<u>Лекция 14</u>.

Упругое и неупругое некогерентное рассеяние нейтронов. Восстановление функции плотности фононных частот. Уравнение состояния колеблющегося кристалла. Гамильтониан системы взаимодействующих магнитных моментов атомов в ферромагнетике. Преобразование гамильтониана к представлению с выделенной магнитным полем осью.

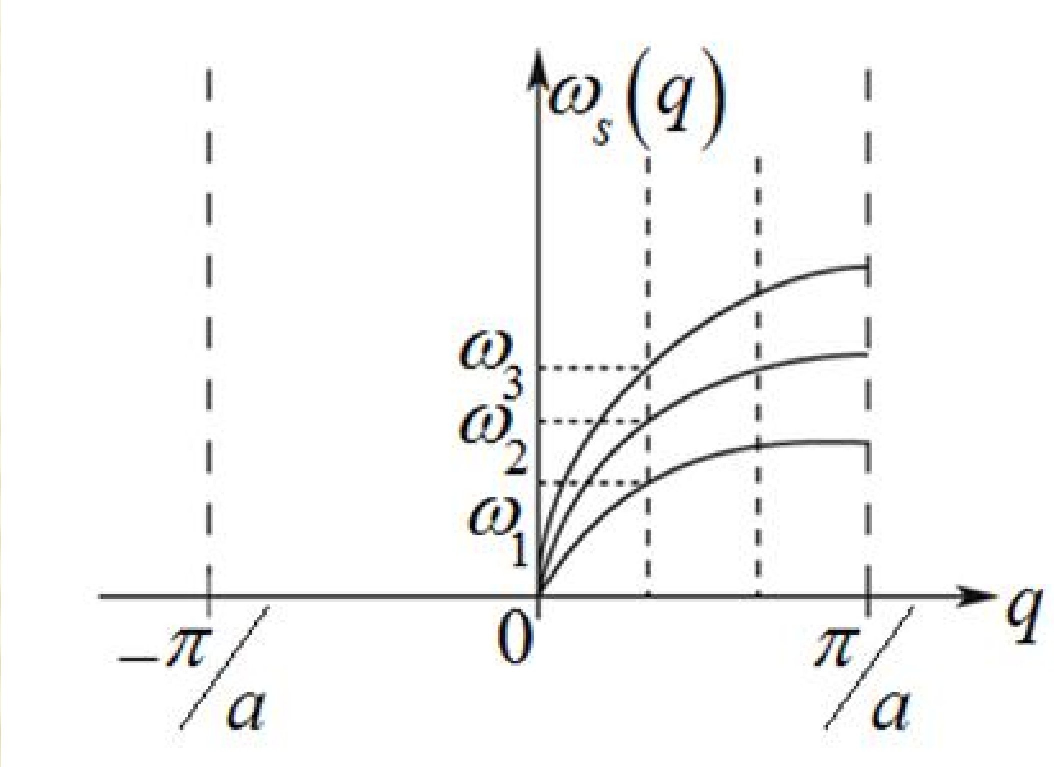
Рассматриваются только акустические ветви, в трехмерном кристалле их три.

$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} + \hbar\omega_s\left(\vec{q}\right)$ отвечает возбуждению (рождению фононов);

$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} - \hbar\omega_s\left(\vec{q}\right)$ - поглощению фонона

Если нейтрон и ядро встречаютчя в фазе, фонон рождается, если в противофазе – поглощается.

$\bar{n}$ - планковское распределение; при $T = 0; n = 0$ левые пики исчезают; тогда возможно только рождение фонона (однофононные процессы).



Таким образом, изменяя $\vec{q}$ поворотом детектора (при повороте меняется $\vec{k}_1$) можно получить фононный спектр. Вообще говоря, δ -функция есть пик бесконечной высоты и ужины; Мы же заменили δ -функции лоренцевскими пиками (добавили к ↓ мнимую добавку):

$$e^{-i\omega_\xi t} \xrightarrow[\omega_\xi + i\Delta\omega_\xi]{} e^{-i\omega_\xi t} e^{\Delta\omega_\xi t} \qquad \Delta\omega_\xi = -\left|\Delta\omega_\xi\right|$$

видно, что фононы живут конечное время $\sim \dfrac{1}{\left|\Delta\omega_\xi\right|}$ (наблюдается затухание в меру $\Delta\omega_\xi$,

т.е. в меру ширины пиков)

Нейтроны <u>должны</u> быть тепловыми, энергия $n \sim kT \sim \hbar\omega \Rightarrow$ изменение энергии нейтрона при рождении фонона существенно (ощутимо). Для рентгеновских квантов можно было бы получить такое же упругое рассеяние, но для кванта $\hbar\omega_k \sim 10 кэв; \hbar\omega_\xi \sim 10^{-2}$ $эв$, и изменение его энергии отследить невозможно.

Таким образом, нужны тепловые нейтроны (с невысокой энергией).

Если $|k| < \left|\frac{G}{2}\right|$, то рассеяние не произойдет, т.к. $\vec{k}$ никогда не попадет на «стенку». То есть энергия нейтронов не должна быть слишком малой, холодные нейтроны нам не подходят; их отсеивают, пропуская пучок через поликристалл.

$$W_{ну}^{нкг}\left(\vec{q},\omega\right) = \frac{1}{\hbar^2}\sum_n \overline{\left|\Delta U_n\left(\vec{q}\right)\right|^2 e^{-Z\left(\vec{q}\right)}} \cdot 1 \cdot D_{nn}\left(\omega\right);$$

$$D_{nn}(\omega) = q^\alpha q^\beta \sum_\xi \frac{\hbar}{2NM\omega_\xi}(\underbrace{l_\xi^\alpha l_\xi^{*\beta}}_{\gamma^{\alpha\beta}/3} \cdot 1 \cdot 2\pi\delta\left(\omega+\omega_\xi\right)\overline{n}_\xi + \underbrace{l_\xi^{*\alpha} l_\xi^\beta}_{\gamma^{\alpha\beta}/3} \cdot 1 \cdot 2\pi\delta\left(\omega-\omega_\xi\right)(\overline{n}_\xi + 1)) =$$

в кубическом кристалле

$$\frac{q^2}{3}2\pi\sum_{\xi}\frac{\hbar}{2NM\omega_\xi}\left[\bar{n}_\xi\delta\left(\omega+\omega_\xi\right)+(\bar{n}_\xi+1)\delta\left(\omega-\omega_\xi\right)\right]=$$

$$=2\pi q^2\frac{\hbar}{2M}\int_0^{\omega_{\max}}d\omega_1\left[\underbrace{\frac{1}{3N}\sum_{\xi}\delta\left(\omega_1-\omega_\xi\right)}\right]\frac{1}{\omega_1}\left[\bar{n}\left(\omega_1\right)\delta\left(\omega+\omega_1\right)+(\bar{n}\left(\omega_1\right)+1)\delta\left(\omega-\omega_1\right)\right]$$

функция плотности

фононных колебаний $g\left(\omega_1\right)$

$$D_{nn}(\omega)=2\pi q^2\frac{\hbar}{2M}\left\{\frac{\bar{n}(-\omega)}{(-\omega)}g\left(\omega\right)+\frac{\bar{n}(-\omega)+1}{\omega}g\left(\omega\right)\right\}=$$

$g\left(-\omega\right)=g\left(\omega\right)$ из-за четности функции

$$=2\pi q^2\frac{\hbar}{2M}\frac{g(\omega)}{\omega}\left\{-\bar{n}\left(\omega\right)+\bar{n}\left(\omega\right)+1\right\}$$

$$-\bar{n}\left(-\omega\right)=\frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}=\frac{+e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{-1+e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}=1+\bar{n}\left(\omega\right)$$

$$-\bar{n}(-\omega)=\frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}=\frac{+e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{-1+e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}=1+\bar{n}(\omega)$$

$$D_{nn}(\omega)=2\pi\left(\frac{\hbar^2q^2}{2M}\right)\frac{1}{\hbar\omega}2\left(\bar{n}(\omega)+1\right)g(\omega)$$

$$W_{ну}^{нкг}(\vec{q},\omega)=\frac{1}{\hbar^2}\sum_n\overline{\left|\Delta U_n\left(\vec{q}\right)\right|^2}e^{-Z\left(\vec{q}\right)}\cdot 1\cdot D_{nn}(\omega)\sim g(\omega)!!!$$

таким образом, мы прямо в эксперименте получаем функцию плотности $g(\omega)$.

Уравнение состояния колеблющегося кристалла

Функциональная связь между объемом, давлением и температурой системы:

$$\Phi(V, p, T) = 0$$

учет u_0 принципиален, т.к. u_0 зависит от объема.

Для описания системы с заданным давлением необходима свободная энергия – функция объема и температуры.

$F = \sum_{\xi} F_{\xi}$ ξ - полный перебор всех (dgN) колебаний кристалла

$$F_{\xi} = \bar{\varepsilon}_{\xi} - TS_{\xi}$$

$\downarrow$

средняя термодинамическая энергия одного осциллятора : $\bar{\varepsilon}_{\xi} = \hbar\omega_{\xi}\left(\bar{n}_{\xi} + \frac{1}{2}\right)$

$$S_{\xi} = -k\overline{\ln \omega_{\xi}} \quad , \quad \omega_{\xi} = \frac{1}{z_{\xi}} e^{-\frac{\varepsilon_{\xi}}{kT}}$$

$$S_{\xi} = -k\left\{\overline{-\frac{\varepsilon_{\xi}}{kT} - \ln z_{\xi}}\right\} = \frac{\bar{\varepsilon}_{\xi}}{T} + k\overline{\ln z_{\xi}}$$

тогда $F_\xi = \bar{\varepsilon}_\xi - T\left\{\frac{\bar{\varepsilon}_\xi}{T} + k\ln z_\xi\right\} = -kT\ln z_\xi$

$\downarrow$ среднее можно не писать, т.к. это есть константа.

(z_ξ не зависит от n_ξ - квантового числа, по которому производится усреднение)

$$z_\xi = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{2kT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}}$$

$$\boxed{F_\xi = \frac{\hbar\omega_\xi}{2} + kT\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}\right)}$$

$\downarrow$ энергия нулевых колебаний

Парциальное давление, создаваемое ξ -м осциллятором

$$p_\xi = -\left.\frac{\partial F_\xi}{\partial V}\right|_T = \left.\frac{\partial F_\xi}{\partial \omega_\xi}\right|_T \left(-\frac{\partial \omega_\xi}{\partial V}\right)$$

зависимость от V «сидит» в ω_ξ

$\vee$ с учетом минуса

0

$$\gamma_\xi = -\frac{V}{\omega_\xi}\frac{\partial \omega_\xi}{\partial V} = -\frac{\partial \ln \omega_\xi}{\partial \ln V} > 0!$$

$$p_\xi = \gamma_\xi \frac{\omega_\xi}{V}\frac{\partial F_\xi}{\partial \omega_\xi} = \frac{1}{V}\gamma_\xi \omega_\xi \left\{ \frac{\hbar}{2} + \cancel{kT}\frac{1}{\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}\right)}\left(+e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}\right)\left(+\frac{\hbar\omega_\xi}{\cancel{kT}}\right)\right\} =$$

$$= \frac{1}{V}\gamma_\xi \left\{ \frac{\hbar\omega_\xi}{2} + \hbar\omega_\xi \frac{e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}}{\underbrace{1-e^{-\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}}_{\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_\xi}{kT}}-1}=\bar{n}_\xi}} \right\}$$

$p_\xi = \frac{\gamma_\xi}{V}\overline{\varepsilon_\xi}$ суммируя по всем ξ найдем полное давление, создаваемое в кристалле за счет его колебаний

$$p_{кол} = \sum_\xi p_\xi = \frac{1}{V}\sum_\xi \gamma_\xi \overline{\varepsilon_\xi} \simeq \frac{\gamma}{V}\sum_\xi \overline{\varepsilon_\xi} = \frac{\gamma}{V}\overline{E}$$

$\gamma_\xi \equiv \gamma$ приближение Грюнайзена

$$\boxed{p_{кол}V \simeq \gamma \overline{E}}$$

$$\alpha_T = \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p \equiv \frac{\partial(V,p)}{\partial(T,p)} = \left\| \begin{matrix} \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p & \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_p \\ \left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_T & \left.\frac{\partial p}{\partial p}\right|_T \end{matrix} \right\| = \frac{\partial(V,p)}{\partial(V,T)}\frac{\partial(V,T)}{\partial(T,p)} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \frac{1}{\frac{\partial(T,p)}{\partial(V,T)}} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \frac{}{-(\frac{\partial}{\partial}}$$

$$\boxed{\alpha_T = \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V}{-\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T}}$$ коэффициент объемного расширения (через производные от давления)

$$p = p_0 + p_{кол}$$

$$p_0 = -\frac{\partial U_0}{\partial V}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_T = 0 + \left(\frac{\partial p_{кол}}{\partial T}\right)_V \cong \frac{\partial}{\partial T}\bigg|_V \frac{\gamma}{V}\overline{E} = \frac{\gamma}{V}\frac{\partial \overline{E}}{\partial T}\bigg|_V = \frac{\gamma}{V}C_V$$

$$-\frac{\partial p}{\partial V}\bigg|_T \simeq -\frac{\partial p_0}{\partial V} + \overset{=}{0}(кол) > 0!$$

обратная

сжимаемость $\dfrac{1}{\chi_0}$

$$\alpha_T \approx \frac{\frac{\gamma}{V}C_V}{1/\chi_0} \to \boxed{\frac{\alpha_T}{C_V} = \frac{\chi_0\gamma}{V} = const}$$ закон Грюнайзена

(поведение коэффициента теплового расширения и теплоемкости одинаковое)

Здесь существенным является приближение Грюнайзена

Спиновые волны в ферромагнетиках

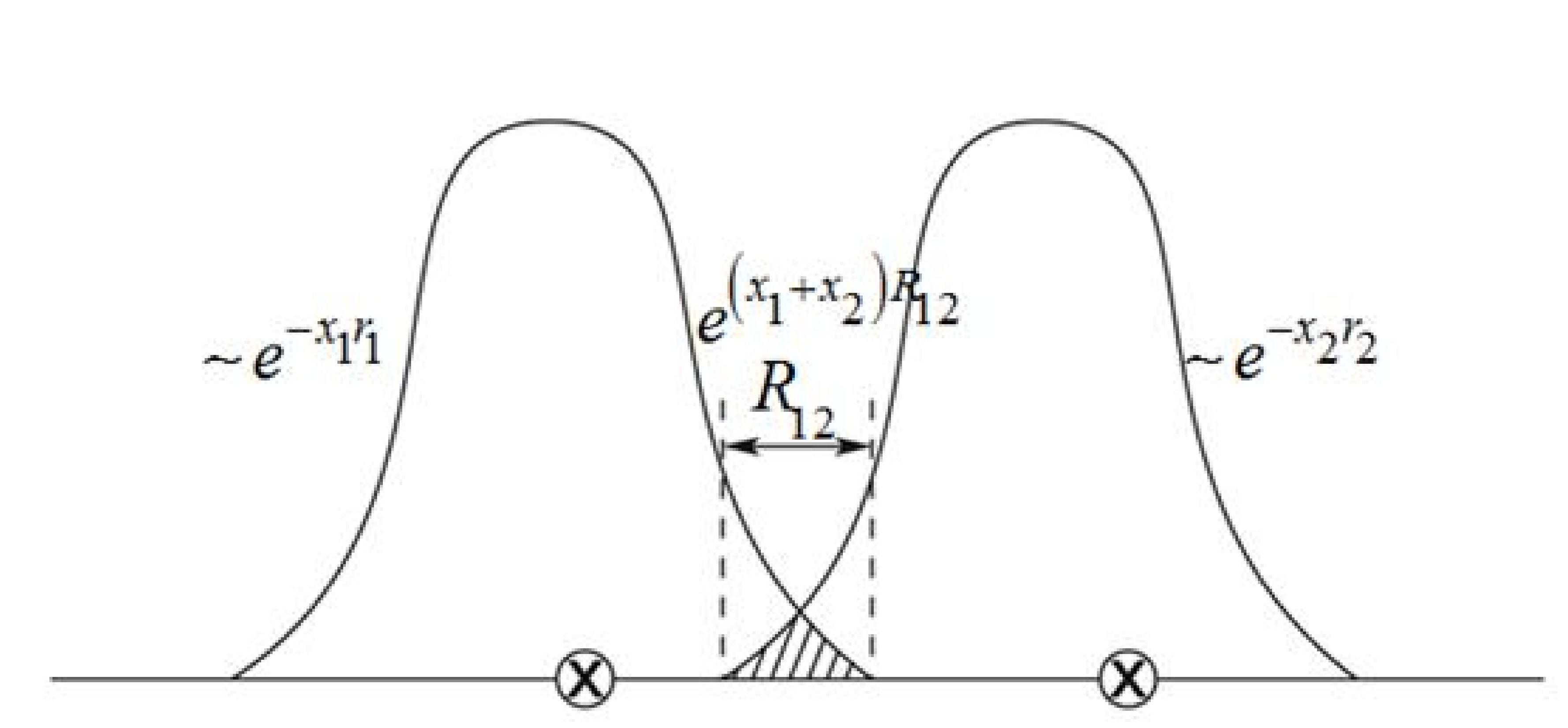
За счет чего у атома в кристаллической решетке появляется магнитный момент?
Спин незаполненной оболочки не полностью скомпенсирован. Однако, это неприменимо к валентным оболочкам, т.к. электроны валентных оболочек в кристалле обобществлены(размазаны по объему), распределены по состояниям, и у них все моменты скомпенсированы. Нам же необходим локальный магнитный момент, строго привязанный к конкретному атому. Нужны внутренние незаполненные оболочки.
Группа железа (Fe,Ni,Co) – 3d не заполнена
Редкоземельные металлы (Ru,Rh,Pd) - 4f
Что заставляет все моменты выстроиться ||?

$$U_{d-d} \sim \frac{M_d^2}{r^3}, \mu_\alpha \sim \mu_Б = \frac{e\hbar}{2mc} \sim 10^{-20}\, эрг.с$$

$$r \sim 10^{-8}\, см$$

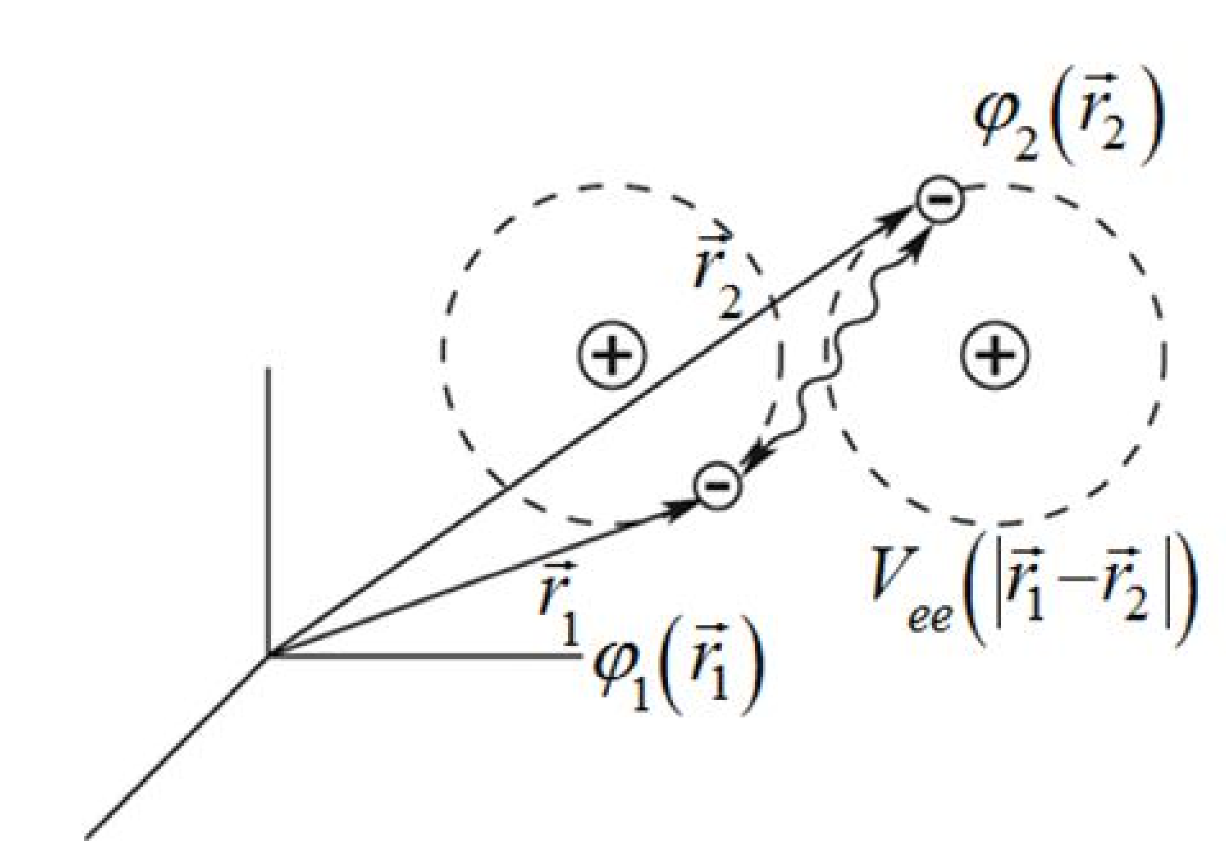
$$U_{d-d} \sim \frac{10^{-40}}{10^{-24}} \sim 10^{-16}\, эрг \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-12} \frac{эрг}{eV}} \sim 10^{-4}\, eV \sim 1^\circ K$$

$T_c \sim 10^3 K$ не может иметь отношение к этому взаимодействию



Здесь электроны разных
атомов знают друг о друге

Т.к. e^- - фермионы, то их волновые функции $\Psi_{1,2} = \Phi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right)\chi\left(s_1, s_2\right)$



Их спины $\left|\vec{s}_1+\vec{s}_2\right| = \begin{cases} 0, (\uparrow\downarrow)(\downarrow\uparrow) \\ 1, (\uparrow\uparrow)(\downarrow\downarrow) \end{cases} = \left|\vec{S}\right|$

$\chi_{(0)}(s_1, s_2) = -\chi_{(0)}(s_2, s_1)$ для синглетного состояния

$\chi_{(1)}(s_1, s_2) = +\chi_{(1)}(s_2, s_1)$ для триплетов

$\uparrow s = 1$

$$\Phi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\varphi_1\left(\vec{r}_1\right)\varphi_2\left(\vec{r}_2\right)\mp\varphi_1\left(\vec{r}_2\right)\varphi_2\left(\vec{r}_1\right)\right\}$$

$$\downarrow s-0$$

$$\Delta E=\iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi^*\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)V_{ee}\left(\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|\right)\Phi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)=$$

$$=\frac{1}{2}\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\left\{\varphi_1^*(\vec{r}_1)\varphi_2^*(\vec{r}_2)V_{ee}\varphi_1\left(\vec{r}_1\right)\varphi_2\left(\vec{r}_2\right)\mp\varphi_2^*(\vec{r}_1)\varphi_1^*(\vec{r}_2)V_{ee}\varphi_1\left(\vec{r}_1\right)\varphi_2\left(\vec{r}_2\right)\mp\right.$$

$$\left.\mp\varphi_1^*(\vec{r}_1)\varphi_2^*(\vec{r}_2)V_{ee}\varphi 2\left(\vec{r}_1\right)\varphi_1\left(\vec{r}_2\right)\mp\varphi_2^*(\vec{r}_1)\varphi_1^*(\vec{r}_2)V_{ee}\varphi_2\left(\vec{r}_1\right)\varphi_1\left(\vec{r}_2\right)\right\}$$

если в 4-м слагаемом $r_1 \rightleftarrows r_2$ оно удвоится с 1-м

$$\Delta E=\frac{1}{\cancel{2}}\cdot\cancel{2}\left\{A\mp J\right\}$$

$$A=\iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\left(\varphi_1^*\left(\vec{r}_1\right)\varphi_1\left(\vec{r}_1\right)\right)V_{ee}\left(\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|\right)\left|\varphi_2\left(\vec{r}_2\right)\right|^2$$

$$J=\iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\varphi_1^*\left(\vec{r}_1\right)\varphi_2^*\left(\vec{r}_2\right)\underbrace{V_{ee}\left(\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|\right)}_{\frac{e^2}{\left|r_1^2-\vec{r}_2\right|}\sim 10eV}\varphi_1\left(\vec{r}_2\right)\varphi_2\left(\vec{r}_1\right)\sim 10^{-1}N$$

$$V_{exch} = \alpha + \beta(\widehat{\vec{s}_1, \vec{s}_2})$$

$$\langle 0 | V_{exch} | 0 \rangle = +J$$

Дирак ввел: $\langle 1 | V_{exch} | 1 \rangle = -J$

$$+J = \alpha + \beta \left\langle 0 \middle| \widehat{\vec{s}_1 \vec{s}_2} \middle| 0 \right\rangle$$

$$-J = \alpha + \beta \left\langle 1 \middle| \widehat{\vec{s}_1 \vec{s}_2} \middle| 1 \right\rangle$$

$$\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$$

$$\hat{S}^2 = s(s+1) = \overbrace{\underbrace{\hat{s}_1^2}_{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} + \underbrace{\hat{s}_2^2}_{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}}^{3/2} + 2\left(\widehat{\vec{s}_1 \vec{s}_2}\right)$$

$$\left(\widehat{\vec{s}_1 \vec{s}_2}\right) = \frac{1}{2}\left[s(s+1) - \frac{3}{2}\right] = \begin{cases} \frac{1}{2}\left[0 - \frac{3}{2}\right], s = 0 \\ \frac{1}{2}\left[1(1+1) - \frac{3}{2}\right], s = 1 \end{cases}$$

$$J = \alpha + \beta \left\langle 0 \left| -\frac{3}{4} \right| 0 \right\rangle = \alpha - \beta \frac{3}{4}$$

$$-J = \alpha + \beta \left\langle 1 \left| \frac{1}{4} \right| 1 \right\rangle = \alpha + \beta \frac{1}{4}$$

$$2J = -\beta$$

$$\boxed{\begin{aligned} \beta &= -2J \\ \alpha &= \frac{-J}{2} \end{aligned}}$$

вычитая, получим :

$$\alpha = -J - \frac{1}{4}(-2J) = -\frac{J}{2}$$

$$V_{exch} = -\frac{J}{2} - \underbrace{2J}_{\uparrow}(\widehat{\vec{s}_1}\widehat{\vec{s}_2})$$

интенсивность этого взаимодействия
диктуется обменным членом

$$\boxed{\widehat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{n \neq m} J(\vec{n} - \vec{m})\widehat{\vec{S}_n}\widehat{\vec{S}_m}}$$

гамильтониан Гайзенберга

(отсчитан от $-\dfrac{J}{2}$; дает отрицательную добавку при $J < 0$)

Обменное взаимодействие выстраивает моменты вдоль фиксированного направления; однако, в силу равномерности всех направлений, при усреднении получится ноль.

Выделим одно направление: $\vec{\mathrm{H}} = (0, 0, H)$ внешнее магнитное поле

$-\mu_Б g \sum_n (\widehat{\vec{S}}_n \widehat{\vec{H}})$ - второе слагаемое в гамильтониане

$\vec{M} = g\mu_Б \vec{s}_n$ - магнитный момент одного атома

$$\overbrace{-\left(\vec{M}_n \vec{H}\right)} \qquad \nearrow J_{nm} = J\left(\left|\vec{n} - \vec{m}\right|\right) \equiv J_{mn}$$

$$\boxed{\widehat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{n\neq m} J(\vec{n} - \vec{m})\left(\widehat{\vec{s}}_n \widehat{\vec{s}}_m\right) - \mu_Б g H \sum_n \hat{s}_n^z}$$

для всех узлов $\begin{cases} \hat{s}^z \Psi_{s_z} = s_z \Psi_{s_z} \\ -s \leq s_z \leq s \end{cases}$ s - полный спин атома

Если все s_n^z равны +1 по оси z, то отрицательный вклад гамильтониана максимален и энергия будет минимальной $\Rightarrow$ это основное состояние

$\hat{s}^z = \sum_n \hat{s}_n^z \rightarrow \left[\widehat{H}\widehat{S^z}\right] = 0$ (доказать самостоятельно)

$\Rightarrow$ суммарная проекция магнитного момента никогда за счет внутренних изменений не поменяется.

Если за счет внешнего источника изменит суммарную проекцию (это значит, что один из s_z изменится на 1 (правило отбора), т.е. от s до $s-1$), то по кристаллу побежит волна отклонения проекции спина от максимального значения s .(Отклонившись, атом (в одном из узлов) спровоцирует отклонение в ближайшем соседнем узле, а сам вернется в исходное состояние в силу закона сохранения проекции спина.)

Это спиновая волна или магнон

Таким образом задача «привязалась» к оси Z;