

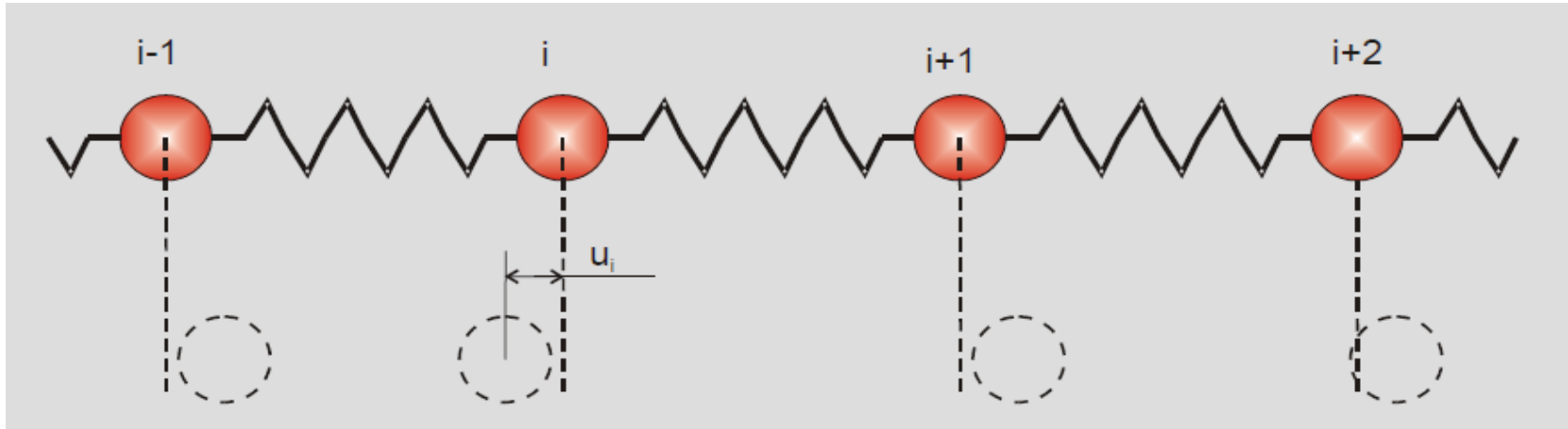
В.Н.Глазков

Спектроскопия конденсированных сред

слайды к лекции 2

**«НЕКОТОРЫЕ МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ  
СПЕКТРОВ ВОЗБУЖДЕНИЙ»**

Фононы в кристалле. «Модель шариков и пружинок»



$$M \frac{d^2 \vec{u}_j}{dt^2} = C (\vec{u}_{j+1} + \vec{u}_{j-1} - 2\vec{u}_j)$$

$$-M \omega^2 = C (e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}} - 2) = -2C (1 - \cos(\vec{k}\cdot\vec{a})) = -4C \sin^2\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}}{2}\right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{\vec{k}\cdot\vec{a}}{2}\right) \right|$$

длинноволновый предел

$$\omega = s k$$

$$s = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4C}{M}} a$$

$s \sim 1000$  м/сек,  $a \sim 0.2$  нм,  
макс. частота  $\sim 10^{13}$  1/сек

$$\omega = \frac{2s}{a} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Фононы. Квантовое рассмотрение  
одномерной модели.

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2M} \hat{p}_j^2 + \frac{C}{2} (x_{j+1} - x_j)^2$$

$$x_r = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k X_k e^{ikr}$$

$$\hat{p}_r = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k P_k e^{-ikr}$$

$$a_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar M \omega_k}} (M \omega_k X_{-k} - iP_k)$$

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar M \omega_k}} (M \omega_k X_k + iP_{-k})$$

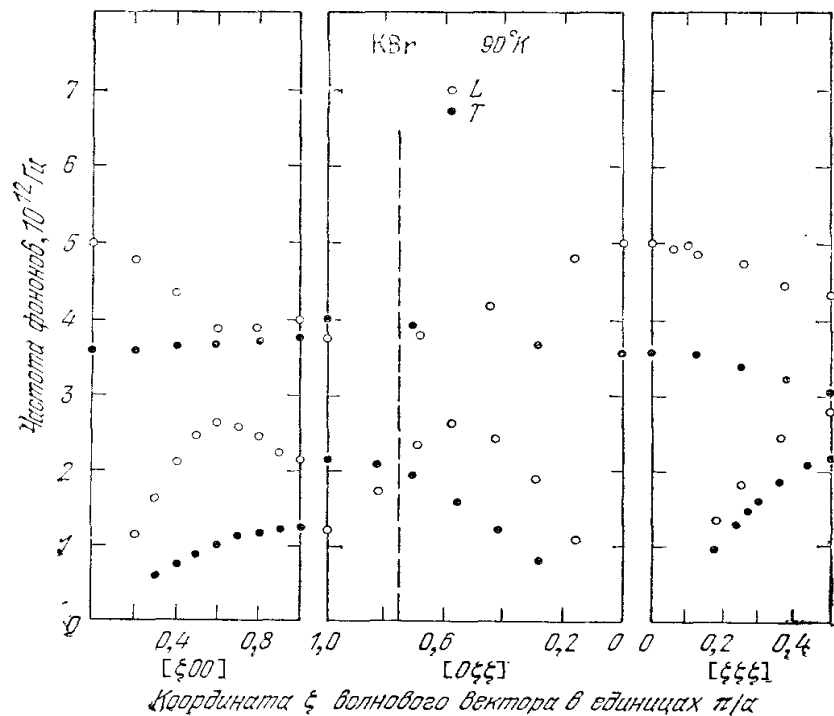
$$\omega_k = \sqrt{\frac{2C}{M} (1 - \cos(ka))} = \omega_{-k}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \sum_k \omega_k (a_k a_k^+ + a_k^+ a_k) = \hbar \sum_k \omega_k \left( a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right) = \hbar \sum_k \omega_k \left( n_k + \frac{1}{2} \right)$$

Если подобрать преобразования операторов, то получим газ невзаимодействующих квазичастиц.

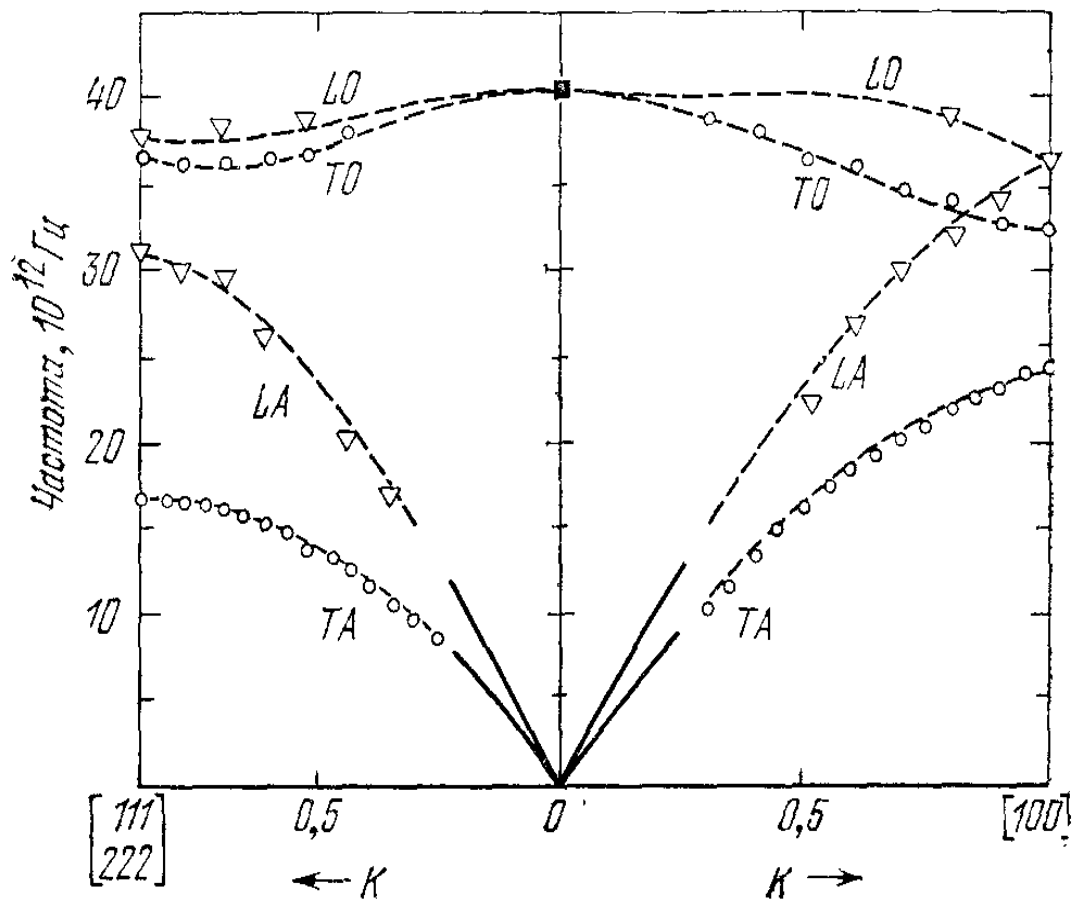
Для фононов преобразование точное в гармоническом приближении.

# Примеры фононных спектров.

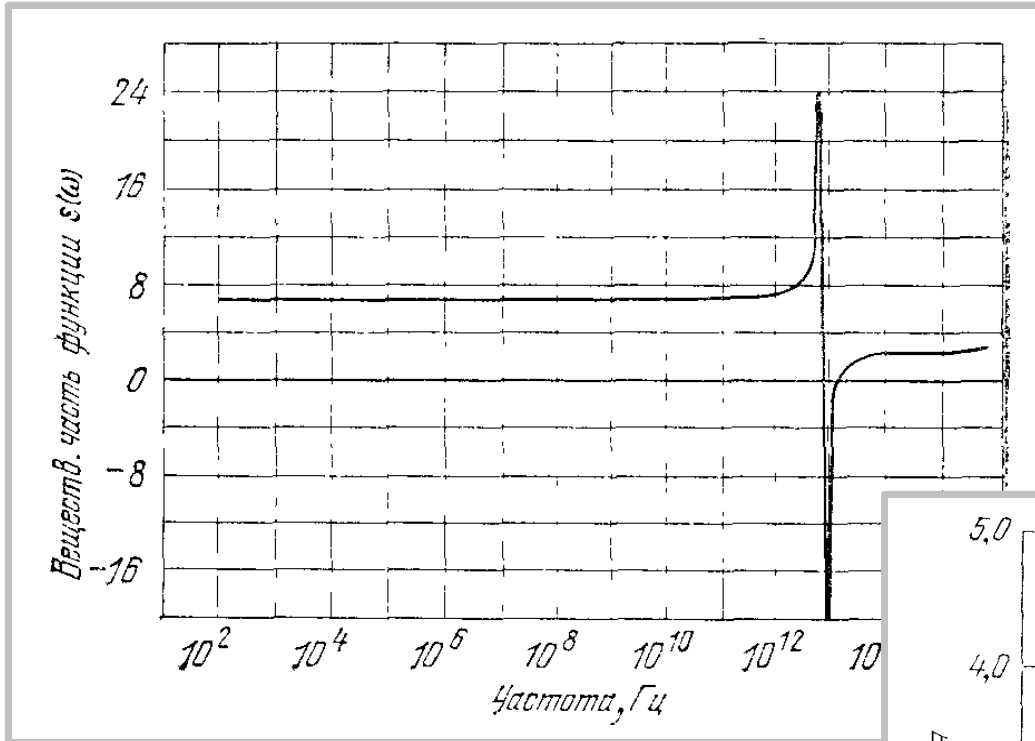


Продольные (открытые символы) и поперечные (закрашенные) фононные моды для кристалла КВг. Из книги Киттеля «Введение в физику твёрдого тела»

Фононные моды алмаза для волн распространяющихся в различных направлениях. (LA, LO, TA и TO обозначает продольные акустические, продольные оптические, поперечные акустические и поперечные оптические фононы соответственно). Из книги Киттеля «Введение в физику твёрдого тела»

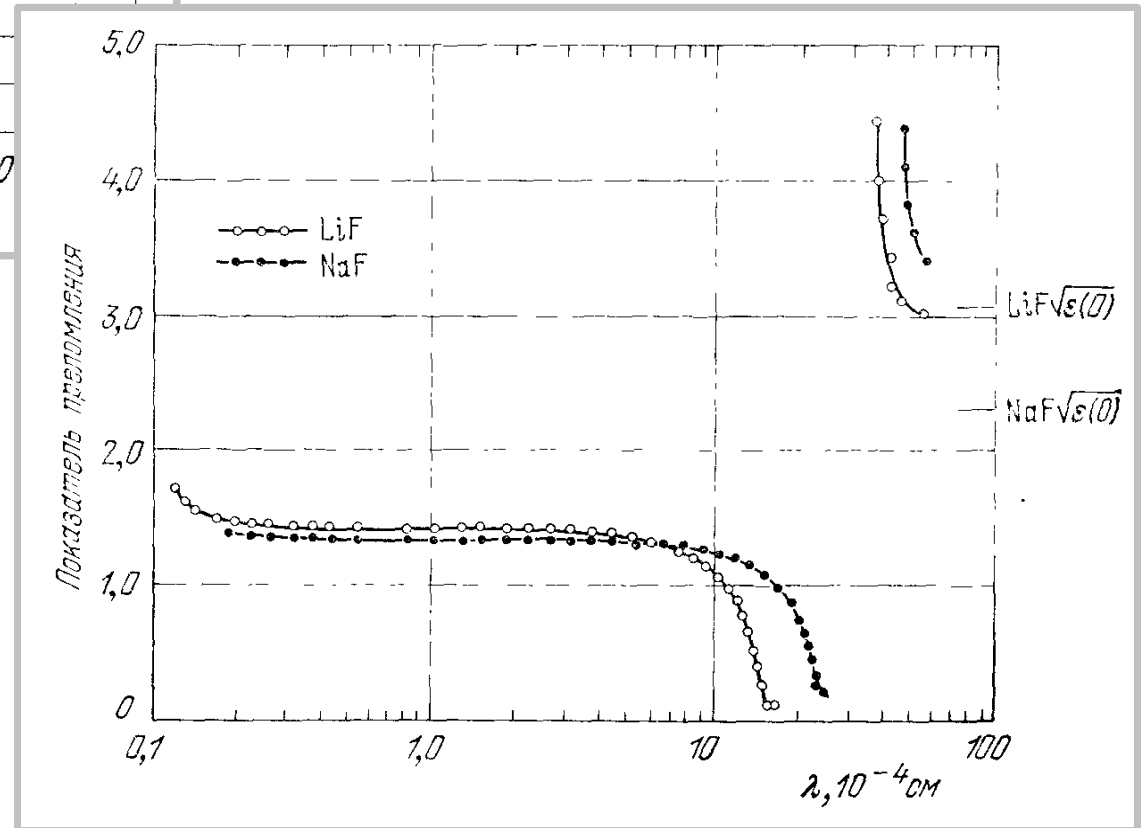


# Связанные с возбуждением оптических магнонов аномалии диэлектрической восприимчивости и показателя преломления



Аномалия в действительной части диэлектрической проницаемости SrF<sub>2</sub>, связанная с возбуждением оптических фононов. Из книги Киттеля «Введение в физику твёрдого тела»

Аномалия показателя преломления кристаллов LiF и NaF в ИК-области спектра, связанная с взаимодействием с оптическими фононами. Для сравнения со сделанными ранее оценками: длина волны  $30 \cdot 10^{-4}$  см соответствует частоте  $10^{13}$  Гц. Из книги Киттеля «Введение в физику твёрдого тела»



Магноны в ферромагнетике.  
Классическое рассмотрение.

$$E = J \sum_{i=0}^N \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \quad J < 0$$

эффективное  
обменное поле

$$\vec{B}_j = -\frac{\partial E}{\partial \vec{M}_j} = -\frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial E}{\partial \vec{S}_j}$$

$$\vec{B}_i = -\frac{J}{g\mu_B} (\vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i-1})$$

$$\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = (g\mu_B \vec{S}_i) \times \vec{B}_i = -J (\vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_i \times \vec{S}_{i-1})$$

Магноны в ферромагнетике.  
Классическое рассмотрение.

$$\hbar \frac{d \vec{S}_i}{dt} = (g \mu_B \vec{S}_i) \times \vec{B}_i = -J (\vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_i \times \vec{S}_{i-1})$$

$$\frac{d S_i^x}{dt} = -\frac{JS}{\hbar} (S_i^y - S_{i+1}^y + S_i^y - S_{i-1}^y)$$

$$S_p^x = u e^{i(ka p - \omega t)}$$

$$\frac{d S_i^y}{dt} = \frac{JS}{\hbar} (S_i^x - S_{i+1}^x + S_i^x - S_{i-1}^x)$$

$$S_p^y = v e^{i(ka p - \omega t)}$$

$$\begin{vmatrix} -i\omega & -\frac{JS}{\hbar} (2 - e^{ika} - e^{-ika}) \\ \frac{JS}{\hbar} (2 - e^{ika} - e^{-ika}) & -i\omega \end{vmatrix} = 0$$

$$-\omega^2 + 4 \left( \frac{JS}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos(ka))^2 = 0$$

$$\omega = 2|J| \frac{S}{\hbar} (1 - \cos(ka))$$

длинноволновый  
предел

$$\omega = |J| \frac{Sa^2}{2\hbar} k^2$$

Магноны в ферромагнетике.  
Преобразование Холштейна-Примакова.

$$\hat{H} = J \sum_{j, \delta} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+\delta} - g \mu_B H \sum_j S_j^z$$

Однократное  
суммирование каждой  
связи

$$S_j^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}} a_j$$
$$S_j^- = \sqrt{2S} a_j^+ \sqrt{1 - \frac{a_j^+ a_j}{2S}}$$

$$[a_j, a_l^+] = \delta_{jl}$$

$$S_j^z = S - a_j^+ a_j$$



Магноны в ферромагнетике.  
Преобразование Холштейна-Примакова.

фурье-  
преобразование

$$b_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k}\vec{r}_j} a_j$$

$$b_{\vec{k}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} a_j^+$$

рождение этих квазичастиц  
уменьшает полную проекцию  
спина

$$S = NS - \sum_j a_j^+ a_j = NS - \frac{1}{N} \sum_{j, \vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'} = NS - \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

пренебрегая взаимодействием  
частиц оставим только эти  
слагаемые.

$$S_j^z = S - a_j^+ a_j = S - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'}$$

$$S_j^+ \approx \sqrt{2S} \left( 1 - \frac{a_j^+ a_j}{4S} + \dots \right) a_j = \sqrt{\frac{2S}{N}} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j} b_{\vec{k}} - \frac{1}{4SN} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{k}'')\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'} b_{\vec{k}''} + \dots \right]$$

$$S_j^- \approx \sqrt{2S} a_j^+ \left( 1 - \frac{a_j^+ a_j}{4S} + \dots \right) = \sqrt{\frac{2S}{N}} \left[ \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^+ - \frac{1}{4SN} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} e^{i(\vec{k}+\vec{k}'-\vec{k}'')\vec{r}_j} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}'}^+ b_{\vec{k}''} + \dots \right]$$

Магноны в ферромагнетике.  
Преобразование Холштейна-Примакова.

После некоторых преобразований, отбрасывая опять взаимодействие магнонов

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \left( |J| S z \left( 1 - (\gamma_{\vec{k}} + \gamma_{-\vec{k}}) \right) + g \mu_B H \right) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$$

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i \vec{k} \cdot \vec{\delta}}$$

сумма по половине ближайших соседей, обеспечивающая однократный учёт всех обменных связей

для модели ФМ цепочки

$$\vec{\delta} = \vec{a}$$
$$z = 2$$

$$\omega_k = 2|J| \frac{S}{\hbar} (1 - \cos(ka)) + g \mu_B H$$

Квантовое рассмотрение спектра антиферромагнетика  
 выше поля насыщения

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \vec{S}_{\vec{R}} \vec{S}_{\vec{R}+\vec{\delta}} - g \mu_B H \sum_{\vec{R}} S_{\vec{R}}^z$$

сумма по всем соседям,  
 множитель  $\frac{1}{2}$  обеспечивает  
 однократный учёт всех  
 связей

$S_z$  -хорошее квантовое число,  
 основное состояние в ВЫСОКИХ ПОЛЯХ:

$$\psi_0 = |\dots \uparrow \uparrow \uparrow \dots\rangle$$

$$E_0 = -N g \mu_B H S + \frac{N}{2} S^2 \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}}$$

одночастичное возбуждение

$$\psi_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0$$

$$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{R}}$$

Квантовое рассмотрение спектра антиферромагнетика  
 выше поля насыщения

$$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \psi_{\vec{R}}$$

$$\psi_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\vec{R}}^- \psi_0$$

$$\hat{H} \psi_{\vec{R}} = E_0 \psi_{\vec{R}} + \left[ g \mu_B H - S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \right] \psi_{\vec{R}} + \frac{S}{2} \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} (\psi_{\vec{R}+\vec{\delta}} + \psi_{\vec{R}-\vec{\delta}})$$

«прыжки» возбуждения по решётке,  
 при переходе к k-пространству дадут  
 дисперсию

$$E(\vec{k}) = E_0 + g \mu_B H - S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} + S \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \cos(\vec{k} \vec{\delta})$$

Фурье образ распределения обменных интегралов по соседям!  
 Обратимость фурье-преобразования позволяет по измеренным  
 спектрам (в идеале) точно найти все обменные константы.  
 Но, для работы метода рассеяния нейтронов нужно чтобы  
 критическое поле было меньше 10-12 Тесла....