晶软磁材料发生纳米晶化后磁特性变化,但该理论主要反映了纳米晶化作用,而未计入软磁合金中剩余非晶相的作用.其后纪松等^[18]采用类似的统计力学方法提出了非晶/纳米晶双相软磁合金的双相无规磁各向异性模型.该模型表明在一定非晶/纳米晶比例时,双相体系的软磁性能达到最佳(磁滞回线面积最小).对于硬磁类非晶/纳米晶双相体系,类似上述软磁的理论处理尚未见报道. Inoue^[19]曾指出在非晶硬磁材料中随着晶化程度的加深,材料的硬磁性能呈显著单调下降.

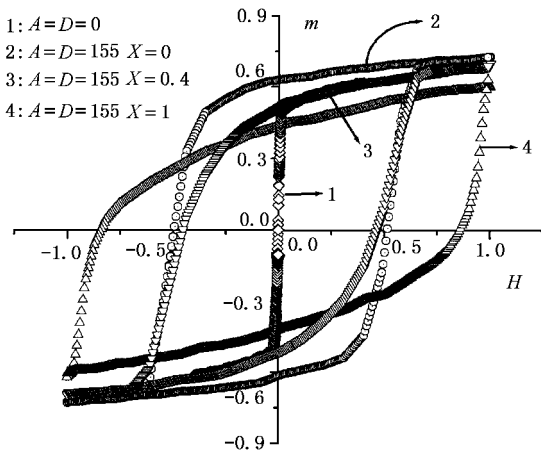


图3 不同条件下的典型磁滞回线形状

本文理论模拟计算以及在 Nd-Fe-Al 大块状非晶/纳米晶材料中的测量结果都表明磁性能不是随晶化程度加深单调下降,而是在一定非晶/纳米晶比例下具有最小值.图4是实验测量结果(有关材料制备,实验测量过程将另文报道).图中结果表明当纳米晶相体积百分比约为40%时磁滞回线面积达到最小值,这与本文的理论计算得到的约在纳米晶相体积百分比为60%时获得最小值的结果有一定差异,但是实验曲线的整体走势与理论计算结果基本一致,最为重要的是证明了体系在一定的非晶/纳米晶相比例下最小磁滞损耗的存在.产生上述实验值与理论值的差异,可能是因为在实验中对材料两相体积分数的标定时存在一定的误差.

由考察体系的哈密顿量组成(1)式可见,对各向同性 Heisenberg 系统磁滞后(或矫顽力)的直接贡献是引入二类各向异性.从矫顽力的各向异性机制不

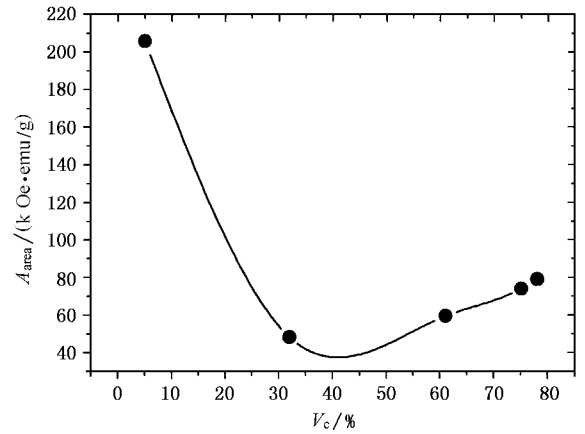


图4 不同纳米晶体积 V_c 下在大块状 NdFeAl 合金的磁滞回线面积变化

难理解,两类各向异性点阵在一定浓度比例时出现最小值.图1(a)图3清楚表明,当 $A = D = 0$ 时,系统无磁滞后,在 $A \neq 0, D \neq 0$ 的二类各向异性纯点阵,伴随 X 的增加,单轴各向异性和随机各向异性分别呈单调下降和上升趋势.混合点阵综合了二种各向异性纯点阵的作用,最终导致在中等点阵浓度比例时出现磁滞后最小值.

应当补充指出的是3.2节中的磁滞后标度分析,仅是针对二类各向异性等强度($A = D$)时进行的.对于非等强度情形,一种各向异性将占优,而导致 X_{\min} 分别出现趋向0,1两种情形.

5 结 论

1. 引入随机各向异性项和单轴各向异性项,用 Monte Carlo 方法基于离散经典混合海森堡模型对非晶/纳米晶软磁材料体系的磁滞回线面积随随机各向异性组分比例 X 的变化规律进行模拟计算.得到了磁滞回线面积 A_{area} 将在某个 X 值出现极小值的模拟结果.该结果与我们在大块状 NdFeAl 非晶/纳米晶双相材料中得到的实测结果能很好地吻合.

2. 磁滞后对单轴各向异性常数 A 、随机各向异性常数 D 和随机各向异性组分比例 X 存在标度关系 $A_{\text{area}} \sim A^\delta D^\eta X^\sigma$, 且 $\delta + \eta = 0.9$. 稀释混合点阵的标度指数 δ, η 虽与纯单轴各向异性点阵的 δ 及纯随机各向异性点阵的 η 不同,但它们的和与纯点阵的标度指数值是一致的.

3. 磁滞回线面积出现最小值时的 X_{\min} 与 $\log(A/D)$ 之间有很好的“S”形 sigmoidal 关系.

- [1] S. W. Sides , P. A. Rikvold , M. A. Novotny , *Phys. Rev.* , **E57** (1998) 6512 .
- [2] M. Acharyya , B. K. Chakrabarti , *Phys. Rev.* , **B52** (1995) 6550 .
- [3] T. Tome , M. J. de Oliveira , *Phys. Rev.* , **A41** (1990) A251 .
- [4] M. Rao , H. R. Krishnamurthy , R. Pandit , *Phys. Rev.* , **B42** (1990) 856 .
- [5] W. S. Lo , R. A. Pelcovits , *Phys. Rev.* , **A42** (1990) 7471 .
- [6] Y. Z. Shao , *et al.* , *Phys. Stat. Sol(b)* , **214** (1999) R11 .
- [7] C. H. Shek , Y. Z. Shao *et al.* , *Physica* , **A276** (2000) 201 .
- [8] Y. Z. Shao , *et al.* , *Chin Phys. Lett.* , **17** (2000) 367 .
- [9] G. Herzer , *Nanomagnetism* , edited by Hernando , NATO ASI Series E , 247 Kluwer Academic , 1998) , p. 111 .
- [10] G. Herzer , *IEEE Trans. Mag.* , **26** (1990) 1397 .
- [11] R. Fisch , *Phys. Rev.* , **B48** (1993) 15764 .
- [12] R. Fisch , *Phys.* , **B58** (1998) 5684 .
- [13] R. Fisch , *Phys. Rev.* , **B57** (1998-1) 269 .
- [14] G. S. Rushbrooke , P. J. Wood , *Mol. Phys.* , **1** (1958) 257 .
- [15] D. Wagner , *Introduction to the Theory of Magnetism* (Pergamon Press , New York , 1972) , p. 153 .
- [16] J. Mlodzki , F. R. Wuensch and R. R. Galazka , *J. Mag. Mag. Mater.* , **86** (1990) 269 .
- [17] Y. Z. Shao , T. Lan , Z. H. He , *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Sunyatseni* , **39** (2000) 30 (in Chinese) [邵元智、蓝图、何振辉 , *中山大学学报* , **39** (2000) 30] .
- [18] S. Ji , G. B. Yang , R. Wang , *Acta Physica Sinica* , **45** (1996) 2061 (in Chinese) [纪松、杨国斌、王润 , *物理学报* , **45** (1996) 2061] .
- [19] A. Inoue , A. Takeuchi , T. Zhang , *Metallurgical and Materials Transactions* , **29A** (1998) 1779 .

SCALING HYSTERESIS OF DYNAMICAL TRANSITION OF DILUTED HEISENBERG SPIN SYSTEM*

SHAO YUAN-ZHI LAN TU LIN GUANG-MING

(*Institute of Condensed Matter Physics , Department of Physics , Zhongshan University , Guangzhou 510275 , China*)

(Received 1 August 2000)

ABSTRACT

The Monte Carlo method was employed to perform the numerical simulation for classical discrete diluted Heisenberg spin system driven by an oscillating external magnetic field. To form the diluted spin system based on isotropic Heisenberg model , we introduced in the Hamiltonian of a typical Heisenberg model both random anisotropy energy term characterizing amorphous state with a proportion X and uniaxial anisotropy energy term representing crystalline state with a proportion $1-X$. The dynamical transition behavior of the Spin system mentioned above , hysteresis loop scaled with parameter X and random as well as uniaxial anisotropy constant D and A , respectively , was studied in detail. It has been put forward a scaling relationship between hysteresis loop area and parameter X , A and D as below : $A_{\text{area}} - A^\delta D^\eta X^\sigma$. The main conclusions can be summarized below (1) At a specific value X (defined as X_{min}) , the investigated system gains minimal hysteresis which has been proved experimentally in our another investigation. (2) The exponents δ , η and σ of the diluted spin system are universal constants , and the sum of $\delta + \eta$ (~ 0.9) equals the exponent δ , η of single either uniaxial or random anisotropy spin system. (3) The specific value X_{min} versus logarithm of the ratio of A/D shows a peculiar sigmoidal trend.

Keywords : Heisenberg model , Monte Carlo Simulation , scaling hysteresis , amorphous/nano-crystalline

PACC : 7510J , 7115Q , 6140 , 6146

* Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province (Grant No. 990213) , China.