

# 光频支声子对二维 Heisenberg 铁磁系统 磁激发的影响\*

成泰民<sup>1)†</sup> 鲜于泽<sup>2)</sup> 铁臣<sup>1)</sup>

1) 沈阳化工学院数理系, 沈阳 110142)

2) 东北大学理学院物理系, 沈阳 110004)

(2005 年 12 月 21 日收到, 2006 年 3 月 27 日收到修改稿)

在二维复式正方 Heisenberg 铁磁系统的基础上建立了磁振子-声子相互作用模型. 利用松原格林函数理论研究了系统的磁激发, 计算了布里渊区的主要对称点线上的磁振子色散曲线, 比较了光频支声子与声频支声子对系统磁激发的影响以及各项参数的变化对磁振子软化的影响. 发现光频支声子-磁振子耦合对磁振子软化起主要作用, 尤其是纵向光频支声子对磁振子软化起更大的作用, 并且非磁性离子的光频支声子对磁振子软化的作用比磁性离子的光频支声子对磁振子软化的作用更显著.

关键词: 磁振子-声子相互作用, 磁振子软化, 磁激发, 光频支声子, 铁磁系统

PACC: 7136, 7650, 7255

## 1. 引言

对于钙钛矿铁磁材料的非弹性中子散射实验中发现, 在低温时晶带边界磁振子谱的软化与磁振子谱线增宽<sup>[1-3]</sup>. 在钙钛矿结构化合物  $A_{0.7}B_{0.3}MnO_3$  (其中 A 为稀土元素、B 为碱土元素) 通过改变 A 元素和 B 元素可得到不同的状态<sup>[1-6]</sup>. 通常以双交换 (Double-Exchange (D-E)) 模型为理论基础研究这类钙钛矿结构化合物<sup>[7,8]</sup>. 但是一些非弹性中子散射的测量指出自旋波可用最近邻 Heisenberg 哈密顿量来表示<sup>[9-11]</sup>. 从近似的自旋波理论得到 D-E 模型在无穷大的交换积分  $J$  极限下与最近邻 Heisenberg 模型是等价的. 但是由单一的 D-E 模型不能产生大的磁振子谱线增宽以及晶带边界磁振子谱的软化现象, 这意味着要考虑另一种附加效应. 非弹性中子散射实验数据揭示了低温磁振子软化与增宽的微观起源. 从基于磁振子寿命效应和与它有联系的光频支声子散射模式来看, Dai 和 Hwang 等观测到磁振子谱的软化与磁振子谱线增宽是源于强烈的磁振子-声子相互作用<sup>[1,2]</sup>. 到目前为止理论上没有真正利

用复式晶格的光频支声子讨论过磁振子-声子相互作用下的绝缘铁磁体磁激发. 一般都取了长波近似<sup>[4-6]</sup>, 如对光频支声子频率近似地取为  $\omega_q = \nu_p q$ , 对磁振子近似地取为  $\epsilon_k = Dk^2$ . 我们认为对光频支声子频率近似地取  $\omega_q = \nu_p q$  没有表现出光频支声子的特性, 而更像声频支声子. 因此, 为了确认对于钙钛矿铁磁材料的非弹性中子散射实验所揭示的在低温下, 磁振子和光频支声子交叉时发现磁振子谱线的增宽与软化开始的现象<sup>[1-3,12]</sup>, 我们利用晶格动力学求声子能量与其对应的极化向量时都没有取长波近似, 并且利用自旋动力学求简谐磁振子能量时, 也没有取长波近似的情形下, 利用 Matsubara 格林函数<sup>[13]</sup>系统地研究了光频支声子在磁振子软化中所起的作用. 并且讨论了在 Brillouin 区的主要对称点线上各项参数对磁振子软化的影响.

## 2. 间接交换作用下 Heisenberg 铁磁系统的磁振子-声子耦合模型

间接交换作用下 Heisenberg 铁磁系统哈密顿量为

\* 国家自然科学基金 (批准号 59972005) 和高等学校博士学科点基金 (批准号 98014513) 及辽宁省教育厅高等学校科学研究基金 (批准号: 2005325) 资助的课题.

† E-mail: ctm701212@126.com

$$\hat{H}^{s+s-p} = - \sum_{i,j} J(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (1)$$

根据 Anderson<sup>[14]</sup>间接交换理论,  $J(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$  可看成磁性离子之间的相互作用是通过磁性离子与非磁性离子之间的耦合而产生的. 因为磁性离子跳过非磁性离子与另一磁性离子相互作用, 磁性离子之间无电子云的重叠, 它们是通过磁性离子与非磁性离子的电子云重叠而相互作用的<sup>[4,10]</sup>. 对于亚锰酸盐钙钛矿类型的铁磁体中的磁性离子之间耦合键角<sup>[12]</sup>一般取为  $180^\circ$ .  $J(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) = \beta V_{\text{pd}}^2 / \Delta$ , 其中  $V_{\text{pd}}$  是磁性离子的 3d 轨道电子与非磁性离子 2p 轨道电子的重叠积分<sup>[8]</sup>,  $\beta$  表示数字因子  $\sum_k f_k \cos(k_x a) / 4S^2$ ,  $\Delta = |\epsilon_p - \epsilon_d|$  是被占据的 2p 轨道与未被占据 3d 轨道之间的能量差的绝对值.

$\beta V_{\text{pd}}^2(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l|) / \Delta$  与  $\beta V_{\text{pd}}^2(|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_j|) / \Delta$  各自相对于  $(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0)$  和  $(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_j^0)$  作 Taylor 级数展开只取  $(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_l)$  的一级近似和  $(\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_j)$  的一级近似为止<sup>[11]</sup>. 从而可得

$$\hat{H}^s = - \sum_{i,j} \mathcal{J}(|\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_j^0|) \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}^{s-p} = & 2\beta \frac{V_{\text{pd}}}{\Delta} \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \left\{ X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) e^{iq \cdot \mathbf{R}_i^0} \right. \\ & - X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_j^0) e^{iq \cdot \mathbf{R}_j^0} \\ & - X_{q\sigma}^B e_{q\sigma}^B \cdot [\nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) \\ & \left. + \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_j^0)] e^{iq \cdot \mathbf{R}_l^0} \right\} \mathcal{P}_{q\sigma} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (3) \end{aligned}$$

此复式晶格的晶格振动有关的哈密顿量及  $\mathbf{u}_i$  的表示式如下:

$$\hat{H}^p = \sum_{q\sigma} \left[ p_\sigma^+(q) p_\sigma(q) + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_\sigma(q), \quad (4)$$

$$\mathbf{u}_i(s) = \sum_{q\sigma} X_{q\sigma}^s e_{q\sigma}(s) \exp(iq \cdot \mathbf{R}_i^0) \mathcal{P}_\sigma(q), \quad (5)$$

式中  $\sigma$  表示不同的本征值,

$$X_{q\sigma}^s = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM_s \omega_\sigma(q)}}, \quad \mathcal{P}_\sigma(q) = p_\sigma^+(-q) + p_\sigma(q), \quad (6)$$

为了得到复式晶格的声音频率与对应的极化向量, 利用晶格动力学可求得  $\omega_\sigma(q)$ ,  $e_{q\sigma}(s)$  其中  $s = A, B$ ).

以  $i$  格点为中心只考虑最近邻格点形式表示

$$\begin{aligned} \hat{H}^{s-p} = & 2\beta \frac{V_{\text{pd}}}{\Delta} \sum_{i,\delta} \sum_{\sigma} \left\{ X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) e^{iq \cdot \mathbf{R}_i^0} \right. \\ & \left. - X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{i+\delta}^0) e^{iq \cdot \mathbf{R}_{i+\delta}^0} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} - & X_{q\sigma}^B e_{q\sigma}^B \cdot [\nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) \\ & + \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{i+\delta}^0)] e^{iq \cdot (\mathbf{R}_i^0/2 + \delta/2)} \} \mathcal{P}_{q\sigma} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+\delta} \quad (7) \end{aligned}$$

对自旋偏离算符作动量空间的傅里叶变换

$$\begin{cases} a_l = (1/N)^{1/2} \sum_k e^{ik \cdot \mathbf{R}_l^0} a_k, \\ a_l^+ = (1/N)^{1/2} \sum_k e^{-ik \cdot \mathbf{R}_l^0} a_k^+, \\ (1/N)^{-1} \sum_l e^{i(k-k') \cdot \mathbf{R}_l^0} = \delta_{k,k'}. \end{cases} \quad (8)$$

把  $\hat{S}_l \cdot \hat{S}_l = \hat{S}_l^z \hat{S}_l^z + \frac{1}{2} (\hat{S}_l^+ \hat{S}_l^- + \hat{S}_l^- \hat{S}_l^+)$ , D-M 变换  $\hat{S}_l^+ = (2S)^{1/2} (1 - a_l^+ a_l) / (2S)$ ,  $\hat{S}_l^- = (2S)^{1/2} \cdot a_l^+$ ,  $\hat{S}_l^z = S - a_l^+ a_l$  和 (8) 式代入到 (2) 式和 (3) 式并只取自波算符的二次方项, 分别可得

$$H^s = -J_0 NZS^2 + \sum_k E_{\text{nb}}(\mathbf{k}) a_k^+ a_k, \quad (9)$$

$$\hat{H}^{s-p} = \sum_{k,q,\sigma} [M_{kq\sigma}^A a_{k+q}^+ a_k + M_{kq\sigma}^B a_{k+q/2}^+ a_k] \mathcal{P}_{q\sigma}, \quad (10)$$

(9) 式中

$$E_{\text{nb}}(\mathbf{k}) = 2ZJ_0 S(1 - \gamma_k),$$

$$\gamma_k = Z^{-1} \sum_\delta \exp(i\mathbf{k} \cdot \delta), \quad (11a)$$

对于二维复式铁磁晶格而言

$$E_{\text{nb}}(\mathbf{k}) = 4J_0 S[2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a)], \quad (11b)$$

(10) 式中

$$\begin{aligned} M_{kq\sigma}^A = & 2\beta S \frac{V_{\text{pd}}}{\Delta} \sum_\delta \left\{ X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) \right. \\ & \times [e^{-i(k+q) \cdot \delta} + e^{ik \cdot \delta} - 1 - e^{-iq \cdot \delta}] \\ & - X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{i+\delta}^0) \\ & \left. \times [e^{-ik \cdot \delta} + e^{(k+q) \cdot \delta} - e^{iq \cdot \delta} - 1] \right\}, \quad (12a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{kq\sigma}^B = & -2\beta S \frac{V_{\text{pd}}}{\Delta} \sum_\delta \left\{ X_{q\sigma}^B e_{q\sigma}^B \cdot [\nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) \right. \\ & \left. + \nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{i+\delta}^0)] \right. \\ & \left. \times [e^{-ik \cdot \delta} + e^{(k+q/2) \cdot \delta} - e^{(q/2) \cdot \delta} - 1] \right\} \quad (12b) \end{aligned}$$

因为磁性离子与非磁性离子都对磁振子-声子耦合有作用, 并且重叠积分  $V_{\text{pd}}$  的梯度可用下式表示:

$$\nabla V_{\text{pd}}(\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) = \kappa_0 V_{\text{pd}} \hat{\delta}, \quad (13)$$

其中  $\kappa_0$  是 Slater 系数描述指数递减的函数,  $\kappa_0$  在  $0.1 \text{nm}^{-1}$  的数量级.  $\hat{\delta} = (\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0) / |\mathbf{R}_i^0 - \mathbf{R}_l^0|$ , 把 (13) 式代入到 (12a) 和 (12b) 式分别可得

$$M_{kq\sigma}^A = 2\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} \sum_{\delta} \left\{ X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \hat{\delta}_{i,l} \left[ e^{-(k+q)\cdot\delta} + e^{ik\cdot\delta} - 1 - e^{-iq\cdot\delta} \right] - X_{q\sigma}^A e_{q\sigma}^A \cdot \hat{\delta}_{l,i+\delta} \left[ e^{-ik\cdot\delta} + e^{(k+q)\cdot\delta} - e^{iq\cdot\delta} - 1 \right] \right\}, \quad (14)$$

$$M_{kq\sigma}^B = -2\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} \sum_{\delta} \left\{ X_{q\sigma}^B e_{q\sigma}^B \cdot \left[ \hat{\delta}_{i,l} + \hat{\delta}_{l,i+\delta} \right] \times \left[ e^{-ik\cdot\delta} + e^{(k+q/2)\cdot\delta} - e^{(q/2)\cdot\delta} - 1 \right] \right\}. \quad (15)$$

考虑正方复式晶格的对称性, 并令磁性离子与非磁性离子平衡位置之间的距离为  $a$ , 从而得

$$M_{kq\sigma}^A = -8i\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} X_{q\sigma}^A \left\{ e_{q\sigma}^{Ax} \left[ \sin(2k_x a + 2q_x a) - \sin(2k_x a) - \sin(2q_x a) \right] + e_{q\sigma}^{Ay} \left[ \sin(2k_y a + q_y a) - \sin(2k_y a) - \sin(2q_y a) \right] \right\}, \quad (16)$$

$$M_{kq\sigma}^B = -8i\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} X_{q\sigma}^B \left\{ e_{q\sigma}^{Bx} \left[ \sin(2k_x a + q_x a) - \sin(2k_x a) - \sin(q_x a) \right] + e_{q\sigma}^{By} \left[ \sin(2k_y a + q_y a) - \sin(2k_y a) - \sin(q_y a) \right] \right\}, \quad (17)$$

令

$$C_B = 8\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} \left( \frac{\hbar}{2N\sqrt{fM_B}} \right)^{1/2}, \quad (18)$$

$$C_A = 8\beta\kappa_0 S \frac{V_{\text{pl}}^2}{\Delta} \left( \frac{\hbar}{2N\sqrt{fM_A}} \right)^{1/2}, \quad (19)$$

把(18)与(19)式代入到(16)与(17)式得

$$M_{kq\sigma}^A = C_A \Phi_{\sigma}^A(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad M_{kq\sigma}^B = C_B \Phi_{\sigma}^B(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (20)$$

其中

$$\Phi_{\sigma}^A(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{-i}{\sqrt{\psi_{\rho\sigma}(\mathbf{q})}} \left\{ e_{q\sigma}^{Ax} \left[ \sin(2k_x a + 2q_x a) - \sin(2k_x a) - \sin(2q_x a) \right] + e_{q\sigma}^{Ay} \left[ \sin(2k_y a + q_y a) - \sin(2k_y a) - \sin(2q_y a) \right] \right\}, \quad (21)$$

$$\Phi_{\sigma}^B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{-i}{\sqrt{\psi_{\rho\sigma}(\mathbf{q})}} \left\{ e_{q\sigma}^{Bx} \left[ \sin(2k_x a + q_x a) - \sin(2k_x a) - \sin(q_x a) \right] \right\}$$

$$+ e_{q\sigma}^{By} \left[ \sin(2k_y a + q_y a) - \sin(2k_y a) - \sin(q_y a) \right] \}. \quad (22)$$

利用晶格动力学求得的二维正方复式晶格的声子频率与对应的极化向量如下:

$$\omega_{\sigma}(\mathbf{q}) = \sqrt{f/M_A} \psi_{\rho\sigma}(\mathbf{q}), \quad (23)$$

$$\begin{cases} \psi_{\rho 1}(\mathbf{q}) = \{ \eta + 1 - [ \eta^2 + 1 + 2\eta \cos(2aq_x) ]^{1/2} \}^{1/2}, \\ \mathbf{e}_{q1} = \{ \Delta_1 / \sqrt{\Delta_1^2 + 1} \ \rho, 1 / \sqrt{\Delta_1^2 + 1} \ \rho \}; \end{cases} \quad (24)$$

$$\begin{cases} \psi_{\rho 2}(\mathbf{q}) = \{ \eta + 1 + [ \eta^2 + 1 + 2\eta \cos(2aq_x) ]^{1/2} \}^{1/2}, \\ \mathbf{e}_{q2} = \{ \Delta_2 / \sqrt{\Delta_2^2 + 1} \ \rho, 1 / \sqrt{\Delta_2^2 + 1} \ \rho \}; \end{cases} \quad (25)$$

$$\begin{cases} \psi_{\rho 3}(\mathbf{q}) = \{ \eta + 1 - [ \eta^2 + 1 + 2\eta \cos(2aq_y) ]^{1/2} \}^{1/2}, \\ \mathbf{e}_{q3} = \{ 0, \Delta_3 / \sqrt{\Delta_3^2 + 1} \ \rho, 1 / \sqrt{\Delta_3^2 + 1} \}; \end{cases} \quad (26)$$

$$\begin{cases} \psi_{\rho 4}(\mathbf{q}) = \{ \eta + 1 + [ \eta^2 + 1 + 2\eta \cos(2aq_y) ]^{1/2} \}^{1/2}, \\ \mathbf{e}_{q4} = \{ 0, \Delta_4 / \sqrt{\Delta_4^2 + 1} \ \rho, 1 / \sqrt{\Delta_4^2 + 1} \}; \end{cases} \quad (27)$$

其中

$$\eta = M_A / M_B, \quad (28)$$

$$\begin{cases} \Delta_1 = \frac{[\sqrt{\eta} - \sqrt{1/\eta} + \sqrt{\eta + 1/\eta + 2\cos(2aq_x)}]}{[2|\cos(aq_x)|]}, \\ \Delta_2 = \frac{[\sqrt{\eta} - \sqrt{1/\eta} - \sqrt{\eta + 1/\eta + 2\cos(2aq_x)}]}{[2|\cos(aq_x)|]}, \\ \Delta_3 = \frac{[\sqrt{\eta} - \sqrt{1/\eta} + \sqrt{\eta + 1/\eta + 2\cos(2aq_y)}]}{[2|\cos(aq_y)|]}, \\ \Delta_4 = \frac{[\sqrt{\eta} - \sqrt{1/\eta} - \sqrt{\eta + 1/\eta + 2\cos(2aq_y)}]}{[2|\cos(aq_y)|]}, \end{cases} \quad (29)$$

(24)–(27) 式中作动力学矩阵及本征矢量的表示时按  $\mathbf{e}_{q\sigma} = \{ e_{q\sigma}^x(A), e_{q\sigma}^y(A), e_{q\sigma}^x(B), e_{q\sigma}^y(B) \}$  形式表示的, 所以可求  $\mathbf{e}_{q\sigma}(s)$ .

### 3. 磁振子谱的重正化

对系统的哈密顿量, 我们可以用松原格林函数理论分析它. 磁振子的算符是玻色子算符, 它满足玻色-爱因斯坦统计分布, 并且对磁振子-声子耦合而言, 还得考虑系统的磁序<sup>[4–6, 15, 16]</sup>.

利用松原格林函数可求得磁振子的一级正规自

能如下<sup>[15,16]</sup>：

$$\begin{aligned} \Sigma^{*(1)}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = & \frac{1}{S_{\text{lattice}}} \left\{ \sum_{\mathbf{q}, \sigma} |M_{kq\sigma}^A|^2 \left[ \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) + 1}{i\varepsilon_n - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \right. \\ & + \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\varepsilon_n + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) + 1}{i\varepsilon_n + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ & \left. \left. - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{i\varepsilon_n - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \right. \\ & + \sum_{\mathbf{q}, \sigma} |M_{kq\sigma}^B|^2 \left[ \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + 1}{i\varepsilon_n - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \right. \\ & + \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2))}{i\varepsilon_n + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + 1}{i\varepsilon_n + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \\ & \left. \left. - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2))}{i\varepsilon_n - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \right] \right\}. \quad (30) \end{aligned}$$

利用 Dysons 方程求取至二阶微扰项的松原格林函数,如下式所示：

$$\mathcal{G}^{(2)}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{(\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, i\varepsilon_n))^{-1} - \Sigma^{*(1)}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)}. \quad (31)$$

对于(31)式,利用  $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) \xrightarrow{i\varepsilon_n \rightarrow E_m(\mathbf{k}) + i0^+} G_{\text{retarded}}(\mathbf{k}, E_m(\mathbf{k}))$ ,求得磁振子的推迟热力学格林函数,然后利用  $\frac{1}{x \pm i0^+} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$  其中  $P$  表示积分主值,求其极点,并求极点的实部

$$E_m(\mathbf{k}) = E_{n0}(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma^{*(1)}(\mathbf{k}), \quad (32)$$

式中

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma^{*(1)}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \iint dq_x dq_y \left\{ \sum_{\sigma} |M_{kq\sigma}^A|^2 \left[ \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) + 1}{E_{n0}(\mathbf{k}) - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right. \right. \\ & + \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{E_{n0}(\mathbf{k}) + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) + 1}{E_{n0}(\mathbf{k}) + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ & \left. \left. - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{E_{n0}(\mathbf{k}) - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \right. \\ & + \sum_{\sigma} |M_{kq\sigma}^B|^2 \left[ \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + 1}{E_{n0}(\mathbf{k}) - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \right. \\ & + \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2))}{E_{n0}(\mathbf{k}) + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) - E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) + N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)) + 1}{E_{n0}(\mathbf{k}) + E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \\ & \left. \left. - \frac{N_B(E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q})) - N_B(E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2))}{E_{n0}(\mathbf{k}) - E_{\rho\sigma 0}(\mathbf{q}) + E_{n0}(\mathbf{k} + \mathbf{q}/2)} \right] \right\}, \quad (33) \end{aligned}$$

为了数值计算上的方便,令

$$\beta_1/\alpha_1 = \eta^{1/4}. \quad (34)$$

$$\alpha_1 = C_A(4J_0 S\pi 2a),$$

$$\alpha_2 = \hbar \sqrt{f/M_A}(4J_0 S),$$

$$\beta_1 = C_B(4J_0 S\pi 2a),$$

$$T_m = 4J_0 S/k_B,$$

$$C_B/C_A = \eta^{1/4},$$

## 4. 数值计算结果与讨论

把 11b 式、(16)式、(31)式、(33)式、(34)式,代入到(32)式,然后进行了数值计算.数值计算中,我们参照了钙钛矿  $\text{Pr}_{0.63}\text{Sr}_{0.37}\text{MnO}_3$  的测量数据<sup>[12]</sup>：

$a = 0.386\text{nm}$ ,  $D = 2J_0 Sa^2 = 0.0165\text{eV}(\text{nm})^2$ ,  $k_B = 8.617385(73) \times 10^{-5}\text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$  从而得  $T_m = 257.02\text{K}$ , 这里我们取了低温  $T = 10\text{K}$ . 参数  $\alpha_1, \alpha_2, \eta, T_m$  以及温度  $T$  的变化下的数值计算结果见图 1—10:

图 1 所示为只考虑磁性离子  $\text{Mn}^{4+}$  或者  $\text{Mn}^{3+}$  时, 磁性离子对磁振子谱的影响. 图 1(a) 表示, 磁性离子的声频支声子与光频支声子的共同作用对磁振子谱的影响. 图 1(b) 表示, 只考虑磁性离子的声频支声子对磁振子谱的影响. 图 1(c) 表示, 只考虑磁性离子的光频支声子对磁振子谱的影响. 对比图 1(a)(b)(c) 可知, 磁振子谱线的极强烈的振荡源于磁性离子的声频支声子. 磁振子谱的软化源于磁性离子的光频支声子, 但软化不大, 只有在布里渊区边界上的  $M$  附近才表现出微小的软化. 在这所说的磁性离子的光频支声子及声频支声子是对其频率与极化向量都考虑的情况下而言的, 因为磁性离子与非磁性离子的光频支声子的频率或者声频支声子的频率是相同的, 但是极化向量不同之故.

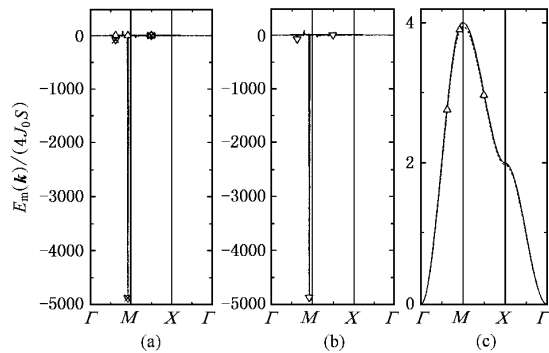


图 1 在第一布里渊区的主要对称点线上, 只考虑磁性离子  $\text{Mn}^{4+}$  或者  $\text{Mn}^{3+}$  时, 比较了声频支声子 ( $\nabla$ ) 与光频支声子 ( $\triangle$ ), 以及共同的作用 ( $\times$ ) 对磁振子能谱的影响. 各项参量如下:  $\alpha_1 = 0.25$ ;  $\alpha_2 = 3.0$ ;  $T_m = 257.02\text{K}$ ;  $\eta = M_{\text{Mn}}/M_{\text{O}} = 3.43376$ ;  $T = 10\text{K}$

图 2 所示为只考虑非磁性离子  $\text{O}^{2-}$  时, 非磁性离子对磁振子谱的影响. 图 2(a) 表示, 非磁性离子的声频支声子与光频支声子的共同作用对磁振子谱的影响. 图 2(b) 表示, 只考虑非磁性离子的声频支声子对磁振子谱的影响. 图 2(c) 表示, 只考虑非磁性离子的光频支声子对磁振子谱的影响. 对比图 2(a)(b)(c) 可知, 磁振子谱线的极强烈的振荡源于非磁性离子的声频支声子. 与图 1 对比可知, 只有非磁性离子的声频支声子作用下的振荡幅度比只有磁性离子的声频支声子作用下的振荡幅度小得多. 磁振子谱的软化源于非磁性离子的光频支声

子. 并且比只有磁性离子的光频支声子作用下的磁振子谱的软化更加显著.

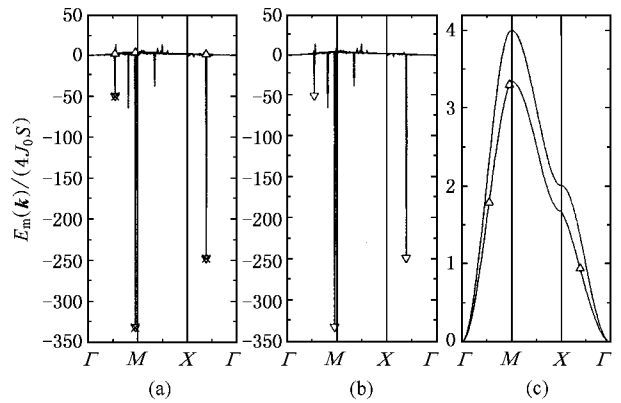


图 2 在第一布里渊区的主要对称点线上, 只考虑非磁性离子  $\text{O}^{2-}$  时, 比较了声频支声子 ( $\nabla$ ) 与光频支声子 ( $\triangle$ ), 以及共同的作用 ( $\times$ ) 对磁振子能谱的影响. 各项参量如下:  $\alpha_1 = 0.25$ ;  $\alpha_2 = 3.0$ ;  $T_m = 257.02\text{K}$ ;  $\eta = M_{\text{Mn}}/M_{\text{O}} = 3.43376$ ;  $T = 10\text{K}$

图 3 所示为磁性离子  $\text{Mn}^{4+}$  或者  $\text{Mn}^{3+}$  与非磁性离子  $\text{O}^{2-}$  都考虑时, 它们的共同作用对磁振子谱的影响. 图 3(a) 表示, 磁性离子与非磁性离子的声频支声子与光频支声子的共同作用对磁振子谱的影响. 图 3(b) 表示, 只考虑磁性离子与非磁性离子的声频支声子对磁振子谱的影响. 图 3(c) 表示, 只考虑磁性离子与非磁性离子的光频支声子对磁振子谱的影响. 对比图 3(a)(b)(c) 可知, 磁振子谱线的极强烈的振荡源于磁性离子与非磁性离子的声频支声子. 磁振子谱的软化源于磁性离子与非磁性离子的光频支声子.

图 1—3 说明磁振子谱的软化源于磁性离子与非磁性离子的光频支声子, 但是非磁性离子的光频支声子对磁振子软化作用比磁性离子的光频支声子对磁振子软化作用更加显著. 这可以这样解释: 与间接交换作用有关的磁性离子和非磁性离子的重叠积分  $V_{\text{pd}}$  与磁性离子和非磁性离子之间的相对距离有关. 因此, 磁性离子与非磁性离子同向运动的声频支声子对重叠积分  $V_{\text{pd}}$  的影响较小, 但是磁性离子与非磁性离子相对反向运动的光频支声子对重叠积分  $V_{\text{pd}}$  的影响很大, 并占主导地位. 且非磁性离子  $\text{O}^{2-}$  比磁性离子  $\text{Mn}^{4+}$  或者  $\text{Mn}^{3+}$  轻得多易动, 因此非磁性离子对磁性离子与非磁性离子之间的相对距离起主要作用, 重叠积分  $V_{\text{pd}}$  变化主要取决于非磁性离子. 所以非磁性离子的光频支声子对磁振子软化作用比磁性离子的光频支声子对磁振子软化作用

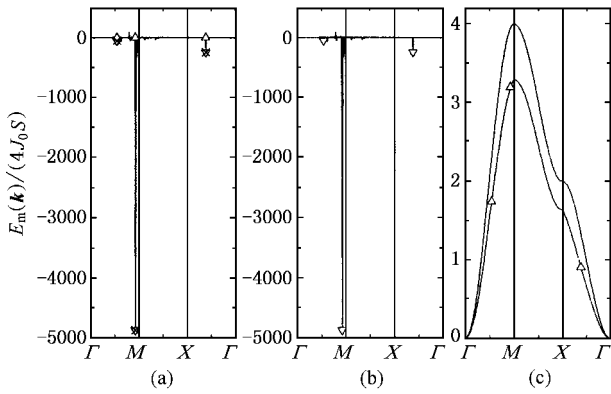


图 3 在第一布里渊区的主要对称点线上,磁性离子  $Mn^{2+}$  或者  $Mn^{3+}$  与非磁性离子  $O^{2-}$  都考虑时,比较了声频支声子( $\nabla$ )与光频支声子( $\triangle$ ),以及共同的作用( $\times$ )对磁振子能谱的影响. 各项参量如下:  $\alpha_1 = 0.25$ ;  $\alpha_2 = 3.0$ ;  $T_m = 257.02K$ ;  $\eta = M_{Mn}/M_O = 3.43376$ ;  $T = 10K$

更加显著.

下面,我们主要讨论各项参数及温度对磁振子软化的影响. 因磁振子软化源于光频支声子,所以我们只考虑了磁性离子与非磁性离子的光频支声子.

图 4—10 说明了各项参数及温度对磁振子软化的影响.

图 4 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,随参量  $\alpha_1$  的增加,磁振子软化越明显. 从(34)式可知,磁振子-声子耦合越强,磁振子软化越明显.

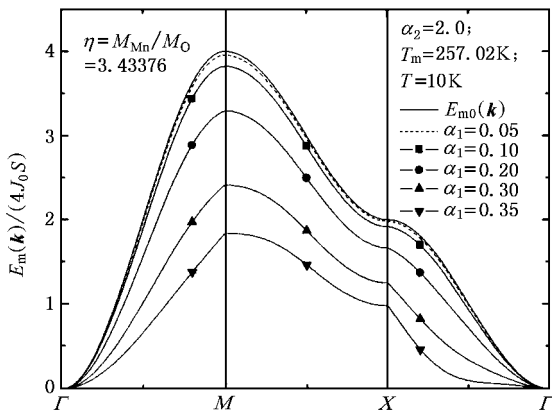


图 4 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的  $\alpha_1$  参量下的磁振子能谱

图 5 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,随参量  $\alpha_2$  的减小,磁振子软化越明显. 当小到  $\alpha_2 = 1.41$  附近开始,磁振子谱发生振荡,振荡强度随  $\alpha_2$  减小更加强烈. 从(34)式可知,  $\alpha_2 \propto \Theta_D$  (其中

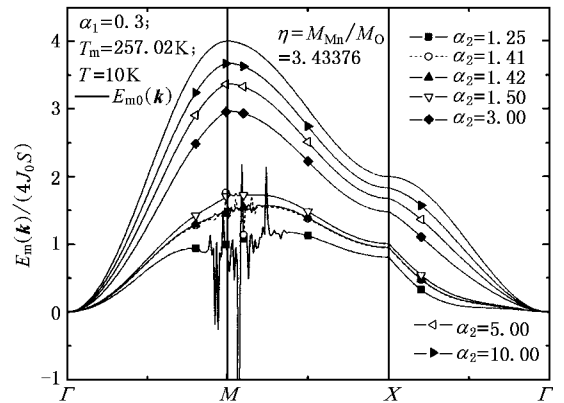


图 5 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的  $\alpha_2$  参量下的磁振子能谱

$\Theta_D$  是材料的 Debye 温度),所以,材料的 Debye 温度  $\Theta_D$  越低,软化越强. 小到某一临界值磁振子谱开始振荡.

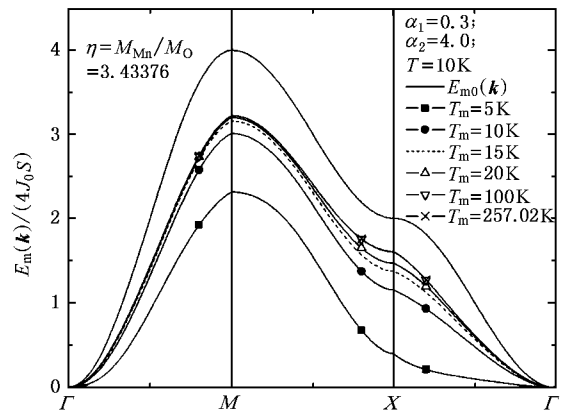


图 6 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的  $T_m$  参量下的磁振子能谱

图 6 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,随  $T_m$  参量的减小,磁振子软化更明显. 从(34)式可知,  $T_m \propto D$  (其中  $D$  是磁性材料的劲度系数),所以,劲度系数  $D$  越小,磁振子软化越强. 对比第一布里渊区上不同的对称线上的磁振子谱线,发现在  $\Delta$  线以及  $X$  点附近随劲度系数  $D$  越小,谱线分开的更明显. 这是因为在  $\Delta$  线上,起作用的  $\omega_2(q)$  光频支声子是纵向光频支声子之故. 在  $X$  点附近  $\omega_2(q)$  光频支声子也近似认为纵向光频支声子. 根据文献 15 所得出的结论纵向声子比横向声子对磁振子软化起更大的作用相结合,我们得出如下结论,纵向光频支声子-磁振子的耦合对磁振子软化起更大的作用.

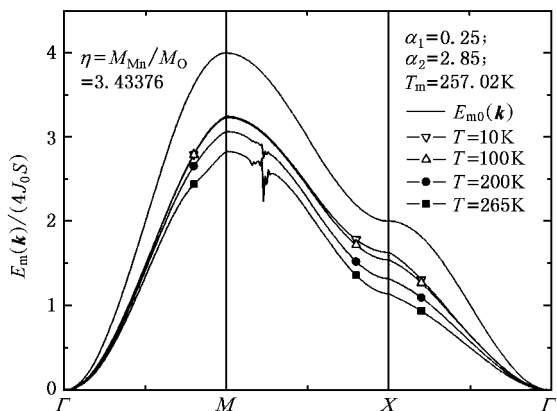


图 7 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的温度  $T$  下的磁振子能谱

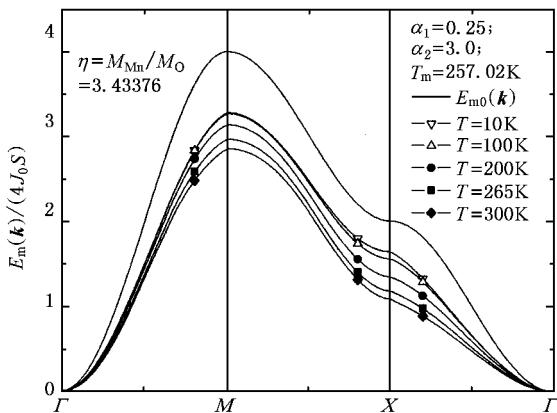


图 8 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的温度  $T$  下的磁振子能谱

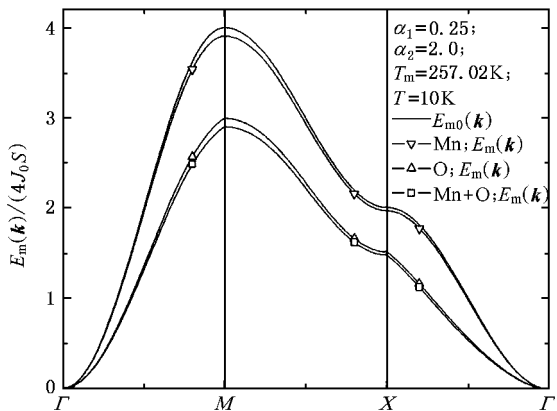


图 9 在第一布里渊区的主要对称点线上,磁性离子  $Mn^{4+}$  或者  $Mn^{3+}$ 、非磁性离子  $O^{2-}$  以及共同的作用对磁振子能谱的影响

图 7 与图 8 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,随温度的升高,磁振子软化更强。图 7 与图 8 对比可知,对于某一绝缘铁磁性材料其各项参数是给定的(包括居里温度  $T_c$ )。温度升高到某一临界

值开始,随温度的升高磁振子谱发生振荡,其振荡强度随温度的升高更加强烈,直至无法判断磁振子软化。但是低温下温度对磁振子软化的影响较小。在  $\Delta$  线以及  $X$  点附近,随温度  $T$  升高,谱线分开的越明显。这再一次说明纵向光频支声子-磁振子的耦合对磁振子软化起更大的作用。这一结果与文献 [1, 2] 的实验结果较符合。

图 9 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,非磁性离子  $O^{2-}$  比磁性离子  $Mn^{4+}$  或者  $Mn^{3+}$  对磁振子软化的作用更大。

图 10 所示为在第一布里渊区的主要对称点线上,磁性离子与非磁性离子的质量比值越小,磁振子软化越明显。

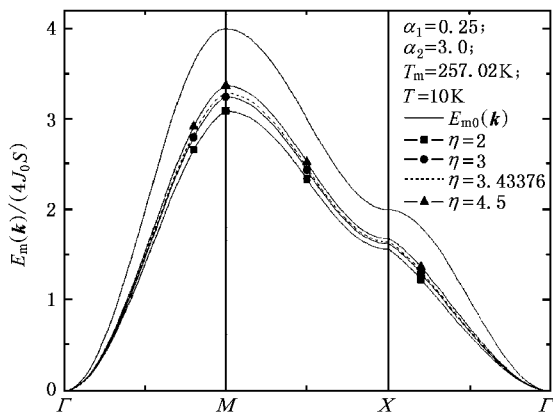


图 10 在第一布里渊区的主要对称点线上,不同的  $\eta$  参量下的磁振子能谱

总之,在第一布里渊区的主要对称点线上,随波矢  $k$  的增加磁振子软化越明显,并且离点  $\Gamma$  越远磁振子软化越明显。

### 5. 结 论

通过系统地研究磁振子-声子耦合对二维复式正方 Heisenberg 铁磁系统的磁激发作用,我们得到了如下结论:

- (1) 声频支声子对磁振子谱起极强烈的振荡,并且磁性离子的声频支声子起主要作用。
- (2) 光频支声子-磁振子耦合对磁振子软化起主要作用。纵向光频支声子对磁振子软化起更大的作用。
- (3) 在第一布里渊区的主要对称点线上,随波矢  $k$  的增加磁振子软化越明显,并且离  $\Gamma$  点越远,磁振子软化越明显。
- (4) 非磁性离子对磁振子软化的作用比磁性离

子对磁振子软化的作用更大.

(5) 磁振子-声子耦合越强, 磁振子软化越明显.

(6) 材料的 Debye 温度  $\Theta_D$  越低, 磁振子软化越强. 小到某一临界值磁振子谱开始振荡.

(7) 自旋波劲度系数  $D$  越小, 磁振子软化越强.

(8) 在铁磁相变居里温度  $T_C$  以下, 随温度的升高磁振子软化越明显. 但低温下温度对磁振子软化起的作用不大.

(9) 磁性离子与非磁性离子的质量比越小, 磁振子软化越明显.

- [ 1 ] Dai P C ,Hwang H Y ,Zang J D ,Fernandez-Baca J A ,Cheong S W , Kloc C ,Tomioka Y ,Tokura Y 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9553
- [ 2 ] Hwang H Y , Dai P , Cheong S W , Aepli G , Tennant D A , Mook H A 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 1316
- [ 3 ] Solovyev I V , Terakura K 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2959
- [ 4 ] Woods L M 2001 *Phys. Rev. B* **65** 014409
- [ 5 ] Saenger D U 1995 *Phys. Rev. B* **52** 1025
- [ 6 ] Saenger D U 1994 *Phys. Rev. B* **49** 12176
- [ 7 ] Anderson P W , Hasegawa H 1955 *Phys. Rev.* **100** 675
- [ 8 ] Mahadevan P , Solovyev I V , Terakura K 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11439
- [ 9 ] Saitoh T , Bocquet A E , Mizokawa T , Namatame H , Fujimori A , Abbate M , Takeda Y , Takano M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 13942
- [ 10 ] Dai P , Zhang J D , Mook H A , Liou S H , Dowben P A , Plummer E W 1996 *Phys. Rev. B* **54** R3694
- [ 11 ] Li Z D , Liang J Q , Li L , Liu W M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066611
- [ 12 ] Khaliulin G , Kilian R 2000 *Phys. Rev. B* **61** 3494
- [ 13 ] Gerald D Mahan 1981 *Many-Particle Physics* ( New York : Plenum Press )
- [ 14 ] Anderson P W 1950 *Phys. Rev.* **79** 350
- [ 15 ] Cheng Tai-Min , Xianyu Ze , Du An , Zou Jun-Ding 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2239 ( in Chinese ) [ 成泰民、鲜于泽、杜安、邹君鼎 2005 物理学报 **54** 2239 ]
- [ 16 ] Cheng Tai-Min , Xianyu Ze , Du An 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5314 ( in Chinese ) [ 成泰民、鲜于泽、杜安 2005 物理学报 **54** 5314 ]

## Effect of optical phonon on magnetic excitation of two-dimensional Heisenberg ferromagnetic system<sup>\*</sup>

Cheng Tai-Min<sup>1</sup>† Xianyu Ze<sup>2</sup> Gang Tie-Chen<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Department of Mathematics and Physic , Shenyang Institute of Chemical Technology , Shenyang 110142 , China*

<sup>2</sup> *Department of Physics School of Science , Northeastern University , Shenyang 110004 , China*

( Received 21 December 2005 ; revised manuscript received 27 March 2006 )

### Abstract

A magnon-phonon interaction model is built in the two-dimensional double square ferromagnetic system. By using Matsubara Green function theory, we study magnetic excitation of the system, and calculate the magnon dispersion curve on the main symmetric points and lines in the Brillouin zone. The influences of optical phonon and acoustic phonon on the magnetic excitation of the system are compared, and the influences of the parameter change on the magnon softening are also studied. It is concluded that the coupling of the optical phonon and magnon has predominant effect on the magnon softening, especially the longitudinal optical phonon has the greatest effect on the magnon softening, and the effect of nonmagnetic ion on magnon softening is stronger than that of magnetic ion.

**Keywords** : magnon-phonon interaction, magnon softening, magnetic excitation, optical phonon, ferromagnetic system

**PACC** : 7136, 7650, 7255

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 59972005 ) and the Doctorate Foundation of University of China ( Grant No. 98014513 ), the Scientific Research Foundation of the Educational Bureau of Liaoning Province China ( Grant No. 2005325 ).

† E-mail : ctm701212@126.com