

磁感生各向异性的一个新模型

关 鹏 刘宜华

山东大学物理系

1988年10月25日收到

本文通过分析金属-金属型非晶合金中磁感生各向异性随成分的变化关系,提出了四面体元方向有序模型。与实验拟合结果表明此模型与实验符合较好。

一、引 言

磁性材料的感生各向异性在基础研究和应用技术中都非常重要。特别在非晶合金中,由于不存在磁晶各向异性,因而由磁场退火所感生的单轴各向异性对改善材料的磁性能具有重要意义。然而磁感生各向异性的起源还是一个有待于解决的问题。

Fujimori 对 $(\text{Fe}, \text{Co}_{1-x})_{78}\text{Si}_{10}\text{B}_{12}$ 进行了研究,发现其感生各向异性与成分的关系不能在整个成分范围内用原子对方向有序理论解释^[1]。Luborsky 怀疑其各向异性对给定的退火温度没有达到饱和^[2]。Miyazaki 则认为其测量磁场太小致使造成很大的测量误差^[3]。但后来 Hernando^[4] 对相似的 Co 基合金的感生各向异性随成分的关系作了研究,得到与 Fujimori 相似的结果,并经验地提出: $K_u(x)$ 与样品中存在的四种四面体(对合金 A_{1-x}B_x 其组合方式为: 4A, 4B, 3A1B, 1A3B) 的几率有关,然而其微观机制仍不清楚。对 Co-TM (TM 为非磁性金属原子) 型非晶合金, Suran^[5] 等人对 $\text{Co}_{1-x}\text{Ti}_x$ 进行了研究,并指出其感生各向异性不符合原子对方向有序理论,因实验发现 $K_u(x)$ 随 x 增大而呈线性地减小。

此外,我们还注意到,虽然一些实验能用 Iwata^[6] 模型拟合,但在 $x = 0.5$ 附近却很差。如在 Luborsky 的四组实验中,只有一组 $K_u(y)$ 在 $y = 0.5$ 时达到极大值 ($T = 325^\circ\text{C}$), 其它三组极大值出现在 $y > 0.5$ 处。在 Miyazaki 的实验结果中, $K_u(x)$ 极大值也不正好在 $x = 0.5$ 处,且在 $x > 0.5$ 时,与 Luborsky 结果极为相似。Morita^[7] 的实验结果也表明: 高分区理论与实验符合较差。为了解决以上问题,本文给出了一个新模型——四面体元方向有序。

二、模 型

由于金属-金属型非晶结构可用硬球密积模型描述, Polk^[8] 发现在这种结构中,正四面体的数量百分比为 86.2, 因此 Hernando^[4] 提出可把非晶结构近似看成是内嵌着一些大空洞的正四面体的堆积。由于四面体结构的紧密性和高含量,作为一个近似可认为宏观各向异性主要来源于四面体元的贡献。

1. 各种四面体元的局域各向异性

对二元金属-金属型合金 A_1-xB_x , 四面体可根据其顶点原子的占据方式分为五类, 即 4A, 4B, 3A1B, 2A2B, 1A3B. 若 φ 为某原子对指向与磁化方向的夹角, 则任一相邻原子对的磁相互作用能可表示为

$$E_{ij} = L_{ij}(\cos^2\varphi - 1/3). \quad (1)$$

式中 L_{ij} 为相邻原子对的偶极相互作用能. 为了表述方便, 对 AA, BB, AB 原子对分别记为 l, n, m .

建立坐标系如图 1 所示. 坐标原点在四面体中心. 若磁化方向为 (θ_M, φ_M) , 则对于不同的四面体, 只要把它所包含的各个相邻原子对的能量相加就得到四面体的能量. 计算结果为

$$E_{4A} = E_{4B} = 0,$$

$$E_{3A1B} = -(l - m) \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right),$$

$$E_{1A3B} = -(n - m) \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right),$$

$$E_{2A2B} = - \left[\frac{1}{2} (l + n) - m \right] \left(\cos^2\theta - \frac{1}{3} \right)$$

$$- (l - n) \sin^2\theta \sin\varphi_M \cos\varphi_M. \quad (2)$$

式中 θ 为磁化方向与四面体最高次旋转轴的夹角. 对 3A1B 和 1A3B 正四面体为 c_3 轴, 对 2A2B 为 c_2 轴.

从以上计算结果中得出结论: 1) 4A 和 4B 型四面体元对宏观各向异性无贡献. 合金的宏观各向异性是由其余三种局域各向异性不为零的四面体元造成的. 因此, Hernando^[4] 考虑 4A, 4B 型四面体而不计 2A2B 是不妥的. 2) 从表达式中看出: 3A1B 和 1A3B 具有单轴形式, 2A2B 虽不是简单的单轴关系, 但可把它看成为前一部分单轴与后一部分非单轴的相加, 而后一部分由于是 φ_M 的奇函数, 在对整个样品求和时被消掉, 因此也只有单轴部分对宏观各向异性有贡献.

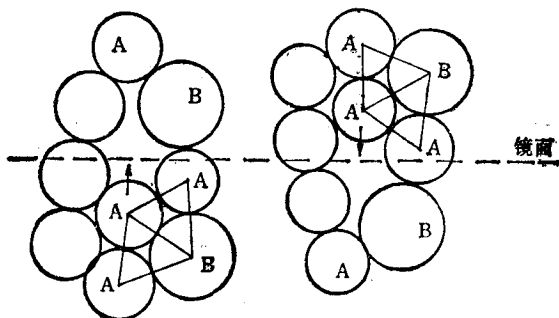


图 2

2. 样品的宏观感生各向异性

经过预退火达到平衡态的非晶合金, 其中的自由体积不是退火温度的增函数^[9]. 这表明在以后产生方向有序而进行的退火不再改变其结构.

用双能级模型处理这一系统. 假设与自由体积邻近的每个各向异性单元都有两个不同的取向 1 和 2, 它们

对应的能量不同. 对可逆弛豫, Kronmüller^[10] 指出原子的重排发生在等价的原子位形

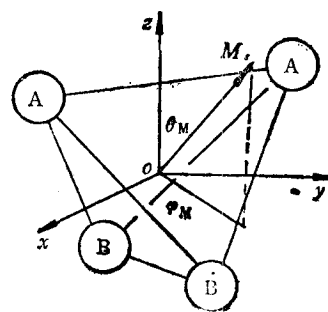


图 1

上,新位形是原位形在某个镜面上的反射像,如图 2 所示.两种位形的转换使局域各向异性单元的取向发生变化,而各种四面体的数目保持不变.

当不考虑磁性相互作用时,认为两种位形能级相同(忽略由非磁性作用造成的能级分裂),在磁性材料中,这种简并由于磁相互作用而解除.分裂后能级差为

$$2\Delta_i^p = E_{i,2}^p - E_{i,1}^p. \quad (3)$$

式中 p 为四面体种类, $E_{i,j}^p$ 为第 p 种第 i 个四面体元取向为 j 时的能量.

磁退火前,每个各向异性单元各个方向随机分布,相应地其所有二能级位形在各个方向有相同的分布几率.在进行磁场退火时,有些四面体元要重新取向,以此来降低系统的自由能.若对分裂参数 Δ ,取向为 1,2 的各向异性单元的数目分别为 n_1, n_2 ,则磁场退火过程中其重新分布由下面速率方程决定:

$$dn_j/dt = -\nu_{jj'}n_j + \nu_{j'j}n_{j'} \quad j \neq j'; j, j' = 1, 2. \quad (4)$$

式中 $\nu_{jj'}$ 和 $\nu_{j'j}$ 分别为 $1 \rightarrow 2$ 和 $2 \rightarrow 1$ 的跃迁频率.求得 j 方向的占有几率为^[10]

$$f_j(\Delta, t) = \frac{1}{2} \{1 \pm \tanh(\Delta/kT)[1 - e^{-\nu_k t}]\}. \quad (5)$$

式中 $\nu_k = \nu_0 e^{-Q/kT}$, Q 为激活能,正号表示低能级,负号表示高能级.

经过一段退火时间 t 后,总磁相互作用能为

$$\phi(t) = \sum_{ijp} f_j(\Delta, t) E_{ij}^p. \quad (6)$$

经过对四面体元取向参数的统计平均,最后得到 $t \rightarrow \infty$ 时的感生各向异性常数为

$$K_u = \frac{1}{15} \frac{1}{kT} \sum_{p=1}^3 \pm c^p \langle E_0^p \rangle. \quad (7)$$

式中 c^p 为 p 种活动性四面体的密度, $\langle E_0^p \rangle$ 对三种四面体元 3A1B, 1A3B, 2A2B 分别为: $-\frac{3}{2}(l-m)$; $\frac{3}{2}(m-n)$; $-\left[\frac{1}{2}(l+n)-m\right]$. 正负号由磁退火后四面体元最高次旋转轴的分布情况决定.图 3(a) 表示取正值的情况, (b) 表示取负值的情况.

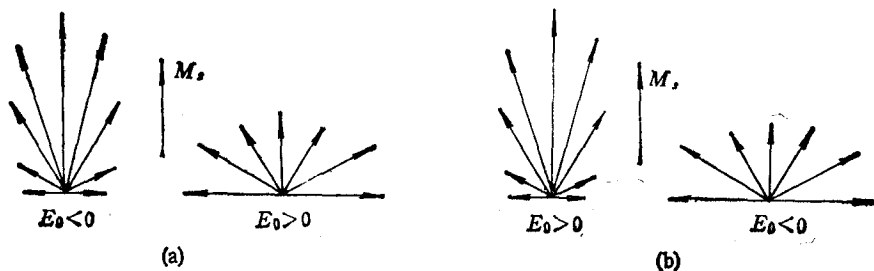


图 3

注意到 c^p 是与成分有关的量,对原子排列完全无序的情形,在 $A_{1-x}B_x$ 金属-金属型合金中找到 n 个 A 原子 $4-n$ 个 B 原子组成四面体的几率为

$$P(n, 4-n) = \frac{4!}{n!(4-n)!} (1-x)^n x^{4-n}. \quad (8)$$

但由于非晶中,非磁性相互作用不能忽略,因此原子不能随机分布,为此引入相参量 D^p

$$D^p = \frac{c^p}{P(p, 4-p)}, \quad (9)$$

即为在材料中实际存在的某种活动性四面体的密度与非磁性相互作用为零时其存在几率的比值。它与材料是否有磁性无关, 是非磁性作用的函数, 因此可以认为不受磁退火的影响。将 (8)、(9) 式代入 (7) 式得

$$K_u(x) = \frac{1}{15} \frac{1}{kT} [A^1 \cdot 4x(1-x)^3 + A^2 \cdot 6x^2(1-x)^2 + A^3 \cdot 4x^3(1-x)], \quad (10)$$

式中 $A^p = \pm \langle E_0^p \rangle^2 D^p$ 。

图 4 (a)–(c) 是用 (10) 式对 Fujimori, Luborsky 和 Morita 实验结果的拟合。

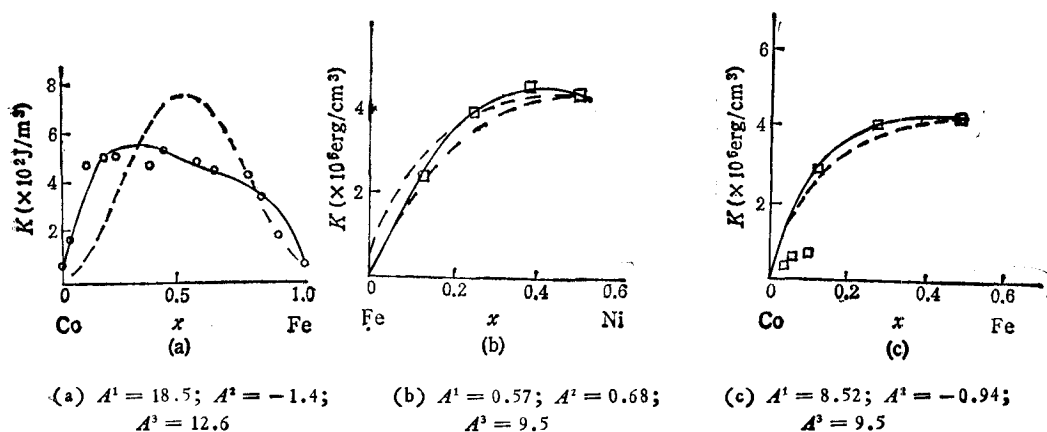


图 4

三、讨 论

1. 从拟合结果看出, 本模型在 $x = 0.5$ 附近与实验的符合比 Iwata 模型好。图 4(a), (c) 中有些低成分区的符合还不十分好, 说明不能用一组相参量使整个成分区内都满足, 必须不同成分区内选用不同的相参量。

2. 由于非晶中各向异性的形成和再取向过程是原子的协同重排, 而每个各向异性单元的重新取向都会同时改变与它邻近的各向异性单元的取向, 这就有可能使某种四面体元处于高能态分布, 因此拟合参数中可出现负值。

3. 对于 Co-TM 非晶合金, 由于只存在 Co-Co 间的偶极作用^[11], 这时 $m = n = 0$, 由此得 $E_{1A3B} = 0$ 。在非晶中, 由于非磁性相互作用属结团型, 即同种原子趋向于结合在一起形成脱溶, 所以当非晶中非磁性原子增加时, 可认为主要形成 4B 和 1A3B 型四面体元, 而这两种四面体元的局域各向异性恰好为零, 致使单位体积内的非零局域各向异性单元数目减少, 因而 $K_u(x)$ 减小。

四、结 论

本文提出了四面体元方向有序模型,发现非晶合金感生各向异性与成分的关系是与存在三种四面体的几率有关,拟合结果表明此模型能较好地与实验符合。

- [1] H. Fujimori, *Amorphous Magnetism II*, Plenum Press, New York, (1977), p. 393.
- [2] F. E. Luborsky, *Ferromagnetic Material*, Vol. I, North Holland, (1980), p. 451.
- [3] T. Miyazaki and M. Takahashi, *Jap. J. Appl. Phys.*, **17**(1978), 1755.
- [4] A. Hernando *et al.*, *Solid State Commun.*, **54**(1985), 1059.
- [5] G. Suran *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 3109.
- [6] T. Iwata, *Sci. Repts. Research Inst. Tohoku Univ.*, **A13**(1961), 356.
- [7] H. Morita *et al.*, *J. Magn. Magn. Mat.*, **49**(1985), 301.
- [8] D. E. Polk, *Acta Metall.*, **20**(1972), 485.
- [9] W. Chambron, *Solid State Commun.*, **35**(1980), 61.
- [10] H. Kronmüller, *J. Magn. Magn. Mat.*, **41**(1984), 336.
- [11] Y. Machata *et al.*, *Proc. Inter. Conf. on Quenched Metals*, (1985), p. 1979.

A NEW MODEL FOR INDUCED ANISOTROPY IN AMORPHOUS ALLOYS

GUAN PENG LIU YI-HUA

Department of Physics, Shandong University, Jinan
(Received 25 October 1988)

ABSTRACT

Some previous experimental results about the concentration dependence of magnetic anisotropy for metal-metal amorphous alloys were analyzed. By introducing a new parameter, a model of tetrahedral directional order was proposed. The comparison with some experimental data shows good agreement.