

磁性金属材料中交换耦合作用和自旋波的研究

郑勇林 卢孟春 郭红霞 包秀丽

Research of spin wave function and exchange coupling interactions in metal magnetic materials

Zheng Yong-Lin Lu Meng-Chun Guo Hong-Xia Bao Xiu-Li

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 177501 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.177501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.177501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维扩展离子 Hubbard 模型的相图研究

Phase diagram of the one-dimensional extended ionic Hubbard model

物理学报.2015, 64(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.107101>

硅基二氧化钒相变薄膜电学特性研究

Researches on the electrical properties of vanadium oxide thin films on Si substrates

物理学报.2015, 64(1): 017102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017102>

在半导体-金属相变温度附近氧化钒 $\square \wedge$ 度 \square 灾实囊斐 1 潤

Abnormal variation of optical properties of vanadium oxide thin film at semiconductor-metal transition

物理学报.2014, 63(10): 107104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.107104>

$\text{BiFeO}_3/\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ 磁性双层膜中的交换偏置及其热稳定性研究

Exchange bias in $\text{BiFeO}_3/\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ magnetic films and its thermal stability

物理学报.2013, 62(9): 097501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.097501>

CoFe_2O_4 和 MnFe_2O_4 纳米复合介质的制备及其磁性研究

Synthesis and magnetic properties of CoFe_2O_4 and MnFe_2O_4 nano composites

物理学报.2012, 61(20): 207502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.207502>

磁性金属材料中交换耦合作用和自旋波的研究*

郑勇林^{1)2)†} 卢孟春²⁾ 郭红霞¹⁾ 包秀丽²⁾

1) (成都大学电子信息工程学院, 成都 610106)

2) (长江师范学院凝聚态物理研究所, 重庆 408100)

(2015年2月28日收到; 2015年4月26日收到修改稿)

基于交换耦合理论通常使用的近似分析的一般原理, 严格的分析了没有特定假设情况下的磁序范围或有关磁化密度的形式, 及在任何近似下提出一种关于耦合参数的计算方法. 并结合铁磁系统 (磁性金属材料 Gd, Fe, Ni), 定量的讨论了这种关系的适用范围, 也对自旋波和交换耦合进行了相关分析. 分析表明: 对于近邻磁性原子之间的交换耦合的计算以及在有限波矢量情况下对自旋波谱的计算都得到较为有意义的改进. 提出的交换耦合近似及自旋波谱的关系, 应用于铁磁系统时对近邻原子之间相互作用能给出较好的描述, 或对任何磁体中非完全局域磁化的自旋波谱较大波矢部分给出较合理的描述. 从磁性理论来看, 按照本文模型应用于磁学系统计算得到的结果与实验结果较好的符合.

关键词: 磁性金属材料, 交换耦合作用, 自旋波函数, Fe, Ni

PACS: 75.30.Et, 75.30.-m, 71.30.+h, 75.40.Gb

DOI: 10.7498/aps.64.177501

1 引言

在自旋电子学中, 电子不仅是电荷的载体, 而且还是自旋的载体. 这一新的自由度的加入, 大大丰富了微电子学的研究内容, 为大量新型器件的诞生提供了新的源泉^[1]. Yang 等^[2]用平面波扩展方法, 对不同形状的方形阵列的二维磁量子晶体的自旋波带结构也进行了计算, 其计算结果将有益于磁量子晶体隙宽设计. 交换耦合是磁性铁磁材料中重要的基本相互作用理论. 应用该相互作用的知识容易对铁磁材料磁性作一定的定量描述和提供不同模型的适应性临界实验. 例如文献^[3]运用电子自旋的输运理论, 研究了铁磁非铁磁夹层中电子自旋波的传输, 发现在系统中电子自旋波函数可表示为无限周期系统中转换矩阵特征向量的叠加或类布洛赫 (Bloch) 函数, 得到了一定的与实验较符合的理论. 但是在磁致电阻、巨磁电阻效应及其器件、磁输运现象的研究中还需要更丰富的原子或原子层之间的有效交换耦合的知识^[4]. 所以, 从基本

原理和应用的观点来说这些耦合参量的可靠计算就尤其重要. 长期以来, 用平均场理论来处理铁磁体相变问题, 其结果是仅可对临界现象作定性解释, 定量上却和实验事实明显的不符, 例如对二维伊辛模型所作的严格解给出了与平均场理论不一致的结果, 使人们对平均场理论的正确性产生了怀疑. 当然在总结了实验事实的基础上, 又有很多科学家提出了标度律、重整化群等方法, 从微观上计算了各种模型的临界指数, 得到了与实验相符合的结果^[5]. 然而, 上述大多数模型都仅仅针对局域自旋系统而提出. 这对有效交换场 (局域近似) 处理原子磁化是直接有效的. 但在实际的非平衡态情况下, 由于局域和巡游状态的自由度同时存在使这些方向总是不同的. 事实上, 在真实的磁体中确实涉及到局域和巡游自由度同时存在的情况. 因此, 在许多磁性金属中确定原子磁化产生不同磁序的计算公式被提出^[6-11]. 但在这些计算模型中就有提出关于限制自由度非局域的假设, 以确定影响自旋间的相关函数和相关的动力学和热性质. 例如, 在

* 国家自然科学基金 (批准号: 11205022) 和重庆市教委科学技术研究项目 (批准号: KJ061305, KJ081307) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhyong303@163.com

参考文献 [7] 中应用局域近似方法, 直接提出了非磁体的强短程序概念. 令人满意的是该理论就一般而言, 在任何极限温度下, 短程序和长程序这两种情况分布基本还是一致的, 然而, 微扰理论也仅只能适用于较低温度时自旋波强度的计算.

鉴于此, 本文从交换耦合理论所使用的近似临界分析的一般原理出发, 进一步严格的分析了没有特定假设时的磁序范围或有关磁化密度的形式, 并在任何近似下提出一种关于耦合参数的计算方法. 并结合铁磁系统 (磁性金属材料 Gd, Fe, Ni) 中自旋波和交换耦合进行相关的分析.

2 交换耦合理论

对于由 N 个磁性原子组成的铁磁系统, 应用量子化方法可以推导出海森伯 (Heisenberg) 电子之间的交换作用关系为 [5]

$$J_{nn'} = \int f_{n'}^*(r') f_{n'}(r') f_n^*(r) f_n(r) \times \left[\frac{e^2}{|r-r'|} - \frac{e^2}{|R-r'|} - \frac{e^2}{|R'-r|} \right] dr dr', \quad (1)$$

式中 $f_n(r)$ 为轨道本征态, R 和 r 及 R' 和 r' 分别为第 n 个原子和第 n' 个原子的坐标位置和相应的空间坐标.

在非均匀磁化介质中, 这种交换在不同点总能量 (E) 依赖于磁化强度矢量 $\mathbf{m}(r)$ 的相对取向关系. 磁状态的稳定与磁化密度的变化关系由总能量对磁化强度的二阶导数所决定 [12]

$$J_{\alpha\beta}(r, r') = - \frac{\delta^2 E}{\delta m_\alpha(r) \delta m_\beta(r')} \Big|_{m=m_0}, \quad (2)$$

这里 $\alpha = x, y, z$, $\beta = x', y', z'$, m_0 是任何定态的磁化强度. 通常这个交换和海森伯模型参量不同, (1) 式是基于单电子近似方法来讨论多原子系统的交换作用, 而且假设每个原子上只有一个对磁性有贡献的电子, 从而在这基础上写出哈密顿量. 这种方法本质上与局域电子理论或巡游电子理论有相似之处, 然而用上述两种理论计算稠密电子系统的磁有序问题时仍然存在着一定问题. 譬如, 对局域电子理论来说, 当考虑两个原子之间电子交换作用时, 必须要求近邻原子的电子波函数有明显的重叠, 但这样又破坏了局域电子模型的精度. 对于巡游电子理论来说, 在一对自旋平行的电子中必须有

一个占据较高的动动态, 这就要求交换作用的大小高于所增加的动能, 这恰好是关联效应变得明显的情形. 对于 (2) 式参数 $J_{\alpha\beta}(r, r')$ 它仅依赖磁体的结构, 且不完全涉及到不同磁相之间总能量的差异, 而且还避开了只有一个电子对磁性有贡献的假设. $J_{\alpha\beta}$ 的数量为 $|J_{\alpha\beta}|$ 的模, 因而 (2) 式的定义不是唯一的.

由于对 $J_{\alpha\beta}(r, r')$ 的计算有助于对自旋密度变化的认识. 我们知道, 外部磁场 \mathbf{B}_{ext} 是能引起实际物理分布变化的. 所以, 这里引入一种线性共振和动态磁化率的概念, 并对此作相应的计算, 在非均匀磁化介质的非局域区间, 外部磁场与磁化强度变化的关系为

$$\delta \mathbf{m} = \hat{\chi} \delta \mathbf{B}_{\text{ext}}, \quad (3)$$

式中 $\hat{\chi}$ 是提出的非局域动态磁化率 [6,7]

$$\hat{\chi} = \frac{\delta \mathbf{m}}{\delta \mathbf{B}_{\text{ext}}} = -\hat{\chi} \frac{\delta^2 E}{\delta m_\alpha(r) \delta m_\beta(r')} \hat{\chi} = \hat{\chi} \hat{J}(r, r') \hat{\chi}, \quad (4)$$

式中 $\hat{J} = \hat{\chi}^{-1}$, 也是有效交换的定义. 从磁化率的描述来看, 这就是海森堡模型中引用的反转磁化率关系, 亦即有效交换等于反转磁化率. 下面研究该有效交换的定义和普遍应用之间的关系. 同时也相应的对绝热自旋波谱进行分析.

为了进一步的理解有效交换的定义这里先讨论交换耦合对频率的依赖, 并引入下面关系:

$$\int \hat{J}(r, r', \omega) \hat{\chi}(r, r', \omega) dr = \int \delta(r-r') I^0(r, \omega) dr = I^0(r', \omega), \quad (5)$$

这里参数 $\hat{J}(r, r', \omega)$ 是包含所有增强效应的全部交换, 而等式右端 $I^0(r', \omega)$ 反映 r 在较小区域时, 对自旋交换作用不做精确细节的苛求, 而注重一个区域内的积分值, 通过引入的 $\delta(r-r')$ 函数, 选择出 $I^0(r, \omega)$ 的单个值, 从而解决了在源点处对交换作用的描述. 注意, 在文献 [5, 10, 11] 中已分析过在长波近似中 $J(q, \omega)$ (其中 q 为波矢) 的表达式, 然而在考虑自旋波之间 (例如电子之间) 的相互作用的情况下, 随着温度的上升, 自旋波逐渐的增多, 自旋波相互作用的机会也逐渐增加, 在这时瞬时和任何动态磁化率的精确计算就不可能发生, 因而真正实际有用的 $\hat{J}(r, r', \omega)$ 就要求确定某一假设, 并要加以修正.

对电子相互作用引起的动态磁化率的反转, 这里应用线性共振动能将总的交换作用分解为

$$J(r, r', \omega) = J^0(r, r', \omega) - I_{XC}(r, r', \omega), \quad (6)$$

这里 $J^0(r, r', \omega)$ 为无屏蔽交换耦合 (例如, 从 Kohn-Sham 波函数获得), 但交换函数 $I_{XC}(r, r', \omega)$ 是与磁感应强度

$$\mathbf{B}_{XC}(r', \omega) = \int I_{XC}(r, r', \omega) \mathbf{m}(r', \omega) dr' \quad (7)$$

关联的相关函数.

这样方程 (6) 就给出一种非常方便的计算交换耦合参数增加效应的方法. 从多体理论来说, 当 I_{XC} 的显式不存在时, 方程 (6) 就被认为是依赖于频率的斯特恩 (Stoner) 参数 $I_{XC}(r, r', \omega)$. 该关系实际上是仅当完美晶体的 $J = J(r, r', \omega)$ 在转化不变 (为恒定量) 和满足假设条件

$$I_{XC}(r, r', \omega) = I_{XC}(r, r', 0) = I \quad (8)$$

时才成立. 这样自旋波存在的条件就可记为

$$J^0(q, \omega) = I_{XC}. \quad (9)$$

需要强调的是, 对于实际材料的计算, 方程 (9) 适合处理满带结构和要求有全部的基本设置. 下面考虑铁磁情形和限制性地分析涉及到 χ^\pm 成分的效应, 对于任意的磁有序, 磁化率矩阵 $\hat{\chi}(r, r', \omega)$ 是一个 4×4 阵列, 并且其中的 χ^\pm 成分是不易从 χ^{zz} 和电荷组分中分离.

为了说明参数 J 是如何进入自旋动力学方程, 考虑方程 (6) 的绝热限制, 在这种情况下, 下面密度泛函转矩方程有效

$$\frac{d\mathbf{m}(r, t)}{dt} = \gamma \mathbf{m}(r, t) \times \mathbf{B}(r, t), \quad (10)$$

式中 $\mathbf{B}(r, t)$ 是电子自旋作用于 r 点处的总激发场, γ 是回磁比. 在方程 (10) 中 $\mathbf{m}(r, t)$ 是非独立成分, 因为与关系 $\frac{\mathbf{m} \cdot d\mathbf{m}}{dt} = 0$ 相关联.

绝热自旋动力学方程 (6) 能通过类似于刚性自旋近似情况下的线性运动方程来解释几个简单的磁序情形 [10, 13]. 例如, 对于铁磁 (FM) 系统, 有

$$\hat{\omega}_q = m [\chi_q^{-1} K_q - \chi_0^{-1}], \quad (11)$$

这里 χ_q 是在周期性系统的情况下 “无屏蔽” 静态磁化率 $\chi(r - r', \omega = 0)$ 的傅里叶变换. K_q 是一个考虑了不同自旋方向的波函数空间梯度差异后的一个 “动力学梯度” 矩阵. 在非局域不使用刚性自旋近似对磁扰动的情形下, 可得到绝热自旋波光谱的

结果. 对于更复杂的磁结构 (如, 螺旋形状等) 可使用旋转坐标系而获得相应分布律. 上面得到的结果是在假设没有自旋波衰减情形时而得到的绝热自旋动力学方程. 否则, 这些方程为线性关系且是精确的, 并在长波和短波尺度范畴是相等的. 如果相对源的磁场也被包括其中, 则在 (11) 式中可以增加自由运动 (整个晶体磁化旋转运动) 的能量.

对 (11) 式的分析, 在密度泛函理论中一般应用下式 [8]:

$$\omega_q^l = mI[\chi_0 - \chi_q]I. \quad (12)$$

假设比值

$$\Delta = \text{Tr} \hat{\Delta} = \text{Tr}(\chi_q - \chi_0)/\chi_0 \approx \omega_q^l/mI, \quad (13)$$

在长波近似下较小, 且 “动力学梯度” 矩阵 $K_q = 1$, 即不同自旋方向有效带宽相等. 这样, 在参数 Δ 附近展开方程 (11), 从而得到期望的结果

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_q &= m(\chi_q^{-1} - \chi_0^{-1}) = m\chi_0^{-1} \hat{\Delta} (1 - \hat{\Delta})^{-1} \\ &= \hat{\omega}_q^l (1 - \hat{\omega}_q^l (m\hat{I})^{-1})^{-1} \approx m\chi_0^{-1} (\chi_0 - \chi_q) \chi_0^{-1} \\ &= m(J_0^l - J_q^l) \end{aligned} \quad (14)$$

或

$$\begin{aligned} J_q &= J_0 [1 + \hat{\Delta} (1 - \hat{\Delta})^{-1}] \\ &= J_0 [1 + \hat{\Delta} + \hat{\Delta}^2 + \dots]. \end{aligned} \quad (15)$$

这里磁化率具有矩阵结构, 并应用 (2), (3) 和 (4) 式则有

$$\begin{aligned} J_q^l &= J_0 (1 + \hat{\Delta}) = \chi_0^{-1} \chi_q \chi_0^{-1} = I \chi_q I \\ &= -I \frac{\partial^2 E}{\partial^2 B_{\text{tot}}} I, \end{aligned} \quad (16)$$

该式是一个在局域 (长波) 近似下的交换参数矩阵. 方程 (16) 与参考文献 [6, 7] 中所介绍的一般公认的耦合参数一致. 当然在具体的使用中还将做不同的修正. 至此我们已导出了方程 (11) 和关系 (14) 或 (15), 这也正是本文所期望得到的结果. 下面我们应用这个结论和多散射技术对 Fe, Ni 和 Gd 的耦合参数和绝热自旋波谱进行计算.

3 应用分析及讨论

从计算的角度考虑, 可有两种选择方法来进行我们相关的计算. 第一种方法是计算包含外部场在内的系统的总能量, 第二种是使用一种不需要自恰和总能量计算的所谓 “局域力定理” 方

法. 在参考文献[14]中对磁扰动的计算是用所谓的“局域力定理”方法; 多散射技术常用于磁化率 $\chi = -\partial^2 E / \partial B_{XC}^2$ 的计算, 这里 B_{XC} 的角色是属于某位置点散射矩阵 t^{-1} 的磁化强度. 需要强调的是力定理方法能够用于磁化率 χ^{+-} 和有效交换 $J^{+-} = -\partial^2 E / \partial m^2$ 两者的计算, 是不用对原始定理作任何修正的. 这似乎也满意的说明线性共振理论的结果[13]. 然而, 力定理方法由于仅考虑了孤立系统(或说没有自旋间的相互作用), 从而导致只能在极低温情况下合理的解释有关磁有序等概念.

以前通常应用弱增强的假设, 譬如方程(6)就是例子, 这就是自旋波谱近似的原因. 因为如果我们假设 $I_{XC}(q) = I$, 那么等式 $J(q) - J(0) = J^0(q) - J^0(0)$ 是有效的. 因而, 元激发光谱不受到交换相关增强的影响, 所以(16)式的定义主要涉及到几种强近似. 譬如, 刚性自旋近似、自旋波的最小散射比拟为有效交换劈裂(原子限制范畴)、以及 $I_{XC}(q, \omega)$ 较小的散射等.

从形式上看, 刚性自旋近似是直接的应用了局域力定理方法. 而力定理精确公式包含了总能量的初始变化, 在刚性自旋近似中其相应的总能量对磁矩的一阶导数为

$$\frac{\delta E}{\delta m(R_i + r)} \approx \frac{\partial E}{\partial m_i}, \quad (17)$$

式中 i 是原子位置指标, 且对应较大 q 矢量情形, 在这里已忽略了梯度项.

事实上, 在布里渊区确定的自由度与较大 q 矢量的情况下, 二次近似 $(\chi_0 - \chi_q)\chi_0^{-1} \ll 1$ 同样发生移动. 类似的, 在现代的动态平均场技术中, 已经采用了位置近似[5]、自洽 GW 方案[15]和相干势近似[6]等方法. 这种限制会影响磁体的自旋自旋相关函数和动态性能及热性能. 由于一般情况下很容易地从方程(11)得到自旋自旋相关函数, 这样就可以将长波近似用于较难的自旋波计算.

$I_{XC}(q)$ 项通常是短程的. 在实空间, 若 χ_q 的 Fourier 变换为 χ_{ij} , 且在场点的磁化率为 χ_{ii} , 则 $\chi_{ij}/\chi_{ii} \ll 1$ 时与相应的最小临界相一致, 因此局域近似 $I_{XC}(q) = I$ 仅可影响近邻原子之间的交换.

对具体磁系统的定量讨论中, 是用多散射理论完成这种计算而得到无屏蔽的“ J_q ”, 这个理论中的关键方程是[10]

$$\tau(\varepsilon) = [P(\varepsilon) - S]^{-1}, \quad (18)$$

这里 $\tau(\varepsilon)$ 是散射轨道算符, $P(\varepsilon)$ 是场点反转散射矩

阵, S 是构造矩阵, $\tau(\varepsilon)$, $P(\varepsilon)$ 可以分别记为

$$\begin{aligned} \tau(\varepsilon) &= T_0(\varepsilon) + T(\varepsilon)\sigma, \\ P(\varepsilon) &= p(\varepsilon) + p(\varepsilon)\sigma. \end{aligned} \quad (19)$$

这样相对于扰动磁场在位置 i 中的偏差使总能量的变化可以在静态线性响应中呈现, 且为

$$\delta E = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \text{Im} \text{Tr}_L \{ \delta p_0 \mathbf{T}_{00} \}, \quad (20)$$

式中 \mathbf{T}_{00} 是在位置 0 处的全散射矩阵的复合矢量元素. 应用文献[10]中引入的 τ 矩阵的加法定则, 得到下列无屏蔽的交换耦合关系

$$\begin{aligned} J_q^{+-} &= \frac{1}{4\pi} \int_{\varepsilon_F} d\varepsilon \text{Im} (T^\uparrow - T^\downarrow)_{00} \\ &\quad \times \left[\int dk T_K^\uparrow T_{K+q}^\downarrow \right]^{-1} (T^\uparrow - T^\downarrow)_{00} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\varepsilon_F} d\varepsilon \text{Im} (T^\uparrow - T^\downarrow)_{00} [\chi]_q^{-1} \\ &\quad \times (T^\uparrow - T^\downarrow)_{00}. \end{aligned} \quad (21)$$

在磁体中, 表达式(21)恰当的考虑了不同自旋不同能量的分布, 所以方程(20)能直接在自旋为螺旋序列或非共线性情形下所用, 亦即, 在这种情况下将构造一般的 4×4 转置矩阵 χ . 对磁体自旋局域的任意程度, 方程式(21)似乎也长波近似的一般结果一致. 接下来我们应用局域密度近似和线性糕模轨道技术, 在原子球近似下根据(21)式计算有效交换. 因自旋波谱为

$$\omega_q = [J_q - J_0]/m, \quad (22)$$

及局域模型的自旋波谱为

$$\omega_q^l = [J_0^l - J_q^l]/m, \quad (23)$$

与长波一样, J_q^l 由参考文献[14, 16]确定. 在多散射技术中方程(21)类似方程(4)是静态的. 方程(21)的矩阵形式和来自方程(15)交换矩阵的固有对称属性是这种计算的基本成分. $\hat{\omega}_q^0$ 仅就 s, p 和 d 轨道的转置的计算与 χ_q^{-1} 比较是更稳定的. 但它仍然是可用于有效紧束缚线性糕模轨道的哈密顿函数. 通过对 Gd, Ni 和 Fe 三种铁磁 (FM) 系统在同一固定点的局域矩的计算, 有不完全相同的结果. 对于 Gd 有较高的局域矩和较小的自旋波分布, 这个近似结论是基于满足如下假设:

$$\Delta = \text{Tr}(\chi_q - \chi_0)\chi_0^{-1} \ll 1 \quad (24)$$

而得到. 实际上在区域边界 $\Delta < 0.01$ 情形时, 观察得到较小的自旋波分布. 然而, 在对 Ni 的观察

中, 适当的局域磁矩, 就有大的自旋波散射, 当 Ni 在 $\Delta \approx 0.6$ 时自旋波散射情况就消失了. 所以可以利用方程 (14) 相应矩阵估计证明在较大 q 时自旋波谱的较强增加. Fe 的情况处于 Gd 和 Ni 的之间, Δ 的最大值是 0.30. 这个结果表明, 先前在对自旋的螺旋形计算中, 使用局域磁矩代替相互交换关系场, 使在有限 q 时的散射被低估了. 然而, 在小 q 区域, 应用 (14) 式计算的结果又是完全正确的, 正如上面结果所见.

在实空间, 原子之间有效交换耦合的分析是很重要的. 这里的结果暗示在 Fe 和 Ni 中, 主要的贡献来自于第一近邻交换的重正化, 所以在 BCC/Fe 中, 它是增强的形式, 其有效交换耦合为 $J_{01}^I = 16.6$ meV 到 $J_{01}^I = 19.4$ meV, 然而, 在 FCC/Ni 中有效交换耦合为 $J_{01}^I = 2.7$ meV 到 $J_{01}^I = 8.3$ meV. 正是这一显著特点, 使我们在不同的金属磁体中, 可应用长波近似局域参数 $(\chi_q - \chi_0)\chi_0^{-1}$ 明显移动的结果来作为指示器. 例如在 Fe 和 Ni 中, 运用长波平均场的变化估算预测铁磁系统 (FM) Ni 中的临界温度 T_c 为 300—350 K, 而这个结果在参考文献 [10, 15, 17] 中计算的这个临界温度为 340 K, 而实际实验中的结果是 630 K.

上述结果的偏差, 可从以下几方面说明, 首先, 长波近似对于像 Fe 一样的局域系统是合适的, 在此种情况下, 最近邻 J_{01} 相应的变化相对的小 (T_c 相应的增加比预期的小). 其次对铁磁系统 (FM) Ni 更相当于一个巡游系统和一个任意的局域近似 (尤其是长波近似), 在这种情况下就可能产生大的错误. 因而对于 Ni 在 J_{10} 较大时, 通常用平均场方法, 即任何其他非短程序假设的近似是不适用于这种巡游系统的, 如果用于对温度的预言将有很高的 T_c (至少高于 100 K). 这样的数字计算也与局域密度近似方法计算的结果不一致, 因为在 FCC/Ni 中不允许 T_c 高于 500—540 K (使用梯度修正计算是 600—640 K), 所以数字计算仅只能考虑为平均场 (MF) 近似的非应用的一种预测.

综上所述, 上面方程 (21) 形式的趋向是通过约束短波分布提升 T_c 从而使短程序增加. 因为在平均场 (MF) 近似中, 这个估算已经包含了经典的所有波长 (除了纵向) 及预期 Ni 的最终 T_c 是很高. 因此, 本文在这里提出了没有任何关于磁化密度和磁序假设的有效交换参数计算的“有限温度磁学理论模型”. 这个模型在实际的应用中有其相应的地位及实际应用价值. 譬如, 在 3D 金属中对有限温度

下巡游磁学系统的可靠描述有重要意义.

4 结 论

综上所述, 本文提出的没有任何关于磁化密度和磁序假设的有效交换参数计算的方法应用在铁磁 (Fe, Ni, Gd) 系统上显示, 对于近邻磁性原子之间的交换耦合的计算以及在有限波矢量情况下对自旋波光谱的计算都得到较为有意义的改进. 因为, 在这之前对 FCC/Ni 的长波近似值的计算是错误的. 从当前的磁性理论来看, 本文建立的模型且应用于磁学系统计算得到的结果与实验结果较一致, 譬如: 在巡游磁体中对 T_c 的正确描述; 在 $T = 0$ K 时对最近邻原子间的交换作用参数 J_{ij} 的确定; 在有限的温度, 对 Fe 尤其是在 Gd 中的具体应用得到了一种类似于局域模式的结果, 这些结果正是预期的. 因此, 本文提出的交换耦合近似及自旋波谱关系 ((11) 式、(15) 式和 (21) 式), 在应用于铁磁系统中时将显著的改进对近邻原子之间相互作用的描述, 或将显著改善任何磁体中与非完全局域磁化中自旋波谱较大 q 部分的描述. 我们期望这种形式的应用在有限温度和在强磁性短程有序系统中越来越体现它的重要价值.

参考文献

- [1] Xing D Y 2005 *Physics* **34** 348 (in Chinese) [邢定钰 2005 物理 **34** 348]
- [2] Yang H, Yun G H, Cao Y J 2014 *Chin. Phys. B* **23** 097501
- [3] Zheng Y L, Wang X X, Ge Z L, Gou H L, Yang G F, Dai S H, Zhu X L, Tian X B 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 227701 (in Chinese) [郑勇林, 王晓茜, 葛泽玲, 郭红力, 严刚峰, 戴松晖, 朱晓玲, 田晓滨 2013 物理学报 **62** 227701]
- [4] Tokura Y, Tomioka Y 1999 *J. Magn. Magn. Mater.* **200** 1
- [5] Jiang S T 1993 *Theory of Ferromagnetic*. (Beijing: Science Press) p202,34,117 (in Chinese) [姜寿亭 1993 铁磁性理论 (北京: 科学出版社) 第 202, 34, 117 页]
- [6] Moriya T 1985 *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, Springer, Berlin, Heidelberg
- [7] Oguchi T, Terakura K, Hamada N 1983 *J. Phys. F* **13** 145
- [8] Korenman V, Murray L J, Prange E R 1977 *Phys. Rev. B* **16** 4032
- [9] Wang S C, Prange E R, Korenman V 1982 *Phys. Rev. B* **25** 5766
- [10] Antropov P V 2001 *D. P. Landau (Ed.), Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XIII* **86** Springer, Berlin, Heidelberg p7

- [11] Antropov P V 2003 *D. P. Landau(Ed.), Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics*, in press
- [12] Cyrot M 1982 (Ed.) *Magnetism of Metals and Alloys* North Holland, Amsterdam
- [13] Antropov P V, Katsnelson I M, Van Schilfgaarde M, Harmon N B, Kusnezov N 1996 *Phys. Rev. B* **54** 1019
- [14] Liechtenstein I A, Katsnelson I M, Gubanov A V 1984 *J. Phys. F* **14** 1125
- [15] Van Schilfgaarde M, Antropov P V 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 4827
- [16] Antropov P V, Katsnelson I M, Liechtenstein I A 1997 *Phys. B* **237-238** 336
- [17] Wang S C, Prange E R, Korenman V 1982 *Phy. Rev. B* **25** 5766

Research of spin wave function and exchange coupling interactions in metal magnetic materials*

Zheng Yong-Lin^{1)2)†} Lu Meng-Chun²⁾ Guo Hong-Xia¹⁾ Bao Xiu-Li²⁾

1) (*Institute of Electronics and Information Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China*)

2) (*Institute of Condensed Matter Physics, Yangtze Normal University, Chongqing 408100, China*)

(Received 28 February 2015; revised manuscript received 26 April 2015)

Abstract

Exchange coupling is one of the most important fundamental interactions in ferromagnetic systems. Understanding of the parameters in this interaction may help describe numerous properties of metal magnetic materials. However, in the localized electron theory or itinerant electron theory there are also certain difficulties when utilizing this approximation method to study magnetic ordering problems for multi-atom systems. In realistic magnets exchange coupling is also related to the coexistence of localized and itinerant degrees of freedom. In this case Heisenberg exchange relationship has some limitations. If the exchange relationship only depends on the structure of the magnet, and is not related to energy differences between the phases, we can better avoid the Heisenberg exchange limits. Based on this, we use the general principle of the exchange coupling theory to analyse the usual approximation, and discuss the opportunity to calculate the parameters of such coupling rigorously without specific assumptions about the range of magnetic order or any approximation about the form of magnetization density. We propose a method for calculating the exchange coupling parameter to any approximation. The range of applicability of the above relation is discussed quantitatively for real magnetic systems (magnetic metal materials Gd, Fe, Ni) and spin waves, and the relevance for the exchange coupling is also analysed. This analysis for metal magnetic system (Fe, Ni and Gd) shows that the most significant improvement is obtained for exchange coupling between nearest magnetic atoms and for spin wave spectrum at finite wave vectors. It can be described by the relationship between the exchange coupling approximation and spin wave spectrum, and also interaction between the nearest neighbor magnetic atoms in ferromagnetic systems; these will give reasonable description to the large wave vectors part of spin wave spectra in any magnet with not fully localized magnetism. This point of view from the magnetism theory is consistent with the experimental results.

Keywords: metal magnetic material, exchange coupling interactions, spin waves function, Fe, Ni

PACS: 75.30.Et, 75.30.-m, 71.30.+h, 75.40.Gb

DOI: 10.7498/aps.64.177501

* Project: 1 Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11205022), and the Science and Technology Foundation of the Education Committee of Chongqing, China(Grant Nos. KJ061305, KJ081307).

† Corresponding author. E-mail: zhyong303@163.com