Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет
Кафедра нейтронной и синхротронной физики

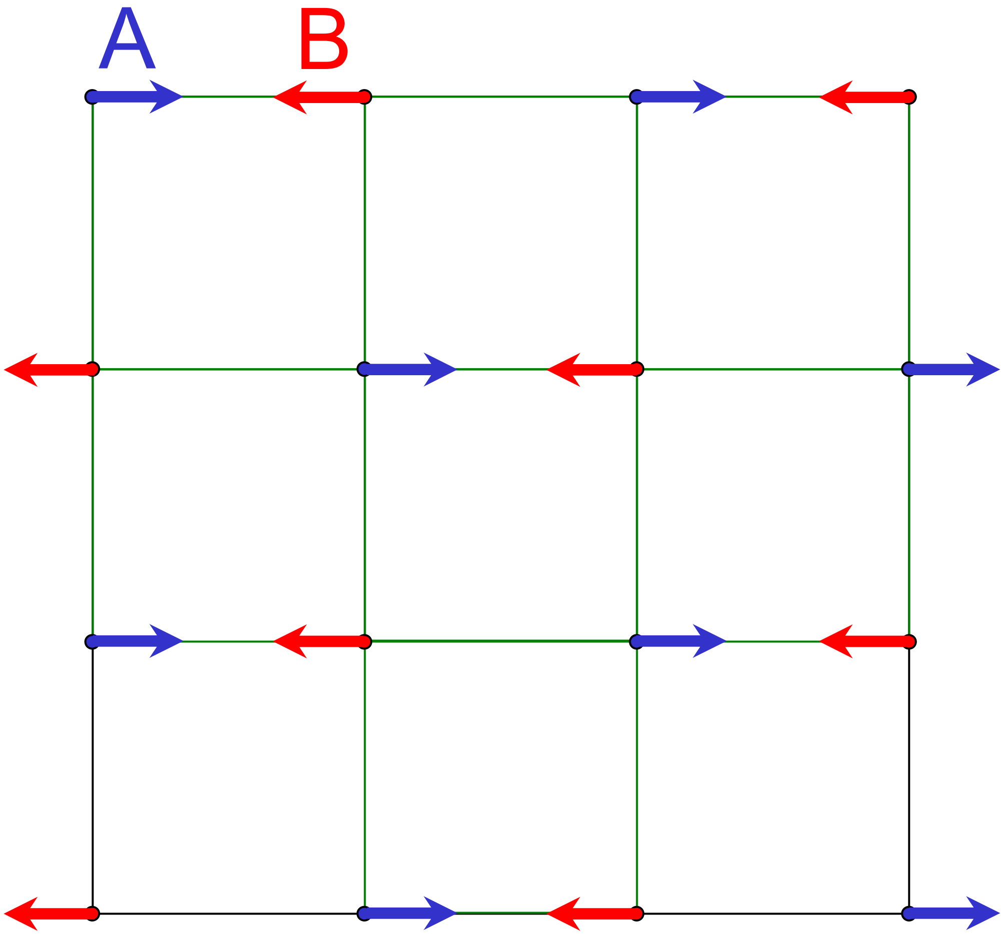
Сыромятников
Арсений Владиславович

Лекция 10. Основы теории магнитного рассеяния нейтронов.

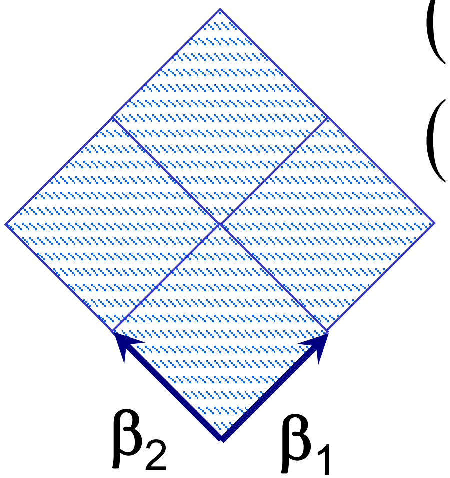
- *Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике и спиральном магнетике*
- *Рассеяние нейтронов на спиновых волнах (магнонах)*

Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j , \qquad J > 0$$



Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

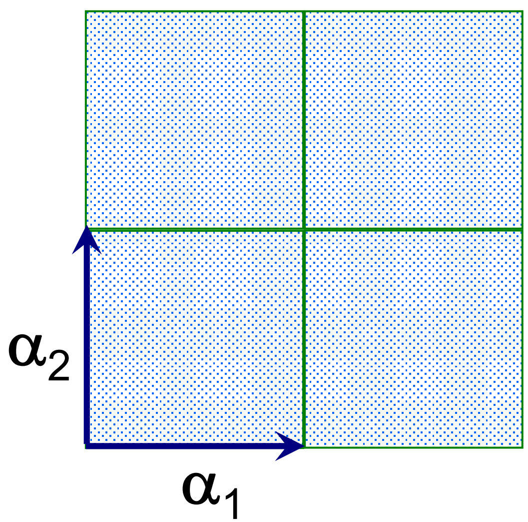


$$(\boldsymbol{\beta}_1\mathbf{b}_1) = (\boldsymbol{\beta}_2\mathbf{b}_2) = 2\pi$$

$$(\boldsymbol{\beta}_1\mathbf{b}_2) = (\boldsymbol{\beta}_2\mathbf{b}_1) = 0$$

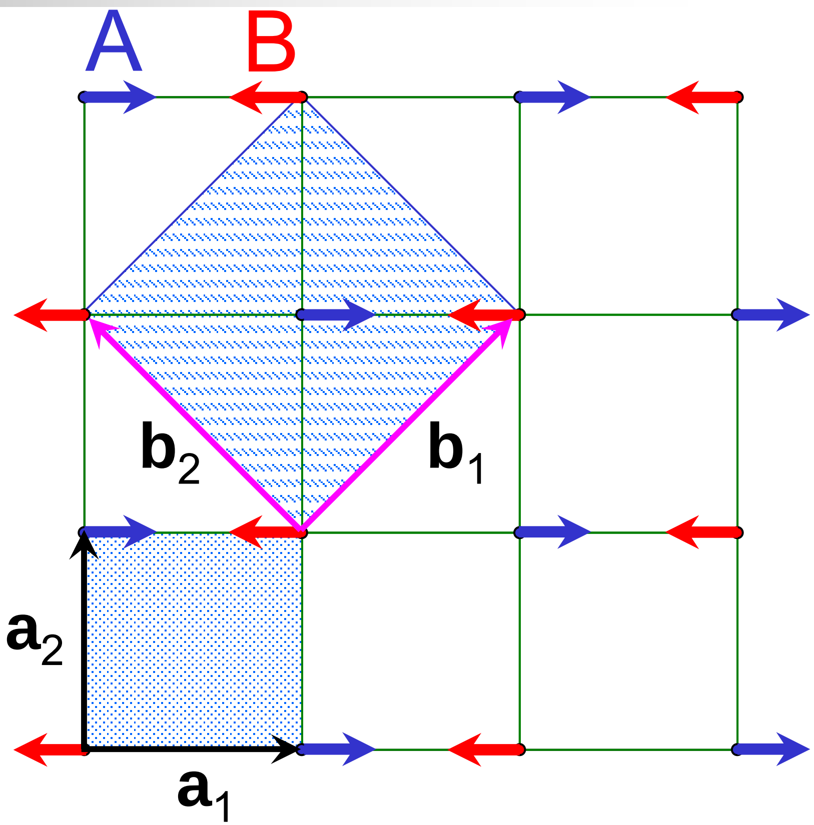
$$\boldsymbol{\beta}_1 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2)$$

$$\boldsymbol{\beta}_2 = \frac{1}{2}(-\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2)$$



$$(\boldsymbol{\alpha}_1\mathbf{a}_1) = (\boldsymbol{\alpha}_2\mathbf{a}_2) = 2\pi$$

$$(\boldsymbol{\alpha}_1\mathbf{a}_2) = (\boldsymbol{\alpha}_2\mathbf{a}_1) = 0$$



$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{b}_2 = -\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$$

Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{\mathrm{el}} = (\gamma r_0)^2 \left|F(\mathbf{Q})\right|^2 e^{-2W} N \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^{\eta}\hat{Q}^{\chi}\right) \sum_{l} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} \left\langle S_0^{\chi} \right\rangle \left\langle S_l^{\eta} \right\rangle$$

$$= (\gamma r_0)^2 \left|F(\mathbf{Q})\right|^2 e^{-2W} N_m \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^{\eta}\hat{Q}^{\chi}\right) \sum_{ld} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}} \left\langle S_0^{\chi} \right\rangle \left\langle S_{ld}^{\eta} \right\rangle$$

$$= (\gamma r_0)^2 \left|F(\mathbf{Q})\right|^2 e^{-2W} N_m \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^{\eta}\hat{Q}^{\chi}\right) \left\langle S^{\chi} \right\rangle \left\langle S^{\eta} \right\rangle \sum_{l} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} \sum_{d} \sigma_d e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_d}$$

$$= (\gamma r_0)^2 \left|F(\mathbf{Q})\right|^2 e^{-2W} N_m \left(1 - \left(\hat{Q}^z\right)^2\right) \left\langle S^z \right\rangle^2 \frac{(2\pi)^3}{\mathrm{V}_{0m}} \sum_{\boldsymbol{\tau}_m} \delta\left(\mathbf{Q} - \boldsymbol{\tau}_m\right) \sum_{d} \sigma_d e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_d}$$

$$= (\gamma r_0)^2 N_m \frac{(2\pi)^3}{\mathrm{V}_{0m}} \left\langle S^z \right\rangle^2 \sum_{\boldsymbol{\tau}_m} \left|F(\boldsymbol{\tau}_m)\right|^2 e^{-2W} \left(1 - \left(\tau_m^z\right)^2\right) \sum_{d} \sigma_d e^{i\boldsymbol{\tau}_m\mathbf{r}_d} \delta\left(\mathbf{Q} - \boldsymbol{\tau}_m\right)$$

$$\boxed{\sigma_d = \pm 1 \qquad \boldsymbol{\tau}_m = n_1\boldsymbol{\beta}_1 + n_2\boldsymbol{\beta}_2}$$

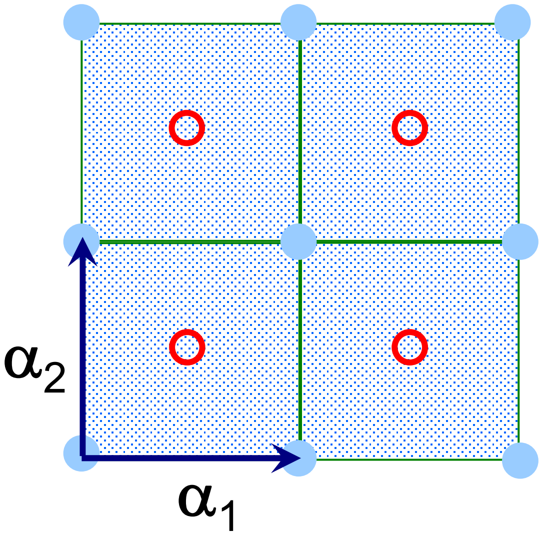
Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

$$\boldsymbol{\tau}_m = n_1\boldsymbol{\beta}_1 + n_2\boldsymbol{\beta}_2 = n_1\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2\right) + n_2\frac{1}{2}\left(-\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2\right)$$

$$= \frac{n_1 - n_2}{2}\boldsymbol{\alpha}_1 + \frac{n_1 + n_2}{2}\boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{cases} \left(q_1 + \dfrac{1}{2}\right)\boldsymbol{\alpha}_1 + \left(q_2 + \dfrac{1}{2}\right)\boldsymbol{\alpha}_2 \\ q_1\boldsymbol{\alpha}_1 + q_2\boldsymbol{\alpha}_2 \end{cases}$$

$$\sum_d \sigma_d e^{i\boldsymbol{\tau}_m \mathbf{r}_d} = \sigma_1 + \sigma_2 e^{i\boldsymbol{\tau}_m \mathbf{a}_2}$$

$$= 1 - e^{i\boldsymbol{\tau}_m \mathbf{a}_2} = \begin{cases} 1 - e^{i2\pi\left(q_2 + \frac{1}{2}\right)} = 2 \\ 1 - e^{i2\pi q_2} = 0 \end{cases}$$



Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

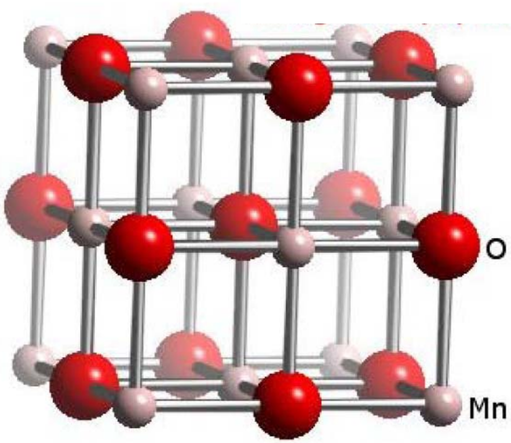
3D антиферромагнетик

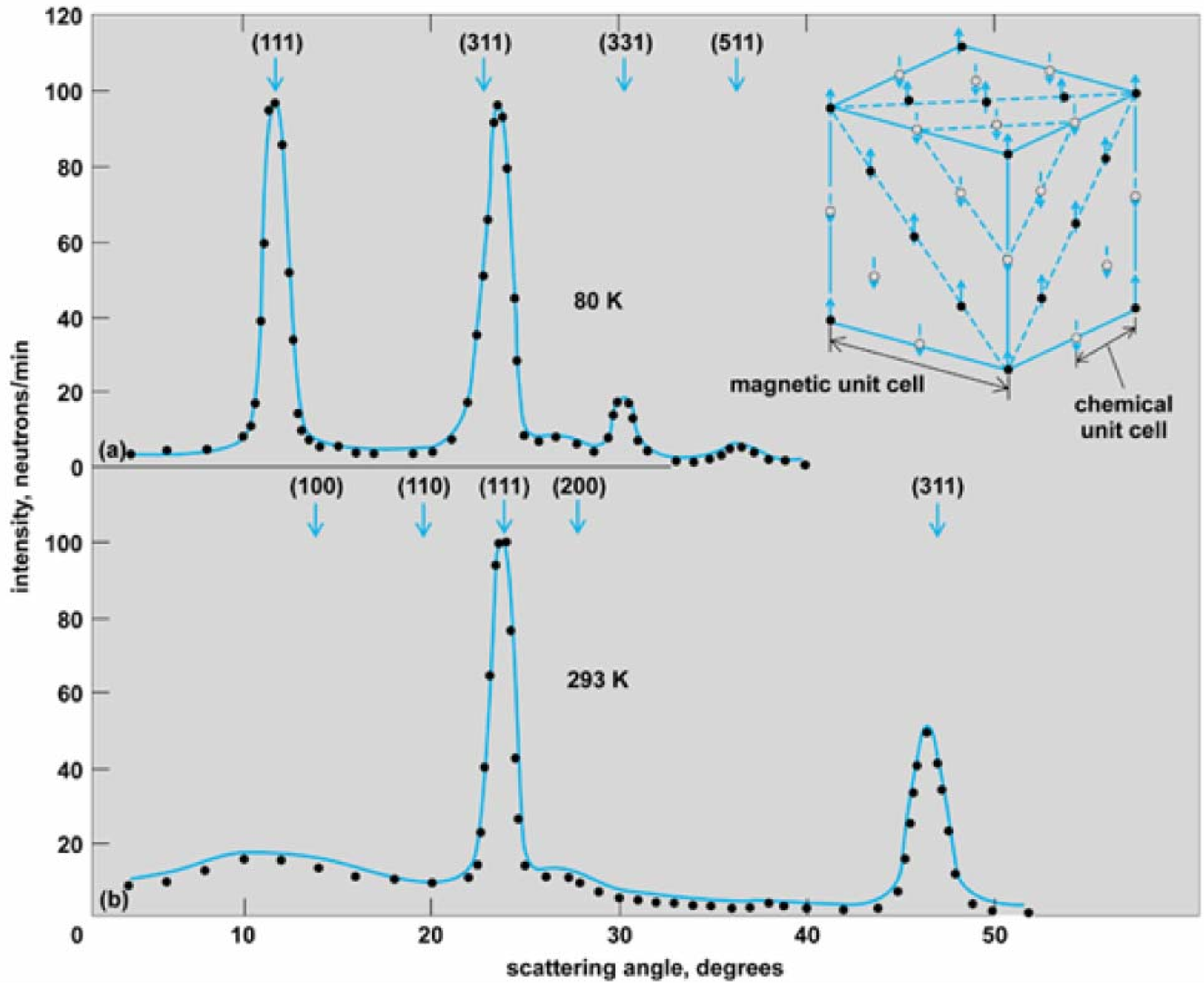
$$\boldsymbol{\tau}_m = \begin{cases} \left(q_1 + \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\alpha}_1 + \left(q_2 + \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\alpha}_2 + \left(q_3 + \frac{1}{2}\right)\boldsymbol{\alpha}_3 \\ q_1\boldsymbol{\alpha}_1 + q_2\boldsymbol{\alpha}_2 + q_3\boldsymbol{\alpha}_3 \end{cases}$$

$$\sum_d \sigma_d e^{i\boldsymbol{\tau}_m \mathbf{r}_d} = \begin{cases} 2 \\ 0 \end{cases}$$

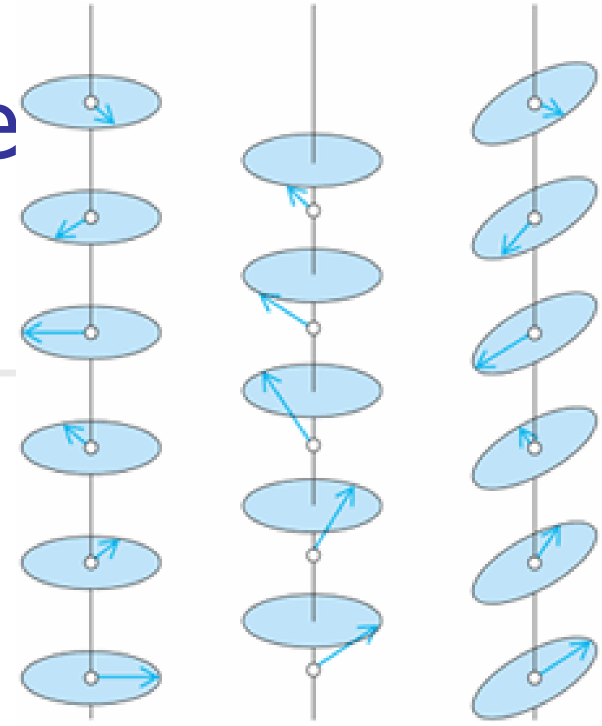
Упругое магнитное рассеяние в антиферромагнетике

MnO





Упругое магнитное рассеяние в спиральном магнетике



$$\left\langle S_l^x \right\rangle = \left\langle S \right\rangle \cos\left(\mathbf{qR}_l\right)$$

$$\left\langle S_l^y \right\rangle = \left\langle S \right\rangle \sin\left(\mathbf{qR}_l\right)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{\mathrm{el}} = \left(\gamma r_0\right)^2 \left|F\left(\mathbf{Q}\right)\right|^2 e^{-2W} \sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}\left(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}\right)} \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi\right) \left\langle S_{l'}^\chi \right\rangle \left\langle S_l^\eta \right\rangle$$

$$\sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}\left(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}\right)} \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi\right) \left\langle S_{l'}^\chi \right\rangle \left\langle S_l^\eta \right\rangle$$

$$= \sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}\left(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}\right)} \left(\left(1 - \left(\hat{Q}^x\right)^2\right) \left\langle S_{l'}^x \right\rangle \left\langle S_l^x \right\rangle \right.$$

$$\left. + \left(1 - \left(\hat{Q}^y\right)^2\right) \left\langle S_{l'}^y \right\rangle \left\langle S_l^y \right\rangle - \hat{Q}^x \hat{Q}^y \left\langle S_{l'}^x \right\rangle \left\langle S_l^y \right\rangle - \hat{Q}^x \hat{Q}^y \left\langle S_{l'}^y \right\rangle \left\langle S_l^x \right\rangle \right)$$

Упругое магнитное рассеяние в спиральном магнетике

$$= \langle S \rangle^2 \sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} \left(\left(1 - \left(\hat{Q}^x \right)^2 \right) \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_{l'}) \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_l) \right.$$

$$+ \left(1 - \left(\hat{Q}^y \right)^2 \right) \sin(\mathbf{q}\mathbf{R}_{l'}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{R}_l) - \hat{Q}^x \hat{Q}^y \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_{l'}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{R}_l)$$

$$\left. - \hat{Q}^x \hat{Q}^y \sin(\mathbf{q}\mathbf{R}_{l'}) \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_l) \right)$$

$$= \langle S \rangle^2 \sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} \left(\left(1 - \frac{1}{2} \left(\left(\hat{Q}^x \right)^2 + \left(\hat{Q}^y \right)^2 \right) \right) \cos\left(\mathbf{q} \left(\mathbf{R}_{l'} - \mathbf{R}_l \right) \right) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \left(- \left(\hat{Q}^x \right)^2 + \left(\hat{Q}^y \right)^2 \right) \cos\left(\mathbf{q} \left(\mathbf{R}_{l'} + \mathbf{R}_l \right) \right) - \hat{Q}^x \hat{Q}^y \sin\left(\mathbf{q} \left(\mathbf{R}_{l'} + \mathbf{R}_l \right) \right) \right)$$

$$= \langle S \rangle^2 \sum_{ll'} \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(\hat{Q}^z \right)^2 \right) \frac{1}{2} \left(e^{i(\mathbf{Q}+\mathbf{q})(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} + e^{i(\mathbf{Q}-\mathbf{q})(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} \right) \right)$$

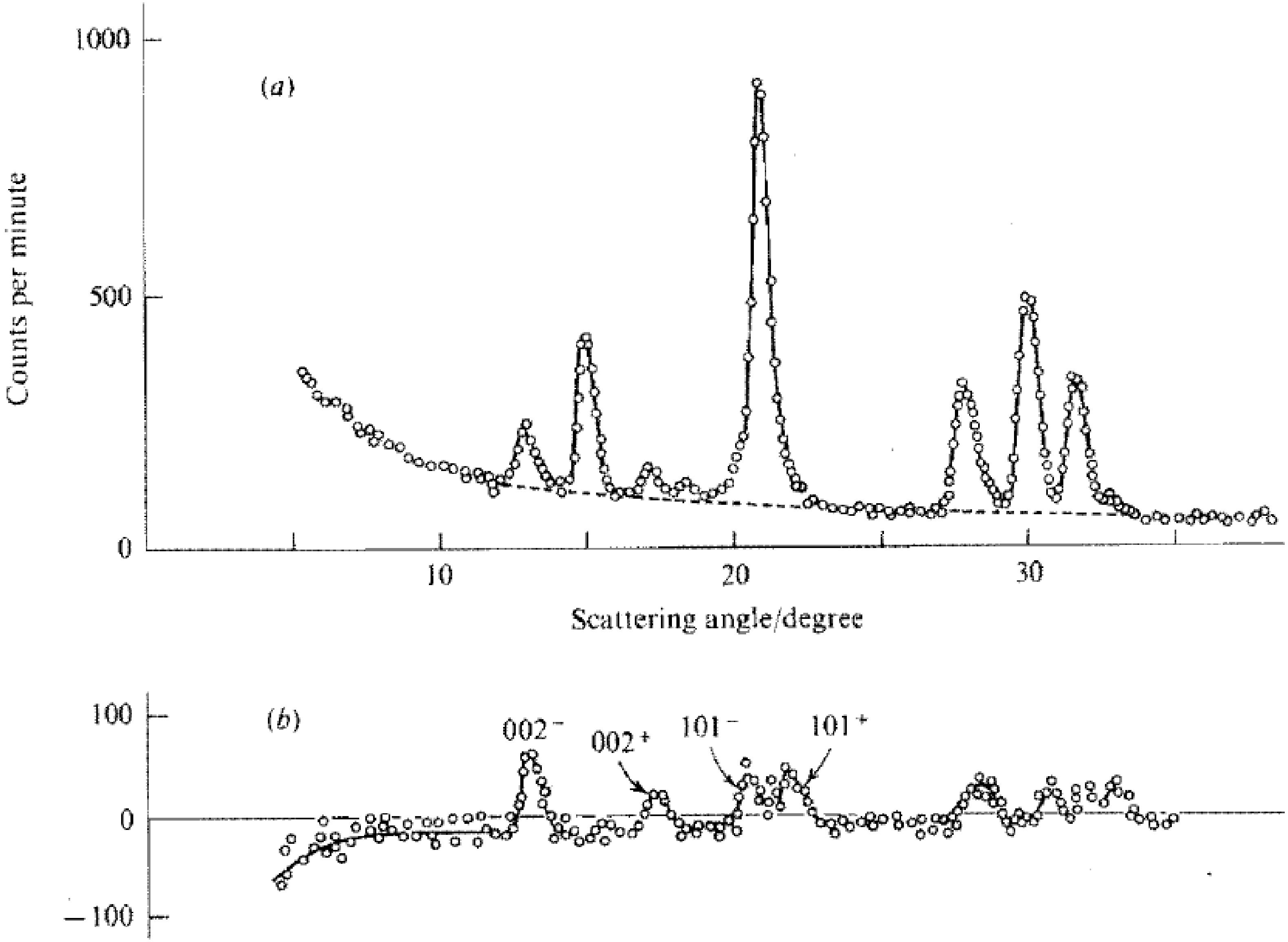
Упругое магнитное рассеяние в спиральном магнетике

$$\sum_{ll'} e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi\right) \left\langle S_{l'}^\chi \right\rangle \left\langle S_l^\eta \right\rangle$$

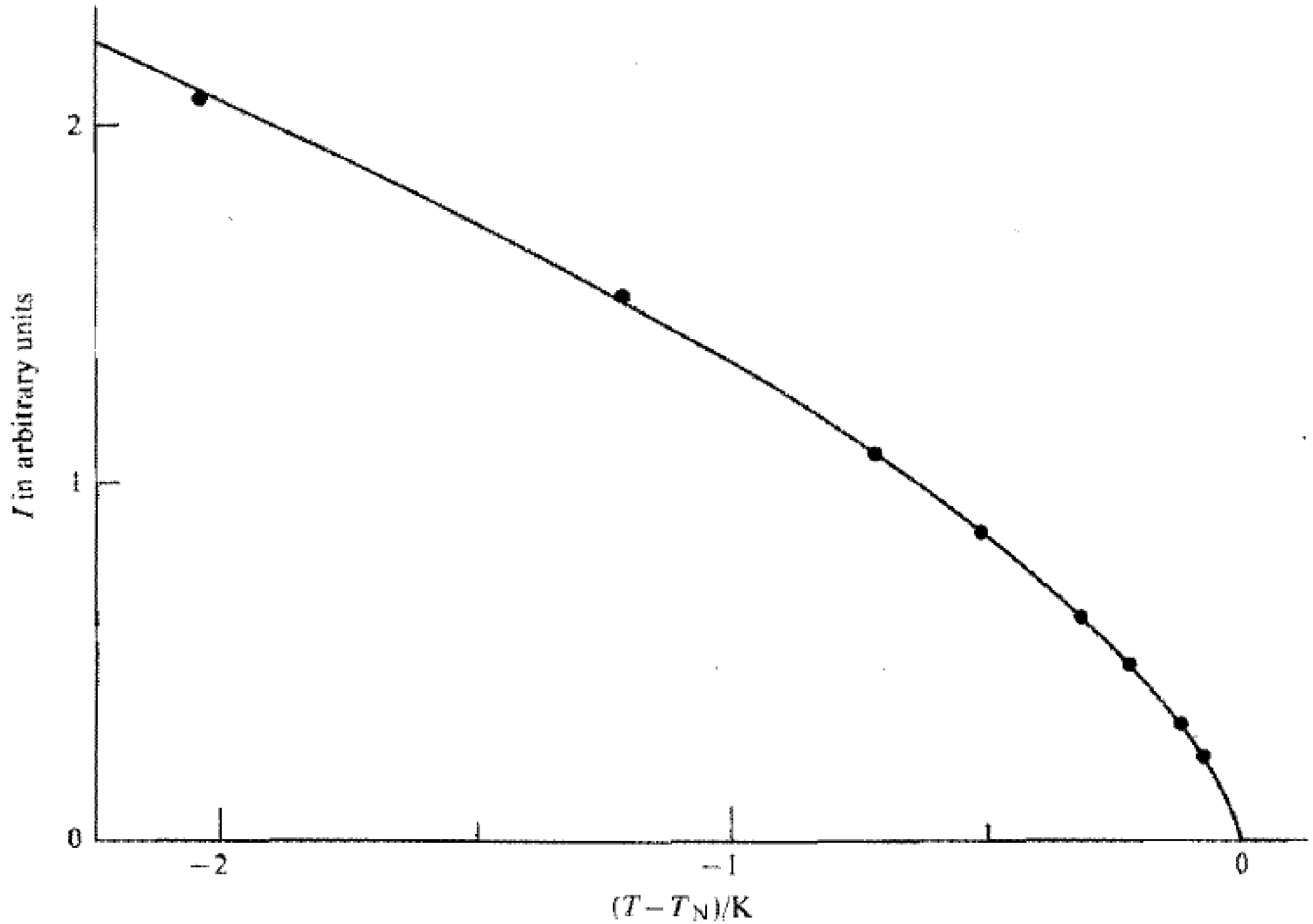
$$= \frac{\langle S \rangle^2}{4} \left(1 + \left(\hat{Q}^z\right)^2\right) \frac{(2\pi)^3}{\mathrm{v}_0} N \sum_{\boldsymbol{\tau}} \left(\delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + \delta(\mathbf{Q} - \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau})\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{\mathrm{el}} &= (\gamma r_0)^2 \left|F(\mathbf{Q})\right|^2 e^{-2W} \\ &\times \frac{\langle S \rangle^2}{4} \left(1 + \left(\hat{Q}^z\right)^2\right) \frac{(2\pi)^3}{\mathrm{v}_0} N \sum_{\boldsymbol{\tau}} \left(\delta(\mathbf{Q} + \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + \delta(\mathbf{Q} - \mathbf{q} - \boldsymbol{\tau})\right) \end{aligned}}$$

Упругое магнитное рассеяние в спиральном магнетике



Упругое магнитное рассеяние в магнетиках. Интенсивность брэгговских пиков.



Магнитное рассеяние на магнонах. Линейное спин-волновое приближение.

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right)\right)$$

Основное состояние

$$\boxed{\begin{aligned} &\left|0\right\rangle = \left|S\right\rangle_1 \left|S\right\rangle_2 \ldots \left|S\right\rangle_N \\ &\mathcal{H}\left|0\right\rangle = -\frac{1}{2}\left(\sum_{i,j} J_{ij}\right) S^2 \left|0\right\rangle \end{aligned}}$$

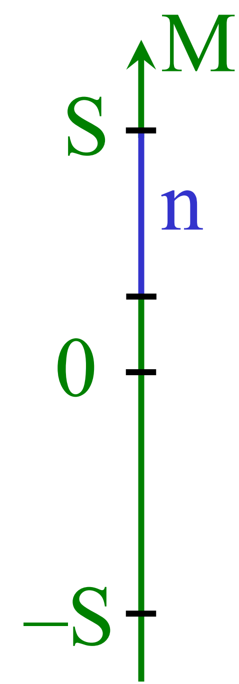
$$S^z\left|M\right\rangle = M\left|M\right\rangle$$

$$\left\langle M\left|S^+\right|M-1\right\rangle$$

$$= \left\langle M-1\left|S^-\right|M\right\rangle = \sqrt{\left(S-M\right)\left(S+M+1\right)} \qquad n \equiv S - M$$

$$\mathcal{n} = S - S^z \qquad \mathcal{n}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$$

$$S^z\left|n\right\rangle = \left(S-n\right)\left|n\right\rangle \qquad \left\langle n-1\left|S^+\right|n\right\rangle = \sqrt{2Sn}\sqrt{1-\frac{n-1}{2S}}$$



Переход от операторов спина к бозонам

$$a_i^+|n_i\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|n_i+1\rangle \qquad a_i|n_i\rangle = \sqrt{n_i}\,|n_i-1\rangle \qquad [a_i, a_i^+] = 1$$

$$a_i^+ a_i|n_i\rangle = \boldsymbol{n}_i|n_i\rangle = n_i|n_i\rangle$$

$$\boxed{S_i^- = \sqrt{2S}\,a_i^\dagger\sqrt{1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}} \qquad S_i^+ = \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}\;a_i \qquad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i}$$

$$S_i^- \approx \sqrt{2S}\,a_i^\dagger \qquad S_i^+ \approx \sqrt{2S}\,a_i \qquad S_i^z = S - a_i^\dagger a_i$$

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right)\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\left(\left(S - a_i^\dagger a_i\right)\left(S - a_j^\dagger a_j\right) + \frac{2S}{2}\left(a_i a_j^\dagger + a_i^\dagger a_j\right)\right)$$

Переход от операторов спина к бозонам

$$\mathcal{H} \cong -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\left(-Sa_i^\dagger a_i - Sa_j^\dagger a_j + 2Sa_i^\dagger a_j\right) = \sum_{i,j} SJ_{ij}\left(a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_j\right)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \qquad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}$$

$$\sum_{i,j} SJ_{ij} a_i^\dagger a_j = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} \sum_{i,j} SJ\left(\left|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right|\right) e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{R}_j}$$

$$= \frac{1}{N} S \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2} \sum_{i,j} J\left(\left|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right|\right) e^{-i\mathbf{k}_1\left(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right)} e^{i\left(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1\right)\mathbf{R}_j} = \sum_{\mathbf{k}} SJ_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

$$J_{\mathbf{k}} = \sum_i J_{ij} \exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}\right) = 2J\left(\cos ck_x + \cos ck_y + \cos ck_z\right)$$

$$\sum_{i,j} SJ_{ij} a_i^\dagger a_i = \sum_{\mathbf{k}} SJ_{\mathbf{0}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

Переход от операторов спина к бозонам

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \qquad \varepsilon_{\mathbf{k}} = S\left(J_{\mathbf{0}} - J_{\mathbf{k}}\right)$$

$$J_{\mathbf{k}} = \sum\nolimits_{i} J_{ij} \exp\left(i\mathbf{kR}_{ij}\right) = 2J\left(\cos ck_x + \cos ck_y + \cos ck_z\right)$$

$k \ll 1$

$$J_{\mathbf{k}} \approx 2J\left(1 - \frac{1}{2}\left(ck_x\right)^2 + 1 - \frac{1}{2}\left(ck_y\right)^2 + 1 - \frac{1}{2}\left(ck_z\right)^2\right)$$

$$= 2J\left(3 - \frac{1}{2}\left(ck\right)^2\right)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx SJc^2k^2$$