

ВРАЩАТЕЛЬНАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ И МЕХАНИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В ТЕОРИИ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН.*

Ю.Н.Мицай, доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. КАН,
А.Н.Майорова, Ю.А.Фридман, кандидат физико-математических наук, доцент

Изучение динамических проявлений магнитоупругой связи имеет принципиальное значение в теории магнетизма. Во-первых, спин-решеточное взаимодействие определяет связь магнитных и механических (упругих, акустических, стрикционных и т.д.) характеристик системы. Во-вторых, магнитоупругие взаимодействия, как правило, кардинально меняют характер поведения системы при магнитных фазовых переходах. В частности, магнитоупругая связь может полностью подавить аномальные критические флуктуации в точке фазового перехода второго рода и заблокировать появление доменной структуры в диссимметричной фазе. Более подробно различные качественные аспекты влияния спин-решеточной связи на характер критического поведения системы, а также на другие физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов описаны в [1].

Теоретические исследования динамических проявлений магнитоупругой связи велись до настоящего времени в рамках двух взаимно дополняющих друг друга подходов. Первый подход основан на общей гидродинамической теории. Такой подход является строгим (точнее, безмодельным), однако область его применения ограничена низкими частотами и большими длинами волн. Кроме того, чисто гидродинамический подход позволяет в общем случае исследовать лишь акустические и упругие свойства, но не спиновую динамику.

Второй подход также принято называть феноменологическим, однако он уже существенно использует конкретные динамические уравнения для описания спиновой системы, обычно это уравнения Ландау-Лифшица либо некоторая их модификация. Последнее обстоятельство существенно расширяет область применимости теории в смысле частот и длин волн, а также позволяет исследовать динамику в спиновой системе. Тем не менее, использование квазиклассических методов при описании спиновой динамики допустимо отнюдь не для всех систем. В частности, такой подход не применим к системам с сильной одноионной анизотропией, поскольку в этом случае невозможно обойтись без явного учета квантовых состояний магнитных ионов в кристаллическом поле. С другой стороны, именно в таких системах следует ожидать особенно сильные магнитоупругие эффекты [2].

Настоящая работа как раз и посвящена анализу магнитоупругой связи в магнетиках с мощной квантовой одноионной анизотропией. С самого начала мы будем последовательно учитывать как квантовые одноионные эффекты, так и эффекты нарушенной вращательной инвариантности магнитоупругой энергии системы, находящейся в магнитном поле.

На необходимость построения вращательно инвариантной теории магнитоупругих волн обращают внимание довольно давно [3,4]. Основным результатом в этой теории — предсказание нового механизма магнитоупругой связи. Качественно этот механизм можно понять следующим образом. При прохождении упругой волны через магнитный кристалл элементарная ячейка не только изменяет свой объем, но и испытывает сдвиговые деформации. В результате изменяется положение локальных осей магнитной анизотропии, пространственная ориентация которых определяет равновесное направление магнитного момента.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного комитета по вопросам науки и технологии. Проект № 2.3/687.

Таким образом, даже в отсутствии стандартной магнитоупругой связи, связь между магнитной и упругой подсистемами будет обеспечиваться за счет энергии анизотропии в гамильтониане.

Механические граничные условия, обусловленные способом закрепления образца, существенно влияют на структуру спонтанных деформаций в магнитном диэлектрике, что в свою очередь определяет основные характеристики спектров связанных магнитоупругих волн и типы фазовых переходов между магнитоупорядоченными фазами.

Рассмотрим описанные выше эффекты на примере модели ферромагнетика с одноионной анизотропией типа "легкая плоскость".

Как известно, [2], для такого ферромагнетика возможна реализация трех магнитных фаз при изменении магнитного поля, если $\beta_4 \geq I(0)$. Квадрупольная фаза (КУ) реализуется в интервале полей $0 < H < H_{c_1}$, квадрупольно-ферромагнитная (КФМ), или угловая фаза при $H_{c_1} < H < H_{c_2}$ и ферромагнитная фаза (ФМ) - при $H > H_{c_2}$, где

$$H_{c_2} \sim \beta/2, \text{ а } H_{c_1} \sim \sqrt{\beta \left(\beta/4 - I(0) \right)}.$$

Гамильтониан такой системы, с учетом вращательной инвариантности можно представить в виде:

$$\begin{aligned} H = & -H \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}^z + \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{n}} \left(\mathbf{R}_{z\mathbf{i}}^{-1} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^i \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} I(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \vec{S}_{\mathbf{n}} \cdot \vec{S}_{\mathbf{n}'} + \nu \cdot \\ & \cdot \sum_{\mathbf{n}} \left(\mathbf{R}_{\mathbf{if}}^{-1} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^i \right) \left(\mathbf{R}_{\mathbf{ig}}^{-1} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^g \right) \xi_{\mathbf{ij}}(\mathbf{n}) + \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{\lambda + \eta}{2} (\xi_{xx}^2 + \xi_{yy}^2 + \xi_{zz}^2) + \eta (\xi_{xy}^2 + \xi_{xz}^2 + \xi_{zy}^2) + \right. \\ & \left. + \lambda (\xi_{xx} \xi_{yy} + \xi_{xx} \xi_{zz} + \xi_{yy} \xi_{zz}) \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \mathbf{R} - оператор локальных поворотов, который через компоненты тензора дисторсии $\frac{\partial U_i}{\partial x_j}$ выражается следующим образом.

$$\mathbf{R}_{ij}^{-1} = \delta_{ij} - w_{ij} + \frac{1}{2} w_{ij}^2 + \frac{1}{2} (U_{ik} w_{kj} + w_{ik} U_{kj}) + o(U_{ij}^2)$$

$$U_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \text{симметричная часть тензора деформации};$$

$$w_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \text{антисимметричная часть тензора деформации};$$

$\xi_{ij} = U_{ij} + \frac{1}{2} (U_{ik} - w_{ik})(U_{kj} + w_{kj})$ - компоненты тензора конечных деформаций.

Кроме того в (1) введены следующие обозначения: H - внешнее магнитное поле; $\beta > 0$ - константа одноионной анизотропии; $I(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ - обменный интеграл; $S_{\mathbf{n}}^{\alpha}$ - спиновый оператор в узле \mathbf{n} , ν - константа магнитоупругой связи; λ , η - упругие модули. Далее бу-

дем считать, что спин магнитного иона равен единице. Теория может быть обобщена на случай произвольного спина.

Первые три слагаемых в (1) описывают магнитную подсистему, пятое слагаемое - упругую, а четвертое - стандартное описание магнитоупругой связи, которая для простоты вычислений выбрана изотропной.

Конкретные вычисления будем производить в рамках формализма операторов Хаббарда [5,6]. В терминах хаббардовских операторов удастся точно учесть как энергию анизотропии, так и энергию магнитоупругой связи в нулевом гамильтониане. Построенная теория справедлива при произвольных температурах, вплоть до температуры Кюри.

Хаббардовские операторы строятся в базисе волновых функций, являющихся решением одноионной задачи

$$H_0(n)\psi_n(M) = E_M\psi_n(M), \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} H_0(n) = & -(\mathbf{H}\cos\theta + I(0)\langle S \rangle)S^z + \frac{\mathbf{H}}{2i}(S^+ - S^-)\sin\theta + \\ & + \frac{\beta}{2}(S^z)^2\cos^2\theta - \frac{\beta}{8}[(S^+)^2 + (S^-)^2 - S^+S^- - S^-S^+]\sin^2\theta + \\ & + \frac{i\beta}{8}[S^+S^z + S^zS^+ - S^zS^- - S^-S^z]\sin 2\theta \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь введены следующие обозначения: $S^\pm = \frac{1}{2}(S^x \pm iS^y)$, θ - угол между

направлением магнитного поля и направлением магнитного момента. Появление этого угла обусловлено наличием сдвиговых деформаций и, как следствие, отклонением оси анизотропии от направления, существующего в недеформированном кристалле.

Решение уравнения (2) позволяет определить энергетические уровни магнитного иона:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\beta}{2} - \mathbf{H} + \frac{I(0)\langle S \rangle}{2} \cdot \frac{\beta/2 - \mathbf{H}}{\beta/2 - \mathbf{H}} \theta^2, \\ E_0 &= \frac{\mathbf{H}I(0)\langle S \rangle^2}{2(\mathbf{H}^2 - \beta^2/4)} \theta^2, \\ E_{-1} &= \frac{\beta}{2} + \mathbf{H} - \frac{I(0)\langle S \rangle}{2} \cdot \frac{\beta/2 + \mathbf{H}}{\beta/2 + \mathbf{H}} \theta^2. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{H} = H + I(0)\langle S \rangle$, в этом случае и далее приводится решение, справедливое при малых углах θ .

Для волновых функций получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned}
\psi_n(1) &= \left[1 - \frac{\theta^2}{4} \left(\frac{H - \beta/2}{H - \beta/2} \right)^2 \right] |1\rangle - i \frac{\theta}{\sqrt{2}} \cdot \frac{H - \beta/2}{H - \beta/2} |0\rangle \\
&\quad - \frac{\theta^2}{4H} \cdot \frac{H^2 - \bar{H}\beta/2}{H - \beta/2} |-1\rangle \\
\psi_n(0) &= -\frac{i\theta}{\sqrt{2}} \cdot \frac{H - \beta/2}{H - \beta/2} |1\rangle + \left[1 + \frac{\theta^2}{2} \left(\frac{H^2 - \beta^2/4}{H^2 - \beta^2/4} - \left(\frac{\bar{H}H - \beta^2/4}{H^2 - \beta^2/4} \right)^2 \right) \right] |0\rangle - \frac{i\theta}{\sqrt{2}} \cdot \frac{H + \beta/2}{H + \beta/2} |-1\rangle, \\
\psi_n(-1) &= -\frac{\theta^2}{4H} \cdot \frac{H^2 + \bar{H}\beta/2}{H + \beta/2} |1\rangle - \frac{i\theta}{\sqrt{2}} \cdot \frac{H + \beta/2}{H + \beta/2} |0\rangle + \\
&\quad + \left[1 - \frac{\theta^2}{2} \cdot \left(\frac{H + \beta/2}{H + \beta/2} \right)^2 \right] |-1\rangle
\end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $|i\rangle$ - собственная функция оператора S^z .

На полученных волновых векторах строятся операторы Хаббарда

$$X_n^{MM'} \equiv |\psi_n(M')\rangle \langle \psi_n(M)|, \quad (6)$$

описывающие переходы из состояния M' в состояние M .

С учетом вклада магнитоупругого взаимодействия в одноионный гамильтониан, одноионную задачу можно переписать в следующем виде:

$$\tilde{H}_0(n) \tilde{\psi}_n(M) = \tilde{E}_M \tilde{\psi}_n(M), \quad (7)$$

$$\text{где } \tilde{H}_0(n) = H_0(n) + H_{M_y}(n) + H_{AM_y}(n),$$

$$H_{M_y}(n) - \text{ четвертое слагаемое в гамильтониане (1), а } H_{AM_y}(n) = \frac{\beta}{2} (R_{2i}^{-1} S^i)^2 - \frac{\beta}{2} (S^z)^2.$$

Слагаемое $H_{AM_y}(n)$ описывает отклонение оси анизотропии от направления, существовавшего в недеформированном кристалле.

Окончательно для энергетических уровней магнитного иона с учетом спин-решеточного взаимодействия получаем:

$$\tilde{E}_1 = N - \Lambda,$$

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_0 &= \frac{\beta}{2} \sin^2 \theta \left[\sin^2 \theta - \frac{(H - \tilde{H} \cos \theta)^2}{\beta^2/4 - H^2} \right] + \frac{\beta}{2} U_{yz}^2 \left[1 - \frac{(v - \beta/2)^2}{\beta^2/4 - H^2} \right] + \\
&\quad + \frac{2\bar{H}(v - \beta/2)(H - \tilde{H} \cos \theta)}{\beta^2/4 - H^2} U_{yz} \sin \theta + v U_{yy} \left(1 + \frac{U_{yy}}{2} \right),
\end{aligned}$$

$$\tilde{\mathbf{E}}_{-1} = \mathbf{N} + \Lambda,$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{N} = & \frac{\beta}{2} \left[2 - \sin^4 \theta - \frac{(\bar{H} - \tilde{H} \cos \theta)^2}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} \sin^2 \theta \right] + \frac{(\nu - \beta/2)^2 \beta / 4}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} U_{yz}^2 + \\ & + \frac{\bar{H}(\bar{H} - \tilde{H} \cos \theta)}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} (\nu - \beta/2) U_{yz} \sin \theta + \frac{\nu}{2} U_{yy} \left(1 + \frac{U_{yy}}{2} \right) + \\ & + \frac{\nu^2 \beta/2}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} U_{yy}^2 + 2(\nu + \beta/8) U_{yz}^2, \\ L = & \bar{H} + \frac{H^2}{2\bar{H}} \sin^2 \theta - 2\bar{H} \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\nu^2}{\bar{H}} U_{yy}^2 + \frac{\nu^2}{2\bar{H}} U_{yz}^2 - \\ & - \frac{\nu\beta}{4\bar{H}} U_{yz} (\sin 2\theta + 2U_{yz}) + \frac{\beta^2}{32\bar{H}} (\sin \theta + 2U_{yz})^2 - \\ & - \frac{\beta^2 H^2}{8\bar{H}(\beta^2/4 - \bar{H}^2)} \sin^2 \theta - \frac{\beta^2}{8\bar{H}(\beta^2/4 - \bar{H}^2)} \left[\nu U_{yz} - \frac{\beta}{4} (\sin 2\theta + U_{yz}) \right] - \quad (8) \\ & - \frac{\beta H}{2(\beta^2/4 - \bar{H}^2)} \sin \theta \left[\nu U_{yz} - \frac{\beta}{4} (\sin 2\theta + 2U_{yz}) \right] - \\ & - \frac{\nu^2 U_{yy}^2}{8\bar{H}(\beta^2/4 - \bar{H}^2)} \left[\bar{H}^2 + \frac{3}{4} \beta^2 - 2\bar{H}^2 \frac{\bar{H}^4 + \beta^4/16}{(\beta^2/4 - \bar{H}^2)^2} \right]. \end{aligned}$$

Описанные выше результаты относятся к конкретным механическим граничным условиям, которые определяют структуру спонтанных деформаций.

На рисунке показаны выбранные нами механические граничные условия, и схематично показано, каким образом деформируется образец. Выбранная таким образом геометрия задачи накладывает следующие ограничения на тензор спонтанных деформаций $\xi_{ij}^{(0)}$:

$$\xi_{xx}^{(0)} = \xi_{zz}^{(0)} = \xi_{xy}^{(0)} = \xi_{xz}^{(0)} = 0.$$

Из этого равенства получим

$$U_{xx}^{(0)} = U_{zz}^{(0)} = U_{xy}^{(0)} = U_{xz}^{(0)} = w_{xy}^{(0)} = w_{xz}^{(0)} = 0.$$

Поскольку пространственная зависимость существует только от координаты y , выполняются следующие соотношения

$$U_{yz}^{(0)} = -w_{yz}^{(0)},$$

$$\xi_{yy}^{(0)} = U_{yy}^{(0)} \left(1 + \frac{U_{yy}^{(0)}}{2} \right) + 2U_{yz}^{(0)2} \neq 0, \quad (9)$$

$$\xi_{yz}^{(0)} = U_{yz}^{(0)} \neq 0.$$

Отличные от нуля спонтанные деформации и угол отклонения оси анизотропии определяется из условия минимума плотности свободной энергии $F = F_0 - \mathbf{T} \ln \mathbf{Z}$,

где

$$F_0 = \frac{\lambda + \eta}{2} \xi_{yy}^{(0)^2} + 2\eta \xi_{yz}^{(0)^2}, \quad (10)$$

$Z = \sum_M e^{-\beta M \Gamma}$ - статистическая сумма. Для угла θ и спонтанных деформаций $U_{yy}^{(0)}$ и $U_{yz}^{(0)}$ получаем

$$\begin{aligned} \theta^2 &= \frac{I(0)\langle S \rangle}{\bar{H} - \beta/2} \left[\frac{(v - \beta/2)^2}{2\eta} \cdot \frac{I(0)\langle S \rangle}{\bar{H} - \beta/2} - \bar{H} + \frac{\beta}{2} \right] \\ &\left[\beta + \frac{\beta}{4} I(0)\langle S \rangle \frac{I(0)\langle S \rangle + 4\bar{H}}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} + \frac{\bar{H} \bar{H}^2 - \beta^2/4}{2 \beta^2/4 - \bar{H}^2} + \right. \\ &\left. + \frac{I(0)\langle S \rangle}{2} \cdot \frac{\bar{H}^2 + \frac{5}{4} \beta^2}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} - \frac{(v - \beta/2)^2}{4\eta} \cdot \frac{I(0)\langle S \rangle (I(0)\langle S \rangle + 4\bar{H})}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} \right]^{-1}, \quad (11) \\ U_{yz}^{(0)} &= \frac{v - \beta/2}{2\eta} \cdot \frac{\bar{H} \cos \theta - \bar{H}}{\beta/2 - \bar{H}} \sin \theta, \\ U_{yy}^{(0)} &= -\frac{v}{2(\lambda + \eta)} - (v - \beta/2) \frac{\lambda + \eta}{\eta} \cdot \frac{\bar{H} \cos \theta - \bar{H}}{\beta/2 - \bar{H}} \sin \theta. \end{aligned}$$

Выражения (11) были получены в предположении о малости угла θ ($\theta \ll 1$). Это значит, что система находится в окрестности точки фазового перехода КФМ - ФМ. Используя выражение для θ^2 (11) и условие перехода КФМ - ФМ $\theta = 0$, можно определить точку устойчивости системы, которая оказывается равной

$$\bar{H} = \frac{\beta}{2} + \frac{(v - \beta/2)^2}{2\eta},$$

а выражения (11) при $\bar{H} \leq \bar{H}$ трансформируются следующим образом

$$\begin{aligned} \theta^2 &\approx \frac{(v - \beta/2)^2}{2\eta\beta}, \\ U_{yz}^{(0)} &\approx -\frac{(v - \beta/2)^2}{2\eta\sqrt{2\eta\beta}}, \\ U_{yy}^{(0)} &\approx -\frac{v}{2(\lambda + \eta)} + \frac{(v - \beta/2)^2}{\eta\sqrt{2\eta\beta}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Анализ полученных результатов показывает, что учет механических граничных условий "затягивает" угловую (КФМ) фазу по магнитному полю. Это обстоятельство является существенным как при экспериментальных исследованиях по магнитоакустике, так и при теоретических расчетах, поскольку спин-решеточное взаимодействие максимально проявляется именно в окрестности линии фазового перехода.

Кроме того, как видно из (12), спонтанные деформации и угол отклонения оси анизотропии определяются как константой магнитоупругой связи, так и константой одионой анизотропии.

Для "экзотических" материалов с малой одноионной анизотропией и большим спин-решеточным взаимодействием комбинация $\nu - b/2 \approx 0$. В этом случае, как легко видеть, влияние механических граничных условий либо минимально, либо полностью нейтрализуется.

Дальнейшие исследования влияния механических граничных условий на спин-решеточное взаимодействие будут посвящены исследованию спектров связанных магнитоупругих волн и другим динамическим эффектам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Барьяхтар В.Г., Витебский И.М., Лавриненко Н.М., Соболев В.Л. Критическая динамика при ферропластичных фазовых переходах во внешнем поле //ЖЭТФ.- 1986.-т.90,№3.- С.1111 - 1117.
2. Онуфриева Ф.П. Квантовая теория ферромагнетиков с одноионной анизотропией в магнитном поле произвольного направления // ФТТ. 1981.- т. 23,№9.-С. 2664 - 2673.
3. Терстон Р. "Распространение волн в жидкостях и твердых телах" Сб. "Физическая акустика" под редакцией У. Мэзона т.1. Мир, Москва, 1966 г.
4. Барьяхтар В.Г., Туров Е.А. Магнитоупругие возбуждения // В сб. Электронная структура и электронные свойства металлов и сплавов.- Киев: Наукова Думка.- 1988.- С.39-70.
5. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике //ЖЭТФ.-1972.-Т.63,№1.-С.207-215.
6. Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн//ТМФ.-1989.-Т.81,№2.-С.263-270.