

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Мы эксплуатируем гамильтониан Гейзенберга. Его форма - требует строгого доказательства, однако интуитивно мы его понимаем. Все зависимости от координат зашиты в константе.

В первом приближении мы посчитали спины просто векторами. Вообще мы можем вводить классическое описание далеко не всегда. Получились у нас уравнения движения в формализме скобок Пуассона, вместо коммутаторов.

Мы смогли получить некоторые особенности поведения таких систем из связанных спиновых частиц. Например смогли получить характер намагниченности и спиновые волны. На самом деле 1D цепочка спинов неустойчива.

А что нам даст квантовое рассмотрение?

При квантовом рассмотрении в гамильтониане Гейзенберга \hat{S}_i - оператор спина, действующий в пространстве спиноров, действующий на i -ом узле. Эти функции - функции столбцы, имеющие $2S_0 + 1$ компонент. S_0 - максимальное значение проекции спина на ось квантования. Матричные элементы операторов \hat{S}_i - аналогичны рассмотренным в самом начале.

Вернемся к обычной квантовой механике - к матричной её части. Вместо функций там столбцы, а вместо операторов - матрицы. А что есть базис? И нам нужно ещё знать, как оператор действует на этот базис. В нашем случае: $|Y_{i,S_0,M_S}\rangle$. Здесь i - номер частицы, S_0 - максимальное возможное значение проекции спина, M_S - точное значение проекции спина в данном случае. В данном случае:

$$\hat{S}_i^2 |Y_{i,S_0,M}\rangle = S_0(S_0 + 1) |Y_{i,S_0,M}\rangle; \quad (1)$$

$$\hat{S}_{iz} |Y_{i,S_0,M}\rangle = M_S |Y_{i,S_0,M}\rangle; \quad (2)$$

И аналогично обычной квантовой механике можно ввести:

$$\hat{S}_{i-} |Y_{i,S_0,M}\rangle = \sqrt{(S_0 + M)(S_0 - M + 1)} |Y_{i,S_0,M-1}\rangle; \quad (3)$$

$$\hat{S}_{i+} |Y_{i,S_0,M}\rangle = \sqrt{(S_0 - M)(S_0 + M + 1)} |Y_{i,S_0,M+1}\rangle; \quad (4)$$

Вместо $|Y_{i,S_0,M_S}\rangle$ введём $|n_i\rangle$ - это спиновая функция, описывающая состояние i -ого спина с определённой проекцией на ось OZ . Тогда $M_{is} = S_0 - n_i$. Оно принимает значение: $n_i = 0, 1, 2, \dots$, такие что $M_s = S_0 \dots - S_0$. Удобно ввести оператор:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle; \quad (5)$$

$$\hat{a}_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle; \quad (6)$$

Для этих операторов справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{a}_i; \hat{a}_i^\dagger] = 1; \quad (7)$$

Это привычные нам орператоры рождения и уничтожения. Они часто применяются в многочастичных задачах или, например, в параболической яме. Используя их можно ввести оператор отклонения спина:

$$\hat{n}_i = s_0 - \hat{M}_{is} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i; \quad (8)$$

В таком случае получим:

$$\begin{aligned} \hat{S}_{i-} |Y_{i,S_0,M_S}\rangle &= \hat{S}_{i-} |n_i\rangle = \sqrt{(S_0 + M_{is})(S_0 - M_{is} + 1)} |n_i + 1\rangle = \\ &= \sqrt{(2S_0 - n_i)(n_i + 1)} |n_i + 1\rangle = \sqrt{2S_0 \hat{a}_i^\dagger} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_i}{2S_0}} |n_i\rangle; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{i+} |Y_{i,S_0,M_S}\rangle &= \hat{S}_{i+} |n_i\rangle = \sqrt{(S_0 + M_{is} + 1)(S_0 - M_{is})} |n_i - 1\rangle = \\ &= \sqrt{2S_0} \sqrt{1 - \frac{n_i - 1}{2S_0}} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle = \sqrt{2S_0} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_i}{2S_0}} \hat{a}_i |n_i\rangle; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\hat{S}_{iz} = S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i; \quad (11)$$

И мы хотели бы эту гадость линеаризовать. Если мы заинтересуемся состояниями, в которых M_s мало отличается от S_0 , тогда $n_i \ll 2S_0$, тогда мы имеем:

$$\hat{S}_{i+} \approx \sqrt{2S_0} \hat{a}_i; \quad (12)$$

$$\hat{S}_{i-} \approx \sqrt{2S_0} \hat{a}_i^\dagger; \quad (13)$$

Тогда гамильтониан Гейзенберга может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} &= -\frac{1}{2} J \sum_i (S_0 \hat{a}_i \hat{a}_{i+1}^\dagger + S_0 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + S_0 \hat{a}_i \hat{a}_{i-1}^\dagger + S_0 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i-1}) \\ &\quad - \frac{1}{2} J \sum_i (S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)(S_0 - \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_{i+1}) - \frac{1}{2} J \sum_i (S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)(S_0 - \hat{a}_{i-1}^\dagger \hat{a}_{i-1}); \end{aligned} \quad (14)$$

Причем мы рассматриваем только ближайших соседей. Перейдём в Фурье-представление (N - число спинов в цепочке, R_i - дискретная координата спина):

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k e^{ikR_i}; \quad (15)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k^\dagger e^{-ikR_i}; \quad (16)$$

Тогда вместо 14 мы имеем:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} &= -\frac{1}{2} J \sum_k ((\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)(e^{ika} + e^{-ika}) + (\hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger)(e^{ika} + e^{-ika})) \\ &\quad + 2S_0 J \sum_k ((\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 JN) \end{aligned} \quad (17)$$

Чуть-чуть приведя:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_k J(2S_0)(1 - \cos ka)(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 JN; \quad (18)$$

И окончательно можно видеть:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_k \hbar \omega_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 J N = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k - S_0^2 J N; \quad (19)$$

А дисперсионка тут:

$$\omega_k = \frac{2S_0 J}{\hbar} (1 - \cos ka); \quad (20)$$

Это очень похоже на фононы. Константный член в уравнении 19 - соответствует энергии в основном состоянии, а член $\hbar \omega_k \hat{n}_k$ - описывает возбуждение волны с частотой ω_k , \hat{n}_k - определяет энергию такой волны.

Заметим, что 20 в точности совпадает с дисперсионным соотношением, полученным при классическом рассмотрении. В линейном разложении:

$$\omega_k \approx \frac{S_0 J a^2}{\hbar} k^2; \quad (21)$$

В таком случае операторы \hat{a}_k , \hat{a}_k^\dagger можно воспринимать, как операторы рождения и уничтожения кванта магнитной волны. такие кванты называются магнонами.

Так как \hat{a}_i , \hat{a}_i^\dagger - бозевские операторы, то и в случае волновых аналогов они тоже бозевские. таким образом в состоянии термодинамического равновесия:

$$n_k = (e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1)^{-1}; \quad (22)$$

А что с химпотенциалом? Это не обычные частицы. Их число не фиксированно, тогда их химпотенциал равен нулю.

Используя 22 вычислим термодинамически равновесную намагниченность цепочки спинов.

$$N S_z = N S_0 - \langle \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = N S_0 - \int_0^\infty \frac{dk}{e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1} \frac{N a}{2\pi}; \quad (23)$$

При малых T число магнонов с большими k экспоненциально мало. Поэтому верхний предел заменён на ∞ . Так как в случае цепочки $\omega_k \sim k^2$, то интеграл 23 расходится в нижнем пределе. Это значит, что при сколь угодно малой температуре не может реализоваться ферромагнитное упорядочение в магнитной цепочке.

Проведённые нами рассуждения для цепочки можно провести и для 2D, и для 3D объектов спина. Закон дисперсии получился прежним: $\omega_k \sim k^2$, $ka \ll 1$. Тогда для 2D этот интеграл также разошёлся бы.

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle_{2D} \sim \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1} \frac{N a^2}{(2\pi)^2}; \quad (24)$$

Таким образом на плоскости не возможен ферромагнетизм. Естественно перейти к тому, что встречается в природе само по себе. А именно к 3D случаю. Там такой интеграл не расходится: Рассмотрим для начала гамильтониан (здесь суммирование по импульсу):

$$\hat{H}_{ex} = \frac{1}{2} z J_0 a^2 k^2 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \frac{1}{2} N z J^2 S \quad (25)$$

$$\omega_k \approx \frac{1}{2\hbar} z J S_0 a^2 k^2; \quad (26)$$

В таком случае среднее значение:

$$NS_z = NS_0 - \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{T}} - 1} \frac{Na^3}{2\pi^3} = NS_0 \left(1 - \frac{T^{3/2}}{2^{-1/2}\pi^2 z^{3/2} S_0^{5/2} J^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} \right); \quad (27)$$

Тогда с увеличением температуры у нас уменьшается упорядочение. 27 описывает изменение намагниченности трёхмерного ферромагнетика при низких температурах, обусловленные возбуждением спиновых волн (газа магнонов). Магноны ведут себя как идеальный газ - это следствие нашей линеаризации.

Теплоемкость газа магнонов. В рассматриваемом приближении газ магноно идеален. В состоянии термодинамического равновесия его энергия в соответствии с 19:

$$E_m = \sum_k \hbar\omega_k n_k \approx \int_0^\infty \frac{\hbar\omega_k}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{T}} - 1} \frac{4\pi k^2 Na^3 dk}{(2\pi)^2} = \frac{NT^{5/2}}{2^{-1/2}\pi^2 (zJS_0)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{e^{x^2} - 1}; \quad (28)$$

Из 28 мы вычислим магнонную теплоёмкость:

$$C_m = \frac{\partial E_m}{\partial T} \sim T^{3/2}; \quad (29)$$

Таким образом теплоемкость металла, кроме теплоёмкости электронной и фононной части, содержит ещё и магнонную.

Мы говорим в основном про ферромагнетизм, но есть ещё и антиферромагнетизм. Там закон дисперсии для магнона другой. В остальном все похоже.

15 Релятивистские взаимодействия в ферромагнитном кристалле.

Обменное взаимодействие, описываемое гамильтонианом Гейзенберга является электростатическим по своей природе. Описание ферромагнетика приводит к тому, что за основное состояние мы принимаем такое, в котором все спины сонаправлены и направлены вдоль любой оси. Т.е. оси, направленной произвольно, относительно кристаллографических осей кристалла. Однако обменное взаимодействие не единственное взаимодействие в ферромагнетике. Учтём релятивистские, спин-спиновые и спин-орбитальные взаимодействия.

Спин-спиновое (дипольное) взаимодействие - энергия взаимодействия пары спинов уже была записана. В классической электродинамике, такое взаимодействие называется диполь-дипольным. Поэтому о соответствующей энергии говорят, как об энергии дипольного взаимодействия.

Важно подчеркнуть, что такое взаимодействие ведёт себя по закону $\sim 1/r^3$.

Рассмотрим это взаимодействие. Энергия каждой такой пары зависит от ориентации относительно прямой их соединяющей.

Такие прямые в кристалле обусловлены кристаллической решёткой. поэтому энергия дипольного взаимодействия зависит от ориентации намагниченности материала, относительно кристаллографических направлений. На лицо анизотропия. Можно показать, что в приближении сплошной среды выражение для энергии диполь-дипольного взаимодействия имеет вид:

$$E_m = -\frac{1}{2} \int_V d^3\vec{r} (\beta_{\alpha\gamma} M_\alpha(\vec{r}) M_\gamma(\vec{r}) + \frac{4\pi}{3} \vec{M}^2(\vec{r}) + \vec{M}(\vec{r}) \vec{H}_m(\vec{r})); \quad (30)$$

Здесь M - плотность магнитного момента, α, γ - координаты, $\beta_{\alpha\gamma}$ - тензор, зависящий от структуры кристалла.

Первый член 30 описывает эффекты анизотропии. Его Учёт объясняет взаимодействие между близкими спинами, а уже остальные члены связаны с дальнедействующим характером диполь-дипольного взаимодействия. Поэтому они не связаны с симметрией кристалла.

$\vec{\mathcal{H}}_m$ - напряжённость магнитного поля, соответствующая заданному распределению.

$$\mathbf{rot} \vec{\mathcal{H}}_m = 0; \quad (31)$$

$$\mathbf{div} (\vec{\mathcal{H}}_m + 4\pi\vec{M}) = 0; \quad (32)$$

Спин-орбитальное взаимодействие. По поводу спин-орбитального взаимодействия можно заметить следующее. В изолированном атоме энергия спин-орбитального взаимодействия определяется взаимной ориентацией спинового и орбитального моментов (LS связь).

И в атоме распределение электронной плотности в пространстве определяется \vec{L} . В кристалле же симметрия в распределении электронной плотности определяется симметрией кристалла. Поэтому в кристалле спин орбитальное взаимодействие определяется ориентацией спинового момента относительно кристаллографических осей.

Можно показать, что *эффективный гамильтониан взаимодействия между спинами*, обусловленный спин-орбитальным взаимодействием записывается в виде:

$$\hat{H}_{se} \sim \sum_{ij} \beta_{\alpha\gamma}(\vec{r}_{ij}) S_{i\alpha} S_{j\beta}; \quad (33)$$

Снова этот тензор оказывается привязанным к кристаллографическим направлениям. Гамильтониан 33 получен исключением орбитальных переменных и потому зависит лишь от спинов. Информация об орбитальных переменных содержится в тензоре и определяется симметрией кристалла.