

Московский физико-технический институт
Кафедра общей физики

Лекция 14

МАГНЕТИЗМ 2. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В МАГНЕТИКАХ.
МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

заметки к лекции по общей физике

В.Н.Глазков

2017

Основные сведения могут быть также найдены в книге Ч.Киттеля [1] (главы 15-17).
Заключительный раздел написан на основе современной научной литературы. Разделы,
являющиеся дополнительными к лекционному курсу отмечены символом (†).

Оглавление

Магнитноупорядоченные структуры (напоминание).....	5
Поведение магнетиков в магнитном поле.....	6
Восприимчивость ферромагнетика ниже температуры упорядочения.	6
Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.	8
Молекулярные магнетики†.....	10
Спиновые волны в ферро- и антиферромагнетиках.....	13
Элементарные возбуждения ферромагнетика.....	14
Элементарное возбуждение одномерного ферромагнетика в модели Изинга.†.....	16
Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.....	17
Спиновые волны в антиферромагнетике. Классическое рассмотрение.†.....	18
Примеры спектров спиновых волн в реальных средах.....	19
Экспериментальные методы изучения спиновых волн.....	19
Спиновые волны в ферро- и ферримагнетиках.....	20
Спиновые волны в антиферромагнетике MnF ₂ .†.....	21
Квантовое рассмотрение спиновых волн в ферромагнетике. †.....	23
Квантование спиновых волн. Вклад спиновых волн в теплоёмкость и намагниченность ферромагнетика.....	25
Необычные виды магнитного порядка и разупорядоченные магнитные состояния.†.....	28
Димерные магнетики: отсутствие упорядочения из-за квантовых эффектов.....	28
Переход Березинского-Костерлица-Таулеса.....	30

Список литературы

- 1: Ч.Киттель, Введение в физику твёрдого тела, 1978
- 2: Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Том VIII. Электродинамика сплошных сред, 1992
- 3: M Hagiwara, K Katsumatay, I Yamada and H Suzuki, "Antiferromagnetic resonance in MnF₂ over wide ranges of frequency and magnetic field", Journal of Physics: Condensed Matter 8, 7349 (1996)
- 4: 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 {Ni₄Mo₁₂}", Physical Review 73, 094401 (2006)
- 5: Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика том IX. Статистическая физика часть 2, 2002
- 6: Ч.Киттель, Квантовая теория твёрдых тел., 1967
- 7: В.Н.Глазков, Методы изучения структуры и колебаний кристаллов, 2016
- 8: B.N.Brockhouse, "Slow Neutron Spectroscopy and the Grand Atlas of the Physical World", Nobel lecture (1994)
- 9: R.N.Sinclair and B.N.Brockhouse, "Dispersion Relation for Spin Waves in a fcc Cobalt Alloy", Physical Review 120, 1638 (1960)
- 10: Z. Yamani, Z. Tun, and D.H. Ryan, "Neutron scattering study of the classical antiferromagnet MnF₂: a perfect hands-on neutron scattering teaching course.", Canadian Journal of Physics 88, 771 (2010)
- 11: D. J. Lockwood and M. G. Cottam, "Light scattering from magnons in MnF₂", Physical Review B 35, 1973 (1987)
- 12: Samuel S. Shinozaki, "Specific Heat of Yttrium Iron Garnet from 1.5° to 4.2°K", Physical Review 122, 388 (1961)
- 13: Freeman J. Dyson, "Thermodynamic Behavior of an Ideal Ferromagnet", Physical Review 102, 1230 (1956)
- 14: A.C.Gossard, V.Jaccarino, J.P.Remeika, "Experimental test of the spin-wave theory of a ferromagnet", Physical Review Letters 7, 122 (1961)
- 15: 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", New Journal of Physics 9, 31 (2007)
- 16: Thierry Giamarchi, Christan Rugg and Oleg Tchernyshyov, "Bose–Einstein condensation in magnetic insulators", Nature Physics 4, 198 (2008)
- 17: Vivien Zapf, Marcelo Jaime, and C. D. Batista, "Bose-Einstein condensation in quantum magnets", Review of Modern Physics 86, 563 (2014)
- 18: J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless, "Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems", J.Phys.C: Solid State Phys. 6, 1181 (1973)

Магнитноупорядоченные структуры (напоминание).

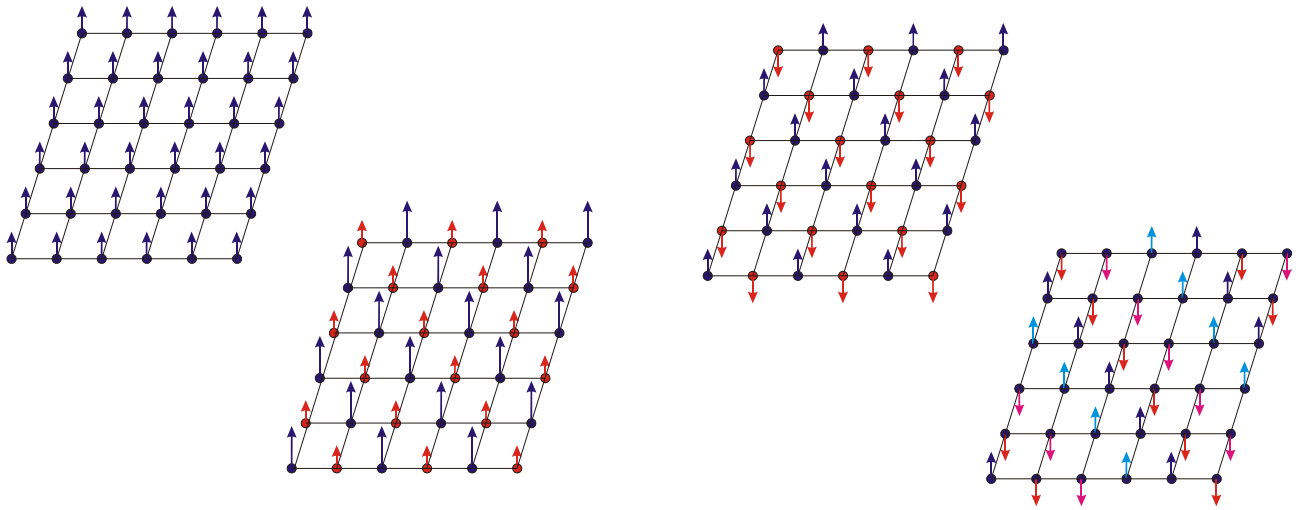


Рисунок 1: Схематическое изображение различных типов упорядочения на двумерной решётке. Цветом выделены элементы одной подрешётки. Слева направо: ферромагнетик, коллинеарный ферримагнетик, коллинеарная антиферромагнитная структура неелевского типа с двумя подрешётками, коллинеарная антиферромагнитная структура типа "два вверх-два вниз" с четырьмя подрешётками.

На прошлой лекции обсуждалось, что во многих кристаллах реализуются различные формы магнитного порядка, простейшими из которых являются ферромагнетизм и антиферромагнетизм (рисунок 1). Такой магнитный порядок наступает под действием *обменного взаимодействия* между магнитными ионами, расположенными регулярно в кристаллической структуре данного вещества. Фазовый переход из парамагнитной в магнитноупорядоченную фазу наступает при понижении температуры, как правило это фазовый переход второго рода. Параметром порядка является среднее значение магнитного момента атома для ферромагнетика и намагниченность подрешётки (или подходящим образом выбранная комбинация локальных намагниченностей) для антиферромагнетика.

На прошлой лекции также было рассмотрено поведение парамагнетика в магнитном поле, а также в модели молекулярного поля рассмотрено поведение магнетика в слабом поле, что позволило получить закон Кюри-Вейса $\chi = \frac{C_{at}}{T - \Theta}$, где $C_{at} = \frac{S(S+1)g^2\mu_B^2}{3k_B}$ — константа

Кюри (на атом), а $\Theta = -\frac{S(S+1)}{3k_B} \sum_j J_{ij}$ — температура Кюри-Вейса. Для ферромагнетика

$\Theta > 0$ и восприимчивость ферромагнетика расходится в этой модели при температуре Кюри-Вейса (являющейся температурой фазового перехода).

Целями этой лекции является рассмотреть подробнее поведение ферромагнетика и антиферромагнетика в магнитном поле и рассмотреть свойства элементарных возбуждений магнитноупорядоченных кристаллов.

Поведение магнетиков в магнитном поле.

Намагниченность и магнитная восприимчивость являются важными и легко доступными для наблюдения характеристиками магнетиков.¹ Поэтому важно уметь извлекать физическую информацию из этих величин.

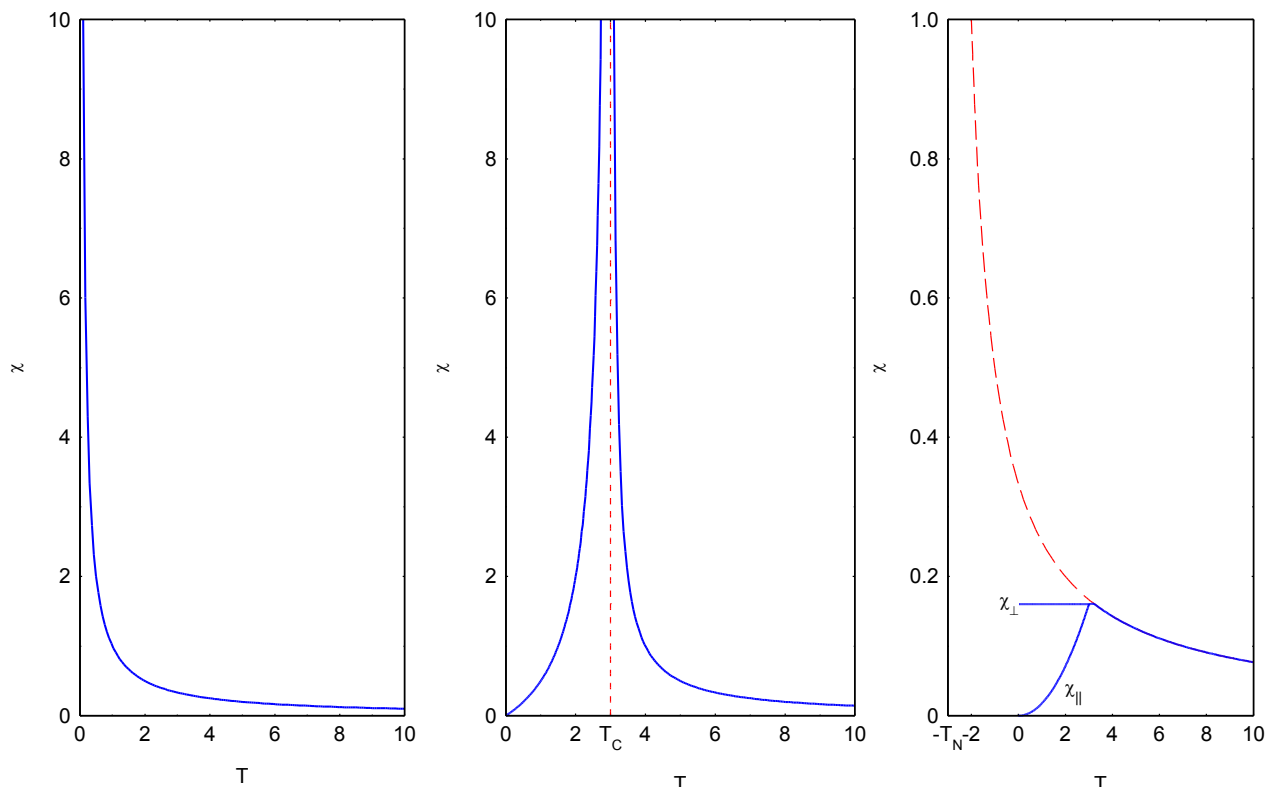


Рисунок 2: Схематическое изображение зависимости магнитной восприимчивости от температуры. Слева направо: парамагнетик (закон Кюри), ферромагнетик, антиферромагнетик. На графике для антиферромагнетика пунктиром построена кривая закона Кюри-Вейса.

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 $\chi_{diff} = \left. \frac{dM}{dB} \right|_{B=0}$.

¹ 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.²

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 2.

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 $S=1/2$, $g=2$)

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

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

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

2 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) $\chi_{\text{диф}} = \frac{\mu_B^2}{8k_B(\Theta - T)}$. Этот результат согласуется с ожидаемой расходимостью восприимчивости в точке перехода (рисунок 2).

Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.

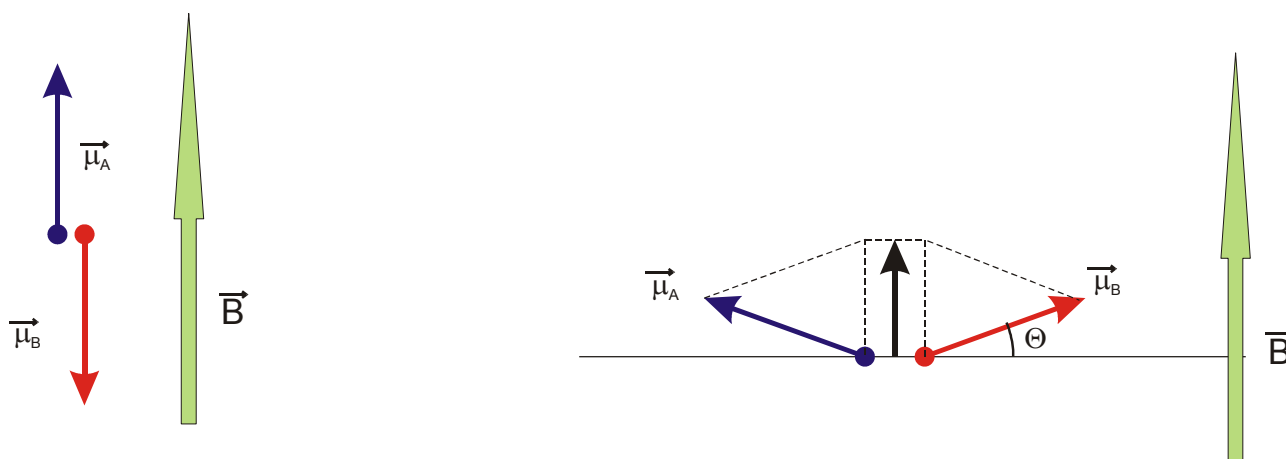


Рисунок 3: Двухподрешёточный антиферромагнетик с легкоосной анизотропией в магнитном поле, приложенном параллельно (слева) и перпендикулярно (справа) лёгкой оси.

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 [2]. Мы ограничимся качественным рассмотрением при $T = 0$.

Рассмотрим два способа приложения слабого внешнего поля: вдоль направления намагниченности подрешёток и перпендикулярно ему (рисунок 3). 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 [3] (рисунок 4).

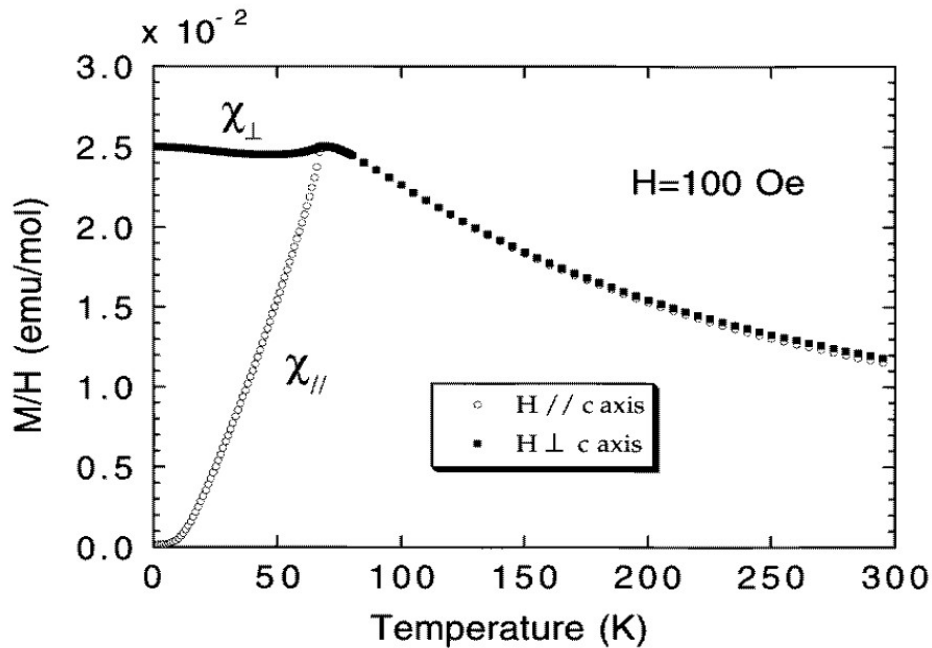


Рисунок 4: Экспериментально измеренная намагниченность антиферромагнетика MnF_2 в двух ориентациях магнитного поля. Из работы [3].

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 2. Пример реально измеренной кривой восприимчивости показан на рисунке 4.

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.

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.

Здесь мы в качестве примера рассмотрим поведение молекулярного магнетика $\{\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}\}$ в магнитном поле [4]. Металл-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 5. 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 4.³

³ 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 неэквивалентности связей.

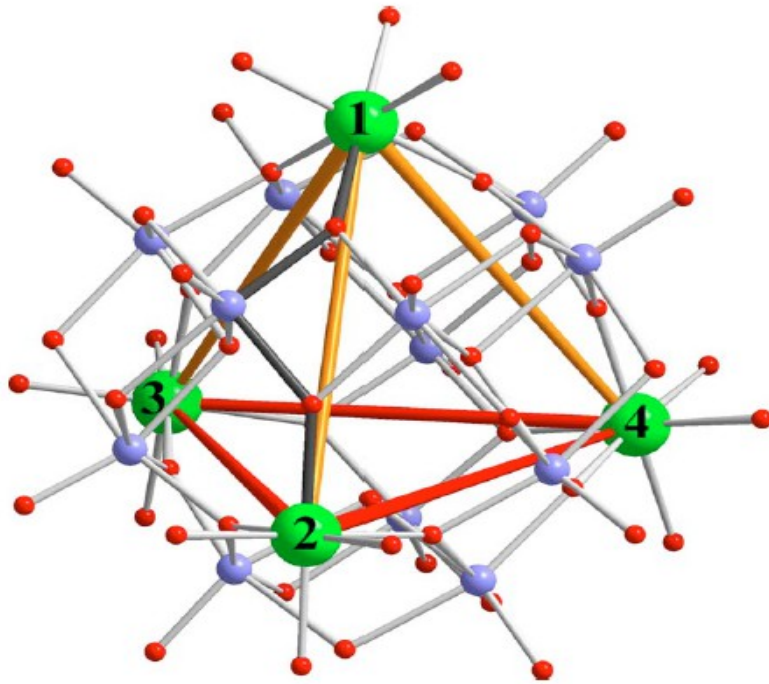


Рисунок 5: Фрагмент структуры молекулы метал-органического комплекса $\text{Mo}_{12}^V\text{O}_{30}(\mu_2\text{-OH})_{10}\text{H}_2\{\text{Ni}^{II}(\text{H}_2\text{O})_3\}_4$. Зелёные (нумерованные) шары - ионы никеля, голубые шары среднего размера - молибден, маленькие красные шары - кислород. Из статьи [4]

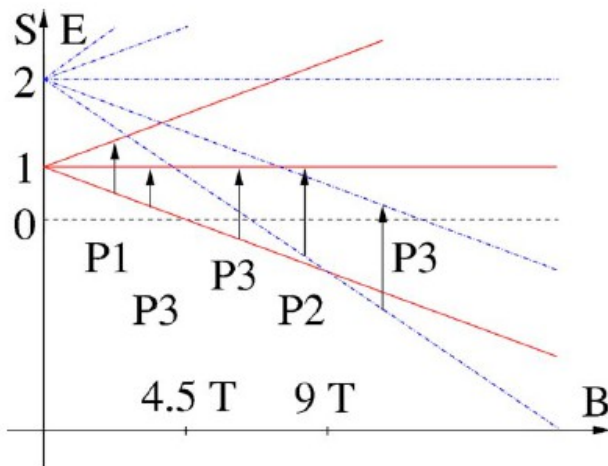


Рисунок 6: Фрагмент зависимости энергии спиновых подуровней от поля. Стрелки отмечают возможные ЭПР переходы. Из статьи [4].

В случае рассматриваемого молекулярного магнетика обменное взаимодействие оказывается антиферромагнитным ($J > 0$, $J/k_B \approx 4\text{K}$) и наименьшую энергию имеет состояние с $S_\Sigma = 0$. 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

$$\langle \mu \rangle = \frac{\sum_i \mu_i e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}, \quad \text{где индекс } i$$

пробегают все состояния системы (см. сноску на стр.10), 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_Σ нижний спиновый подуровень всегда понижает свою энергию быстрее, чем для более низких энергетических уровней. При $T \ll J$ полная намагниченность определяется самым нижним спиновым подуровнем, но эти подуровни будут меняться с ростом поля (рисунок 6). 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:

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

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

$M(B)$ и результаты реального эксперимента показаны на рисунке 7, 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.

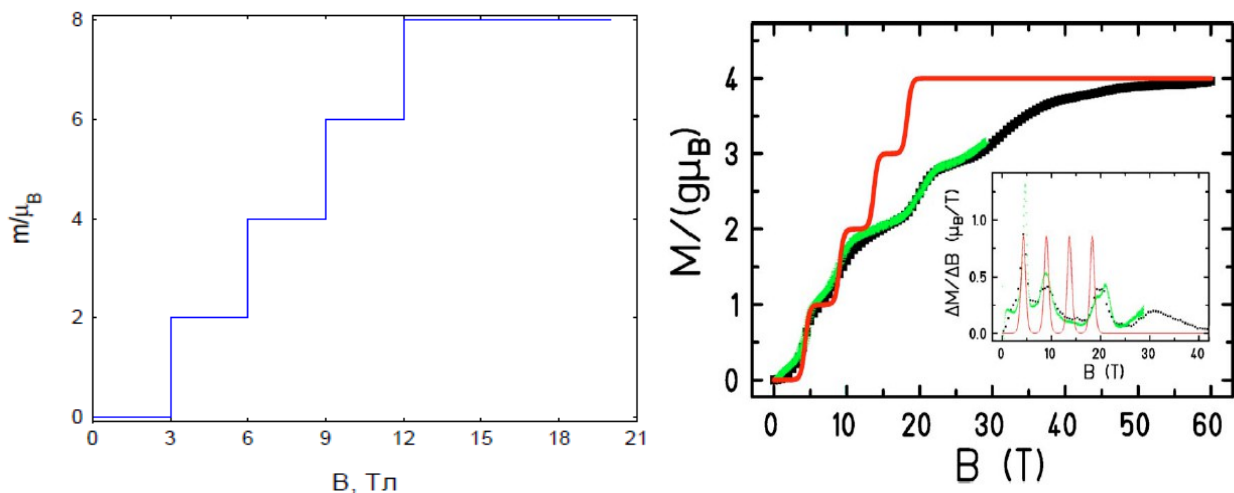


Рисунок 7: Модельная зависимость намагниченности молекулярного магнетика из четырёх антиферромагнитно связанных спинов $S=1$ от поля при $T \ll J$, $J/k_B=4\text{К}$. Справа для сравнения результаты работы [4]: теоретическая кривая (красная) немного отличается от нашей из-за учёта конечной температуры и небольшого отличия параметров, экспериментальные данные (символы) демонстрируют сглаженные ступеньки из-за дополнительных взаимодействий и перестройки системы в сильном магнитном поле.

Спиновые волны в ферро- и антиферромагнетиках.

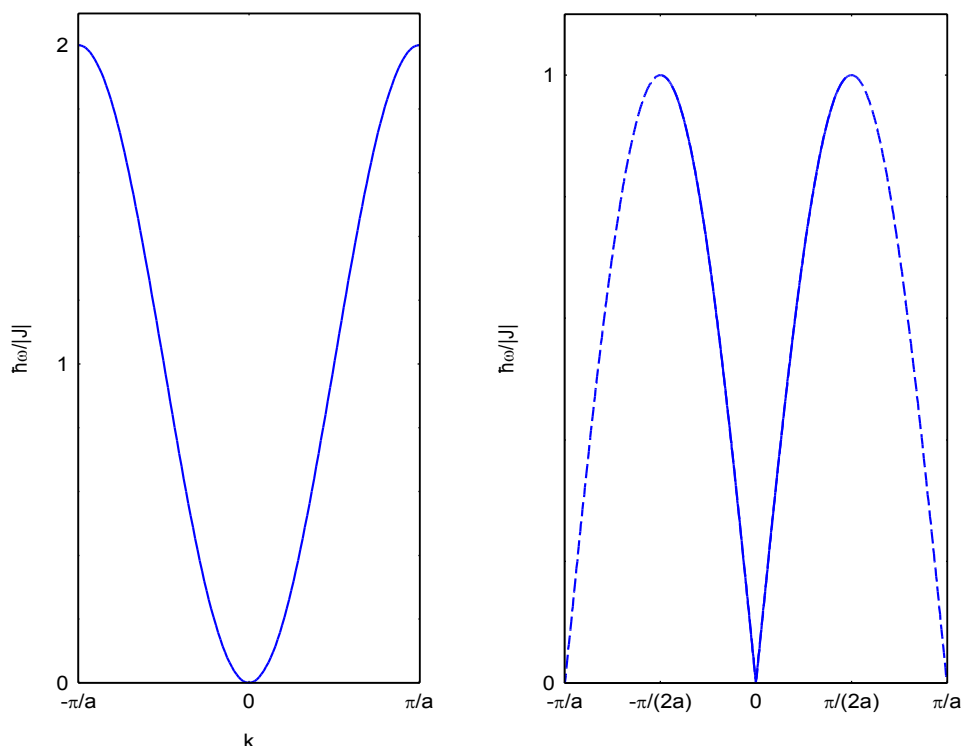


Рисунок 8: Вычисленные в классическом приближении для цепочки спинов спектры спиновых волн в ферромагнетике (слева) и в антиферромагнетике (справа). Для антиферромагнетика сплошной линией показан спектр в магнитной первой зоне Бриллюэна, пунктиром спектр продолжен по кристаллографической первой зоне 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 8). 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. [5], глава VII), что такое отличие в спектрах связано именно с макроскопическим различием ферро- и антиферромагнетиков.

Элементарные возбуждения ферромагнетика.

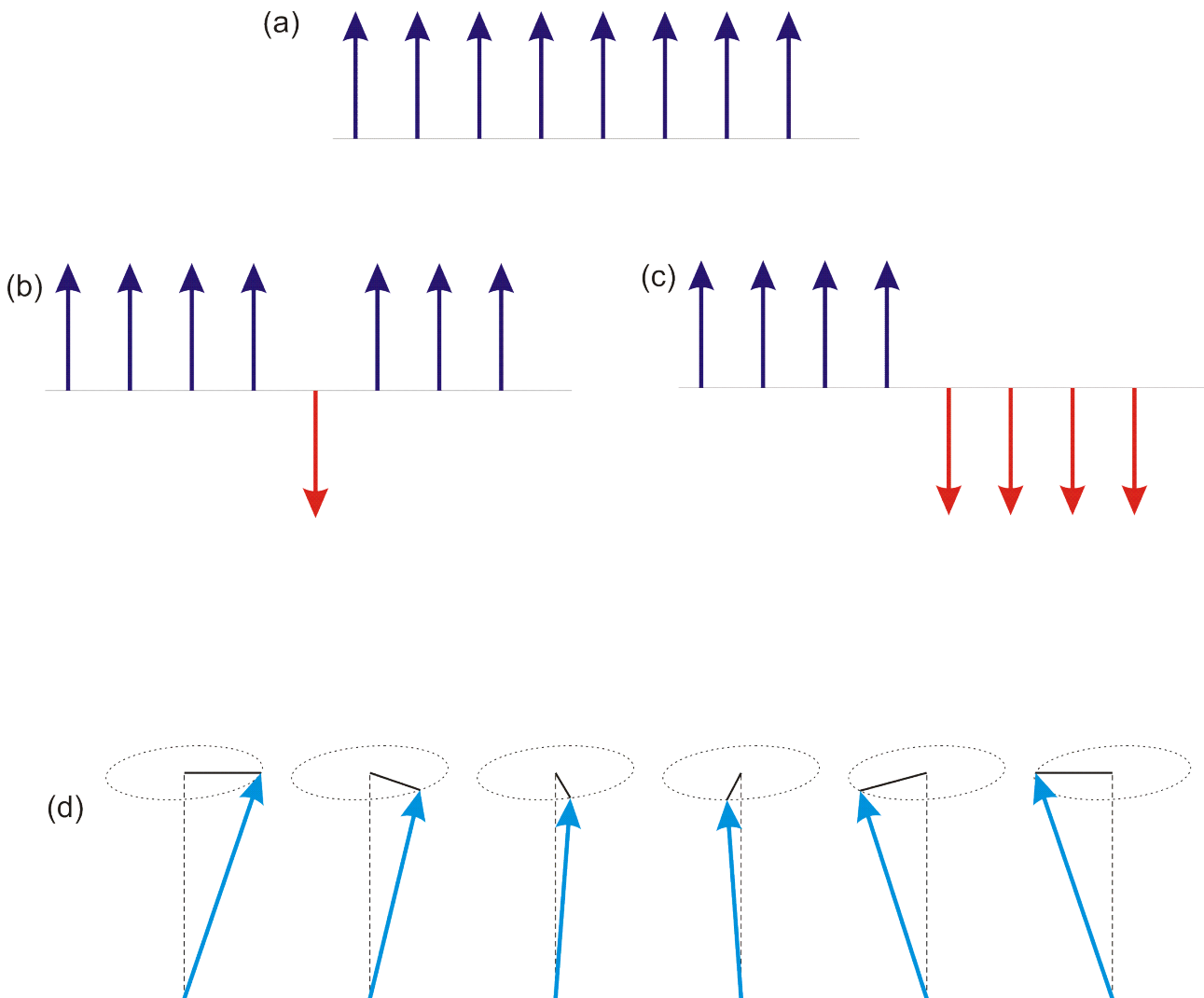


Рисунок 9 К построению элементарного возбуждения ферромагнетика. (a) основное состояние ферромагнитной цепочки, (b) возбуждённое состояние с перевёрнутым спином на одном из узлов, (c) возбуждённое состояние типа доменной стенки, (d) спиновая волна.

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 9-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 9-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 9-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 9-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 малой⁴ увеличением периода волны (уменьшением φ) и уменьшением угла отклонения Θ . Возбуждения такого типа называют спиновыми волнами.

4 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.[†]

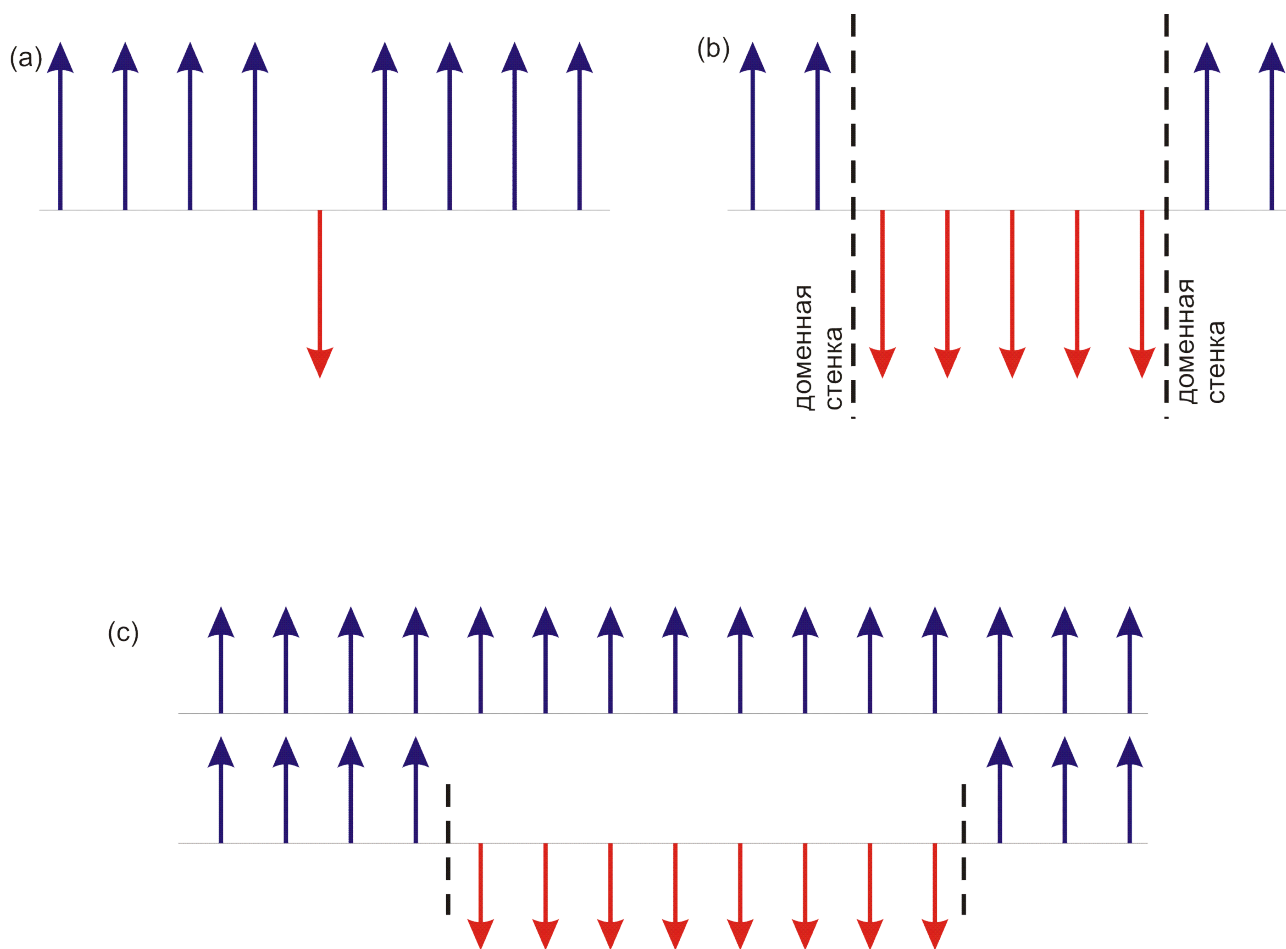


Рисунок 10 К построению возбуждения одномерного изинговского ферромагнетика. (a) переворот спина, (b) распад состояния с перевёрнутым спином на две доменные стенки, (c) «конфайнмент» доменных стенок в квазиодномерном изинговском ферромагнетике.

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 10).

Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.

Рассмотрим модельную задачу ферромагнитно упорядоченной цепочки спинов⁵ 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:

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

Здесь можно уменьшить число уравнений, перейдя к комплексным переменным⁶ $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$:

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

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 8. 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

5 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.18).

6 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.

Спиновые волны в антиферромагнетике. Классическое рассмотрение.[†]

В качестве модельной задачи рассмотрим одномерную антиферромагнитно упорядоченную цепочку.⁷

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:

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

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

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

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

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

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

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

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:

⁷ Как мы увидим далее, спектр антиферромагнитных магнонов аналогичен спектру фононов (он линеен при малых k). Поэтому к антиферромагнетику 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.17).

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

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 8). 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.⁸ 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.

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 [7].

⁸ Аналогичные эффекты конечно имеют место и в ферромагнетике, однако в антиферромагнетике происходит своеобразное усиление анизотропии [6]: 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 $\omega_a \ll \sqrt{\omega_{ex}\omega_a}$.

Спиновые волны в ферро- и ферритмагнетиках.

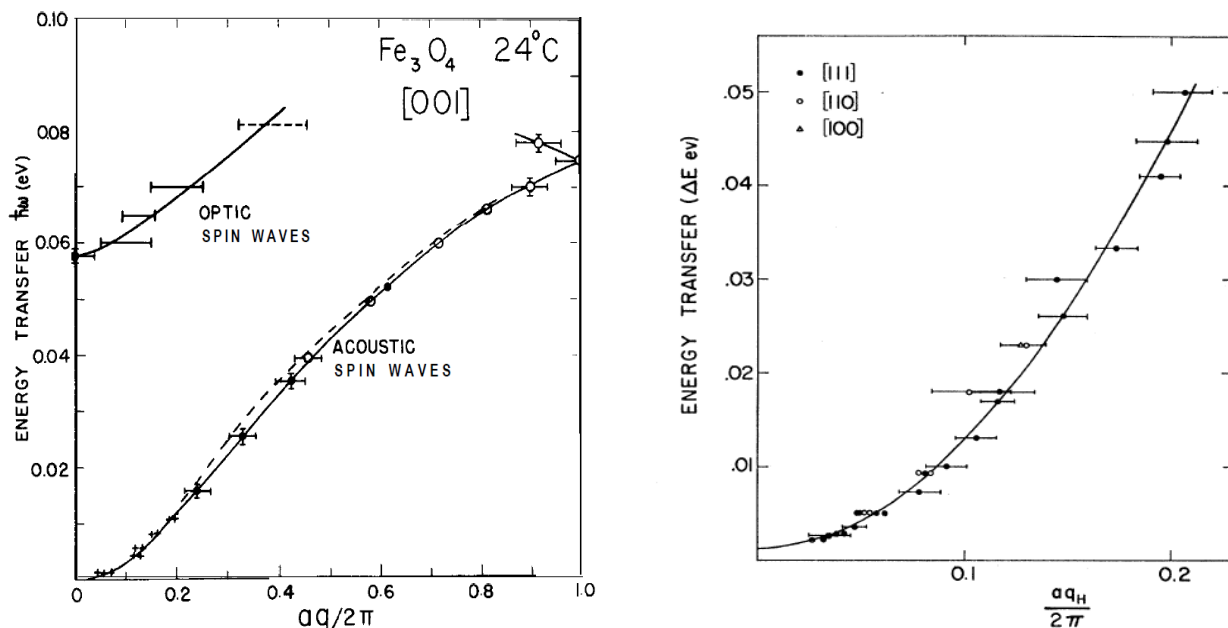


Рисунок 11: Слева: Спектр спиновых волн в ферритмагнитном магнетите Fe_3O_4 . Из работы [8]. Справа: спектр спиновых волн в ферромагнитном сплаве $FeCo$. Из работы [9].

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 $FeCo$ [9] и на ферритмагнитном магнетите Fe_3O_4 [8] (рисунок 11). В случае ферритмагнетика, 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 . †

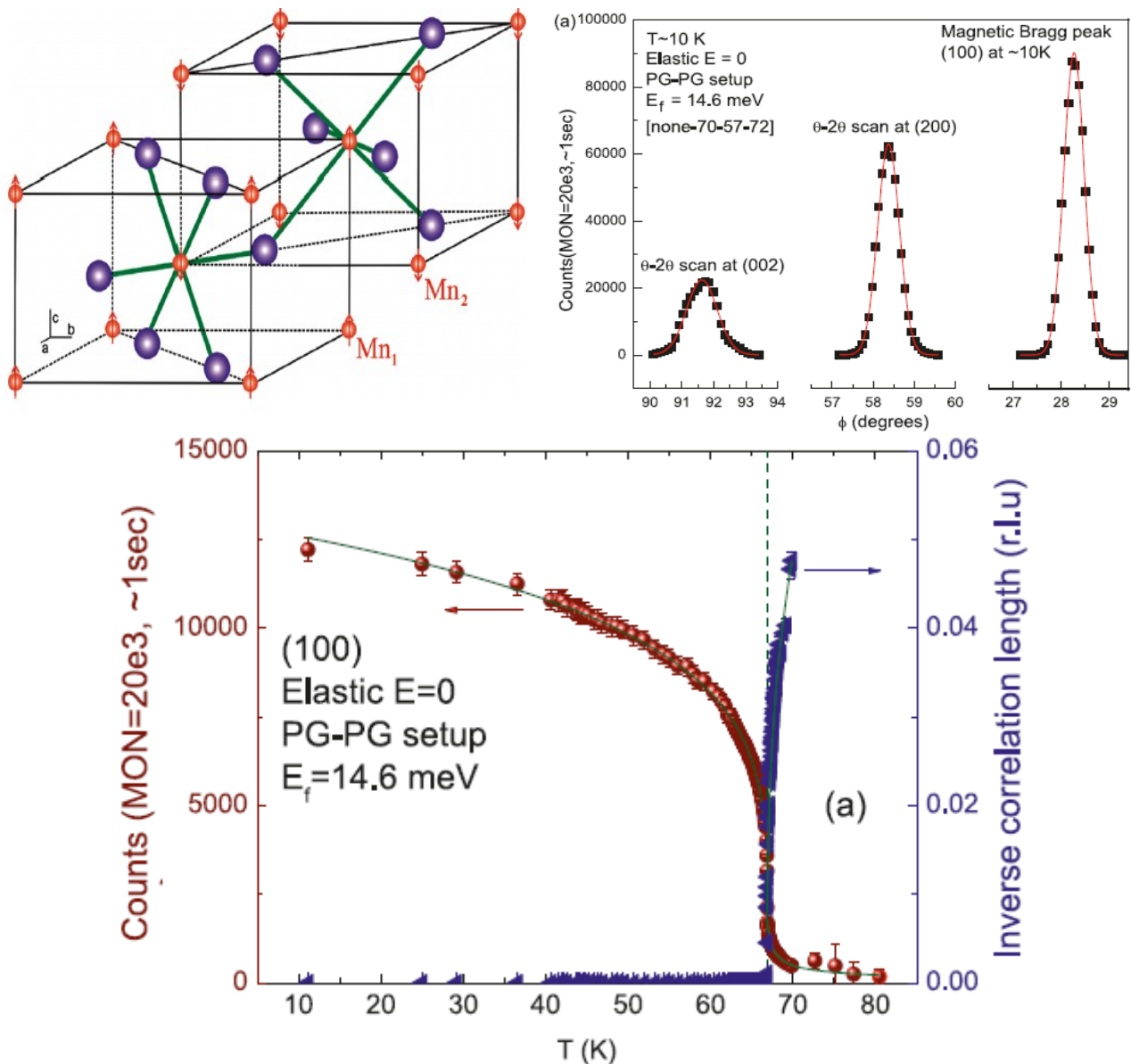


Рисунок 12: Верхний ряд слева: определённая по данным упругого рассеяния нейтронов магнитная структура антиферромагнетика MnF_2 . Верхний ряд справа: профили брэгговских пиков для нейтронного рассеяния на ядрах (пики (002) и (200)) и магнитного брэгговского пика (100) ниже температуры Нееля. Внизу: зависимость от температуры интенсивности магнитного брэгговского пика (красные символы) и магнитной корреляционной длины (синие). Из работы [10].

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 [10], магнитным резонансом [3], комбинационным рассеянием света [11] и различными статическими методами (см., например, рисунок 4). 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 12).

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 12).

Методом неупругого рассеяния нейтронов был измерен [10] спектр спиновых волн (рисунок 13). 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 [3]. При рассеянии света также наблюдался сдвиг частоты рассеянного света, соответствующий одномагнотному и двухмагнотному рамановскому процессу [11] (рисунок 14).

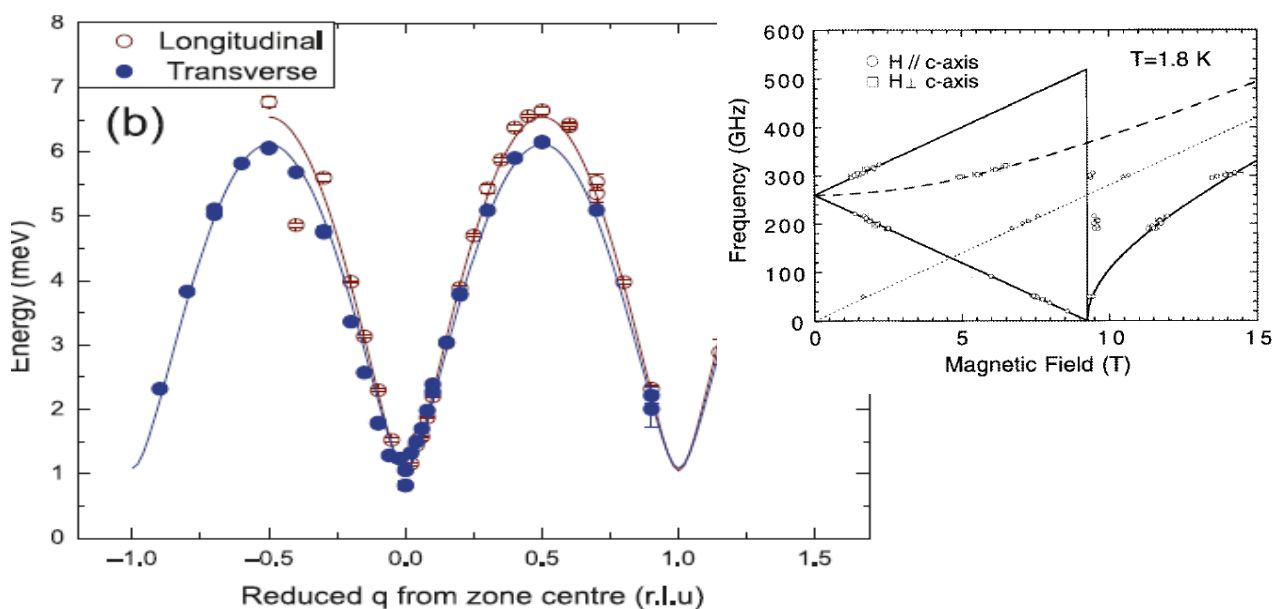


Рисунок 13: Слева: MnF_2 , спектры для двух поляризаций антиферромагнитных магнонов с волновым вектором $(0,0,q)$, измеренные по неупругому рассеянию нейтронов. Волновой вектор нормирован на вектор обратной решётки. Кривые — расчёт в модели спиновых волн. Из работы [10]. Справа: зависимость частоты магнитного резонанса от магнитного поля, величина частоты при $B=0$ соответствует энергии однородных колебаний при $q=0$ на левой панели. Из работы [3].

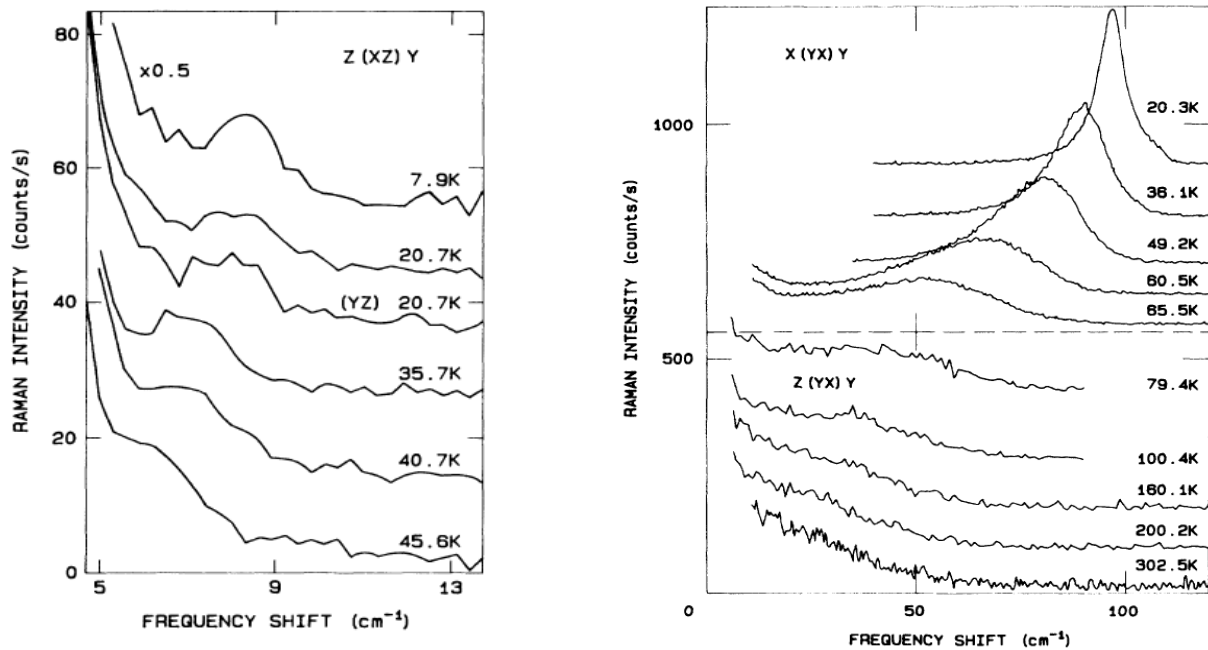


Рисунок 14: Зависимость от температуры спектров рассеяния света с длиной волны 476.5 нм. Из работы [11]. Слева: одномагнотное рассеяние. Возникающий при низких температурах пик со сдвигом частоты около 8.5 см^{-1} (около 250 ГГц или 1 мэВ) соответствует рамановскому процессу с рождением одного магнона 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.

Квантовое рассмотрение спиновых волн в ферромагнетике. †

Рассмотрим ферромагнетик на простой кубической решётке с взаимодействием только ближайших соседей с гамильтонианом $\hat{H} = J \sum_{j,\delta} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+\delta} - g \mu_B H \sum_j S_j^z$, здесь обменный интеграл $J < 0$ одинаков для всех соседей, H — внешнее магнитное поле, индекс δ соответствует суммированию по ближайшим соседям. Мы считаем, что набор входящих в суммирование соседей выбирается так, чтобы каждая связь учитывалась при суммировании по всей решётке единожды. Таким образом, для каждого атома учитывается 3 соседа, связанные с ним векторами трансляции $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$ и $(0, 0, a)$, где a — период кристалла.

Спектр спиновых волн в ферромагнетике может быть получен в рамках квантовомеханического подхода [6]. Этот подход использует стандартный метод — подобрать преобразование операторов, приводящее исходный гамильтониан к виду суммы по невзаимодействующим осцилляторам. Отметим, что входящие в запись этого гамильтониана спиновые операторы проекции спина \hat{S}_x , \hat{S}_y и \hat{S}_z связаны друг с другом так как $(\vec{S})^2 = S(S+1)$, а операторы \hat{S}_x и \hat{S}_y выражаются через комплексно сопряжённые операторы $\hat{S}^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ и $\hat{S}^- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$. Поэтому возможность выразить гамильтониан всего через два сопряжённых оператора несомненно есть. Искомое преобразование, называемое преобразованием Холштейна-Примакова, мы приводим для сведения, оно имеет вид:

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}}$$

$$S_j^- = \sqrt{2S} a_j^+ \sqrt{1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}}$$

где от операторов a и a^+ требуется выполнение бозонного коммутационного соотношения $[a_j, a_l^+] = \delta_{jl}$. Этот подход оказывается громоздким и компактное решение оказывается возможным лишь приближённо, при малых числах заполнения осцилляторов — т. е. при малом числе возбуждений. В этом вычисление спектра магнонов принципиально отличается от спектра фононов, где в гармоническом приближении переход к осцилляторам был строгим преобразованием.

Поэтому для наглядности в нашем курсе мы не будем использовать эти громоздкие строгие преобразования, а сразу рассмотрим приближение малого числа возбуждений. Основное состояние ферромагнетика имеет однозначно определённую волновую функцию $\psi_0 = |\dots \uparrow \uparrow \uparrow \dots\rangle$, описывающую полностью поляризованное состояние, в котором проекция каждого спина на выбранную ось максимальна. В качестве такой выбранной оси можно взять направление внешнего магнитного поля.⁹ Энергия основного состояния

$E_0 = \frac{z}{2} J S^2 N - g \mu_B H S N$, где z — число ближайших соседей (6 на простой кубической решётке), а N — число атомов в решётке.

В качестве возбуждения естественно рассмотреть состояние с уменьшенной на 1 проекцией одного из спинов $\psi_{\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{r}}^- \psi_0$, где индекс \vec{r} — это «номер» спина, проекция которого уменьшилась, а нормировочный множитель здесь связан с правилами вычисления матричных элементов повышающего и понижающего спиновых операторов. Этот вид волновой функции однако не блоховский и легко проверить, что это не собственная функция гамильтониана:

$$\hat{H} \psi_{\vec{r}} = \left[J \sum_{j, \delta} \left(\hat{S}_j^z \hat{S}_{j+\delta}^z + \frac{\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+\delta}^- + \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+\delta}^+}{2} \right) - g \mu_B H \sum_j \hat{S}_j^z \right] \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{r}}^- \psi_0.$$

Здесь в слагаемых, содержащих z -проекцию, отличие от ранее вычисленного значения E_0 дадут только слагаемые гамильтониана, действующие на «укороченный» r -ый спин, но сама волновая функция под действием операторов z -проекции не меняется, т. е. получим часть ответа в виде $(E_0 - z J S + g \mu_B H) \psi_{\vec{r}}$ (напомним, что $J < 0$). В слагаемых гамильтониана с повышающим и понижающим оператором ненулевой вклад дадут только слагаемые, где повышается («удлинняется» к максимальному значению) «укороченный» r -ый спин. Но одновременно с этим «укорачивается» один из соседних спинов! Результатом такого действия будет $J 2S \frac{1}{2} (\psi_{\vec{r}+\vec{x}} + \psi_{\vec{r}-\vec{x}} + \psi_{\vec{r}+\vec{y}} + \psi_{\vec{r}-\vec{y}} + \psi_{\vec{r}+\vec{z}} + \psi_{\vec{r}-\vec{z}})$, где \vec{x} , \vec{y} , \vec{z} — вектора трансляции к ближайшим соседям. То есть, под действием гамильтониана возникли слагаемые, соответствующие перемещению возбуждения на один из соседних узлов.

Диагонализировать гамильтониан можно сделав линейную комбинацию одноузельных волновых функций, имеющую блоховский вид: $\psi_{\vec{k}} = \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \psi_{\vec{r}}$. Такая функция

⁹ А в реальных кристаллах — направление, выделяемое анизотропными спин-спиновыми взаимодействиями, действие которых можно представить как некоторое эффективное поле анизотропии H_A .

диагонализует наш гамильтониан:

$$\hat{H} \psi_k = \left(E_0 - z J S + g \mu_B H + J S \left(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} \right) \right) \psi_k .$$

То есть, энергия возбуждения¹⁰ равна $\varepsilon = 2|J|S(3 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a) - \cos(k_z a)) + g \mu_B H$.

Спектр квадратичен при малых волновых векторах. Магнитный момент одного возбуждения может быть найден формально $m = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial H} = -g \mu_B$. Эти рассуждения также легко могут быть перенесены на случай цепочки $\varepsilon_{1D} = 2|J|S(1 - \cos(ka)) + g \mu_B H$ (что совпадает с результатом классической модели прецессии в эффективном поле, полученным ранее) и двумерной квадратной решётки $\varepsilon_{2D} = 2|J|S(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a))$.

Это позволяет отождествить введённые магноны с квантами спиновых волн в ферромагнетике. В магнитном поле спектр ферромагнитных магнонов приобретает щель, пропорциональную полю.

Формальная нестрогость нашего рассмотрения начнёт проявляться, если мы захотим рассмотреть двух-, трёх- и т. д. магнонные состояния: когда перевернуто несколько спинов. В таком случае оказывается невозможным рассматривать такие состояния как простую комбинацию двух одномагнонных — случай, когда координаты двух магнонов совпадают оказывается специально выделенным. Это особенно наглядно для случая спина $S = 1/2$: так как двукратное действие понижающего оператора на состояние с проекцией спина $S_z = +1/2$ даёт ноль, то два магнона принципиально *не могут* находиться на одном узле. Другими словами, есть эффективное сильное отталкивание магнонов, пренебречь которым можно только в случае их малой концентрации.

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 $\Delta m = g \mu_B$.¹¹ Подчеркнём, что этот результат касается именно

¹⁰ Как обычно, энергия квазичастицы — это разность полной энергии системы, содержащей квазичастицу, и энергии основного состояния

¹¹ Это рассуждение подтверждается непосредственно при квантовомеханическом выводе спектра магнонов выше.

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 системе¹² $\omega(\vec{k}) = \frac{2|J|S}{\hbar} (3 - (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)))$, 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: $E = \int_{\text{з.бр.}} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega/T} - 1} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}$.

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:

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

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 [12], пример температурной зависимости теплоёмкости представлен на рисунке 15.

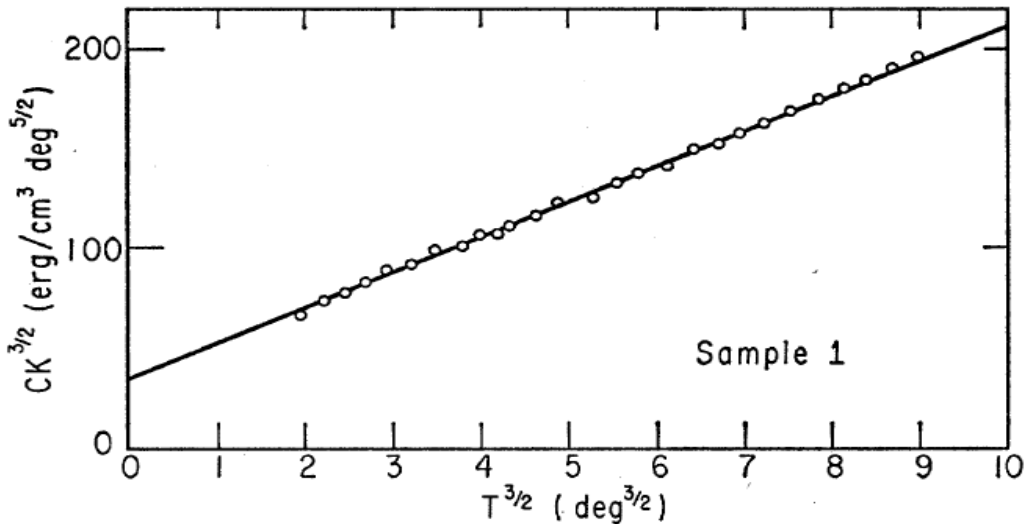


Рисунок 15: Экспериментальная проверка предсказания спин-волновой теории для ферромагнетика, из работы [12]. Исследовался образец железо-итриевого граната, температура Кюри около 550К. По оси X отложена $T^{3/2}$, по оси Y произведение $CT^{3/2}$: в таких координатах сумма магнонного и фононного вклада в теплоёмкости $C_{\text{полн}} = aT^{3/2} + bT^3$ должна преобразовываться в прямую.

12 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.

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

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

Этот результат известен под названием закона $T^{3/2}$ Блоха.¹³

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 [14]) представлен на рисунке

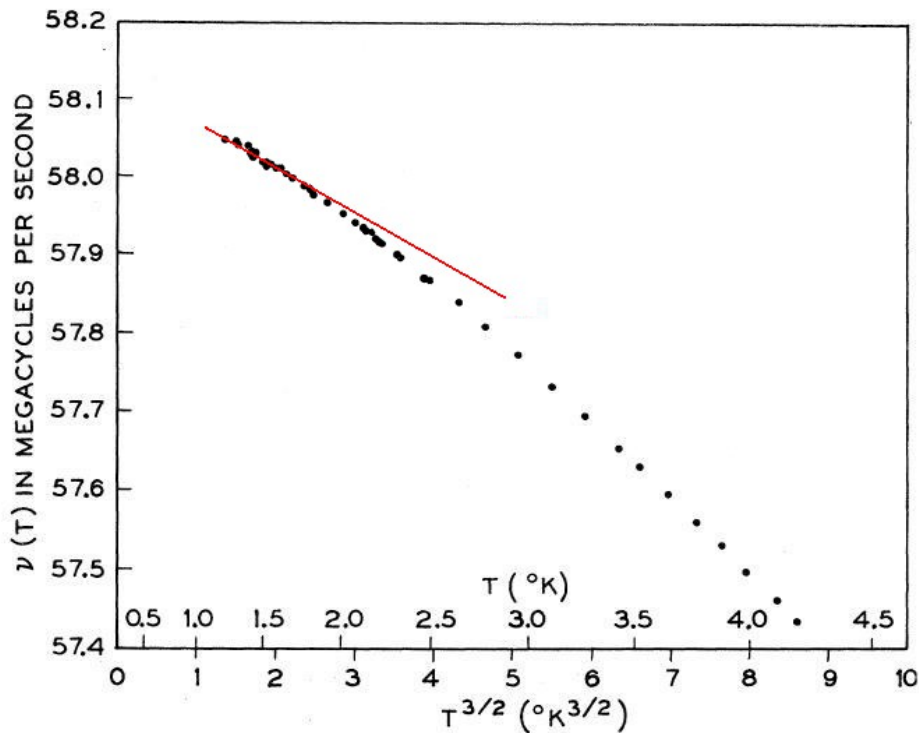


Рисунок 16: Пример экспериментальной проверки закона Блоха, из работы [14]. Символы — данные эксперимента, красная линия — закон Блоха $3/2$. CrBr_3 , $T_C = 37\text{K}$.

В работе [14] исследовался методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) ферромагнетик

¹³ Перечислим ещё раз приближения модели, в которой получается закон Блоха: спектр считается квадратичным, спиновые волны (магны) считаются невзаимодействующими. В принципе, в рамках теории спиновых волн, могут быть получены и другие поправки, учитывающие эти эффекты. В работе Дайсона [13] показано, что первые члены разложения имеют вид:

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

где все коэффициенты положительные.

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

SrBr_3 с температурой Кюри 37 К. Регистрировалась частота ЯМР на ядрах ^{53}Sr , 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) [13] 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.

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.

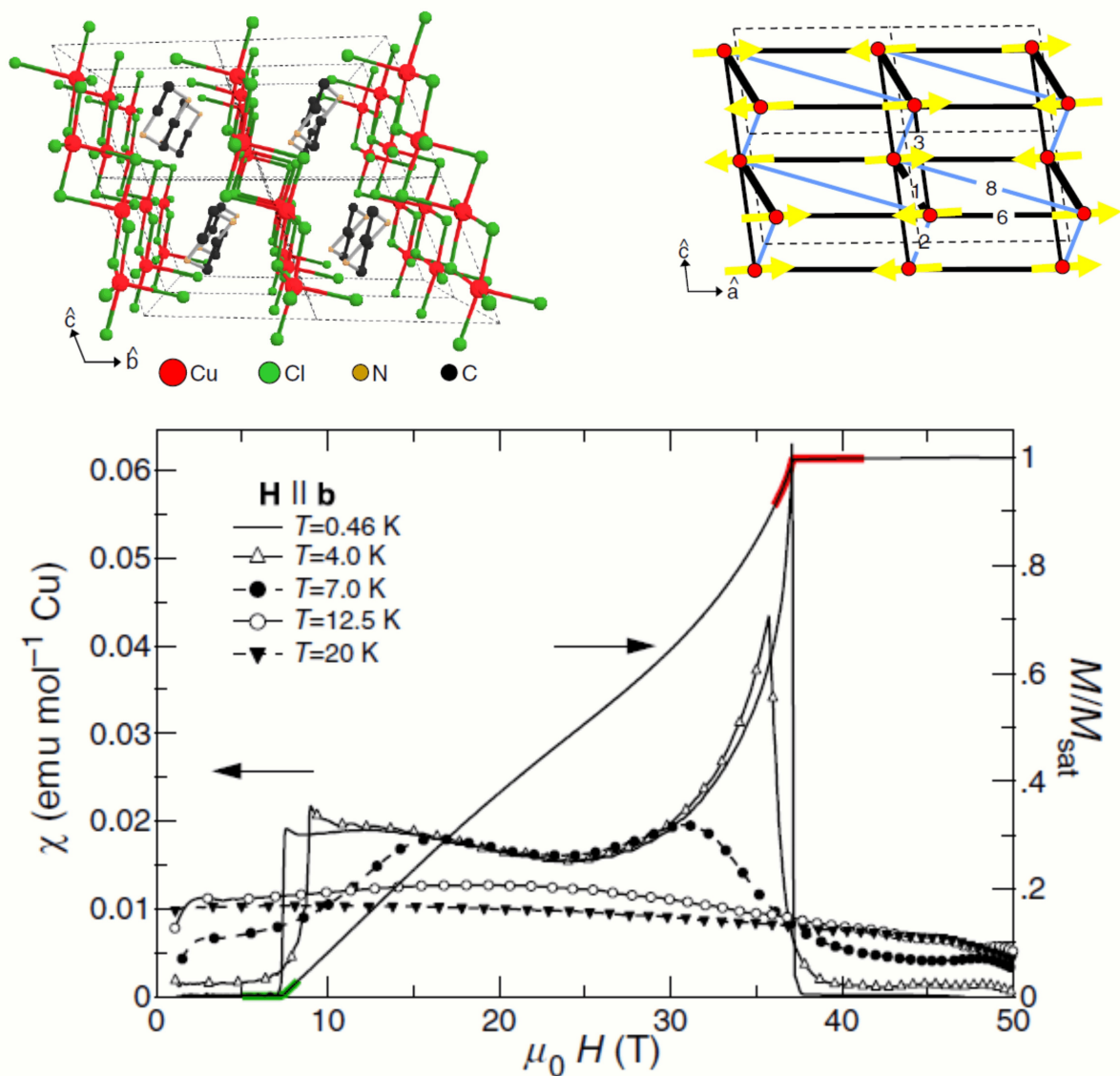


Рисунок 17: Структура и кривая намагничивания квазидвумерного спин-щелевого магнетика $(C_4H_{12}N_2)(Cu_2Cl_6)$ (по работе [15]). Верхний ряд слева: кристаллическая структура (триклинная симметрия, элементарная ячейка выделена пунктиром). Верхний ряд справа: обменные связи между ионами меди в плоскости (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 [16][17].

Хорошо изученным примером такой системы является квазидвумерный магнетик с химической формулой $(C_4H_{12}N_2)(Cu_2Cl_6)$ [15]. 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 17). В плоскости димеры оказываются связаны между собой многочисленными обменными взаимодействиями (рисунок 17). 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 [15]. Низкотемпературная намагниченность следует описанной выше схеме с двумя критическими полями (рисунок 17).

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 [18], 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 18. 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 18). Эти состояния, естественно, эквивалентны по энергии и, так как их можно преобразовать одно в другое плавными изменениями (без «разрывов»), их называют топологически эквивалентными.

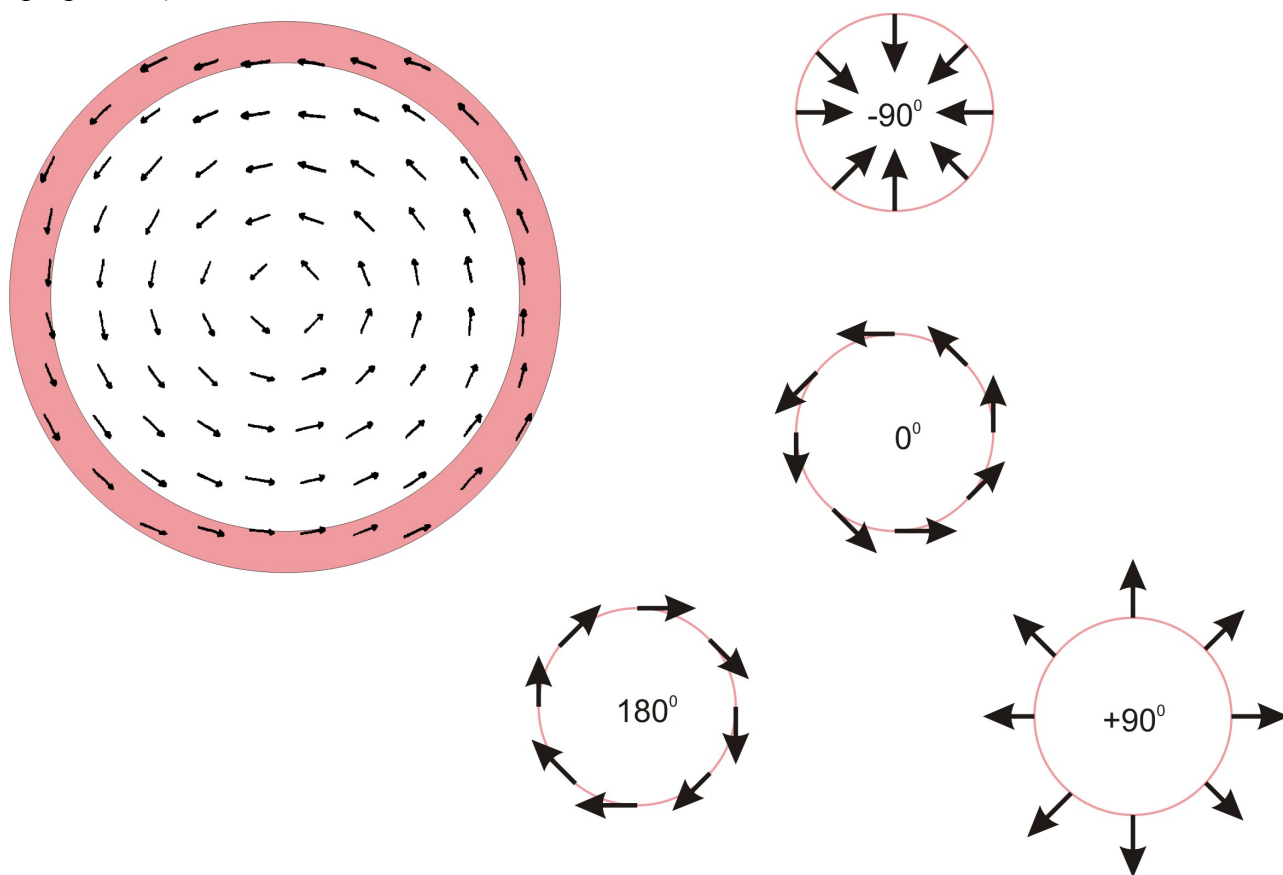


Рисунок 18: Вихрь в XY-магнетике (на основе рисунка из статьи [18]). Слева: распределение ориентаций спинов на решётке. Справа: иллюстрация получения эквивалентных по энергии ориентаций спинов при одновременном повороте всех спинов на один угол. В центре круга указан угол поворота.

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 19. 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».

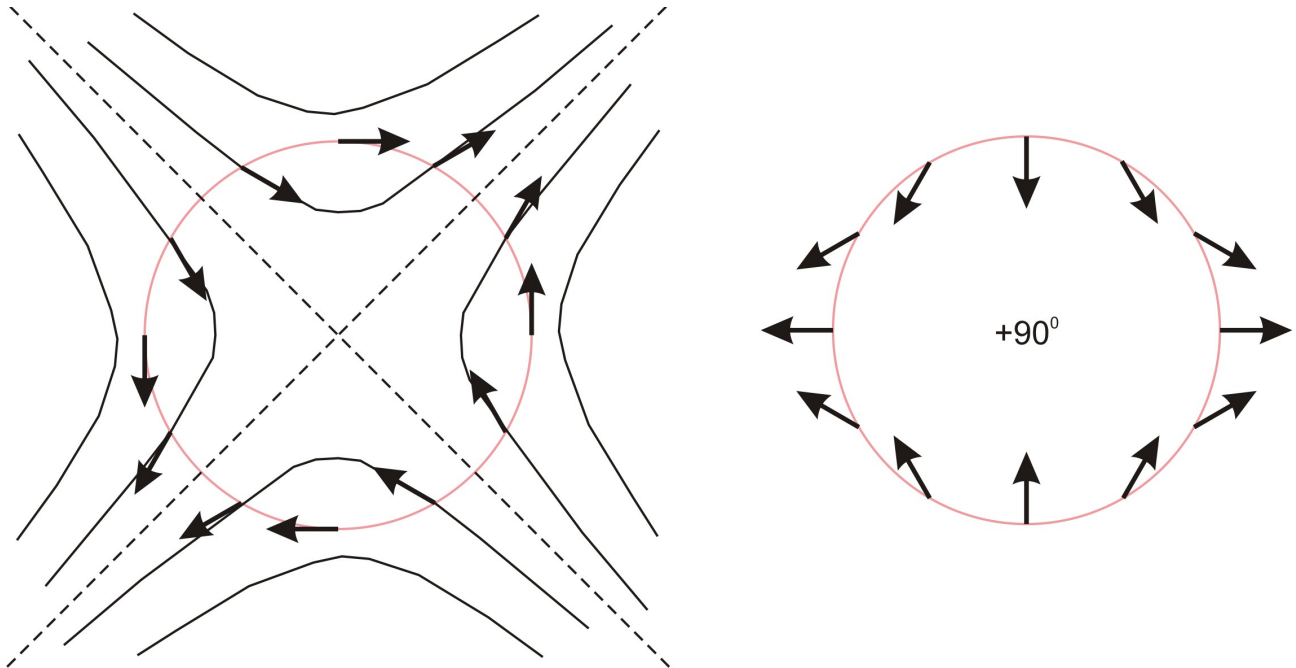


Рисунок 19 Построение конфигурации типа антивихря для XY-ферромагнетика. Слева: один из вариантов конфигурации и схема семейства огибающих. Справа: изменение конфигурации при одновременном повороте спиновых векторов.

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.¹⁴ Поправки к этому решению, учитывающие взаимодействие вихрей [18], приводят к небольшому изменению критической температуры: $\frac{\pi|J|}{2T_c} \approx 1.12$.

¹⁴ 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».