

Московский физико-технический институт
Кафедра общей физики

Лекция 13

МАГНЕТИЗМ: СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
МАГНЕТИКОВ

заметки к лекции по общей физике

В.Н.Глазков

2021

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).

В эту версию включен только минимум, полная версия содержит дополнительный материал по теме.

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.....	5
Предмет физики магнетиков.....	5
Экспериментальные методы исследования.....	5
«Шкала» магнитных полей современной экспериментальной физики.....	6
Парамагнетизм свободных атомов. Парамагнитная восприимчивость. Закон Кюри.....	12
Магнитный порядок в диэлектрических кристаллах.....	13
Замораживание орбитального момента в кристаллах.....	13
Виды магнитного упорядочения в кристаллах. Изменение симметрии при магнитном упорядочении.....	14
Обменное взаимодействие между магнитными ионами.....	16
Гейзенберговский гамильтониан.....	16
Классический предел.....	18
Модель Изинга и XY-модель спин-спинового взаимодействия.....	18
Модель молекулярного поля.....	19
Магнетик выше температуры упорядочения. Закон Кюри-Вейса.....	19
Ферромагнетик ниже температуры Кюри.....	22
Поведение магнетиков в магнитном поле.....	23
Восприимчивость ферромагнетика ниже температуры упорядочения.	23
Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.	25
Квантовое рассмотрение антиферромагнетика выше поля насыщения.....	27
Спиновые волны	30
Элементарные возбуждения ферромагнетика.....	31
Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.....	32
Спиновые волны в ферро- и ферримагнетиках: эксперимент.....	34
Квантование спиновых волн. Вклад спиновых волн в теплоёмкость и намагниченность ферромагнетика.....	34
Переход Березинского-Костерлица-Таулеса в двумерном XY-ферромагнетике.....	37

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: Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика. Статистическая физика т.5,

20: J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless, Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems, 1973

21: L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, 2001

22: М Hagiwara, K Katsumatay, I Yamada and H Suzuki, Antiferromagnetic resonance in MnF₂ over wide ranges of frequency and magnetic field, 1996

23: 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

24: Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика том IX. Статистическая физика часть 2, 2002

25: B.N.Brockhouse, Slow Neutron Spectroscopy and the Grand Atlas of the Physical World, 1994

26: R.N.Sinclair and B.N.Brockhouse, Dispersion Relation for Spin Waves in a fcc Cobalt Alloy, 1960

27: Samuel S. Shinozaki, Specific Heat of Yttrium Iron Garnet from 1.5° to 4.2°K, 1961

28: Freeman J. Dyson, Thermodynamic Behavior of an Ideal Ferromagnet, 1956

29: A.C.Gossard, V.Jaccarino, J.P.Remeika, Experimental test of the spin-wave theory of a ferromagnet, 1961

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 намагниченности: в точке фазового перехода второго рода теплоёмкость часто демонстрирует особенность, а изменение магнитной структуры магнетика при возникновении или изменении магнитного порядка отражается на зависимости намагниченности 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 намагниченность атомов выстраивается каким-то регулярным образом — изменяется пространственная периодичность кристалла. Это приводит к тому, что, например, изменяется

картина дифракции нейтронов на образце [2].

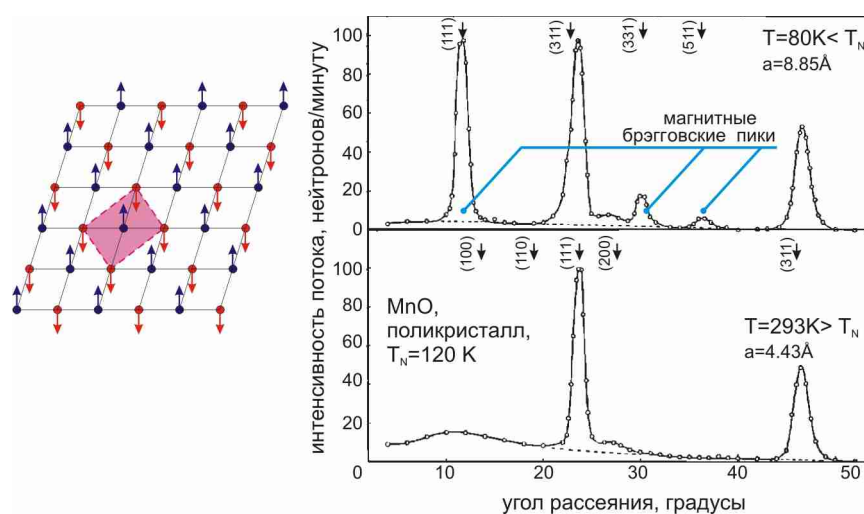


Рисунок 1: Слева: схема возникновения антиферромагнитного порядка на квадратной решётке. Цветом выделена примитивная ячейка магнитной структуры. Справа: изменение картины дифракции нейтронов на порошке антиферромагнетика MnO. На основе рисунка из работы [2].

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 милikelъвин 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 зеемановская 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 3). 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 3 Резистивный водоохлаждаемый магнит на поле до 1.5 Тл в составе ЭПР спектрометра Bruker. С сайта bruker.com



Рисунок 2: Сверхпроводящий соленоид на поле 8Тл. 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 в соленоид 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 2). Соленоиды на поле 12-14 Тл разной геометрии изготавливаются 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 ЯМР томографах используются сверхпроводящие магниты, создающие поле 3 Тл. Сверхпроводящие магниты разных типов активно используются в современных ускорителях частиц, включая Большой адронный коллайдер [4].

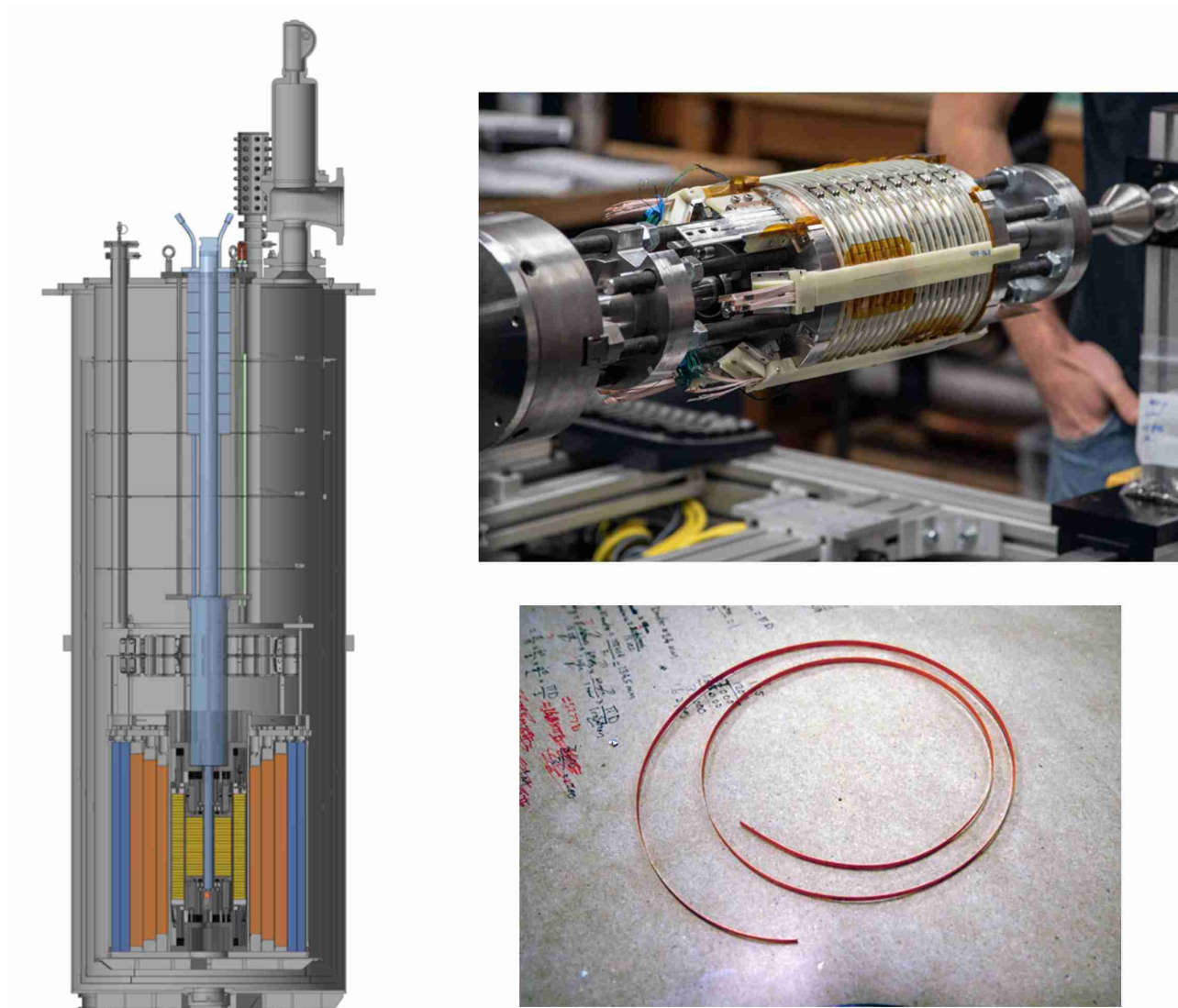


Рисунок 4: Рекордный сверхпроводящий соленоид на 32 Тл (достигнутое на 2016 год поле 27 Тл) в Национальной лаборатории высоких магнитных полей в Талахаси (Флорида, США). Слева: схема криостата с композитным соленоидом. Справа сверху: ВТСП катушка. Справа внизу: фрагмент ВТСП ленты. С сайта [5].

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].

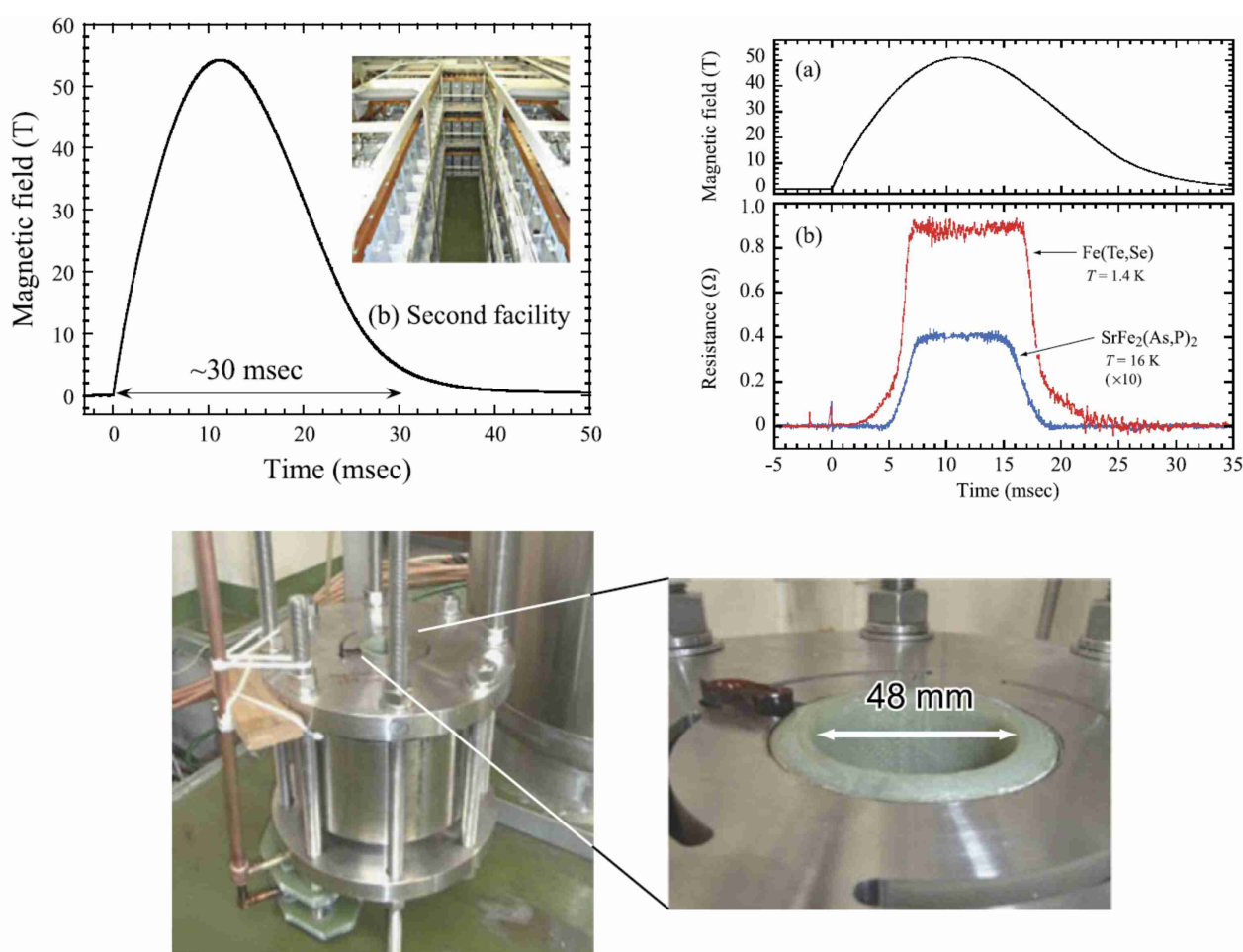


Рисунок 5 Получение импульсных магнитных полей в лаборатории высоких магнитных полей Университета Осаки. Слева сверху: профиль импульса поля и вид конденсаторной батареи (запасенная энергия 2 МДж). Внизу: вид на катушку для получения высокого магнитного поля. Справа сверху: импульс поля и зависимость 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 50 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 $\Phi = BS = \text{const}$, 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.

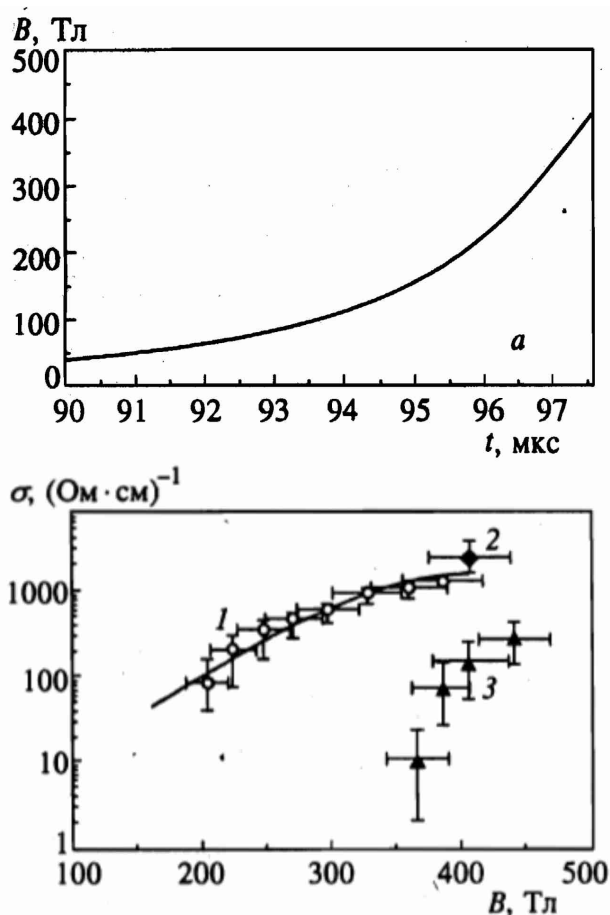


Рисунок 6 Слева: экспериментальная установка по получению сверхсильного магнитного поля до эксперимента. С сайта [11]. Справа: профиль магнитного поля в импульсе на финальной стадии импульса и пример измеренных на двух образцах кривых магнитосопротивления в сверхвысоких полях. Из статьи [12].

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].

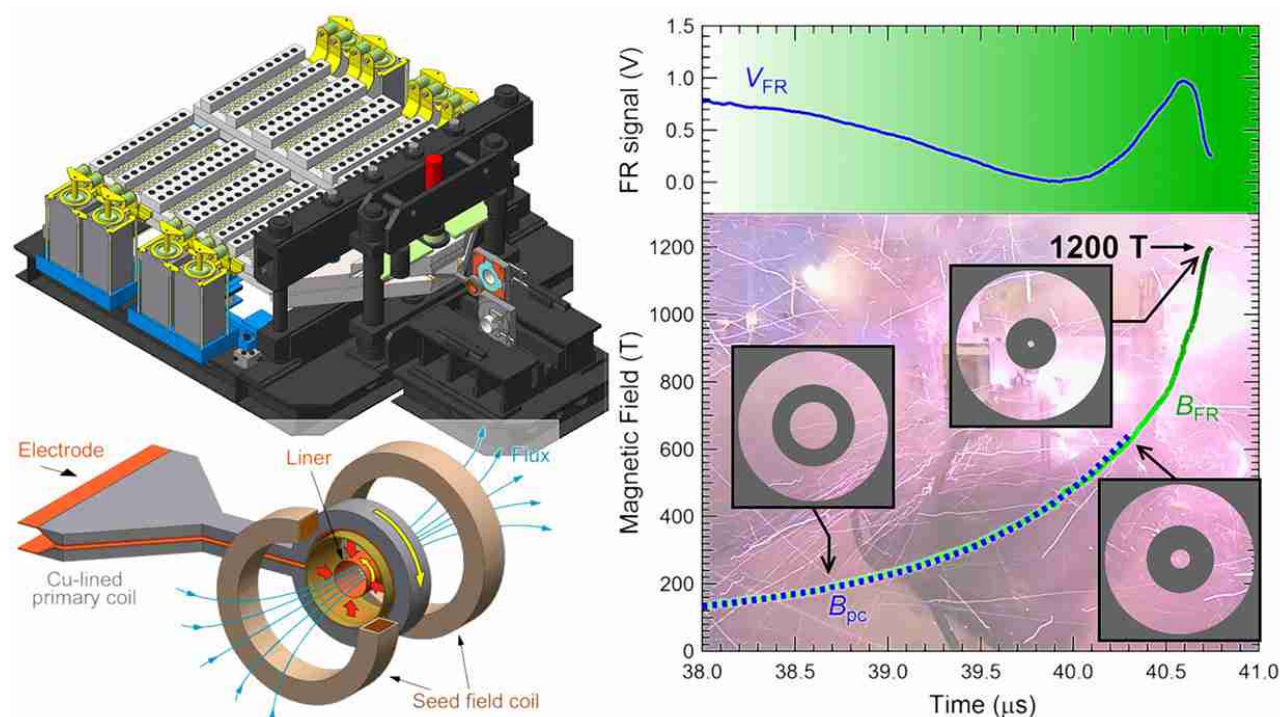


Рисунок 7: Схема эксперимента 2018 года по получению сверхсильного магнитного поля в Университете Токио (с сайта [14]). Слева сверху - общая схема установки с батареей конденсаторов, запасующей около 5 МДж энергии. Слева внизу: система катушек экспериментальной установки. Справа: зависимость магнитного 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 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 $\langle \mu \rangle = \frac{1}{2} g \mu_B \tanh\left(\frac{g \mu_B B}{2T}\right)$.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

$J=1/2$ 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 – константой Кюри.

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

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

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 вырожденного уровня линейен 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

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.

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

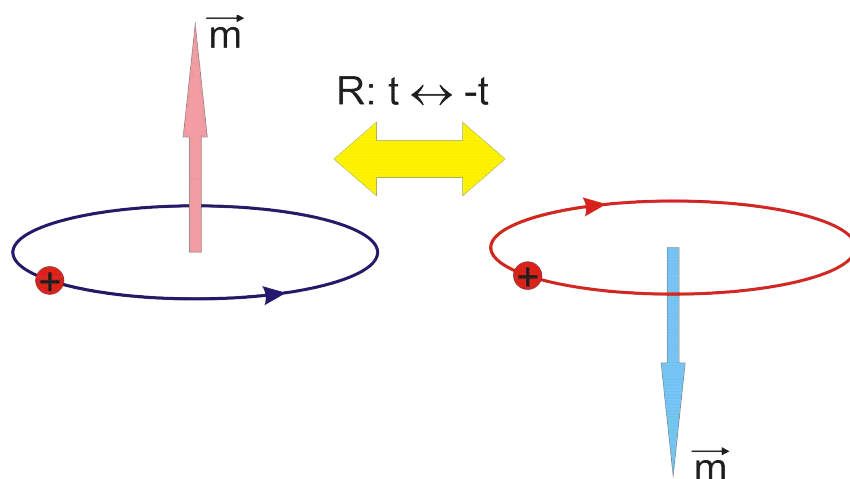


Рисунок 8 Изменение направления магнитного момента витка с током при преобразовании обращения времени.

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, что то же самое, 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.

⁸ Также их называют шубниковскими группами.

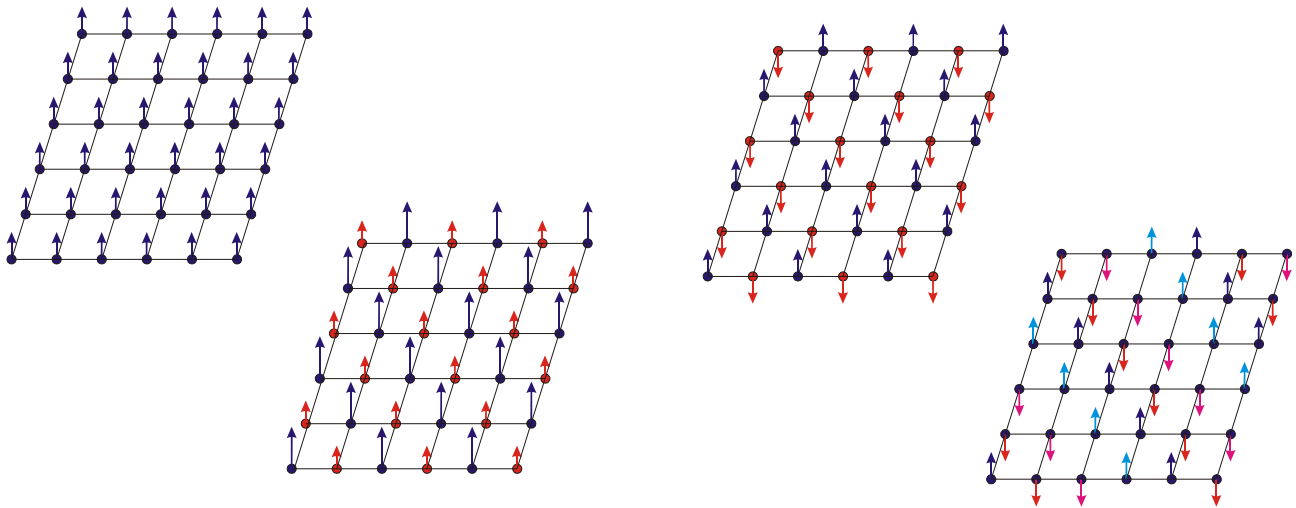


Рисунок 9: Схематическое изображение различных типов упорядочения на двумерной решётке. Цветом выделены элементы одной подрешётки. Слева направо: ферромагнетик, коллинеарный ферримагнетик, коллинеарная антиферромагнитная структура неелевского типа с двумя подрешётками, коллинеарная антиферромагнитная 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 $E \sim \frac{\mu_B^2}{d^3} \sim 0.1\text{K}$. В то же время известно множество магнетиков с температурами упорядочения в десятки и сотни кельвин: температура Кюри для железа 1043K, для никеля 627K, для кобальта 1388K; температура Нееля для NiO 525K, для MnO 116K. 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

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1)) \quad , \quad \text{где знак ``+`` соответствует}$$

антисимметричной спиновой волновой функции состояния со спином $S=0$

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad , \quad \text{а знак ``-`` спиновой волновой функции триплетного}$$

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):

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

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:

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

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.

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 занулятся 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 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

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.

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 [19], а XY-модели на двумерной решётки, как примера системы в которой имеется топологический фазовый переход Березинского-Костерлица-Таулеса [20]. В то же время, имеется множество реальных магнетиков, свойства которых соответствуют таким моделям (см., например, обзор [21], а также примеры в этом пособии).

Модель молекулярного поля.

Магнетик выше температуры упорядочения. Закон Кюри-Вейсса.

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):

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.

$$E = g \mu_B \sum_i \vec{B}_i^{(eff)} g \mu_B \vec{S}_i$$

$$\delta E = -2 g \mu_B \sum_i \vec{S}_i \vec{B}_i^{(eff)}$$

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

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:

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

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

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».

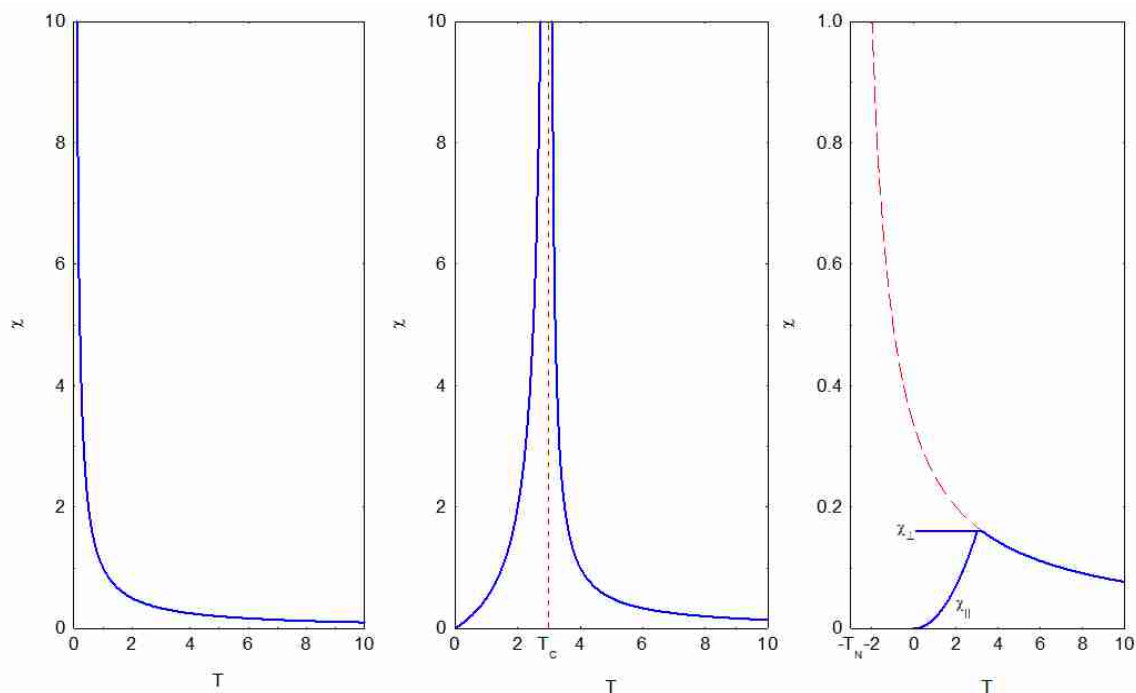


Рисунок 10: Схематическое изображение зависимости магнитной восприимчивости от температуры. Слева направо: парамагнетик (закон Кюри), ферромагнетик, антиферромагнетик. На графике для антиферромагнетика пунктиром построена кривая закона Кюри-Вейса.

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.

Ферромагнетик ниже температуры Кюри

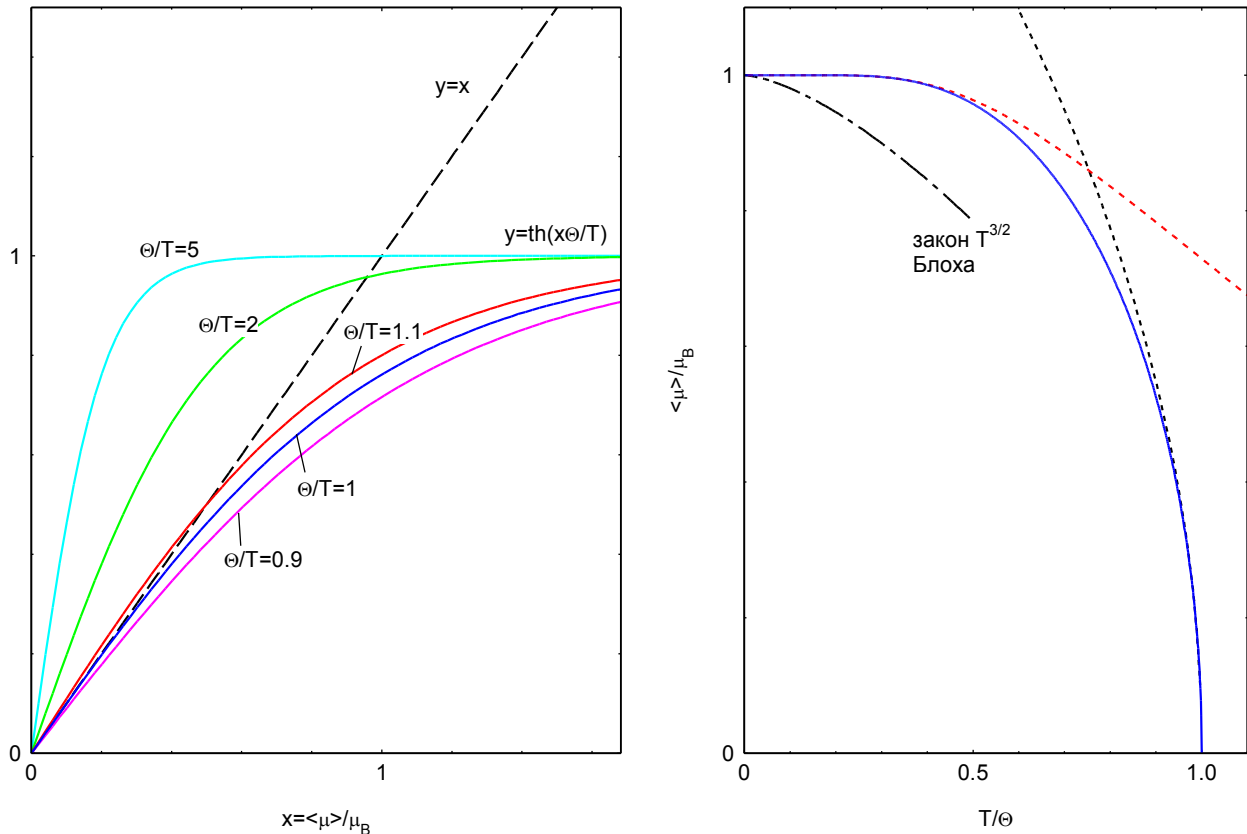


Рисунок 11: (слева) Графическое решение уравнения для намагниченности подрешётки в модели молекулярного поля. (справа) Сплошная линия - зависимость намагниченности подрешётки от температуры в модели молекулярного поля, пунктирные линии - асимптотики при низких температурах и в окрестности перехода, штрих-пунктирная 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 $\langle \mu \rangle = \mu_B \text{th} \left(\frac{\mu_B B^{(eff)}}{T} \right)$. 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 $\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} = \text{th} \left(\frac{\langle \mu \rangle}{\mu_B} \frac{\Theta}{T} \right)$, которое может быть решено

численно или графически (рисунок 11). 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.

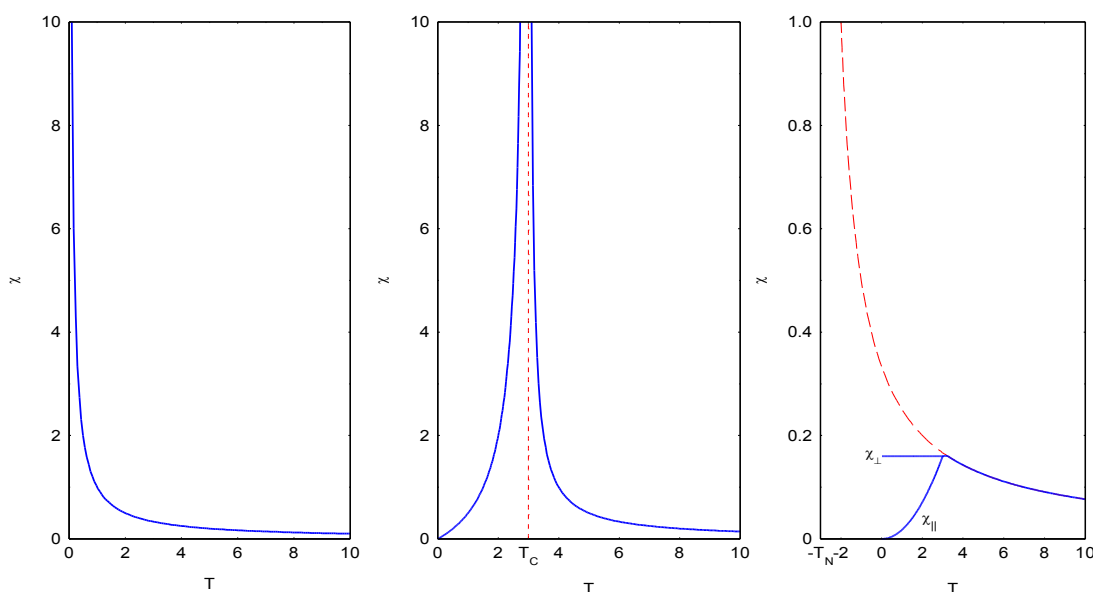


Рисунок 12: Схематическое изображение зависимости магнитной восприимчивости от температуры. Слева направо: парамагнетик (закон Кюри), ферромагнетик, антиферромагнетик. На графике для антиферромагнетика пунктиром построена кривая закона Кюри-Вейса.

Восприимчивость ферромагнетика ниже температуры упорядочения.

При температурах много выше характерного масштаба энергии взаимодействия между

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

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

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 12.

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

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

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

Тогда дифференциальная восприимчивость при $B=0$:

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.

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

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

При $T \ll \Theta$ получаем экспоненциальное обращение восприимчивости в ноль $\chi_{диф} \propto e^{-2\Theta/T}$, 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 показать, что в этом пределе (возвращаем постоянную Больцмана) $\chi_{диф} = \frac{\mu_B^2}{8 k_B (\Theta - T)}$. Этот результат согласуется с ожидаемой расходимостью восприимчивости в точке перехода (рисунок 12).

Восприимчивость и намагниченность коллинеарного антиферромагнетика ниже температуры упорядочения.

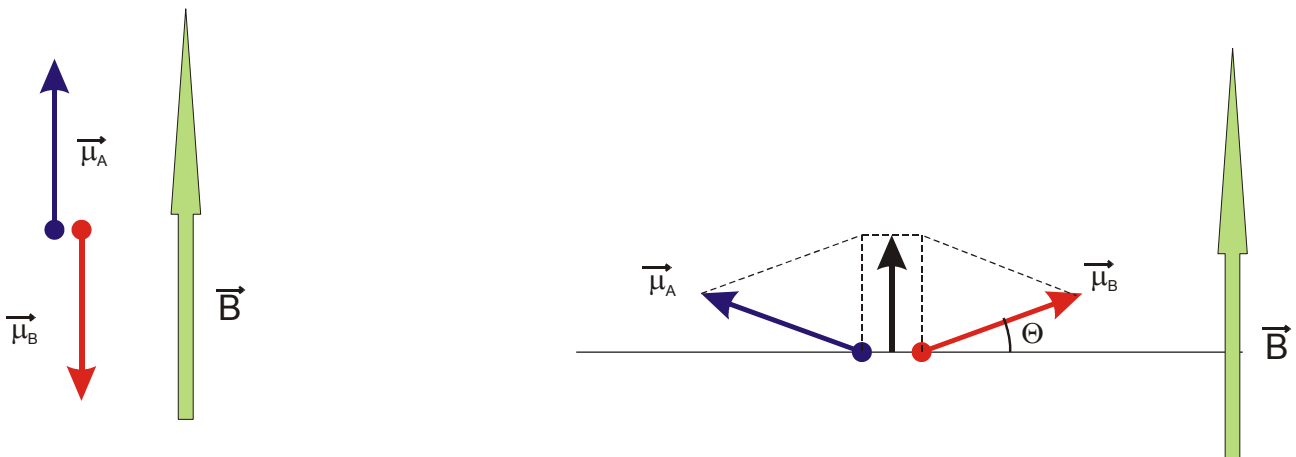


Рисунок 13: Двухподрешёточный антиферромагнетик с легкоосной анизотропией в магнитном поле, приложенном параллельно (слева) и перпендикулярно (справа) лёгкой оси. При рассмотрении антиферромагнетиков в магнитном поле мы ограничимся простейшей моделью двухподрешёточного коллинеарного антиферромагнетика. 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 13). 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 [22] (рисунок 14).

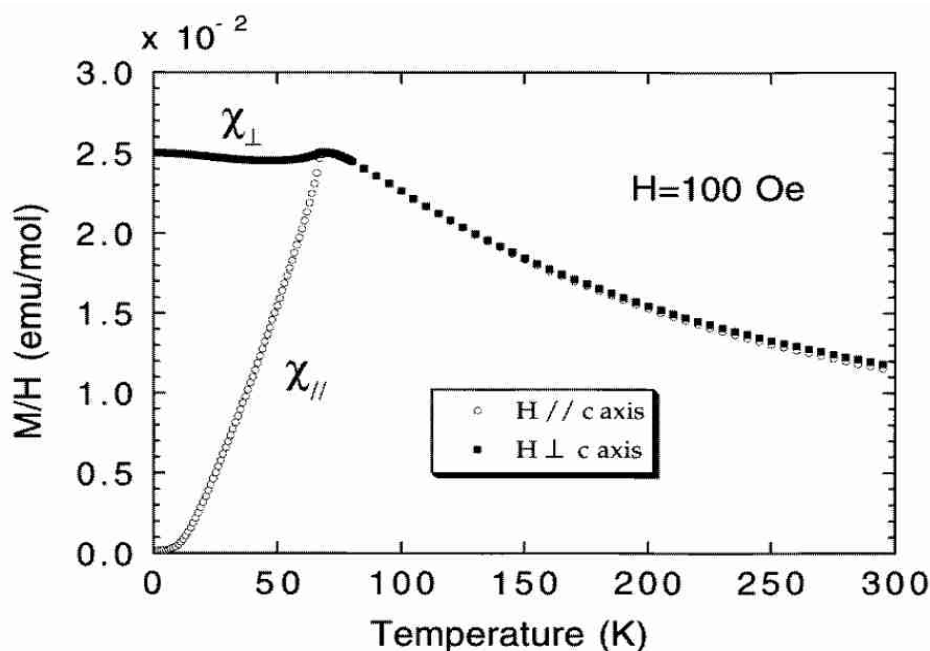


Рисунок 14: Экспериментально измеренная намагниченность антиферромагнетика MnF_2 в двух ориентациях магнитного поля. Из работы [22].

При приложении же поля в перпендикулярном направлении возникает возможность выиграть в зеемановской 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 12. Пример реально измеренной кривой восприимчивости показан на рисунке 14.

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

$$\sin \Theta = \frac{g\mu_B B}{2zJS} \geq 1$$

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 [23] применительно к квазидвумерному антиферромагнетику Cs_2CuCl_4 .

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

$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \vec{S}_{\vec{R}} \vec{S}_{\vec{R}+\vec{\delta}} - g \mu_B H \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z$, здесь $\vec{\delta}$ 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

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

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

$\psi_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0$. 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 $[S^z, S^-] = -S^-$):

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

$$\frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^+ S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) = \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{\sqrt{2S}} \left(S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}'}^+ S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- + 2\delta_{\vec{R}, \vec{R}'} S_{\vec{R}}^z S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- \right) \psi_0 = \frac{1}{2} S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \psi_{\vec{R}+\vec{\delta}},$$

$$\frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^+ \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) = \frac{1}{4} \sum_{\vec{R}', \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{\sqrt{2S}} \left(S_{\vec{R}}^- S_{\vec{R}'}^+ S_{\vec{R}'+\vec{\delta}}^- + 2\delta_{\vec{R}, \vec{R}'+\vec{\delta}} S_{\vec{R}}^z S_{\vec{R}'}^z \right) \psi_0 = \frac{1}{2} S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \psi_{\vec{R}-\vec{\delta}},$$

$$-g \mu_B H \sum_{\vec{R}'} S_{\vec{R}'}^z \left(\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0 \right) = [-N g \mu_B H S + g \mu_B H] \psi_{\vec{R}},$$

то есть

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

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 подученный результат для модельной одномерной спиновой цепочки:

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

Для антиферромагнетика ($J > 0$) энергия возбуждения минимальна при $ka = \pm \pi$:

$\epsilon_{min} = g\mu_B H - 4SJ$. 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.

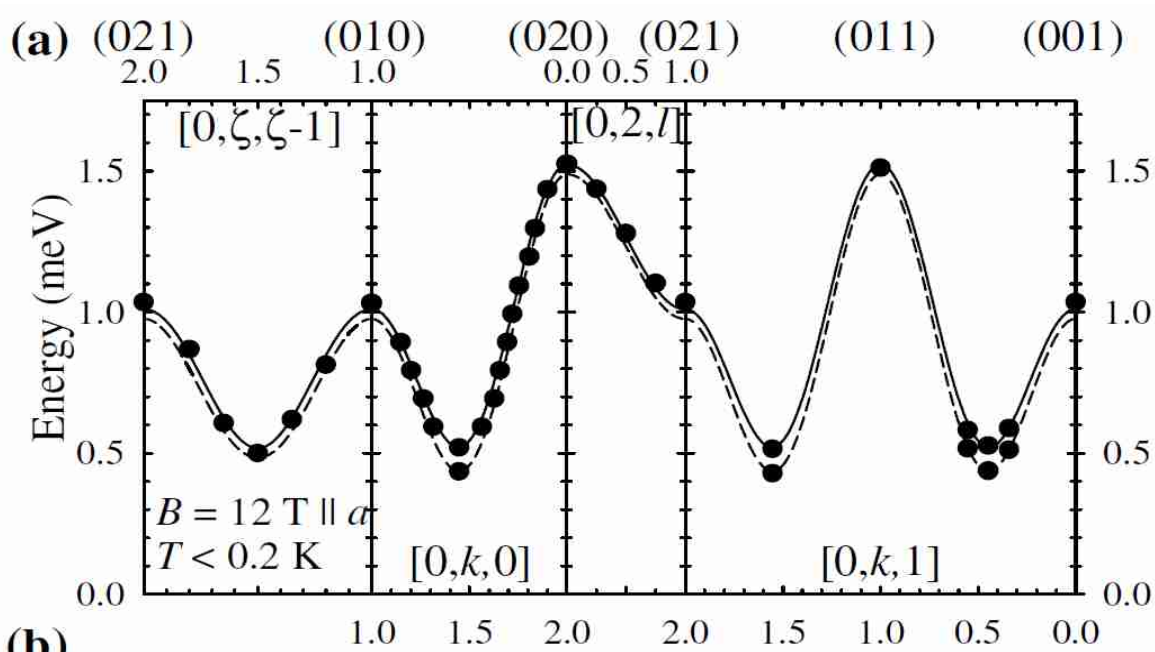


Рисунок 15: Спектр одночастичных возбуждений в антиферромагнетике Cs_2CuCl_4 выше поля насыщения. Пунктирная и сплошная линия соответствуют двум магннным ветвям, расщеплённым из-за наличия дополнительных взаимодействий. Из работы [23].

В работе [23] были измерены сечения спектра возбуждений вдоль нескольких направлений для квазидвумерного антиферромагнетика Cs_2CuCl_4 (рисунок 15). 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.

Спиновые волны

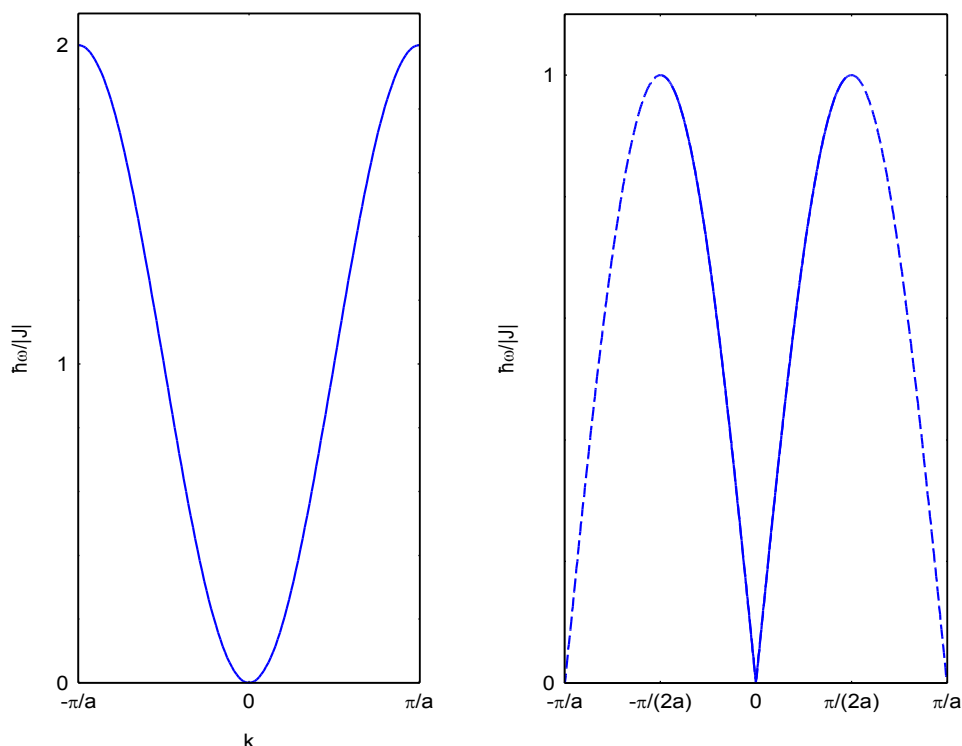


Рисунок 16: Вычисленные в классическом приближении для цепочки спинов спектры спиновых волн в ферромагнетике (слева) и в антиферромагнетике (справа). Для антиферромагнетика сплошной линией показан спектр в магнитной первой зоне Бриллюэна, пунктиром спектр продолжен по кристаллографической первой зоне 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 16). 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. [24], глава VII), что такое отличие в спектрах связано именно с макроскопическим различием ферро- и антиферромагнетиков.

Элементарные возбуждения ферромагнетика

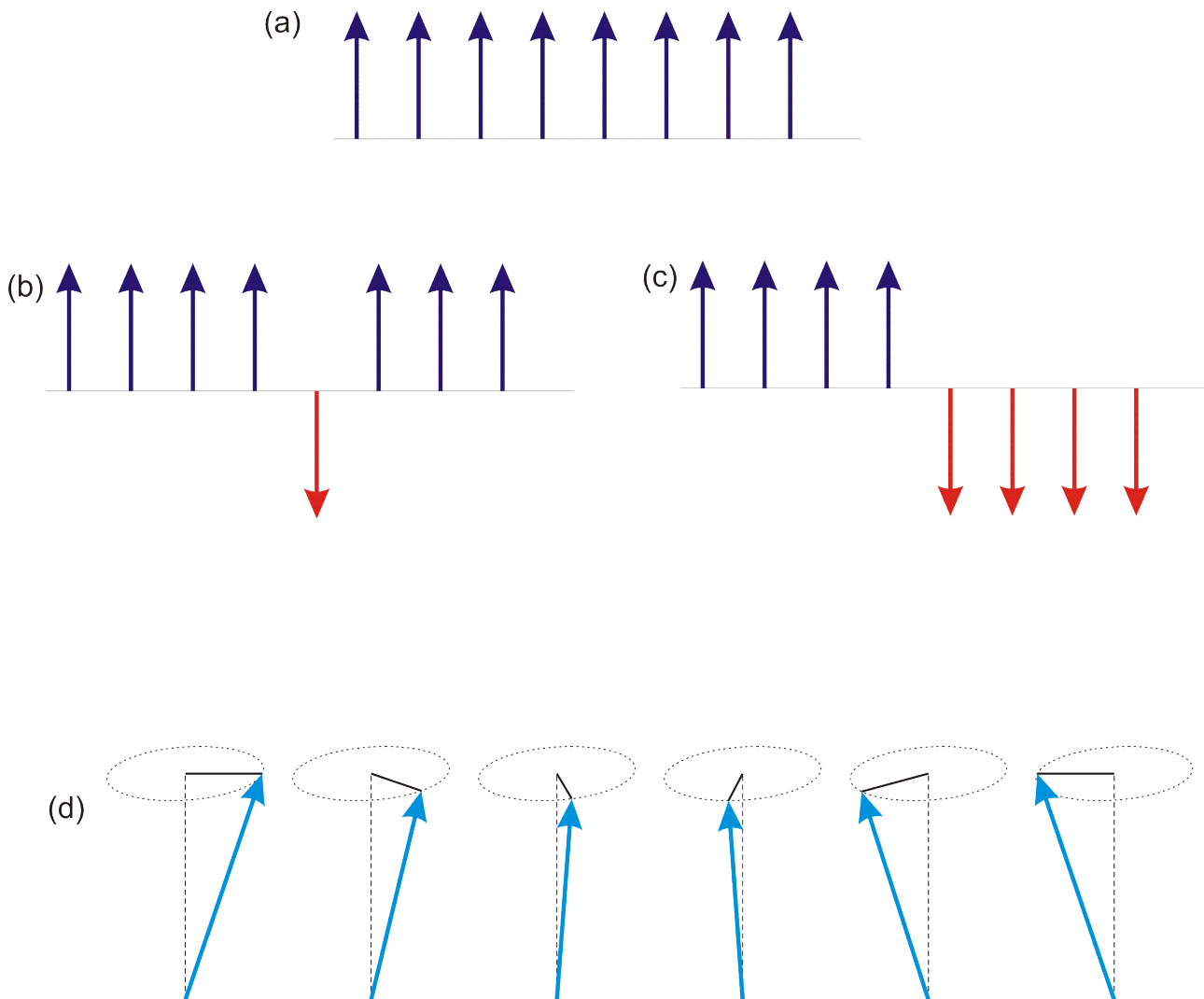


Рисунок 17 К построению элементарного возбуждения ферромагнетика. (a) основное состояние ферромагнитной цепочки, (b) возбуждённое состояние с перевёрнутым спином на одном из узлов, (c) возбуждённое состояние типа доменной стенки, (d) спиновая волна.

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 17-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 17-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 17-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 17-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:

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

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 малой¹⁴ увеличением периода волны (уменьшением φ) и уменьшением угла отклонения Θ . Возбуждения такого типа называют спиновыми волнами.

Спектр спиновых волн в ферромагнетике. Классическое рассмотрение.

Рассмотрим модельную задачу ферромагнитно упорядоченной цепочки спинов¹⁵ 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 линейризуется:

¹⁴ Дополнительно можно отметить, что при выборе периодических граничных условий минимальное значение

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

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

¹⁵ 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.32).

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

Здесь можно уменьшить число уравнений, перейдя к комплексным переменным¹⁶
 $S^\pm = S^x \pm i S^y$:

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

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

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

График этой зависимости представлен на рисунке 16. 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 (кванта таких колебаний) $\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} = \frac{2|J|Sa^2}{\hbar^2}$. 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.

16 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:

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

Спиновые волны в ферро- и ферримагнетиках: эксперимент.

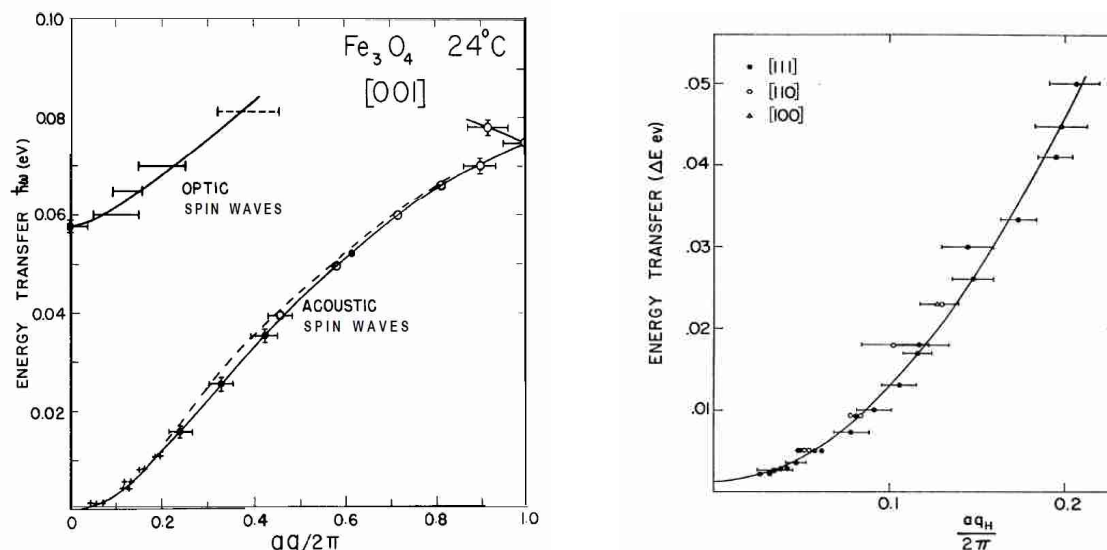


Рисунок 18: Слева: Спектр спиновых волн в ферримагнитном магнетите Fe_3O_4 . Из работы [25]. Справа: спектр спиновых волн в ферромагнитном сплаве FeCo . Из работы [26].

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 [26] и на ферримагнитном магнетите Fe_3O_4 [25] (рисунок 18). 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.

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 $M_{\text{sat}} = N g \mu_B S$, 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 $\Delta m = g \mu_B$.¹⁷ 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 системе¹⁸ $\omega(\vec{k}) = \frac{2|J|S}{\hbar} (3 - (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)))$, 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: $E = \int_{1 \text{ з.б.р.}} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}$.

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 $C \propto T^{3/2}$. Экспериментально такое поведение наблюдалось в работе [27], пример температурной зависимости теплоёмкости представлен на рисунке 19.

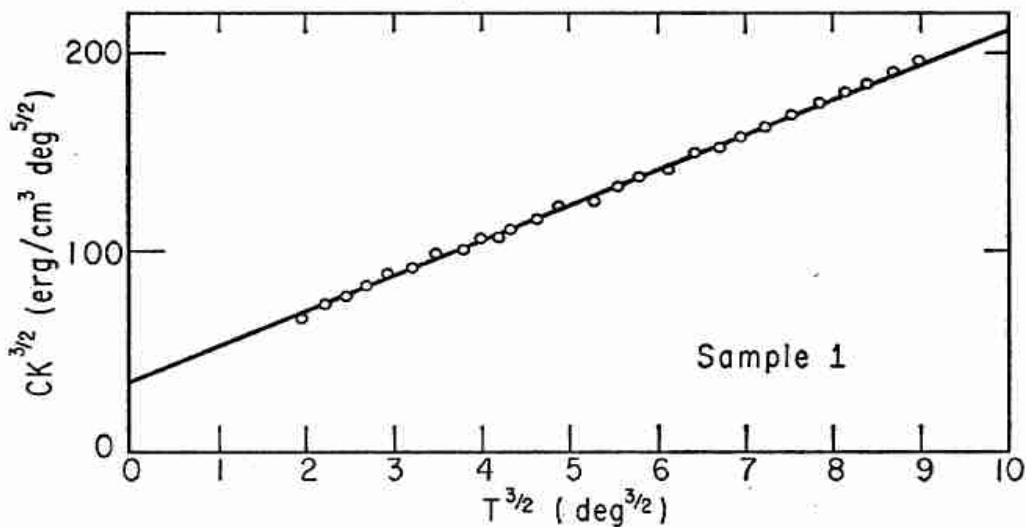


Рисунок 19: Экспериментальная проверка предсказания спин-волновой теории для ферромагнетика, из работы [27]. Исследовался образец железо-итриевого граната, температура Кюри около 550К. По оси X отложена $T^{3/2}$, по оси Y произведение $CT^{3/2}$: в таких координатах сумма магнонного и фононного вклада в теплоёмкости $C_{\text{полн}} = aT^{3/2} + bT^3$ должна преобразовываться в прямую.

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

18 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 магноны приводят к уменьшению спонтанной намагниченности ферромагнетика. Это уменьшение при низких температурах:

$$\Delta M = g \mu_B \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} = \frac{V g \mu_B}{2 \pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{e^{|J|Sa^2 k^2/T} - 1} = \frac{V g \mu_B}{4 \pi^2} \left(\frac{T}{|J|Sa^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1} \propto T^{3/2}.$$
 Этот результат известен под названием закона $T^{3/2}$ Блоха.¹⁹

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 [29]) представлен на рисунке 20.

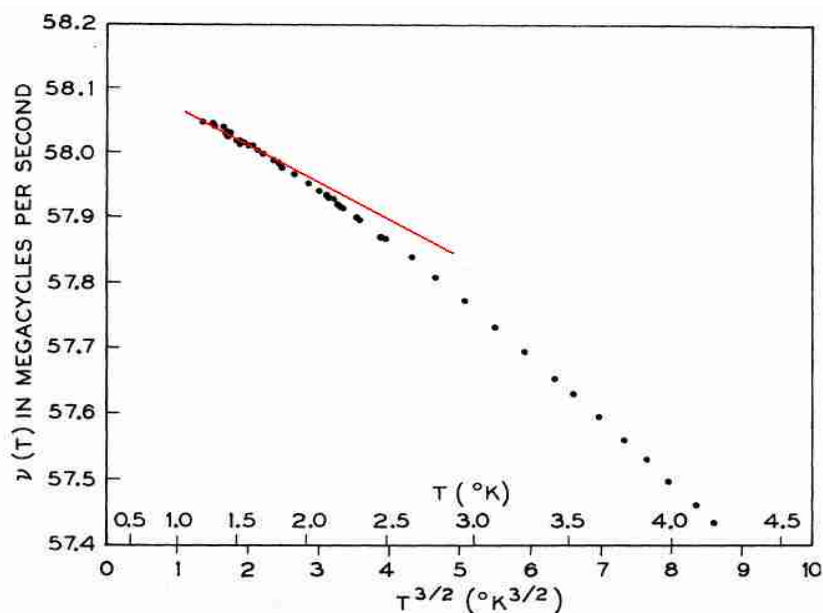


Рисунок 20: Пример экспериментальной проверки закона Блоха, из работы [29]. Символы — данные эксперимента, красная линия — закон Блоха 3/2. CrBr_3 , $T_C = 37\text{K}$.

В работе [29] 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.

¹⁹ 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 [28] показано, что первые члены разложения имеют вид:

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

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.

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.23) [28] включением слагаемого $T^{5/2}$, описывающего отклонение от квадратичного спектра магнонов.

Переход Березинского-Костерлица-Таулеса в двумерном XY-ферромагнетике

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

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y), \text{ здесь угловые скобки в индексах суммы обозначают, что каждая}$$

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 [20], классический XY-ферромагнетик ($J < 0$) на квадратной решётке с взаимодействием только ближайших соседей.

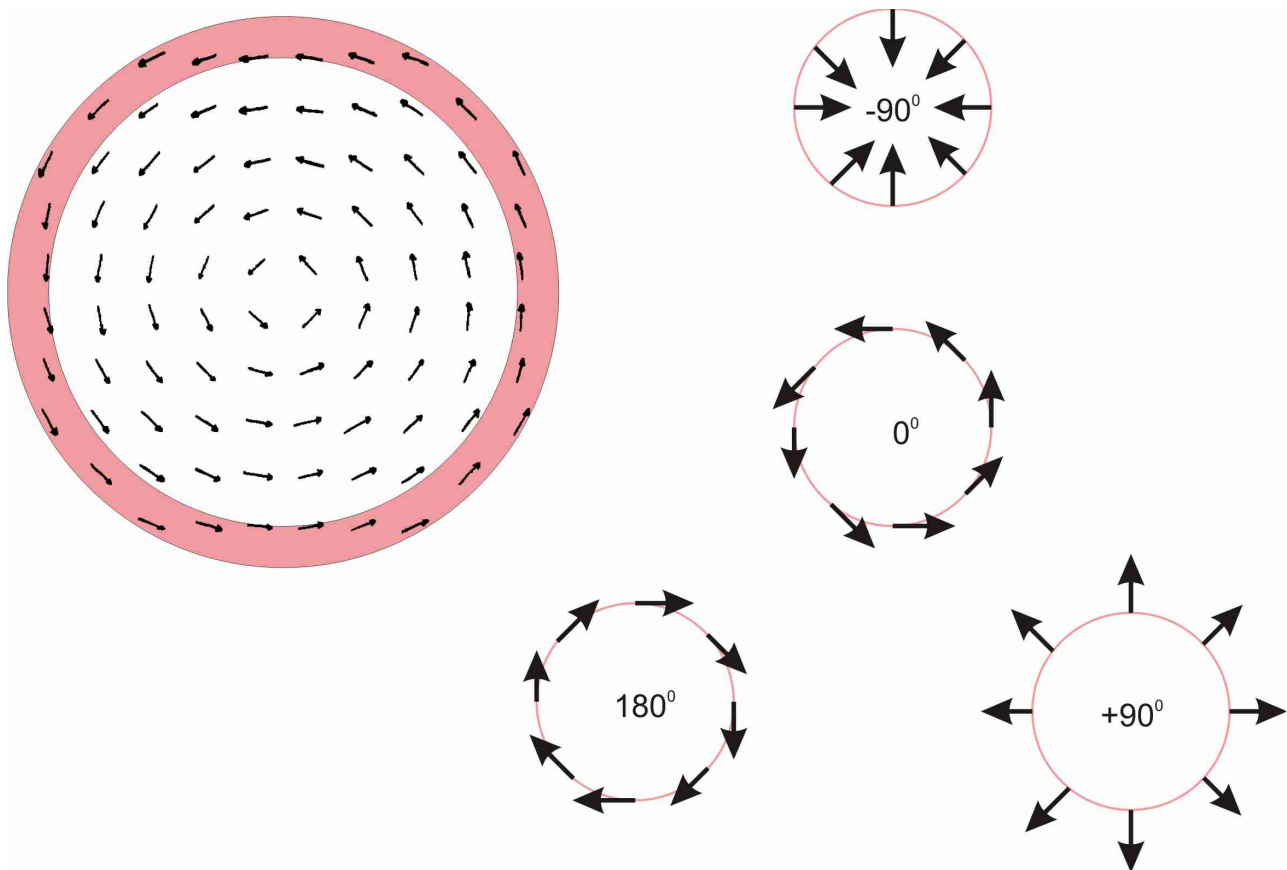


Рисунок 21: Вихрь в XY-магнетике (на основе рисунка из статьи [20]). Слева: распределение ориентаций спинов на решётке. Справа: иллюстрация получения эквивалентных по энергии ориентаций спинов при одновременном повороте всех спинов на один угол. В центре круга указан угол поворота.

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

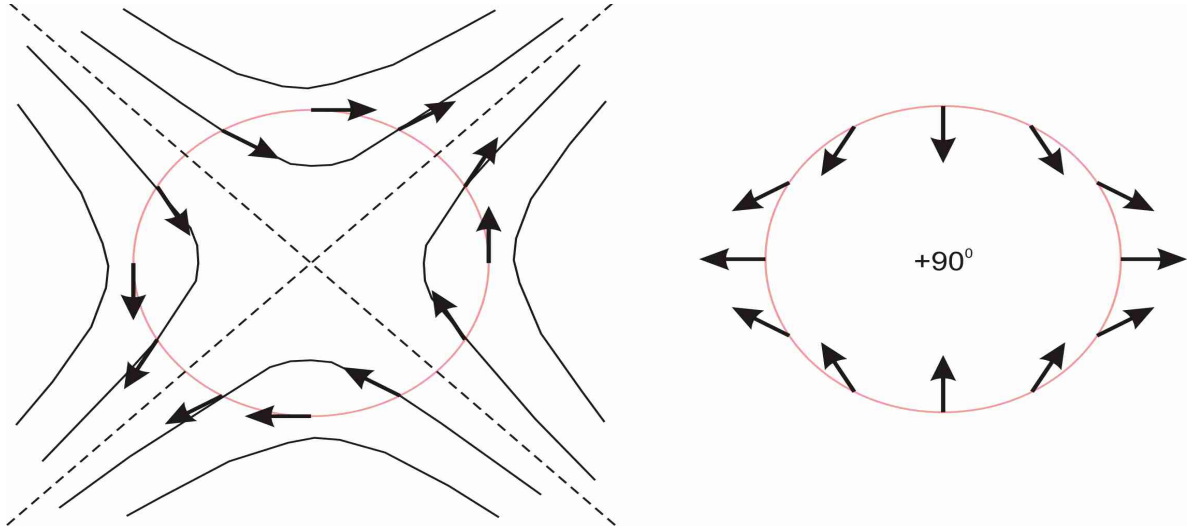
$$E = E_0 - \frac{J}{2} \sum_{\langle j, j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 .$$


Рисунок 22 Построение конфигурации типа антивихря для XY-ферромагнетика. Слева: один из вариантов конфигурации и схема семейства огибающих. Справа: изменение конфигурации при одновременном повороте спиновых векторов.

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

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 22. 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».

Конфигурация вихря или антивихря является топологическим дефектом ХУ-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.²⁰

20 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».