

Московский физико-технический институт
Кафедра общей физики

Лекция 13

МАГНЕТИЗМ: СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
МАГНЕТИКОВ

заметки к лекции по общей физике

В.Н.Глазков

2022

Это пособие содержит материалы по завершающей теме курса, связанной с физикой магнитных явлений. Физика магнитных явлений является разделом физики конденсированного состояния с большим кругом изучаемых задач и разнообразием применяемых методов. В рамках лекции рассматриваются основы этого раздела физики: понятие магнитного упорядочения и применение к его описанию модели среднего поля, коллективные степени свободы упорядоченного магнетика, их квантование и вклад магнонов в наблюдаемые величины. Основные сведения могут быть также найдены в книге Ч.Киттеля [1] (главы 15-17).

Также в пособие включены разделы, написанные на основе современной научной литературы. Разделы, являющиеся дополнительными к лекционному курсу отмечены символом (†).

Основной обязательный материал на лекции:

1. Магнитный порядок в кристаллах. Гейзенберговская, изинговская и XY-модели взаимодействия.
2. Ферромагнетик в модели молекулярного поля.
3. Спиновые волны, их спектр, вклад спиновых волн в теплоёмкость и намагниченность.

Оглавление

Исследование магнитных систем.....	6
Предмет физики магнетиков.....	6
Экспериментальные методы исследования.....	6
«Шкала» магнитных полей современной экспериментальной физики.....	7
Парамагнетизм и диамагнетизм атомов и молекул.....	13
Парамагнетизм свободных атомов. Парамагнитная восприимчивость. Закон Кюри.....	13
Диамагнетизм [†]	14
Парамагнетизм ван Флека [†]	14
Магнитный порядок в диэлектрических кристаллах.....	15
Замораживание орбитального момента в кристаллах.....	15
Виды магнитного упорядочения в кристаллах. Изменение симметрии при магнитном упорядочении.....	16
Обменное взаимодействие между магнитными ионами.....	18
Гейзенберговский гамильтониан.....	18
Косвенное обменное взаимодействие. [†]	20
Классический предел.....	21
Модель Изинга и XY-модель спин-спинового взаимодействия.....	21
Модель молекулярного поля.....	23
Магнетик выше температуры упорядочения. Закон Кюри-Вейса.....	23
Ферромагнетик ниже температуры Кюри.....	25
Поведение магнетиков в магнитном поле.....	27
Восприимчивость ферромагнетика ниже температуры упорядочения.....	27
Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.....	29
Квантовое рассмотрение антиферромагнетика выше поля насыщения.....	31
Молекулярные магнетики [†]	33
Спиновые волны.....	37
Элементарные возбуждения ферромагнетика.....	38
Элементарное возбуждение одномерного ферромагнетика в модели Изинга. [†]	40
Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.....	41
Спиновые волны в антиферромагнетике. Классическое рассмотрение. [†]	42
Примеры спектров спиновых волн в реальных средах.....	43
Экспериментальные методы изучения спиновых волн.....	43
Спиновые волны в ферро- и ферримагнетиках: эксперимент.....	44
Спиновые волны в антиферромагнетике MnF_2 . [†]	45
Квантование спиновых волн. Вклад спиновых волн в теплоёмкость и намагниченность ферромагнетика.....	47
Необычные виды магнитного порядка и разупорядоченные магнитные состояния. [†]	51
Неколлинеарные антиферромагнетики.....	51
Антиферромагнетики со спиральным упорядочением.....	52
Магнетики с геометрической фрустрацией обменного взаимодействия.....	53
Двумерная модель Изинга.....	56
«Спиновый лёд».....	59
Димерные магнетики: отсутствие упорядочения из-за квантовых эффектов.....	62
Переход Березинского-Костерлица-Таулеса.....	64

Список литературы

- 1: Ч.Киттель, Введение в физику твёрдого тела, 1978
- 2: C. G. Shull, W. A. Strauser, and E. O. Wollan, Neutron Diffraction by Paramagnetic and Antiferromagnetic Substances, 1951
- 3: В.Н.Глазков, Методы изучения структуры и колебаний кристаллов, 2016
- 4: CERN, Pulling together: Superconducting electromagnets , 2021, <https://home.cern/science/engineering/pulling-together-superconducting-electromagnets>
- 5: HMFL, 32T Team, 32 Tesla All-Superconducting Magnet , 2017, <https://nationalmaglab.org/magnet-development/magnet-science-technology/magnet-projects/32-tesla-scm>
- 6: NHFML, National High Magnetic Field Laboratory Homepage, 2017, <https://nationalmaglab.org/>
- 7: LNCMI-Grenoble, Laboratoire Nationale des Champs Magnetique Intense, 2017, <http://lncmi-grenoble.cnrs.fr/>
- 8: HMF-Osaka, Center for Advanced High Magnetic Field Studies, 2017, http://www.ahmf.sci.osaka-u.ac.jp/index_e.html
- 9: M. Hagiwara, T. Kida, K. Taniguchi, K. Kindo, Present Status and Future Plan at High Magnetic Field Laboratory in Osaka University, 2013
- 10: P.L. Kapitza, A Method of Producing Strong Magnetic Fields, 1924
- 11: ВНИИЭФ, ВНИИЭФ-Электрофизика, 2017, <http://vniief.ru/wps/wcm/connect/vniief/site/researchdirections/Research/electrophysics/>
- 12: Кудасов Ю.Б., Волков А.Г., Повзнер А.А., Баянкин П.В., Быков А.И., Гук В.Г., Долотенко М.И., Колокольчиков Н.П., Крюк В.В., Монахов М.П., Маркевцев И.М., Платонов В.В., Селемир В.Д., Таценко О.М., Филиппов А.В., Переход полупроводник-металл в FeSi в сильном магнитном поле, 1999
- 13: D. Nakamura, A. Ikeda, H. Sawabe, Y. H. Matsuda, and S. Takeyama, Record indoor magnetic field of 1200 T generated by electromagnetic flux-compression, 2018
- 14: S.K. Moore, Magnetic Field Record Set With a Bang: 1,200 Tesla, 2018, <https://spectrum.ieee.org/nanoclast/semiconductors/nanotechnology/magnetic-field-record-set-with-a-bang-1200-tesla>
- 15: В.Я.Френкель, К истории эффекта Эйнштейна -де Гааза, 1979
- 16: Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика, том.3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория.,
- 17: С.А.Альтшулер и Б.М.Козырев, Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп, 1972
- 18: Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Том VIII. Электродинамика сплошных сред, 1992
- 19: P. W. Anderson, Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction, 1950
- 20: E. Pavarini, E. Koch, F. Anders, and M. Jarrell (eds.), Correlated Electrons: From Models to Materials, , <http://www.cond-mat.de/events/correl12/manuscripts/koch.pdf>
- 21: Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Статистическая физика т.5,
- 22: J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless, Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems, 1973
- 23: L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, 2001
- 24: M Hagiwara, K Katsumatay, I Yamada and H Suzuki, Antiferromagnetic resonance in MnF2 over wide ranges of frequency and magnetic field, 1996
- 25: R. Coldea, D. A. Tennant, K. Habicht, P. Smeibidl, C. Wolters, and Z. Tylczynski, Direct Measurement of the Spin Hamiltonian and Observation of Condensation of Magnons in the 2D Frustrated Quantum Magnet Cs₂CuCl₄, 2002
- 26: Jürgen Schnack, Mirko Brüger, Marshall Luban, Paul Kögerler, Emilia Morosan, Ronald Fuchs,

- Robert Modler, Hiroyuki Nojiri, Ram C. Rai, Jinbo Cao, Janice L. Musfeldt, and Xing Wei, Observation of field-dependent magnetic parameters in the magnetic molecule $\{Ni_4Mo_{12}\}$, 2006
- 27: Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика том IX. Статистическая физика часть 2, 2002
- 28: Ч.Киттель, Квантовая теория твёрдых тел., 1967
- 29: B.N.Brockhouse, Slow Neutron Spectroscopy and the Grand Atlas of the Physical World, 1994
- 30: R.N.Sinclair and B.N.Brockhouse, Dispersion Relation for Spin Waves in a fcc Cobalt Alloy, 1960
- 31: Z. Yamani, Z. Tun, and D.H. Ryan, Neutron scattering study of the classical antiferromagnet MnF₂: a perfect hands-on neutron scattering teaching course., 2010
- 32: D. J. Lockwood and M. G. Cottam, Light scattering from magnons in MnF₂, 1987
- 33: Samuel S. Shinozaki, Specific Heat of Yttrium Iron Garnet from 1.5° to 4.2°K, 1961
- 34: Freeman J. Dyson, Thermodynamic Behavior of an Ideal Ferromagnet, 1956
- 35: A.C.Gossard, V.Jaccarino, J.P.Remeika, Experimental test of the spin-wave theory of a ferromagnet, 1961
- 36: V.N.Glazkov, A.M.Farutin, V.Tsurkan, H.-A.Krug von Nidda, A.Loidl, Evidence for orthorhombic distortion in the ordered state of ZnCr₂O₄:A magnetic resonance study, 2009
- 37: Д.Маттис, Теория магнетизма,
- 38: Hugo Keller and Iliia M.Savic, Moessbauer studies of the static and dynamic critical behavior of the layered antiferromagnets RbFeF₄ and KFeF₄, 1983
- 39: А.Пятаков, Спиновый лёд: фрустрированное царство., 2012
- 40: Linus Pauling, The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement, 1935
- 41: C.Castelnuovo, R.Moessner, S.L.Sondhi, Magnetic monopoles in spin ice, 2008
- 42: M.B.Stone, C.Broholm, D.H.Reich, P.Schiffer, O.Tchernyshyov, P.Vorderwisch and N.Harrison, Field-driven transition in a quasi-two dimensional quantum antiferromagnet, 2007
- 43: Thierry Giamarchi, Christan Rugg and Oleg Tchernyshyov, Bose–Einstein condensation in magnetic insulators, 2008
- 44: Vivien Zapf, Marcelo Jaime, and C. D. Batista, Bose-Einstein condensation in quantum magnets, 2014

Исследование магнитных систем

Предмет физики магнетиков

Магнетизм, физика магнитных явлений, является областью физики с большой историей и продолжает активно развиваться. Мы ограничимся рассмотрением магнитных диэлектриков, магнитные свойства которых связаны с локализованными на ионах магнитными моментами и с взаимодействием этих моментов. Мы обсудим классификацию магнетиков, простейшие модели для описания формирования магнитного порядка, свойства упорядоченных состояний и возможность их описания на языке квазичастиц, аналогичном языку фононов для описания упругих колебаний.

Интерес к физике магнитных явлений связан с тем, что взаимодействия между локальными магнитными моментами ионов имеют различную природу и могут иметь энергетические масштабы от долей градуса до сотен градусов, могут из-за особенностей кристаллической структуры сильно отличаться между магнитными ионами, соседствующими в различных направлениях, могут быть сильно анизотропны. Это может приводить не только к формированию привычных ферро- или антиферромагнитных состояний, но и к формированию экзотических магнитных структур, а спектры коллективных возбуждений (и соответствующих им квазичастиц) в таких системах также могут быть достаточно необычными.

При этом иногда возникает формальная эквивалентность между магнитными системами и фундаментальными физическими задачами: некоторые виды упорядочения могут описываться как бозе-эйнштейновская конденсация некоторых квазичастиц, задача об одномерной спиновой системе оказывается эквивалентна одномерной системе взаимодействующих фермионов (жидкости Латтинжера), в некоторых магнитных системах (квазиодномерные магнетики) взаимодействие возбуждений друг с другом растёт с расстоянием, демонстрируя свойства «конфайнмента». Всё это позволяет проверять различные теоретические модели на практике и обнаруживать новые явления. К сожалению, эти интересные вопросы выходят за рамки краткого курса и интересующимся можно предложить обратиться к специализированной литературе.

Экспериментальные методы исследования

Таким образом, предметом нашего обсуждения будут: фазовые переходы в разнообразные упорядоченные состояния, определение структуры этих упорядоченных состояний, изменение свойств под действием внешних воздействий (для магнетиков это, в первую очередь, приложенное магнитное поле), квазичастицы в магнетиках. Перечислим вкратце, какими экспериментальными методами можно пользоваться для определения этих свойств.

Факт фазового перехода часто можно установить по рутинным измерениям теплоёмкости и намагничённости: в точке фазового перехода второго рода теплоёмкость часто демонстрирует особенность, а изменение магнитной структуры магнетика при возникновении или изменении магнитного порядка отражается на зависимости намагничённости исследуемого образца от магнитного поля или температуры. Для этих измерений в современных лабораториях часто используются обсуждавшиеся в нашем курсе методы релаксационного измерения теплоёмкости и СКВИД-магнетометры.

При наступлении какого-либо вида магнитного порядка в системе — то есть, если локальная намагничённость атомов выстраивается каким-то регулярным образом — изменяется пространственная периодичность кристалла. Это приводит к тому, что, например, изменяется

картина дифракции нейтронов на образце [2] (рис. 1).

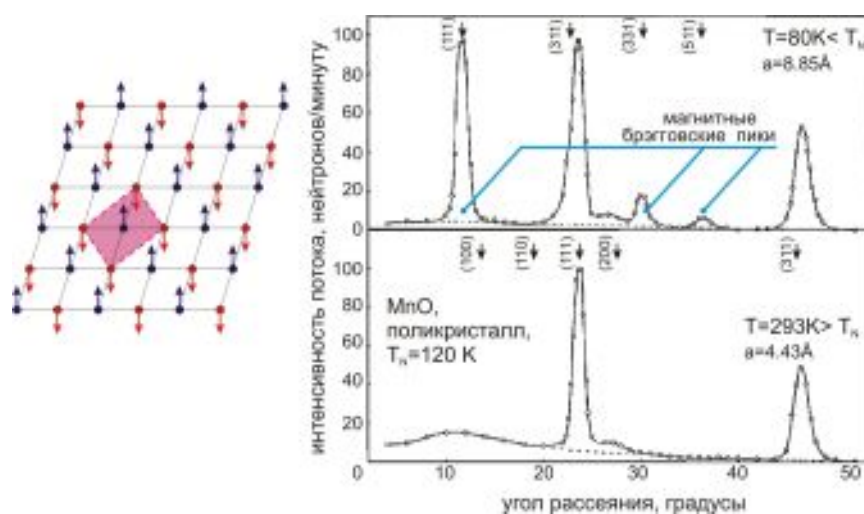


Рисунок 1: Слева: схема возникновения антиферромагнитного порядка на квадратной решётке. Цветом выделена примитивная ячейка магнитной структуры. Справа: изменение картины дифракции нейтронов на порошке антиферромагнетика MnO. На основе рисунка из работы [2].

Изменение картины дифракционных пиков при магнитном рассеянии нейтронов позволяет восстановить структуру расположения упорядоченных локальных магнитных моментов, их величину. Применение методики неупругого рассеяния нейтронов (см. методическое пособие [3]) позволяет определить спектры элементарных возбуждений магнетика.

Информацию о возбуждениях магнетика можно также получить методами комбинационного рассеяния света, магнитного резонанса. Информацию о локальных полях на магнитных ионах (фактически, о величине параметра порядка упорядоченной фазы) можно получить методами ЯМР, мессбауэровской спектроскопии.

Наконец, есть богатые экспериментальные возможности изучать поведение магнитных систем при различных условиях: температурах от милликельвин до тысяч кельвин, высоких давлениях, в сильных магнитных полях.

«Шкала» магнитных полей современной экспериментальной физики

Отклик магнетиков а внешнее магнитное поле является часто очень информативным. Поэтому в применении к изучению магнетиков используется весь «арсенал» доступных экспериментаторам лабораторных магнитных полей. Приведём здесь для информации характерные величины доступных в разных экспериментальных методиках магнитных полей.

Напомним, что магнитное поле Земли составляет около 1 Гс (или 10^{-4}Тл). Магнитное поле в солнечном пятне составляет около 5 кГс. Для того, чтобы зеemanовская энергия электрона в атоме стала порядка разности энергий между электронными уровнями энергии, необходимо поле порядка 10^8 Гс (в таком поле разрушится диктуемая правилами Хунда иерархия заполнения атомных термов). В некоторых типах нейтронных звёзд (магнетары) ожидается наличие магнитных полей до 10^{14} Гс. Сравним эту «линейку» природных магнитных полей с возможностями, доступными современному экспериментатору.

Поля до 1.5...2 Тл в лабораториях можно получить при помощи водоохлаждаемого резистивного магнита (рисунок 2). Такой магнит потребляет мощность порядка 10 кВт и весит около тонны. Такой магнит использует сердечник из материала с высокой магнитной проницаемостью, что позволяет усилить поле в зазоре между полюсами магнита. Максимальное поле такого магнита (около 2 Тл) ограничено насыщением материала сердечника: выигрыш в «усилении» поля пропадает, когда сердечник полностью намагничивается.



Рисунок 2 Резистивный водоохлаждаемый магнит на поле до 1.5 Тл в составе ЭПР спектрометра Bruker. С сайта bruker.com



Рисунок 3: Сверхпроводящий соленоид на поле 8 Тл. Фото автора.

Более высокие поля получают при помощи сверхпроводящих соленоидов. Если задача не требует высокой однородности поля или большого диаметра области, в которой поле создаётся, то такой соленоид может быть довольно компактным. Преимуществом сверхпроводящего соленоида является отсутствие потерь, часто их используют в короткозамкнутом режиме (после введения тока соленоид закорачивается и поддерживает ток неограниченно долго). Однако так как технологичные металлические сверхпроводники требуют температур жидкого гелия, такие соленоиды требуют специального криогенного оборудования¹.

Сверхпроводящие соленоиды изготавливают из сверхпроводников II рода с как можно более высоким вторым критическим полем и сильным пиннингом вихрей. Такие сверхпроводники сохраняют нулевое сопротивление и в смешанном состоянии в полях $H_{c1} < H < H_{c2}$. Однако, второе критическое поле в металлических сверхпроводниках не превышает примерно 20 Тл, что накладывает фундаментальное ограничение сверху на доступные в сверхпроводящих магнитах постоянные магнитные поля. Практически, соленоиды с не слишком высокими требованиями к однородности поля на поля до 10 Тл могут быть изготовлены самостоятельно из коммерчески доступного сверхпроводящего провода (рисунок 3). Соленоиды на поле 12-14 Тл разной геометрии доступны коммерчески.

¹ Это требование является достаточно мягким. Сейчас отработаны несколько технологий автономного поддержания криогенных температур. Например, в ЯМР томографы с полем от 3 Тл и выше, уже достаточно распространенных в больницах, используются именно такие автономные криосистемы.

Рекордные сверхпроводящие соленоиды позволяют достичь поля 22 Тл. В широко распространённых медицинских ЯМР томографах используются сверхпроводящие магниты, создающие поле 3 Тл. Сверхпроводящие магниты разных типов активно используются в современных ускорителях частиц, включая Большой адронный коллайдер [4].

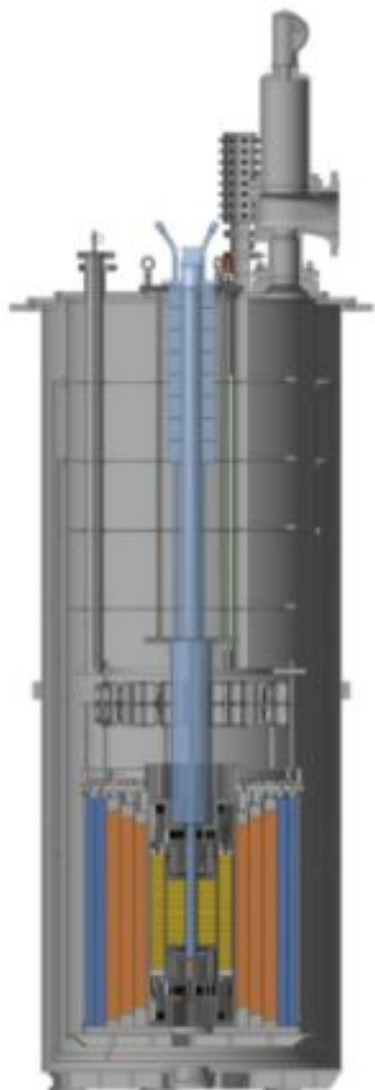


Рисунок 4: Рекордный сверхпроводящий соленоид на 32 Тл (достигнутое на 2016 год поле 27 Тл) в Национальной лаборатории высоких магнитных полей в Талахаси (Флорида, США). Слева: схема криостата с композитным соленоидом. Справа сверху: ВТСП катушка. Справа внизу: фрагмент ВТСП ленты. С сайта [5].

Этот рекорд поля в сверхпроводящем соленоиде был существенно превышен в Национальной лаборатории высоких магнитных полей в Талахаси (Флорида, США) [5]. Там запущен проект комбинированного сверхпроводящего магнита на поле 32 Тл, на котором в 2016 году было достигнуто промежуточное поле 27 Тл. Этот магнит (рисунок 4) состоит из магнита на 15 Тл из «обычных» сверхпроводящих сплавов NbTi и Nb₃Sn, а в сердцевине магнита находится дополнительный соленоид изготовленный из высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП) YBa₂Cu₃O_{7-x}. ВТСП имеет большее критическое поле, поэтому внутри ВТСП-катушки можно создать поле, превышающее второе критическое для «обычного» сверхпроводника. При этом вне катушки рассеянное поле мало (в пределах длинного соленоида оно вообще отсутствует), что позволяет не разрушать сверхпроводимость во внешних катушках. В сборе вся конструкция весит более 2 тонн.

Высокая температура перехода в сверхпроводящее состояние обуславливает высокие критические поля, однако ВТСП не являются технологичными металлами — это керамические материалы. Для изготовления сверхпроводящего «провода» керамическое покрытие наносят на металлическую ленту. Современные технологии позволяют получать ленту с непрерывным покрытием длиной до 10 км.

Дальнейшее повышение поля при помощи сверхпроводящих соленоидов невозможно (во всяком случае до появления новых материалов с существенно большими критическими полями) и используются комбинированные магниты: сверхпроводящий соленоид комбинируется с водоохлаждаемым резистивным соленоидом. Эта технология позволяет получать стационарные поля до примерно 40 Тл, однако потребляемая электрическая мощность в таком магните измеряется десятками мегаватт. Это специализированные установки, расположенные обычно в лабораториях высоких магнитных полей. Такие лаборатории являются часто международными научными центрами, лидирующие лаборатории расположены в Талахаси (Флорида, США) [6], Гренобле (Франция) [7], Осаке (Япония) [8].

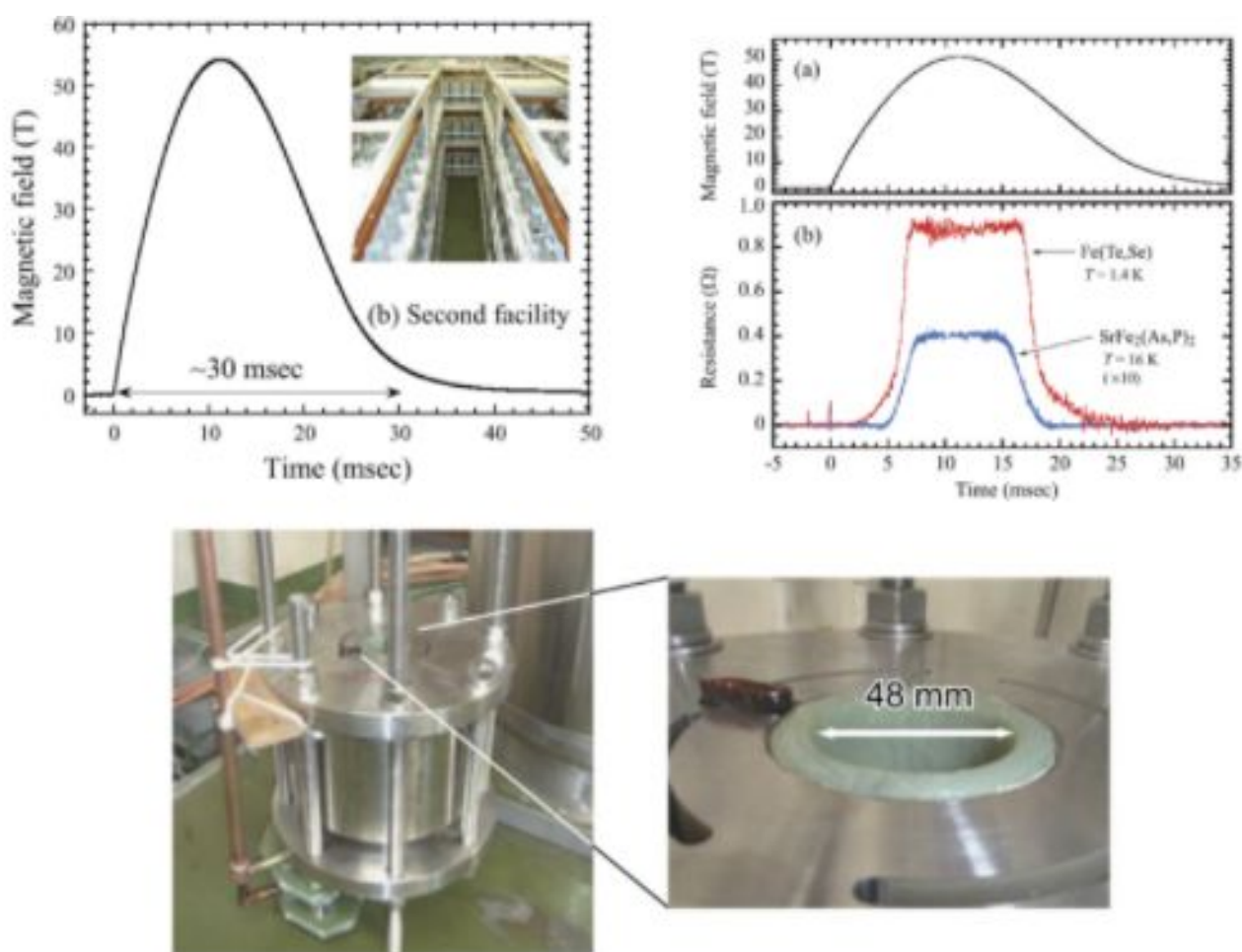


Рисунок 5 Получение импульсных магнитных полей в лаборатории высоких магнитных полей Университета Осаки. Слева сверху: профиль импульса поля и вид конденсаторной батареи (запасенная энергия 2 МДж). Внизу: вид на катушку для получения высокого магнитного поля. Справа сверху: импульс поля и зависимость от времени сопротивления двух сверхпроводящих соединений на основе железа (сопротивление возникает выше поля разрушения сверхпроводимости). Из статьи [9].

Создание стационарных магнитных полей выше 40 Тл оказывается экономически нецелесообразным: потери энергии растут квадратично с полем. Поля до примерно 100 Тл

получают импульсными методами: в катушку кратковременно вводят большой ток (например, разряжая батарею конденсаторов) (рисунок 5) [9]. Одним из первых опыты по получению импульсных высоких магнитных полей ставил П.Л.Капица в Кембридже, получивший в начале 20-х годов XX века поля до 30 Тл [10].

Рекордные магнитные поля до 1000 Тл² получают также импульсно методом взрывного сжатия проводящего контура, например в Сарове [11]. Индукционные токи стремятся сохранить поток через контур $\Phi = BS = const$, поэтому при уменьшении сечения контура индукция в контуре резко возрастает. Для быстрого сжатия используется взрывчатое вещество, время эксперимента ограничено временем распространения ударной волны до места расположения образца и окружающих его датчиков [12]. Отметим, что такое взрывное сжатие необходимо не только для того, чтобы при быстром сжатии сверхпроводящего контура можно было пренебречь потерями, но и для того, чтобы преодолеть давление магнитного поля: плотность энергии магнитного поля $\frac{H^2}{8\pi}$ определяет давление, с которым магнитное поле давит на «стенки» создающего его соленоида: в поле 100 Тл (10⁶ Гс) это составляет порядка 50,000 атмосфер.

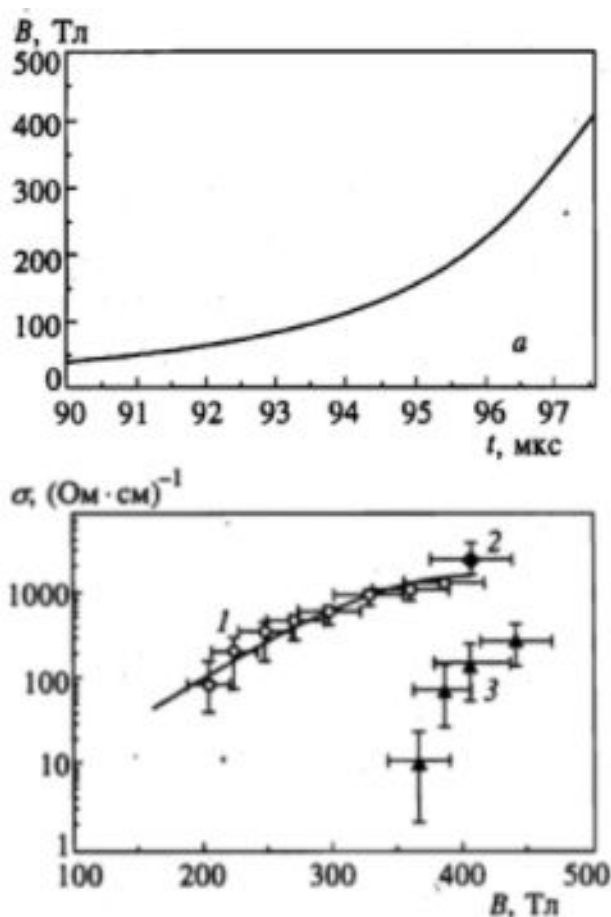


Рисунок 6 Слева: экспериментальная установка по получению сверхсильного магнитного поля до эксперимента. С сайта [11]. Справа: профиль магнитного поля в импульсе на финальной стадии импульса и пример измеренных на двух образцах кривых магнитосопротивления в сверхвысоких полях. Из статьи [12].

2 Абсолютным рекордом является достижение поля 2800 Тл (28 МГс) в объёме 2 см³, эксперимент требовал примерно 140 кг взрывчатого вещества [11].

В 2018 году был установлен рекорд «комнатного» магнитного поля: в Лаборатории высоких магнитных полей Университета Токио было достигнуто поле 1200 Тл [13][14].

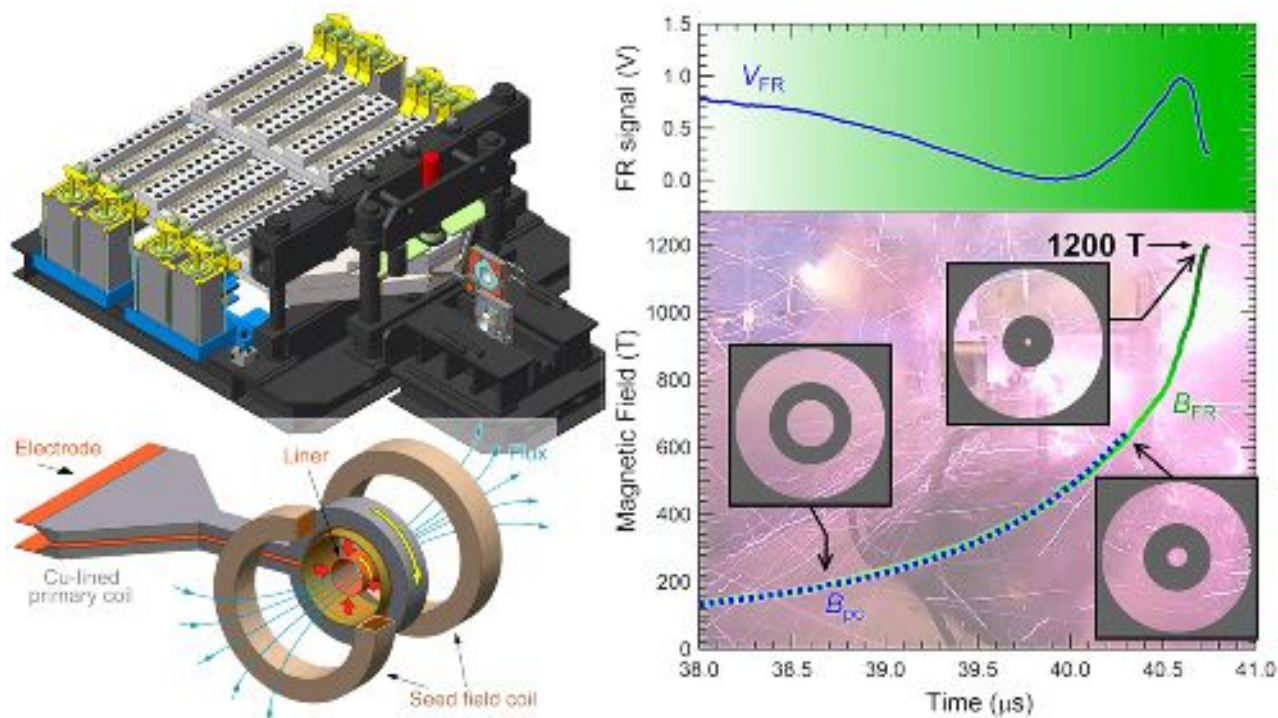


Рисунок 7: Схема эксперимента 2018 года по получению сверхсильного магнитного поля в Университете Токио (с сайта [14]). Слева сверху - общая схема установки с батареей конденсаторов, запасующей около 5 МДж энергии. Слева внизу: система катушек экспериментальной установки. Справа: зависимость магнитного поля внутри сжимаемой катушки от времени.

Здесь для сжатия магнитного потока используются индуктивные силы: при разрядке батареи конденсаторов на катушки возникающее поле сжимает проводящий «лайнер», в котором в свою очередь возникают индукционные токи, поддерживающие поток индукции и «сжимающие» поле внешних катушек.

Парамагнетизм и диамагнетизм атомов и молекул.

Парамагнетизм свободных атомов. Парамагнитная восприимчивость. Закон Кюри.

В качестве простейшей модели рассмотрим систему невзаимодействующих атомов с ненулевым полным моментом J . В магнитном поле будет снято вырождение по проекции полного момента:

$$\hat{H} = g \mu_B B \hat{J}^z = -B \hat{\mu}^z,$$

где B – величина индукции магнитного поля, направление поля является осью квантования, а g — фактор Ланде (g-фактор). Выбор знака перед g-фактором является во многих случаях вопросом договоренности, выбранный выше знак соответствует отрицательному гиромагнитному отношению для электрона (проекции полного момента и магнитного момента на ось квантования противоположно направлены).

Проекция намагниченности иона в состоянии с проекцией момента J^z равна $-g \mu_B J^z$. Средняя намагниченность при температуре T находится усреднением с больцмановскими факторами³:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\sum_{m=-J}^J (-g \mu_B m) e^{-g \mu_B B m / T}}{\sum_{m=-J}^J e^{-g \mu_B B m / T}}.$$

В простейшем случае $J=1/2$ получаем $\langle \mu \rangle = \frac{1}{2} g \mu_B \operatorname{th} \left(\frac{g \mu_B B}{2T} \right)$.⁴ В больших полях $g \mu_B B \gg T$ намагниченность стремится к насыщению $M_{sat} = g \mu_B / 2$. Это соответствует тому, что атом полностью поляризован вдоль поля. Для оценки отметим, что $\frac{\mu_B \times 1 \text{ Тл}}{k_B} = 0.67 \text{ К}$. То есть в поле 1 Тл насыщение возникает при температурах $\sim 1 \text{ К}$.

В малых полях $g \mu_B B \ll T$ намагниченность линейна по приложенному полю, что позволяет вычислить восприимчивость $\chi = \frac{\langle \mu \rangle}{B}$, которая в расчёте на атом для

$$J=1/2 \text{ равна } \chi = \frac{g^2 \mu_B^2}{4 k_B T}.$$

Для произвольного J $\chi = \frac{J(J+1) g^2 \mu_B^2}{3 k_B T}$, а на моль:

$$\chi_{mol} = \frac{N_A J(J+1) g^2 \mu_B^2}{3 k_B T} = \frac{C}{T} \approx \frac{J(J+1) g^2}{3 T} \times 0.375 \text{ ед. СГС} \cdot \text{К}.$$

Этот результат называют законом Кюри для парамагнетика, а постоянную C —

³ Постоянную Больцмана для компактности записи полагаем равной единице (температура измеряется в единицах энергии), в важных конечных формулах мы её вернём для совместимости ответов с литературой.

⁴ В общем случае $\langle \mu \rangle = g J \mu_B B_J(x)$, где $x = (g J \mu_B B) / T$, а B_J – функция Бриллюэна

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{cth} \frac{(2J+1)x}{2J} - \frac{1}{2J} \operatorname{cth} \frac{x}{2J}.$$

константой Кюри.

Диамagnetизм†

На классическом уровне, движение электронов по орбитам атома можно интерпретировать как контуры с током — а тогда при изменении потока внешнего магнитного поля через такой контур должны возникать индукционные токи, стремящиеся скомпенсировать внешнее поле. Магнитный момент таких токов, очевидно, направлен против внешнего поля, что соответствует диамagnetизму. Такой диамagnetный отклик должен присутствовать независимо от наличия парамагнитного магнетизма атомов. В частности, он должен присутствовать и для немагнитного ($J=0$) атома.

Рассмотрим возникновение диамagnetизма атома более строго. Рассмотрим орбитальное движение электрона в атоме, помещённом во внешнее магнитное поле. Гамильтониан

$$\text{принимает вид: } \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) = \hat{H}_0 + i\mu_B (\vec{\nabla} A + A \vec{\nabla}) + \frac{e^2}{2m c^2} A^2 .$$

Для вектор-потенциала поля, направленного вдоль Z , выбранного в виде $\vec{A} = \left(-\frac{yB}{2}; \frac{xB}{2}; 0 \right)$ второе слагаемое превращается в $i\mu_B B \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = B\mu_B \hat{L}^z$, что описывает орбитальный вклад в парамагнетизм, рассмотренный выше. Третье слагаемое равно $\frac{e^2}{8m c^2} B^2 (x^2 + y^2)$, оно сохраняется даже если $L=0$. То есть, это слагаемое описывает вклад в энергию атома в магнитном поле, не зависящий от наличия парамагнитного момента. Положительная поправка к энергии атома, связанная с этим эффектом, в первом порядке теории возмущений:

$$E = \frac{e^2}{8m c^2} B^2 \langle x^2 + y^2 \rangle, \text{ а для сферически симметричного случая } E = \frac{e^2}{12m c^2} B^2 \langle r^2 \rangle .$$

Соответствующий диамagnetный момент равен $\mu = -\frac{\partial E}{\partial B} = -\frac{e^2 \langle r^2 \rangle}{6m c^2} B$, этот результат называется Ланжевенским диамagnetизмом. Ланжевенская диамagnetная восприимчивость не зависит от температуры и равна $\chi_{dia} = -\frac{e^2 \langle r^2 \rangle}{6m c^2}$.

Парамагнетизм ван Флека†

В некоторых случаях при описании экспериментальных результатов оказывается существенен магнитный отклик атомов, у которых в основном состоянии (обозначаемом далее $|0\rangle$) намагнитченности нет, то есть $\langle 0 | \hat{\mu}^z | 0 \rangle = 0$.

Пусть у атома имеется возбужденный уровень $|1\rangle$, энергия которого $E_1 - E_0 = \Delta$, такой, что $\langle 1 | \hat{\mu}^z | 0 \rangle \neq 0$. Для выполнения этого условия необходимо, чтобы в основном состоянии атома был полный момент $J=0$, но при этом $L=S \neq 0$. Тогда в магнитном поле возникнет смешивание волновых функций основного и возбужденного состояний и возникнет поправка к энергии атома во втором порядке теории возмущений:

$$E = -B^2 \frac{\langle 1 | \hat{\mu}^z | 0 \rangle^2}{\Delta} .$$

Знак поправки к энергии соответствует парамагнетизму, эффект не зависит от температуры при $T \ll \Delta$. Этот эффект называют парамагнетизмом ван Флека, соответствующая восприимчивость $\chi_{\text{вф}} = 2 \frac{|\langle 1 | \hat{\mu}^z | 0 \rangle|^2}{\Delta}$.

Магнитный порядок в диэлектрических кристаллах.

Замораживание орбитального момента в кристаллах.

Эксперимент показывает, что во многих важных случаях (для ионов переходных металлов, таких как медь или железо) магнитные свойства ионов, помещённых в кристаллическую структуру, оказываются практически чисто спиновыми — то есть связанными только со спиновым моментом иона.⁵

Это происходит из-за того, что в кристаллической решётке на ион действуют электрическое поле его соседей (называемое *кристаллическим полем*). Для кристаллов диэлектриков можно считать электронные оболочки ионов не перекрывающимися и рассматривать эффект от наличия заряженного окружения только как эффект создания неоднородного электрического поля. Задача об атоме в электрическом поле (эффекте Штарка) хорошо известна (см. например [16]), известно что во втором порядке теории возмущений возникает квадратичное по электрическому полю изменение энергии уровней, а в первом порядке теории возмущений возникает линейное по градиенту напряжённости электрического поля взаимодействие с

полем электрического квадрупольного момента иона ($\hat{V} = \frac{1}{6} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_k} \hat{Q}_{ik}$, где ϕ - потенциал электрического поля, а $\hat{Q}_{ik} = \sum e(3x_i x_k - \delta_{ik} r^2)$ - оператор квадрупольного момента иона). Во многих практически важных случаях квадрупольное взаимодействие, возникающее в первом порядке теории возмущений, оказывается важнее.

Без учёта взаимодействия с кристаллическим полем состояния иона вырождены по проекции орбитального момента (мы рассматриваем приближение слабой спин-орбитальной связи, хорошо работающее для переходных металлов, таких как медь и железо). Квадрупольный момент иона определяется распределением заряда по оболочкам и может быть выражен через орбитальный момент иона [16]: $\hat{Q}_{ik} = \frac{3Q}{2L(2L-1)} \left(\hat{L}_i \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_i - \frac{2}{3} \hat{L}^2 \delta_{ik} \right)$. Тогда взаимодействие квадрупольного электрического момента оболочек с градиентами электрического поля соседей приведёт к снятию вырождения по проекции орбитального момента.

Степень снятия вырождения зависит от симметрии электрического поля в месте расположения магнитного иона. Однако в реальности снятие вырождения в подавляющем большинстве случаев оказывается полным: даже если в исходной кристаллической структуре электрическое поле имело слишком высокую симметрию, иону оказывается энергетически выгодно слегка сместиться в менее симметричную позицию: проигрыш упругой энергии оказывается квадратичен по смещению, а выигрыш в энергии за счёт расщепления ранее

5 В связи с этим интересно вспомнить историю открытия эффекта Эйнштейна-де Гааза [15]. Первоначально опыт ставился в поиске «молекулярных токов», то есть орбитального магнетизма. Однако точные эксперименты показали, что гиромагнитное отношение для железа вдвое отличается от предсказания теории молекулярных токов — то есть, как мы теперь понимаем, соответствует именно спиновому магнетизму. Поучительно, что де Гааз и Эйнштейн в своих первых опытах из-за достаточно большой погрешности эксперимента получили результат для гиромагнитного отношения близкий к предсказанию теории молекулярных токов и из-за этого «прошли мимо» открытия спинового магнетизма.

вырожденного уровня линейно по смещению иона (этот эффект называется эффектом Яна-Теллера).

После полного снятия вырождения по проекции орбитального момента получившиеся уровни должны быть орбитальными синглетами $\langle i | \hat{L}_\alpha | i \rangle = 0$, так как в силу симметрии оператора квадрупольного момента к обращению времени состояния с противоположными проекциями орбитального момента имеют одинаковую энергию. Характерный масштаб расщепления уровней иона в кристаллическом поле для d-элементов составляет порядка 1эВ (10^4 см^{-1} [17] или 300 ТГц). Эта величина заметно превосходит и энергию зеемановского взаимодействия в достижимых полях, и возможные энергии межспинового взаимодействия (даже самое сильное обменное взаимодействие обычно имеет масштаб сотен кельвин).

В результате при приложении магнитного поля зеемановское взаимодействие должно учитываться как возмущение, так как величина расщепления уровней в кристаллическом поле очень велика. Так как $\hat{H}_Z = \mu_B (\hat{L} + 2\hat{S}) \vec{H}$, то в первом порядке для уровня являющегося орбитальным синглетом остаётся только спиновый вклад. Вклад орбитального магнетизма проявляется при учёте спин-орбитального взаимодействия в следующих порядках теории возмущений. В частности, отсюда следует, что эффективный g-фактор ионов в кристалле близок к чисто спиновому значению 2.00, что действительно наблюдается для многих ионов d-элементов [17]: для ионов Mn^{2+} и Fe^{3+} во многих случаях $g \approx 2.00$, для ионов Ni^{2+} $g \approx 2.1 \dots 2.3$, для Cu^{2+} $g \approx 2.0 \dots 2.2$, для Cr^{3+} $g \approx 1.96$.

Это «выключение» орбитального магнетизма в кристаллах называют замораживанием орбитального момента.

Виды магнитного упорядочения в кристаллах. Изменение симметрии при магнитном упорядочении.

У некоторых атомов и ионов имеется собственный спиновый и магнитный момент.⁶ Мы будем считать, что орбитальный момент полностью «заморожен», поэтому в рамках нашего рассмотрения спин и магнитный момент иона являются практически синонимами — эти величины отличаются всего лишь множителем $\vec{\mu} = -g \mu_B \vec{S}$.

Если такие атомы регулярно расположены в кристаллической структуре, то при наличии взаимодействия между этими магнитными моментами возможно формирование магнитно-упорядоченных структур, в которых, например, все атомные (локальные) магнитные моменты смотрят в одну сторону или регулярно чередуются. Если же локальные магнитные моменты случайно изменяют своё направление под действием тепловых или квантовых флуктуаций, то мы имеем дело с магнитно-неупорядоченным состоянием. Мы дополнительно сузим класс рассматриваемых явлений и будем рассматривать только упорядоченные состояния в которых у каждого магнитного иона есть ненулевой средний магнитный момент (называемый локальной намагниченностью) и эти средние магнитные моменты формируют регулярную последовательность.⁷

⁶ Мы рассматриваем здесь только вклад электронов в полный спиновый момент иона, поэтому этот спиновый момент «составлен» из спинов электронов незаполненных оболочек. Во многих случаях случаев спиновая конфигурация иона формируется благодаря сильным внутриионным взаимодействиям, а взаимодействие между ионами не разрушает эту конфигурацию, будучи более слабым. Поэтому, хотя спин электрона $S = 1/2$, спин магнитного иона может быть произвольным ($1/2$, 1 , $3/2$ и так далее, для редкоземельных ионов известны примеры когда полный момент иона равен $15/2$), мы в дальнейшем говоря о спине магнитного иона подразумеваем именно этот полный спин.

⁷ Это исключает из рассмотрения сложные формы порядка при которых на всех узлах решётки средние значения спина нулевые $\langle S_i^\alpha \rangle = 0$, но есть ненулевые многочастичные корреляторы на разных узлах

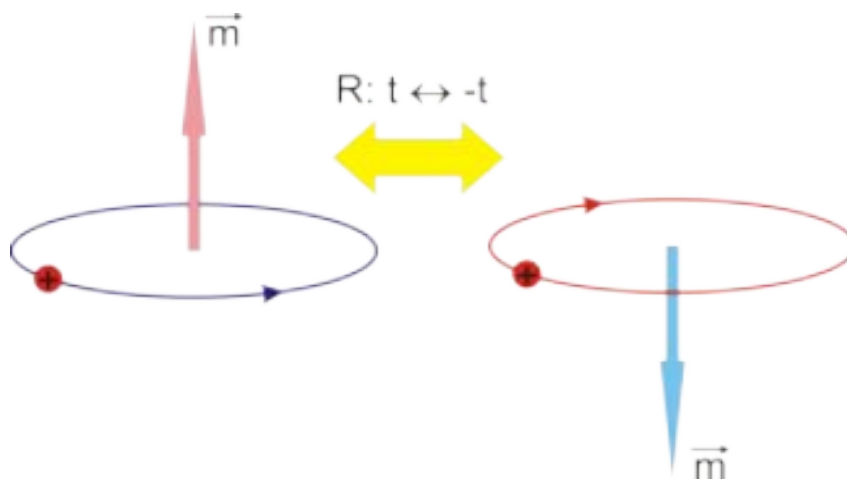


Рисунок 8 Изменение направления магнитного момента витка с током при преобразовании обращения времени.

Переход между магнитно-упорядоченным и неупорядоченным состояниями является в большинстве случаев фазовым переходом второго рода. Симметрия, нарушающаяся в точке перехода — это довольно необычная симметрия по отношению к обращению времени. Если представить себе, что мы изменили направление хода времени $t \rightarrow -t$ или, другими словами, мгновенно поменяли направления скоростей у всех частиц на противоположное, то для обычного кристалла ничего не изменится (кристалл формируется за счёт кулоновских сил и квантовых эффектов, не зависящих от направления скорости). Другими словами, кристаллические структуры инвариантны к преобразованию обращения времени. Однако магнитный момент при таком преобразовании меняет направление (тривиально проверяется на примере витка с током, рисунок 8).

Таким образом, при этом преобразовании магнитно-упорядоченная структура перейдёт не в себя, а в структуру, отличающуюся направлениями локальной намагниченности. Появление дополнительного преобразования симметрии приводит к увеличению числа пространственных групп симметрии, в отличие от 230 чисто пространственных кристаллографических групп с учётом магнитной симметрии имеется 1651 магнитная пространственная группа⁸ [18]. Параметром порядка при этом фазовом переходе является (в простых случаях, которые мы будем рассматривать) средняя величина намагниченности магнитного иона либо комбинация таких намагниченностей на различных ионах, которая равна нулю в неупорядоченной фазе и плавно увеличивается при пересечении температуры упорядочения. Отметим также, что энергии состояний, отличающихся одновременной инверсией всех локальных намагниченностей (в отсутствие внешнего магнитного поля) будут одинаковы. При фазовом переходе случайно выбирается одно из этих состояний, что является примером спонтанного нарушения симметрии. В достаточно большом образце магнитный порядок зарождается независимо в разных точках образца и этот случайный выбор ориентации локальной намагниченности (ориентации параметра порядка) независим в разных точках. В результате в образце могут возникать домены с разной ориентацией параметра порядка.

решётки $\langle S_i^\alpha S_j^\beta \rangle$, а также стекольные состояния, когда ненулевые локальные магнитные моменты хаотично ориентированы.

⁸ Также их называют шубниковскими группами.

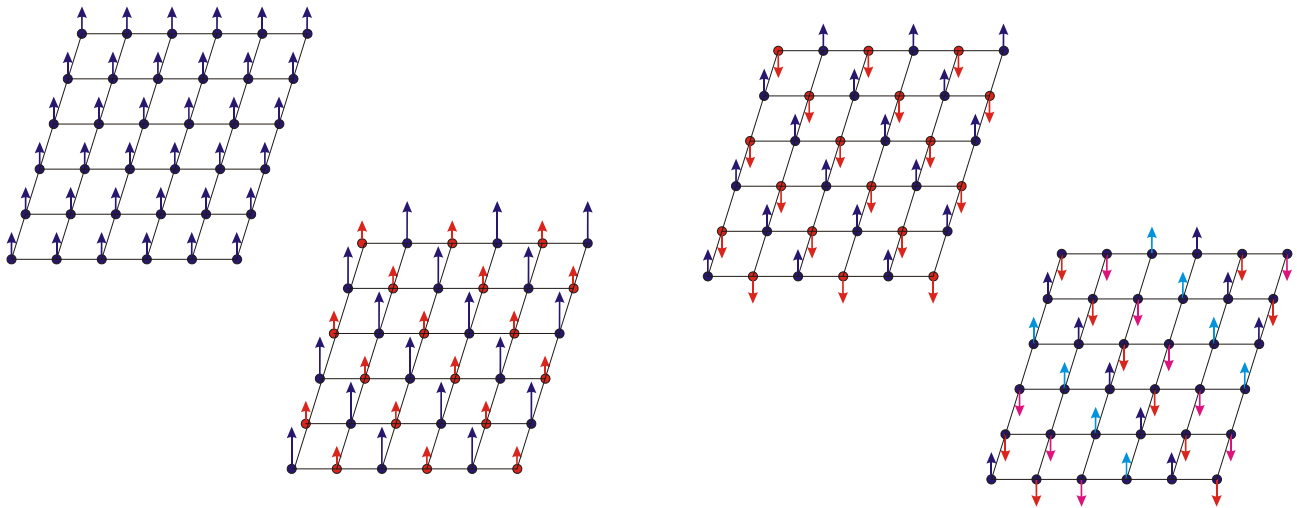


Рисунок 9: Схематическое изображение различных типов упорядочения на двумерной решётке. Цветом выделены элементы одной подрешётки. Слева направо: ферромагнетик, коллинеарный ферримагнетик, коллинеарная антиферромагнитная структура неелевского типа с двумя подрешётками, коллинеарная антиферромагнитная структура типа "два вверх-два вниз" с четырьмя подрешётками.

Основными видами магнитного упорядочения являются следующие:

1. Парамагнетик (неупорядоченный магнетик). Отсутствует средний магнитный момент магнитных ионов и отсутствуют незатухающие корреляции между магнитными моментами на разных узлах.
2. Ферромагнетик. Существует полный магнитный момент у всего кристалла. В случае, если в кристалле локальные намагниченности в различных позициях различаются по величине или направлению (в кристалле есть несколько *магнитных подрешёток*), то такой ферромагнетик называют ферримагнетиком. Температуру перехода в ферромагнитное состояние называют точкой Кюри или температурой Кюри.
3. Антиферромагнетик. Существует средний магнитный момент у магнитных ионов, магнитные моменты расположены регулярно, но полной намагниченности у кристалла нет. Во многих случаях антиферромагнетик также можно разбить на несколько подрешёток, простейшей моделью является двухподрешёточный антиферромагнетик в котором две подсистемы параллельно упорядоченных магнитных моментов сориентированы антипараллельно и полностью компенсируют полный магнитный момент. Если подрешётки параллельны, то говорят о коллинеарном антиферромагнетике, если подрешётки не параллельны, то говорят о неколлинеарном антиферромагнетике. Температуру перехода в антиферромагнитное состояние называют точкой Нееля или температурой Нееля.

Примеры магнитно-упорядоченных структур показаны на рисунке 9. Обратите внимание, что в структурах, содержащих несколько подрешёток, одновременно с упорядочением изменяется и пространственная периодичность кристалла.

Обменное взаимодействие между магнитными ионами.

Гейзенберговский гамильтониан.

При рассмотрении взаимодействия между локальными магнитными моментами в кристалле первым вспоминается диполь-дипольное взаимодействие. Однако его величина слишком

мала: энергия взаимодействия двух магнитных диполей величиной $1\mu_B$ находящихся на расстоянии 2\AA друг от друга $E \sim \frac{\mu_B^2}{d^3} \sim 0.1\text{К}$. В то же время известно множество магнетиков с температурами упорядочения в десятки и сотни кельвин: температура Кюри для железа 1043К, для никеля 627К, для кобальта 1388К; температура Нееля для NiO 525К, для MnO 116К. Очевидно, что дипольное взаимодействие не может быть причиной таких переходов. Кроме того, дипольное взаимодействие сильно анизотропно, а опыты показывают, что во многих случаях взаимная ориентация локальных моментов не зависит от того, как магнитные подрешётки ориентированы относительно кристалла: то есть энергия магнитно-упорядоченного состояния не изменяется при одновременном повороте всех магнитных моментов на один и тот же произвольный угол.

Главным взаимодействием, приводящим к магнитному упорядочению, является обменное взаимодействие [16]. В простейшей модели обменное взаимодействие возникает в системе двух электронов с перекрывающимися координатными волновыми функциями (например, внешние электроны на соседствующих ионах). Так как волновая функция пары фермионов должна быть антисимметрична по перестановке частиц, то, в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, её координатная часть должна иметь вид либо симметризованного, либо антисимметризованного произведения $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1))$, где знак '+' соответствует антисимметричной спиновой волновой функции состояния со спином $S=0$ $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, а знак '-' спиновой волновой функции триплетного спинового состояния с $S=1$.

При учёте взаимодействия электронов энергии симметричного и несимметричного по координатам состояния окажутся разными, причём это расщепление уровней оказывается связано с сильным кулоновским взаимодействием электронов, которое на атомных расстояниях имеет энергетический масштаб тысяч кельвин. Из-за связи чётности координатной части волновой функции с полным спином пары, возникающее расщепление уровней зависит от полного спина пары электронов (хотя эта зависимость не связана с непосредственным взаимодействием спинов, а является проявлением принципа Паули). Формально это может быть выражено через спиновые операторы как гамильтониан обменного взаимодействия Гейзенберга (впервые введён Дираком):

$$\hat{H} = J \hat{S}_1 \hat{S}_2,$$

где параметр J называют обменным интегралом, его величина сильно зависит от степени перекрытия волновых функций электронов. Обобщая этот результат на случай большого числа ионов получаем гамильтониан обменного взаимодействия:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j, \text{ где индексы } i, j \text{ нумеруют взаимодействующих соседей, множитель } \frac{1}{2} \text{ введён для того, чтобы каждая пара соседей учитывалась единожды.}^9$$

Обменное взаимодействие отвечает наблюдаемым на эксперименте свойствам магнитно-упорядоченных состояний: масштаб характерной энергии оказывается связан с кулоновским

9 В литературе встречается несколько вариантов обозначения, различающихся с точностью до множителя 2 и выбора знака. В выбранной нами записи положительный знак обменного интеграла соответствует антиферромагнитному взаимодействию.

взаимодействием и перекрытием волновых функций электронов и может достигать сотен градусов, кроме того гейзенберговский гамильтониан инвариантен к одновременному повороту всех спинов на произвольный угол. Так как гамильтониан взаимодействия выражается через спиновые операторы, а в рассматриваемых нами системах магнетизм практически чисто спиновый, то вместо локальной намагниченности можно говорить о спине магнитного иона, его среднем значении и так далее. Как уже отмечалось, в рамках нашего изложения, локальная намагниченность и спин иона отличаются только множителем, поэтому мы будем использовать оба термина равнозначно.

Косвенное обменное взаимодействие.[†]

Волновые функции электрона на ионе спадают экспоненциально по мере удаления от иона. Характерное расстояние, на котором происходит это спадение порядка боровского радиуса. Однако на практике часто наблюдается сильное взаимодействие между магнитными ионами, находящимися друг от друга на достаточно большом расстоянии $\sim 4...5 \text{ \AA}$, а между магнитными ионами находятся какие-то промежуточные ионы не обладающие собственным магнитным моментом. Непосредственное перекрытие волновых функций магнитных ионов в таком случае очень мало и не может объяснить наблюдаемые величины обменного интеграла.

Это объясняется тем, что в магнитных диэлектриках основным механизмом обменного взаимодействия является так называемый «суперобмен» или «косвенный обмен», при котором происходит не непосредственное перекрытие волновых функций электронов на магнитных ионах, а перекрытие волновой функции электрона на магнитном ионе (например Cu^{2+}) с волновой функцией электрона на немагнитном ионе (например кислороде), которая в свою очередь перекрывается с волновой функцией электрона на следующем магнитном ионе (рисунок 10) [19][20]. Такая цепочка взаимодействий может включать и более одного промежуточного иона.

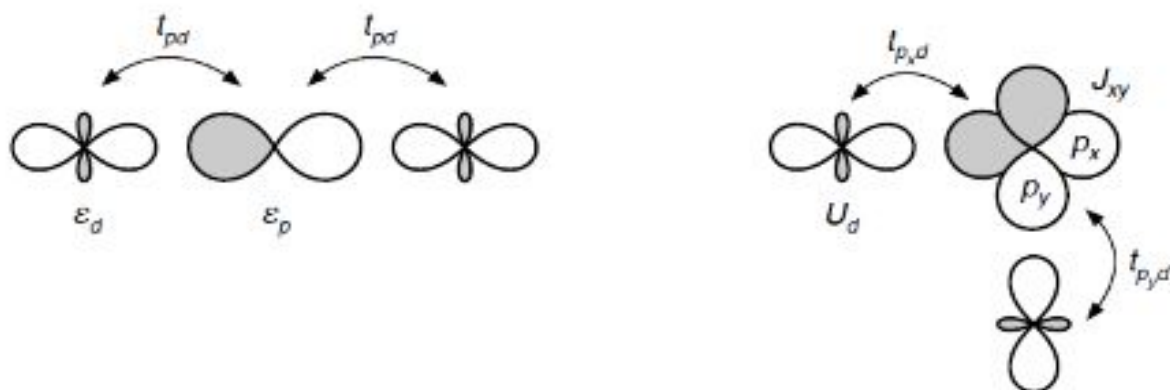


Рисунок 10: Зависимость косвенного обменного взаимодействия от взаимного расположения d-ионов и промежуточного p-аниона. Из обзора [20].

Конечно, с ростом числа посредников величина эффективного обменного интеграла довольно быстро убывает. Однако, так как помимо длины суперобменного пути присутствуют ещё и геометрические факторы, величина обменных констант между первыми двумя-тремя соседями иногда оказывается соизмеримой. Простым примером такого геометрического фактора является хорошо известный случай «90°-связи» медь-кислород-медь (рисунок 10). Суперобменное взаимодействие в таких системах передаётся через p-орбиталь кислорода. Если все три иона расположены на одной прямой, происходит перекрытие d-орбиталей ионов

меди с одной и той же р-орбиталью кислорода, в результате чего возможен обмен электронами. Однако, если угол медь-кислород-медь равен 90^0 , то один из ионов меди имеет перекрытие например с p_x орбиталью, а другой с ортогональной орбиталью p_y . В результате эффективного перескока электронов между ионами меди нет и взаимодействие по такому пути выключается (или сильно ослабляется, возникая за счёт более слабых поправок).

Из-за связанных с конкретной структурой кристалла геометрических факторов возможна также реализация ситуации, когда в трёхмерном кристалле взаимодействия между магнитными ионами, соседствующими вдоль одного или двух направлений окажутся существенно ослаблены, по сравнению с взаимодействиями в других направлениях. Это позволяет экспериментально получать низкоразмерные магнитные системы в реальных кристаллах.

Классический предел.

Как обычно, классическому пределу соответствует замена операторов соответствующими скалярными или векторными величинами. Соответственно, для энергии «классических спинов», связанных обменным взаимодействием, имеем
$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j .$$

Пренебрежение квантовой природой спина соответствует пределу $S \gg 1$, когда дискретное изменение проекции спина на 1, возможное в квантовой теории, заменяется непрерывным. Примерами таких «почти классических» спинов являются, например, системы, в которых магнитным ионом является Gd^{3+} : это ион в S-состоянии ($L=0$) со спином $S=7/2$.

При переходе к классическому пределу в случае магнетиков необходимо иметь в виду, что этот переход немного лукав — само явление магнетизма (наличия у иона постоянного, не исчезающего со временем, механического и магнитного момента) это существенно квантовый эффект. В «абсолютно честном» переходе к классическому пределу необходимо устремлять к нулю и постоянную Планка, при этом занулится магнетон Бора, входящий как множитель в связь между спином и локальным магнитным моментом. Всё же такое классическое рассмотрение оказывается удобно в некоторых случаях, так как позволяет получить простые результаты там, где квантовое рассмотрение оказывается громоздко или даже невозможно.

В частности, в классическом пределе для магнетика на кубической решётке при отрицательном знаке обменного интеграла¹⁰ минимуму энергии соответствует параллельная сонаправленная ориентация всех спинов — то есть ферромагнитное упорядочение. При положительном знаке обменного интеграла и при учёте только ближайших соседей минимум энергии будет достигаться при параллельном направлении всех спинов, но при чередовании направлений на соседствующих узлах решётки — это так называемый неелевский антиферромагнитный порядок (для двумерной квадратной решётки показан на рисунке 9).

Модель Изинга и XY-модель спин-спинового взаимодействия.

Выше говорилось, что во многих случаях орбитальный момент иона в кристалле оказывается «заморожен» и магнетизм оказывается чисто спиновым. Модель обменного взаимодействия использовала приближение независимости спиновой степени свободы от пространственного (орбитального) движения электрона. При этом возникают несколько независимых масштабов энергии: масштаб обменного интеграла, масштаб расстояния между уровнями энергии иона в

¹⁰ Подчеркнём, что отрицательность обменного интеграла для ферромагнитной связи является следствием выбранной нами формы записи обменного гамильтониана. В литературе встречается и вариант записи с другим общим знаком. Оба варианта достаточно широко используются.

кристаллическом поле и энергия спин-орбитального взаимодействия в ионе.

При наличии сильного спин-орбитального взаимодействия (что типично, например, для 4f электронов редкоземельных ионов) выделенные градиентами электрических полей соседей направления будут «чувствоваться» спином иона (даже при замораживании орбитального момента этот эффект возникнет в следующих порядках теории возмущений). Простейшей формой такого анизотропного вклада в гамильтониан иона в кристалле будет слагаемое

$D\hat{S}_z^2$: при $D > 0$ минимальной энергии соответствует минимальная проекция спина на выделенное направление ($1/2$ или 0), при $D < 0$ – максимальная проекция спина. В предельном случае это можно интерпретировать как то, что в первом случае спин иона преимущественно направлен перпендикулярно к выделенному направлению, а во втором — только вдоль выделенного направления.

Если теперь учесть обменное взаимодействие, то для малых значений обменного интеграла это преимущественное направление надо продолжать учитывать (учитываем обменное взаимодействие как возмущение к уровням с минимальной энергией). Это приводит нас к двум распространенным модельным гамильтонианам спин-спинового взаимодействия:

- модель Изинга:
$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_{z,i} \hat{S}_{z,j}$$
- XY-модель:
$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\hat{S}_{x,i} \hat{S}_{x,j} + \hat{S}_{y,i} \hat{S}_{y,j})$$
 .

Такие модели часто удобны для различных теоретических моделей, так как они легче поддаются анализу. В частности, можно отметить важность модели Изинга на двумерной решётки, как примера точно решаемой системы, в которой имеется фазовый переход [21], а XY-модели на двумерной решётки, как примера системы в которой имеется топологический фазовый переход Березинского-Костерлица-Таулеса [22]. В то же время, имеется множество реальных магнетиков, свойства которых соответствуют таким моделям (см., например, обзор [23], а также примеры в этом пособии).

Модель молекулярного поля.

Магнетик выше температуры упорядочения. Закон Кюри-Вейса.

Рассмотрим магнетик с обменно-связанными спинами, в котором магнитные ионы занимают эквивалентные позиции¹¹, находящийся выше температуры упорядочения. Выше температуры перехода в отсутствие магнитного поля локальные намагниченности равны нулю. При приложении внешнего поля намагниченность появится, в силу эквивалентности всех ионов средние локальные намагниченности всех магнитных ионов будут равны.

Пусть наш магнетик находится в некотором состоянии с минимальной энергией. Выберем спин на i -ой позиции и изменим его направление на противоположное. Энергия магнетика изменится при этом на величину (в классическом пределе):

$$\delta E_i = E(\text{перев. } i\text{-ый спин}) - E(\text{исх.}) = -2\vec{S}_i \left(\sum_j J_{ij} \vec{S}_j \right),$$

где суммирование идёт по всем соседям, с которыми выбранный ион связан обменным взаимодействием.

Это изменение энергии эквивалентно тому, что выбранный нами спин находится в некотором эффективном магнитном поле (называемым также обменным):

$$E = g \mu_B \sum_i \vec{B}_i^{(eff)} g \mu_B \vec{S}_i$$
$$\delta E = -2 g \mu_B \vec{S}_i \vec{B}_i^{(eff)}$$
$$\vec{B}_i^{(eff)} = \frac{1}{g \mu_B} \sum_j J_{ij} \vec{S}_j$$

Приближение молекулярного поля (или среднего поля) заключается в том, что при вычислении эффективного поля мгновенные значения спиновых векторов заменяются их средними значениями. Физически это соответствует достаточно высоким температурам, когда быстрые тепловые флуктуации усредняют действие соседей на выбранный спин.

В этом приближении обменное поле оказывается независимым от узла, для случая эквивалентных магнитных ионов в парамагнитной фазе все средние $\langle \vec{S}_j \rangle$ одинаковы и равны $\langle \vec{s} \rangle$. Тогда эффективное обменное поле равно $\vec{B}^{(eff)} = \frac{\langle \vec{s} \rangle}{g \mu_B} \sum_j J_{ij} = - \frac{\langle \vec{\mu} \rangle}{(g \mu_B)^2} \sum_j J_{ij}$,

где $\langle \vec{\mu} \rangle$ - средняя намагниченность иона (знак минус возникает так как магнитный и спиновый моменты отрицательно заряженной частицы противоположно направлены).

Если добавить теперь взаимодействие с внешним магнитным полем, то обменное поле складывается с внешним. Таким образом в этом приближении энергия системы взаимодействующих спинов во внешнем поле преобразуется в энергию невзаимодействующих спинов в поле, к которому добавлено некоторое эффективное поле. Восприимчивость невзаимодействующих спинов описывается законом Кюри, тогда:

¹¹ Это может быть и ферро- и антиферромагнетик, требование эквивалентности позиций упрощает наш анализ, так как в этом случае выше температуры перехода намагниченности всех ионов одинаковы, однако результат может быть обобщён и на произвольную структуру.

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{C_{at}}{T} (\vec{B} + \vec{B}^{(eff)}) = \frac{C_{at}}{T} \left(\vec{B} - \frac{\langle \vec{\mu} \rangle}{(g\mu_B)^2} \sum_j J_{ij} \right),$$

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{C_{at}}{T - \Theta} \vec{B}$$

здесь $C_{at} = \frac{S(S+1)g^2\mu_B^2}{3k_B}$ это константа Кюри в расчёте на атом, а температура Кюри-Вейса $\Theta = -\frac{S(S+1)}{3k_B} \sum_j J_{ij}$. Такую зависимость восприимчивости от температуры называют законом Кюри-Вейса.

Для антиферромагнетика температура Кюри-Вейса отрицательна, для ферромагнетика — положительна. Формально восприимчивость ферромагнетика расходится при $T = \Theta$, что позволяет качественно сопоставить температуру Кюри-Вейса с температурой фазового перехода (точкой Кюри ферромагнетика или точкой Нееля антиферромагнетика). Однако, это сопоставление только качественное — как уже отмечалось приближение молекулярного поля неявно подразумевает, что тепловые флуктуации происходят быстро, то есть мы находимся достаточно далеко от точки фазового перехода. В то же время, можно отметить, что расходимость восприимчивости означает специальную «мягкость» физической системы — на малое воздействие происходит большой отклик, что характерно для точки фазового перехода, когда некоторый порядок возникает спонтанно, а внешнее воздействие просто подталкивает систему «в нужную сторону».

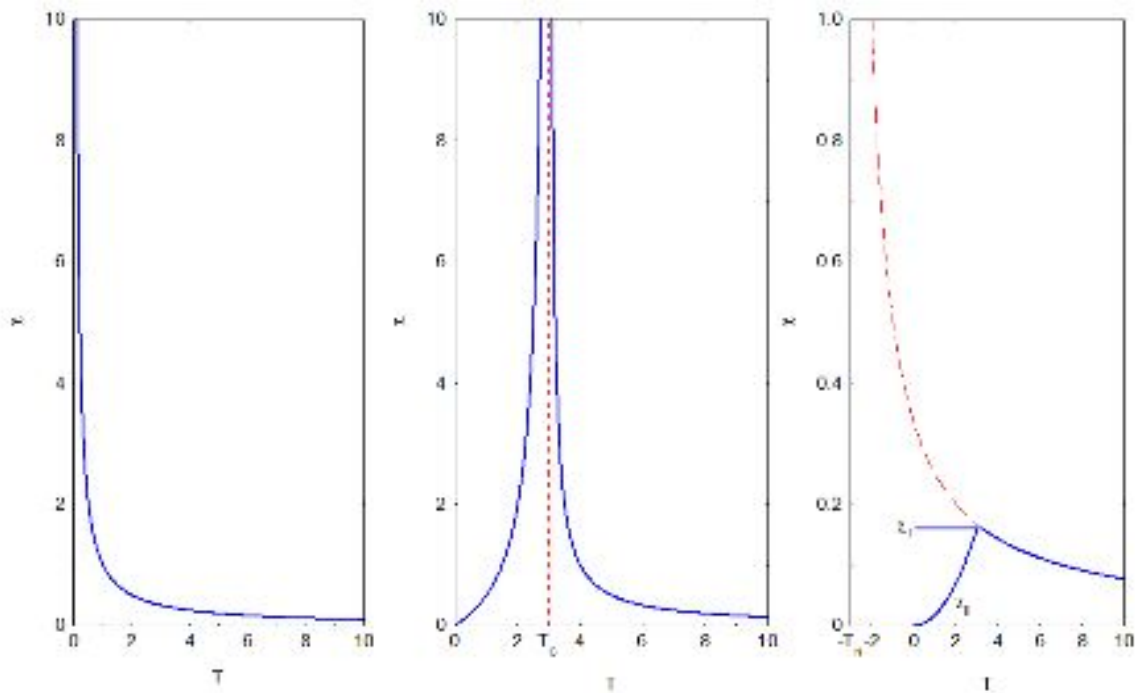


Рисунок 11: Схематическое изображение зависимости магнитной восприимчивости от температуры. Слева направо: парамагнетик (закон Кюри), ферромагнетик, антиферромагнетик. На графике для антиферромагнетика пунктиром построена кривая закона Кюри-Вейса.

Кроме того, обратите внимание, что в температуру Кюри-Вейса входит сумма обменных интегралов по всем соседям. В реальных системах (особенно в антиферромагнетиках) нередко встречается ситуация, когда между различными соседями обменное взаимодействие имеет не только разную величину, но и разный знак. Простейшим примером такого типа

является набор ферромагнитно упорядоченных атомных плоскостей с чередующимися направлениями намагниченности. Такая система будет антиферромагнетиком, но в зависимости от соотношения между величинами обменных интегралов в плоскости и между плоскостями можно получить температуру Кюри-Вейса любого знака. Также, как мы кратко обсудим в заключительной части, существуют магнетики со специальной геометрией обменных связей, в которых несмотря на сильное обменное взаимодействие (и большую температуру Кюри-Вейса) упорядочение не наступает вплоть до самых низких температур.

Таким образом, закон Кюри-Вейса описывает высокотемпературную асимптотику поведения восприимчивости магнетика. Температура Кюри-Вейса даёт качественную информацию о величине взаимодействия между магнитными ионами. Однако отождествление температуры Кюри-Вейса с температурой магнитного упорядочения в реальных системах является неправильным и работает только на качественном уровне для достаточно простых систем.

Ферромагнетик ниже температуры Кюри

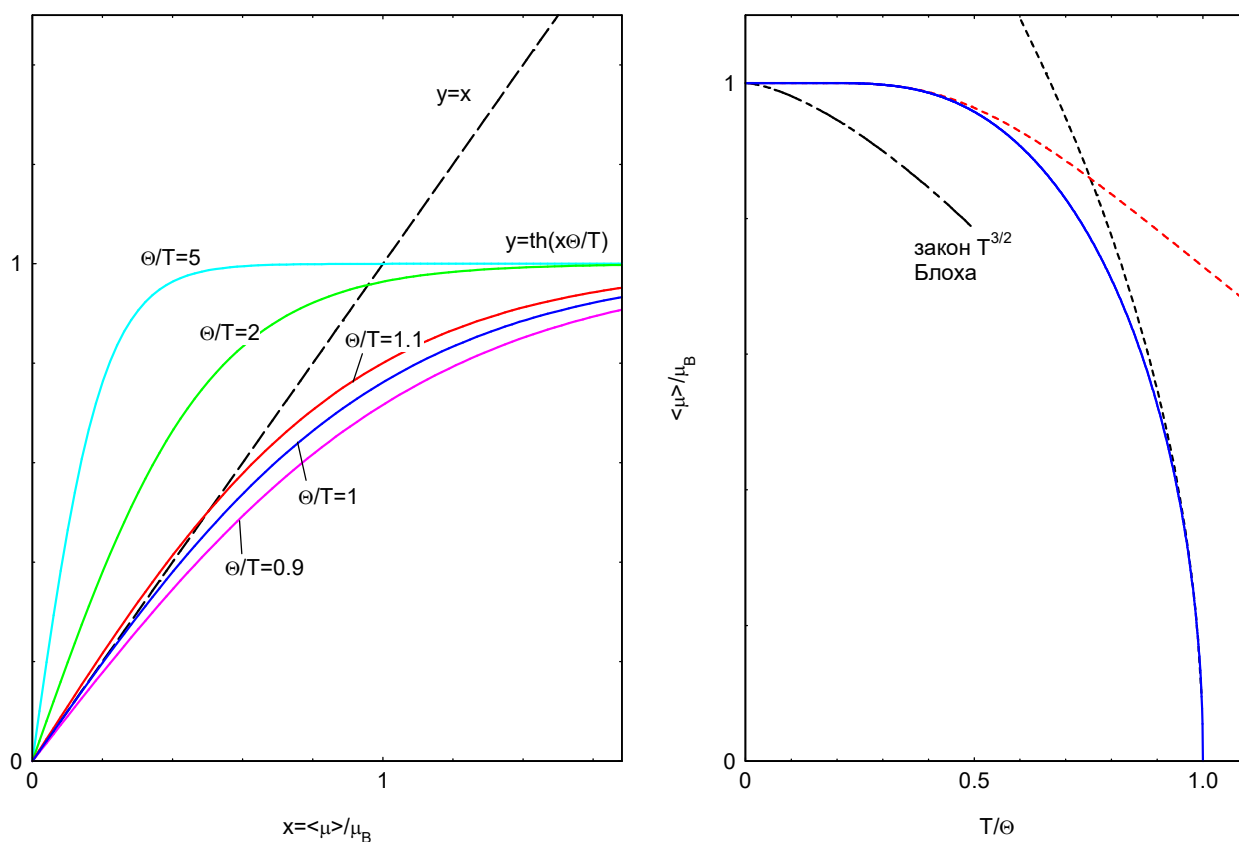


Рисунок 12: (слева) Графическое решение уравнения для намагниченности подрешётки в модели молекулярного поля. (справа) Сплошная линия - зависимость намагниченности подрешётки от температуры в модели молекулярного поля, пунктирные линии - асимптотики при низких температурах и в окрестности перехода, штрих-пунктирная линия — закон $T^{3/2}$ Блоха из спин-волновой теории.

Модель молекулярного поля может быть применена и ниже температуры перехода. При этом мы также заменяем обменное взаимодействие соседей с выбранным спином некоторым эффективным полем, создаваемым соседними спинами. Физически это оправдано не слишком близко к точке перехода, когда уже развился заметный параметр порядка (есть ненулевое среднее значение локальной намагниченности). Наша цель — рассматривая намагничивание подрешётки как результат действия этого эффективного поля найти зависимость намагниченности от температуры.

В качестве простой модели рассмотрим ферромагнетик (с единственной подрешёткой) из спинов $S=1/2$ с чисто спиновым значением g-фактора 2.00. Будем считать, что обменное взаимодействие со всеми соседями одинаково, J – обменный интеграл, z – число ближайших соседей.

С одной стороны, намагниченность (на атом) в поле $B^{(eff)}$ равна $\langle \mu \rangle = \mu_B th \left(\frac{\mu_B B^{(eff)}}{T} \right)$. С

другой стороны, эффективное поле $B^{(eff)} = -\frac{\langle \mu \rangle z J}{2(g\mu_B)^2} = \langle \mu \rangle \frac{\Theta}{\mu_B^2}$ (здесь температура Кюри-Вейса в энергетических единицах).

Получаем трансцендентное уравнение $\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = th \left(\frac{\langle \mu \rangle \Theta}{\mu_B T} \right)$, которое может быть решено численно или графически (рисунок 12). Решения есть только при $T < \Theta$, то есть температура Кюри-Вейса действительно оказывается в этой модели температурой фазового перехода.

Низкотемпературная асимптотика этого решения $\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = 1 - 2e^{-2\Theta/T}$.

Асимптотика вблизи температуры перехода $\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = \sqrt{3} \sqrt{1 - \frac{T}{\Theta}}$.

Корневое поведение в окрестности фазового перехода в модели молекулярного поля оказывается таким же, что и в теории Ландау фазовых переходов 2-го рода, и качественно соответствует эксперименту. Однако сравнение с экспериментом показывает, что низкотемпературное предсказание (экспоненциальное стремление к насыщению) оказывается неверным, в реальных системах при понижении температуры намагниченность подрешётки медленнее стремится к насыщению. Причиной этого расхождения является наличие в ферромагнетике специального вида возбуждений (спиновых волн), которые уменьшают среднюю намагниченность.

Поведение магнетиков в магнитном поле.

Намагниченность и магнитная восприимчивость являются важными и легко доступными для наблюдения характеристиками магнетиков.¹² Поэтому важно уметь извлекать физическую информацию из этих величин.

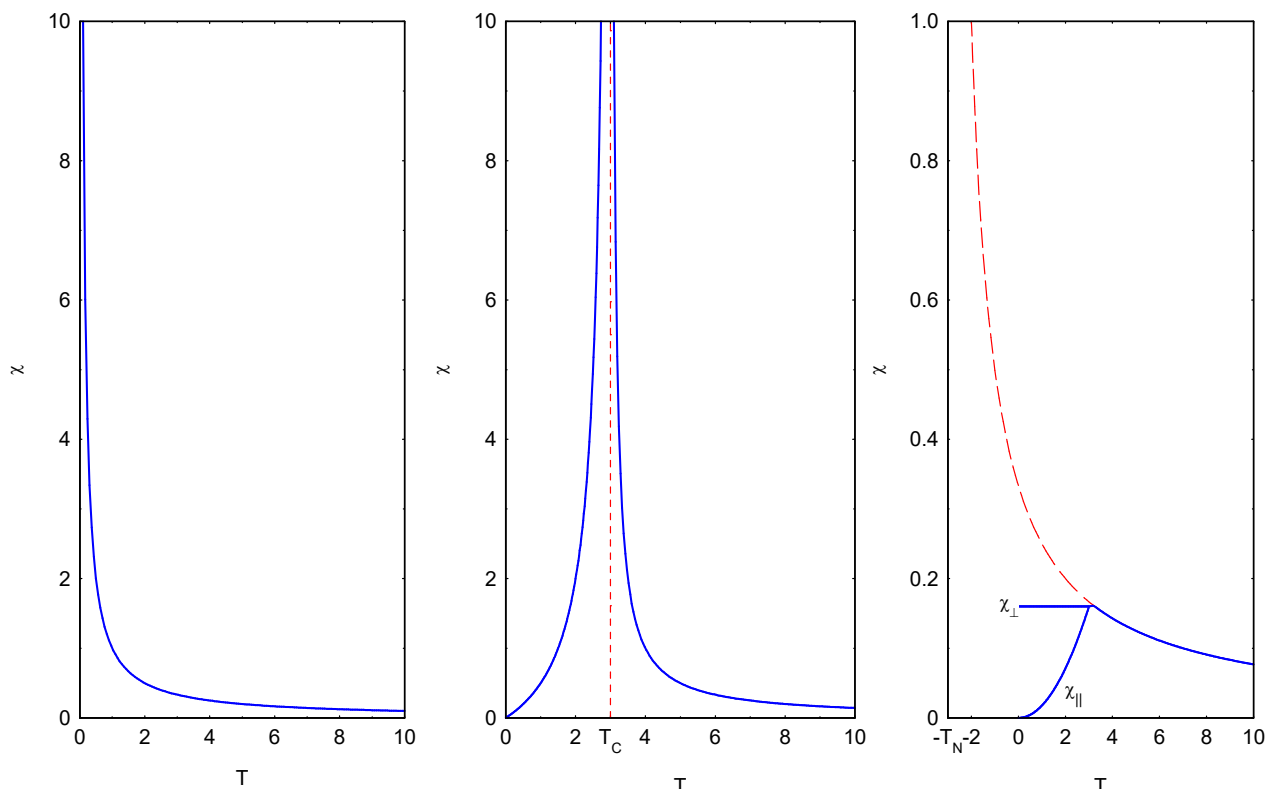


Рисунок 13: Схематическое изображение зависимости магнитной восприимчивости от температуры. Слева направо: парамагнетик (закон Кюри), ферромагнетик, антиферромагнетик. На графике для антиферромагнетика пунктиром построена кривая закона Кюри-Вейса.

Восприимчивость ферромагнетика ниже температуры упорядочения.

При температурах много выше характерного масштаба энергии взаимодействия между спинами восприимчивость магнетика будет вести себя как парамагнетик и подчиняться закону Кюри. По мере того, как взаимодействие между спинами будет становиться существенным, будут возникать отклонения от закона Кюри. В простейшем приближении эти отклонения могут быть описаны законом Кюри-Вейса. Рассмотрим, что будет происходить с восприимчивостью ферромагнетика вблизи температуры фазового перехода и при дальнейшем понижении температуры.

Во-первых, необходимо отметить, что, так как ферромагнетик имеет собственную намагниченность ниже точки перехода, определение намагниченности $\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{M}{B}$ теряет смысл и естественно рассматривать дифференциальную восприимчивость $\chi_{diff} = \left. \frac{dM}{dB} \right|_{B=0}$.

¹² Стандартным прибором для измерения намагниченности является СКВИД-магнетометр, принцип работы которого рассматривался на лекции по эффекту Джозефсона.

Для парамагнетика и антиферромагнетика оба определения дают один результат.

Во-вторых, интересно отметить, что, строго говоря, фазовый переход в ферромагнитно упорядоченное состояние пропадает при включении внешнего поля. Действительно, существенным свойством фазового перехода является различие симметрии двух фаз. Намагниченный в магнитном поле парамагнетик оказывается в смысле симметрии к обращению времени неотличим от ферромагнетика: в обоих случаях есть средняя намагниченность каждого атома, направленная вдоль поля.

Возникновение спонтанной намагниченности у ферромагнетика в точке перехода соответствует тому, что в окрестности перехода система «очень мягкая» к приложению внешнего поля: приложение небольшого внешнего поля приводит к большой намагниченности, так как система уже готова упорядочить свои локальные намагниченности сонаправленно за счёт внутренних взаимодействий. Таким образом, резкое увеличение (и даже расходимость) магнитной восприимчивости ферромагнетика в точке перехода совершенно естественно.¹³

При очень низких температурах при приложении магнитного поля к ферромагнетику его намагниченность выстраивается вдоль поля и не меняется по величине — максимальная намагниченность уже достигнута за счёт внутренних взаимодействий. Таким образом, при нулевой температуре дифференциальная восприимчивость ферромагнетика должна зануляться. Схематическая зависимость восприимчивости ферромагнетика от температуры показана на рисунке 13.

В рамках модели молекулярного поля ниже точки Кюри эти рассуждения могут быть естественным образом учтены: нужно добавить внешнее поле к эффективному и получим уравнение на среднюю намагниченность (считая опять для простоты $S=1/2$, $g=2$)

$$\langle \mu \rangle = \mu_B th \left(\frac{\mu_B [B^{(eff)} + B]}{T} \right), \quad \text{откуда, с учётом определения эффективного поля}$$

$$B^{(eff)} = - \frac{\langle \mu \rangle z J}{2(g\mu_B)^2} = \langle \mu \rangle \frac{\Theta}{\mu_B}, \quad \text{получим} \quad \frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = th \left(\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} \frac{\Theta}{T} + \frac{\mu_B B}{T} \right).$$

Тогда дифференциальная восприимчивость при $B=0$:

$$\frac{\partial \langle \mu \rangle}{\partial B} = \mu_B \frac{1}{ch^2 \left(\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} \frac{\Theta}{T} \right)} \left[\frac{\Theta}{\mu_B T} \frac{\partial \langle \mu \rangle}{\partial B} + \frac{\mu_B}{T} \right]$$

$$\frac{\partial \langle \mu \rangle}{\partial B} = \frac{\mu_B^2}{T} \frac{1}{ch^2 \left(\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} \frac{\Theta}{T} \right) - \frac{\Theta}{T}}$$

При $T \ll \Theta$ получаем экспоненциальное обращение восприимчивости в ноль $\chi_{diff} \propto e^{-2\Theta/T}$, которое не соответствует эксперименту (слишком быстрое). Эту проблему модели молекулярного поля мы обсуждали, когда говорили о магнитном моменте ферромагнетика $M(T)$.

При $T \rightarrow \Theta$ модель молекулярного поля предсказывает зануление параметра порядка корневым образом $\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = \sqrt{3} \sqrt{1 - \frac{T}{\Theta}}$, разлагая квадрат гиперболического косинуса можно

¹³ Такая расходимость восприимчивости является достаточно общим свойством фазового перехода 2-го рода. Если есть некоторое внешнее поле (магнитное, электрическое, поле деформаций и т.д.), которое входит в энергию системы в комбинации с параметром порядка, то в точке фазового перехода восприимчивость к этому полю будет расходиться.

показать, что в этом пределе (возвращаем постоянную Больцмана) $\chi_{\text{аиф}} = \frac{\mu_B^2}{8 k_B (\Theta - T)}$. Этот результат согласуется с ожидаемой расходимостью восприимчивости в точке перехода (рисунок 13).

Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.

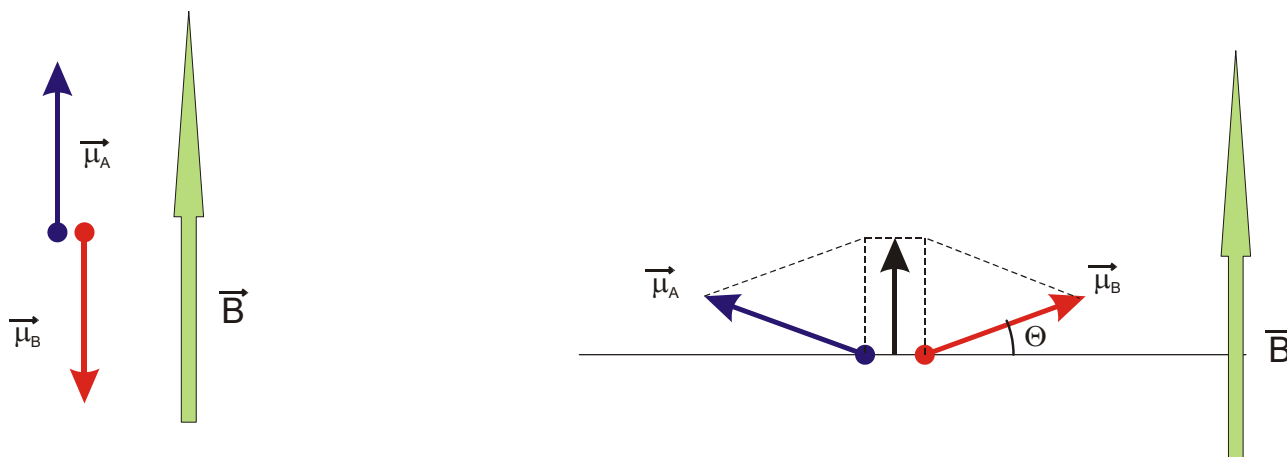


Рисунок 14: Двухподрешёточный антиферромагнетик с легкоосной анизотропией в магнитном поле, приложенном параллельно (слева) и перпендикулярно (справа) лёгкой оси.

При рассмотрении антиферромагнетиков в магнитном поле мы ограничимся простейшей моделью двухподрешёточного коллинеарного антиферромагнетика. Дополнительно предположим, что слабые анизотропные взаимодействия (например диполь-дипольные) привели к тому, что в кристалле появилось предпочтительное направление для намагниченности подрешёток (случай так называемого легкоосного антиферромагнетика).

Заметим, что никаких причин для расходимости магнитной восприимчивости в точке перехода нет: так как подрешётки ориентированы в противоположном направлении, то в малых полях их вклады в зеемановскую энергию компенсируются и приложение однородного магнитного поля не может вызвать одновременный рост намагниченностей обеих подрешёток.

Ниже перехода, однако, восприимчивость антиферромагнетика становится анизотропной. Это является следствием именно антиферромагнитного упорядочения, возникновение такой анизотропии восприимчивости в точке перехода может быть показано в рамках теории фазовых переходов Ландау [18]. Мы ограничимся качественным рассмотрением при $T=0$.

Рассмотрим два способа приложения слабого внешнего поля: вдоль направления намагниченности подрешёток и перпендикулярно ему (рисунок 14). Напомним, что у нас есть некоторое слабое анизотропное взаимодействие, которое поддерживает магнитные моменты подрешёток параллельными этому выделенному направлению.

При приложении поля вдоль выделенного направления (называемого лёгкой осью намагничивания или просто лёгкой осью) поле оказывается направлено вдоль намагниченности одной подрешётки и противоположно к намагниченности другой подрешётки. При этом при $T=0$ намагниченности подрешёток достигли своих максимальных значений и поддерживаются в этом насыщенном состоянии сильными внутренними взаимодействиями. Это означает, что слабое внешнее поле не может ни увеличить намагниченность подрешётки, параллельной полю, ни уменьшить

намагниченность подрешётки, направленной против поля. То есть, восприимчивость антиферромагнетика к полю приложенному вдоль лёгкой оси (продольная восприимчивость) оказывается при $T=0$ нулевой. Такое поведение действительно наблюдается на эксперименте [24] (рисунок 15).

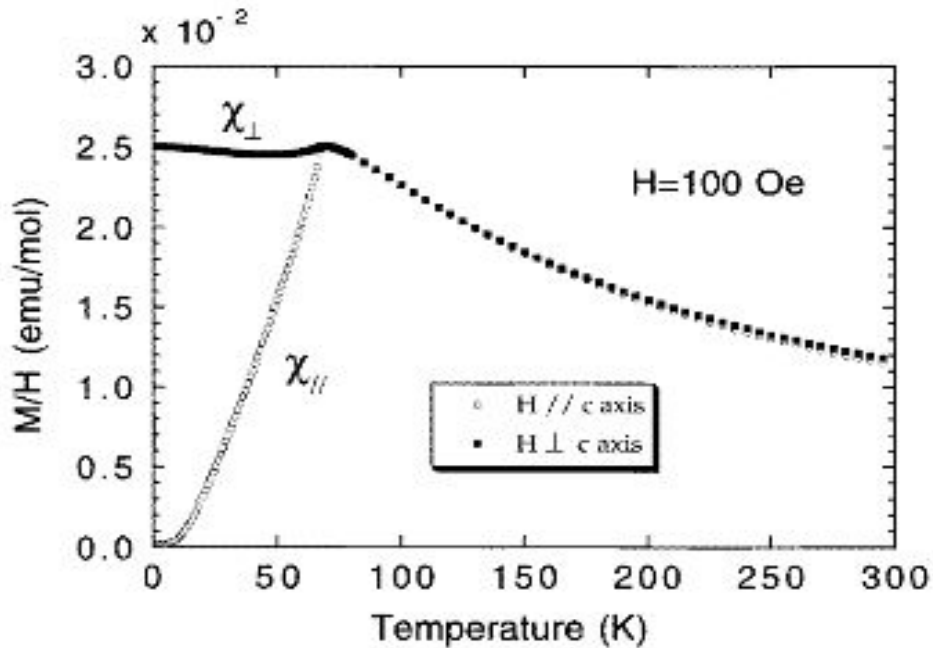


Рисунок 15: Экспериментально измеренная намагниченность антиферромагнетика MnF_2 в двух ориентациях магнитного поля. Из работы [24].

При приложении же поля в перпендикулярном направлении возникает возможность выиграть в земановской энергии не изменяя намагниченности подрешёток за счёт их незначительного подкоса в направлении поля. Если антиферромагнетик разбивается на две подрешётки «А» и «В», так что каждый магнитный ион взаимодействует только с ионами другой подрешётки и обменные интегралы между всеми ближайшими соседями одинаковы, то в классическом пределе для энергии такого антиферромагнетика можно записать:

$$E = \frac{J}{2} \sum_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_i \vec{\mu}_i \vec{B} = \frac{JS^2}{2\mu^2} \sum_{ij} \vec{\mu}_i \vec{\mu}_j - \sum_i \vec{\mu}_i \vec{B} = \frac{NzJS^2}{2\mu^2} \vec{\mu}_A \vec{\mu}_B - \frac{N}{2} (\vec{\mu}_A + \vec{\mu}_B) \vec{B}$$

$$\frac{E}{N} = -\frac{JzS^2}{2} \cos 2\Theta - B\mu \sin \Theta$$

где N — полное число магнитных ионов, Θ - угол отклонения намагниченности подрешётки от лёгкой оси, спин иона равен S , z - число ближайших соседей, а $\vec{\mu}_A$, $\vec{\mu}_B$ и $\mu = |\vec{\mu}_A| = |\vec{\mu}_B|$ - средние значения намагниченности магнитных ионов подрешёток «А» и «В» и их модуля.

Минимизируя по углу подкоса, получаем $\sin \Theta = \frac{B\mu}{2zJS^2}$, а восприимчивость

$$\chi_{\perp} = \frac{\langle \mu \rangle}{B} = \frac{N\mu \sin \Theta}{B} = N \frac{\mu^2}{2zJS^2} = N \frac{(g\mu_B)^2}{2zJ}$$

Это соответствует восприимчивости системы невзаимодействующих спинов $1/2$ при температуре $k_B T = zJ/2$, то есть можно сказать, что по порядку величины поперечная восприимчивость легкоосного антиферромагнетика при $T=0$ равна восприимчивости

системы в точке перехода. Схематически эта зависимость восприимчивости от температуры показана на рисунке 13. Пример реально измеренной кривой восприимчивости показан на рисунке 15.

Наконец, отметим существование в антиферромагнетике двух фазовых переходов по магнитному полю. Как мы уже видели, при приложении поля вдоль лёгкой оси в малых полях восприимчивость равна нулю. Поэтому в некотором сравнительно небольшом поле оказывается выгодно одновременно повернуть намагниченности подрешёток перпендикулярно полю: при этом проигрывается энергия анизотропии (некоторая небольшая константа), но выигрывается зеемановская энергия, так как после поворота оказывается возможен подкос подрешёток и появляется ненулевая восприимчивость. Этот переход называют спин-флоп переходом. В больших полях, соответствующих условию

$$\sin \Theta = \frac{g \mu_B B}{2 z S J} \geq 1$$

выстраиваются параллельно друг другу и антиферромагнетик переходит в полностью поляризованное состояние. Этот переход называют спин-флип переходом.

Квантовое рассмотрение антиферромагнетика выше поля насыщения

Выше рассматривались «классические» модели ферромагнетика и антиферромагнетика. Это связано со сложностью квантового рассмотрения задачи о выборе основного состояния при конечной температуре. Для антиферромагнетиков имеется фундаментальная проблема квантового описания основного состояния антиферромагнетика (системы с антиферромагнитным взаимодействием) и разрешима в довольно ограниченном классе простых моделей.

Однако есть интересный случай, когда квантовая задача о возбуждениях антиферромагнетика может быть точно решена для произвольной системы (системы с произвольной структурой обменных связей). Это случай, когда антиферромагнетик помещён в сильное магнитное поле, так что, несмотря на антиферромагнитное взаимодействие спинов, он оказывается полностью поляризован. Пример применения этого подхода представлен в работе [25] применительно к квазидвумерному антиферромагнетика Cs_2CuCl_4 .

Итак, пусть в системе есть только обменное и зеемановское взаимодействия:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \vec{S}_{\vec{R}} \vec{S}_{\vec{R}+\vec{\delta}} - g \mu_B H \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z, \text{ здесь } \vec{\delta} \text{ пробегает всех соседей, с которыми есть}$$

обменная связь, множитель $1/2$ перед обменным гамильтонианом обеспечивает однократный учёт всех пар при окончательном суммировании. Этот гамильтониан сохраняет вращательную симметрию вокруг оси Z , поэтому z -компонента спина является хорошим квантовым числом. Мы будем считать, что спин каждого иона равен $S=1/2$.

В некотором критическом поле основным состоянием такого магнетика становится однородное поляризованное состояние с максимально возможной проекцией спина

$$\psi_0 = |\dots \uparrow \uparrow \dots\rangle. \text{ Его энергия } E_0 = -N g \mu_B H S + \frac{N}{2} S^2 \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}}. \text{ В поле выше критического}$$

возбуждения с наименьшей энергией это перевороты отдельных спинов, которые можно формально описать действием понижающего спинового оператора на соответствующий узел

$$\psi_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0. \text{ Из-за трансляционной инвариантности задачи надо перейти в импульсное}$$

пространство и построить из N одночастичных состояний N блоховских состояний с

импульсом \vec{k} : $\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{R}}$.

Проследим действие разных частей гамильтониана на $\psi_{\vec{R}}$ (используем коммутационные соотношения $[S^+, S^-] = 2S^z$ и $[S^z, S^-] = -S^-$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^z, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^z \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{\sqrt{2S}} \left(S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}}^z, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^z - \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^z - \delta_{\vec{R}, \vec{R}'+\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}'}^z \right) \psi_0 = \\ &= \left[\frac{NS^2}{2} \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} - S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \right] \psi_R \\ \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^+, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{\sqrt{2S}} \left(S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}}^+, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- + 2\delta_{\vec{R}, \vec{R}'} S_{\vec{R}}^z S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- \right) \psi_0 = \frac{1}{2} S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \psi_{\vec{R}+\vec{\delta}} , \\ \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^-, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^+ \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{\sqrt{2S}} \left(S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}}^+, S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- + 2\delta_{\vec{R}, \vec{R}'+\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^z S_{\vec{R}'}^- \right) \psi_0 = \frac{1}{2} S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \psi_{\vec{R}-\vec{\delta}} , \\ -g\mu_B H \sum_{\vec{R}'} S_{\vec{R}'}^z \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) &= [-Ng\mu_B HS + g\mu_B H] \psi_{\vec{R}} , \end{aligned}$$

то есть

$$\hat{H} \psi_R = E_0 \psi_R + \left[g\mu_B H - S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \right] \psi_R + \frac{S}{2} \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} (\psi_{\vec{R}+\vec{\delta}} + \psi_{\vec{R}-\vec{\delta}}) .$$

Подстановкой сюда волновой функции блоховского вида и обычной заменой переменной суммирования, получаем спектр возбуждений нашего антиферромагнетика в насыщенной фазе: $E(\vec{k}) = E_0 + g\mu_B H - S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} + S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \cos(\vec{k}\vec{\delta})$.

Для сравнения с предыдущим классическим результатом перепишем полученный результат для модельной одномерной спиновой цепочки:

$$\varepsilon(\vec{k}) = E(\vec{k}) - E_0 = g\mu_B H - 2SJ + 2SJ \cos(ka) .$$

Для антиферромагнетика ($J > 0$) энергия возбуждения минимальна при $ka = \pm\pi$: $\varepsilon_{min} = g\mu_B H - 4SJ$. Видно, что в поле $H_c = 4SJ / (g\mu_B)$ минимальная энергия возбуждения обратится в ноль и в меньших полях возбуждения с $k = \pm\pi/a$, соответствующие формированию антиферромагнитного порядка должны начать произвольно конденсироваться.

Полученное критическое поле соответствует «классическому» полю спинфлипа, найденному в предыдущем разделе.

Отметим также, что, в принципе, полученный результат является одним из способов определения обменных констант в реальном магнетике. Зависимость энергии возбуждения в насыщенной фазе от волнового вектора имеет вид фурье-образа распределения обменных взаимодействий по решётке. Так как фурье-преобразование обратимо, то (по крайней мере с точки зрения математики), измерив спектр возбуждений выше поля насыщения (например методом неупругого рассеяния нейтронов), можно однозначно восстановить информацию об имеющихся в системе обменных взаимодействиях.

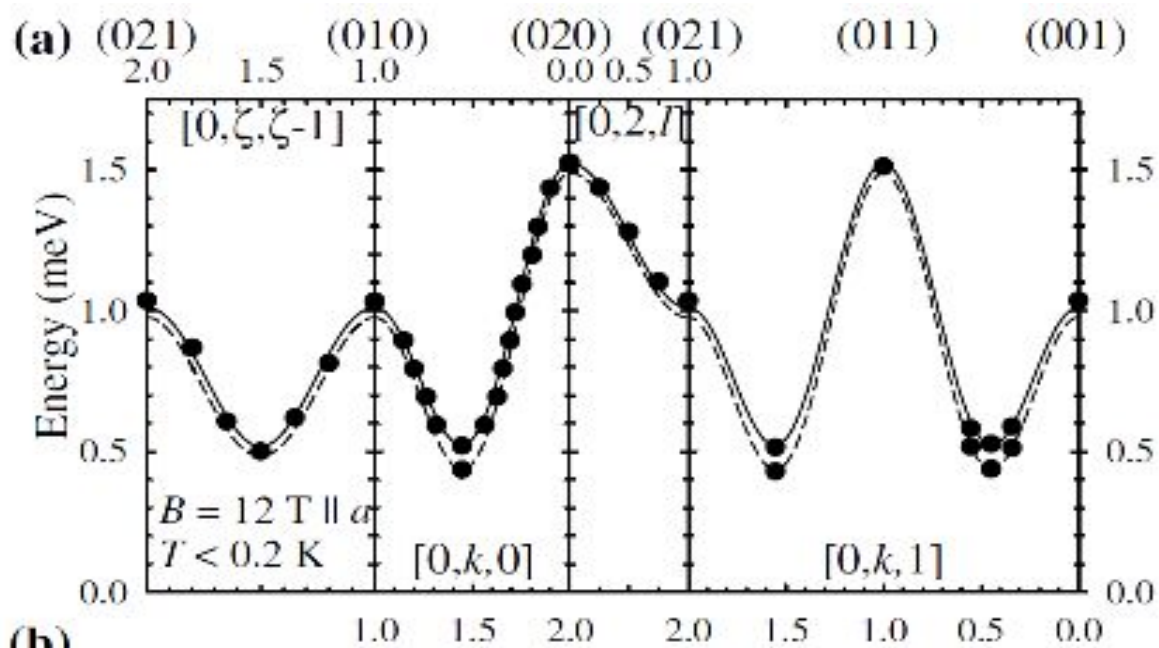


Рисунок 16: Спектр одночастичных возбуждений в антиферромагнетике Cs_2CuCl_4 выше поля насыщения. Пунктирная и сплошная линия соответствуют двум магнным ветвям, расщеплённым из-за наличия дополнительных взаимодействий. Из работы [25].

В работе [25] были измерены сечения спектра возбуждений вдоль нескольких направлений для квазидвумерного антиферромагнетика Cs_2CuCl_4 (рисунок 16). Поле насыщения в этом антиферромагнетике равно примерно 8.5 Т, измерения проводились методом неупругого рассеяния нейтронов в поле 12 Т. Из их анализа были определены все константы взаимодействий.

Молекулярные магнетики[†]

В некоторых органических молекулах присутствует несколько магнитных ионов, между которыми имеется обменное взаимодействие (а иногда и другие спин-спиновые взаимодействия). В результате формируются несколько состояний с различным полным значением спина. Так как разность энергий этих состояний порядка обменной энергии, что часто оказывается не слишком большой величиной, оказывается возможным разными внешними воздействиями (в частности, приложением магнитного поля) изменять основное состояние такого *молекулярного магнетика*. Изучение таких магнетиков представляет интерес как реализация простых квантовых систем с не слишком большим числом частиц, также такие магнетики обсуждаются в связи с задачами квантовых вычислений. Молекулярные магнетики с основным состоянием с большим полным спином (т. е. с большим собственным магнитным моментом) обсуждаются как возможный материал для магнитной записи информации с рекордной плотностью.

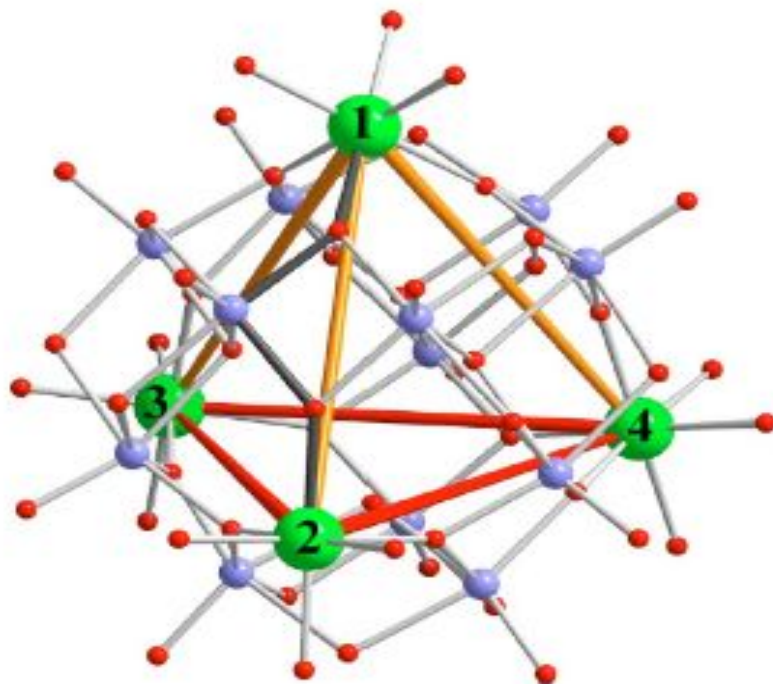


Рисунок 17: Фрагмент структуры молекулы метал-органического комплекса $\text{Mo}_{12}^{\text{V}}\text{O}_{30}(\mu_2\text{-OH})_{10}\text{H}_2\{\text{Ni}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_3\}_4$. Зелёные (нумерованные) шары - ионы никеля, голубые шары среднего размера - молибден, маленькие красные шары - кислород. Из статьи [26]

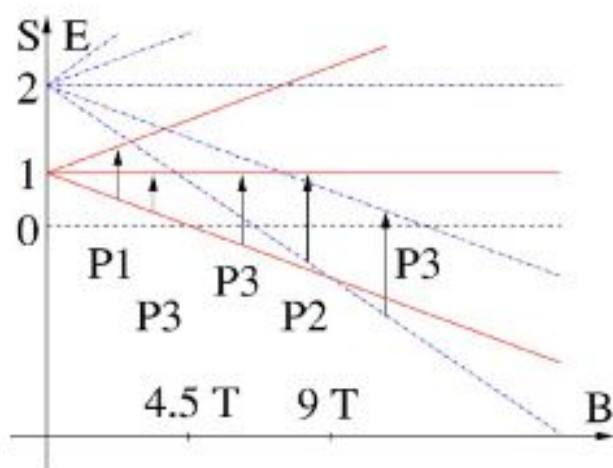


Рисунок 18: Фрагмент зависимости энергии спиновых подуровней от поля. Стрелки отмечают возможные ЭПР переходы. Из статьи [26].

Здесь мы в качестве примера рассмотрим поведение молекулярного магнетика $\{\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}\}$ в магнитном поле [26]. Метал-органический комплекс, о котором речь, имеет полную химическую формулу $\text{Mo}_{12}^{\text{V}}\text{O}_{30}(\mu_2\text{-OH})_{10}\text{H}_2\{\text{Ni}^{\text{II}}(\text{H}_2\text{O})_3\}_4$, фрагмент структуры этой молекулы показан для сведения на рисунке 17.

Ионы никеля имеют спин $S=1$ и формируют почти идеальную пирамиду, в которой каждый ион взаимодействует с каждым: $\hat{H} = \sum_{u>v} J_{uv} \hat{S}_u \hat{S}_v$. Если для

модельных рассуждений считать пирамиду идеальной, то все связи эквивалентны и сумма попарных произведений сводится к квадрату полного спина:

$$\hat{H} = \frac{J}{2} (\hat{S}_{\Sigma}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2 - \hat{S}_3^2 - \hat{S}_4^2) = \frac{J}{2} (S_{\Sigma}(S_{\Sigma}+1) - 8)$$

здесь S_{Σ} – полный спин молекулы, мы воспользовались тем, что для $S=1$ $\hat{S}^2 = S(S+1) = 2$. Таким образом, в нулевом поле уровни молекулы могут быть рассортированы по полному спину. По правилам сложения моментов четыре спина $S=1$ могут дать значения полного спина от 0 до 4.¹⁴

14 Вообще говоря, при этом есть отдельный комбинаторный вопрос о кратности вырождения этих спиновых мультиплетов: в исходной системе $3^4=81$ состояние, а в пяти состояниях от $S=0$ до $S=4$ было бы только $1+3+5+7+9=25$ состояний. Так что некоторые значения спина можно получить несколькими способами. Это вырождение некоторых спиновых состояний снимется, например, учётом

В случае рассматриваемого молекулярного магнетика обменное взаимодействие оказывается антиферромагнитным ($J > 0$, $J/k_B \approx 4\text{K}$) и наименьшую энергию имеет состояние с $S_z = 0$. Энергии спиновых состояний равны $E_S = \{-4J, -3J, -J, 2J, 6J\}$ в порядке роста полного спина.

В магнитном поле спиновые уровни начнут дополнительно расщепляться по проекции спина. В принципе, можно выписать средний магнитный момент такого магнетика по общим

правилам $\langle \mu \rangle = \frac{\sum_i \mu_i e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}$, где индекс i пробегает все состояния системы (см. сноску

на стр.34), но мы ограничимся только случаем $T \ll J$. Тогда можно заметить, что магнитная восприимчивость в малых полях будет экспоненциально мала $\chi(T \rightarrow 0) \propto e^{-J/T}$ в меру малости заселённости ближайшего уровня с ненулевым спином. Для состояний с ненулевыми значениями S_z нижний спиновый подуровень всегда понижает свою энергию быстрее, чем для более низких энергетических уровней.

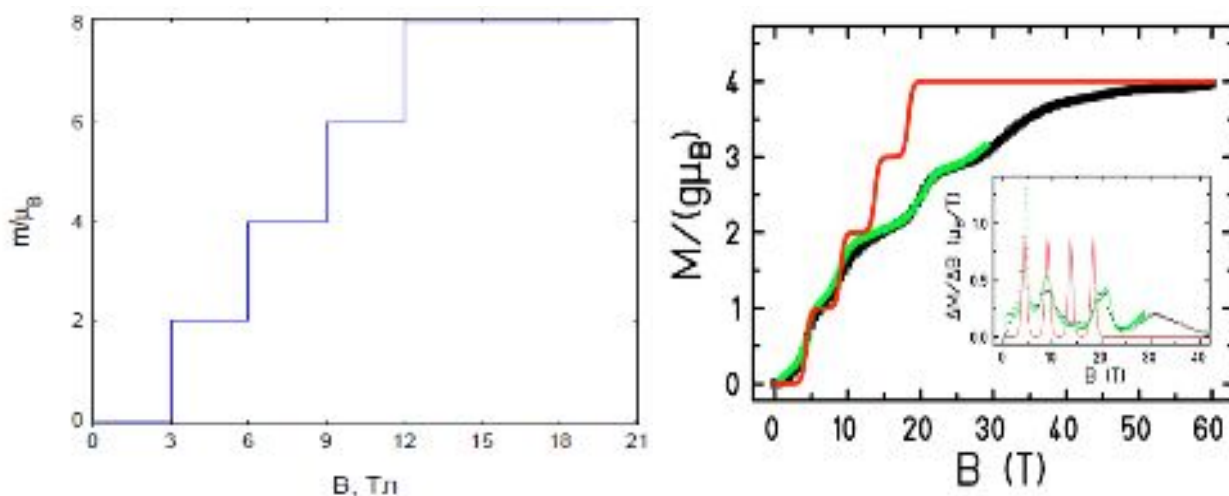


Рисунок 19: Слева: Модельная зависимость намагниченности молекулярного магнетика из четырёх антиферромагнитно связанных спинов $S=1$ от поля при $T \ll J$, $J/k_B = 4\text{K}$. Справа для сравнения результаты работы [26]: теоретическая кривая (красная) немного отличается от нашей из-за учёта конечной температуры и небольшого отличия параметров, экспериментальные данные (символы) демонстрируют сглаженные ступеньки из-за дополнительных взаимодействий и перестройки системы в сильном магнитном поле.

При $T \ll J$ полная намагниченность определяется самым нижним спиновым подуровнем, но эти подуровни будут меняться с ростом поля (рисунок 18). Таким образом, намагниченность при низких температурах будет дискретно «переключаться» между значениями из ряда $0, 2\mu_B, 4\mu_B, 6\mu_B, 8\mu_B$ по мере того, как нижним будет становиться подуровень $(S=0, S_z=0)$, $(S=1, S_z=1)$, $(S=2, S_z=2)$, $(S=3, S_z=3)$, $(S=4, S_z=4)$, соответственно.

В упрощённой модели равных связей между магнитными ионами можно легко найти поля, когда происходит смена основного состояния. Приравняем $E(S, S_z=S)$ и $E(S+1, S_z=S+1)$ в магнитном поле:

неэквивалентности связей.

$$\frac{J}{2}(S(S+1)-8)-2\mu_B B S = \frac{J}{2}((S+1)(S+2)-8)-2\mu_B B(S+1)$$

$$2\mu_B B = J(S+1)$$

$$B = \frac{J(S+1)}{2\mu_B}$$

Таким образом «переключение» основного состояния будет происходить через равные интервалы по магнитному полю с шагом $B = \frac{k_B J}{2\mu_B} \approx 30 \text{ кГц} = 3 \text{ Тл}$. Модельная зависимость

$M(B)$ и результаты реального эксперимента показаны на рисунке 35, конечная температура немного размывает резкие ступеньки на кривой намагничивания, учёт неэквивалентности связей делает ступеньки немного неравными. Кроме того, в реальном молекулярном магнетике присутствуют анизотропные спин-спиновые взаимодействия и индуцированные полем искажения структуры молекулы, приводящие к дополнительным различиям с рассмотренной простой моделью.

СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ

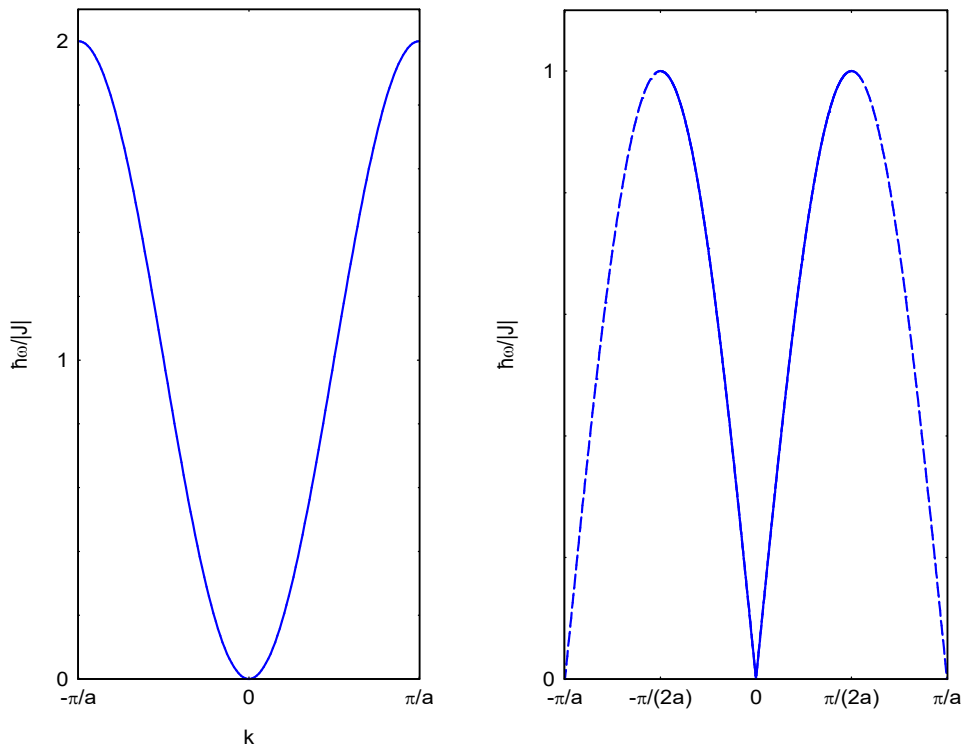


Рисунок 20: Вычисленные в классическом приближении для цепочки спинов спектры спиновых волн в ферромагнетике (слева) и в антиферромагнетике (справа). Для антиферромагнетика сплошной линией показан спектр в магнитной первой зоне Бриллюэна, пунктиром спектр продолжен по кристаллографической первой зоне Бриллюэна.

Низкотемпературные свойства магнетиков полностью определяются видом и спектром их возбуждений. В магнитоупорядоченных кристаллах такими возбуждениями являются колебания локальной намагниченности, которые (аналогично представлению колебаний атомов в кристалле в виде упругих волн или фононов) могут быть представлены в виде волн колебаний намагниченности: спиновых волн или магнонов.

Ниже мы рассмотрим примеры вычисления спектров спиновых волн в некоторых простых модельных случаях. Забегая вперёд, отметим что оказывается, что спектр спиновых волн в ферромагнетике и антиферромагнетике принципиально различается (рисунок 20). Длинноволновые спиновые волны в гейзенберговском ферромагнетике имеют квадратичный спектр $E \propto k^2$, а в антиферромагнетике — линейный $E \propto k$. Это отличие в спектрах не связано с используемыми простыми моделями — может быть показано из общих соображений (см. [27], глава VII), что такое отличие в спектрах связано именно с макроскопическим различием ферро- и антиферромагнетиков.

Элементарные возбуждения ферромагнетика

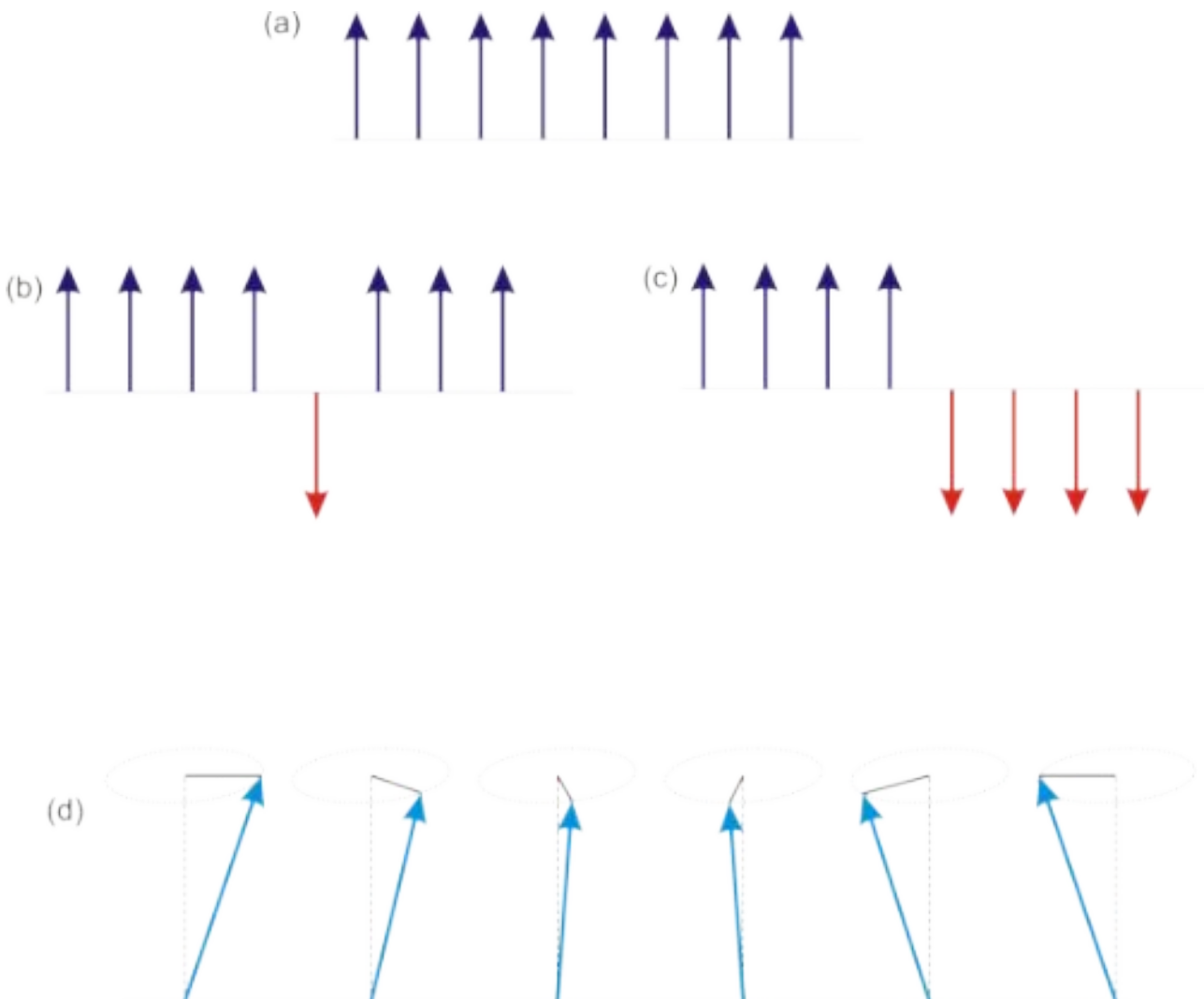


Рисунок 21 К построению элементарного возбуждения ферромагнетика. (a) основное состояние ферромагнитной цепочки, (b) возбуждённое состояние с перевернутым спином на одном из узлов, (c) возбуждённое состояние типа доменной стенки, (d) спиновая волна.

Рассмотрим модельный случай одномерной ферромагнитной цепочки при $T=0$. Будем рассматривать эту задачу в классическом пределе, считая спины обычными векторами. Состоянию с наименьшей энергией соответствует параллельная ориентация всех спиновых векторов (рисунок 21-а). Как устроены возбуждения такой системы?

В качестве напрашивающегося предположения, можно «перевернуть» один из спинов. Создание такого состояния потребует совершения работы $\delta E = 4|J|S^2$: энергия $2|J|S^2$ проигрывается во взаимодействии и с левым и с правым соседом (рисунок 21-б). Можно заметить, что можно создать возбуждённое состояние с вдвое меньшей энергией, если «перевернуть» половину спинов слева от некоторого узла, создав доменную стенку — тогда проигрывается энергия только на одной обменной связи (рисунок 21-с).

Однако, если вспомнить, что спиновый вектор трёхмерный, оказывается возможно сконструировать возбуждение со сколь угодно малой энергией. Для этого надо немного отклонить спины от положения равновесия на малый угол. Так как, в силу симметрии гамильтониана обменного взаимодействия, поворот всех спинов на *одинаковый* угол энергию не меняет (сохраняется взаимная ориентация спинов), то эти углы поворота должны

отличаться на разных узлах. Тогда оправданным приближением является поиск элементарного возбуждения в виде волны отклонения спина от равновесного положения (рисунок 21-d):

$$\vec{S}_n = \begin{pmatrix} \sin \Theta \cos(\varphi n) \\ \sin \Theta \sin(\varphi n) \\ \cos \Theta \end{pmatrix},$$

здесь Θ – угол отклонения спиновых векторов от «вертикали», а φ — «сдвиг» при переходе от одного узла к другому. Эта конфигурация соответствует тому, что все спины отклонены от оси Z на малый угол Θ , а их проекция на плоскость (XY) поворачивается с шагом φ .

Энергия такого состояния:

$$\begin{aligned} E &= J S^2 \sum_n \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} = J \sum_n \left(\sin^2 \Theta \cos(\varphi n) \cos(\varphi(n+1)) + \sin^2 \Theta \sin(\varphi n) \sin(\varphi(n+1)) + \cos^2 \Theta \right) = \\ &= J S^2 \sum_n \left(\sin^2 \Theta \cos \varphi + \cos^2 \Theta \right) = E_0 - 2 J S^2 N \sin^2 \Theta \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \end{aligned}$$

где $E_0 = J S^2 N$ — энергия основного состояния ферромагнетика. Положительная добавка к энергии основного состояния (напомним, что для ферромагнетика по нашему выбору знака обменного гамильтониана $J < 0$) и есть энергия возбуждения, она может быть сделана сколь угодно малой¹⁵ увеличением периода волны (уменьшением φ) и уменьшением угла отклонения Θ . Возбуждения такого типа называют спиновыми волнами.

15 Дополнительно можно отметить, что при выборе периодических граничных условий минимальное значение

$$\varphi_{min} = \frac{2\pi}{N}, \text{ что даёт оценку для энергии возбуждения независимо от параметра } \Theta \quad \varepsilon \leq \frac{2\pi^2}{N} J S^2,$$

что действительно меньше чем «наивные» возбуждения типа переворота спина или создания доменной стенки.

Элементарное возбуждение одномерного ферромагнетика в модели Изинга.[†]

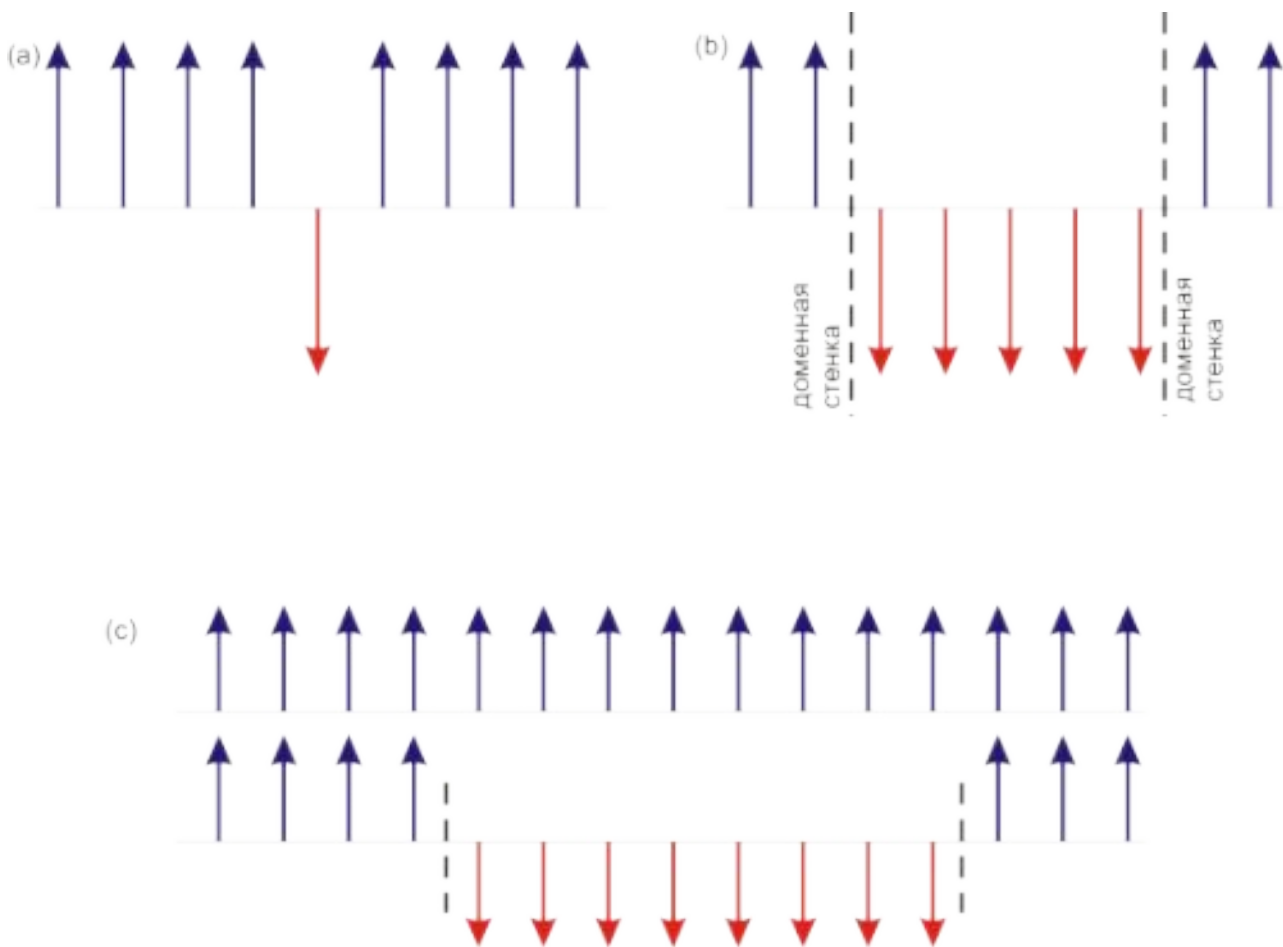


Рисунок 22 К построению возбуждения одномерного изинговского ферромагнетика. (a) переворот спина, (b) распад состояния с перевёрнутым спином на две доменные стенки, (c) «конфайнмент» доменных стенок в квазиодномерном изинговском ферромагнетике.

Для возникновения спиновых волн рассмотренного типа необходима возможность непрерывно поворачивать спиновый вектор. В некоторых кристаллах ориентация спинового вектора фиксируется вдоль или против какой-то оси кристалла сильными анизотропными взаимодействиями. Такой магнетик называют изинговским, его элементарным возбуждением в одномерном случае является описанная выше доменная стенка. Просто переворот спина распадается на две доменные стенки, которые в чисто одномерном случае могут быть свободно разнесены друг от друга, что эквивалентно отсутствию взаимодействия таких возбуждений.

Отметим интересную особенность, возникающую в таком магнетике в квазиодномерном случае. Взаимодействие между соседними цепочками делает разбегание доменных стенок невыгодным, проигрыш в энергии растёт с увеличением длины «неправильного» домена. Это означает возникновение взаимодействия возбуждений, причём это взаимодействие (с энергией взаимодействия линейно растущей с расстоянием) аналогично «конфайнменту» в кварковой теории (рисунок 22).

Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.

Рассмотрим модельную задачу ферромагнитно упорядоченной цепочки спинов¹⁶ с однородным гейзенберговским взаимодействием ближайших соседей [1]. Энергия такой цепочки: $E = J \sum_{i=0}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$, где $J < 0$.

Классическое рассмотрение, как и в модели молекулярного поля, вводит эффективное поле $\vec{B}_i = \frac{J}{g\mu_B} (\vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i-1})$, которое вызывает прецессию i -ого спина, если он отклонится от направления эффективного поля:

$$\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = (g\mu_B \vec{S}_i) \times \vec{B}_i = J (\vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_i \times \vec{S}_{i-1}).$$

Приняв направление ферромагнитного момента за ось z и считая отклонения $S_i^{x,y}$ малыми, векторное уравнение линеаризуется:

$$\begin{aligned} \frac{dS_i^x}{dt} &= \frac{JS}{\hbar} (S_i^y - S_{i+1}^y + S_i^y - S_{i-1}^y) \\ \frac{dS_i^y}{dt} &= -\frac{JS}{\hbar} (S_i^x - S_{i+1}^x + S_i^x - S_{i-1}^x) \\ \frac{dS_i^z}{dt} &= 0 + O(S^x S^y) \end{aligned}$$

Здесь можно уменьшить число уравнений, перейдя к комплексным переменным¹⁷ $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$:

$$\frac{dS_i^+}{dt} = \frac{JS}{\hbar} (-2i S_i^+ + i S_{i+1}^+ + i S_{i-1}^+),$$

откуда стандартной подстановкой $S_i^+ = u e^{i(\omega t - kx)}$ получаем уравнение для частот:

$$\omega = \frac{JS}{\hbar} (-2 + e^{ika} + e^{-ika}) = -2 \frac{JS}{\hbar} (1 - \cos(ka)) = -4 \frac{JS}{\hbar} \sin^2 \frac{ka}{2} \quad (\text{напомним, что } J < 0).$$

График этой зависимости представлен на рисунке 20. В длинноволновом пределе этот результат превращается в квадратичный спектр $\omega = \frac{|J|Sa^2}{\hbar} k^2$. Квадратичный спектр в механике соответствует массивной частице, поэтому иногда говорят о «массе» магнона

16 Строго говоря, одномерный ферромагнитный порядок будет разрушаться тепловыми флуктуациями при любой ненулевой температуре, поэтому рассмотрение такой спиновой цепочки модельно (как и рассмотрение задачи о колебаниях в цепочке атомов при обсуждении фононов). Аналогичное рассмотрение может быть сделано и на более реалистичной решётке. Однако ключевой вывод о свойствах спектра при малых k останется тем же (смотри также сноску на стр.39).

17 Либо ищем решение в форме бегущей волны с двумя компонентами $S_p^x = u e^{i(kap - \omega t)}$ и $S_p^y = v e^{i(kap - \omega t)}$, для нетривиальности решений которого необходимо равенство нулю детерминанта:

$$\begin{vmatrix} -i\omega & \frac{JS}{\hbar} (2 - e^{ika} - e^{-ika}) \\ -\frac{JS}{\hbar} (2 - e^{ika} - e^{-ika}) & -i\omega \end{vmatrix} = 0.$$

(кванта таких колебаний) $\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} = \frac{2|J|S a^2}{\hbar^2}$. Максимальная энергия возбуждений определяется обменной константой и спином магнитного иона, в зависимости от устройства обменной связи (в том числе и расстояния между ионами) она типично варьируется от нескольких градусов до нескольких сотен градусов Кельвина. Спиновые волны в ферромагнетике существуют только одной поляризации.

Отметим также, что рассматривая ранее поведение антиферромагнетика в насыщенной фазе мы фактически получили спектр элементарных возбуждений ферромагнетика в квантовом подходе. Нестрогость «модели векторов» оправдывается тем, что удаётся получить качественно верный ответ при помощи более простого формализма, который, к тому же, позволяет легко учитывать возможные изменения архитектуры обменных связей в магнетике. В каком-то смысле «модель векторов» в физике магнетиков является аналогом «модели шариков и пружин» в описании упругих волн в кристалле.

Спиновые волны в антиферромагнетике. Классическое рассмотрение.[†]

В качестве модельной задачи рассмотрим одномерную антиферромагнитно упорядоченную цепочку.¹⁸

В классической задаче состояние с минимальной энергией представляет собой неелевский порядок — чередование локальных спинов направленных «вверх» и «вниз». Выберем ось z вдоль направления спинов и для определённости выберем состояние, в котором чётные спины направлены в направлении оси z . Классическое рассмотрение, как и для ферромагнетика, рассматривает прецессию спина в эффективном поле

$$\vec{B}_i = \frac{J}{g \mu_B} (\vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i-1}), \text{ создаваемом соседями:}$$

$$\hbar \frac{d \vec{S}_i}{dt} = (g \mu_B \vec{S}_i) \times \vec{B}_i = J (\vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_i \times \vec{S}_{i-1}).$$

Однако, из-за чередования направления спина в исходном состоянии, уравнения прецессии для спинов в чётных и нечётных позициях отличаются:

$$\hbar \frac{d S_{2p}^x}{dt} = JS (-S_{2p}^y - S_{2p+1}^y - S_{2p}^y - S_{2p-1}^y)$$

$$\hbar \frac{d S_{2p}^y}{dt} = JS (S_{2p}^x + S_{2p+1}^x + S_{2p}^x + S_{2p-1}^x)$$

$$\hbar \frac{d S_{2p+1}^x}{dt} = JS (S_{2p+1}^y + S_{2p+2}^y + S_{2p+1}^y + S_{2p}^y)$$

$$\hbar \frac{d S_{2p+1}^y}{dt} = JS (-S_{2p+1}^x - S_{2p+2}^x - S_{2p+1}^x - S_{2p}^x)$$

Число уравнений можно уменьшить, перейдя к комплексным переменным $S^\pm = S^x \pm i S^y$:

¹⁸ Как мы увидим далее, спектр антиферромагнитных магнонов аналогичен спектру фононов (он линеен при малых k). Поэтому к антиферромагнетикам сразу применимы все рассуждения про неустойчивость одномерного кристалла при $T=0$ и двумерного кристалла при $T \neq 0$. Рассуждения о цепочке упорядоченных спинов являются простой моделью (смотри также сноску на стр.28).

$$\begin{aligned}\hbar \frac{dS_{2p}^+}{dt} &= i JS (2S_{2p}^+ + S_{2p+1}^+ + S_{2p-1}^+) \\ \hbar \frac{dS_{2p+1}^+}{dt} &= -i JS (2S_{2p+1}^+ + S_{2p+2}^+ + S_{2p}^+)\end{aligned}$$

Подстановкой $S_{2p}^+ = u e^{i(2pka - \omega t)}$ $S_{2p+1}^+ = v e^{i((2p+1)ka - \omega t)}$ и требованием нетривиальности решения получим дисперсионное уравнение:

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix} i\hbar\omega - 2iJS & -iJS(e^{ika} + e^{-ika}) \\ iJS(e^{ika} + e^{-ika}) & i\hbar\omega + 2iJS \end{vmatrix} &= 0 \\ (\hbar\omega)^2 - 4(JS)^2 + 4(JS)^2 \cos^2(ka) &= 0 \\ (\hbar\omega)^2 &= 4(JS)^2 \sin^2(ka) \\ \hbar\omega &= 2JS |\sin(ka)|\end{aligned}$$

Отметим, что магнитная зона Бриллюэна в этой задаче вдвое меньше кристаллографической: периодичность найденного спектра в k -пространстве равна $\frac{\pi}{a}$, а не $\frac{2\pi}{a}$ как в ферромагнетике. Это связано с тем, что магнитный период цепочки вдвое больше кристаллографического. Также, в отличие от ферромагнетика, спектр антиферромагнитных спиновых волн линейен при малых волновых векторах (рисунок 20). В двухподрешёточном антиферромагнетике существует две своеобразные «поляризации» спиновых волн, соответствующие антиферромагнитным магнонам, распространяющимся по разным подрешёткам.

В более сложных задачах аналогичные рассуждения могут быть проведены в модели с большим числом подрешёток. В реальных кристаллах помимо обменного взаимодействия присутствуют и различные анизотропные спин-спиновые взаимодействия (например диполь-дипольные), наличие которых приводит к тому, что для намагниченности подрешётки возникают выделенные направления. С учётом анизотропии частота однородных колебаний перестаёт быть нулевой — минимальное отклонение намагниченности подрешётки от равновесного положения требует конечной энергии.¹⁹ Для одномерной модели спектр с учётом анизотропии имеет вид $\hbar\omega = \sqrt{\Delta^2 + (2JS \sin(ka))^2}$.

Примеры спектров спиновых волн в реальных средах.

Экспериментальные методы изучения спиновых волн.

Магнонный спектр доступен наблюдению в опытах по неупругому рассеянию нейтронов (за счёт взаимодействия магнитного момента нейтрона с локальной намагниченностью среды), а в центре зоны в опытах по комбинационному рассеянию и магнитному резонансу. Описание неупругого рассеяния и комбинационного рассеяния формально аналогично описанию аналогичных процессов с участием фононов. Однако интенсивность магнитного комбинационного рассеяния света оказывается слабее из-за относительной слабости взаимодействия магнитного поля электромагнитной волны с намагниченностью среды.

¹⁹ Аналогичные эффекты конечно имеют место и в ферромагнетике, однако в антиферромагнетике происходит своеобразное усиление анизотропии [28]: частота однородных колебаний в антиферромагнетике

$\Delta \sim \sqrt{\omega_{ex} \omega_a}$, где $\hbar\omega_{ex}$ и $\hbar\omega_a$ - характерные энергии обменного и анизотропного взаимодействий (в расчёте на спин), в то время как в ферромагнетике это величина порядка $\omega_a \ll \sqrt{\omega_{ex} \omega_a}$.

Для рассеяния нейтронов наблюдение дифракции на магнитной структуре и неупругого рассеяния на магнитных возбуждениях не требует принципиально более высокой чувствительности, так как в силу удачного совпадения сечения рассеяния на ядрах (связанного с сильным, но короткодействующим сильным ядерным взаимодействием) и на магнитных моментах (связанные со слабым, но далекодействующим диполь-дипольным взаимодействием) оказываются близки. Некоторые общие сведения по этим методам могут быть найдены в методическом пособии [3].

Спиновые волны в ферро- и ферримагнетиках: эксперимент.

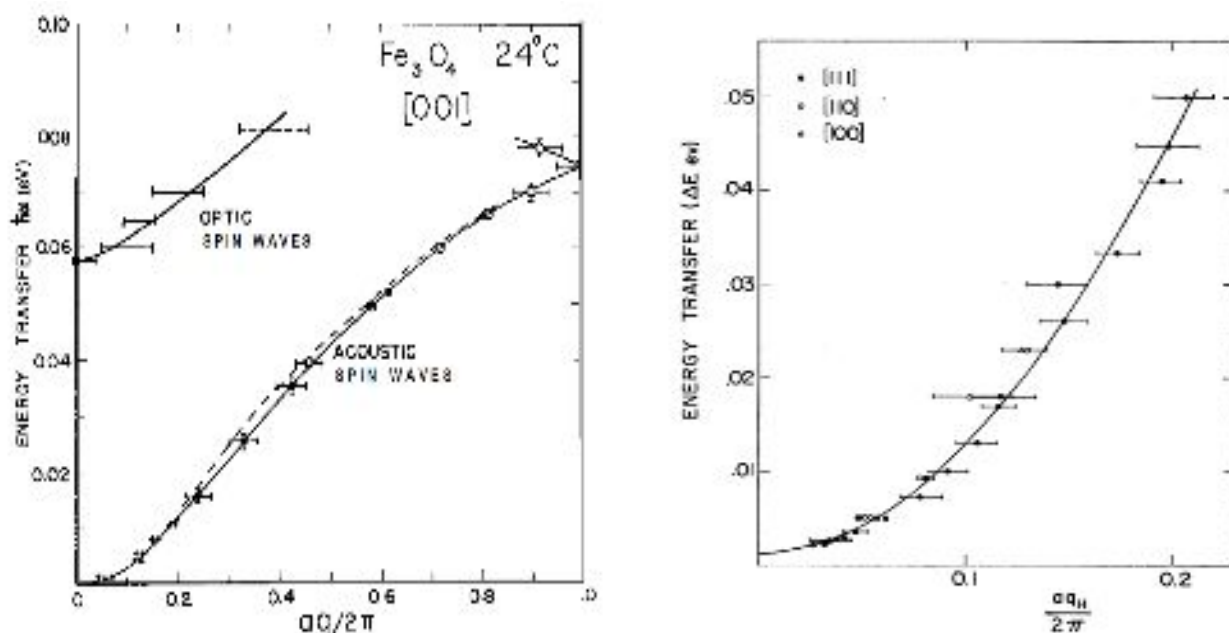


Рисунок 23: Слева: Спектр спиновых волн в ферримагнитном магнетите Fe_3O_4 . Из работы [29]. Справа: спектр спиновых волн в ферромагнитном сплаве $FeCo$. Из работы [30].

Квадратичность спектра спиновых волн в ферромагнетиках непосредственно установлена в опытах по неупругому рассеянию нейтронов. В качестве примера можно привести классические результаты Брокхауза для рассеяния нейтронов на ферромагнитном сплаве $FeCo$ [30] и на ферримагнитном магнетите Fe_3O_4 [29] (рисунок 23). В случае ферримагнетика, у которого есть две подрешётки, наблюдается не только квадратичная при малых волновых векторах «акустическая» мода, но и «оптическая» мода с ненулевой энергией длинноволновых колебаний.

Спиновые волны в антиферромагнетике MnF_2 . †

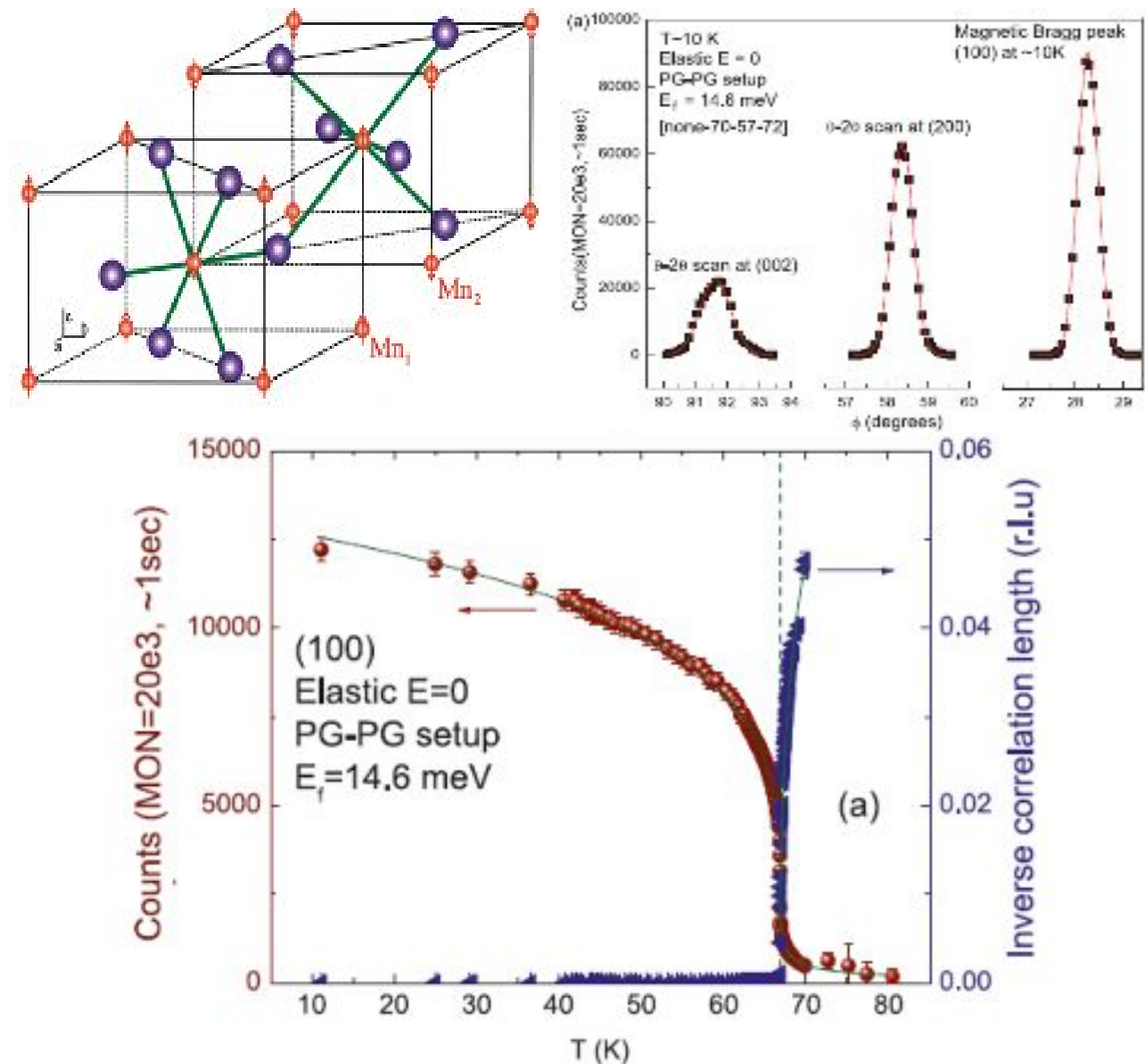


Рисунок 24: Верхний ряд слева: определённая по данным упругого рассеяния нейтронов магнитная структура антиферромагнетика MnF_2 . Верхний ряд справа: профили брэгговских пиков для нейтронного рассеяния на ядрах (пики (002) и (200)) и магнитного брэгговского пика (100) ниже температуры Нееля. Внизу: зависимость от температуры интенсивности магнитного брэгговского пика (красные символы) и магнитной корреляционной длины (синие). Из работы [31].

Антиферромагнетик MnF_2 является одним из «классических» антиферромагнетиков, изучаемым с 40-х годов 20 века. Его свойства хорошо описываются в спин-волновой модели, это соединение изучено основными экспериментальными методами: рассеянием нейтронов [31], магнитным резонансом [24], комбинационным рассеянием света [32] и различными статическими методами (см., например, рисунок 15). Кристаллическая решётка этого магнетика — объёмноцентрированная тетрагональная, магнитные ионы Mn^{2+} ($S=5/2$) занимают позиции в углах и в центре элементарной ячейки и ниже температуры Нееля $T_N \approx 68K$ образуют две подрешётки с локальными намагниченностями направленными

вдоль оси 4-го порядка (рисунок 24).

При наступлении магнитного порядка ионы, относящиеся к разным подрешёткам перестают быть эквивалентными и *примитивная* элементарная ячейка изменяется (магнитная примитивная ячейка является простой тетрагональной и включает теперь два *магнитно-неэквивалентных* атома марганца). Поэтому при упругом рассеянии нейтронов возникают дополнительные магнитные брэгговские пики. По их положению и интенсивности и определяется магнитная структура. Интенсивность магнитного брэгговского пика ниже температуры Нееля связана с величиной намагниченности подрешётки (рисунок 24).

Методом неупругого рассеяния нейтронов был измерен [31] спектр спиновых волн (рисунок 25). Наблюдается две ветви спектра, соответствующие двум «поляризациям» антиферромагнитных магнонов. Небольшое различие дисперсионных кривых для разных поляризаций связано с наличием нескольких различных обменных взаимодействий. Ненулевая энергия в центре зоны Бриллюэна связана с эффектами анизотропии, эта ненулевая энергия однородных колебаний проявляется также и в опытах по магнитному резонансу [24]. При рассеянии света также наблюдался сдвиг частоты рассеянного света, соответствующий одномагнотному и двухмагнотному рамановскому процессу [32] (рисунок 26).

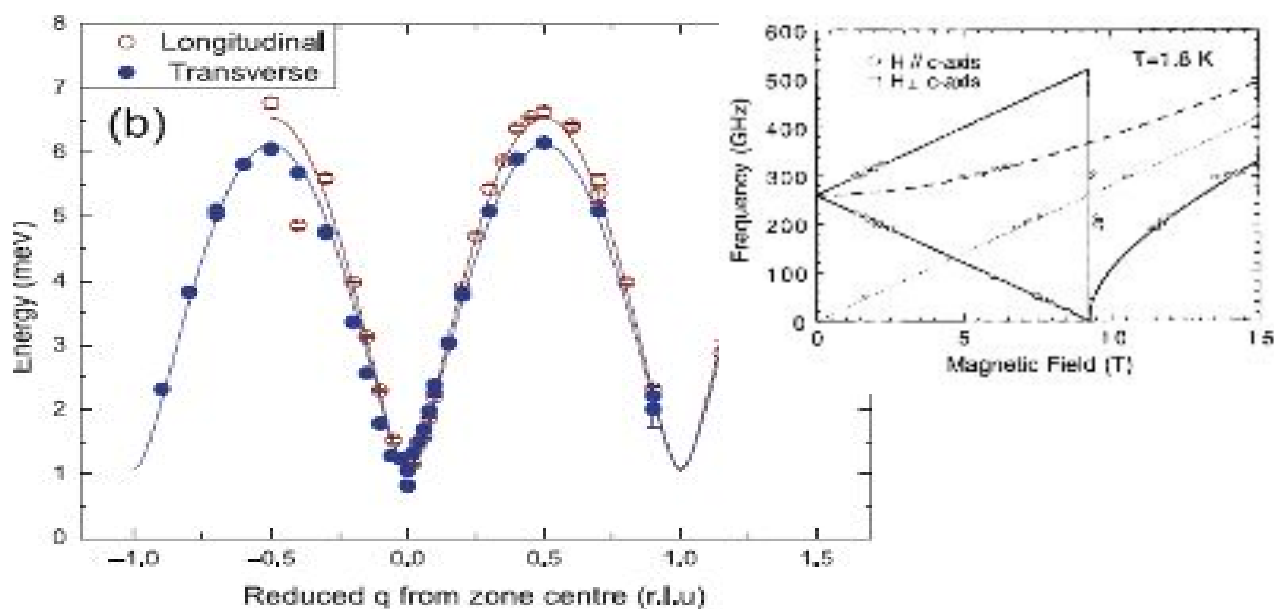


Рисунок 25: Слева: MnF_2 , спектры для двух поляризаций антиферромагнитных магнонов с волновым вектором $(0,0,q)$, измеренные по неупругому рассеянию нейтронов. Волновой вектор нормирован на вектор обратной решётки. Кривые — расчёт в модели спиновых волн. Из работы [31]. Справа: зависимость частоты магнитного резонанса от магнитного поля, величина частоты при $B=0$ соответствует энергии однородных колебаний при $q=0$ на левой панели. Из работы [24].

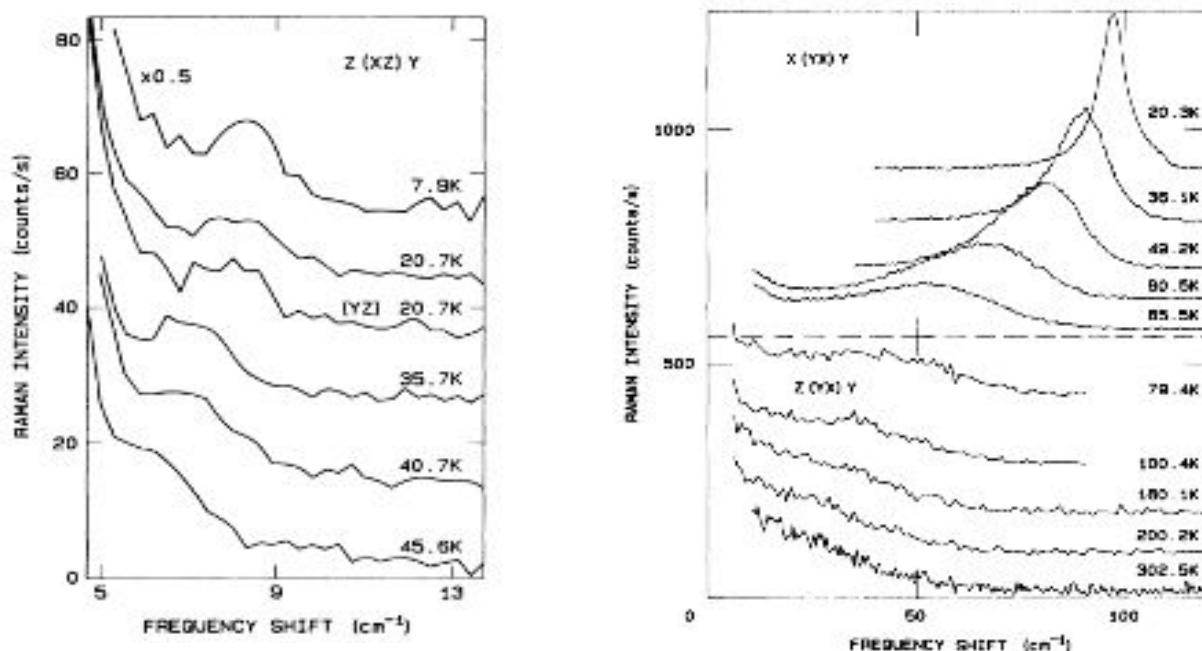


Рисунок 26: Зависимость от температуры спектров рассеяния света с длиной волны 476.5 нм. Из работы [32]. Слева: одномагнотное рассеяние. Возникающий при низких температурах пик со сдвигом частоты около 8.5 см^{-1} (около 250 ГГц или 1 мэВ) соответствует рамановскому процессу с рождением одного магнона в центре зоны Бриллюэна. Справа: двухмагнотное рассеяние. Максимум со сдвигом частоты 100 см^{-1} соответствует рождению двух магнонов с энергией 50 см^{-1} (около 1500 ГГц или 6 мэВ) на границе зоны Бриллюэна.

Квантование спиновых волн. Вклад спиновых волн в теплоёмкость и намагниченность ферромагнетика.

Аналогично переходу от упругих волн к фононам, можно проквантовать колебания магнитной подсистемы. Спиновым волнам с частотой ω и волновым вектором \vec{k} сопоставляются квазичастицы — магноны. Энергия магнона $\hbar\omega$, квазиимпульс $\hbar\vec{k}$ определён с точностью до вектора обратной решётки (обратной решётки для магнитной системы, которая может отличаться от кристаллографической, если период магнитной структуры в некоторых направлениях кратно увеличивается). Магноны являются бозе-частицами с нулевым химпотенциалом (как и для всех квазичастиц, для магнонов нет закона сохранения числа частиц и они рождаются в нужном количестве до достижения термодинамического равновесия), их числа заполнения описываются планковской функцией

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} .$$

В отсутствие магнонов намагниченность ферромагнетика из N спинов равна $M_{sat} = N g \mu_B S$, при возникновении спиновых волн локальные намагниченности отклоняются от равновесного направления и значение проекции полной намагниченности на данное направление должно уменьшаться. В силу квантования спинового момента это изменение должно быть дискретно — таким образом мы ожидаем, что каждый ферромагнитный магнон несёт магнитный момент, равный минимальному кванту изменения

намагниченности $\Delta m = g \mu_B$.²⁰ Подчеркнём, что этот результат касается именно ферромагнитных магнонов, в антиферромагнетиках вопрос о магнитном моменте магнона сложнее.

Низкотемпературная теплоёмкость магнетиков часто определяется именно вкладом спиновых волн. Проведём вычисления этого вклада для ферромагнетика. Рассмотрим ферромагнетик с взаимодействием только ближайших соседей на простой кубической решётке. Спектр спиновых волн в такой системе²¹ $\omega(\vec{k}) = \frac{2|J|S}{\hbar} (3 - (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)))$, вблизи минимума в центре зоны (при $k=0$) это квадратичный спектр $\omega \approx \frac{|J|S a^2}{\hbar} k^2$, аналогичный полученному ранее в простой модели ферромагнитной цепочки.

Энергия, связанная с термически активированными магнонами: $E = \int_{1 \text{ з.бр.}} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}$.

Нас интересует низкотемпературный предел, тогда мы можем, заменить спектр квадратичным для всех \vec{k} и, как и при выводе закона Дебая для фононов, распространить интегрирование по частоте до бесконечности:

$$E = \frac{V |J| S a^2}{2 \pi^2} \int_0^\infty \frac{k^4}{e^{|J| S a^2 k^2 / T} - 1} dk = \frac{V}{2 \pi^2} \frac{T^{5/2}}{(|J| S a^2)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{e^{x^2} - 1} = \frac{V}{4 \pi^2} \frac{T^{5/2}}{(|J| S a^2)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1}.$$

Мы получили $E \propto T^{5/2}$, соответственно для теплоёмкости ферромагнетик при низких температурах получаем $C \propto T^{3/2}$. Эта зависимость спадает при понижении температуры медленнее, чем дебаевский вклад T^3 и, соответственно, при низких температурах в теплоёмкости ферромагнетика вклад магнонов должен доминировать. Экспериментально такое поведение наблюдалось в работе [33], пример температурной зависимости теплоёмкости представлен на рисунке 27.

20 Это рассуждение подтверждается непосредственно при квантовомеханическом выводе спектра магнонов выше.

21 Мы используем результат, полученный в предыдущем разделе для 6 ближайших соседей и трёх векторов $\vec{\delta} = \vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$, но аналогичный результат можно получить и в классической модели.

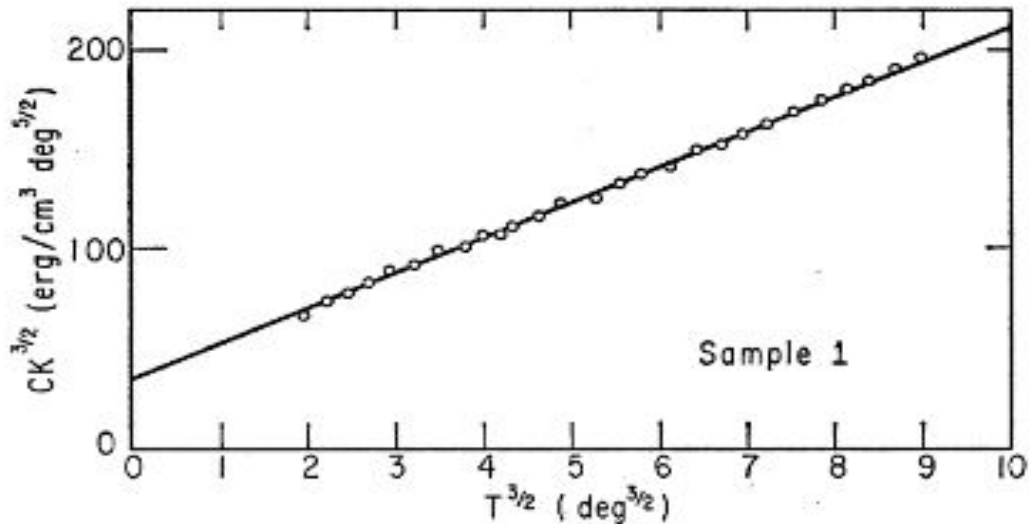


Рисунок 27: Экспериментальная проверка предсказания спин-волновой теории для ферромагнетика, из работы [33]. Исследовался образец железо-итриевого граната, температура Кюри около 550К. По оси X отложена $T^{3/2}$, по оси Y произведение $CT^{3/2}$: в таких координатах сумма магнного и фононного вклада в теплоёмкости $C_{полн} = aT^{3/2} + bT^3$ должна преобразовываться в прямую.

Кроме того, термоактивированные магноны приводят к уменьшению спонтанной намагниченности ферромагнетика. Это уменьшение при низких температурах:

$$\Delta M = g\mu_B \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \frac{V g \mu_B}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{e^{|J|Sa^2k^2/T} - 1} = \frac{V g \mu_B}{4\pi^2} \left(\frac{T}{|J|Sa^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} \propto T^{3/2}. \quad \text{Этот результат}$$

известен под названием закона $T^{3/2}$ Блоха.²²

В расчёте на спин для простой кубической решётки можно получить относительное изменение намагниченности $\frac{\Delta m}{g\mu_B S} = 0.0587 \frac{1}{S} \left(\frac{k_B T}{|J|S} \right)^{3/2}$. Для сравнения с результатом

теории молекулярного поля выразим этот ответ для спинов 1/2 через температуру Кюри-Вейса $k_B \Theta = -\frac{S(S+1)}{3} \sum_j J_{ij} = \frac{3}{2} |J|$: $\frac{\Delta m}{\mu_B} = 0.6100 \left(\frac{T}{\Theta} \right)^{3/2}$. Как уже отмечалось при

анализе результатов модели молекулярного поля, этот результат даёт более слабую зависимость от температуры (степенную, а не экспоненциальную). Пример экспериментальной проверки закона Блоха в ферромагнетике (по работе [35]) представлен на рисунке 28.

22 Перечислим ещё раз приближения модели, в которой получается закон Блоха: спектр считается квадратичным, спиновые волны (магноны) считаются не взаимодействующими. В принципе, в рамках теории спиновых волн, могут быть получены и другие поправки, учитывающие эти эффекты. В работе Дайсона [34] показано, что первые члены разложения имеют вид:

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - a_0 T^{3/2} - a_1 T^{5/2} - a_2 T^{7/2} - a_3 T^4 + Q(T^{9/2}), \quad \text{где все коэффициенты положительные.}$$

Слагаемое с a_0 описывает блоховский вклад, слагаемые с a_1 и a_2 описывают эффект от отклонения спектра магнонов от квадратичного, слагаемое с a_3 является первым вкладом от взаимодействия магнонов.

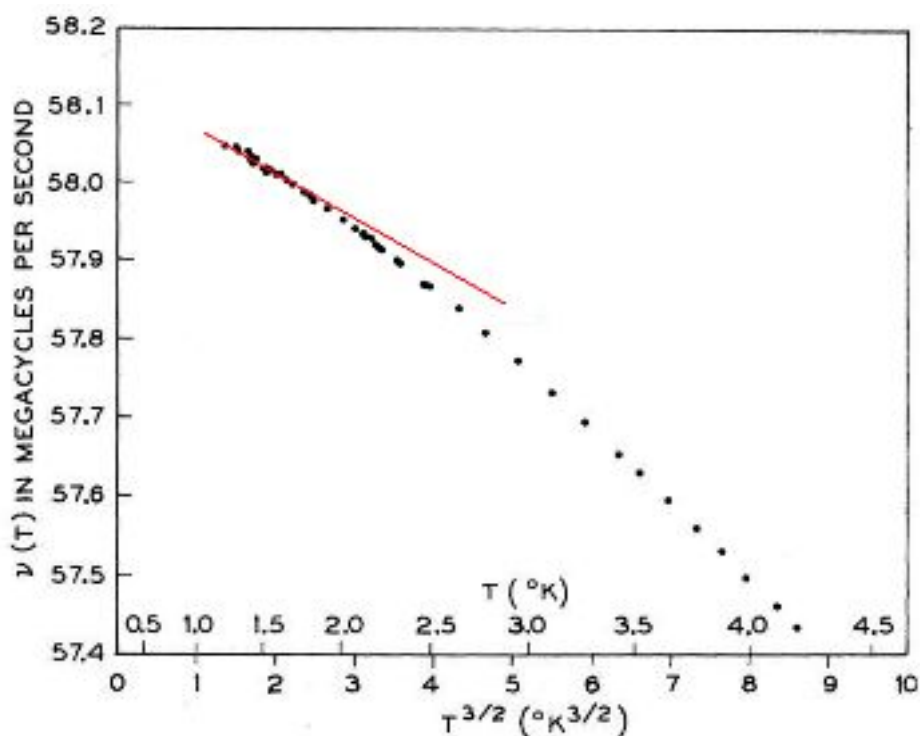


Рисунок 28: Пример экспериментальной проверки закона Блоха, из работы [35]. Символы — данные эксперимента, красная линия — закон Блоха 3/2. CrBr_3 , $T_C=37\text{K}$.

В работе [35] исследовался методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) ферромагнетик CrBr_3 с температурой Кюри 37 К. Регистрировалась частота ЯМР на ядрах ^{53}Cr , определяемая сверхтонким (электрон-ядерным) взаимодействием. Это взаимодействие можно описать как действие на ядро эффективного поля, пропорционального намагниченности ферромагнетика. Поэтому сдвиг частоты ЯМР является по сути измерением электронного магнитного момента иона. Отклонение от закона Блоха $T^{3/2}$ может быть описано в модели Дайсона (см. сноску на стр.27) [34] включением слагаемого $T^{5/2}$, описывающего отклонение от квадратичного спектра магнонов.

Необычные виды магнитного порядка и разупорядоченные магнитные состояния.[†]

В заключение приведём несколько примеров магнетиков, которые демонстрируют свойства, отличные от рассмотренных простых систем.

Неколлинеарные антиферромагнетики.

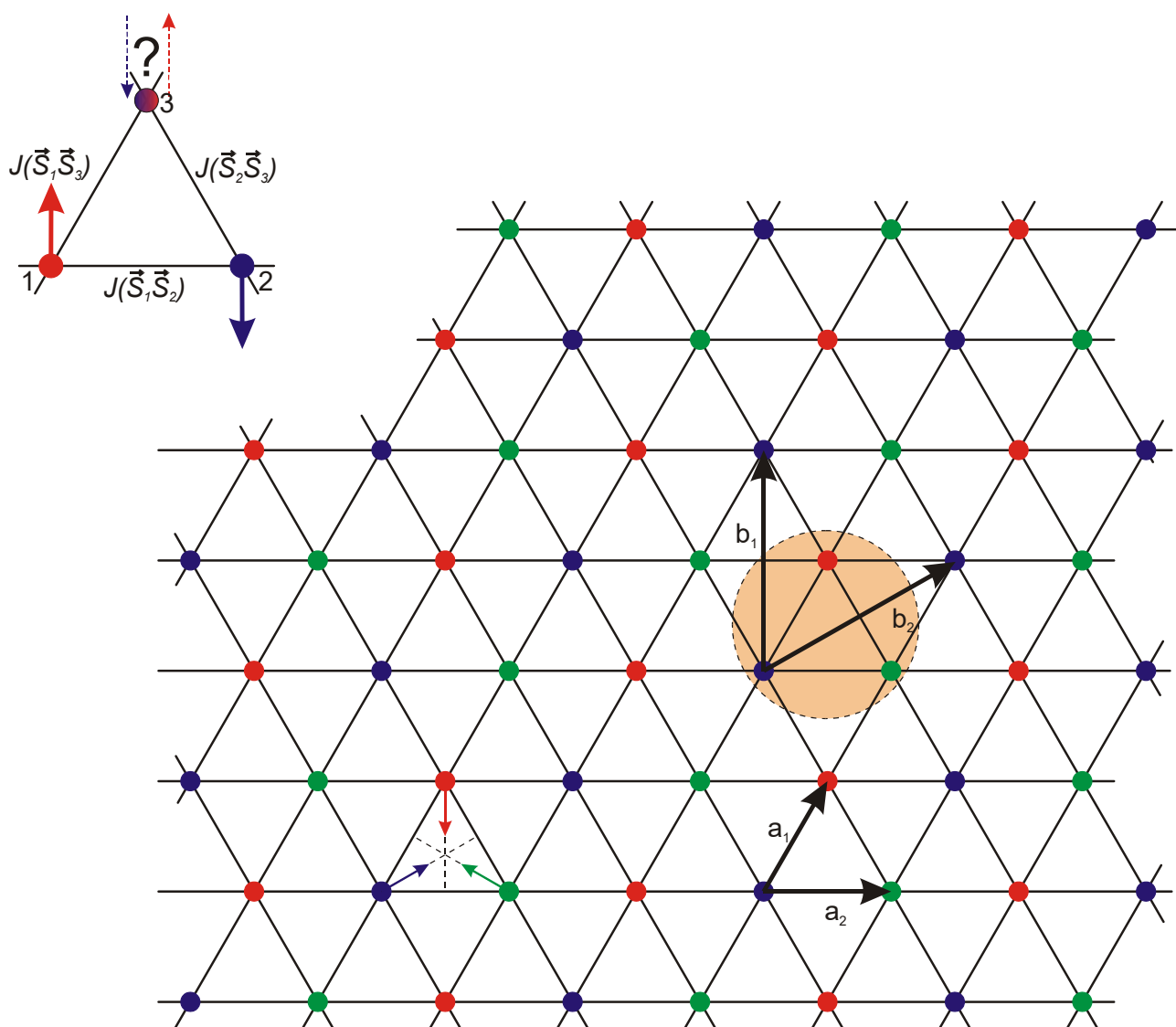


Рисунок 29: (вставка) Иллюстрация невозможности минимизировать энергию обменного взаимодействия на треугольной решётке в коллинеарной структуре. (основная панель) 120-градусное неколлинеарное упорядочение в антиферромагнетике на треугольной решётке. Цветом помечены магнитные ионы из одной подрешётки. В упорядоченной фазе базис состоит из трёх атомов (вариант выбора базиса показан оранжевым фоном), площадь элементарной ячейки утраивается. Показаны также примитивные трансляции исходной решётки a_1, a_2 и магнитной структуры b_1, b_2 .

В антиферромагнетике может быть и больше двух подрешёток. В ряде кристаллов гексагональная симметрия приводит к тому, что магнитные ионы в плоскостях,

перпендикулярных оси 6 порядка, занимают места в вершинах сети равносторонних треугольников. При этом каждый ион взаимодействует одинаково со всеми своими шестью соседями в плоскости. Треугольный геометрический мотив обменных связей препятствует формированию обычного двухподрешётчного антиферромагнитного порядка, это наглядно проявляется в классическом пределе: если мы направим спины в двух вершинах треугольника антипараллельно, то третий спин не может одновременно быть антипараллелен обоим — но при этом его взаимодействие с обоими спинами одинаково.

Учёт более тонких эффектов (энергии не только основного состояния, но и энергии спиновых волн) показывает, что в таких структурах стабилизируется так называемое 120-градусное упорядочение: спины формируют три подрешётки, лежащих в одной плоскости, и угол между намагниченностями подрешёток равен 120° (рисунок 35). При учёте только обменного взаимодействия (в обменном приближении) плоскость, в которой лежат намагниченности подрешёток может быть произвольно ориентирована относительно кристалла и локальные намагниченности в плоскости могут быть одновременно повернуты на произвольный угол.

Антиферромагнетики со спиральным упорядочением.

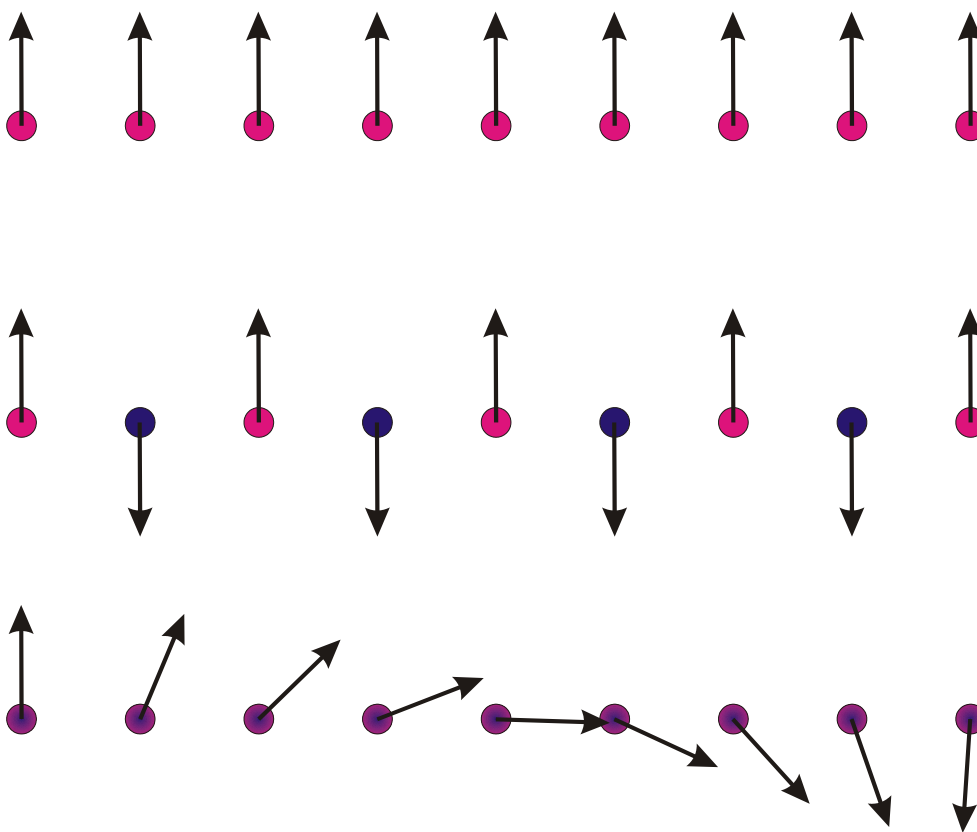


Рисунок 30: Сверху вниз: коллинеарное ферромагнитное ($\phi=0$), коллинеарное антиферромагнитное ($\phi=\pi$) и неколлинеарное спиральное состояния классической спиновой цепочки.

Необычным примером антиферромагнетика, в котором в некотором смысле имеется бесконечное число подрешёток, являются антиферромагнетики со спиральным упорядочением. В таких магнетиках вдоль некоторого кристаллографического направления при переходе от одного магнитного иона к следующему локальная намагниченность поворачивается на некоторый угол, так что период получающейся спирали оказывается не кратным периодом решётки. При этом по своим свойствам эта система является

антиферромагнетиком: есть среднее значения спина на узле, есть регулярное расположение спинов в пространстве, нет полного магнитного момента.

Простейшей моделью, в которой возникает такая структура является цепочка классических спинов, в которых обменным образом взаимодействуют не только ближайшиe соседи, но и следующие за ближайшими (как уже отмечалось, такая картина возможна так как обменное взаимодействие между магнитными ионами в реальных магнетиках осуществляется косвенным образом через промежуточные немагнитные ионы).

Действительно, энергия взаимодействия классических спинов $E = J_1 \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}$. Если для упрощения задачи предположить, что все спиновые вектора лежат в некоторой плоскости (при строгом рассмотрении такая планарная структура будет выбрана при учёте энергии возбуждений, как и в случае 120-градусной структуры) и ввести угол поворота спина на каждом шаге относительно предыдущего спина ϕ , то $E = J_1 S^2 \cos \phi + J_2 S^2 \cos 2\phi$. Минимизация этого выражения приводит к уравнению:

$$J_1 \sin \phi + 2 J_2 \sin 2\phi = 0$$

$$\sin \phi \left(\frac{J_1}{J_2} + 4 \cos \phi \right) = 0$$

При ферромагнитном $J_2 < 0$ минимуму энергии отвечает коллинеарное состояние с $\phi = 0; \pi$ (для ферро- и антиферромагнитного взаимодействия ближайших соседей, соответственно), при слабом антиферромагнитном взаимодействии вторых соседей $\left| \frac{J_1}{J_2} \right| > 4$ минимуму энергии также отвечает коллинеарное состояние с $\phi = 0; \pi$, а при более сильном $\left| \frac{J_1}{J_2} \right| < 4$ - неколлинеарное (спиральное) состояние в котором на каждом шаге спины подворачиваются на определяемый отношением обменов (и вообще говоря произвольный) угол $\phi = \arccos \left(-\frac{J_1}{4J_2} \right)$.

Магнетики с геометрической фрустрацией обменного взаимодействия.

Геометрической фрустрацией обменного взаимодействия называют ситуацию, когда геометрия обменных связей такова, что невозможно построить классическую спиновую структуру, одновременно обеспечивающую локальный минимум обменной энергии на всех связях.²³

Одной из моделей, где фрустрация обменного взаимодействия ведёт к существенному изменению свойств магнетика является антиферромагнетик с взаимодействием только ближайших соседей на пироклорной решётке. В такой решётке магнитные ионы занимают позиции в узлах сети из тетраэдров с общими вершинами (рисунок 30), такая структура реализуется в ряде редкоземельных соединений ($Gd_2Ti_2O_7$, $Gd_2Sn_2O_7$) и в соединениях со структурой шпинели (например, $ZnCr_2O_4$).

23 Рассмотренные выше треугольная решётка и цепочка с конкурирующими взаимодействиями ближайших и следующих за ближайшими соседей также являются примерами такой геометрической фрустрации.

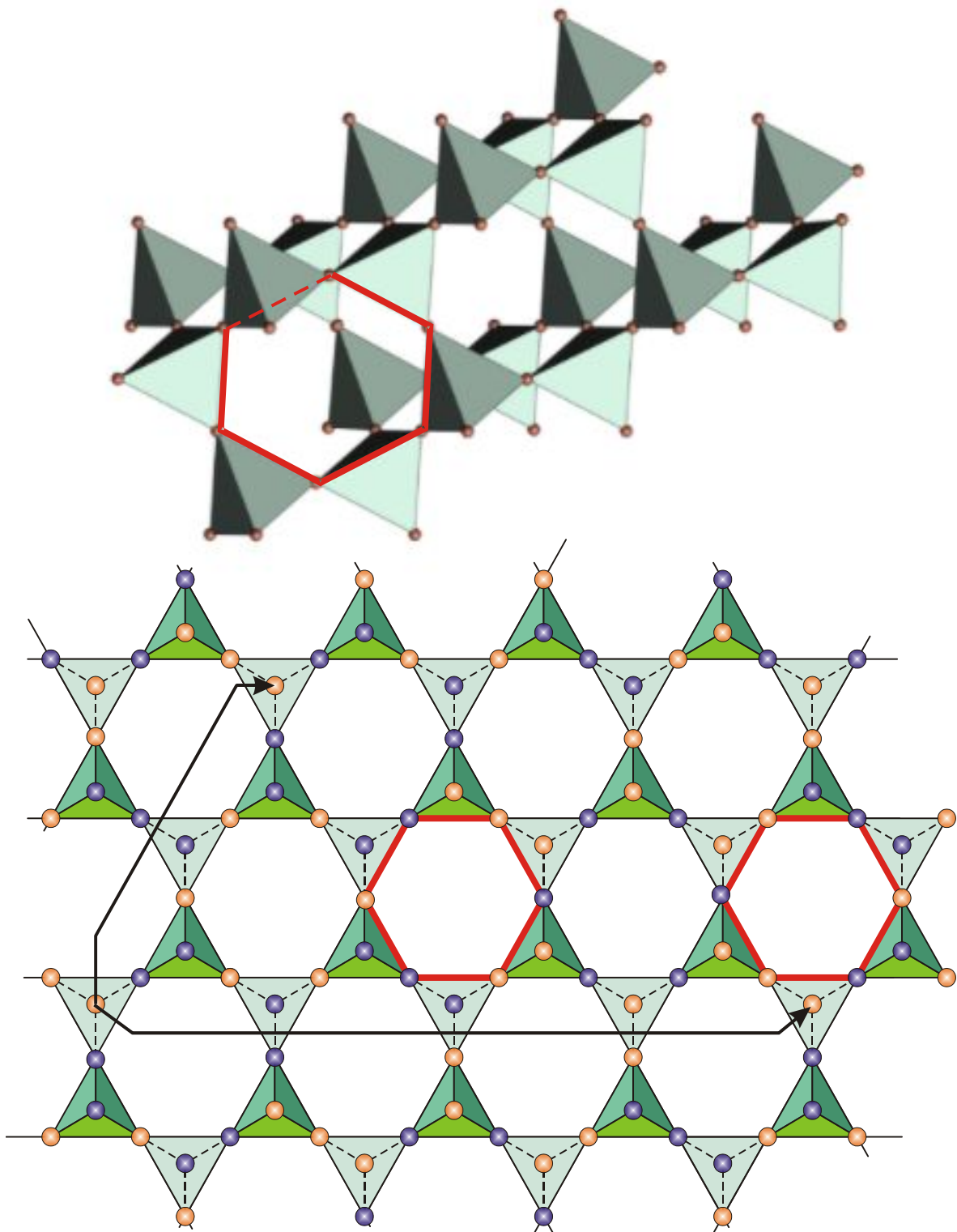


Рисунок 31: Сверху: решётка из тетраэдров с общими вершинами (пирохлорная решётка). Снизу: пример периодического расположения на одном из слоёв пирохлорной решётки коллинеарной магнитной структуры (разные цвета узлов соответствуют двум подрешёткам, ломаные стрелки показывают трансляции в плоскости). Красным на обеих панелях выделены шестиугольные контуры, на нижней панели выделено два изолированных контура с чередующейся закраской вершин.

Классическая энергия такого антиферромагнетика может быть преобразована в сумму по тетраэдрам, составляющим эту структуру:

$$E = \frac{1}{2} J \sum_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j = J \sum_{\substack{k\text{-ый} \\ \text{тетр.}}} (\vec{S}_{k,1} \vec{S}_{k,2} + \vec{S}_{k,1} \vec{S}_{k,3} + \vec{S}_{k,1} \vec{S}_{k,4} + \vec{S}_{k,2} \vec{S}_{k,3} + \vec{S}_{k,2} \vec{S}_{k,4} + \vec{S}_{k,3} \vec{S}_{k,4}) ,$$

здесь цифры 1,2,3,4 нумеруют ионы внутри тетраэдра. Сумма парных произведений может быть выражена через квадрат полного спина k-ого тетраэдра $\vec{S}_{k,\Sigma} = \vec{S}_{k,1} + \vec{S}_{k,2} + \vec{S}_{k,3} + \vec{S}_{k,4}$ и квадраты самих спинов, которые являются константой $\vec{S}_{k,i}^2 = S^2$. Таким образом,

$$E = \frac{J}{2} \sum_{\substack{k\text{-ый} \\ \text{тетр.}}} \vec{S}_{k,\Sigma}^2 - 2S^2 J N_{\text{тетр.}} .$$

Минимум энергии для антиферромагнитного взаимодействия ($J > 0$) достигается в любой структуре, в которой полный спин на каждом тетраэдре равен нулю. Для одного тетраэдра таких состояний можно построить сколь угодно много: можно разбить 4 вершины тетраэдра на две пары, в каждой паре направить спины антипараллельно, а вот направления вдоль которых направлены спины пар оказываются совершенно независимы.

При объединении тетраэдров в трёхмерную решётку часть состояний окажется запрещена требованиями совместимости. Однако оказывается, что сильное вырождение сохраняется. Приведём здесь эти красивые рассуждения. Построим искусственно коллинеарное состояние, отвечающее требованию нулевого спина на каждом тетраэдре и распространим его регулярно по всей решётке (рисунок 30).²⁴

Заметим теперь, что в структуре имеются изолированные контуры в форме правильных шестиугольников, к которым примыкают шесть разных тетраэдров. Вдоль этих контуров (выделены красным на рисунке 30) в построенной нами структуре направления спинов чередуются: к каждому тетраэдру относится пара противоположно ориентированных спинов. Это означает, что оставшаяся вне этого контура пара спинов каждого тетраэдра также противоположно ориентирована. А в этом случае, одновременный произвольный поворот всех 6 спинов на шестиугольнике не изменит полную энергию системы: на каждом тетраэдре

²⁴ Алгоритм построения такого коллинеарного состояния можно, например, устроить следующим образом. Возьмём один из слоёв пироклорной структуры, перпендикулярный оси [111] (рисунок 30, снизу). В плоскости (111) лежат основания тетраэдров, половина из этих тетраэдров смотрит «вверх», половина - «вниз» относительно плоскости рисунка. Сами основания при этом формируют сеть треугольников с общими вершинами, называемую кагоме-структурой (в честь традиционного японского плетения из соломки), содержащую шестиугольные ячейки. Вместо расстановки спиновых векторов для построения коллинеарной структуры будем расставлять раскрашенные шары в узлы решётки: один цвет соответствует одной подрешётке, другой — противоположно ориентированной подрешётке. Начнём заполнение с одного из горизонтальных направлений в кагоме-плоскости (средний слой шестиугольников на рисунке 30) и заполним вершины шестиугольников в следующем порядке: шестиугольник со всеми красными вершинами, шестиугольник с вершинами чередующихся цветов, шестиугольник со всеми синими вершинами, шестиугольник с вершинами чередующихся цветов итд. Далее выберем одно из направлений под 60° к горизонтали (на рисунке — направление вправо-вверх) и для каждого из шестиугольников с чередующимися цветами вершин в исходной горизонтали продолжим заполнение вершин следующих в выбранном «наклонном» направлении шестиугольников чередующимися цветами. Это позволит заполнить все позиции в плоскости, соседями «одноцветных» шестиугольников в наклонном направлении оказываются шестиугольники, у которых 4 вершины одного цвета, а две — другого. После этого вершины тетраэдров, лежащие вне плоскости заполняются однозначно по условию нулевого полного спина: в каждом тетраэдре две вершины должны быть одного цвета, а две — другого. Этим заканчивается заполнение одного слоя. Следующие слои вдоль направления [111] могут быть получены, например, просто отражением относительно плоскости, проходящей через вершины тетраэдров, выступающих из плоскости рисунка. Полученная структура удовлетворяет требованию нулевого спина на каждом тетраэдре и является, следовательно, одной из структур с минимальной энергией для классического гейзенберговского антиферромагнетика на пироклорной решётке.

по-прежнему остаётся две пары противоположно ориентированных спинов. Так как такие контуры оказываются изолированы друг от друга, то такие произвольные повороты на разных контурах можно делать независимо, а так как число таких шестиугольников макроскопически велико, то мы можем построить макроскопически большое число состояний с минимально возможной энергией. Такое вырождение приводит к тому, что такая модельная система должна оставаться в неупорядоченном макроскопически вырожденном состоянии вплоть до $T=0$ несмотря на наличие сильного взаимодействия между спинами.

Такое состояние неупорядоченного магнетика при температурах ниже характерного масштаба межспиновых взаимодействий называют спиновой жидкостью (по аналогии с тем, что магнитно упорядоченное состояние является магнитным (спиновым) кристаллом). Формально такое состояние является парамагнитным.

Макроскопическое вырождение при $T=0$ противоречило бы третьему началу термодинамики. В реальных системах оно снимается за счёт более слабых взаимодействий (взаимодействия с более далёкими соседями, с решёткой и так далее), однако температура упорядочения за счёт этих эффектов оказывается много меньше температуры Кюри-Вейса (например, в соединении со структурой шпинели $ZnCr_2O_4$ при температуре Кюри-Вейса 380K упорядочение наступает только при 12.5K [36]). В то же время, тот факт, что магнитный порядок устанавливается не за счёт основного (самого сильного) обменного взаимодействия ближних соседей, а за счёт тонкого баланса различных более слабых взаимодействий приводит к возможности реализации экзотических магнитных структур и к богатым фазовым диаграммам таких систем.

Двумерная модель Изинга

Существует упрощенная модель взаимодействия спинов, называемая моделью Изинга. В рамках этой модели в парном взаимодействии участвуют только z-компоненты спина $\hat{H} = \tilde{J} \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z = J \sigma_1 \sigma_2$, где изинговская переменная $\sigma_i = \pm 1$. Такой вид взаимодействия можно записать если имеется какое-то сильное анизотропное взаимодействие, из-за которого спин иона направлен в основном вдоль некоторого направления. Кроме того, многие задачи из других областей физики могут быть переформулированы на язык изинговской модели (например задача о поведении сорбированных на поверхность кристалла атомов сводится к двумерной модели Изинга).

Интересным свойством модели Изинга является то, что на квадратной двумерной решётке она полностью разрешима — то есть может быть абсолютно строго записана свободная энергия такой системы при произвольной температуре [21][37]:

$$F = -T \ln(2 \operatorname{ch}^2(J/T)) - \\ - \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} T \iint_0^{2\pi} \ln \left[(1 + th^2(J/T))^2 + 2 th(J/T) (1 - th^2(J/T)) (\cos \xi_1 + \cos \xi_2) \right] d\xi_1 d\xi_2 = \\ = -T \ln 2 - \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} T \iint_0^{2\pi} \ln \left[ch^2\left(\frac{2J}{T}\right) + sh\left(\frac{2J}{T}\right) (\cos \xi_1 + \cos \xi_2) \right] d\xi_1 d\xi_2$$

Особой точкой подынтегрального выражения является обращение в ноль выражения под логарифмом. В зависимости от знака параметра взаимодействия минимум этого выражения достигается при $\cos \xi_1 = \cos \xi_2 = 1$ ($J < 0$) или $\cos \xi_1 = \cos \xi_2 = -1$ ($J > 0$). В любом случае выражение может обратиться в ноль если:

$$\begin{aligned}
& ch^2\left(\frac{2J}{T}\right) - 2 sh\left(\frac{2|J|}{T}\right) = 0 \\
& \left(ch^2\left(\frac{J}{T}\right) + sh^2\left(\frac{|J|}{T}\right) \right)^2 - 4 ch\left(\frac{J}{T}\right) sh\left(\frac{|J|}{T}\right) = 0 \\
& (1 + th^2(J/T))^2 - 4 th(|J|/T)(1 - th^2(J/T)) = 0 \\
& (th^2(|J|/T) + 2 th(|J|/T) - 1)^2 = 0 \\
& th(|J|/T) = \sqrt{2} - 1
\end{aligned}$$

Видно, что выражение под логарифмом имеет вид полного квадрата, поэтому ноль этого выражения является единственной особой точкой. Эта особая точка соответствует фазовому переходу. Критическая температура этого перехода равна $\frac{T_c}{|J|} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269$.

Параметром порядка в двумерной модели Изинга является средняя намагниченность на узле решётки, установление порядка сопровождается появлением незатухающей парной корреляционной функции. Ниже критической температуры спонтанная намагниченность ферромагнитной модели Изинга [37]:

$$M = \left[1 - \frac{1}{sh^4\left(\frac{2J}{T}\right)} \right]^{1/8}.$$

Параметр порядка обращается в ноль в точке перехода — то есть происходит переход второго рода. Вблизи перехода $M \propto (T_c - T)^{1/8}$, критическая экспонента параметра порядка отличается от значения 1/2 в теории Ландау.

Параметр порядка и соответствующие критические индексы в изинговских магнетиках также изучались различными способами, например при помощи рассеяния нейтронов или мессбауэровской спектроскопии [38] (рисунок 29).

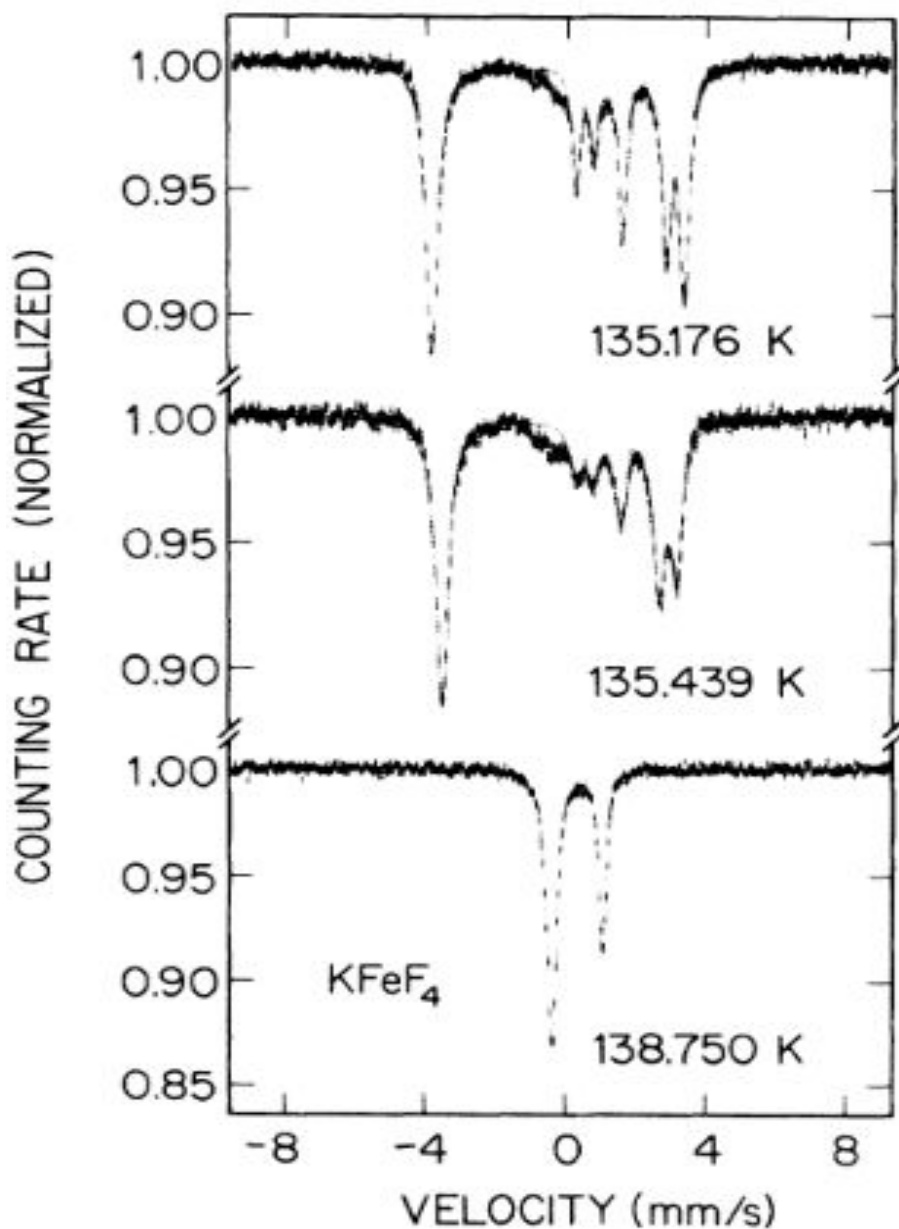


Рисунок 32: Мессбауэровские спектры квазидвумерного изинговского антиферромагнетика $KFeF_4$ вблизи температуры перехода (135.79K). Изменение формы спектра и сдвиги линий связаны с возникновением и величиной параметра порядка. Из работы [38].

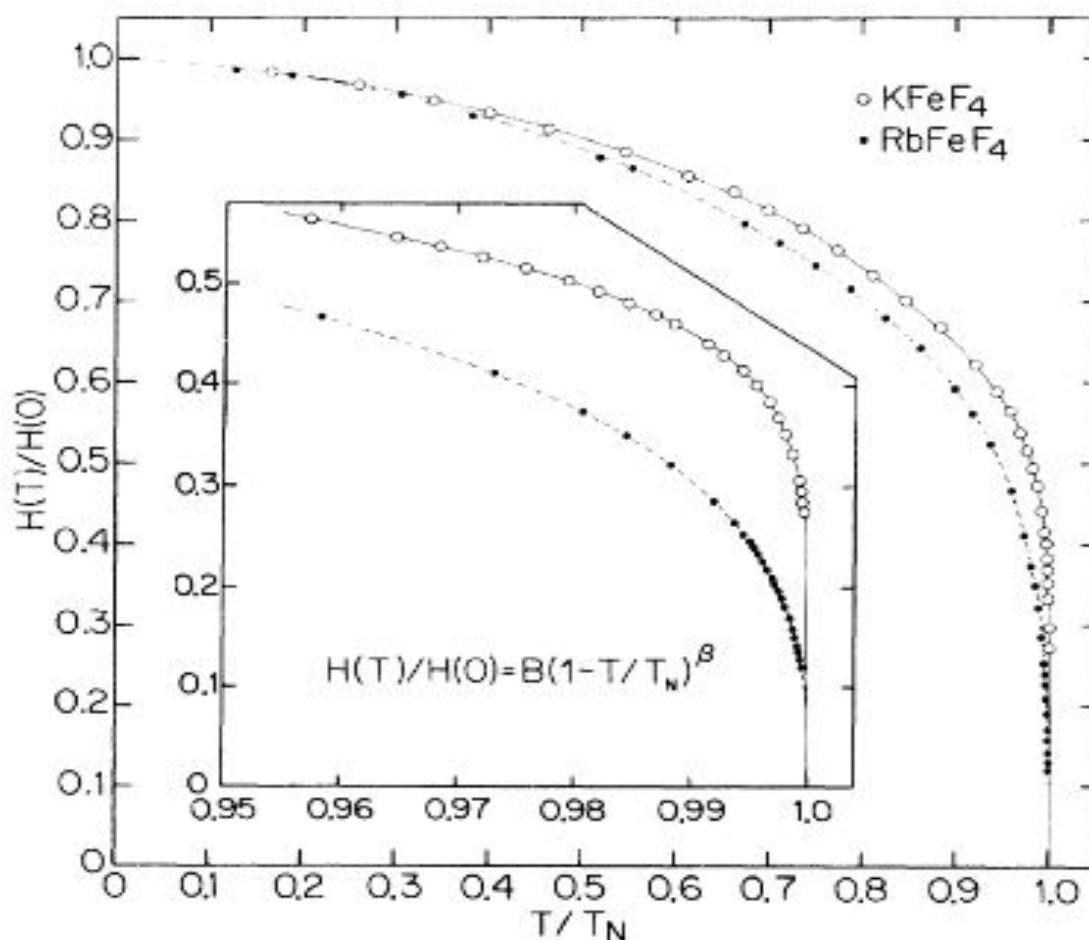


Рисунок 33: Зависимость от температуры сверхтонкого поля на ядре железа, измеренного методом мессбауэровской спектроскопии, от температуры для изинговских антиферромагнетиков $KFeF_4$ и $RbFeF_4$. Из работы [38].

Например, представленные выше данные мессбауэровской спектроскопии [38] показывают, что пропорциональное параметру порядка сверхтонкое поле на ядре железа действительно следует степенному закону с показателем степени, равным 0.316 для $RbFeF_4$ и 0.151 для $KFeF_4$. Эти значения близки к теоретическим предсказаниям 0.325 для трёхмерного изинговского магнетика и $0.125 = 1/8$ для двумерного.

«Спиновый лёд»

Модель Изинга может быть сформулирована и в трёхмерном случае, хотя точно она при этом не решается. При этом известно из различных расчётов, что на кубической решётке критическая экспонента для параметра порядка вблизи температуры перехода равна примерно $1/3$ — то есть и в трёхмерном случае переход в изинговском магнетике отличается от теории Ландау (оставаясь при этом непрерывным фазовым переходом второго рода).

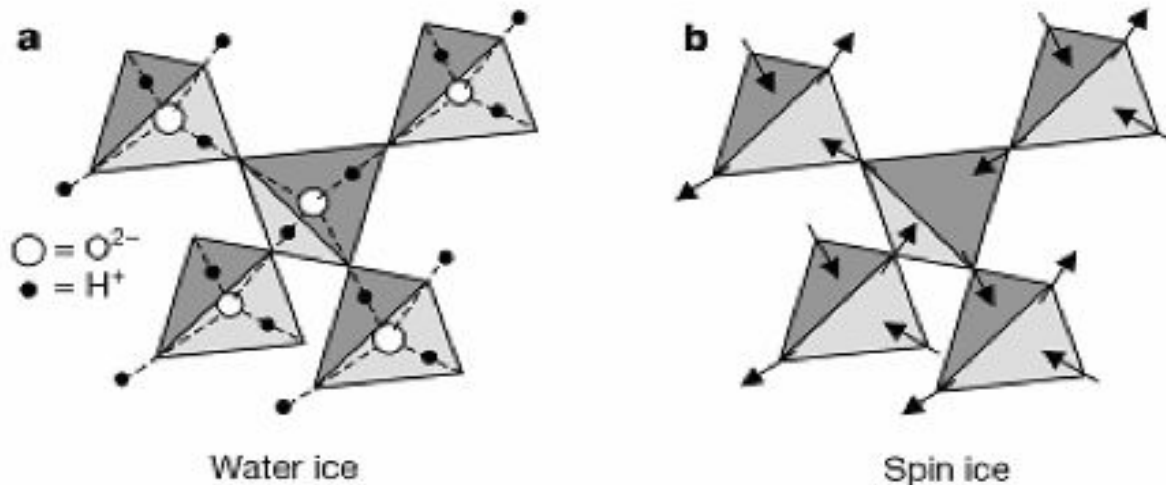


Рисунок 34: Аналогия между обычным льдом (слева) и изинговским ферромагнетиком на пирохлорной решётке (справа). Из статьи [39].

Рассмотрим здесь один интересный специальный случай изинговского магнетика: ферромагнетик на пирохлорной решётке, называемый иногда «спиновым льдом». Пирохлорная решётка представляет собой сеть тетраэдров с общими вершинами и относится к классу сильно фрустрированных решёток.

Если взаимодействие между классическими спинами на такой решётке подчиняется гейзенберговской модели (считаем, что взаимодействуют только ближайшие соседи), то, как мы это уже делали ранее, можно записать для энергии

$$E = J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j = J \sum_{\text{tetr}} \sum_{\langle i, j \rangle \in \text{tetr}} \vec{S}_i \vec{S}_j = \frac{J}{2} \sum_{\text{tetr}} \left(S_{\Sigma}^2 - \sum_{i \in \text{tetr}} S_i^2 \right) = \frac{J}{2} \sum_{\text{tetr}} S_{\Sigma}^2 + \text{const} .$$

Мы перешли от суммирования по всем парам к суммированию по тетраэдрам и суммированию внутри каждого тетраэдра, S_{Σ} - это полный спин на тетраэдре. Таким образом, все конфигурации с одинаковым по модулю полным спином на каждом тетраэдре имеют одну энергию.

Изинговская модель на такой решётке оказывается устроена немного экзотично — локальные оси анизотропии для спинов в вершинах тетраэдра не совпадают и направлены вдоль прямых, проведённых из центра тетраэдра через соответствующую вершину. В этом случае оказывается, что и для ферромагнитного взаимодействия спинов невозможно выбрать единственное состояние с наименьшей энергией. Подчеркнём специфику этой ситуации — хотя каждый спин описывается переменной изинговского типа, оси, вдоль которых направлены изинговские спины, смотрят в различных направлениях для всех вершин выбранного тетраэдра. Максимальному выигрышу в энергии межспинового взаимодействия (максимальному спину на тетраэдре) соответствует ориентация спинов в которой два спина смотрят внутрь тетраэдра, а два — наружу. В такой конфигурации на тетраэдре возникает полный спиновый момент направленный вдоль прямой соединяющей противоположные рёбра тетраэдра. При этом при переходе в соседний тетраэдр информация о преимущественном направлении спинов в предыдущем тетраэдре теряется — её невозможно восстановить по их единственному общему спину. Поэтому на больших расстояниях корреляция теряется и система не упорядочивается: все структуры, удовлетворяющие «правилу льда» (два спина направлены внутрь тетраэдра, два — наружу) имеют одинаковую энергию.

Возникающий беспорядок полностью аналогичен обычному льду, в котором на один атом

кислорода в кубической решётке приходится два атома водорода. Атомы кислорода занимают позиции в центрах тетраэдров, а атомы водорода обеспечивают связь между атомами кислорода. При этом между каждой парой атомов кислорода может быть всего один атом водорода, что приводит к формированию «правила льда», эквивалентного сформулированному выше правилу «два внутрь, два наружу» для изинговского магнетика. В рамках одной молекулы воды (внутри одного тетраэдра) возможно $C_4^2=6$ расположений атомов водорода. Вероятность того, что данная ориентация «разрешена» «правилом льда» можно оценить из тех соображений, что в соседней молекуле (соседнем тетраэдре) это направление свободно с вероятностью $2/4=1/2$ и, следовательно, вероятность допустимости данной ориентации примерно $(1/2)^2=1/4$. Тогда полное число конфигураций для N молекул $(6 \times 1/4)^N$, что приводит к энтропии $R \ln(3/2)$ на молекулу или $\frac{R}{2} \ln(3/2)$ на атом водорода, остающейся и при нулевой температуре. Такая избыточная энтропия водяного льда экспериментально измерялась [40].

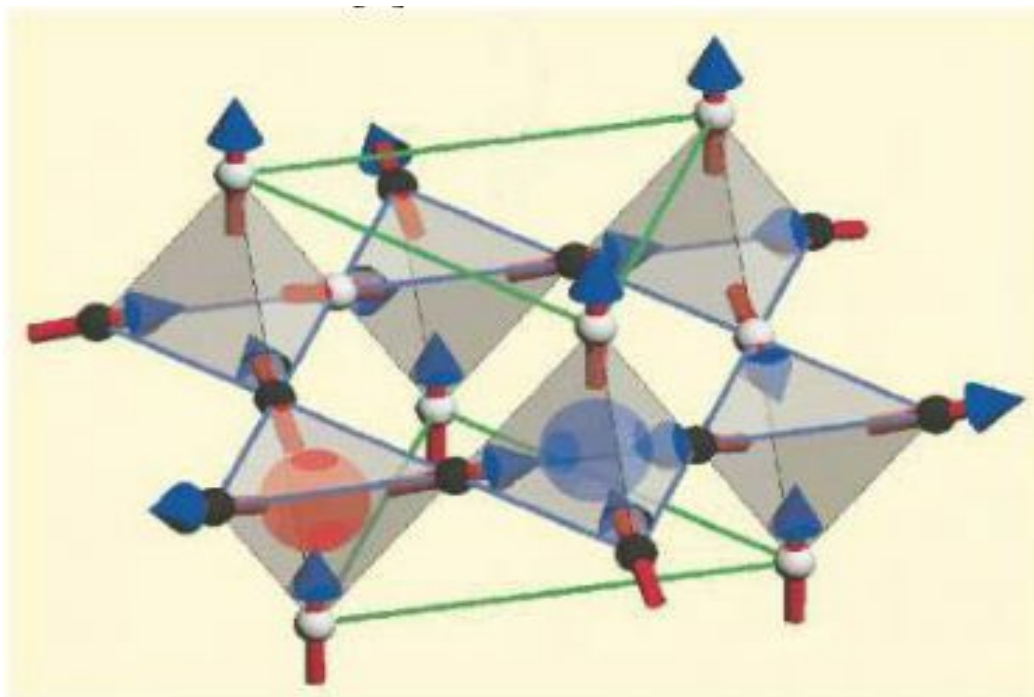


Рисунок 35: Образование "монополя" при перевороте спина в "спиновом льде". Из статьи [39].

Со «спиновым льдом» связана интересная возможность создать возбуждение, формально эквивалентное магнитному монополю [41]. При перевороте одного из спинов, нарушающем «правило льда», в один из соседних тетраэдров «входит» три спиновых вектора, а «выходит» один, в другом, наоборот, «входит» один, а «выходит» три. Если представить себе магнитный диполь (магнитный момент в узле решётки) как пару магнитных зарядов, то в основном состоянии суммарный магнитный заряд каждого тетраэдра нулевой (по правилу «два внутрь — два наружу» в каждом тетраэдре присутствует по паре зарядов каждого знака), а при перевороте спина в соседних тетраэдрах возникнут суммарные ненулевые магнитные заряды разных знаков. Благодаря фрустрации решётки (обеспечивающей потерю корреляций и отсутствие порядка) эти «заряды» получают возможность передвигаться по кристаллу: перевернув спин в одном из узлов тетраэдра, содержащего «магнитный заряд», мы можем восстановить «правило льда» на этом тетраэдре, но (конечно же) нарушить его на следующем. Полученное состояние будет иметь ту же энергию, что и исходное. Поэтому

Димерные магнетики: отсутствие упорядочения из-за квантовых эффектов.

Рассмотрим магнетик, построенный из антиферромагнитных димеров. В реальных системах встречаются как одномерные, так и двух- и трёхмерные структуры такого типа. Для простоты рассмотрим случай спина $S=1/2$.

Свойства изолированного димера: двух спинов $1/2$ с гейзенберговским гамильтонианом взаимодействия $\hat{H}=J\hat{S}_1\hat{S}_2$ ($J>0$), достаточно просты. Основным состоянием (для антиферромагнитного знака обменного взаимодействия) является спиновый синглет с полным спином $S=0$ и спиновой волновой функцией $\psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$, а возбуждёнными состояниями являются три компоненты триплетного состояния с полным спином $S=1$ и проекциями спина $S_z=1,0,-1$ (их волновые функции $\psi_{1,1}=|\uparrow\uparrow\rangle$, $\psi_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$ и $\psi_{1,-1}=|\downarrow\downarrow\rangle$). Энергии этих состояний отличаются на величину обменного интеграла.

Синглетное состояние является немагнитным, его энергия не меняется в магнитном поле так как $\langle\psi_0|g\mu_B B(\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z})|\psi_0\rangle=0$. Все магнитные свойства димера связаны с триплетным возбуждённым уровнем. Поэтому при низких температурах магнитная восприимчивость такого димера экспоненциально обращается в ноль.

Подчеркнём, что немагнитное синглетное состояние димера не является антиферромагнитным: отсутствует среднее значение проекции спина на каждом из ионов. Это именно синглетное состояние, с нулевым полным спином.

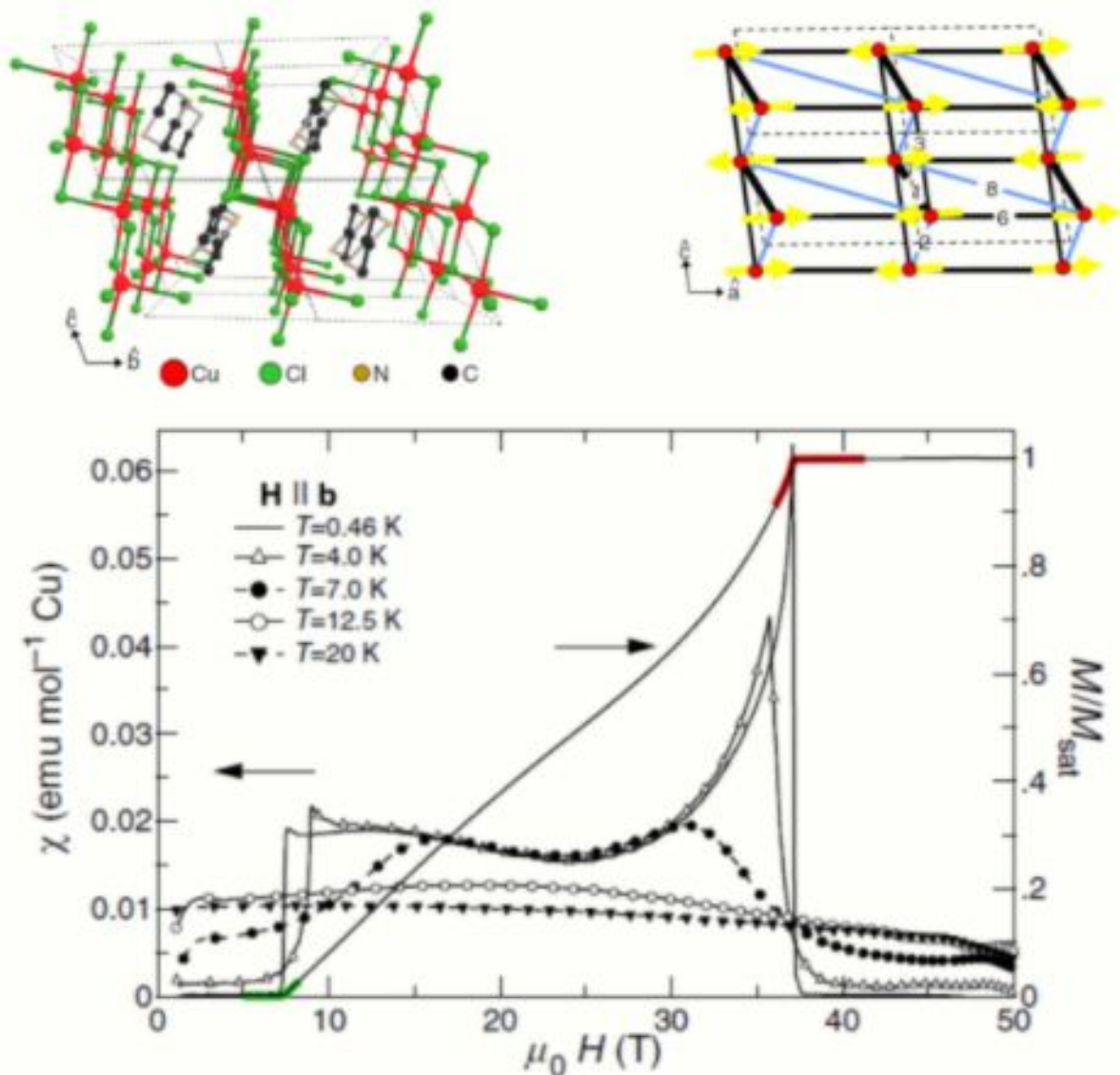


Рисунок 36: Структура и кривая намагничивания квазидвумерного спин-щелевого магнетика $(C_4H_{12}N_2)(Cu_2Cl_6)$ (по работе [42]). Верхний ряд слева: кристаллическая структура (триклинная симметрия, элементарная ячейка выделена пунктиром). Верхний ряд справа: обменные связи между ионами меди в плоскости (ac), установленные по результатам измерения дисперсионных кривых методом неупругого рассеяния нейтронов, толщина линии пропорциональна величине обменного интеграла, стрелки показывают направление упорядоченной компоненты локальной намагниченности выше критического поля. Внизу: измеренные в импульсных полях до 50 Тл кривые дифференциальной восприимчивости (символы) и проинтегрированная по этим данным зависимость намагниченности от поля при 0.46К (кривая).

При «включении» слабого обменного взаимодействия между димерами общие свойства системы не изменяются (это может быть продемонстрировано в рамках теории возмущений). Основное состояние остаётся по-прежнему немагнитным синглетом, возбуждённые состояния приобретают способность «перепрыгивать» с димера на димер и приобретают некоторый закон дисперсии, а конечная щель Δ между энергией основного состояния и энергией возбуждений сохраняется (конкретное значение волнового вектора при котором энергия возбуждений минимальна зависит от устройства междимерных обменных связей).

Единственное основное состояние не противоречит третьему началу термодинамики и

система остаётся в таком квантово-разупорядоченном состоянии вплоть до самых низких температур. Такого типа магнетики относят также к классу спиновой жидкости.

Необычным является процесс намагничивания такой системы при $T \approx 0$. В малых полях намагниченность равна нулю, так как основное состояние немагнитно. Однако в магнитном поле происходит зеемановское расщепление триплетного уровня и с ростом поля энергия одного из подуровней понижается и в некотором критическом поле $B_c = \frac{\Delta}{g\mu_B}$ щель в спектре исчезнет. Оказывается, что в этом критическом поле в системе связанных димеров происходит переход в антиферромагнитно упорядоченную фазу. При дальнейшем росте поля возникает конечная намагниченность, которая растёт вплоть до поля насыщения. Сам же фазовый переход из немагнитного в антиферромагнитное состояние может быть формально описан как бозе-конденсация некоторых квазичастиц [43][44].

Хорошо изученным примером такой системы является квазидвумерный магнетик с химической формулой $(C_4H_{12}N_2)(Cu_2Cl_6)$ [42]. Структурным блоком, ответственным за магнитные свойства этой системы является димер $(Cu_2Cl_6)^{2-}$, плоскости из этих димеров оказываются разделёнными большими молекулами молекулярных ионов пиперазина $(C_4H_{12}N_2)^{2+}$, что обеспечивает двумерность магнитной подсистемы (рисунок 36). В плоскости димеры оказываются связаны между собой многочисленными обменными взаимодействиями (рисунок 36). Обменные интегралы имеют масштаб 10-15К, щель в спектре равна примерно 10К, никакого магнитного порядка не наступает в нулевом поле до самых низких доступных в эксперименте температур 50 мК [42]. Низкотемпературная намагниченность следует описанной выше схеме с двумя критическими полями (рисунок 36).

Переход Березинского-Костерлица-Таулеса

Рассмотрим модельную двумерную систему, которая демонстрирует фазовый переход другого типа: двумерный XY-магнетик. XY-магнетиком называют модельную систему, в которой во взаимодействиях участвуют только X и Y компоненты спинового вектора:

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y),$$

здесь угловые скобки в индексах суммы обозначают, что каждая пара индексов учитывается лишь однажды.

В реальных кристаллах XY-модель может приближённо реализовываться если есть сильная анизотропия, привязывающая спины к какой-то плоскости.

Мы будем рассматривать, следуя [22], классический XY-ферромагнетик ($J < 0$) на квадратной решётке с взаимодействием только ближайших соседей. Если выбрать в плоскости XY произвольное направление, то энергию спиновой системы можно выразить через углы (фазы) ϕ_i отклонения спиновых векторов от этого направления. Причём, в выражение для энергии войдут только разности углов для соседних спинов (считаем для простоты длины спиновых векторов единичными):

$$E = J \sum_{\langle j,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j).$$

Если фаза ϕ_i медленно меняется (что является довольно естественным предположением, так как локально соседние спины стремятся быть сонаправленными), то можно разложить энергию по малому изменению фазы

$$E = E_0 - \frac{J}{2} \sum_{\langle j,j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2.$$

Мы уже сталкивались при обсуждении низкоразмерных систем с тем, что в двухмерной системе длинноволновые флуктуации делают термодинамически неустойчивым кристаллическое состояние. Аналогичное утверждение можно сделать и для двумерного XY-ферромагнетика, мы не будем его здесь строго обосновывать: оно соответствует тому, что при

конечной температуре фаза ϕ_i медленно меняется так, что на больших расстояниях ферромагнитные корреляции спинов теряются. Однако при этом оказывается, что в такой системе может возникать очень необычный фазовый переход.

Рассмотрим специальную принудительно созданную конфигурацию «вихря» в ориентации спинов, показанную ниже на рисунке 37. В этой конфигурации при обходе по часовой стрелке вокруг центра вихря на большом расстоянии от центра при переходе к соседнему узлу происходит небольшой поворот спинового вектора также по часовой стрелке. При завершении обхода по замкнутому контуру (отмеченному розовой заливкой на рисунке) полный поворот спинового вектора равен 2π . Отметим, что так как все спиновые вектора могут быть одновременно повернуты на один угол, эта конфигурация может быть преобразована и в вихрь, в котором стрелки смотрят в противоположную сторону (вдоль направления обхода по часовой стрелке), и в «ежа» в котором все стрелки смотрят на центр вихря или из центра вихря (рисунок 37). Эти состояния, естественно, эквивалентны по энергии и, так как их можно преобразовать одно в другое плавными изменениями (без «разрывов»), их называют топологически эквивалентными.

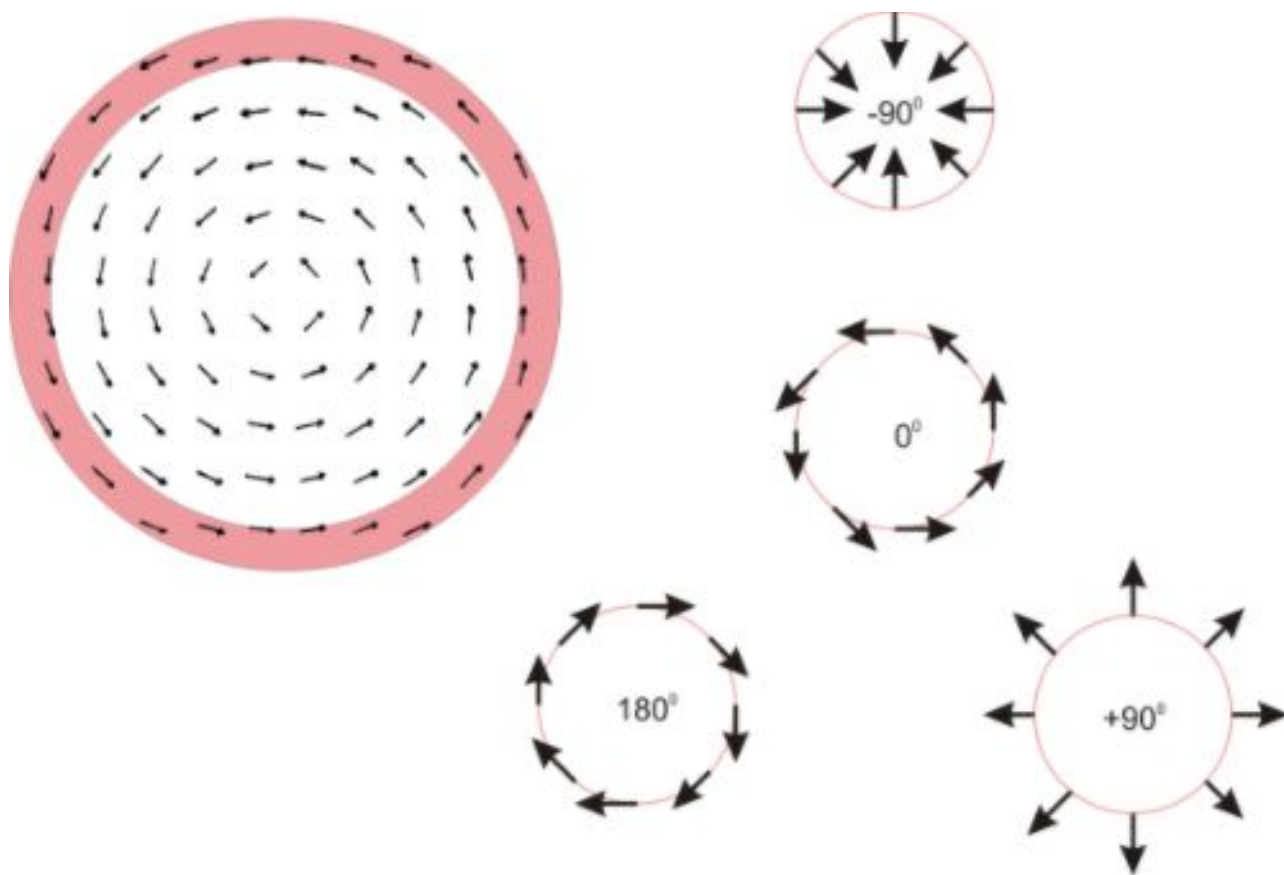


Рисунок 37: Вихрь в XY-магнетике (на основе рисунка из статьи [22]). Слева: распределение ориентаций спинов на решётке. Справа: иллюстрация получения эквивалентных по энергии ориентаций спинов при одновременном повороте всех спинов на один угол. В центре круга указан угол поворота.

Парой к такой вихревой конфигурации будет конфигурация антивихря, в которой при обходе по аналогичному контуру спиновые вектора будут поворачиваться против часовой стрелки. При этом набег угла поворота при обходе по замкнутому контуру составит -2π . Построение такой конфигурации показано на рисунке 38. Для антивихря огибающие поля спиновых векторов имеют форму семейства гипербол, поворот спиновых векторов эквивалентен повороту осей этих гипербол. Никакой поворот спиновых векторов не может превратить вихрь в антивихрь, хотя энергии этих конфигураций одинаковы. Конфигурации

типа вихря и антивихря оказываются топологически не эквивалентными, их взаимному превращению мешает «закон сохранения топологического заряда».

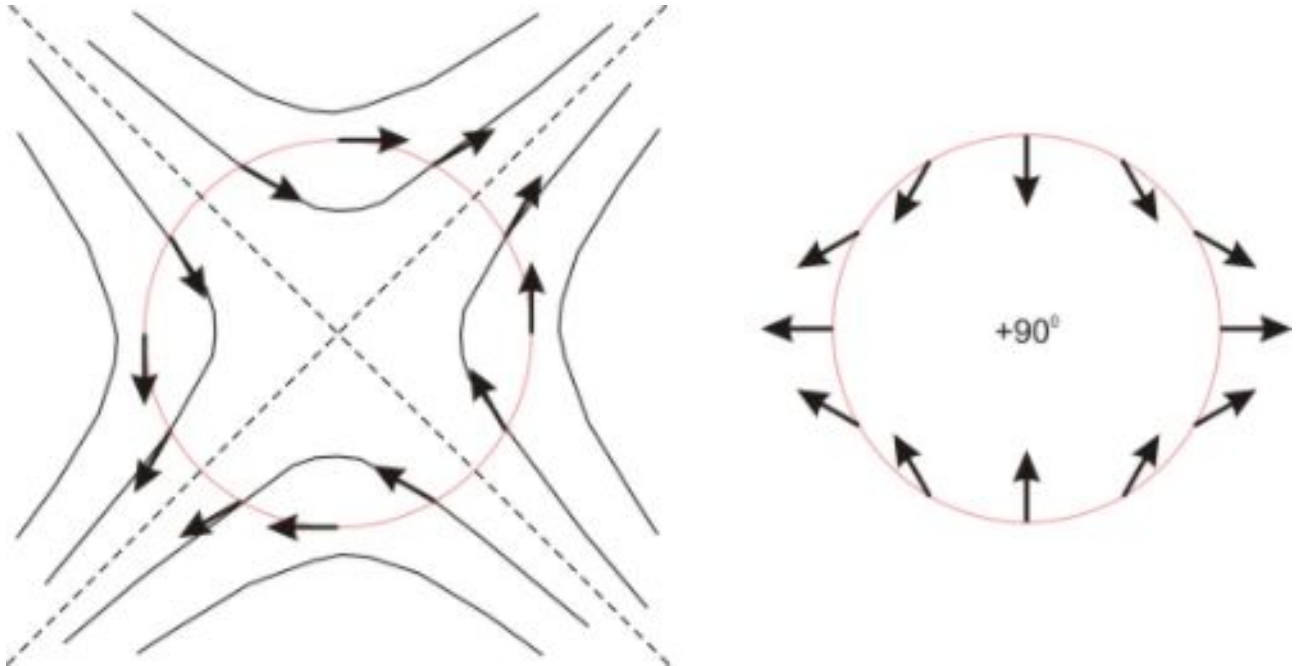


Рисунок 38 Построение конфигурации типа антивихря для XY-ферромагнетика. Слева: один из вариантов конфигурации и схема семейства огибающих. Справа: изменение конфигурации при одновременном повороте спиновых векторов.

Конфигурация вихря или антивихря является топологическим дефектом XY-модели: от нее невозможно избавиться путём малых деформаций структуры. Отметим, что это свойство существенно связано с двумерностью *спинового* пространства, так как для гейзенберговского магнетика (когда у спинового вектора есть все три компоненты) можно непрерывно перейти в коллинеарное ферромагнитное состояние, поворачивая все спины в направлении, перпендикулярном плоскости рисунка.

Для определённости будем рассматривать конфигурацию типа вихря. При обходе вокруг центра этого вихря фаза ϕ_i меняется на 2π . Если выбрать траекторию обхода на большом расстоянии r от центра, то в полосе шириной в межатомное расстояние a будет $2\pi r a / a^2 = 2\pi r / a$ спинов. Соответственно, разница фазы между соседними в этом «кольце» спинами a/r . Вдоль радиусов фаза не меняется, поэтому для энергии такого состояния получаем:

$$E \approx E_0 - \frac{J}{2} \sum_i \left(\frac{a}{r_i}\right)^2 N_{r_i} \approx E_0 - \frac{J}{2} \int \left(\frac{a}{r}\right)^2 \frac{d^2 r}{a^2} = E_0 - \pi J \int \frac{dr}{r} = E_0 - \pi J \ln\left(\frac{R}{r_0}\right),$$

здесь суммирование идёт по всем радиусам r_i таких колец шириной a , $N_{r_i} = \frac{2\pi r}{a}$ – число узлов в кольце шириной a , R – размер системы и r_0 – некоторый радиус обрезания (порядка межатомного), введение которого необходимо из-за неприменимости интегрального подхода при малых расстояниях от центра вихря. Существование такого вихря невыгодно энергетически (напомним, что $J < 0$).

С точностью до краевых эффектов, центр вихря может находиться в любом узле решётки. Соответственно, связанная с появлением одиночного вихря энтропия

$$S = \ln N = \ln \left(\frac{R}{r_0'} \right)^2 = 2 \ln \left(\frac{R}{r_0'} \right), \text{ здесь } r_0' \text{ также расстояние порядка межатомного.}$$

Вихрь может возникнуть при заданной температуре, если его появление приведёт к понижению свободной энергии:

$$F = E - TS = F_0 - \pi J \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) - 2T \ln \left(\frac{R}{r_0'} \right).$$

Пренебрегая для оценки разницей между r_0 и r_0' получаем, что при $T > -\frac{\pi J}{2}$ рождение свободных вихрей выгодно, в то время как при $T < -\frac{\pi J}{2}$ рождение свободных вихрей не выгодно.

Этот необычный фазовый переход между состоянием со свободными вихрями выше T_c , и состоянием, в котором (с точностью до тепловых флуктуаций) свободных вихрей нет ниже T_c называют переходом Березинского-Костерлица-Таулеса.²⁵ Поправки к этому решению, учитывающие взаимодействие вихрей [22], приводят к небольшому изменению критической температуры: $\frac{\pi|J|}{2T_c} \approx 1.12$.

²⁵ Костерлиц (J. Michael Kosterlitz) и Таулес (David J. Thouless) — лауреаты Нобелевской премии по физике 2016 года (совместно с Д.Халдейном) «за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз вещества».