

关于磁性物质的自旋位形的某些問題*

蒲富恪 鄭庆祺

提 要

本文用 Lyons-Kaplan 的方法, 討論了具有一种磁性离子組成的布拉維点陣的自旋位形在外磁場作用下的变化及磁晶各向异性对它的影响。存在有一个反鉄磁-鉄磁性結構轉变的临界磁場, 外磁場大于临界磁場时一切反鉄磁結構都消失。磁場(小于临界磁場)和各向异性都使自旋位形的簡并部分消失。最后还討論了所得到的自旋位形的稳定性。

1. Villain^[1] 用分子場近似考虑分布于一种布拉維 (Bravais) 点陣上的磁性离子自旋間的相互作用, 由求自由能的最小值得到在給定了諸交換积分的数值后, 在一定温度下的自旋位形 (spin configuration)。这种确定磁結構的方法正如 Villain 所指出的, 其优点在于不用預先人为地假定存在几个次点陣(如 Neel 理論所做的那样)。次点陣的划分是理論的自然結果, 而且可以看到交換积分的数值与磁結構間的关系。尤其是在最近发现的自旋的螺旋形排列的結構, 在这情形下不可能分解成次点陣, Villain 的理論便是唯一可用的办法了。

比 Villain 稍早, Yoshimori^[2] 将 Heisenberg 交換模型的哈密頓量看成是經典的量, 从求基态能量最小的条件, 具体地考虑了具有三种交換积分的正方体心点陣, 第一次提出了自旋的螺旋形位形, 解释了 MnO_2 的中子衍射实验結果。Cooper^[3] 对体心立方点陣考虑了三种交換积分, 得到与 Cr 的实验相符的結果。

最近 Lyons 和 Kaplan^[4] 更进一步地闡明了这种处理方法的特点, 同时将它推广到由几种布拉維点陣穿插迭加而成的复杂的点陣情形, 并具体地应用到正型尖晶石型結構的鉄氧体, 得出 Neel 型次点陣結構(反平行)稳定的条件。

本文采用 Lyons-Kaplan 的处理方法, 考虑在外磁場作用下自旋位形的变化, 以及各向异性对自旋位形的影响。作为初步的結果我們限于討論布拉維点陣的簡單情形。

2. 为了便于和以后討論的結果比較, 我們首先简单地重述一下不加磁場, 沒有磁晶各向异性时一种磁性离子組成的布拉維点陣可能具有的自旋位形^[1], 不过这里是利用 Lyons-Kaplan 方法討論的。

按 Heisenberg 交換模型, 自旋系統的哈密頓量可写成

$$\mathcal{H} = - \sum 2J(f, f') \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'}, \quad (1)$$

其中 $J_{ff'}$ 表示 f 和 f' 格点間的交換积分, \mathbf{S}_f 为 f 格点的自旋。我們将它不看成量子力学算符而看成經典矢量, 这样 \mathcal{H} 直接代表系統的能量。另外为簡單起見, 只考虑一种磁性离子, 这样所有格点自旋的絕對值都是一样的, 即

* 1961 年 9 月 6 日收到

$$S_f^2 = S^2 \quad (2)$$

現在的問題是要求在滿足條件(2)下使能量 \mathcal{H} 最小的自旋 \mathbf{S}_f 的位形。為此,作變換

$$\mathbf{S}_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{f}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

S_f 滿足周期性邊界條件, k 限于在第一個布里淵區內,代入(1)得到

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^*, \quad (4)$$

其中

$$J(\mathbf{k}) = \sum_{f'} J_{(f,f')} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{f}'-\mathbf{f})}. \quad (5)$$

為了求解容易起見,常常將條件(2)對格點 \mathbf{f} 求和得到比(2)較弱的條件:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}}^* = NS^2, \quad (6)$$

利用拉格朗日乘子的方法得到 $S_{\mathbf{k}}$ 必須滿足

$$-2J(\mathbf{k})\mathbf{S}_{\mathbf{k}} - \lambda\mathbf{S}_{\mathbf{k}} = 0, \quad (7)$$

其中 λ 為和 \mathbf{k} 無關的常數。由(7)乘以 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}^*$ 並對 \mathbf{k} 求和,就得到

$$\mathcal{H} = \lambda S^2 N = -2NS^2 J(\mathbf{k}). \quad (8)$$

因此相對於 \mathcal{H} 的最小值乃是 $J(\mathbf{k})$ 的最大值 $J(\mathbf{k}_0)$ 。此時由(7)知,除 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}_0}, \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0}^*$ 外,其他的 $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}$ 都等於零。第 \mathbf{f} 格點的自旋 \mathbf{S}_f 可寫為

$$\mathbf{S}_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \{ \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{f}} + \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0}^* e^{-i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{f}} \}, \quad (9)$$

這樣的解還必須滿足條件(2),亦即

$$S_{\mathbf{k}_0}^2 e^{2i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{f}} + (S_{\mathbf{k}_0}^*)^2 e^{-2i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{f}} + 2\mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0}^* = NS^2, \quad (10)$$

取

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} = (\mathbf{u} - i\mathbf{v})S \frac{\sqrt{N}}{2}$$

其中 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 為兩個實單位矢量,則(10)式成為

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \sin 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = 0, \quad (10')$$

而

$$\mathbf{S}_f = S \{ \mathbf{u} \cos \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} + \mathbf{v} \sin \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} \}, \quad (11)$$

滿足(10')式的有下列幾種情形:

(i) $\mathbf{k}_0 = 0, \mathbf{S}_f = S\mathbf{u}$ 為鐵磁性結構。

(ii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n\pi, \mathbf{S}_f = (-1)^n S\mathbf{u}$ 為反鐵磁結構,相對於 $n =$ 偶數的諸格點組成一組次點陣,相對於 $n =$ 奇數的格點組成另一組次點陣,每組次點陣上的自旋平行排列,不同次點陣上自旋反平行排列。

(iii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n \frac{\pi}{2},$

$$\mathbf{S}_f = \begin{cases} S\mathbf{u} & n = 4m \\ S\mathbf{v} & n = 4m + 1 \\ -S\mathbf{u} & n = 4m + 2 \\ -S\mathbf{v} & n = 4m + 3 \end{cases}$$

为反铁磁结构，相应于 $n = 4m$ 的诸格点组成一组次点阵 A_1 , $n = 4m + 2$ 的诸格点组成次点阵 A_2 , $n = 4m + 1$ 的组成次点阵 A_3 , $n = 4m + 3$ 的诸格点组成次点阵 A_4 , 同一次点阵中的自旋都平行排列, A_1 和 A_2 次点阵的自旋分别排列在 \mathbf{u} 和 $-\mathbf{u}$ 方向, 互相反平行. A_3 和 A_4 次点阵的自旋分别排列在 \mathbf{v} 和 $-\mathbf{v}$ 方向互相反平行. \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 两者间取向可以是任意的.

(iv) $2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} \approx n\pi$, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$, 此时所有自旋都处于和 $\mathbf{w} = \mathbf{u} \times \mathbf{v}$ 垂直的各平面内, 但一般而言, 在同一平面内的诸自旋的取向并不平行, 只有当 \mathbf{k}_0 和 \mathbf{w} 平行时, 同一垂直于 \mathbf{w} 的平面内的自旋都相互平行, 这时整个晶体就成为在 \mathbf{w} 方向上的螺旋形位形, 其螺距为 $\frac{2\pi}{|\mathbf{k}_0|}$.

3. 现在我们来考虑有外磁场 H 存在时自旋位形的变化, 此时自旋系统的能量为

$$\mathcal{H} = - \sum_{ff'} 2J_{ff'} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f'} - g\beta \sum_f \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_f, \quad (12)$$

其中 g 为 Lande 因子, β 为玻尔磁子. 仿照 2 中的方法, 得到满足条件(6)的解 \mathbf{S}_k 满足的方程为

$$(4J(\mathbf{k}) + 2\lambda)\mathbf{S}_k + \sqrt{N}g\beta\delta_{0k}\mathbf{H} = 0, \quad (13)$$

亦即

$$\begin{aligned} (4J(0) + 2\lambda)\mathbf{S}_0 + \sqrt{N}g\beta\mathbf{H} &= 0, \\ (4J(\mathbf{k}) + 2\lambda)\mathbf{S}_k &= 0, \quad \mathbf{k} \neq 0. \end{aligned} \quad (13')$$

(13)式乘以 \mathbf{S}_k^* 并对 k 相加, 得到

$$\mathcal{H} = NS^2\lambda - \frac{1}{2}\sqrt{N}g\beta\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_0, \quad (14)$$

现在问题是求解(13')使(14)式的 \mathcal{H} 最小.

(i) 若(13')的解为

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k &= 0, \quad \mathbf{k} \neq 0, \\ \mathbf{S}_0 &= \frac{-\sqrt{N}g\beta\mathbf{H}}{2\lambda + 4J(0)}, \end{aligned}$$

可以证明, 此时 $\mathbf{k} = 0$ 相应于 $J(k)$ 的最大值. 由条件(2)可以求得

$$\lambda = -\frac{g\beta\mathbf{H}}{2S} - 2J(0),$$

$$\mathbf{S}_f = S \frac{\mathbf{H}}{H},$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 = -2NS^2J(0) - NSg\beta\mathbf{H}. \quad (15)$$

以上的讨论表明对铁磁性自旋位形, 外场的作用是使自旋平行于外场的方向.

(ii) 若(13')存在 $\mathbf{S}_{k_0} \neq 0$ ($\mathbf{k}_0 \neq 0$) 的解, 则

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_0 &= \frac{\sqrt{N}g\beta\mathbf{H}}{4(J(\mathbf{k}_0) - J(0))}, \\ \lambda &= -2J(\mathbf{k}_0). \end{aligned}$$

由(14)式得到

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_2 = -2NS^2J(\mathbf{k}_0) - \frac{N}{8} \frac{(g\beta\mathbf{H})^2}{(J(\mathbf{k}_0) - J(0))}, \quad (16)$$

可以証明,这时使能量 \mathcal{H} 取最小值的 \mathbf{k}_0 使 $J(\mathbf{k}_0)$ 取最大值. 令

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} = \frac{\sqrt{N}}{2} c(\mathbf{u} - i\mathbf{v})$$

\mathbf{u} 和 \mathbf{v} 的意义同前, c 为一待定常数,由(3)式有

$$\mathbf{S}_f = S \frac{\mathbf{H}}{H_c} + c(\mathbf{u} \cos \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} + \mathbf{v} \sin \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}),$$

其中

$$H_c = \frac{4S(J(\mathbf{k}_0) - J(0))}{g\beta} > 0, \quad (17)$$

要满足条件(2),除要求

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \sin 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = 0$$

外,尚須满足

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{H} \cdot \mathbf{v} = 0,$$

这时由条件(2)有

$$S^2 = S^2 \frac{H^2}{H_c^2} + c^2, \quad (18)$$

$$c = S \sqrt{1 - \left(\frac{H}{H_c}\right)^2}.$$

从而

$$\mathbf{S}_f = S \frac{\mathbf{H}}{H_c} + S \sqrt{1 - \left(\frac{H}{H_c}\right)^2} (\mathbf{u} \cos \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} + \mathbf{v} \sin \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}). \quad (19)$$

由(18)式可知,以上解只有当 $H \leq H_c$ 时才能存在,此时 $\mathcal{H}_2(H) < \mathcal{H}_1(H)$, $H = H_c$ 时 $\mathcal{H}_2(H) = \mathcal{H}_1(H)$, $H > H_c$ 时只存在铁磁结构的解.

这样若在 $H = 0$ 时 $\mathbf{k}_0 \neq 0$ 的自旋位形对应于稳定态,则在外场 \mathbf{H} 中,当 $H < H_c$ 时諸自旋沿 \mathbf{H} 方向有一和磁場 H 成正比的分量,在和 \mathbf{H} 垂直的平面內仍保持其原有的位形. 随着 H 的增大与 \mathbf{H} 方向平行的分量亦增大,而和 \mathbf{H} 垂直的方向的成分减小. 当 $H = H_c$ 时,则完全成为平行于磁場方向的铁磁性结构. 在 $H < H_c$ 时,磁化率 χ 为

$$\chi = \frac{NS\beta g}{H_c}.$$

外磁場 \mathbf{H} ($H < H_c$) 的作用除使发生磁化外,还使原先自旋位形的簡并度部分消失. 亦即无磁場时 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 在空間中的取向是任意的,当有外場 \mathbf{H} 存在时, \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 必須在和 \mathbf{H} 垂直的平面內,但在該平面內仍可以是任意的.

在简单的反铁磁排列的情形下,若只考虑最近邻和次近邻的交換作用,并分別用 J_1 和 J_2 来表示,則

$$J(\mathbf{k}) = J_1(\mathbf{k}) + J_2(\mathbf{k}),$$

易見对 $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n\pi$ 的反铁磁排列的情形

$$J_1(\mathbf{k}_0) = -J_1(0), \quad J_2(\mathbf{k}_0) = J_2(0),$$

由(17)式得

$$H_c = \frac{4S(J(\mathbf{k}_0) - J(0))}{g\beta} = -\frac{8SJ_1(0)}{g\beta}, \quad (20)$$

与 Тябьков 在反铁磁性理论的工作^[5]中得到的结果相同。

4. 现在我们再来考虑最简单的单轴磁晶各向异性的情形, 这时哈密顿量 \mathcal{H} 可以写成

$$\mathcal{H} = -2\sum_{f,f'} J_{ff'} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f'} + D \sum_f (S_f^z)^2, \quad (21)$$

其中 D 为和磁晶各向异性有关的常数, $D < 0$ 表示 z 轴为易磁化轴, $D > 0$ 表示 z 轴为难磁化轴, S_f^z 为 \mathbf{S}_f 的 z 分量。

仍利用上述方法求在条件(6)下相应于(21)式最小值的 \mathbf{S}_f , 得到 \mathbf{S}_f 的傅立叶分量 \mathbf{S}_k 满足方程:

$$(-2J(\mathbf{k}) - \lambda)\mathbf{S}_k + D\mathbf{z}S_k^z = 0, \quad (22)$$

亦即

$$(-2J(\mathbf{k}) - \lambda)S_k^{x,y} = 0,$$

$$(-2J(\mathbf{k}) - \lambda)S_k^z + DS_k^z = 0. \quad (22')$$

(22)式乘以 \mathbf{S}_k^* 并对 \mathbf{k} 求和, 得到

$$\mathcal{H} = \lambda NS^2,$$

因而 \mathcal{H} 的最小值相应于(22')中 λ 的最小的本征值。若 $J(\mathbf{k}_0)$ 为 $J(\mathbf{k})$ 的最大值, 于是当

(A) $D < 0$ 时,

$$\lambda_{\min} = D - 2J(\mathbf{k}_0),$$

由(22')易见此时

$$S_{\mathbf{k}_0}^z \neq 0, \quad S_{\mathbf{k}_0}^{x,y} = 0,$$

$$\mathbf{S}_k = 0, \quad |\mathbf{k}| \neq |\mathbf{k}_0|,$$

$$\mathbf{S}_f = S_f^z \mathbf{z} = \frac{\mathbf{z}}{\sqrt{N}} \{S_{\mathbf{k}_0}^z e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}} + S_{\mathbf{k}_0}^{z*} e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}}\} \quad (23)$$

中 \mathbf{z} 为 z 方向单位矢量, 而能量为

$$\mathcal{H} = -NS^2(|D| + 2J(\mathbf{k}_0)),$$

解(23)必须满足条件(2), 此时(23)可改写成

$$S_f^z = S(\cos \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} + \sin \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}), \quad (23')$$

其中 \mathbf{k}_0 满足

$$\sin 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = 0,$$

这可以分下列三种情形:

(i) $\mathbf{k}_0 = 0$, 于是 $S_f^z = S$ 为诸格点的自旋都沿 z 轴(易磁化轴)的铁磁性排列。

(ii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n\pi$, 于是 $S_f^z = (-1)^n S$ 为两组次点阵构成的反铁磁排列, 对 n 为偶数的诸格点 $S_f^z = S$, 自旋沿 z 轴正方向; 对 n 为奇数的诸格点 $S_f^z = -S$, 自旋沿 z 轴负方向排列。

(iii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n\frac{\pi}{2}$ 对于相应于 $n = 4m, 4m + 1$ 的诸格点, 自旋都沿 z 轴正方向排列,

而相应于 $n = 4m + 2, 4m + 3$ 的諸格点, 自旋都沿着 z 軸負方向排列. 整个点陣成反鉄磁的位形. 这表明具有 $D < 0$ 的各向异性时, 各向异性的作用使前面 2 中討論的状态 (iii) 的矢量 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 都和各向异性軸平行.

(B) 当 $D > 0$ 时

$$\lambda_{\text{最小}} = -2J(\mathbf{k}_0),$$

此时

$$S_k^z = 0, \quad S_k^{xy} = 0, \quad |k| \neq |k_0|$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} = \frac{\sqrt{N}}{2} S(\mathbf{u} - i\mathbf{v}),$$

其中 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 为在 (x, y) 平面內的单位矢量. 而

$$\mathbf{S}_f = S(\mathbf{u} \cos \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} + \mathbf{v} \sin \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f}), \quad (24)$$

即自旋都在 (xy) 平面內.

$$\mathcal{H} = -2NS^2J(\mathbf{k}_0)$$

解(24)尚須滿足条件(2), 这样的解可分下列四种情形

(i) $\mathbf{k}_0 = 0$ 为自旋在 (xy) 平面內的鉄磁性排列.

(ii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n\pi$ 相应于 $n =$ 偶数的諸格点組成一組次点陣, 相应于 $n =$ 奇数的諸格点組成另一組次点陣, 属于同一次点陣中格点上的自旋方向相同, 不同次点陣的自旋互为反平行.

(iii) $\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} = n \frac{\pi}{2}$ 相应于 $n = 4m$ 的諸格点組成次点陣 A_1 自旋都排列在 \mathbf{u} 方向; 相应于 $n = 4m + 2$ 的諸格点組成次点陣 A_2 , 自旋排列在 $-\mathbf{u}$ 方向; $n = 4m + 1$ 的諸格点組成次点陣 A_3 , 自旋排列在 \mathbf{v} 方向; 相应于 $n = 4m + 3$ 的諸格点构成次点陣 A_4 , 自旋沿 $-\mathbf{v}$ 方向, \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 都在 (xy) 平面內, 但彼此都是任意的, 因而整个点陣由四个次点陣穿插迭合而成, 当 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 平行(或反平行)时, 四个次点陣蜕化为二个次点陣.

(iv) $\sin 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{f} \neq 0, \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$, 与 2 中的情形 (iv) 相同, 只是各向异性的作用确定了 $\mathbf{w} = \mathbf{u} \times \mathbf{v}$ 的方向必須和 z 軸(亦即各向异性軸)平行, 即自旋必須在 (xy) 平面內.

容易証明, 上面所討論的解是稳定的. 为此只需証明在滿足条件(2)下, 任何自旋取向的变化都使能量增大.

按照(21)式, 利用(3), (5), 可以将能量写成

$$\mathcal{H} = -2 \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k}) S_k^{\alpha} S_k^{*\alpha} + D \sum_{\mathbf{k}} S_k^z S_k^{*z} - \lambda \left[\sum_{\alpha, \mathbf{k}} S_k^{\alpha} S_k^{*\alpha} - NS^2 \right],$$

$\alpha = x, y, z$. 当 S_k 有一小变化 δS_k 时 \mathcal{H} 的变化为

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha', k, k'} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial S_k^{\alpha'} \partial S_k^{\alpha}} \delta S_k^{\alpha'} \delta S_k^{\alpha} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, k} (-2J(\mathbf{k}) + D\delta_{\alpha z} - \lambda) \delta S_k^{\alpha} \delta S_k^{*\alpha}. \end{aligned}$$

当 $D < 0$ 时 $\lambda = D - 2J(\mathbf{k}_0)$,

$$\delta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, k} [2J(\mathbf{k}_0) - 2J(\mathbf{k}) + |D|(1 - \delta_{\alpha z})] \delta S_k^{\alpha} \delta S_k^{*\alpha} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (2J(\mathbf{k}_0) - 2J(\mathbf{k}) + |D|) [(\delta S_k^x)^2 + (\delta S_k^y)^2] + (2J(\mathbf{k}_0) - 2J(\mathbf{k})) (\delta S_k^z)^2 \} > 0,$$

因 $J(\mathbf{k}_0)$ 是 $J(\mathbf{k})$ 的最大值.

当 $D > 0$ 时, $\lambda = -2J(\mathbf{k}_0)$,

$$\delta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{ (2J(\mathbf{k}_0) - 2J(\mathbf{k})) ((\delta S_k^x)^2 + (\delta S_k^y)^2) + (2J(\mathbf{k}_0) - 2J(\mathbf{k}) + D) (\delta S_k^z)^2 \}.$$

对于绕 z 轴自旋系统的均匀转动 $\delta\phi$, 有

$$\delta S_k^z = 0,$$

$$\delta \mathbf{S}_i = \delta\phi \times \mathbf{S}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \{ e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \delta \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0} + e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \delta \mathbf{S}_{\mathbf{k}_0}^* \}$$

于是

$$\delta \mathcal{H} = 0.$$

对于自旋的其他改变(只要 $\delta S_k^z \neq 0$), $\delta \mathcal{H} > 0$. 因而除绕 z 轴的均匀转动外, 前面求的解是唯一可能的稳定的解. 绕 z 轴转动相当于矢量 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 在 (xy) 平面内的选择的自由性. 在这限度内自旋位形是简并的, 加上外磁场 H 将使这种简并部分消失.

5. 以上我们用了 Lyons-Kaplan 的方法来讨论外磁场及各向异性对自旋位形的影响, 它们都使自旋位形的简并部分消失, 在反铁磁位形的情况下, 还存在着一个由反铁磁到铁磁性结构转变的临界磁场 H_c , 它和自旋间诸交换作用有关.

原则上讲, 我们的计算, 结果只适用于绝对零度的情况, 若能考虑温度对自旋位形的影响将是很有兴趣的课题. Villain 用分子场的近似得到的结果, 表明从绝对零度到居里点的温度范围内, 自旋的位形都是不变的, 温度的影响只是改变自旋的大小. 但近来许多实验表明 Dy^[6] Er^[7] 等金属在低温下是铁磁性的, 而在某一转变温度由铁磁性变成反铁磁性. 如 Dy 的这种转变温度为 85°K, 而在 85°K 到 178.5°K 间相应的反铁磁结构为沿六次对称轴的螺旋形结构. 这种自旋位形随温度的变化是 Villain 的分子场近似无法解释的. Yosida 和 Miwa^[8] 用自旋波近似讨论了铁磁-反铁磁转变, 在这方面作了初步的尝试. 但由于自旋波理论只在低温下才适用, 因而还不能讨论整个温度范围的自旋位形. 发展这方面的方法是很有意义的.

参 考 文 献

- [1] Villain, J., *J. Phys. Chem. Solids*, **11** (1959), 303.
- [2] Yoshimori, A., *J. Phys. Soc.*, (Japan) **14** (1959), 807.
- [3] Cooper, B. R., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 135.
- [4] Lyons, D. H., Kaplan, T. A., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 1580.
- [5] Тябликов, С. В., *Ф. М. М.*, **2** (1956), 193.
- [6] Wilkinson, M. K. et al., *J. Appl. Phys.*, **32** (1961), 48 s.
- [7] Cable, J. W. et al., *J. Appl. Phys.*, **32** (1961), 49 s.
- [8] Yosida, K., Miwa, H., *J. Appl. Phys.*, **32** (1961), 8 s.

SPIN CONFIGURATION OF MAGNETIC SUBSTANCES

PU FU-CHO, CHENG CHIN-CHI

ABSTRACT

The Lyons-Kaplan method is applied to the discussion of the change of spin configuration of a Bravais lattice in the presence of external magnetic field or magnetic anisotropy. It is shown that the antiferromagnetic structure transforms into ferromagnetic ones above a certain critical field and the formula for this critical field is derived. The stability of the corresponding spin configurations is also examined.