

冲击波诱导Nd₂Fe₁₄B磁相变的理论计算研究*

鲁峰 陈朗† 冯长根

(北京理工大学机电学院, 爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

(2014年3月19日收到; 2014年4月22日收到修改稿)

根据Nd₂Fe₁₄B的冲击加载实验, 计算了3.3—7.2 GPa压力范围内冲击波阵面上压力与温度的关系. 基于分子场理论, 引入压力等效场, 改进了双亚点阵理论模型, 并分析了在不同温度和压力下Nd₂Fe₁₄B的磁性转变机理. 计算了压力对Nd₂Fe₁₄B磁致伸缩系数、磁化率、磁化强度以及居里温度的影响, 给出了Nd₂Fe₁₄B发生铁磁-顺磁相变的压力和温度判据. 计算结果表明: 压力使Nd₂Fe₁₄B的居里温度逐渐向低温区转移, 当压力从0 GPa增加到1.15 GPa时, 居里温度从584 K降至292 K; 随着压力的增加, Nd₂Fe₁₄B的磁化强度不断下降, 且临界去磁压力随温度的升高呈下降趋势; 在3.3—7.2 GPa压力范围内, Nd₂Fe₁₄B发生了铁磁-顺磁相变.

关键词: 铁磁-顺磁相变, 居里温度, 分子场理论, Nd₂Fe₁₄B

PACS: 75.10.-b, 75.30.Cr, 75.30.Kz, 77.80.B-

DOI: 10.7498/aps.63.167501

1 引言

在冲击波压缩作用下, 固体的磁学性质将发生显著改变, 一些磁性材料的磁化强度、居里温度、磁化率等磁学参数对压力有着很强的依赖关系. 通过理论计算方法对磁性与压力的关系进行物理描述是许多研究者的目标. 分子场理论已成功地被用于计算分析稀土磁性材料的磁性转变过程. 1982年, Herbst和Croat^[1]提出了双亚点阵分子场理论, 采用三个分子场系数分别描述RFe₃化合物(R表示稀土元素)中的三种交换作用, 即R-R, R-Fe和Fe-Fe三种磁相互作用, 这三种磁相互作用决定了居里温度和分子场. 随后, 文献^[2—5]采用分子场理论计算了R₂Fe₁₇C, R₂Fe₁₄B等稀土磁性化合物的磁化强度与温度的关系. Hao^[6]采用亚点阵模型, 计算了过渡稀土化合物R₂Fe_{17-x}M_x(R为Tb或Du, M为Al或Ga)中R亚点阵与M亚点阵间的交换作用常数. Wang等^[7]采用横场伊辛模型研究了铁磁薄膜的磁性转变过程, 给出了磁化强度的温

度依赖关系. 郭光华^[8]采用分子场模型分析了DyMn₂Ge₂在低温下的自发磁相变及场诱导的磁相变, 计算了其磁化强度与温度的关系. Prasongkit和Tang^[9]采用双亚点阵模型计算了GdCo_{4-x}Ni_xAl化合物的磁化强度与温度的关系. Wang等^[10]采用双亚点阵分子场理论分析了Nd₂Fe₁₇H_x(x = 0, 3, 4.9)在外磁场中的磁化行为, 计算了不同温度下该物质的磁化曲线. Hu等^[11]采用金刚石压腔技术观测到在13 GPa压力下Fe发生了铁磁-顺磁相变. 虽然双亚点阵分子场理论模型能够较准确地描述磁化强度对温度的依赖性, 但并不能描述压力对磁化强度的影响.

采用改进的双亚点阵分子场理论, 本文研究了压力作用下Nd₂Fe₁₄B化合物的磁性转变. 引入压力等效场, 将外部压应力耦合到分子场理论中, 进而描述压力对磁化强度和居里温度的影响. 基于冲击加载实验得到了Nd₂Fe₁₄B在3.3—7.2 GPa压力范围内的冲击温度-压力曲线, 再结合临界去磁压力与温度的关系, 确定了冲击作用下Nd₂Fe₁₄B发生铁磁-顺磁相变的临界点.

* 国家自然科学基金(批准号: 11072036)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: chenlang@bit.edu.cn

2 Nd₂Fe₁₄B 内部冲击波阵面上温度的计算

采用 $\Phi 57$ mm 轻气炮发射飞片的方法对 Nd₂Fe₁₄B 进行冲击加载, 实验装置如图 1 所示. 弹丸前端的飞片以一定速度撞击固定在靶室内的 Nd₂Fe₁₄B 靶板, 通过改变弹丸速度调节撞击强度. 采用锰铜压力传感器测量 Nd₂Fe₁₄B 中的冲击压力. 靶板由五个薄片叠加组成, 薄片材料为 Nd₂Fe₁₄B, 直径均为 42.5 mm, 其中前四片厚度为 3 mm, 最后一片厚度为 6 mm. 飞片材料选用与靶板相同材料的 Nd₂Fe₁₄B, 进行对称碰撞, 飞片直径为 53 mm, 厚度为 3 mm. 实验中, 飞片速度控制在 200—500 m/s 之间, 对 Nd₂Fe₁₄B 内部 3, 6, 9 和 12 mm 四个深度位置处的压力进行测量.

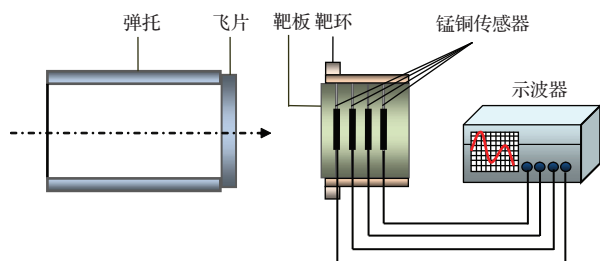


图 1 Nd₂Fe₁₄B 气炮冲击加载实验装置示意图

在冲击压缩作用下, 固体材料的冲击波速度 D 和波后质点速度 u 可用 D - u 关系来描述. 利用冲击加载实验采集得到的数据点, 可以拟合得到 Nd₂Fe₁₄B 在 3.3—7.2 GPa 压力范围内的 D - u 关系曲线, 结果如图 2 所示. 在该压力范围内, 冲击波速度与波后粒子速度满足线性关系, 其表达式为

$$D = 1.916 + 2.766u. \quad (1)$$

由于在 3.3—7.2 GPa 压力范围内 Nd₂Fe₁₄B 并未发生熔化现象, 因此根据 (1) 式所给的 Nd₂Fe₁₄B 的 D - u 关系, 可以计算出内部冲击波阵面上的温度, 具体计算公式为^[12]

$$\frac{dT}{dV} = \frac{1}{2c_V(T)} \left[(V_0 - V) \frac{dP(V)}{dV} + P(V) \right] - \frac{\gamma(V)}{V} T, \quad (2)$$

$$P(V) = \frac{1.916^2(1 - V/V_0)}{V_0[1 - 2.766(1 - V/V_0)]^2}. \quad (3)$$

(2) 式为一阶常微分方程. 这里 V , P 和 T 分别为材料的比体积、冲击波阵面上的压力和波阵面上的温

度; V_0 为材料初始比体积; c_V 为比定容热容; γ 为 Grüneisen 常数.

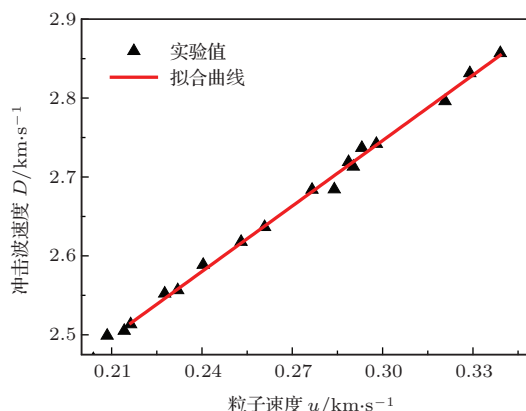


图 2 Nd₂Fe₁₄B 的 D - u 关系曲线

3 耦合外部应力的双亚点阵分子场理论

根据 Herbst 和 Croat^[1] 提出的双亚点阵分子场理论, 如果不考虑 B 原子, 可将 Nd₂Fe₁₄B 化合物近似看作是由 Nd 亚点阵和 Fe 亚点阵组成, 并用 Nd₂Fe₁₄ 表示. 当磁体中存在外加应力时, 应力与磁致伸缩之间存在相互作用, 通过磁致伸缩系数可将外应力等效为一个外加磁场. 因此, 在分子场中应增加应力等效场 H_P 一项, 从而作用在 Nd 亚点阵和 Fe 亚点阵上的分子场 $H_{Nd}(T)$ 和 $H_{Fe}(T)$ 分别为

$$H_{Nd}(T) = H + H_{P, Nd} + d[2n_{NdNd}\mu_{Nd}(T) + 14n_{NdFe}\mu_{Fe}(T)], \quad (4)$$

$$H_{Fe}(T) = H + H_{P, Fe} + d[2n_{NdFe}\mu_{Nd}(T) + 14n_{FeFe}\mu_{Fe}(T)], \quad (5)$$

式中, H 为外场; $\mu_{Nd}(T)$ 和 $\mu_{Fe}(T)$ 分别为 Nd 离子和 Fe 离子在温度为 T 时的磁矩; d 为转换因子, $d = N_A\mu_B\rho/A$, d 将 Nd₂Fe₁₄ 的磁矩单位从 μ_B 转换为 T, 其中, N_A 为阿伏伽德罗常数, μ_B 为玻尔磁子, ρ 为 Nd₂Fe₁₄ 化合物的密度, A 为 Nd₂Fe₁₄ 化合物的相对分子质量; n_{NdNd} , n_{NdFe} 和 n_{FeFe} 为分子场系数, 分别表示 Nd-Nd, Nd-Fe 和 Fe-Fe 原子间的交换作用.

两个亚点阵磁矩与温度的关系为

$$\mu_{Nd}(T) = \mu_{Nd}(0)B_{J_{Nd}} \times [\mu_{Nd}(0)H_{Nd}(T)/(k_B T)], \quad (6)$$

$$\mu_{\text{Fe}}(T) = \mu_{\text{Fe}}(0) B_{J_{\text{Fe}}}[\mu_{\text{Fe}}(0) H_{\text{Fe}}(T) / (k_{\text{B}} T)], \quad (7)$$

式中, $\mu_{\text{Nd}}(0)$ 和 $\mu_{\text{Fe}}(0)$ 分别为 Nd 和 Fe 两个亚点阵在绝对零度时的磁矩; k_{B} 为玻尔兹曼常数; $B_J(x)$ 为布里渊函数, 其表达式为

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right), \quad (8)$$

其中 J_{Nd} 和 J_{Fe} 分别为 Nd 离子和 Fe 离子的角动量量子数. 可采用 Nd^{3+} 自由离子的磁矩计算 Nd 亚点阵的磁矩, 因此有

$$\mu_{\text{Nd}}(0) = g_J J_{\text{Nd}}, \quad (9)$$

式中 g_J 为朗德因子. 对于 Nd 亚点阵有 $g_J = 8/11$, $J_{\text{Nd}} = 9/2$, 则 $\mu_{\text{Nd}}(0) = 3.2727 \mu_{\text{B}}$. 而对于 Fe 亚点阵有 $g_J = 2$, $J_{\text{Fe}} = 5/2$. 已知 0 K 时 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的总磁矩的实验测量值 $\mu_{\text{ex}}(0) = 37.5 \mu_{\text{B}}$, 利用

$$\mu_{\text{Fe}}(0) = \frac{\mu_{\text{ex}}(0) - 2\mu_{\text{Nd}}(0)}{14} \quad (10)$$

可求得的 $\mu_{\text{Fe}}(0) = 2.2253 \mu_{\text{B}}$. 计算得到 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 化合物一个单胞的总磁矩 $\mu_{\text{cal}}(T)$ 为

$$\mu_{\text{cal}}(T) = 2\mu_{\text{Nd}}(T) + 14\mu_{\text{Fe}}(T). \quad (11)$$

采用迭代法对 (4)—(7) 式进行数值计算, 可解出分子场系数 n_{NdNd} , n_{NdFe} 和 n_{FeFe} .

4 应力等效场

根据文献 [13], 应力等效场 H_P 可表示为

$$H_P = \frac{3P}{2\mu_0} \frac{d\lambda}{dM}, \quad (12)$$

式中, M 为磁化强度, λ 为磁致伸缩系数, μ_0 为真空磁导率. 因此, 若将 λ 表示为 M 和 P 的函数, 即可确定应力等效场 H_P . 考虑 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的热力学模型, 单位质量的磁体在外磁场 H 和外压力 P 的作用下, 其热力学方程为 [14]

$$\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_{T,P} = -\mu_0 \left[V \left(\frac{\partial \chi}{\partial P}\right)_T + \chi \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \right], \quad (13)$$

式中 χ 为磁化率. 当外磁场 H 为弱场时, 可略去等温压缩系数 κ_T 对 H 的依赖性, 且有 $\lambda = \Delta V/V \ll 1$. 则当磁场从 0 增加到 H 时, 由 (13) 式得到 λ 的表达式为

$$\lambda = \frac{\mu_0 M^2}{2\chi^2} \left[\chi \kappa_T - \left(\frac{\partial \chi}{\partial P}\right)_T \right]. \quad (14)$$

由 (14) 式可知, λ 随磁场的增强而增加. 对于 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 有 $\kappa_T = 9.8 \times 10^{-12} \text{ m/N}$. (14) 式表明磁致伸缩系数是一个关于磁化强度和压力的二元函数.

由磁化强度的定义可知,

$$M = d(2\mu_{\text{Nd}} + 14\mu_{\text{Fe}}), \quad (15)$$

因此, 应力等效场应由两部分构成, 令 $H_P = H_{P, \text{Nd}} + H_{P, \text{Fe}}$, 则有

$$H_{P, \text{Nd}} = \frac{3dP}{2\chi^2} \left[\chi \kappa_T - \left(\frac{\partial \chi}{\partial P}\right)_T \right] 2\mu_{\text{Nd}}, \quad (16)$$

$$H_{P, \text{Fe}} = \frac{3dP}{2\chi^2} \left[\chi \kappa_T - \left(\frac{\partial \chi}{\partial P}\right)_T \right] 14\mu_{\text{Fe}}, \quad (17)$$

式中 $H_{P, \text{Nd}}$ 和 $H_{P, \text{Fe}}$ 分别为作用在 Nd 亚点阵和 Fe 亚点阵上的应力等效场. 将 (16), (17) 式代入 (4) 和 (5) 式后可计算出各温度下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的磁化强度与压力的关系曲线, 以及各压力下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的磁化强度与温度的关系曲线.

5 结果及讨论

5.1 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的冲击温度

求解 (2) 式可得到冲击温度 T 与冲击压力 P 的关系. 图 3 所示为 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 在 3.3—7.2 GPa 冲击压力范围内的冲击温度, 在该压力范围内, 冲击温度与冲击压力近似呈线性增长规律. 当冲击压力为 3.3 GPa 时, 对应的冲击温度为 333 K. 当冲击压力为 7.2 GPa 时, 对应的冲击温度为 357 K. 由此可见, 当冲击压力由 3.3 GPa 增加至 7.2 GPa 时, 温升仅为 24 K, 由冲击波压缩引起的温升是很小的.

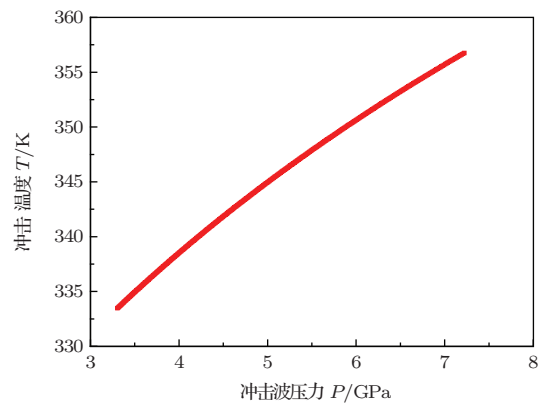


图 3 3.3—7.2 GPa 冲击压力范围内 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的冲击温度曲线

5.2 压力对Nd₂Fe₁₄B磁化率的影响

图4为在0.25, 0.5, 0.75和1 GPa压应力下室温时Nd₂Fe₁₄B的磁滞回线^[15]. 在压力较小(0.5 GPa以下)时, 磁滞回线受应力的影响较小, 磁体的磁性能变化不显著. 当压力超过0.5 GPa时, 磁体磁滞回线的方圆形和矫顽力迅速下降, 磁性发生明显变化. 根据温度为300 K时各压力下Nd₂Fe₁₄B的磁滞回线可以确定其磁化率与压力的关系, 结果如表1所列. 采用指数型公式

$$y = A_1 e^{-\frac{x}{t_1}} + A_2 e^{-\frac{x}{t_2}} + y_0 \quad (18)$$

拟合表1所列实验数据并进行外延, 可以得到1 GPa以上压力下的磁化率曲线, 结果如图5所示. 这里A₁, A₂, t₁, t₂, y₀均为拟合参数. 当压力增至约2.2 GPa时, 磁化率几乎为零.

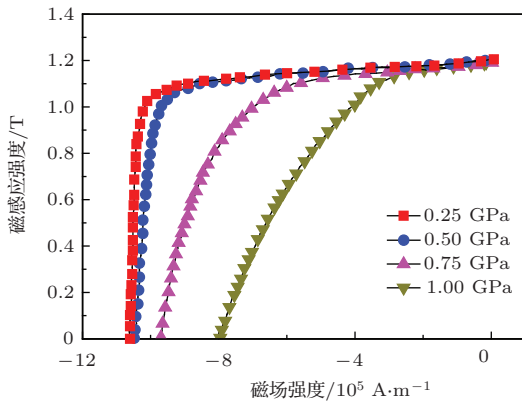


图4 不同压力作用下Nd₂Fe₁₄B的磁滞回线

表1 不同压力下Nd₂Fe₁₄B的磁化率

压力 P/GPa	磁化率 χ	$\partial\chi/\partial P$
0.25	51.95	-2.52 ⁻⁷
0.5	18.11	-6.27 ⁻⁸
0.75	8.83	-2.12 ⁻⁸
1	5.16	-1.02 ⁻⁸

5.3 压力对Nd₂Fe₁₄B居里温度的影响

根据实验所给的Nd₂Fe₁₄B化合物磁矩与温度的依赖关系^[16], 引入应力等效场, 计算了Nd₂Fe₁₄B在不同压力下的热磁曲线, 结果如图6所示. 从图6可以看出, 随着压力的增加, Nd₂Fe₁₄B磁化强度M的下降速率逐渐增大, Nd₂Fe₁₄B的居里温度逐渐向低温区转移. 根据图6可得到各压力下Nd₂Fe₁₄B的居里温度, 结果列于表2. 这里

T_C 为居里温度, $\frac{dT_C}{dP}$ 为居里温度变化率. 由表2可知: 当压力从0 GPa增加到1.15 GPa时, 居里温度下降了292 K; 0 GPa时计算得到的居里温度与文献^[16]给出的实验结果(588 K)相一致.

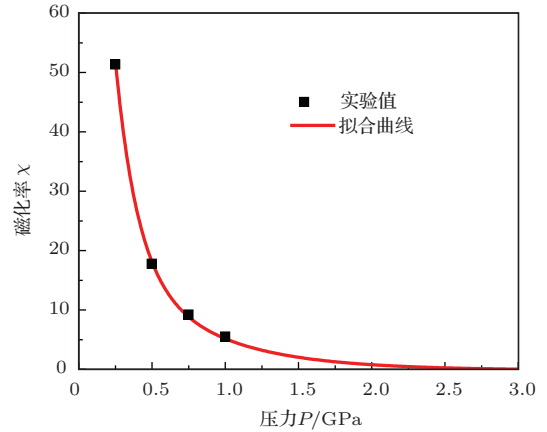


图5 磁化率随压力的变化曲线

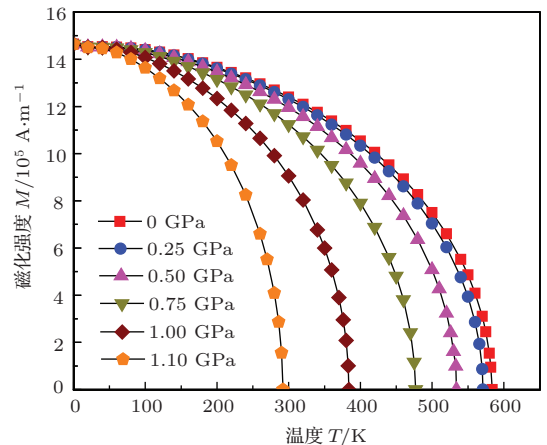


图6 不同压力作用下Nd₂Fe₁₄B的热磁曲线

表2 不同压力下Nd₂Fe₁₄B的居里温度

P/GPa	T _C /K	$\frac{dT_C}{dP}/K \cdot Pa^{-1}$
0	584	-52 × 10 ⁻⁸
0.25	571	-100 × 10 ⁻⁷
0.50	534	-188 × 10 ⁻⁷
0.75	477	-300 × 10 ⁻⁷
1.00	384	-493 × 10 ⁻⁷
1.15	292	-613 × 10 ⁻⁷

图7为Nd₂Fe₁₄B的居里温度T_C随压力P的变化曲线. 从图7可以看出: 在无外力作用时, Nd₂Fe₁₄B的居里温度的计算值为584 K; 当存在外加压力时, 居里温度会随着压力的增大而减小,

且下降速率逐渐加快. 在0.25 GPa压力作用下, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的居里温度降为571 K, 与无外力作用情况相比, 仅下降了13 K. 这说明在低于0.25 GPa的压力范围内, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的居里温度受压力的影响较小. 当压力高于0.25 GPa后, 居里温度迅速下降. 由此可知, 外加压力使磁体的工作温度向低温区转移, 居里温度的下降意味着磁体的工作温度区域变窄, 从而使铁磁-顺磁相变更容易发生.

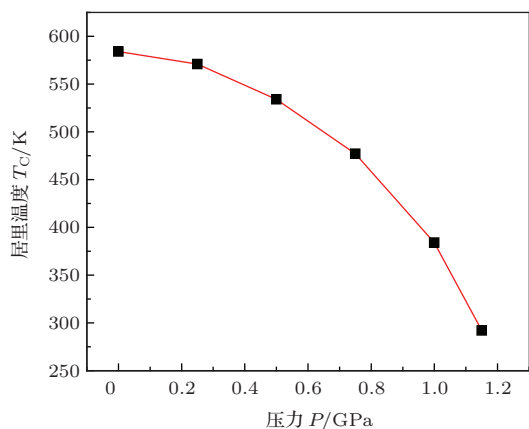


图7 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的居里温度随压力的变化曲线

事实上, 原子磁矩间的磁交换作用能的大小直接决定磁性材料的居里温度. 而分子场实际上是电子间交换作用的等效场, 因此居里温度的大小取决于磁性材料内部分子场的强弱. 当压力低于0.25 GPa时, 较低的压力还不足以对 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 内部的分子场产生影响, 进而表现为居里温度的变化很小. 当压力高于0.25 GPa时, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 内部点阵逐渐被压缩, 各原子间距离逐渐减小, 压力对分子场的影响愈来愈大, 从而表现为居里温度的迅速下降.

5.4 压力对 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 磁化强度的影响

图8为计算得到的在298—500 K温度范围内 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的磁化强度 M 与压力 P 的关系曲线. 从图8可以看出, 随着温度的升高, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的饱和磁化强度逐渐降低, 且临界去磁压力 P_c 也同时降低. 当温度从298 K增加到500 K时, 临界去磁压力 P_c 下降了0.483 GPa. 室温下当压力为0 GPa时, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的饱和磁化强度为 1.24×10^6 A/m, 与文献[17]所得数值(1.28×10^6 A/m)接近. 随着压力的增加, 磁化强度不断下降, 且下降速率逐渐增大, 并在1.142 GPa时降为零. 因此, 在室温

下, 若使 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 磁体完全去磁, 加载压力需达到1.142 GPa, 即在1.142 GPa压力下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的铁磁-顺磁相转变温度为298 K.

图9为298—500 K温度范围内 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的临界去磁压力 P_c 随温度 T 的变化曲线, 在该温度范围内, 临界去磁压力与温度呈近似线性下降规律. 确切地说, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 发生铁磁-顺磁相变的温度应等于样品的初始温度与冲击波引起的温升之和. 由图4可知, 当冲击压力达3.3 GPa时, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 内部的冲击波阵面处温度 $T = 333$ K. 而 $T = 333$ K所对应的临界去磁压力 P_c 仅为1.11 GPa. 因此, 本文实验中的压力范围足以使 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 完全去磁, 这与文献[18]所得结果相一致.

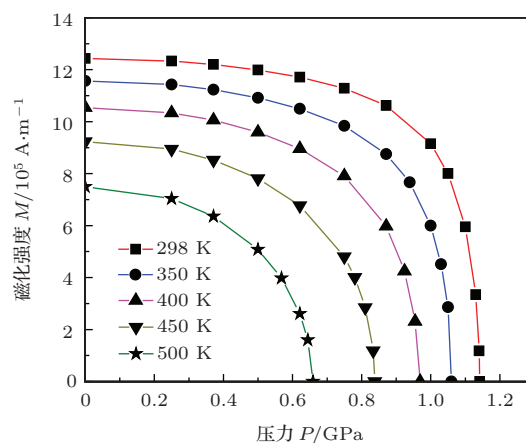


图8 不同温度下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的磁化强度与压力的关系曲线

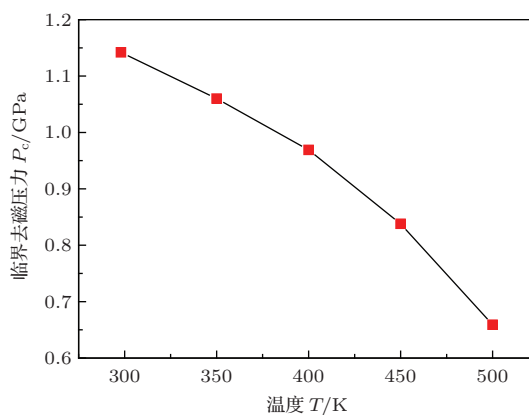


图9 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 临界去磁压力随温度的变化曲线

6 结 论

采用改进的双亚点阵分子场理论模型, 本文描述了冲击波压缩下 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 化合物的磁性转变机理, 并计算了 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 的磁化强度与压力的关

系以及压力对Nd₂Fe₁₄B居里温度的影响. 计算结果表明: 磁化强度随着压力的增加而不断下降, 且下降速率逐渐增大; 随着温度的升高, 临界去磁压力不断降低; 压力使Nd₂Fe₁₄B磁化强度的下降速率逐渐增大, Nd₂Fe₁₄B的居里温度逐渐向低温区转移, 从而使铁磁-顺磁相变更容易发生. 根据冲击加载实验得到了在3.3—7.2 GPa压力范围内Nd₂Fe₁₄B的冲击温度曲线, 当冲击压力由3.3 GPa增至7.2 GPa时, 温升仅为24 K, Nd₂Fe₁₄B在室温下的临界去磁压力为1.142 GPa.

参考文献

- [1] Herbst J F, Croat J J 1982 *J. Appl. Phys.* **53** 4304
- [2] Zhang Z W, Zhang X M, Ren S W, Han L P, Ni Z C, Liu Z Y 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **248** 158
- [3] Zhang X M, Huang R W, Zhang Z W 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **241** 131
- [4] Zhang Z W, Huang R W 1992 *J. Alloys Compd.* **185** 363
- [5] Ren S W, Zhang Z W, Liu Y 1995 *J. Magn. Magn. Mater.* **139** 175
- [6] Hao Y M 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 444
- [7] Wang X G, Pan S H, Yang G Z 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 132
- [8] Guo G H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 313 (in Chinese) [郭光华 2001 物理学报 **50** 313]
- [9] Prasongkit J, Tang I M 2004 *J. Magn. Magn. Mater.* **284** 376
- [10] Wang W, Xu H J, Xu X M, Zhang Y J, Li F 2013 *J. Magn. Magn. Mater.* **331** 225
- [11] Hu T Li, Wang X, Han B, Li Y, Huang F X, Zhou Q, Zhang T 2013 *Chin. Phys. B* **22** 120701
- [12] Zhang B P, Zhang Q M, Huang F L 2001 *Theory of Detonation Physics* (Beijing: Weapon Industry Press) p402 (in Chinese) [张宝平, 张庆明, 黄风雷 2001 爆轰物理学 (北京: 兵器工业出版社) 第402页]
- [13] Kaminski D A, Jiles D C, Biner S B, Sablik M J 1992 *J. Magn. Magn. Mater.* **104** 382
- [14] Bozorth R M 1951 *Ferromagnetism* (New York: D. Van Nostrand) p610
- [15] Wang H J 2007 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Central Iron and Steel Research Institute) (in Chinese) [王会杰 2007 博士学位论文 (北京: 钢铁研究总院)]
- [16] Hiroswawa S, Matsuura Y, Yamamoto H, Fujimura S, Sagawa M 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 873
- [17] Zhou S Z, Dong Q F 2004 *Supermagnets: Rare-earth and Iron System Permanent Magnet* (Beijing: Metallurgical Industry Press) p7 (in Chinese) [周寿增, 董清飞 2004 超强永磁体—稀土铁系永磁材料 (北京: 冶金工业出版社) 第7页]
- [18] Li Y F, Zhu M G, Li W Zhou D, Lu F Chen L, Wu J Y, Qi Y, Du A 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 097501

Shock induced $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ magnetic transition based on molecular field theory analysis*

Lu Feng Chen Lang[†] Feng Chang-Gen

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, School of Mechanical Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 19 March 2014; revised manuscript received 22 April 2014)

Abstract

According to the shock wave experiment on the $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ ferromagnet, the relationship between pressure and temperature on the shock front is calculated in a pressure range from 3.3 GPa to 7.2 GPa. In order to analyze the magnetic transition mechanism of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ under different temperatures and applied pressures, the equivalent pressure field is introduced to improve the two-sublattice model based on the molecular field theory. The pressure dependence of magnetostriction coefficient, susceptibility, magnetization, and Curie temperature of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ are calculated. The criteria of the ferromagnetic-paramagnetic phase transition occurring in $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ at different temperatures and pressures are obtained. The results indicate that the Curie temperature of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ decreases as pressure increases. The Curie temperature reduces from 584 K at 0 GPa to 298 K at 1.142 GPa. With the increasing of pressure, the magnetization of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ declines. The critical demagnetization pressure of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ also decreases with the increasing of temperature. In a pressure region from 3.3 GPa to 7.2 GPa, there appears the pressure induced ferromagnetic-paramagnetic phase transition of $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

Keywords: ferromagnetic-paramagnetic phase transition, Curie temperature, molecular field theory, $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$

PACS: 75.10.-b, 75.30.Cr, 75.30.Kz, 77.80.B-

DOI: [10.7498/aps.63.167501](https://doi.org/10.7498/aps.63.167501)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11072036).

[†] Corresponding author. E-mail: chenlang@bit.edu.cn