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 диссиметричной 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]. Основной результат 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 $\beta_{\bar{4}} \geq I(0)$. Квадрупольная фаза (КУ) реализуется в интервале полей $0 < \mathbf{H} < \mathbf{H}_{c_1}$, квадрупольно-ферромагнитная (КФМ), или угловая фаза при $\mathbf{H}_{c_1} < \mathbf{H} < \mathbf{H}_{c_2}$ и ферромагнитная фаза (ФМ) - при $\mathbf{H} > \mathbf{H}_{c_2}$, где

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

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

$$H = -\mathbf{H}\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{z} + \frac{\beta}{2}\sum_{\mathbf{n}}\left(\mathbf{R}_{zi}^{-1}\cdot\mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{i}\right)^2 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} I\left(\mathbf{n}-\mathbf{n}'\right)\vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\vec{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}'} + \nu\cdot$$

$$\cdot\sum_{\mathbf{n}}\left(\mathbf{R}_{if}^{-1}\mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{f}\right)\left(\mathbf{R}_{jg}^{-1}\mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{g}\right)\xi_{ij}(\mathbf{n}) + \int d\mathbf{r}\left\{\frac{\lambda+\eta}{2}\left(\xi_{xx}^2+\xi_{yy}^2+\xi_{zz}^2\right) + \eta\left(\xi_{xy}^2+\xi_{xz}^2+\xi_{zy}^2\right) + \right.$$

$$\left. +\lambda\left(\xi_{xx}\xi_{yy}+\xi_{xx}\xi_{zz}+\xi_{yy}\xi_{zz}\right)\right\} \qquad (1)$$

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

$$\mathbf{R}_{ij}^{-1} = \delta_{ij} - w_{ij} + \frac{1}{2}w_{ij}^2 + \frac{1}{2}\left(U_{ik}w_{kj} + w_{ik}U_{kj}\right) + 0\left(U_{ij}^2\right),$$

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

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

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

Кроме того в (1) введены следующие обозначения: $\mathbf{H}$ - внешнее магнитное поле; $\beta > 0$ - константа одноионной анизотропии; $I(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$ - обменный интеграл; $\mathbf{S}_{\mathbf{n}}^{\alpha}$ - спиновый оператор в узле $\mathbf{n}$, ν - константа магнитоупругой связи; λ, η - упругие модули. Далее будем 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 удается точно учесть как энергию анизотропии, так и энергию магнитоупругой связи в нулевом гамильтонеане. Построенная теория справедлива при произвольных температурах, вплоть до температуры Кюри.

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

$$H_0(\mathbf{n})\psi_{\mathbf{n}}(M) = E_M\psi_{\mathbf{n}}(M), \tag{2}$$

где

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

Здесь введены следующие обозначения: $S^{\pm} = \frac{1}{2}\left(S^x \pm i S^y\right)$, 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 недеформированом кристалле.

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

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

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

Для волновых функций получаем следующие выражения:

$$\psi_n(1)=\left[1-\frac{\theta^2}{4}\left(\frac{H-\beta/2}{\overline{H}-\beta/2}\right)^2\right]|1\rangle-i\frac{\theta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{H-\beta/2}{\overline{H}-\beta/2}|0\rangle$$

$$-\frac{\theta^2}{4\overline{H}}\cdot\frac{H^2-\overline{H}\beta/2}{\overline{H}\ -\beta/2}|-1\rangle$$

$$\psi_n(0)=-\frac{i\theta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{H-\beta/2}{\overline{H}-\beta/2}\ |1\rangle+\left[1+\frac{\theta^2}{2}\left(\frac{H^2-\beta^2/4}{\overline{H}^2-\beta^2/4}-\left(\frac{\overline{H}H-\beta^2/4}{\overline{H}^2-\beta^2/4}\right)^2\right)\right] \tag{5}$$

$$|0\rangle-\frac{i\theta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{H+\beta/2}{\overline{H}+\beta/2}|-1\rangle\ ,$$

$$\psi_n(-1)=-\frac{\theta^2}{4\overline{H}}\cdot\frac{H^2+\overline{H}\beta/2}{\overline{H}\ +\beta/2}|1\rangle-\frac{i\theta}{\sqrt{2}}\cdot\frac{H+\beta/2}{\overline{H}+\beta/2}|0\rangle+$$

$$+\left[1-\frac{\theta^2}{2}\cdot\left(\frac{H+\beta/2}{\overline{H}+\beta/2}\right)^2\right]|1\rangle$$

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

На полученных волновых векторах строятся операторы Хаббарда

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

описывающие переходы из состояния M' в состоянне M.

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

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

где $\widetilde{H}_0(n)=H_0(n)+H_{My}(n)+H_{AMy}(n)$,

$H_{My}(n)$ - чевертое слагаемое в гамильтониане (1), а $H_{AMy}(n)=\frac{\beta}{2}\left(R_{2i}^{-1}S^i\right)^2-\frac{\beta}{2}\left(S^z\right)^2$.

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

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

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

$$\widetilde{E}_0=\frac{\beta}{2}\sin^2\theta\left[\sin^2\theta-\frac{\left(H-\widetilde{H}\cos\theta\right)^2}{\beta^2/4-\overline{H}^2}\right]+\frac{\beta}{2}U_{yz}^2\left[1-\frac{(\nu-\beta/2)^2}{\beta^2/4-\overline{H}^2}\right]+$$

$$+\frac{2\overline{H}(\nu-\beta/2)\left(H-\widetilde{H}\cos\theta\right)}{\beta^2/4-\overline{H}^2}U_{yz}\sin\ \theta+\nu U_{yy}\left(1+\frac{U_{yy}}{2}\right),$$

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

где

$$N = \frac{\beta}{2}\left[2 - \sin^4\theta - \frac{\left(H - \tilde{H}\cos\theta\right)^2}{\beta^2/4 - \overline{H}^2}\sin^2\theta\right] + \frac{(\nu - \beta/2)^2\,\beta\ /4}{\beta^2/4 - \overline{H}^2}\,U_{yz}^2 +$$

$$+\frac{\overline{H}(H - \overline{H}\cos\theta)}{\beta^2/4 - \overline{H}^2}(\nu - \beta/2)U_{yz}\sin\theta + \frac{\nu}{2}U_{yy}\left(1 + \frac{U_{yy}}{2}\right) +$$

$$+\frac{\nu^2\beta/2}{\beta^2/4 - \overline{H}^2}U_{yy}^2 + 2(\nu + \beta/8)U_{yz}^2,$$

$$L = \overline{H} + \frac{H^2}{2\overline{H}}\sin^2\theta - 2\overline{H}\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{\nu^2}{\overline{H}}U_{yy}^2 + \frac{\nu^2}{2\overline{H}}U_{yz}^2 -$$

$$-\frac{\nu\beta}{4\overline{H}}U_{yz}\left(\sin 2\theta + 2U_{yz}\right) + \frac{\beta^2}{32\overline{H}}\left(\sin\theta + 2U_{yz}\right)^2 -$$

$$-\frac{\beta^2 H^2}{8\overline{H}\left(\beta^2/4 - \overline{H}^2\right)}\sin^2\theta - \frac{\beta^2}{8\overline{H}\left(\beta^2/4 - \overline{H}^2\right)}\left[\nu U_{yz} - \frac{\beta}{4}\left(\sin 2\theta + U_{yz}\right)\right] - \qquad (8)$$

$$-\frac{\beta H}{2\left(\beta^2/4 - \overline{H}^2\right)}\sin\theta\left[\nu U_{yz} - \frac{\beta}{4}\left(\sin 2\theta + 2U_{yz}\right)\right] -$$

$$-\frac{\nu^2 U_{yy}^2}{8\overline{H}\left(\beta^2/4 - \overline{H}^2\right)}\left[\overline{H}^2 + \frac{3}{4}\beta^2 - 2\overline{H}^2\frac{\overline{H}^4 + \beta^4/16}{\left(\beta^2/4 - \overline{H}^2\right)^2}\right].$$

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

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

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

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

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

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

$Z = \sum\limits_{M} e^{-E_M/T}$ - статистическая сумма. Для угла θ и спонтанных деформаций $U_{yy}^{(0)}$ и $U_{yz}^{(0)}$ получаем

$$\theta^2 = \frac{I(0)\langle S\rangle}{\bar{H} - \beta/2}\left[\frac{(\nu - \beta/2)^2}{2\eta}\cdot\frac{I(0)\langle S\rangle}{\bar{H} - \beta/2} - H + \frac{\beta}{2}\right]\cdot$$

$$\cdot\left[\beta + \frac{\beta}{4}I(0)\langle S\rangle\frac{I(0)\langle S\rangle + 4\bar{H}}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} + \frac{H}{2}\frac{\bar{H}^2 - \beta^2/4}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{I(0)\langle S\rangle}{2}\cdot\frac{\bar{H}^2 + \frac{5}{4}\beta^2}{\beta^2/4 - \bar{H}^2} - \frac{(\nu - \beta/2)^2}{4\eta}\cdot\frac{I(0)\langle S\rangle\left(I(0)\langle S\rangle + 4\bar{H}\right)}{\beta^2/4 - \bar{H}^2}\right]^{-1}, \qquad (11)$$

$$U_{yz}^{(0)} = \frac{\nu - \beta/2}{2\eta}\cdot\frac{\bar{H}\cos\theta - H}{\beta/2 - \bar{H}}\sin\theta,$$

$$U_{yy}^{(0)} = -\frac{\nu}{2(\lambda + \eta)} - (\nu - \beta/2)\frac{\lambda + \eta}{\eta}\cdot\frac{\bar{H}\cos\theta - H}{\beta/2 - \bar{H}}\sin\theta.$$

Выражения (11) были получены в предположении о малости угла $\theta(\theta \ll 1)$. 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

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

а выражения (11) при $H \le H^*$ трансформируются следующим образом

$$\theta^2 \approx \frac{(\nu - \beta/2)^2}{2\eta\beta},$$

$$U_{yz}^{(0)} \approx -\frac{(\nu - \beta/2)^2}{2\eta\sqrt{2\eta\beta}}, \qquad (12)$$

$$U_{yy}^{(0)} \approx -\frac{\nu}{2(\lambda + \eta)} + \frac{(\nu - \beta/2)^2}{\eta\sqrt{2\eta\beta}}.$$

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 одиоионной 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,N3.- С.1111 - 1117.

2. Онуфриева Ф.П. Квантовая теория ферромагнетиков с одноионной анизотропией в магнитном поле произвольного направления // ФТТ. 1981.- т. 23,N9.-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,N1.-С.207-215.

6. Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн//ТМФ.-1989.-Т.81,N2.-С.263-270.