

# 磁性物质中冷无序能的作用

王永忠 张志东

(中国科学院金属研究所 沈阳 110015)

(2001 年 9 月 13 日收到)

在研究物质的磁性时,考虑了电子之间的正交换能( $A_1 > 0$ , 导致电子自旋平行排列)和负交换能( $A_2 < 0$ , 导致电子自旋反平行排列)两项各自的物理作用,不是简单地只以它们的代数和为判据. 提出冷无序能的概念:当  $A_1 > |A_2|$  ( $A = A_1 - |A_2| > 0$ ) 时,  $A_1$  为有序能,  $A_2$  为冷无序能; 当  $A_1 < |A_2|$  ( $A < 0$ ) 时,  $A_2$  为有序能,  $A_1$  为冷无序能. 物质的磁性决定于热运动能、有序能以及冷无序能之间的竞争. 考虑了冷无序能导致“冷无序”的物理功能, 将冷无序能变换为等效温度, 在统计物理的框架内处理了铁磁性、反铁磁性转变和自旋玻璃冻结问题.  $A_2 = 0$  的体系具有 Weiss 铁磁性,  $\frac{|A_2|}{A_1} = 1$  的体系表现自旋玻璃磁性,  $|A_2| > \frac{|A_2|}{A_1} > 0$  的体系同时具有铁磁性和自旋玻璃磁性,  $|A_2| > 0$  的体系同时具有反铁磁性和自旋玻璃磁性.

关键词: 交换能, 冷无序能, 铁磁性, 反铁磁性, 自旋玻璃

PACC: 7510

## 1 引 言

磁性物质的电子之间的交换相互作用能由正、负两项组成<sup>[1]</sup>, 以往的磁学理论都是以正、负两项交换能的代数和作为判断的标准. 这代数和为正, 物质是铁磁性的; 这代数和为负, 物质是反铁磁性的. 本文不是简单地以这个代数和的正或负作为判据, 而是考虑了正、负两项交换能各自独立的物理作用, 这样不但解释了铁磁性、反铁磁性和自旋玻璃态的出现, 也解释了铁磁性或反铁磁性自旋玻璃磁性的共存.

## 2 冷无序能和等效温度

在统计物理学中, 热运动能量  $kT$  是一项导致电子自旋取向无序的能量, 因此可以称为无序能或热无序能. 磁性物质中的正交换能( $A_1$ ) 倾向于使电子自旋平行排列, 负交换能( $A_2$ ) 倾向于使电子自旋反平行排列. 因此, 在铁磁性物质中, 正交换能( $A_1$ ) 为有序能, 负交换能( $A_2$ ) 扰乱正交换能( $A_1$ ) 所导致的电子自旋平行排列, 为冷无序能; 在反铁磁性物质中则相反, 负交换能( $A_2$ ) 为有序能, 正交换能( $A_1$ ) 扰乱负交换能( $A_2$ ) 所导致的电子自旋反平行排列, 为冷无序能. 因此, 对于铁磁性物质, 无序能包括热

无序能( $kT$ ) 和冷无序能  $A_2$ ; 对于反铁磁性物质, 无序能包括热无序能( $kT$ ) 和冷无序能  $A_1$ .

考虑冷无序能后, 在统计物理理论的公式中, 导致热无序的能量  $kT$  应代之以导致热无序和冷无序的总无序能  $kT_{\text{eff}}$ ,  $T_{\text{eff}}$  为等效温度. 如果冷无序能为  $|A_2|$ , 则系统的总无序能等于热运动(无序)能与冷无序能之和, 即

$$kT_{\text{eff}} = kT + |A_2|. \quad (1)$$

冷无序能既然是无序能(在导致自旋取向无序的意义上其性质与热运动能相同) 就可以将其表示为等效温度. 如果系统的有序能为  $A_1$ , 冷无序能为  $|A_2|$ , 则定义系统的冷无序度为  $e^{-\frac{A}{|A_2|}}$ , 其中  $A = A_1 - |A_2|$ , 冷无序度也表征冷无序能在总无序能中所占的份额, 因此有

$$|A_2| = kT_{\text{eff}} e^{-\frac{A}{|A_2|}}. \quad (2)$$

由(1)式和(2)式可得

$$T_{\text{eff}} = T(1 - e^{-\frac{A}{|A_2|}})^{-1}. \quad (3)$$

冷无序能所导致的无序是一种自发无序, 在某种意义上也可以说是一种“有序”, 因此, 热运动不仅破坏有序能导致的体系的有序, 也破坏冷无序能导致的无序. 因此(3)式中的  $A$  应该代之以  $kTt^{n-1} + 2At^m$ , 式中  $t^{n-1}$  和  $2t^m$  为权重函数,  $t = \frac{T}{T_r}$ ,  $T_r$  为参考

温度  $k$  为 Boltzman 常数,  $m (< 0)$  和  $n (> 0)$  为整数. 于是 (3) 式变为

$$T_{\text{eff}} = T \left[ 1 - \exp \left( - \frac{t^{n-1} kT + 2t^m A}{|A_2|} \right) \right]^{-1}. \quad (4)$$

此式表明, 系统的等效温度  $T_{\text{eff}}$  决定于热力学温度  $T$ 、冷无序能  $A_2$  以及两项交换能之代数和  $A (= A_1 - |A_2|)$ .

### 3 铁磁性与自旋玻璃磁性

根据以往的磁学理论, 当  $T > T_C$  时, 铁磁性物质的顺磁磁化率与温度的关系为

$$\chi = \frac{C}{T - \theta_p}, \quad (5)$$

其中

$$\theta_p = \frac{2A}{k} = \frac{\chi A_1 - |A_2|}{k} \quad (6)$$

为顺磁居里温度. 以 (4) 式中的等效温度  $T_{\text{eff}}$  取代 (5) 式中的  $T$ , 得到

$$\chi = \frac{C}{T \left[ 1 - \exp \left( - \frac{t^n + t_p t^m}{t_d} \right) \right]^{-1} - \theta_p}, \quad (7)$$

其中  $t = \frac{T}{T_r} = kT/A_1$ ,  $T_r = \frac{A_1}{k}$  为参考温度,  $t_p = \theta_p/T_r$ ,  $t_d = \frac{|A_2|}{A_1}$ ,  $n = 6$ ,  $m = -\chi$  (为电子的动力学自由度数, 2 为电子的自旋自由度数). 于是可得铁磁居里温度为

$$T_C = \theta_p \left[ 1 - \exp \left( - \frac{t_c^6 + t_p t_c^{-2}}{t_d} \right) \right], \quad (8)$$

其中  $t_c = \frac{T_C}{T_r} = \frac{T_C}{A_1/k}$ ,  $T_C$  可由图解法求出. (8) 式可以改写为

$$T_C = \frac{\chi A_1 - |A_2|}{k} \cdot \left[ 1 - \exp \left( - \frac{t_c^6 + \chi (1 - |A_2|/A_1) t_c^{-2}}{|A_2|/A_1} \right) \right]. \quad (9)$$

此式表明, 铁磁转变居里温度  $T_C$  不仅决定于  $A_1$  与  $|A_2|$  的代数和, 也决定于它们的比值. 只有在  $A_2 = 0$  时, 才有  $T_C = \theta_p$ .

若一磁学体系中磁性原子的电子之间的两种交换能的数值相等, 即  $A_1 = |A_2| \neq 0$ ,  $A = A_1 - |A_2| = 0$ , 则正负交换能竞争的结果, 使体系的全部电子自

旋既不能平行排列, 又不能反平行排列, 或者说, 体系中任一对自旋平行排列的概率与反平行排列的概率相等, 也就是体系既不能表现铁磁性, 又不能表现反铁磁性, 而表现自旋玻璃磁性, 其磁化率为

$$\chi = \frac{C}{T \left[ 1 - \exp \left( - \frac{t^n}{t_d} \right) \right]^{-1}}. \quad (10)$$

此式表明, 当  $T \rightarrow 0$  时,  $\chi \rightarrow 0$ . 磁化率随温度的升高而增大, 达到峰值后, 随温度的升高而减小, 当温度足够高时,  $\chi = \frac{C}{T}$ , 即磁化率与温度的关系遵守 Curie

定律. 根据 (10) 式由  $\frac{\partial \chi}{\partial t} = 0$  可求出这个自旋玻璃体系的自旋无序冻结温度. (10) 式描述的是理想自旋玻璃磁性.

(7) 式表明, 对于  $A_1$  与  $|A_2|$  的数值并不完全相等的实际磁学体系, 当温度足够高时,  $\chi = \frac{C}{T - \theta_p}$ , 即磁化率与温度的关系遵守 Curie-Weiss 定律,  $\theta_p$  为顺磁 Curie 温度. 对于一定的  $t_p$ , 在某一温度区间满足条件  $t_p t^m < t^n$ , 体系不会出现自发磁化而表现自旋玻璃的性质. 当温度低于这一温区时, 不再满足  $t_p t^m < t^n$  这一条件, 于是体系出现自发磁化 (即所谓 re-entrant<sup>[2]</sup>, 在实验上已经观测到这一现象). 根据 (7) 式, 由  $\frac{\partial \chi}{\partial t} = 0$  可得

$$\frac{t_d}{t_d + n t^n + m t_p t^m} = \exp \left( - \frac{t^n + t_p t^m}{t_d} \right), \quad (11)$$

由此式用图解法得到自旋玻璃冻结温度的约化值  $t_f$  ( $= \frac{kT_f}{A_1}$ ).

由 (7) 式可以得到

$$A_1 \chi / Ck = \left\{ t \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{t^6 + \chi (1 - |A_2|/A_1) t^{-2}}{|A_2|/A_1} \right] \right]^{-1} - \chi (1 - |A_2|/A_1) \right\}^{-1} \quad (12)$$

和

$$Ck/A_1 \chi = t \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{t^6 + \chi (1 - |A_2|/A_1) t^{-2}}{|A_2|/A_1} \right] \right]^{-1} - \chi (1 - |A_2|/A_1). \quad (13)$$

图 1 是根据 (12) 和 (13) 式作出的. 可以看出,  $\frac{|A_2|}{A_1} = 1$  的体系为理想自旋玻璃体系;  $\frac{|A_2|}{A_1} < 1$  的体系在

温度的降低过程中,先出现自旋玻璃冻结,然后出现自发磁化,也即  $T_c < T_f$ ,随着  $\frac{|A_2|}{A_1}$  数值的减小,  $T_c$  的数值逐渐增大,  $T_f$  逐渐减小,当  $\frac{|A_2|}{A_1}$  减小到一定程度(临界值  $\frac{|A_{2c}|}{A_{1c}}$ )时,体系先出现自发磁化,自旋玻璃冻结被自发磁化掩盖,只是表现出一些迹象(在此情况下,不可能由(11)式求得  $t_f$ );  $\frac{|A_2|}{A_1} = 0$  的体系具有 Weiss 铁磁性或理想铁磁性,磁化率与温度的关系遵守 Curie-Weiss 定律.当温度足够高时,系统的磁化率与温度的关系遵守 Curie-Weiss 定律.由于  $A_2 \neq 0$  而产生的自旋玻璃冻结倾向,使得  $1/\chi-T$  曲线在铁磁 Curie 温度附近向上弯曲,与实验结果相符<sup>[3-5]</sup>.

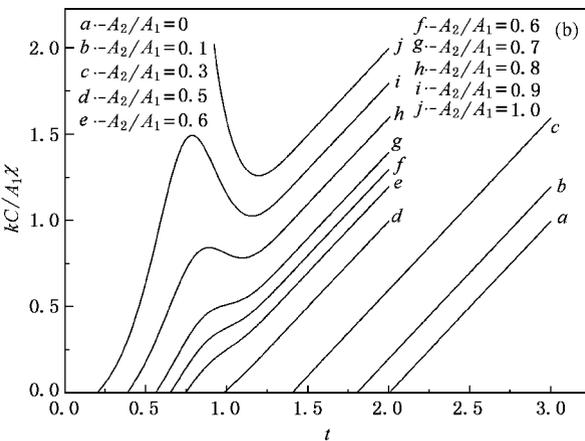
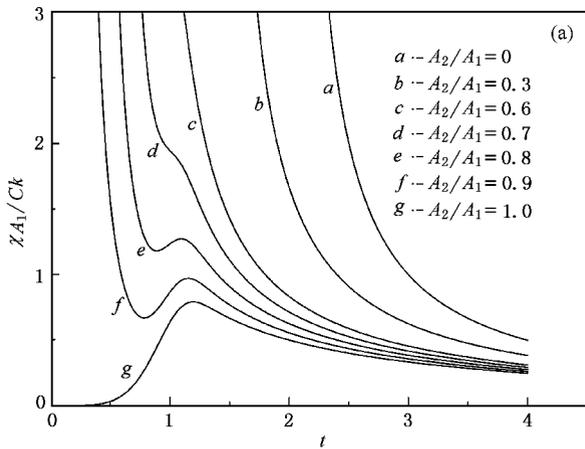


图1  $A_1 \geq |A_2|$  时物质的磁化率(a)和磁化率的倒数(b)与温度的关系

由(6)和(8)式可得

$$\frac{T_c}{\theta_p} = 1 - \exp\left(\frac{((kT_c/A_1)^6 + (k\theta_p/A_1)(kT_c/A_1)^2)}{1 - \frac{\theta_p/2}{A_1/k}}\right), \quad (14)$$

其中  $\theta_p$  和  $T_c$  分别为顺磁居里温度和铁磁居里温度的实验值,使用图解法可求得  $A_1$ , 于是  $A_2$  也可求出.由(11)式可得

$$\frac{|A_2|/A_1}{|A_2|/A_1 + 6t_f^6 - 4(1 - |A_2|/A_1)t_f^{-2}} = \exp\left(-\frac{t_f^6 + 2(1 - |A_2|/A_1)t_f^{-2}}{|A_2|/A_1}\right),$$

其中  $t_f = \frac{kT_f}{A_1}$ ,  $T_f$  为自旋玻璃冻结温度的实验值,由此式和(6)式使用图解法也可求得  $A_1$  和  $A_2$ .

### 4 反铁磁性与自旋玻璃

对于反铁磁性,可以求得反铁磁性物质的顺磁磁化率与温度的关系为

$$\chi = \frac{C}{T\left[1 - \exp\left(-\frac{t^n + t_p t^m}{t_d}\right)\right]^{-1} + \theta_p}, \quad (15)$$

其中  $C = \frac{N\mu_0^2}{k}$  为 Curie 常数,对于反铁磁体,冷无序能为  $A_1$ ,  $T_d = \frac{A_1}{k}$ ,  $\theta_p = \frac{\chi(|A_2| - A_1)}{k}$ , 取  $T_r = \frac{|A_2|}{k}$ ,  $t_d = \frac{T_d}{T_r} = \frac{A_1}{|A_2|}$ ,  $t_p = \frac{\chi(|A_2| - A_1)}{|A_2|}$ ,  $t = T/T_r = kT/|A_2|$ ,  $n = 6$ ,  $m = -2$ .

同理可求得反铁磁转变为 Neel 温度为

$$T_N = \theta_p \left[1 - \exp\left(-\frac{t_N^n + t_p t_N^m}{t_d}\right)\right], \quad (16)$$

其中  $t_N = \frac{T_N}{|A_2|/k}$ .可以看出,当温度足够高时(15)式变成  $\chi = \frac{C}{T + \theta_p}$ ,表明系统的磁化率与温度的关系在高温下遵守 Curie-Weiss 定律,  $\theta_p$  为渐进 Curie 温度.

当温度为自旋玻璃转变温度时,有  $\frac{\partial \chi}{\partial t} = 0$ ,由

(15)式可以得到方程

$$\exp\left(\frac{t^n + t_p t^m}{t_d}\right) = 1 + \frac{nt^n + mt_p t^m}{t_d}, \quad (17)$$

此方程可以用图解法求解,从而得到自旋玻璃冻结温度.

由(15)式可以得到

$$A_2\chi/ck = \left\{ t \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{t^6 + \chi(1 - |A_1|/|A_2|)t^{-2}}{|A_1|/|A_2|} \right] \right]^{-1} + \chi(1 - |A_1|/|A_2|) \right\}^{-1} \quad (18)$$

和

$$ck/A_2\chi = t \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{t^6 + \chi(1 - |A_1|/|A_2|)t^{-2}}{|A_1|/|A_2|} \right] \right]^{-1} + \chi(1 - |A_1|/|A_2|). \quad (19)$$

图2是根据(18)和(19)式作出的,可以看出,在  $t \leq t_N$  的温度范围内,体系的磁化率与温度的关系,完

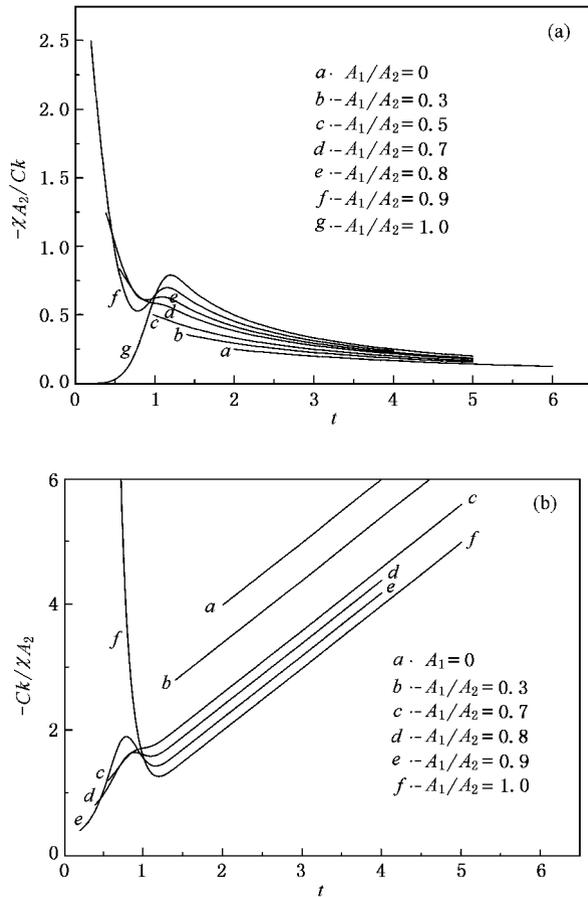


图2  $A_1 \leq |A_2|$  时物质的磁化率(a)和磁化率的倒数(b)与温度的关系

变,也即  $T_N < T_f$ ; 随着  $\frac{A_1}{|A_2|}$  数值的减小,  $T_N$  的数值逐渐增大,  $T_f$  逐渐减小, 当  $\frac{A_1}{|A_2|}$  减小到一定程度时, 体系先出现反铁磁转变, 自旋玻璃冻结被自发磁化掩盖, 只是表现出一些迹象(在此情况下, 不可能由(17)式求得  $t_f$ ); 当温度足够高时, 系统的磁化率与温度的关系遵守 Curie-Weiss 定律.

可见, 具有不同数值的  $\frac{|A_2|}{A_1}$  或  $\frac{A_1}{|A_2|}$  的物质具有不同的磁性(图3).

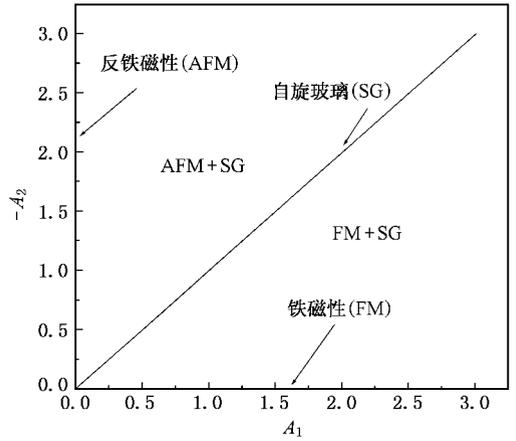


图3 物质的磁性相图

### 5 结 论

应该考虑磁性物质电子之间的正交换能 ( $A_1 > 0$ ) 和负交换能 ( $A_2 < 0$ ) 各自的物理功能: 不但要考虑它们的代数和 ( $A = A_1 - |A_2|$ ), 还要考虑它们的比值  $\frac{|A_2|}{A_1}$ . 物质的磁性决定于热运动能、正交换能以及负交换能之间的竞争.  $A_2 = 0$  的体系表现 Weiss 铁磁性,  $\frac{|A_2|}{A_1} = 1$  的体系表现理想自旋玻璃磁性,  $1 > \frac{|A_2|}{A_1} > 0$  的体系同时具有铁磁性和自旋玻璃磁性.  $1 > \frac{A_1}{|A_2|} > 0$  的体系同时具有反铁磁性和自旋玻璃磁性.

全决定于比值  $\frac{A_1}{|A_2|}$ ,  $\frac{A_1}{|A_2|} < 1$  的体系在温度的降低过程中, 先出现自旋玻璃冻结, 然后出现反铁磁转

- [ 1 ] Heisenberg W 1928 *Z. Physik* **49** 619
- [ 2 ] Mydosh J A 1993 *Spin Glasses :An Experimental Introduction* ( London :Taylor and Francis Inc )
- [ 3 ] Blschof R ,Kaldis E and Wachter P 1983 *J. Magn. Magn. Mater.* **31—34** 255
- [ 4 ] Lorin D ,Dance J M ,Soubeyroux J L ,Tressaud A and Hagenmuller P 1981 *J. Magn. Magn. Mater.* **23** 92
- [ 5 ] Fourquet J L ,de Pape R ,Teillet J ,Varret F and Papaefthymion G. C 1982 *J. Magn. Magn. Mater.* **27** 209

## Cold-disorder energy in magnetic matter

Wang Yong-Zhong Zhang Zhi-Dong

( *Institute of Materials Research ,Chinese Academy of Sciences ,Shenyang 110016 ,China* )

( Received 13 September 2001 )

### Abstract

The concept of cold-disorder energy which originates from the competition of terms with different signs in the exchange energy between electrons of magnetic matter has been introduced. The dominant term in the exchange energy of a magnetic system results in ordering of the system ,whereas another term with different sign tends to disturb such an order. Thus the latter term could be defined as cold-disorder energy ,which can be treated as an effective temperature. The magnetism of the system depends on the competition among the thermal motion ,the order energy and the cold-disorder energy. The phase diagram is derived for the ferromagnetism ,the antiferromagnetism ,the spin glass and for the coexistence of these magnetic phases. When  $A_2 = 0$  the system has Weiss ferromagnetism ,when  $A_1 = 0$  the system has Neel anti ferromagnetism ,when  $A_1 = |A_2|$  system has spin glass magnetism , and when  $A_1 > |A_2|$  there is coexistence of ferromagnetism and spin glass in the the system ,when  $A_1 < |A_2|$  there is coexistence of antiferromagnetism and spin glass in the the system.

**Keywords** : exchange interaction , disorder energy , ferromagnetism , antiferromagnetism , spin glass

**PACC** : 7510