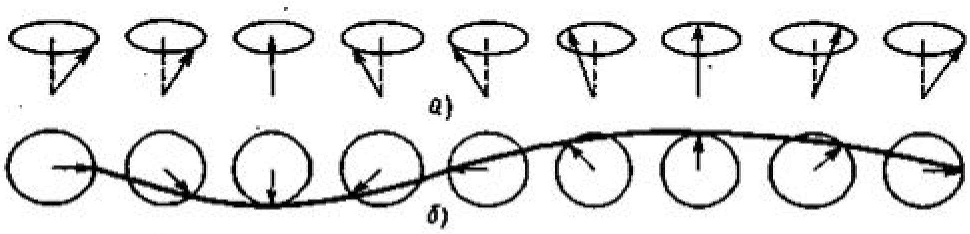
Лекція №17

Феромагнетики й антиферомагнетики

1. Обмінна енергія феромагнетика

На минулій лекції нами встановлено вид гамільтоніану феромагнетика. Слід нагадати, що головние питання, яке нас цікавило, полягало у проясненні характеру енергетичного спектру феромагнетка поблизу основного стану, якому, як показує досвід, і повинна пояснювати теорія, відповідає паралельна орієнтація магнітних моментів окремих атомів.



Згадаємо, що якщо кристал формується аналогічно молекулі водню, тобто, із окремих атомів, кожен із яких містить по одному електрону в основному стані, то використовуючи зазначений гамільтоніан, можна наближено знайти енергетичні рівні кристалу. Однак для дослідження більш загальних випадків мікроскопічний гамільтоніан є надто складним, щоби можна було ним безпосередньо користуватися. Тому природно спробувати перейти від мікроскопічного гамільтоніану до гамільтоніана, що має більш просту математичну структуру і приводить в головних рисах до того ж результату, що й мікроскопічний гамільтоніан. Цей перехід можна провести аналогічно розглянутому раніше переходу від мікроскопічного гамільтоніану двох атомів водню до обмінного гамільтоніану, який має більш просту структуру, ніж вихідний гамільтоніан. При цьому, як ми бачили, якщо мова йде про енергетичні стани, що виникають із основних станів двох атомів і відрізняються тільки значенням сумарного спіну S, то початковий гамільтоніан еквівалентний обмінному.

Наше головне припущення полягало в тому, що ми отримаємо правильну фізичну картину феромагнетика поблизу його основного стану, якщо замінемо мікроскопічний гамільтоніан феромагнетика сумою обмінних гамільтоніанів різних пар його атомів (більш точне виведення такого гамільтоніану наведено в роботах Боголюбова й Тяблікова).

Нехай усі атоми феромагнетика мають спін $1/2$. Тоді обмінний гамільтоніан феромагнетика, яким ми заміняємо вихідний мікроскопічний гамільтоніан, буде мати вигляд суми гамільтоніанів

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2}\sum_{l\neq m} J\left(\mathbf{R}_{lm}\right)\hat{\mathbf{S}}_l\hat{\mathbf{S}}_m \tag{1}$$

де $\hat{\mathbf{S}}_l$ і $\hat{\mathbf{S}}_m$ - спіни атомів, що знаходяться в l-му й m-у вузлах ґратки і $J\left(\mathbf{R}_{lm}\right)$ - деяка функція від радіус-вектора $\mathbf{R}_{lm}$, що сполучає l-й і m-й вузли (сумування проводиться за всіма парами атомів кристалу). Ця функція, що носить назву обмінного інтегралу l-го і m-го атомів, дуже швидко (експоненціально) згасає зі збільшенням відстані, оскільки вона визначається ступенем перекриття хвильових функцій атомів. Тому практично величина $J\left(\mathbf{R}_{lm}\right)$ відмінна від нуля тільки в тому випадку, якщо l-й і m-й атоми є сусідніми, при цьому

$$J\left(\mathbf{R}_{lm}\right) \sim \xi\frac{e^2}{a}, \tag{2}$$

де a - постійна ґратки і ξ - числовий параметр порядку 0,1, який визначається ступенем перекриття хвильових функцій сусідніх атомів.

У цьому гамільтоніані відстані між атомами вважаються заданими, а динамічними змінними є тільки оператори спінів атомів, які діють (а, отже, і сам гамільтоніан H_e) на хвильову функцію системи, що є функцією тільки спінових змінних, але не від просторових координат частинок.

Для феромагнетика обмінний інтеграл позитивний

$$J\left(\mathbf{R}_{lm}\right) > 0\,,$$

Завдяки чому в основному стані всі атоми повинні мати одну й ту ж орієнтацію. Ця орієнтація, однак, не виділена, якщо враховувати тільки обмінну взаємодію. Напрямок цей визначається релятивістськими взаємодіями, про які мова йшла раніше.

Важливою властивістю обмінного гамільтоніану (1), який зазвичай називають гамільтоніаном Гайзенберга (говорять також про модель Гайзенберга, маючи на увазі модель феромагнетика, що описується гамільтоніаном (1)), є те, що він комутує із кожною з проекцій сумарного спіну феромагнетика

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_l \hat{\mathbf{S}}_l\ . \tag{3}$$

Дійсно, використовуючи відомі комутаційні співвідношення для операторів проекцій спину атома

$$\left[\hat{S}_{l\alpha}, \hat{S}_{m\beta}\right] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{S}_{l\gamma}\delta_{lm}$$

(α, β, γ - координатні індекси), легко впевнитись, що

$$\left(\hat{\mathbf{S}}_l + \hat{\mathbf{S}}_m\right)\left(\hat{\mathbf{S}}_l\hat{\mathbf{S}}_m\right) = \left(\hat{\mathbf{S}}_l\hat{\mathbf{S}}_m\right)\left(\hat{\mathbf{S}}_l + \hat{\mathbf{S}}_m\right)$$

і тому

$$\hat{H}_e \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}} \hat{H}_e .$$

Звідси витікає, що якщо враховувати тільки обмінну взаємодію, то квадрат повного спіну системи та його проекція на деяку вісь будуть квантово - механічними інтегралами руху, тобто, обмінна взаємодії сама по собі змінити цих величин не може. Ця обставина є абсолютно зрозумілою, якщо згадати, що з мікроскопічної точки зору обмінна взаємодія – це чисто електростатична взаємодія з урахуванням симетрії хвильових функцій системи.

Як уже вказувалося, магнітний момент феромагнетика має в основному спінову природу. Тому можна визначити оператор густини магнітного моменту феромагнетика $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r})$ у точці $\mathbf{r}$ як суму

$$\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}) = 2\mu_0 \sum_l \hat{\mathbf{S}}_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l), \qquad (4)$$

де $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ - магнетон Бора, $\mathbf{R}_l$ - радіус-вектор, що визначає положення l-го вузла кристалічної ґратки.

Гамільтоніан обмінної взаємодії можна виразити через оператор густини магнітного моменту

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2(2\mu_0)^2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}') .$$

Легко впевнитись також, що оператори проекцій густини магнітного моменту задовольняють комутаційним співвідношенням:

$$\left[\hat{M}_i(\mathbf{r}),\hat{M}_k(\mathbf{r}')\right]=2i\varepsilon_{ikl}\hat{M}_l(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Гамільтоніану (1) відповідає макроскопічна обмінна енергія феромагнетика

$$W_e=-\frac{1}{2(2\mu_0)^2}\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\bar{J}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{M}(\mathbf{r},t)\mathbf{M}(\mathbf{r}',t),\qquad(5)$$

де $\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$ - густина макроскопічного магнітного моменту, що є, взагалі кажучи, функцією координат та часу, і $\bar{J}(\mathbf{r})$ - деяка функція від координати $\mathbf{r}$ і від температури T. Ця функція, як і функція $J(\mathbf{r})$ в мікроскопічному гамільтоніані, швидко зменшується зі зростанням $\mathbf{r}$ й за достатньо низьких температур ($T\ll T_C$, T_C - температура Кюрі) мало відрізняється від функції $J(\mathbf{r})$.

Мається на увазі, що густина макроскопічного магнітного моменту $\mathbf{M}(\mathbf{r},t)$ пов'язана з оператором густини магнітного моменту $\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r})$ співвідношенням

$$\mathbf{M}(\mathbf{r},t)=Sp\rho\hat{\mathbf{M}}(\mathbf{r}),\qquad(6)$$

де ρ - локально рівноважна матриця густини.

Повернемось тепер до мікроскопічного (гайзенбергівського) гамільтоніану (1). У подальшому спіновий гамільтоніан кристалу у зовнішньому магнітному полі $\mathbf{B}=\{0,0,B\}$ будемо записувати у вигляді:

$$\hat{H}_e=-\mu_0\sum_{\mathbf{n}}B\hat{S}^z_{\mathbf{n}}-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}}J(\mathbf{n}-\mathbf{m})\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}},\qquad(7)$$

де $\mu_0 = \dfrac{e\hbar}{2mc}$ - магнетон Бора, $J(\mathbf{n}-\mathbf{m}) = J(\mathbf{m}-\mathbf{n})$ - обмінний інтеграл між $\mathbf{n}$-м і $\mathbf{m}$ вузлами кристалічної ґратки, який має розмірність енергії, $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$ - векторні спінові оператори (в одиницях $\hbar = 1$), що задовольняють перестановочним співвідношенням

$$\left[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{x}, \hat{S}_{\mathbf{n}}^{y}\right] = i\delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z} \tag{8}$$

Слабке магнітне поле $\mathbf{B}$ уведено до гамільтоніану, щоби виділити напрямок (вісь oZ) намагнічення у кристалі. Це доводиться робити тому, що з метою подальшого спрощення викладок до гамільтоніану не включено взаємодії спінів з електричним полем анізотропії кристалу. Як нами вже відмічалось, такі взаємодії мають релятивістський характер і є малими. Хоча такі взаємодії і малі в порівнянні з обмінною взаємодією, вони природним чином виділяють у кристалі напрямок намагнічення. Нагадаємо також, що внаслідок швидкого убування функції $J(\mathbf{n}-\mathbf{m})$ із відстанню між атомами, у сумі (7) можна враховувати взаємодію тільки між найближчими атомами.

Уведений гамільтоніан, як легко впевнитись, комутує з оператором квадрату сумарного спіну та його проекцій на магнітне поле $\mathbf{B} = \{0, 0, B\}$:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \left(\sum_{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\right)^2, \quad \hat{S}_z = \sum_{\mathbf{n}} \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z} \tag{10}$$

Квадрат оператора спіну $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}^2$ кожного атома має тільки одне власне значення $S(S+1)$, де S - одно из значень $1/2,\ 1,\ 3/2, \ldots$ Спінові оператори діють у просторі спінових функцій $\left|S, S_z\right\rangle$, де S_z приймає $2S+1$ значень, $\pm S, \pm(S-1), \ldots$ Оператори $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ можна замінити операторами:

$$\hat{S}^z \equiv \hat{S}_z\,, \quad \hat{S}^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y\,, \quad \hat{S}^- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y\,, \tag{11}$$

які задовольняють перестановочним співвідношенням:

$$\left[\hat{S}^+, \hat{S}^-\right] = 2\hat{S}^z\,, \quad \left[\hat{S}^z, \hat{S}^+\right] = \hat{S}^+, \quad \left[\hat{S}^z, \hat{S}^-\right] = -\hat{S}^-. \tag{12}$$

Оператори $\hat{S}^+, \hat{S}^-$ у просторі спінових функцій $\left|S, S_z\right\rangle$ мають наступні відмінні від нуля матричні елементи

$$\left\langle S, S_z + 1\right|\hat{S}^+\left|S, S_z\right\rangle = \left\langle S, S_z\right|\hat{S}^-\left|S, S_z + 1\right\rangle = \sqrt{\left(S - S_z\right)\left(S + S_z + 1\right)}\,. \tag{13}$$

Як видно, оператор $\hat{S}^+$ збільшує, а оператор $\hat{S}^-$ зменшує на одиницю проекцію спіну на вісь z.

Скористаємось тепер цими формулами для перетворення гамільтоніану (7). При цьому ми повинні вважати, що формули (11) - (13) справедливі окремо для кожного вузлового спіну $\hat{\mathbf{S}}_\mathbf{n}$. Спінові оператори, що відносяться до різних атомів, комутують між собою.

Використовуючи тотожність

$$\hat{\mathbf{S}}_\mathbf{n}\hat{\mathbf{S}}_\mathbf{m} = \hat{S}^z_\mathbf{n}\hat{S}^z_\mathbf{m} + \frac{1}{2}\left(\hat{S}^+_\mathbf{n}\hat{S}^-_\mathbf{m} + \hat{S}^-_\mathbf{n}\hat{S}^+_\mathbf{m}\right) \tag{14}$$

гамільтоніан (7) можна звести до виду

$$\hat{H} = E_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \tag{15}$$

де

$$E_0 = -\mu_0 BNS - \frac{1}{2}NSL(0)\,,$$

$$\hat{H}_1 = \left(\mu_0 B + L(0)\right)\sum_{\mathbf{n}}\left(S - \hat{S}^z_{\mathbf{n}}\right) - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{S}^-_{\mathbf{n}}\hat{S}^+_{\mathbf{m}},$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\left(S - \hat{S}^z_{\mathbf{n}}\right)\left(S - \hat{S}^z_{\mathbf{m}}\right),$$

$$L(0) = S\sum_{\mathbf{n}} J(\mathbf{n}), \quad \mu = N\mu_0.$$

У феромагнетика обмінні інтеграли $J(\mathbf{n})$ позитивні. Мінімум енергії ($E_{\min} = E_0$) відповідає стану, за якого всі спіни направлені уздовж поля. Збуджені стани утворюються при повороті одного або декількох спінів проти поля.

Представлення спінових операторів через оператори спінових збуджень.

Квадрат оператора спіну кожної частинки у вузлі має тільки одне власне значення $S\left(S+1\right)$. Отже, три оператора $\hat{S}^+, \hat{S}^-, \hat{S}^z$ пов'язані між собою рівністю

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \left(\hat{S}^z\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\hat{S}^+\hat{S}^- + \hat{S}^-\hat{S}^+\right) = S\left(S+1\right).$$

Тому ці оператори можна виразити через два нових незалежних оператори $\hat{\mu}^+_{\mathbf{n}}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ - оператори спінових збуджень.

Процедура представлення спінових операторів через оператори спінових збуджень більш складна, ніж у випадку фононних збуджень. Найбільш зручним таке представлення пов'язане з так званим Голдстейна – Примакова. Якщо атом має спін S, то

$$\hat{S}^-_{\mathbf{n}} = \hat{\mu}^+_{\mathbf{n}}\sqrt{2S - \hat{\mu}^+_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}}, \quad \hat{S}^+_{\mathbf{n}} = \sqrt{2S - \hat{\mu}^+_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}}\,\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \quad \hat{S}^z_{\mathbf{n}} = S - \hat{\mu}^+_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \tag{16}$$

де $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ - оператори народження та знищення спінового збудження на вузлі $\mathbf{n}$ кристалу. При цьому під спіновим збудженням ми будемо розуміти зменшення на одиницю проекції спіну уздовж магнітного поля. Перестановочні співвідношення (12) для операторів спінів задовольняються, якщо оператори $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ задовольняють бозівським комутаційним співвідношенням

$$\left[\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \hat{\mu}_{\mathbf{m}}^{+}\right] = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}. \tag{17}$$

Нагадаємо, що оператори під знаком кореня слід розуміти у сенсі розкладу відповідного кореня в (16) у нескінченний ряд за операторами $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$.

У зв’язку з тим, що спін атомів фіксовано, нові оператори діють у просторі функцій від цілих чисел $N_{\mathbf{n}}$, що пробігають тільки $2S+1$ значень: $0,1,2,...2S$. Обмеження «чисел заповнення» відрізняють нові оператори від звичайних бозівських операторів, що діють у просторі функцій із довільними числами заповнень. Задоволення умов $N_{\mathbf{n}} \le 2S$ створює низку труднощів, які не мають суттєвого значення тільки за низьких температур, коли збуджені стани близькі до основного, тобто, містять мале число перевернутих спінів, що може бути виражено нерівністю:

$$\left\langle \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} \right\rangle \ll S. \tag{18}$$

Як уже говорилось, радикали в (16) слід розуміти як нескінченні ряди за степенями $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} / 2S$:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-} = \sqrt{2S}\left(\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+} - \frac{1}{4S}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} + \ldots\right).$$

Тоді при виконанні нерівності (18) можна зберегти в (16) тільки перші доданки:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-} = \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\sqrt{2S}, \quad \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+} = \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{-}\sqrt{2S}, \quad \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z} = S - \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}. \tag{19}$$

Використовуючи ці наближені вирази, гамільтоніан (15) можна звести до вигляду:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \tag{20}$$

де

$$\hat{H}_0 = E_0 + \left[\mu B + L(0)\right]\sum_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} - S\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}, \tag{21}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{n}} J(\mathbf{n}-\mathbf{m})\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}.$$

Енергетичний спектр ізотропного феромагнетика за малих збуджень

У наближенні малого числа збуджень $\left\langle\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}\right\rangle \ll S$ оператор $\hat{H}_{\text{int}}$ (20) можна розглядати як збудження. Тоді в нульовому наближенні енергетичний спектр спінових збуджень визначається оператором

$$\Delta\hat{H} = \hat{H} - E_0 = \left[\mu B + L(0)\right]\sum_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} - S\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}} \tag{22}$$

Діагоналізація оператора (22) відбувається канонічним перетворенням до операторів народження та знищення $\hat{\mu}_{\mathbf{k}}^{+}, \hat{\mu}_{\mathbf{k}}$ елементарних спінових збуджень - **магнонів**, які характеризуються певним значенням квазіімпульсу $\hbar\mathbf{k}$. Якщо кристал містить N елементарних комірок, то зазначене перетворення має вигляд:

$$\hat{\mu}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mu}_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{kn}\right). \qquad (23)$$

Підставивши цей вираз до (22), здобудемо

$$\Delta\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E\left(\mathbf{k}\right) \hat{\mu}_{\mathbf{k}}^{+} \hat{\mu}_{\mathbf{k}}, \qquad (24)$$

де

$$E(\mathbf{k}) = \mu B + \varepsilon(\mathbf{k}),$$

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = L(0) - L(\mathbf{k}), \quad L(\mathbf{k}) = S \sum_{\mathbf{n} \neq 0} J(\mathbf{n}) \exp(i\mathbf{kn}).$$

У зв’язку з тим, що обмінні інтеграли $J(\mathbf{n})$ експоненціально убувають

$$J(\mathbf{n}) \sim \exp\left(\frac{2|\mathbf{n}|}{a_B}\right), \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 5 \bullet 10^{-9} cm,$$

зі збільшенням $\mathbf{n}$, в останній сумі можна враховувати тільки взаємодію з найближчими атомами. Якщо ν - число найближчих сусідів (6 для простої кубічної ґратки, 8 для об’ємноцентричної і 12 - для гранецентричної) у кубічному кристалі з постійною ґратки a, то

$$L(\mathbf{k}) = SJ\nu \cos ka \qquad (25)$$

Отже, в області малих значень $ka \ll 1$ закон дисперсії енергії магнонів можна записати у вигляді:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = L(0) - L(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*},$$

де

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\nu S J a^2}$$

- ефективна маса магнона. Для оцінки ефективної маси можна покласти $\nu = 6$, $S = 1/2$, $a = 10^{-8} cm$, $J = \kappa T_c$, κ - постійна Больцмана, T_c - температура Кюрі, тоді

$$m^* \approx 10^4 m_e / T_c,$$

де m_e - маса електрона.

Існує певна аналогія між спіновими хвилями й коливаннями атомів у твердих тілах. Магнони й фонони привносять вклади в теплоємність твердого тіла. У кристалах чистих феромегнатніх металів у кожній елементарній комірці є по одному іону. Тому в цих кристалах існує тільки одна гілка спінових хвиль. При цьому енергія магнонів прямує до нуля при наближенні їх хвильових векторів до центру зони Бріллюен. Цю гілку коливань називають акустичною гілкою магнонів.

У феромагнітних сплавах ($Fe-Cr$, $Fe-Ni$, $Fe-Ni-Al$ та ін.) в елементарній комірці міститься декілька магнітоактивних іонів. Вони мають і відповідне число гілок спінових хвиль. Одна з них акустична. Частоти інших прямують до скінченних границь при збільшенні довжини хвилі. Ці гілки називають оптичними гілками магнонів.