Лекция №18

Ферромагнетики и антиферромагнетики

1. Взаимодействие между магнонами

На прошлой лекции мы получили спектр изотропного ферромагнетика при малых возбуждениях. При этом мы исходили из полученного нами гамильтониана

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \tag{1}$$

где

$$\hat{H}_0 = E_0 + \left[\mu B + L(0)\right]\sum_{\mathbf{n}} \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} - S\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}, \tag{2}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2}J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}},$$

где $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ - операторы спиновых возбуждений. Такие операторы могут быть введены по методу методом Голдстейна – Примакова. А именно, если атом имеет спин S, то

$$\hat{S}_{\mathbf{n}} = \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\sqrt{2S - \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}}, \quad \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+} = \sqrt{2S - \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}}\,\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \quad \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z} = S - \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \tag{3}$$

где $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ - операторы рождения и уничтожения спинового возбуждения на узле $\mathbf{n}$ кристалла. При этом под спиновыми возбуждениями молекулы мы будем понимать уменьшение на единицу проекции спина вдоль магнитного поля. Перестановочные соотношения для операторов спинов удовлетворяются, если операторы $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}$, $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям

$$\left[\hat{\mu}_{\mathbf{n}}, \hat{\mu}_{\mathbf{m}}^{+}\right] = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}. \tag{4}$$

Напомним, что операторы под знаком корня надо понимать в смысле разложения соответствующего корня в (16) в бесконечный ряд по операторам $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$

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

В приближении малого числа возбуждений $\left\langle \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} \right\rangle \ll S$ оператор $\hat{H}_{\mathrm{int}}$ (20) можно рассматривать как возмущение. Тогда в нулевом приближении энергетический спектр спиновых возбуждений определяется оператором

$$\Delta\hat{H} = \hat{H} - E_0 = \left[\mu B + L(0)\right]\sum_{\mathbf{n}} \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{n}} - S\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{m}} \qquad (5)$$

Диагонализация оператора (22) осуществляется каноническим преобразованием к операторам рождения и уничтожения $\hat{\mu}_{\mathbf{k}}^{+}, \hat{\mu}_{\mathbf{k}}$ элементарных спиновых возбуждения – **магнонов**, характеризующихся определенным значением квазиимпульса $\hbar\mathbf{k}$. Если кристалл содержит N элементарных ячеек, то это преобразование имеет вид:

$$\hat{\mu}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \hat{\mu}_{\mathbf{k}} \exp\left(i\mathbf{kn}\right). \qquad (6)$$

Подставив это выражение в (22), получим

$$\Delta\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E\left(\mathbf{k}\right)\hat{\mu}_{\mathbf{k}}^{+}\hat{\mu}_{\mathbf{k}}, \qquad (7)$$

где

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

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

Если ν - число ближайших соседей (6 для простой кубической решетки, 8 для объемноцентрированной и 12 для гранецентрированной) в кубическом кристалле с постоянной решетки a, то

$$L(\mathbf{k}) = SJ\nu\cos ka \qquad (8)$$

Следовательно, в области малых значений $ka \ll 1$ закон дисперсии энергии магнонов можно записать в виде:

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

где

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\nu SJa^2}, \quad m^* \approx 10^4 m_e / T_c,$$

- эффективная масса магнона.

Имеется определенная аналогия между спиновыми волнами и колебаниями атомов в твердых телах. Магноны и фононы вносят вклад в теплоемкость твердого тела. В кристаллах чистых ферромагнитных металлов в каждой элементарной ячейке имеется по одному иону. Поэтому в этих кристаллах только одна ветвь спиновых волн. При этом энергия магнонов стремится к нулю при приближении их волновых векторов к центру зоны Бриллюэна. Эту ветвь называют акустической ветвью магнонов.

В ферромагнитных сплавах ($Fe-Cr,\ Fe-Ni,\ Fe-Ni-Al$ и др.) в элементарной ячейке содержится несколько магнитоактивных ионов. Они имеют и соответствующее число ветвей спиновых волн. Одна из них акустическая. Частоты других ветвей стремятся к конечным пределам при увеличении длины волны. Эти ветви называются оптическими ветвями магнонов.

Взаимодействие магнонов с колебаниями решетки.

В нулевом приближении энергетический спектр спиновых возбуждений в кристалле определяется приведенным выше выражением только при условии жесткого закрепления ионов ферромагнетика в узлах решетки. Если учесть возможность их смещения из равновесных положений, то надо рассмотреть зависимость обменных интегралов $J(\mathbf{n}-\mathbf{m})$ от смещений $\vec{\xi}_{\mathbf{n}},\vec{\xi}_{\mathbf{m}}$ ионов.

При малых смещениях ионов из положения равновесия следует заменить $J(\mathbf{n}-\mathbf{m})$ в приведенных выше гамильтонианах разложением:

$$J(\mathbf{n}-\mathbf{m})+\left(\vec{\xi}_{\mathbf{n}}-\vec{\xi}_{\mathbf{m}}\right)\mathbf{D}_{\mathbf{nm}}+\ldots, \tag{9}$$

где

$$\mathbf{D}_{\mathbf{nm}}\equiv\left(\frac{\partial J(\mathbf{n}-\mathbf{m})}{\partial\left(\vec{\xi}_{\mathbf{n}}-\vec{\xi}_{\mathbf{m}}\right)}\right)_0 .$$

Проводя такую замену и переходя к операторам смещений, получим оператор взаимодействия спиновых возбуждений и колебаний решетки

$$\hat{H}_{sp,vib}=-S\sum_{\mathbf{nm}}\left(\vec{\xi}_{\mathbf{n}}-\vec{\xi}_{\mathbf{m}}\right)\mathbf{D}_{\mathbf{nm}}\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{n}}\hat{\mu}_{\mathbf{m}}. \tag{10}$$

Переходя в этом выражении к операторам рождения и уничтожения магнонов и фононов $\hat{b}^{+}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}}$ с помощью приведенных выше формул, а также выражения

$$\hat{\xi}_{\mathbf{n}} = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\Omega(\mathbf{k})}} \mathbf{e}(\mathbf{k}) \left(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}^{+}_{-\mathbf{k}} \right),$$

получим оператор взаимодействия с участием двух магнонов и одного фонона

$$\hat{H}_{sp,vib} = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{g}} \left[D(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - D(\mathbf{k}) \right] \left(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}^{+}_{-\mathbf{k}} \right) \hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}} \hat{\mu}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{g}}, \tag{11}$$

$$D(\mathbf{k}) = S \sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\Omega(\mathbf{k})}} \mathbf{D}_{\mathbf{nm}} \mathbf{e}(\mathbf{k}) \exp\left[\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{n}) \right].$$

Этот оператор описывает процессы испускания и поглощения фонона магнонов. Процесс испускания фонона можно рассматривать как черенковское излучение звуковых волн магноном. Условие такого излучения сводится к требованию, чтобы скорость магнона превышала скорость звука c_{ac}. Рассматривая магнон как квазичастицу с выписанной ранее эффективной массой, условие излучение фонона можно записать в виде:

$$\hbar k > m^{*} c_{ac}.$$

Взаимодействие между магнонами.

Магноны соответствуют собственным значениям гамильтониана (5). Этот гамильтониан получен из гамильтониана Гайзенберга в результате двух приближений : а) при учете в бесконечных рядах представлений спиновых операторов через операторы спиновых возбуждений только первого слагаемого; б) при пренебрежении оператором $\hat{H}_{\text{int}}$ в (2). При отказе от этих приближений магноны уже не будут независимыми возбуждениями. Между ними появится взаимодействие. Это взаимодействие принято делить на две части: а) динамическое взаимодействие, обусловленное оператором (2); б) кинематическое взаимодействие, обусловленное учетом последующих членов в разложении операторов (3) в ряд по $\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{n}} \hat{\mu}_{\mathbf{n}}$.

Рассмотрим сначала оператор динамического взаимодействия. Проведя в (2) преобразование к операторам коллективных мод – магнонам, получим

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2NS} \sum L(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}} \hat{\mu}_{\mathbf{k}'} \hat{\mu}^{+}_{\mathbf{q}} \hat{\mu}_{\mathbf{q}'}, \tag{12}$$

где по прежнему

$$L(\mathbf{k}) = S\sum_{\mathbf{n}\neq 0} J(\mathbf{n})\exp(i\mathbf{kn})$$

и суммирование производится по всем $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}'$ при условии выполнения равенства

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{q}' = \mathbf{g}$$

где $\mathbf{g}$ - произвольный вектор обратной решетки. Оператор четвертого порядка по магнонным операторам описывает рассеяние магнонов друг на друге.

Чтобы получить оператор кинематического взаимодействия магнонов, необходимо в исходном гамильтониане спиновых взаимодействий учесть члены следующего порядка в разложении спиновых операторов по операторам спиновых возбуждений. После выполнения необходимых выкладок с переходом до операторов рождения и уничтожения магнонов получим

$$\hat{H}'_{\text{int}} = \frac{1}{4NS}\sum L(\mathbf{k})\left(\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}}\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}'}\hat{\mu}_{\mathbf{q}}\hat{\mu}_{\mathbf{q}'} + \hat{\mu}_{\mathbf{q}}\hat{\mu}_{\mathbf{q}'}\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}}\hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}'}\right),$$

где суммирование проводится по всем значениям $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{q}'$, лежащим в первой зоне Бриллюэна и удовлетворяющим условиям

$$\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{g}.$$

Теплоемкость газа магнонов.

Взаимодействие магнонов между собой и с фононами колебаний решетки приводит к изменению их числа и к установлению термодинамического равновесия. Как уже отмечалось, при малых плотностях магнонов их можно рассматривать как бозе-частицы с соответствующим законом коммутации. Поскольку число магнонов не сохраняется, их химический потенциал равен нулю и среднее число магнонов с волновым вектором $\mathbf{k}$ и энергией $E(\mathbf{k})$ при температуре $\Theta = k_B T$ определяется так же, как и число фононов, формулой

$$\langle N_{\mathbf{k}}\rangle \equiv \langle \hat{\mu}^{+}_{\mathbf{k}}\hat{\mu}_{\mathbf{k}}\rangle = \left(\exp\frac{E(\mathbf{k})}{\Theta} - 1\right)^{-1}. \tag{13}$$

При отсутствии внешнего магнитного поля

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m^*}.$$

Средняя энергия магнонов в кристалле с одним ионом в элементарной ячейке равна

$$\langle E\rangle = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})\langle N_{\mathbf{k}}\rangle . \tag{14}$$

Если в кристалле N элементарных ячеек объема v, то, переходя в этой формуле от суммирования к интегрированию, получим

$$\langle E\rangle = E_0 + \frac{vN\left(2m^*\Theta\right)^{5/2}}{4\pi^2 m^* \hbar^3} \int_0^{x_0} \frac{x^4 dx}{e^{-x^2}-1}, \tag{15}$$

где

$$x_0 = \frac{\hbar k_{\max}}{\sqrt{2m^*\Theta}} .$$

При низких температурах, когда $x_0 \gg 1$, верхний предел интеграла можно заменить бесконечностью, тогда, учитывая, что

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 dx}{e^{x^2}-1} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}\zeta(5/2)$$

где $\zeta(x)$ - дзета-функция Римана, $\zeta(5/2) \approx 1{,}341$, имеем

$$\langle E\rangle = E_0 + AV\Theta^{5/2}, \quad x_0 \gg 1, \tag{16}$$

где

$$A = \frac{3}{4\sqrt{2}}\left(\frac{m^*}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2} .$$

Следовательно, удельная теплоемкость магнонного газа при низких температурах определяется законом

$$C_v = a_{mag}\Theta^{3/2}, \quad a_{mag} = \frac{5}{2} A k_B . \tag{17}$$

Теплоемкость фононного газа при низких температурах пропорциональна кубу температуры

$$C_v = a_{ph}\Theta^3, \quad a_{ph} = \frac{2\pi^2 k_B}{5\left(\hbar\bar{V}\right)^3}, \quad 3\bar{V}^{-3} = \sum_{\alpha} V_a^{-3},$$

где V_α - скорость звука соответствующей ветви колебаний. Это обстоятельство позволяет выделить теплоемкость магнонного газа из общей теплоемкости твердого тела. В самом деле, если

$$C_v = a_{ph}\Theta^3 + a_{mag}\Theta^{3/2}, \tag{18}$$

то график зависимости функции

$$\Theta^{-3/2} C_v = a_{ph}\Theta^{3/2} + a_{mag}$$

от $\Theta^{3/2}$ будет прямой линией. Наклон этой прямой определяет величину a_{ph}, а точка пересечения с осью ординат определяет величину a_{mag}. Зная эту величину, можно вычислить эффективную массу магнона. Наличие магнонов в кристалле уменьшает магнитный момент $M_0 = \mu_0 SN$ его основного состояния. Средний магнитный момент вдоль оси намагничения кристалла определяется выражением

$$\left\langle \hat{M}_z \right\rangle = \mu_0 \sum_{n=1}^{N} \left\langle \hat{S}_n^z \right\rangle,$$

где μ_0 - магнетон Бора. Подставляя $\hat{S}_{\mathbf{n}}^z = S - \hat{\mu}_{\mathbf{n}}^+ \hat{\mu}_{\mathbf{n}}$, используя преобразования $\hat{\mu}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mu}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{kn})$ и формулу (13), имеем

$$\left\langle \hat{M}_z \right\rangle = M_0 \left(1 - \xi\right), \tag{19}$$

где

$$M_0 = \mu_0 SN,$$

$$\xi = \frac{v\left(2m^*\Theta\right)^{3/2}}{2\pi^2 S\hbar^3} \int_0^{x_0} \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} = \frac{v}{2\pi^2 S}\left(\frac{2m^*\Theta}{\hbar^2}\right)^{3/2} \zeta\left(3/2\right), \quad x_0 \gg 1, \quad \zeta\left(3/2\right) \approx 2{,}612.$$

Следовательно, при низких температурах магнитный момент кристалла уменьшается при возрастании температуры пропорционально $\Theta^{3/2}$ - закон трех вторых Блоха.