

А. А. ГУСЕВ

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ МАГНИТОСТРИКЦИИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 15 V 1954)

Введение. Классическая теория магнитострикции была разработана Н. С. Акуловым ⁽¹⁾, который также указал, что магнитно-анизотропные свойства ферромагнетиков, связаны с взаимодействием магнитных моментов спинов и орбит в ферромагнитном кристалле. Квантовомеханическая теория магнитно-анизотропных свойств начала развиваться после работ Я. И. Френкеля ⁽²⁾ и Гейзенберга ⁽³⁾, установивших, что причиной самопроизвольной намагниченности являются электростатические обменные силы. Был выполнен ряд работ по теории магнитной энергетической анизотропии, однако квантовая теория магнитоупругих свойств и, в частности, важнейшего из них — магнитострикции — оставалась весьма мало разработанной. По этому вопросу имеется лишь работа С. В. Вонсовского ⁽⁴⁾, который развил квантовую теорию магнитострикции кубических кристаллов при высоких температурах.

Целью настоящей работы является построение последовательной квантовомеханической теории магнитострикции ферромагнитных монокристаллов с гексагональной и кубической симметрией решетки при низких температурах.

Постановка задачи. В основу рассмотрения положена теория полярной модели металла в форме, развитой в работах Н. Н. Боголюбова и С. В. Тябликова ⁽⁵⁻⁷⁾. Все физические предположения относительно модели системы, вводимые в указанной теории, имеют место и в настоящей работе.

Если учесть помимо обменного и чисто магнитного взаимодействия также и магнитоупругое взаимодействие, то гамильтониан системы в эквивалентной форме с точностью до членов, квадратичных по спиновым операторам, примет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = G_0 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{f_1, f_2 \\ \alpha, \beta}} G_{\alpha\beta}(f_1, f_2) S_{f_1}^{\alpha} S_{f_2}^{\beta} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\substack{f_1, f_2 \\ \alpha, \beta}} \sum_{i, j} A_{ij}^{\alpha\beta}(f_1, f_2) u_{ij} S_{f_1}^{\alpha} S_{f_2}^{\beta} - \sum_{f, \alpha} \mu H \gamma^{\alpha} S_f^{\alpha}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $G_{\alpha\beta}(f_1, f_2)$ — тензор электронного взаимодействия, включающий в себя как обменное, так и чисто магнитное взаимодействие; $A_{ij}^{\alpha\beta}(f_1, f_2)$ — тензор магнитоупругого взаимодействия; S_f^{α} ($\alpha = 1, 2, 3$) — компоненты векторного оператора спина; u_{ij} — компоненты тензора деформаций; γ^{α} — направляющие косинусы магнитного поля H ; G_0 — константа (в смысле независимости от спиновых операторов).

Вид тензоров $G_{\alpha\beta}$ и $A_{ij}^{\alpha\beta}$ зависит, разумеется, от типа кристаллической решетки. Введение в гамильтониан членов, описывающих маг-

нитное взаимодействие, позволяет снять обменное вырождение уже в нулевом приближении. Для упрощения предполагаем дополнительно, что на каждый узел приходится один «ферромагнитный» электрон, а внешнее магнитное поле считаем достаточно сильным, чтобы кристалл в данном направлении был намагничен почти до насыщения.

Путь решения. Можно считать, что гамильтониан $\mathcal{H}$ зависит от компонент u_{ij} как от параметров, и поэтому для нахождения основного уровня системы и ее энергетического спектра можно применить методы, разработанные в общей теории. А именно, перейдем, пользуясь известными соотношениями, от спиновых операторов S_j^z к ферми-операторам a_{fj} , и, далее, рассматривая лишь слабые возбуждения, когда состояния системы близки к основному (низкие температуры), применим метод приближенного вторичного квантования.

Это дает возможность привести гамильтониан к диагональному виду:

$$\mathcal{H} = E_0 + \Delta E_0 + \sum_k E_k \xi_k^+ \xi_k, \quad (2)$$

где E_0 — энергия основного уровня; ΔE_0 — поправка к нему; E_k — некоторая функция волнового числа, характеризующая спектр элементарных возбуждений; ξ_k — бозе-операторы.

Энергию системы с гамильтонианом в форме (2) можно интерпретировать как энергию идеального газа квази-частиц (элементарных возбуждений), подчиняющихся статистике Бозе; E_k — энергетический спектр квази-частиц. Энергетические уровни системы будут определяться наборами чисел заполнения квази-частиц в состояниях E_k .

Величины E_0 , ΔE_0 и E_k в ходе преобразований от (1) к (2) получают в явной форме через компоненты тензоров $G_{\alpha\beta}(f_1, f_2)$, $A_{ij}^{\alpha\beta}(f_1, f_2)$ и u_{ij} , направляющие косинусы вектора намагниченности; они зависят также от величины внешнего магнитного поля. Знание энергетического спектра позволяет обычным путем вычислить сумму состояний

$$Z = \text{След} \left\{ e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right\} = e^{-\frac{E_0 + \Delta E_0}{\vartheta}} \sum_{\dots N_k \dots} e^{-\frac{\sum N_k E_k}{\vartheta}}, \quad (3)$$

а следовательно, и свободную энергию системы

$$\Psi = E_0 + \Delta E_0 + \vartheta \sum \ln(1 - e^{-\frac{E_k}{\vartheta}}) \quad (\vartheta = kT). \quad (4)$$

Результаты. Приближенное вычисление выражения (4) даст в раскрытой форме свободную энергию в виде

$$\begin{aligned} \Psi = & - \left\{ \frac{NG_0}{2V} - \frac{N\mu H}{V} - \frac{\vartheta}{2\pi^2} \frac{V\pi}{4} \left(\frac{\vartheta}{\beta} \right)^{3/2} e^{-\frac{2\mu H - \Delta}{\vartheta}} \right\} - & (= \Psi_0) \\ & - \left\{ \frac{N\Delta}{2V} - \frac{3V\pi\Delta}{8\pi^2} \left(\frac{\vartheta}{\beta} \right)^{3/2} e^{-\frac{2\mu H - \Delta}{\vartheta}} \right\} \gamma_3^2 - & (= \Psi_1) \\ & - \left\{ \frac{N}{2V} - \frac{V\pi}{8\pi^2} \left(\frac{\vartheta}{\beta} \right)^{3/2} e^{-\frac{2\mu H - \Delta}{\vartheta}} \right\} \xi(u_{ij}, \gamma_\alpha, \gamma_\beta) & (= \Psi_2), \end{aligned} \quad (5)$$

где первый пространственно изотропный член Ψ_0 является аналогом соответствующего блоховского выражения, второй Ψ_1 описывает свободную энергию магнитной анизотропии, полученную ранее в работе

С. В. Тябликова (7), а Ψ_2 свободную магнитоупругую энергию, причем вид формы

$$\xi(u_{ij}, \gamma_\alpha, \gamma_\beta) = \sum \bar{A}_{ij}^{\alpha\beta} u_{ij} \gamma_\alpha \gamma_\beta \quad (6)$$

зависит от типа решетки.

В выражении (5) $\Delta = G_\alpha - G_0$; $G_0 = \bar{G}_{11} = \bar{G}_{22}$, $G_\alpha = \bar{G}_{33}$ (Δ — величина порядка первой константы анизотропии, отнесенной на 1 атом); $\bar{G}_{\alpha\beta}$ и $\bar{A}_{ij}^{\alpha\beta}$ — усредненные по решетке значения тензоров $G_{\alpha\beta}(f_1, f_2)$ и $A_{ij}^{\alpha\beta}(f_1, f_2)$; β — величина, основная часть которой пропорциональна обменному интегралу.

Вводя в рассмотрение упругую энергию кристалла и исследуя полученное выражение для свободной энергии на минимум относительно u_{ij} , найдем при фиксированном направлении поля равновесные значения $u_{ij} = u_{ij}^0$, при помощи которых получим относительное магнито-стрикционное удлинение.

Константы магнито-стрикции для гексагональных кристаллов представляются следующими выражениями

$$\kappa_i = \kappa_i^0 \left\{ 1 - \frac{V}{4N} \left(\frac{\vartheta}{\pi \beta_{\text{гекс}}} \right)^{1/2} e^{-\frac{2\mu H - \Delta}{\vartheta}} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, 5), \quad (7)$$

например,

$$\kappa_1^0 = \frac{N}{V} [c_1^{\text{гекс}} (2 \bar{A}_{11}^{33} - \bar{A}_{11}^{11} - \bar{A}_{11}^{22}) - c_2^{\text{гекс}} \bar{A}_{33}^{33}]; \quad (8)$$

для кубических кристаллов

$$\lambda_{[100]} = \lambda_{[100]}^0 f(\vartheta, H); \quad \lambda_{[111]} = \lambda_{[111]}^0 f(\vartheta, H);$$

$$f(\vartheta, H) = \left\{ 1 - \frac{V}{4N} \left(\frac{\vartheta}{\pi \beta_{\text{куб}}} \right)^{1/2} e^{-\frac{2\mu H}{\vartheta}} \right\}; \quad (9)$$

$$\lambda_{[100]}^0 = \frac{N c_1^{\text{куб}} \bar{A}_1^{\text{куб}}}{V}, \quad \lambda_{[111]}^0 = \frac{N c_2^{\text{куб}} \bar{A}_2^{\text{куб}}}{V}, \quad (10)$$

где $c_1^{\text{гекс}}$, $c_2^{\text{гекс}}$, $c_1^{\text{куб}}$, $c_2^{\text{куб}}$ — константы, зависящие от модулей упругости кристаллов.

Формулы (7) и (9) дают явную зависимость констант магнито-стрикции от температуры и, кроме того, от поля. Отметим, что константы κ_i^0 ; $\lambda_{[100]}^0$ и $\lambda_{[111]}^0$ зависят от компонент тензоров $G_{\alpha\beta}$ и $A_{ij}^{\alpha\beta}$, которые при переходе от координатного представления к представлению вторичного квантования вычисляются как матричные элементы операторов соответствующих взаимодействий при помощи принятой системы волновых функций. Естественно, что а priori они могут иметь различные знаки. Следовательно, и константы κ_i^0 , $\lambda_{[100]}^0$, $\lambda_{[111]}^0$ могут быть как положительными, так и отрицательными; этот результат имеет принципиальное значение, так как классическая теория могла объяснить только положительный знак (4).

Произведенные на основе анализа сделанных предположений оценки дают основание считать, что полученные выражения (5), (7) и (9) справедливы в температурном интервале от $T > \Delta/k$ (k — постоянная Больцмана) до примерно водородных температур (верхний предел зависит, конечно, от заданной точности).

Выводы. 1. Последовательно квантовомеханическое рассмотрение системы электронов в спонтанно деформированном ферромагнитном

монокристалле дает возможность объяснить явление магнитострикции и еще раз подтверждает, что само явление магнитострикции существенно связано с магнитным взаимодействием электронов.

2. Теория дает температурную зависимость констант магнитострикции в области низких температур для гексагональных и кубических кристаллов.

3. Константы магнитострикции должны обнаруживать зависимость от магнитного поля. Следует отметить, что необходимость этой зависимости была ранее предсказана Н. С. Акуловым ⁽¹⁾.

4. Между температурной зависимостью констант магнитострикции и констант анизотропии имеется аналогия, что связано с характером энергетического спектра ферромагнетиков при низких температурах.

Очевидно, что, исходя из свободной энергии в форме (4), легко получить выражение для намагниченности, однако рассмотрение этого вопроса, приводящее к ряду новых физических следствий, заслуживает специального рассмотрения.

Поступило
15 V 1954

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Н. С. Акулов, Ферромагнетизм, 1939. ² Я. И. Френкель, Zs. f. Phys., 19, 31 (1928). ³ W. Heisenberg, Zs. f. Phys., 49, 619 (1928). ⁴ С. В. Вонсовский, ЖЭТФ, 10, 762 (1940). ⁵ Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ЖЭТФ, 19, 251, 256 (1949). ⁶ Н. Н. Боголюбов, Лекції з квантової статистики, Київ, 1949. ⁷ С. В. Тябликов, ЖЭТФ, 20, 661 (1950).