

亚铁磁体 RbNiF_3 的自旋波谱

郑 杭¹⁾

(浙江大学物理系)

1982 年 1 月 13 日收到

提 要

应用正则变换和 Bogoliubov 变换讨论六角晶体结构亚铁磁体 RbNiF_3 的自旋波谱, 在整个 Brillouin 区中得到了自旋波谱的解析形式, 并与中子非弹性散射的实验结果作了比较。

以前很多作者在讨论铁磁体和反铁磁体的性质时, 都在 Heisenberg 哈密顿量中引入自旋算符的 boson 表示, 例如 Dyson^[1] 对于铁磁体及 Harris 等人^[2] 对于反铁磁体的工作。这样的做法使得对被讨论的系统易于作数学处理, 从而可以在理论上导出被讨论系统的各种特性, 特别是与温度有关的特性。然而对于亚铁磁体, 由于晶格结构和磁相互作用的复杂性, 引入自旋算符的 boson 表示是比较困难的。因此一般在文献中看到的都是直接从自旋算符的 Heisenberg 运动方程来讨论亚铁磁体的自旋波谱, 例如 Glasser 和 Milford^[3] 对 Fe_3O_4 以及 Chinn 等人^[4] 对 RbNiF_3 的工作。但是这样就很难进一步讨论亚铁磁体的各种特性特别是温度特性。

本文的目的是对六角结构的亚铁磁体 RbNiF_3 引入自旋算符的 boson 表示, 得出整个 Brillouin 区中的自旋波谱, 为讨论 RbNiF_3 的自旋波量子对 Raman 散射谱^[5] 及其它与温度有关的特性作好准备。

RbNiF_3 在常压下为六角结构, 空间群 D_{6h}^1 , 每个原胞中含六个分子式的 RbNiF_3 。它们的六个 Ni^{++} 离子分别处于六个不等价的位置上, 记为 $A_1, B_1, B_2, A_2, B_3, B_4$ 。Néel 温度 $T_N = 133\text{K}$ 以下 RbNiF_3 为亚铁磁序的透明晶体, 这时两种 A 位的 Ni^{++} 自旋互相平行, 四种 B 位的 Ni^{++} 自旋也互相平行, 但 A 位和 B 位的自旋反平行。两种最近邻超交换键 $\text{Ni}^{++}(\text{A})-\text{F}-\text{Ni}^{++}(\text{B})$ 和 $\text{Ni}^{++}(\text{B})-\text{F}-\text{Ni}^{++}(\text{B})$ 的超交换作用常数分别记作 J_{AB} 和 J_{BB} 。详细情况可见文献 [6]。如文献 [6] 中所述, 这里也略去次近邻相互作用和各向异性性能。自旋系统的 Heisenberg 哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & -J_{BB} \sum_{B_1} \mathbf{S}_{B_1} \cdot \mathbf{S}_{B_2} - J_{BB} \sum_{B_3} \mathbf{S}_{B_3} \cdot \mathbf{S}_{B_4} \\ & + J_{AB} \left\{ \sum_{\langle A_1 B_1 \rangle} \mathbf{S}_{A_1} \cdot \mathbf{S}_{B_1} + \sum_{\langle A_1 B_4 \rangle} \mathbf{S}_{A_1} \cdot \mathbf{S}_{B_4} \right. \\ & \left. + \sum_{\langle A_2 B_2 \rangle} \mathbf{S}_{A_2} \cdot \mathbf{S}_{B_2} + \sum_{\langle A_2 B_3 \rangle} \mathbf{S}_{A_2} \cdot \mathbf{S}_{B_3} \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

1) 现在上海交通大学应用物理系。

六套自旋算符 $\mathbf{S}_{A_1}, \mathbf{S}_{B_1}, \mathbf{S}_{B_2}, \mathbf{S}_{A_2}, \mathbf{S}_{B_3}, \mathbf{S}_{B_4}$ 分别相应于六套磁性子晶格. 设晶体中有 N 个原胞, 应用周期性边界条件, 引入 Holstein-Primakoff^[7] 变换和 Fourier 变换以后, (1) 式的二次部分 $\hat{H}_s^{(2)}$ 成为

$$\begin{aligned} \hat{H}_s^{(2)} = J_{\text{BS}} \sum_q \{ & b_{1,q}^+ b_{1,q} + b_{2,q}^+ b_{2,q} + b_{3,q}^+ b_{3,q} + b_{4,q}^+ b_{4,q} \\ & - b_{1,q} b_{2,q}^+ e^{i\frac{c}{b}qz} - b_{1,q}^+ b_{2,q} e^{-i\frac{c}{b}qz} - b_{3,q} b_{4,q}^+ e^{i\frac{c}{b}qz} - b_{3,q}^+ b_{4,q} e^{-i\frac{c}{b}qz} \} \\ & + J_{\text{AB}} S \Delta \sum_q \{ a_{1,q}^+ b_{1,-q}^+ \gamma(\mathbf{q}) e^{-i\frac{c}{b}qz} + a_{1,q}^+ b_{4,-q}^+ \gamma^*(\mathbf{q}) e^{i\frac{c}{b}qz} \\ & + a_{1,q} b_{1,-q} \gamma^*(\mathbf{q}) e^{i\frac{c}{b}qz} + a_{1,q} b_{4,-q} \gamma(\mathbf{q}) e^{-i\frac{c}{b}qz} \\ & + a_{2,q}^+ b_{2,-q}^+ \gamma(\mathbf{q}) e^{i\frac{c}{b}qz} + a_{2,q}^+ b_{3,-q}^+ \gamma^*(\mathbf{q}) e^{-i\frac{c}{b}qz} \\ & + a_{2,q} b_{2,-q} \gamma^*(\mathbf{q}) e^{-i\frac{c}{b}qz} + a_{2,q} b_{3,-q} \gamma(\mathbf{q}) e^{i\frac{c}{b}qz} \\ & + 2a_{1,q}^+ a_{1,q} + 2a_{2,q}^+ a_{2,q} + b_{1,q}^+ b_{1,q} + b_{2,q}^+ b_{2,q} + b_{3,q}^+ b_{3,q} + b_{4,q}^+ b_{4,q} \}, \quad (2) \end{aligned}$$

其中

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Delta} \left[e^{i\frac{a}{\sqrt{3}}q_x} + 2e^{i\frac{a}{2\sqrt{3}}q_x} \cos \frac{a}{2} q_y \right], \quad \Delta = 3. \quad (3)$$

下面引入正则变换来约化(2)式中六套算符之间的耦合. 记

$$R(\mathbf{q}) = |\gamma(\mathbf{q})| = \frac{1}{\Delta} \left[1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}}{2} a q_x \cos \frac{a}{2} q_y + 4 \cos^2 \frac{a}{2} q_y \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

变换为

$$\begin{aligned} a_{1,q} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\frac{c}{4}qz} P_{1,q} + e^{-i\frac{c}{4}qz} P_{2,q}), \\ a_{2,q} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\frac{c}{4}qz} P_{1,q} - e^{-i\frac{c}{4}qz} P_{2,q}), \\ b_{1,q} &= \frac{\gamma^*(\mathbf{q})}{2R(\mathbf{q})} e^{-i\frac{c}{12}qz} (Q_{1,q} + Q_{2,q} + Q_{3,q} + Q_{4,q}), \\ b_{2,q} &= \frac{\gamma^*(\mathbf{q})}{2R(\mathbf{q})} e^{i\frac{c}{12}qz} (Q_{1,q} + Q_{2,q} - Q_{3,q} - Q_{4,q}), \\ b_{3,q} &= \frac{\gamma(\mathbf{q})}{2R(\mathbf{q})} e^{-i\frac{c}{12}qz} (Q_{1,q} - Q_{2,q} + Q_{3,q} - Q_{4,q}), \\ b_{4,q} &= \frac{\gamma(\mathbf{q})}{2R(\mathbf{q})} e^{i\frac{c}{12}qz} (Q_{1,q} - Q_{2,q} - Q_{3,q} + Q_{4,q}), \quad (4) \end{aligned}$$

得

$$\begin{aligned} \hat{H}_s^{(2)} = J_{\text{AB}} S \Delta \sum_q \{ & Q_{1,q}^+ Q_{1,q} + Q_{2,q}^+ Q_{2,q} + Q_{3,q}^+ Q_{3,q} + Q_{4,q}^+ Q_{4,q} \} \\ & + 2J_{\text{BS}} \sum_q (Q_{3,q}^+ Q_{3,q} + Q_{4,q}^+ Q_{4,q}) + 2J_{\text{AB}} S \Delta \sum_q (P_{1,q}^+ P_{1,q} + P_{2,q}^+ P_{2,q}) \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\text{AB}} S \Delta \sum_q R(\mathbf{q}) \{ (e^{-i\frac{c}{2}qz} + 1) P_{1,q}^+ Q_{1,-q}^+ + (e^{i\frac{c}{2}qz} + 1) P_{1,q} Q_{1,-q} \\ & + (e^{-i\frac{c}{2}qz} - 1) P_{1,q}^+ Q_{3,-q}^+ + (e^{i\frac{c}{2}qz} - 1) P_{1,q} Q_{3,-q} + (1 - e^{i\frac{c}{2}qz}) P_{2,q}^+ Q_{2,-q}^+ \\ & + (1 - e^{-i\frac{c}{2}qz}) P_{2,q} Q_{2,-q} + (1 + e^{i\frac{c}{2}qz}) P_{3,q}^+ Q_{3,-q}^+ + (1 + e^{-i\frac{c}{2}qz}) P_{3,q} Q_{3,-q} \\ & + (1 + e^{i\frac{c}{2}qz}) P_{4,q}^+ Q_{4,-q}^+ + (1 + e^{-i\frac{c}{2}qz}) P_{4,q} Q_{4,-q} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (1 - e^{-i\frac{c}{2}q_z})P_{2,q}Q_{2,-q} + (1 + e^{i\frac{c}{2}q_z})P_{2,q}^+Q_{4,-q}^+ \\
& + (1 + e^{-i\frac{c}{2}q_z})P_{2,q}Q_{4,-q}\}.
\end{aligned} \quad (5)$$

$q_z = 0$ 平面上 (5) 式的对角化是容易完成的, 只须引入以下两个 Bogoliubov 变换:

$$\begin{aligned}
Q_{1,q} &= u_q\beta_{1,q} + v_q\alpha_{1,-q}^+, \quad Q_{3,q} = \beta_{2,q}, \\
P_{1,q} &= u_q\alpha_{1,q} + v_q\beta_{1,-q}^+; \\
Q_{2,q} &= \beta_{3,q}, \quad Q_{4,q} = u'_q\beta_{4,q} + v'_q\alpha_{2,-q}^+, \\
P_{2,q} &= u'_q\alpha_{2,q} + v'_q\beta_{4,-q}^+.
\end{aligned}$$

就可以得到 $q_z = 0$ 平面上六支自旋波谱的解析形式

$$\begin{aligned}
E_{\alpha_1}(\mathbf{q}) &= \frac{3}{2}J \left[1 - \frac{8}{9}R^2(\mathbf{q}) \right]^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}J, \\
E_{\beta_1}(\mathbf{q}) &= \frac{3}{2}J \left[1 - \frac{8}{9}R^2(\mathbf{q}) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}J, \\
E_{\beta_2}(\mathbf{q}) &= J + 2J_{\text{BS}}S, \\
E_{\alpha_2}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2}(3J + 2J_{\text{BS}}S) \left[1 - \frac{8J^2R^2(\mathbf{q})}{(3J + 2J_{\text{BS}}S)^2} \right]^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}(J - 2J_{\text{BS}}S), \\
E_{\beta_3}(\mathbf{q}) &= J, \\
E_{\beta_4}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2}(3J + 2J_{\text{BS}}S) \left[1 - \frac{8J^2R^2(\mathbf{q})}{(3J + 2J_{\text{BS}}S)^2} \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(J - 2J_{\text{BS}}S),
\end{aligned} \quad (6)$$

其中 $J = J_{\text{AB}}S\Delta$. 应用文献 [6] 中对散射中子能谱中 Γ 自旋波量子峰的测定数据, 由 (6) 式可以算出

$$\begin{aligned}
J_{\text{AB}} &= \frac{1}{3}E_{\beta_3}(0) = 8.03\text{meV}, \\
J_{\text{BS}} &= (E_{\beta_4}^2(0) + E_{\beta_4}(0)E_{\beta_3}(0))/(2E_{\beta_4}(0) + 4E_{\beta_3}(0)) = 1.82\text{meV}.
\end{aligned} \quad (7)$$

$2J_{\text{BS}}S/J_{\text{AB}}S\Delta \cong 0.11$ 是一个比较小的量, 因此, 在考虑 $q_z \approx 0$ 的一般情况时可以把 (5) 式中的 $2J_{\text{BS}}S \sum_q (Q_{3,q}^+Q_{3,q} + Q_{4,q}^+Q_{4,q})$ 作为微扰哈密顿量处理. 这样, 在零级近似下, (5)

式的对角化可以通过以下两个 3×3 的 Bogoliubov 变换来得到:

$$\begin{aligned}
Q_{1,q} &= \frac{1}{2}(e^{i\frac{c}{2}q_z} + 1)(u_q\beta_{1,q} + \left| \text{tg} \frac{c}{4}q_z \right| \beta_{2,q} + v_q\alpha_{1,-q}^+), \\
Q_{3,q} &= \frac{1}{2}(e^{i\frac{c}{2}q_z} - 1)\left(-\left| \text{ctg} \frac{c}{4}q_z \right| \beta_{2,q} + u_q\beta_{1,q} + v_q\alpha_{1,-q}^+\right), \\
P_{1,q} &= u_q\alpha_{1,q} + v_q\beta_{1,-q}^+;
\end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned}
Q_{2,q} &= \frac{1}{2}(1 - e^{-i\frac{c}{2}q_z})\left(-\left| \text{ctg} \frac{c}{4}q_z \right| \beta_{3,q} + u_q\beta_{4,q} + v_q\alpha_{2,-q}^+\right), \\
Q_{4,q} &= \frac{1}{2}(1 + e^{-i\frac{c}{2}q_z})\left(u_q\beta_{4,q} + \left| \text{tg} \frac{c}{4}q_z \right| \beta_{3,q} + v_q\alpha_{2,-q}^+\right), \\
P_{2,q} &= u_q\alpha_{2,q} + v_q\beta_{4,-q}^+.
\end{aligned} \quad (9)$$

这里

$$\begin{aligned} u_q &= \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \right\}^{\frac{1}{2}}, \\ v_q &= \left\{ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (10)$$

零级近似能谱是简并的,

$$\begin{aligned} E_{\alpha_1}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} J = E_{\alpha_2}(q), \\ E_{\beta_1}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} J = E_{\beta_4}(q), \\ E_{\beta_2}(q) &= J = E_{\beta_3}(q). \end{aligned} \quad (11)$$

在微扰论的一级近似中, 简并消除, 各支自旋波能谱为

$$\begin{aligned} E_{\alpha_1}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} J + J_{\text{BS}} \sin^2 \frac{c}{4} q_z \left\{ \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\}, \\ E_{\beta_1}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} J + J_{\text{BS}} \sin^2 \frac{c}{4} q_z \left\{ \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} + 1 \right\}, \\ E_{\beta_2}(q) &= J + 2J_{\text{BS}} \cos^2 \frac{c}{4} q_z, \\ E_{\alpha_2}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} J + J_{\text{BS}} \cos^2 \frac{c}{4} q_z \left\{ \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\}, \\ E_{\beta_3}(q) &= J + 2J_{\text{BS}} \sin^2 \frac{c}{4} q_z, \\ E_{\beta_4}(q) &= \frac{3}{2} J \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} J + J_{\text{BS}} \cos^2 \frac{c}{4} q_z \left\{ \left[1 - \frac{8}{9} R^2(q) \right]^{-\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + 1 \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

这是在整个 Brillouin 区中的能谱。而在文献 [4, 6] 中应用自旋算符 Heisenberg 运动方程方法给出的只是 Brillouin 区中三个高对称方向 ΓM , ΓK , ΓA 上的能谱。

(12) 式对 Brillouin 区中三个高对称方向作图(见图 1)。图中黑圆点表示文献 [6] 中用中子非弹性散射实验测得的数据。图 1 与文献 [6] 中的图 2 及图 5 相比只有细微的差

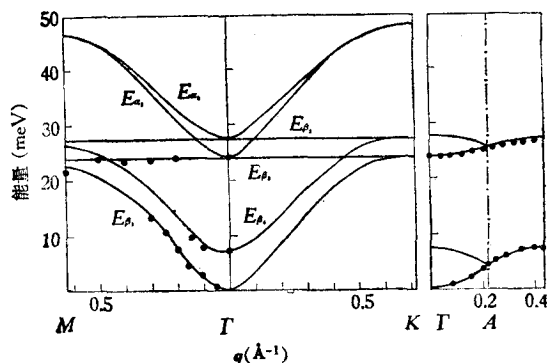


图 1

别, 这种差别的原因在于文献 [6] 中所用的是自旋算符 Heisenberg 运动方程方法, 而本文则用了正则变换和 Bogoliubov 变换, 并对 B 位与 B 位之间的自旋波相互作用作了一级近似处理. 用文献 [6] 中的方法很难得出整个 Brillouin 区中自旋波能谱的解析表达式, 而本文所采取的方法能够比较方便地写出整个 Brillouin 区中自旋波能谱的足够精确的解析表达式 (12). 有了这样的解析表达式, 讨论磁性系统及其与外场相互作用的各种定量特性就比较方便了.

本文是在浙江大学刘古副教授的指导下完成的. 承蒙上海交通大学方俊鑫教授、王志成老师审阅全文并提出修改意见, 在此表示感谢.

参 考 文 献

- [1] F. J. Dyson, *Phys. Rev.*, **102**(1956), 1217; 1230.
- [2] A. B. Harris *et al.*, *Phys. Rev. B*, **3**(1971), 961.
- [3] M. L. Glasser and F. J. Milford, *Phys. Rev.*, **130**(1963), 1783.
- [4] S. R. Chinn *et al.*, *Phys. Rev. B*, **3**(1971), 1709.
- [5] 郑杭, 物理学报, 待发表.
- [6] J. Als-Nielsen *et al.*, *Phys. Rev. B*, **6**(1972), 2030.
- [7] T. Holstein and H. Primakoff, *Phys. Rev.*, **58**(1940), 1098.

THE MAGNON SPECTRA OF FERRIMAGNET RbNiF_3

Zheng Hang*

(Department of Physics, Zhejiang University)

ABSTRACT

By using canonical transformation and Bogoliubov transformation, we treat the magnon spectra of the transparent ferrimagnet RbNiF_3 having a hexagonal structure. In the whole Brillouin zone a six-branch dispersion relation is obtained.

* Present address: Shanghai Jiaotong University.