СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 7371

Н.М.Плакида, Л.С.Смирнов

МАГНИТОВИБРАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ ЗОННЫМИ МАГНЕТИКАМИ

1973

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7371

Н.М.Плакида, Л.С.Смирнов

МАГНИТОВИБРАЦИОННОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ ЗОННЫМИ МАГНЕТИКАМИ

1. Введение

Теория магнитовибрационного рассеяния медленных нейтронов наиболее полно развита для диэлектриков [1-3], которые описываются моделью локализованных спинов. В этой модели магнитовибрационная часть рассеяния, происходящая без изменения спинового состояния системы, легко находится в виде произведения статической продольной компоненты спиновой восприимчивости на корреляционную функцию смещений ионов решетки, которая и определяет неупругую передачу энергии рассеиваемого нейтрона колебаниям решетки. Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов на антиферромагнитном диэлектрике $\alpha - Fe_2O_3$, проведенные с целью наблюдения магнитовибрационного рассеяния [4], показали удовлетворительное совпадение скоростей фононов [5] и магнитовибрационных колебаний.

При рассмотрении магнитного рассеяния нейтронов в металле на основе коллективизированной модели электронов [6] магнитовибрационная часть рассеяния обычно не рассматривается /см., напр., [7] /, хотя эксперименты в этом направлении проводятся [8]. Качественно этот вопрос обсуждался Эллиоттом [9], который пришел к выводу, что сечение магнитовибрационного рассеяния пропорционально квадрату вектора магнитного взаимодействия, как и в случае модели локализованных электронов. Для последовательного обсуждения магнитовибрационного рассеяния в зонной модели магнетизма необходимо учесть в явном виде электрон-фононное взаимодействие, которое определяет неупругую передачу энергии от системы магнитных электронов колебаниям решеки в этом случае.

В настоящей работе мы рассмотрим магнитовибрационное рассеяние нейтронов в модели коллективизированных электронов при учете электрон-фононного взаимодействия. При этом для простоты рассмотрим модель однозонного ферромагнитного металла с простой решеткой Браве, следуя классической работе Изюямы, Кима и Кубо [7].

2. Магнитное сечение рассеяние

Магнитное рассеяние нейтронов системой электронных спинов в пренебрежении взаимодействием нейтрона с орбитальным движением электронов /которое в случае узких зон мало/ описывается следующим образом [7,10,11]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'} = (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k} \Sigma_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) S_{\alpha\beta}(\kappa,\omega), \qquad /1/$$

где

$$S_{\alpha\beta}(\kappa,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \langle \sigma_\alpha(\kappa,t)\, \sigma_\beta(-\kappa) \rangle \qquad /2/$$

и $\vec{\kappa} = \vec{k}' - \vec{k}$, $\omega = E' - E$ - передача импульса и энергии нейтрона при рассеянии из состояния $\vec{k}$ в $\vec{k}'$ $(\hbar = 1)$, $\vec{e} = \vec{\kappa}/|\kappa|$ - единичный вектор рассеяния. Оператор спиновой плотности, например, его z-компонента, в представлении вторичного квантования по блоховским функциям имеет вид:

$$\sigma_z(\kappa) = \int d^3r\, e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}} \psi^+(r) \hat{\sigma}_z \psi(r)$$

$$= \sum_p F(\kappa,p) \frac{1}{2} (a^+_{\vec{p}-\vec{\kappa}\uparrow} a_{\vec{p}\uparrow} - a^+_{\vec{p}-\vec{\kappa}\downarrow} a_{\vec{p}\downarrow}), \qquad /3/$$

где $a^+_{\vec{p}\sigma}$ и $a_{\vec{p}\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов в блоховском состоянии $\phi_{\vec{p}}(r)$ с проекцией спина

$\sigma = (\uparrow\downarrow)$. Формфактор в /3/ можно представить в виде:

$$F(\kappa,p) = \int d^3 r\, e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}}\, \phi^*_{\vec{p}-\vec{\kappa}}(r)\phi_{\vec{p}}(r) = \sum_{\ell} e^{-i\vec{p}\vec{\ell}} \int d^3 r\, e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}}\, w^*(\vec{r})\, w(\vec{r}+\vec{\ell}\,), \qquad /4/$$

если воспользоваться представлением функций Блоха по локализованным в узлах решетки ℓ функциям Ванье $w(\vec{r}-\vec{\ell}\,)$. Пренебрегая в приближении сильной связи перекрытием функций Ванье в /4/ на различных узлах решетки, формфактор можно записать в виде $(\ell=0)$:

$$F(\kappa,p) \simeq F(\kappa) = \int d^3 r\, e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}}\, w^*(\vec{r}\,)\, w(\vec{r}\,), \qquad /4а/$$

а оператор спиновой плотности /3/ - в виде:

$$\sigma_z(\kappa) = F(\kappa)\, \sigma'_z(q), \qquad /3а/$$

где, пользуясь периодичностью функций Блоха в обратном пространстве, мы ввели приведенный к первой зоне Бриллюэна вектор $q = \kappa - 2\pi\tau$.

При рассмотрении магнитовибрационного рассеяния, происходящего без изменения спинового состояния системы, необходимо вычислить продольную восприимчивость системы, которую согласно /2-/4/, представим в виде:

$$S_{zz}(\kappa,\omega) = \frac{1}{4}|F(\kappa)|^2 \frac{n(\omega)}{\pi} Im \langle\langle \sigma'_z(q)\,|\,\sigma'_z(-q)\rangle\rangle_{-\omega+i\epsilon}, \qquad /5/$$

где мы ввели запаздывающую термодинамическую функцию Грина коммутаторного типа в обозначениях [12]:

$$\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[A(t),B(t')]\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega(t-t')}\langle\langle A\,|\,B\rangle\rangle_{\omega}, \qquad /6/$$

связанную с корреляционной функцией, определенной согласно /2/, соотношением:

$$\langle A|B\rangle_{\omega} = \frac{n(\omega)}{\pi} Im \langle\langle A|B\rangle\rangle_{-\omega+i\epsilon}, \qquad /7/$$

где $n(\omega)=(e^{\omega/kT}-1)^{-1}$ - бозе-распределение. Перейдем к определению функции Грина в /5/.

3. Электрон-фононное взаимодействия и магнитовибрационное рассеяние

Электрон-фононное взаимодействие определяется изменением потенциалов ионов решетки $v(\vec{R})$ при учете их тепловых колебаний:

$$H_{e-ph} = \sum_{\ell, i} \{ v(\vec{R}_\ell - \vec{r}_i) - \langle v(\vec{R}_\ell - \vec{r}_i)\rangle_{ph} \}, \qquad /8/$$

где координаты ионов $\vec{R}_\ell = \vec{\ell} + \vec{u}_\ell$, $\vec{\ell}$ - равновесные положения и $\vec{u}_\ell$ - тепловые смещения, $\vec{r}_i$ - координаты электронов. В отличие от общепринятого подхода[6,10,11] блоховские функции определяем по усредненному по колебаниям решетки потенциалу ионов $\tilde{v}(\vec{\ell}-\vec{r}) = \langle v(\vec{R}_\ell - \vec{r})\rangle_{ph}$:

$$\{-\frac{1}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + \sum_{\ell} \tilde{v}(\vec{\ell}-\vec{r})\}\phi_{\vec{p}}(r) = \epsilon_{\vec{p}}\phi_{\vec{p}}(r), \qquad /9/$$

что позволяет учесть упругие процессы электрон-фононного рассеяния. В представлении вторичного квантования по одночастичным функциям Блоха /9/ гамильтониан однозонной модели запишем в виде[6]:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \qquad /10/$$

$$H_e = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a^{+}_{p\sigma} a_{p\sigma} + \frac{v}{2}\sum_{pp'k} a^{+}_{p+k\sigma} a_{p\sigma} a^{+}_{p',-\sigma} a_{p'+k,-\sigma} \qquad /10а/$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_q b^{+}_q b_q \qquad /10б/$$

$$H_{e-ph} = \sum_{pq} V_{p,p+q}\, a^{+}_{p\sigma} a_{p+q\sigma} \frac{1}{N} \sum_{\ell} e^{i\vec{q}\vec{\ell}} \left(e^{i\vec{q}\vec{u}_{\ell}} - \langle e^{i\vec{q}\vec{u}_{\ell}} \rangle \right), \qquad /10в/$$

где $v = u/N$ - энергия кулоновской корреляции в одном узле, $V = V_0 N$ - объем системы, b^{+}_{q} и b_q - операторы рождения и уничтожения фононов с квазиимпульсом $\vec{q}$, поляризацией j и энергией $\omega_{\vec{q}j}$, $q = (\vec{q}, j)$. Матричный элемент электрон-ионного взаимодействия имеет вид

$$V_{p,p+q} = v(q) \int d^3 r \phi^{*}_{\vec{p}}(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \phi_{\vec{p}+\vec{q}}(\vec{r}) = \qquad /11/$$

$$= v(q) F(q, p+q) \simeq V_q \;,$$

где $v(q) = (1/V_0) \int d^3 r\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} v(r)$ - фурье-компонента электрон-ионного потенциала. Как обычно, в модели одной узкой зоны предполагается, что потенциал $v(\vec{R}_{\ell} - \vec{r})$ в /8/-/10/ имеет смысл эффективного /экранированного электронами проводимости/ потенциала взаимодействия магнитных электронов и ионов.

Учитывая определения /3/, /3а/, рассмотрим функцию Грина [7]:

$$G_{\sigma}(q, t) = \sum_{p} \langle\langle \theta_{p\sigma}(q, t); \sigma'_z(-q) \rangle\rangle, \qquad /12/$$

где

$$\theta_{p\sigma}(q) = a^{+}_{p-q\sigma} a_{p\sigma}, \quad \sigma'_z(q) = \frac{1}{2} \sum_{p} \{ \theta_{p\uparrow}(q) - \theta_{p\downarrow}(q) \}.$$

Уравнение для фурье-компоненты функции Грина /12/ в приближении случайных фаз [7] для системы с гамильтонианом /10/ имеет вид:

$$(\omega + \epsilon_{p-q} - \epsilon_p) \langle\langle \theta_{p\sigma}(q) | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2} \eta_{\sigma} (n_{p-q\sigma} - n_{p\sigma}) +$$

$$+ v(n_{p-q\sigma} - n_{p\sigma}) \sum_{p'} \langle\langle \theta_{p',-\sigma}(q) | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_{\omega} + \qquad /13/$$

$$+ (n_{p-q\sigma} - n_{p\sigma}) \langle\langle M_{-q} | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_{\omega} \;,$$

где $\eta_\uparrow = 1$, $\eta_\downarrow = -1$, $n_{p\sigma} = \langle a^+_{p\sigma} a_{p\sigma} \rangle$ и введен для сокращения записи оператор фононных переменных

$$M_q = \frac{1}{N} \sum_{\ell} V_q \, e^{i\vec{q}\vec{\ell}} \left(e^{i\vec{q}\vec{u}_\ell} - \langle e^{i\vec{q}\vec{u}_\ell} \rangle \right). \qquad /14/$$

Последний член в правой части /13/ получен в приближении:

$$\langle\langle a^+_{p-q\sigma} a_{p+q'\sigma} M_{q'} | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_\omega \simeq n_{p-q\sigma} \, \delta_{-q,q'} \langle\langle M_{-q} | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_\omega, \qquad /15/$$

которое позволяет учесть неупругую передачу энергии и импульса от системы электронов к фононной системе /отклик фононной системы на внешнее возмущающее поле $\sigma_z(-q, t')$ /12/ /. Обычную в теории электрон-фононного взаимодействия перенормировку и затухание одноэлектронных состояний /см., напр. /13/ / здесь не будем учитывать,поскольку она не дает существенных поправок. Составляя аналогичное /13/ уравнение для функции Грина $\langle\langle \theta_{p,-\sigma}(q) | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle$ /7/, получаем для функции Грина /12/ выражение /ср. с /7/ /:

$$G_\sigma(q,\omega) = \frac{\pi_\sigma}{1 - v^2 \pi_\sigma \pi_{-\sigma}} \left\{ \frac{1}{2} \eta_\sigma (1 - v\pi_{-\sigma}) + (1 + v\pi_{-\sigma}) \times \right. \qquad /16/$$

$$\left. \times \langle\langle M_{-q} | \sigma'_z(-q) \rangle\rangle_\omega \right\},$$

где

$$\pi_\sigma \equiv \pi_\sigma(q, \omega) = \sum_p \frac{n_{p-q\sigma} - n_{p\sigma}}{\epsilon_{p-q} - \epsilon_p + \omega} \qquad /17/$$

- поляризационный оператор в приближении случайных фаз.

Для определения смешанной электрон-фононной функции Грина в /16/ рассмотрим уравнение для функции Грина

$$G^{ph}_\sigma(q, t-t') = \sum_{p'} \langle\langle M_q(t); \theta_{p'\sigma}(q, t') \rangle\rangle, \qquad /18/$$

дифференцируя ее по t'. Повторяя вычисления, аналогичные /13/, /15/, получаем

$$G_{\sigma}^{ph}(q,\omega)=\frac{\pi_{\sigma}+v\pi_{\sigma}\pi_{-\sigma}}{1-v^{2}\pi_{\sigma}\pi_{-\sigma}}\ll M_q|M_{-q}\gg_{\omega} \qquad /19/$$

и для функции Грина в /16/ с учетом определений в /12/ найдем

$$\ll M_{-q}|\sigma_z'(-q)\gg_{\omega}=\frac{1}{2}\frac{\pi\uparrow-\pi\downarrow}{1-v^{2}\pi\uparrow\pi\downarrow}\ll M_{-q}|M_q\gg_{\omega}. \qquad /20/$$

Следовательно, магнитовибрационная часть функции Грина от продольных компонент спина, определяемая последним членом в /16/, имеет вид:

$$\ll\sigma_z'(q)|\sigma_z'(-q)\gg_{\omega}^{\text{MB}}=\left(\frac{1}{2}\frac{\pi\uparrow-\pi\downarrow}{1-v^{2}\pi\uparrow\pi_{\downarrow}}\right)^{2}\ll M_{-q}|M_q\gg_{\omega}. \qquad /21/$$

Фононная функция Грина в /21/ описывает неупругие процессы фононного рассеяния. Однофононная часть этой функции может быть записана в виде

$$\ll M_{-q}|M_q\gg_{\omega}^{(1)}=|V_q|^{2}e^{-2W(q)}\frac{1}{N^{2}}\sum_{\ell m}e^{-i\vec q(\vec\ell-\vec m)}\ll\vec q\vec u_{\ell}|\vec q\vec u_m\gg_{\omega}=$$

$$=|V_q|^{2}e^{-2W(q)}\frac{(2\pi)^{3}}{NV_0}\frac{1}{NM}\sum_{\tau pj}\delta(\vec q-\vec p-2\pi\vec\tau)\frac{(\vec q\vec e_{pj})^{2}}{\omega^{2}-\omega_{pj}^{2}}, \qquad /22/$$

где однофононную функцию Грина мы выписали в гармоническом приближении /10б/, пренебрегая электрон-фононным взаимодействием, а учет всех упругих процессов в исходной функции Грина $\ll e^{-i\vec q\vec u_{\ell}}|e^{i\vec q\vec u_m}\gg$ дал фактор Дебая-Валлера:

$\langle e^{i\vec q\vec u_{\ell}}\rangle\equiv e^{-W(q)}$ /см., например [14]/.

Таким образом, сечение магнитовибрационного рассеяния при учете однофононного перехода, согласно /1/, /5/, /21/, /22/, принимает окончательный вид:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE'}\right)_{\text{мв}} = (\gamma r_0)^2 \frac{k'}{k}(1-e_z^2)\frac{1}{4}|F(\kappa)|^2 \frac{1}{4}\left[\frac{1/N(\pi\uparrow - \pi\downarrow)}{1-v^2\pi\uparrow\pi\downarrow}\right]^2 |V_q|^2 \times$$

$$\times\Big\{ e^{-2W(q)} \frac{(2\pi)^3}{MV_0} \sum_{\tau pj} \frac{(\vec{q}\vec{e}_{\vec{p}j})^2}{2\omega_{pj}} \left[n(\omega_{pj}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right] \times \qquad /23/$$

$$\times\, \delta(\vec{q} \pm \vec{p} - 2\pi\vec{\tau})\, \delta(\omega \pm \omega_{pj})\Big\}.$$

При вычислении мнимой части полной функции Грина /21/, согласно /5/, мы пренебрегли частотной зависимостью поляризационного оператора /17/, поскольку в области частот $\omega \sim \omega_q \ll \epsilon_F$ -фермиевской энергии электронов можно пользоваться статическим приближением: $\pi_\sigma(q,\omega) \approx \pi_\sigma(q, \omega = 0)$.

При обсуждении полученного выражения отметим, что множитель в фигурных скобках в /23/ имеет обычный для однофононного ядерного рассеяния вид, так что коэффициент перед ним играет роль эффективного сечения магнитовибрационного рассеяния:

$$\sigma_{\text{мв}}(\kappa) = (\gamma r_0)^2 (1-e_z^2)\frac{1}{4}|F(\kappa)|^2 |V_q|^2 \frac{1}{4}\left[\frac{1/N(\pi\uparrow - \pi\downarrow)}{1-v^2\pi\uparrow\pi\downarrow}\right]^2. \qquad /24/$$

Как видно, это сечение помимо обычных для упругого магнитного рассеяния множителей $((1-e_z^2)|F(\kappa)|^2$ и квадрата намагниченности $(N\uparrow - N\downarrow)^2 \sim (\pi\uparrow - \pi\downarrow)^2)$, как и в модели локализованных спинов, дополнительно содержит квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия $|V_q|^2$, что позволяет оценить его величину по магнитовибрационному рассеянию в металле. Для сравнения полученного сечения /23/ с экспериментальными данными необходимо провести численные расчеты входящих в /24/ величин для конкретной модели металла, что предполагается сделать в отдельной работе.

Авторы выражают благодарность Р.А.Алиханову за предложение темы и плодотворные обсуждения.

Литература

1. *R.I.Elliott, R.D.Lowde. Proc.Roy.Soc., A236, 46 (1955).*
2. *A.W.Saenz. Phys.Rev., 119, 1542 (1960).*
3. *В.Н.Кащеев, М.А.Кривоглаз. ФТТ, 3, 1541, 1961; В.Н.Кащеев, ФТТ, 4, 1432, 1962.*
4. *Р.А.Алиханов, В.А.Бурлаков, Л.С.Смирнов. Труды X Международной конференции по физике низких температур, том 4, стр. 195, Москва, 1966.*
5. *I.Shapira. Phys.Rev., 184, 589 (1969).*
6. *A.Blandin. Theory of Condensed Matter, p. 691, IAEA, Vienna, 1968.*
7. *T.Jzuyama, D.Kim, R.Kubo. J.Phys.Soc.Jap., 18, 1025 (1963).*
8. *R.D.Lowde. Proc.Roy.Soc., A235, 305 (1956); O.Steinsvoll. Neutron Inelastic Scattering v. II, p. 45, IAEA, Vienna, 1968.*
9. *R.I.Elliott. Proc. Roy. Soc., A235, 289 (1956).*
10. *Ю.А.Изюмов, Р.П.Озеров. Магнитная нейтронография. Наука, 1966.*
11. *W.Marshall, S.W.Lovesay. Theory of the Thermal Neutron Scattering. Oxford, 1971.*
12. *Д.Н.Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, §16, Наука, 1971.*
13. *P.K.George. Physica 49, 278 (1970).*
14. *Н.М.Плакида. ФТТ, 14, 2841, 1972.*

Рукопись поступила в издательский отдел
27 июля 1973 года.