

基于交换耦合模型纳米双相(硬磁/软磁) 自旋体系的磁性*

邵元智[†] 林光明 蓝 图 钟伟荣

(中山大学理工学院物理系, 广州 510275)

(2002 年 1 月 12 日收到, 2002 年 3 月 18 日收到修改稿)

采用 Monte Carlo 方法对由异类自旋组成混合 Heisenberg 自旋体系进行了数值计算, 以模拟和预测基于交换耦合模型纳米双相(硬磁/软磁)磁性体系的磁性. 区别于以往所报道的那些直接针对硬磁 Nd-Fe-B 与软磁纳米 α -Fe 复合磁体的微磁学计算工作, 着眼于符合 Heisenberg 模型的两类完全不同的原子自旋集团(硬磁自旋和软磁自旋)之间的直接交换耦合作用, 模拟计算了由这两类自旋组成的复合自旋体系的内禀矫顽力 H_c 、剩余磁化强度 M_r 、最大磁能级 $(M \times H)_{\max}$ 等宏观磁性参量随软磁自旋集团的尺度和体积百分比、两类自旋集团之间交换耦合常数以及它们在磁晶各向异性和饱和磁矩差异的变化. 计算工作中全部采用约化量, 不针对具体某一种磁性材料, 所得结果具有一定的普适性.

关键词: Heisenberg 模型, Monte Carlo 模拟, 纳米复合磁体, Nd-Fe-B

PACC: 7510J, 7540M, 6146, 7550

1. 引 言

硬磁 Nd-Fe-B 与高饱和磁感应强度的纳米尺度软磁 α -Fe 复合形成纳米双相磁体具有改善的硬磁性能已是一个公认的事实, 无论是实验测量还是基于微磁学理论的计算都表明它存在增强的磁能积^[1-14]. 关于这一复合纳米双相磁体具有提高磁能积的最根本物理实质是纳米尺度下两相之间存在的自旋交换耦合作用^[1,3,6,9,14]. 交换耦合作用通常指相邻晶粒或原子集团间在交界面处不同取向自旋间存在交换相互作用. 交换耦合作用阻止界面两端两相的自旋沿各自的易磁化轴取向. 取决于界面两端两相各向异性差异的大小, 经交换耦合的自旋可能采取从一个易轴方向连续改变到另一个易轴方向. 存在强-强耦合和强-弱耦合两种情形. 前者对应于两相均为强各向异性的硬磁情形; 而后者则对应于强各向异性的硬磁相耦合弱各向异性甚至各向同性软磁相情形. 前述的硬磁 Nd-Fe-B 与纳米尺度的软磁

α -Fe 复合形成纳米双相磁体就属于此类. 交换耦合作用使得高强各向异性的 Nd-Fe-B 晶粒将高磁化强度(磁感应强度)的 α -Fe 的磁矩耦合到自己的易轴方向上来, 以牺牲少量硬磁相的内禀矫顽力的前提下增加剩余磁化强度从而提高整体的磁能积^[9,14]. 由于交换耦合作用的短程性, 因此必须控制软磁 α -Fe 相的尺度和相比例, 以防止硬磁 Nd-Fe-B 对 α -Fe 占优势的交换耦合转变成 Nd-Fe-B 与 α -Fe 的对等协作方式交换耦合模式. 协作方式交换耦合模式将导致硬磁相的内禀矫顽力的显著下降从而降低磁能积^[14]. 有关 Nd-Fe-B 与纳米尺度的软磁 α -Fe 复合形成纳米双相磁体的实验工作^[5-10,12,13]和基于微磁学理论计算结果^[1-4,9,11]已有报道, 在此不再重复. 对该方面工作比较全面的评述总结以及有关交换耦合理论阐述可参阅文献 [9,10,14].

受上述文献的启发, 同时也基于我们在 $O(n)$ 自旋体系方面理论模拟计算的工作基础^[15-20], 我们在自旋交换作用完全各向同性的标准 Heisenberg 自旋体系 $O(n=3)$ 中引入两类各向异性, 强确定性单轴各向异性和弱随机性单轴各向异性, 以代表硬磁

* 广东省自然科学基金(批准号: 990213)资助的课题.

[†] stdpzo@zsu.edu.cn, cr(o), stssyz@zsu.edu.cn(H), 020-84035297(H), 020-84110399(O)

和软磁两种相. 此前标准 Heisenberg 自旋体系中引入的随机单轴各向异性多作为非晶软磁相处理^[21, 22]. 考虑到微细的纳米晶内原子少, 受热扰动影响涨落显著, 晶粒取向具有较大的随机性, 引入的随机单轴各向异性同样适合对纳米晶软磁相的描述. 我们前期的工作中曾考察了引入上述两类各向异性所构成的晶态与非晶态双相磁性体系在非线性外场驱动下的耗散行为及其滞后标度, 并模拟了这一双相体系的宏观磁性参量如饱和和剩余磁化强度、矫顽力等^[20]. 然而这一混合 Heisenberg 自旋体系当时只是针对由同类磁性原子组成的非晶/晶体双相体系的磁性问题的, 也即从非晶基体中生长出不同体积比例的晶体相或晶体相间残留各种体积比例非晶相这样简单双相的磁性问题的. 显然这样简化的自旋体系不适合于描述类似 Nd-Fe-B 与 α -Fe 这样非同类磁性原子构成的双相复杂磁性体系. 因此在新的混合自旋体系点阵架构中必须包含非同类磁性原子集团及其集团尺度大小和体积分数等信息, 严格计算同类及异类自旋之间的交换作用. 特别关注的是异类自旋之间在相界面处的交换耦合若干细节, 这是本文工作的核心与关键, 也是较我们前期工作的重大改进之处. 有别于以往所报道的那些基于微磁学理论并针对 Nd-Fe-B 与 α -Fe 复合双相体系的计算工作^[1-4, 9, 11], 本文着眼于原子自旋间的交换作用, 不局限于通常微磁学处理中的晶粒间相互作用, 这更有助于了解异类自旋之间在相界面处的交换耦合作用的具体细节. 此外, 本文计算工作中全部采用约化量, 不针对某一种具体磁性材料, 所得结果具有一定的普适性.

挖掘稀土永磁 RM 与 α -Fe 纳米复合双相磁体的最大磁潜能具有重要的应用和理论价值. 但限于技术、时间和资金, 大量系统地开展实验研究还有一定的困难. 开发出适用的计算机模拟软件系统, 对于减少实验工作的盲目性、节省资源和缩短研究周期都是有益的.

2. 模型符号及模拟参数说明

2.1. 混合自旋模型的构成及模拟点阵的架构

设定标准 Heisenberg 自旋体系 ($n = 3$) 被一平行于 Z 轴的外磁场 $H = H_0 \sin \omega t$ 驱动, 并引入单离子确定性单轴各向异性(强度为 A , 比例为 $1 - X$)和

单离子随机性单轴各向异性(强度为 D , 比例为 X), 严格考察自旋点阵与其最近邻、次近邻自旋点阵之间的交换相互作用, 则这一由异类自旋组成的混合自旋系统的 Hamiltonian 可以表述为

$$\hat{H}_{\text{立方}} = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} (S_i \cdot S_j) - g\mu \sum_i (H \cdot S_i) - A \sum_{i'} \sum_{\alpha=1}^3 (S_{i'}^{\alpha})^2 - D \sum_{i'} ((S_{i'} \cdot n_{i'})^2 - 1), \quad (1)$$

$$\hat{H}_{\text{六方}} = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} (S_i \cdot S_j) - g\mu \sum_i (H \cdot S_i) - A \sum_{i'} (S_{i'}^Z)^2 - D \sum_{i'} ((S_{i'} \cdot n_{i'})^2 - 1), \quad (2)$$

其中

$$S_i \cdot S_j = a S_i^x S_j^x + b S_i^y S_j^y + c S_i^z S_j^z. \quad (3)$$

系统的 Hamiltonian 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; 第三项为确定单轴各向异性能项; 第四项为随机各向异性能项. 立方与六方点阵的差别仅表现在第三项确定单轴各向异性的组成上. 符号 S_i, S_j 分别代表阵点 i, j 的自旋, S_i^{α} ($\alpha = 1, 2, 3$) 是自旋在 x, y, z 轴方向的投影, g 为兰德因子, μ 为玻尔磁矩. 自旋交换作用常数 J_{ij} 随点阵位置具体相互作用的自旋耦合类别的不同而变化, 共有三种耦合交换作用模式, 也即确定单轴各向异性阵点相互之间、随机各向异性阵点相互之间、确定单轴各向异性阵点与随机各向异性阵点之间. 计入考察阵点与最近邻 (NN) 间和次近邻 (NNN) 间的相互作用 J_{NN} 和 J_{NNN} . 本文模拟计算中一共有六种交换常数 J_{ij} 组合. 取决于 J_{ij} 具体组合, $\sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij}()$ 分别代表最近邻 (NN) 间和及次近邻 (NNN) 间下对三种自旋作用耦合的求和. 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)—(3) 式为典型各向同性的 Heisenberg 模型; 当 $a = b = 0, c = 1$, 则为典型各向异性的 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, 它们取值将直接影响内禀矫顽力 (H 轴参量) 的大小. 而两类阵点自旋取值的大小将对磁化强度 (M 轴参量) 和内禀矫顽力产生影响. 需要说明的是 Hamiltonian 组成中表征硬磁特征的第三项(确定性单轴各向异性能项)由浓度为 $1 - X$ 的 i' 阵点组成; 而表征软磁特征的第四项(随机各向异性能项)由浓度为 X 的 i' 阵点

组成,整个模拟点阵架构 i 由 i' 和 i'' 按给定比例 X 相互穿插构成,它们的交界面为产生交换耦合作用的完全共格界面。 i' 阵点集团尺寸 d (定义 4 个单自旋组成的立方体为 $d=1$) 可变化并按给定大小取正态分布,随 i' 阵点集团比例 X 的增加和尺寸 d 的减小, i'' 阵点被逐渐分割而尺寸减小。 n_i 是随机方向单位矢量,在每一阵点上取向各异,采用如下关系式来初步计算最近邻约化自旋交换常数 J 值^[23]

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

式中 R 为最近邻数, J_{NN} 随阵点间距离呈指数下降^[24], 通常取值在 $0.1 \sim 0.25 J_{NN}^{[25]}$, 本文取 $J_{NN} = 0.2 J_{NN}$ 。 J 参数的选取及其合理性证明可参见文献[17]。计算中采取周期性边界条件以消除边界效应和退磁对模拟计算结果的影响。模拟点阵为 3 维, 总自旋数为 N^3 , 在本文中 $N = 60$ 。依次重复对整个点阵的每个阵点按非保守 Glauber 动力学方案扫描更新, 自旋翻转判据为 Metropolis 准则。扫描时间用 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。本文中所有物理量均作约化处理, 为无量纲数值量, 其中计算环境的约化温度恒定为 $t = 0.7$ 。

2.2. 计算模拟程序的正确性验证

在开始大规模模拟计算之前, 我们曾从两个方面对本模拟计算程序进行正确性及参数设定的合理性验证。首先是一般磁学重要结论的验证。模拟计算了零外场下约化自发磁化强度与约化温度的关系, $M(T)/M(0) = (1 - T/T_c)^\beta$, $\beta = 1/3$, 与临界标度理论结果完全一致^[26]。此外还模拟了约化各向异性常数与约化磁化强度的关系, $K(T)/K(0) = [M(T)/M(0)]^{(p+1)/2}$, 即所谓的 $\mu(p+1)/2$ 关系^[26], 模拟结果与上述关系式很好吻合, 具体的结果曲线可参阅文献[17]。其次是针对硬磁软磁双相复合体系的模拟计算, 在某些参数空间内可以很好地再现以往采用微磁学理论方法处理硬磁 Nd-Fe-B 与纳米软磁 α -Fe 复合体所得到的结果^[1-4, 9, 11, 30, 31]。图 1 显示随软磁点阵体积比例增加, 最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 、剩磁 M_r 增加而矫顽力 H_c 单调下降, 完全符合文献[19]所报道的硬磁 Nd-Fe-B 与纳米软磁 α -Fe 复合体相应磁学参量的变化趋势。

3. 模拟计算结果

本文主要给出我们模拟计算所得到那些不重复以往微磁学处理方法得到的新结果, 特别是关于直接影响交换耦合的因素。图 1 直接证实了在一定磁性参数空间中随小尺寸的软磁点阵体积比例增加, 最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 的确得到增强。但我们进一步的结果表明这种增强的磁能积仅存在于一定的磁性参数空间里。图 2 给出在另一条件下最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 随软磁点阵尺寸的增加而下降。当尺寸 $d > 4$ 后, 衰减的最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 不再变化, 这暗示交换耦合作用的短程性。图 2 的结果同时表明如果磁性参量选择不恰当, 软磁点阵的加入反而导致最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 的下降。事实上能否产生增强的最大磁能积 $(MH)_{\max}$, 交换耦合的强弱和作用范围是关键。如果超出其短程作用范围, 使磁矩取向一致的交换耦合将被瓦解, 最直观的反映如图 3 退磁曲线所显示出的转折、拐点或台阶, 表明原有小尺度下被交换作用耦合成单一磁相特征的退磁曲线在大尺度下已分解成典型无交换耦合作用的磁双相退磁曲线。此外从高低场下出现相应于硬磁点阵和软磁点阵磁化率双峰也同样清楚说明交换耦合作用失效后原有单一磁相特征退磁曲线的分解。图 4 表明加大自旋间交换耦合作用 (即增加 (4) 式中的 J_{NN} 和 J_{NNN}), 退磁曲线的台阶将被削弱, 甚至完全被消除, 交换耦合作用重新得到巩固。这里需要补充说明的是图 4 中 J_{ab1} , J_{ab2} 分别代表作为最近邻和次近邻的硬磁点阵和软磁点阵间的交换耦合作用常数, 即 (4) 式中的 J , 其值越小表明交换耦合作用越强。图 4 的结果还表明交换耦合作用的增强, 不仅削弱退磁曲线的台阶, 也引起内禀矫顽力 H_c 的增加, 但不影响剩磁 M_r 。

交换耦合作用的变化对内禀矫顽力 H_c 的影响参见图 5。由图可见随交换耦合作用的增强内禀矫顽力 H_c 呈现出单调上升的变化趋势。图 5 的结果还从整体上表明软磁点阵尺寸的增加使得内禀矫顽力 H_c 也有所增加, 这与通常内禀矫顽力 H_c 随晶粒尺寸增加而减小的变化趋势不同。图 6 显示的是最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 、剩磁 M_r 和内禀矫顽力 H_c 对软硬磁两相各向异性常数比值 A/D 的依赖关系。随耦合软硬磁两相的各向异性差异增加, 最大磁能积

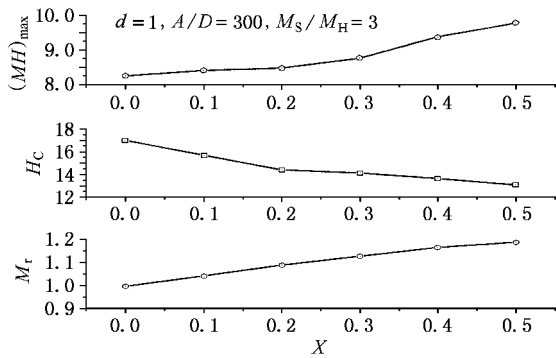


图1 最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 、剩磁 M_r 和内禀矫顽力 H_c 随软磁点阵体积比例 X 变化趋势

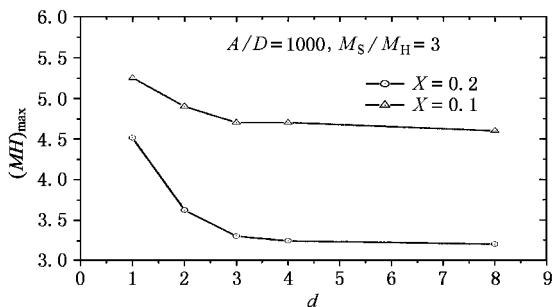


图2 不同软磁点阵尺寸下的最大磁能积 $(MH)_{\max}$

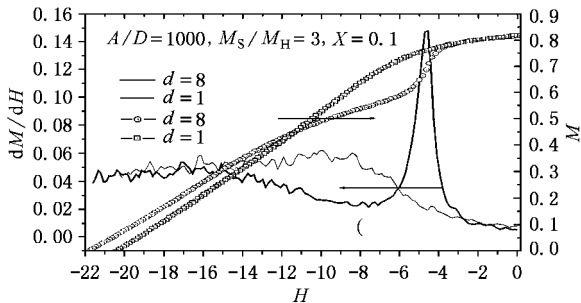


图3 不同软磁点阵尺寸下的退磁曲线和磁化率

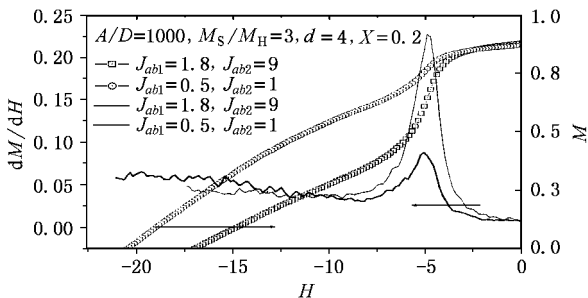


图4 强交换耦合 ($J_{ab1} = 0.5, J_{ab2} = 1$) 及弱交换耦合 ($J_{ab1} = 1.8, J_{ab2} = 9$) 下的退磁曲线和磁化率

(MH)_{max} 和剩磁 M_r 均单调下降而矫顽力 H_c 单调增加. 要获得良好的综合硬磁性能, 选择适当的 A/D 比值就显得十分重要. 图 7 给出最大磁能积 (MH)_{max}、剩磁 M_r 和内禀矫顽力 H_c 随软硬磁两相的饱和磁矩比值 M_S/M_H 的变化. M_S/M_H 比值的增加使得 (MH)_{max}、 M_r 和 H_c 都单调增加. 这一结果表明如果希望通过交换耦合来提高最大磁能积 (MH)_{max}, 应尽量选择高饱和磁矩的软磁材料与硬磁材料复合. 图 8 给出约化温度 $t = 0.7$ 时模拟计算的最大磁能积 (MH)_{max} 在 A/D 和 M_S/M_H 参数空间中的分布. 由图中的结果可见, 在 M_S/M_H 参数的高低两端 A/D 参数对最大磁能积 (MH)_{max} 有完全相反的影响作用. 当软磁硬磁两相的饱和磁矩相差较小时, 提升硬磁软磁两相之间的各向异性差别将会提高双相复合磁体整体的最大磁能积 (MH)_{max}, 而当软磁硬磁两相的饱和磁矩相差已较大时, 继续提升硬磁软磁两相之间的各向异性差别只能导致最大磁能积 (MH)_{max} 的衰减. 要在具有交换耦合作用的硬磁-软磁双相复合体中获得增强的最大磁能积 (MH)_{max}, 正

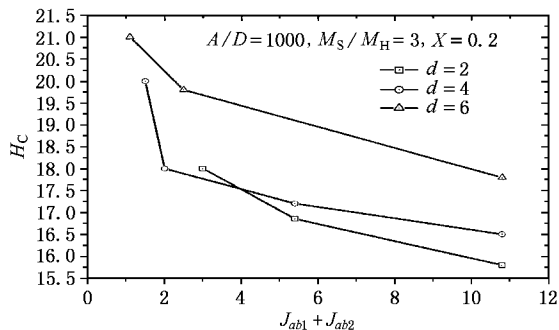


图5 内禀矫顽力 H_c 随约化交换耦合作用常数 J 经(4)式约化处理 变化关系曲线

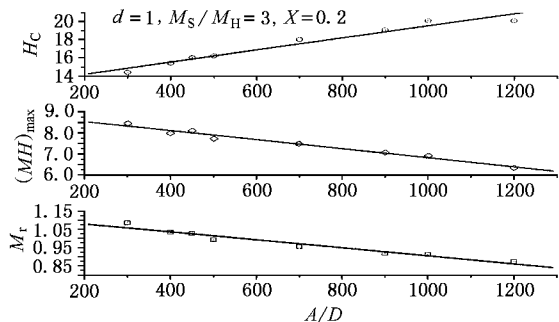


图6 最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 、剩磁 M_r 和内禀矫顽力 H_c 对软硬磁两相各向异性常数比值 A/D 的依赖关系

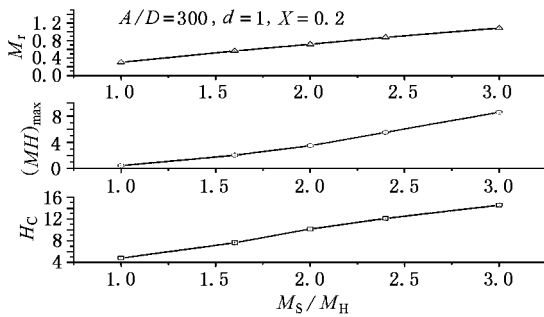


图 7 最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 、剩磁 M_r 和内禀矫顽力 H_c 随软硬磁两相的饱和磁矩比值 M_S/M_H 的变化

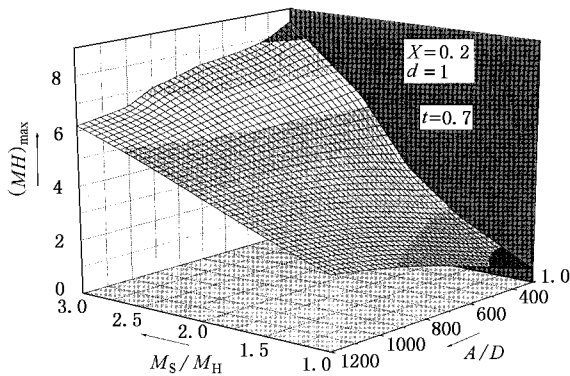


图 8 在 A/D 和 M_S/M_H 参数空间中的最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 分布

确选择 A/D 和 M_S/M_H 参数十分重要。

4. 讨 论

由于本文模拟计算中采用周期性边界条件,所以没有退磁场的存在.软硬磁两相间为完全共格界面,没有畴界和其他钉扎等实际缺陷的存在,内禀矫顽力机制源于自旋取向转动的各向异性和交换耦合作用的强弱.强的各向异性和强的交换耦合作用使得自旋磁矩的翻转变得困难.对于反向外场驱动下软磁硬磁双相复合磁体的自旋磁矩的翻转动力学,普遍认同于磁矩反转过程起始于各向异性较小的软磁相,进而带动硬磁相磁矩的反转^[9,14].自旋磁矩的翻转过程中必定要偏离易轴或者摆脱铁磁自旋交换耦合的平行排列而使体系的能量升高.因此高强的各向异性和交换耦合作用使得体系的内禀矫顽力 H_c 提高.图 5 和图 6 中的结果分别显示了约化交换耦合常数 J_{ab} 减小(实际交换耦合常数 J_{NV} 增大)和各向异性常数比值 A/D 增加和内禀矫顽力 H_c 的增加.正如(1)式 Hamiltonian 组成的第一项所示,自旋

交换作用除随实际交换耦合常数增加而增加外,还与耦合自旋偶的自旋取值紧密相关.自旋 S 取值越大,则交换耦合作用也越强,即内禀矫顽力 H_c 也就越大.图 7 中的结果直接证实了这一点.

本文中另一值得关注的结果是图 3 和图 5 中所显示出的内禀矫顽力 H_c 随软磁点阵尺寸 d 的加大而增加,这与通常内禀矫顽力 H_c 随晶粒尺寸增加而减小的变化趋势不同.出现这一差异与我们模拟计算算法中处理‘原子’团聚尺度的方法与以往普通微磁学方法不同有关.我们的算法中是通过在大的自旋点阵中从最小(即由 4 个单自旋阵点构成简立方单胞)到大而形成自旋团聚,是一个从小到大的过程,而微磁学中在处理纳米微细过程则是采取具有相互作用的晶粒尺寸逐渐减小的相反过程,即由大到小的过程.无论是微磁学理论还是一般的磁学唯象理论都支持内禀矫顽力 H_c 随晶粒尺寸 d 减小而增大的 H_c-d^{-1} 关系.当晶粒尺寸减小到单畴尺度范围后,体系的 H_c 达到最大值,随后 H_c 将快速下降.针对纳米晶单相的生长和磁性,Herzer^[27,28]采用简单的统计物理方法处理随机各向异性模型,并得到 H_c .按照 H_c-d^n 关系随晶粒尺寸 d 增大而增大,直至到达单畴尺度范围后取得最大值,随后按照常规的 H_c-d^{-1} 关系减小,指数 $n=6$ 被作者认为具有普适性.我们随后精确的 Monte Carlo 模拟计算证明 H_c-d^n 关系的确存在,但指数 n 决不是普适常数 6,而是一个受温度等因素影响、介于 4—6 之间的常数^[17].纪松等^[29]在 Herzer 工作的基础上引入纳米晶转变分数,较好地解决了非晶纳米晶双相的磁性,虽然也存在类似 Herzer 那样处理过于简化的问题.应当看到 Herzer、纪松等的工作比较适合于处理纳米单相或具有相同基本磁性参量(同类磁性原子)的双相体系的磁性.而对于处理基本磁性参量相差较大(异类磁性原子)的双相体系的磁性,如硬磁 Nd-Fe-B 与软磁 α -Fe 复合形成双相磁体,如继续采用他们的处理方法可能会产生较大的误差.本文基于混合 Heisenberg 模型,采用 Monte Carlo 方法处理由异类磁性原子组成的双相磁性体系的初步结果也表明 H_c 随 d 增加而提高,不过是否仍遵循类似上述单相体系的幂指数关系还需要进一步更多的计算数据支持.其实从磁各向异性能 $E = KV$ (K 为各向异性常数)与团聚体积 V 的关系来考虑也不难理解 H_c 随 d 增加而提高.

关于图 8 给出的最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 在 A/D 和

M_S/M_H 参数空间中的分布及其变化趋势. 在 M_S/M_H 参数的高低两端 A/D 参数对最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 有完全相反的影响作用. 根据我们的计算, 出现上述差异与 M_S/M_H 参数高低两端的复合体系的交换耦合稳定性有关. 在 $M_S/M_H = 1$ 的低端, 软硬磁双相具有相同的 M_r , 总体退磁曲线即使在 $A/D = 1200$ 这样大的软硬磁性差别下也不出现台阶拐点分解特征. 由于没有软磁相 M_r 增强, 此时最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 的提高纯粹是因为较大矫顽力场的贡献. 而在 $M_S/M_H = 3$ 的高端, 软硬磁双相的 M_r 相差很大, 此时即使软硬磁两相的矫顽力场相差不大, 总体退磁曲线也会发生分解而出现台阶拐点, 导致最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 的下降, 而且这种因为总体退磁曲线发生分解出现台阶拐点而导致最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 下降的趋势随两相矫顽力场差异的加大而更加突出. 当然提高交换耦合作用可以减缓甚至完全抑制相应的下降趋势. 具体的细节还需要进一步更多的计算数据的支持. 最后必须指出的是图 8 显示的最大磁能积 $(MH)_{\max}$ 在 A/D 和 M_S/M_H 参数空间中的分布及其变化趋势是在特定温度、团聚尺度和交换耦合作用参数下经过大量模拟计算得到的, 这些参数的变化对 $(MH)_{\max}$ 这个 3 维曲面影响同样需要进一步的模拟计算工作来确定.

5. 结 论

本文通过 Monte Carlo 方法对由异类自旋组成的混合 Heisenberg 自旋体系进行了较为系统的模拟计算, 以希望在更为广泛和普适基础上对诸如硬磁 Nd-Fe-B 与纳米尺度的软磁 α -Fe 复合这类纳米双相磁体的常规磁性能作出预测和评估. 我们的工作与以往报道的采取微磁学方法针对某种具体材料的计算不同, 我们的模拟计算完全是建立在依靠交换耦

合作用维持的普通纳米硬磁-软磁双相体系之上的, 全部模拟量采用约化量, 所得到结果在我们已完成模拟的参数空间内具有普适性. 由于 Heisenberg 自旋体系本身的复杂性, 模拟计算也特别耗费计算机 CPU 机时, 要完成更大参数空间的模拟计算还需要更多的工作. 我们坚信我们的模拟计算工作和结果对于减少实验工作的盲目性、节省资源和缩短研究周期(特别是新材料的开发)都是有益的. 此外对于加深了解纳米双相磁性体系的交换耦合理论、磁硬化理论同样也是有益的. 本文的主要结论如下:

1. 采用新的模型和算法对基于交换耦合作用的纳米硬磁-软磁双相体系模拟计算, 本文可以很好地再现以往采用微磁学理论针对硬磁 Nd-Fe-B 与纳米软磁 α -Fe 复合双相磁体的计算结果.
2. 交换耦合作用具有的短程性. 弱的交换耦合作用是单一的总体退磁曲线产生台阶和拐点、分解成软硬磁两相曲线的原因, 这直接导致双相磁性体系的最大磁能积的下降. 加大自旋交换耦合作用常数或提高交换耦合自旋偶的自旋值均可以增强交换耦合作用.
3. 随交换耦合作用的增强, 内禀矫顽力 H_c 呈现出单调上升的变化趋势, 但不影响剩磁 M_r . 软磁阵点尺寸的增加使得内禀矫顽力 H_c 也有所增加.
4. 硬磁软磁双相的磁晶各向异性常数的比值 A/D 和软磁与硬磁相的饱和磁矩比值 M_S/M_H 这两个参数的正确选取对于在上述软磁-硬磁双相体系中获得增强的磁能积十分重要. 应当综合考虑体系温度、团聚尺度和交换耦合作用强度等参数去选择. 参数选择不当, 将导致总体退磁曲线产生台阶和拐点, 分解成软硬磁两相曲线.
5. 经过不断完善, 本文模拟计算可以作为专用计算软件包, 胜任纳米软磁-硬磁双相(包括 Nd-Fe-B 与纳米 α -Fe 或其他硬磁稀土与软磁复合)体系的磁性能模拟计算工作.

[1] Schrefl T, Fischer R, Fidler J and Kronmüller H 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 7053
 [2] Schrefl T, Fidler J and Kronmüller H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 6100
 [3] Skomski R and Coey J M D 1993 *Phys. Rev. B* **48** 15812
 [4] Skomski R 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 7059
 [5] Ding J et al 1993 *J. Mag. Mater.* **124** L1
 [6] Manaf A, Buckley R A and Davies H A 1993 *J. Mag. Mater.*

128 302

[7] Wang Z C, Zhang M C and Zhou S Z 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 5097
 [8] Schrefl T and Fidler J 1999 *IEEE. Trans. Mag.* **35** 3223
 [9] Zhou S Z and Dong Q F 1999 *Super Permanent Magnet of Rare-earth Iron Alloy* (Beijing: Metallurgy Industry Press) 439 (in Chinese) 周寿增、董清飞 1999 超强永磁体-稀土铁系永磁材料(北京:冶金工业出版社)第 439 页]

- [10] Luo J ,Gao R W , Zhou S Z and Li W 2001 *Progress in Materials Science and Engineering in Year 2000* (Beijing :Metallurgy Industry Press)p305(in Chinese) [罗 军、高汝伟、周寿增、李 卫 2001 2000 年材料科学与工程进展(北京 :冶金工业出版社)第 305 页]
- [11] Chu Y L ,Xiong L Y and Sun X K 1998 *Acta . Metall . Sin .* **34** 423 (in Chinese) [初业隆、熊良钺、孙校开 1998 金属学报 **34** 423]
- [12] Yang C J and Park E B 1997 *J. Mag . Mag . Mater .* **166** 243
- [13] Cheng Z H ,Shen B G and Mao M X 1995 *Phys . Rev . B* **52** 9427
- [14] O 'Handley R C 2000 *Modern Magnetic Materials Principles and Application* (New York :John. Wiley & Sons. Inc.)p437
- [15] Shao Y Z and Shek C H *et al* 1999 *Phys . Stat . Sol . B* **214** R11
- [16] Shao Y Z and Shek C H *et al* 1998 *Phys . Stat . Sol . B* **209** R1
- [17] Shek C H and Shao Y Z *et al* 2000 *Physica A* **276** 201
- [18] Shao Y Z and He Z H 2000 *Chin . Phys . Lett .* **17** 367
- [19] Shao Y Z , Lan T and Lin G M 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 942(in Chinese) [邵元智、蓝 图、林光明 2001 物理学报 **50** 942]
- [20] Shao Y Z , Lan T and Lin G M 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 948(in Chinese) [邵元智、蓝 图、林光明 2001 物理学报 **50** 948]
- [21] Fisch R 1998 *Phys . Rev . B* **58** 5684
- [22] Moorjani K and Coey J M D 1984 *Magnetic Glass* (B. V. Elsevier. Sci. Pub.) [赵见高等译 1992 磁性玻璃(北京 :科学出版社)第 230 页]
- [23] Rushbrooke G S and Wood P J 1958 *Mol . Phys .* **1** 257
- [24] Wagner D 1972 *Introduction to the Theory of Magnetism* (New York : Pergamon Press)p153
- [25] Mlodzki J ,Wuensch F R and Galazka R R 1990 *J. Mag . Mag . Mater .* **86** 269
- [26] Jiang S T 1993 *Theory of Ferromagnetism* (Beijing :Science Press) p220 ,549(in Chinese) [姜寿亭 1993 铁磁性理论(北京 :科学出版社)第 220 ,549 页]
- [27] Herzer G 1990 *IEEE Trans . Mag .* **26** 1397
- [28] Herzer G 1998 *Nanomagnetism* (edited by Hernando ,NATO ASI Series E ,N247 ,Kluwer Academic)p111
- [29] Ji S ,Yang G B and Wang R 1996 *Acta Phys . Sin .* **45** 2061 (in Chinese) [纪 松、杨国斌、王 润 1996 物理学报 **45** 2061]
- [30] Wang X F ,Jin H M ,Zhao S F and Yan Y 2001 *Chin . Phys .* **10** 555
- [31] Li B H ,Zhang H W ,Zhang Jian ,Wang Y and Zhang S Y 2001 *Chin . Phys .* **10** 1054

Computational magnetism of a spin-clusters ensemble of different species coupled with exchange interaction *

Shao Yuan-Zhi Lin Guang-Ming Lan Tu Zhong Wei-Rong

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

(Received 12 January 2002 ; revised manuscript received 18 March 2002)

Abstract

The magnetism of a dual-phase magnetic system consisting of both hard and soft magnetic phases in nanometer scale was studied through Monte Carlo numerical simulation to classical discrete Heisenberg model mixed with spin-clusters of different species. Unlike those previous computations which focused solely on the concrete dual-phase alloy of Nd-Fe-B plus α -Fe studied by other investigators on the basis of micro-magnetism ,our current simulation instead concentrates upon the direct exchange coupling among the spin-clusters of same and different species by introducing ,within the Hamiltonian of standard Heisenberg model ,both determinant and random anisotropic energy terms which signify hard-magnetic and soft-magnetic phases respectively. We disclosed in this paper the dependences of inherent coercivity H_c ,remanence M_r and maximal energy product $(M \times H)_{\max}$ upon such key parameters as the size and volume fraction of spin-clusters ,the coupling constant of exchange interaction between dissimilar spin-clusters , the difference between the anisotropic constants as well as the saturation magnetic moments of hard and soft magnetic phases. It should be noted that all the simulated quantities in this paper were taken in unitless reduced form and therefore the main conclusions of this paper were of universality at least within the range of parameters we investigated here.

Keywords : Heisenberg model , Monte Carlo simulation , nanocomposite magnets , Nd-Fe-B

PACC : 7510J , 7540M , 6146 , 7550

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