

# Heisenberg 反铁磁超晶格的自旋波\*

钟 健

东南大学物理系, 南京, 210018

1989 年 5 月 12 日收到

考虑由两种不同的 Heisenberg 及铁磁膜组成的磁性超晶格结构, 通过线性化的 Holstein-Primakoff 变换和 Green 函数理论, 计算了自旋波色散关系. 有趣的是, 视一个超原胞内原子平面数为奇或偶, 结果有差异, 意味着宏观性质也会有差异.

PACC: 7530D; 7510J; 7570; 7550E

## 一、理论计算

磁性超晶格作为一种新型的人工材料, 有可能具有特殊的性能. 近来, 实验<sup>[1,2]</sup>和理论<sup>[3-10]</sup>工作者开始注意磁性超晶格的研究. 文献[3,6]讨论了由两种不相同的 Heisenberg 铁磁膜组成的超晶格的自旋波谱. 本文研究由两种不相同的 Heisenberg 反铁磁膜 A 和 B 组成的超晶格的自旋波谱. 假设各层反铁磁膜均有简单立方结构, 并且取相同的晶格常数  $d$ , 又设相邻层间界面都平行于(100)面, 超晶格的调制沿  $x$  方向. 将超晶格分成两套子晶格 1 和 2, 它们的格点互为最近邻, 每个子格中自旋趋于平行排列而两个子格的自旋趋于反平行. 设子格 1 上的自旋倾向于沿  $+z$  方向, 而子格 2 的自旋倾向于沿  $-z$  方向排列. 如果 A, B 膜的原子平面数分别为  $l_A$  和  $l_B$ , 那么沿调制方向原子结构的超周期为  $(l_A + l_B)d$ . 必须区分  $(l_A + l_B)$  为偶或奇数的不同情形. 当它是偶数时, 磁有序化的周期等于原子结构超周期  $(l_A + l_B)d$ ; 当  $(l_A + l_B)$  是奇数时, 则要将超周期扩大一倍, 即磁有序化的周期是原子结构周期的两倍, 即  $2(l_A + l_B)d$ . 下面就两种情形分别讨论:

### 1. $l_A + l_B =$ 偶数的情形

自旋系统的哈密顿量可以写成

$$\hat{H} = - \sum_{mi} \sum_{m'i'} J_{mi, m'i'} \left[ S_{mi}^z S_{m'i'}^z + S_{mi}^+ S_{m'i'}^- \right] + \frac{1}{2} (S_{mi}^+ S_{m'i'}^- + S_{mi}^- S_{m'i'}^+)$$

\* 国家自然科学基金和中国科学院物理研究所磁学开放研究实验室基金资助的课题.

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} (S_{1mi}^+ S_{1m'l'i'}^- + S_{2mi}^- S_{2m'l'i'}^+) \Big] \\
& - g\mu(H + H_1) \sum_{mi} S_{1mi}^z - g\mu(H - H_1) \sum_{mi} S_{2mi}^z, \quad (1)
\end{aligned}$$

式中  $m, m' (=1, 2, \dots, N_x)$  是超原胞的标号;  $l, l' (=1_A, \dots, l_A, 1_B, \dots, l_B)$  是一个超原胞内原子平面的标号;  $i, i'$  代表一个原子平面内的各个格点. 各个求和限于指定的子格 1 或 2. 又  $H_1$  和  $H$  分别是晶场和外磁场, 均在  $z$  方向. 为简单起见, 已假定 A 和 B 膜中的原子有相同的自旋  $S$  和迴磁比  $g$  ( $\mu$  是玻尔磁子), 差别仅在于交换积分  $J_{mli, m'l'i'} (<0)$  的数值不同,

$$J_{mli, m'l'i'} = \begin{cases} J_A & mli, m'l'i' \text{ 为最近邻, 且均属于 A;} \\ J_B & mli, m'l'i' \text{ 为最近邻, 且均属于 B;} \\ J_{AB} & mli, m'l'i' \text{ 为最近邻而分属 A 和 B;} \\ 0 & \text{其它情形.} \end{cases} \quad (2)$$

此外, (1) 式中  $S^\pm$  是自旋上升、下降算符,  $S^z$  是自旋算符的  $z$  分量.

对于低激发态, 可作如下的 Holstein-Primakoff 变换:

$$\begin{aligned}
S_{1mi}^+ &= \sqrt{2S} a_{1mi}, & S_{1mi}^- &= \sqrt{2S} a_{1mi}^\dagger, \\
S_{2mi}^+ &= \sqrt{2S} a_{2mi}^\dagger, & S_{2mi}^- &= \sqrt{2S} a_{2mi}, \\
S_{1mi}^z &= S - a_{1mi}^\dagger a_{1mi}, & S_{2mi}^z &= a_{2mi}^\dagger a_{2mi} - S, \quad (3)
\end{aligned}$$

算符  $a, a^\dagger$  服从玻色对易规则. 再作傅里叶变换

$$\begin{aligned}
a_{1mi} &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{1mi}} a_{1\mathbf{k}l}, \\
a_{2mi} &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{2mi}} a_{2\mathbf{k}l}, \quad (4)
\end{aligned}$$

式中  $N = N_{\parallel} N_x$  ( $N_{\parallel}$  是一个原子平面内子格 1 或 2 的自旋数)  $\mathbf{R}_{1mi}, \mathbf{R}_{2mi}$  是子格 1, 2 上的格点位矢. 经 HP 变换(3)式, 哈密顿量(1)式变成二次型, 将它记作  $\hat{H}_{HP}$ , 在动量空间表示为

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{HP} &= -2S^2 \sum_{mi} \sum_{m'l'i'} J_{mli, m'l'i'} - 2g\mu H_1 N \\
&- 2S \left[ \sum_{(l=1_A, l_A)}^{k'l} (J_{AB} + 5J_A) \hat{A}_{\mathbf{k}l} + \sum_{(l=1_B, l_B)}^{k'l} (J_{AB} + 5J_B) \hat{A}_{\mathbf{k}l} \right. \\
&+ \left. \sum_{(l \in A, l_A)}^{k'l} 6J_A \hat{A}_{\mathbf{k}l} + \sum_{(l \in B, l_B)}^{k'l} 6J_B \hat{A}_{\mathbf{k}l} \right] \\
&+ g\mu(H_1 + H) \sum_{k'l} a_{1k'l}^\dagger a_{1k'l} + g\mu(H_1 - H) \sum_{k'l} a_{2k'l}^\dagger a_{2k'l} \\
&- 2S \left[ \sum_{\mathbf{k}} J_{AB} (\hat{B}_{\mathbf{k}} + \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger) + \sum_{\mathbf{k}, l \in A} J_A (\hat{C}_{\mathbf{k}l}^\dagger + \hat{C}_{\mathbf{k}l}) \right]
\end{aligned}$$

$$+ \sum_{k' \in B} J_B (\hat{D}_{k'l} + \hat{D}_{k'l}^\dagger) \Big], \quad (5)$$

式中

$$\hat{A}_{k'l} = a_{1k'l}^\dagger a_{1k'l} + a_{2k'l}^\dagger a_{2k'l}, \quad (6)$$

$$\hat{B}_k = a_{1k'l_A} a_{2k'l_B} f + a_{1k'l_A} a_{2k'l_B} \bar{f} + a_{1k'l_B} a_{2k'l_A} f + a_{1k'l_B} a_{2k'l_A} \bar{f}, \quad (7)$$

$$\hat{C}_{k'l} = a_{1k'l} a_{2k'l} \gamma(k_{\parallel}) + a_{1k'l} a_{2k'l+1} \bar{f} (1 - \delta_{l,l_A}) + a_{1k'l} a_{2k'l-1} f (1 - \delta_{l,l_A}), \quad (8)$$

$$\hat{D}_{k'l} = a_{1k'l} a_{2k'l} \gamma(k_{\parallel}) + a_{1k'l} a_{2k'l+1} \bar{f} (1 - \delta_{l,l_B}) + a_{1k'l} a_{2k'l-1} f (1 - \delta_{l,l_B}), \quad (9)$$

式中

$$f = \exp(ik_x d), \quad \bar{f} = \exp(-ik_x d),$$

$$\gamma(k_{\parallel}) = 2[\cos(k_y d) + \cos(k_z d)], \quad (10)$$

$\hat{A}_{k'l}^\dagger, \hat{B}_k^\dagger, \hat{C}_{k'l}^\dagger, \hat{D}_{k'l}^\dagger$  分别是  $\hat{A}_{k'l}, \hat{B}_k, \hat{C}_{k'l}$  和  $\hat{D}_{k'l}$  的厄密共轭。

以  $G(\hat{Q}_1, \hat{Q}_2)$  表示算符  $\hat{Q}_1, \hat{Q}_2$  的推迟格林函数的傅氏分量, 利用格林函数运动方程<sup>[11]</sup>

$$\hbar\omega G(\hat{Q}_1, \hat{Q}_2) = \frac{\hbar}{2\pi} \langle [\hat{Q}_1, \hat{Q}_2] \rangle + G([\hat{Q}_1, \hat{H}], \hat{Q}_2) \quad (11)$$

(式中  $\langle \dots \rangle$  代表统计平均) 和哈密顿量(5)式可得

$$\begin{aligned} \hbar\omega G(a_{1k'l'}, \hat{F}) &= \frac{\hbar}{2\pi} \langle [a_{1k'l'}, \hat{F}] \rangle - 2S \left[ \sum_{l=1_A, l_A} (5J_A + J_{AB}) \delta_{l,l'} G(a_{1k'l}, \hat{F}) \right. \\ &\quad + \sum_{l=1_B, l_B} (5J_B + J_{AB}) \delta_{l,l'} G(a_{1k'l}, \hat{F}) \\ &\quad \left. + \sum_{l=2_A}^{l_A-1} 6J_A \delta_{l,l'} G(a_{1k'l}, \hat{F}) + \sum_{l=2_B}^{l_B-1} 6J_B \delta_{l,l'} G(a_{1k'l}, \hat{F}) \right] \\ &\quad - 2S \left\{ \sum_{l \in A} J_A [\gamma(k_{\parallel}) G(a_{1k'l}^\dagger, \hat{F}) + f(1 - \delta_{l,l_A}) G(a_{1k'l+1}^\dagger, \hat{F}) \right. \\ &\quad \left. + \bar{f}(1 - \delta_{l,l_A}) G(a_{1k'l-1}^\dagger, \hat{F})] \delta_{l,l'} \right\} \\ &\quad - 2S \left\{ \sum_{l \in B} J_B [\gamma(k_{\parallel}) G(a_{1k'l}^\dagger, \hat{F}) + f(1 - \delta_{l,l_B}) G(a_{1k'l+1}^\dagger, \hat{F}) \right. \\ &\quad \left. + \bar{f}(1 - \delta_{l,l_B}) G(a_{1k'l-1}^\dagger, \hat{F})] \delta_{l,l'} \right\} \\ &\quad - 2SJ_{AB} [f\delta_{l',l_A} G(a_{1k'l_B}^\dagger, \hat{F}) + f\delta_{l',l_A} G(a_{1k'l_B}^\dagger, \hat{F}) + \bar{f}\delta_{l',l_B} G(a_{1k'l_A}^\dagger, \hat{F}) \\ &\quad + \bar{f}\delta_{l',l_B} G(a_{1k'l_A}^\dagger, \hat{F})] + g\mu(H_1 + H)G(a_{1k'l'}, \hat{F}), \quad (12) \end{aligned}$$

以及关于  $G(a_{1k'l'}, \hat{F})$  的相似的方程。上式中  $\hat{F}$  是  $a_{1k'l}, a_{2k'l}, l = 1_A, \dots, l_A, 1_B, \dots, l_B$  中的任一个算符。由这些关于  $2(l_A + l_B)$  个格林函数  $G(a_{2k'l}, \hat{F}), G(a_{1k'l}, \hat{F})$  的线性方程组, 可得到决定格林函数极点即自旋波频率  $\omega$  的方程, 数值求解这个方程, 即可求出自旋波谱。

## 2. $l_A + l_B = \text{奇数情形}$

按照上述手续,但需注意到磁有序的周期是超晶格原子结构周期的两倍,可得到决定自旋波谱的方程。

## 二、数值结果

数值计算时取  $J_A/J_B = 2.0$ ,  $J_{AB}/J_B = 1.5$ . 考虑  $k_y = k_z = 0$  的色散关系,  $\omega = \omega(k_x)$ . 图 1(a) 是  $l_A = l_B = 4$  ( $l_A + l_B$  为偶数) 情形的自旋波色散关系; 图 1(b) 是  $l_A =$

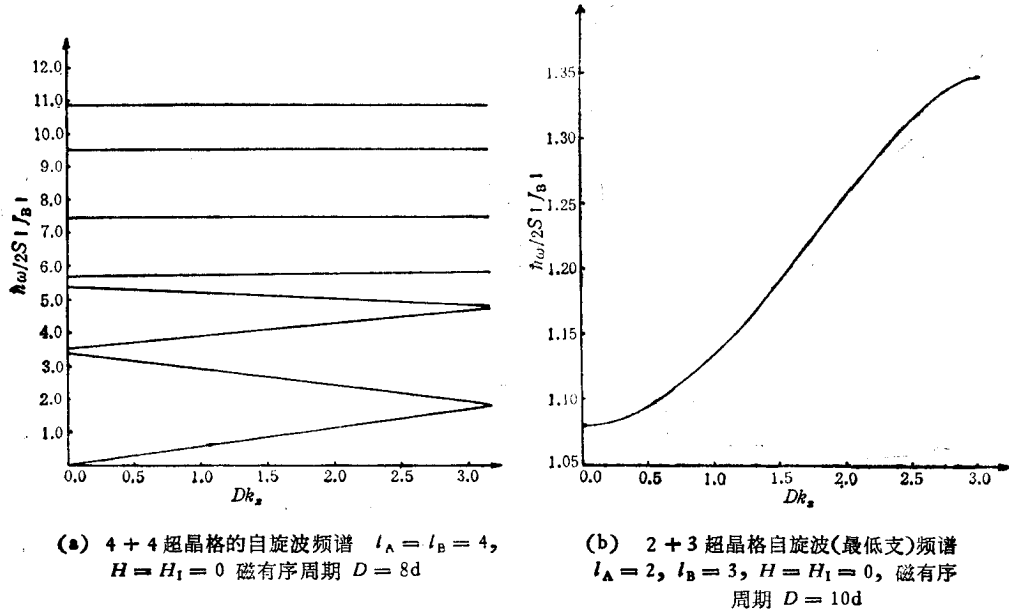
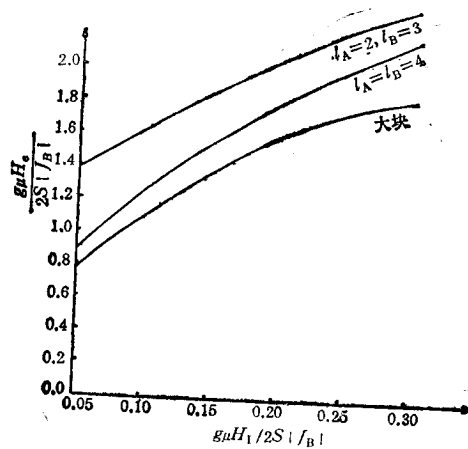


图 1

图 2 临界磁场  $H_c$ ,  $J_A/J_B = 2.0$ ;  $J_{AB}/J_B = 1.5$ ;  $k = 0$

2,  $l_B = 3$  ( $l_A + l_B$  为奇数)情形自旋波色散曲线的最低一支. 由图 1 可见, 超晶格的频谱分成一系列亚带, 和大块材料的频谱不一样.  $l_A + l_B =$  奇数和偶数情形的长波限也有差异, 这些可能导致物理性质上的差别. 在外磁场  $H(\neq 0)$  作用下, 磁有序状态可能会发生改变. 命  $k = 0$ , 由  $\omega(H) = 0$ , 可以解出临界磁场  $H_c$ . 当  $H \geq H_c$  时, 双子格模型所建议的磁有序状态即每个子格中自旋平行排列, 而两子格自旋取向相反的状态已不稳定, 自旋要发生偏转, 如图 2 所示. 随着  $l_B$  增大, 临界磁场  $H_c$  由大渐小, 趋近大块样品(相当于取  $J_B = J_A = J_{AB}$ ) 的临界磁场的数值. 这说明改变超晶格磁有序状态所需要的外磁场比改变大块样品的磁有序状态所需的外加磁场要大. 这个特性来源于超晶格的不均匀性, 即层内、界面间相互作用强弱的不同.

感谢蔡建华教授的指导和帮助.

- [1] J. Q. Zheng, C. M. Falco, J. B. Ketterson and I. K. Schuller, *Appl. Phys. Lett.*, **38**(1981), 424.
- [2] N. K. Flevaris, J. B. Ketterson and J. E. Hilliard, *J. Appl. Phys.*, **53**(1982), 8046.
- [3] H. R. Ma and C. H. Tsai, *Chinese Phys. Lett.*, **1**(1984), 1.
- [4] H. R. Ma and C. H. Tsai, *Solid State Comm.*, **35**(1985), 499.
- [5] N. J. Zhu and S. Cao, *Phys. Lett. A*, **124**(1987), 515.
- [6] E. L. Albuquerque, P. Fulco, E. F. Sarmiento and D. R. Tilley, *Solid State Comm.*, **58**(1986), 41.
- [7] 钟健、蔡建华, 低温物理学报, **11**(1989), 69.
- [8] 蔡建华、钟健, 低温物理学报, **10**(1988), 257.
- [9] Jian Zhong, *Phys. Lett. A*, accepted.
- [10] L. L. Hinchey and D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 3329.
- [11] D. N. Zubarev, *Soviet Phys. Usp.* (English Transl), **3**(1960), 320.

## SPIN WAVE SPECTRUM IN HEISENBERG ANTIFERRO-MAGNETIC SUPERLATTICES

ZHONG JIAN

*Department of Physics, Southeast University, Nanjing, 210018*

(Received 12 May 1989)

### ABSTRACT

By means of linearized Holstein-Primakoff transformation and Green function theory, the spin wave dispersion curves are obtained for superlattices consisting of two kinds of Heisenberg antiferromagnetic layers. It is interesting that the results are different in cases that a supercell contains odd or even number of atomic planes, implying differences in physical properties.

**PACC:** 7530D; 7510J; 7570; 7550E