

Лекция 8

Магнитооптика Ферромагнитных металлов

Магнитооптические методы исследования ферромагнитных металлов и сплавов

$$\delta = a \epsilon'_1 + b \epsilon'_2,$$

где a и b функции $f(n, k, \varphi)$, а $\epsilon_{xy} = i(\epsilon'_1 - i \epsilon'_2)$
недиагональные компоненты тензора
диэлектрической проницаемости

Эффективность использования оптических и МО методов для изучения электронной структуры ферромагнетиков связана с тем, что отклик системы электронов на воздействие электромагнитного излучения может быть записан в виде одной функции отклика тензоре диэлектрической проницаемости ϵ

Совместное измерение оптических и магнитооптических свойств позволяет получить экспериментальные спектральные зависимости для диагональных и недиагональных компонент тензора диэлектрической проницаемости.

- Задача теории получить выражение для тензора ϵ на основе существующих представлений о строении твердого тела и выяснить взаимодействия ответственные за появление или отсутствие МОЭ.
- Для металлов первое объяснение появления МОЭ было дано Аргирресом на основе зонной теории в 1953.
- Но в то время не было еще ни конкретных расчетов зонной структуры ни экспериментальных результатов для ФМ металлов.
- Твердое тело- задача многочастичная , точного решения нет – значит нужны модельные представления .
- Многие свойства металлов и сплавов удастся объяснить на основе зонной теории и даже на основе одноэлектронной зонной теории .

Основные положения зонной теории

В основе зонной теории лежат следующие главные приближения:

- Твёрдое тело представляет собой идеально периодический кристалл.
- Равновесные положения узлов кристаллической решётки Равновесные положения узлов кристаллической решётки фиксированы, то есть ядра атомов Равновесные положения узлов кристаллической решётки фиксированы, то есть ядра атомов считаются неподвижными (адиабатическое приближение Равновесные положения узлов кристаллической решётки фиксированы, то есть ядра атомов считаются неподвижными (адиабатическое приближение). Малые колебания Равновесные положения узлов кристаллической решётки фиксированы, то есть ядра атомов считаются неподвижными (адиабатическое приближение). Малые колебания атомов вокруг равновесных положений, которые могут быть описаны как фононы, вводятся впоследствии как возмущение электронного энергетического спектра.
- Многоэлектронная задача сводится к **одноэлектронной**: воздействие на данный электрон всех остальных описывается некоторым **усредненным периодическим полем**.
Ряд явлений, по существу многоэлектронных, таких

Особенности потенциальной энергии электрона в кристалле

Симметрия $V(r)$ – должна совпадать с симметрией кристалла

$$V(r+n) = V(r), \text{ где}$$

$$n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

a_1, a_2, a_3 – параметры кристаллической решетки

Циклический кристалл – бесконечный кристалл, разбиваемый

на периодически повторяющиеся параллелепипеды с ребрами Ga_1, Ga_2, Ga_3 . Число G является произвольно большим числом. Такой параллелепипед называется основной областью кристалла. Легко установить, что основная область содержит G^3 единичных ячеек с объемом $(a_1 \cdot [a_2 \times a_3])$. Циклические граничные условия требуют, чтобы любые две точки в пространстве, если они отличаются на вектор Gn , рассматривались как физически эквивалентные, то есть

$$\psi(r) = \psi(r + Gn). \quad (15.2)$$

Итак, математически задача формулируется следующим образом. Требуется найти решения уравнения (15.1) с потенциалом $V(\mathbf{r})$, обладающим полной пространственной симметрией решетки, удовлетворяющие граничным условиям (15.2).

$$\hat{\mathcal{H}}^0 \psi(\mathbf{r}) = E^0 \psi(\mathbf{r}), \quad (15.1)$$

$$\hat{\mathcal{H}}^0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + G\mathbf{n}). \quad (15.2)$$

Общие положения теории твердого тела

Как впервые показал Блох, всякое решение поставленной таким образом задачи должно иметь вид

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (15.3)$$

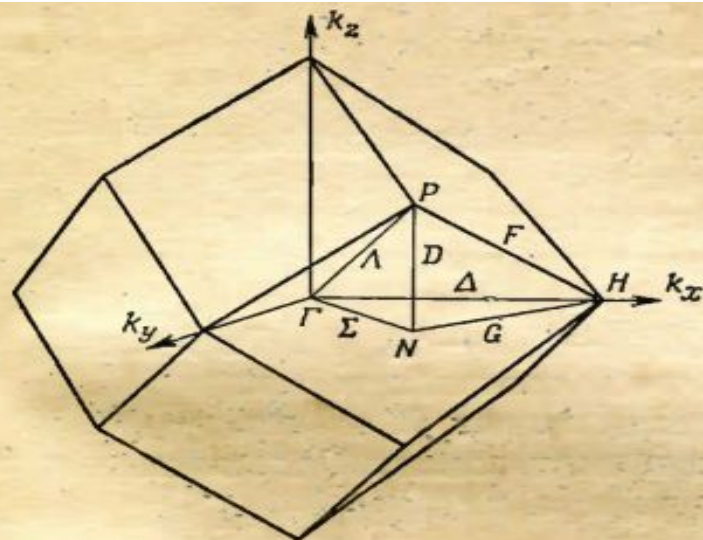
где $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ — периодическая с периодом решетки функция $u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{n})$ и $\mathbf{k}$ — волновой вектор или квазиимпульс электрона в кристалле. Условие (15.2) может быть выполнено только в том случае, когда

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{G} (\kappa_1 \mathbf{b}_1 + \kappa_2 \mathbf{b}_2 + \kappa_3 \mathbf{b}_3), \quad (15.4)$$

где $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ — целые числа и $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — основные периоды так называемой обратной решетки, определяемые равенствами

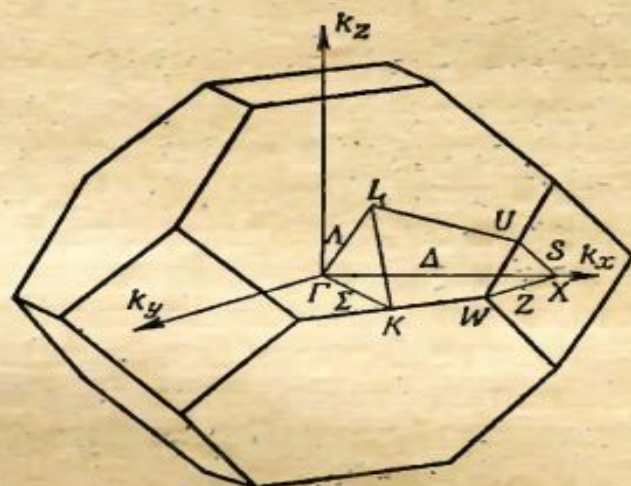
$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3).$$

Можно показать, что две блоховские функции, волновые векторы которых отличаются на вектор обратной решетки $\mathbf{h} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$ (h_i — целые числа, включая нуль), умноженной на 2π , физически эквивалентны. Для того чтобы не рассматривать физически эквивалентных решений, следует ограничить область изменения $\mathbf{k}$ в обратном пространстве. Наиболее просто это можно сделать, потребовав, чтобы вектор $\mathbf{k}$ лежал в центральной единичной ячейке обратной решетки ($\mathbf{k}$ также может лежать на границах единичной ячейки).



Фиг. 1. Зона Бриллюэна о. ц. к.-решетки.

Указаны симметричные точки и линии.



Фиг. 2. Зона Бриллюэна г. ц. к.-решетки.

Указаны симметричные точки и линии.

о. ц. к. Базисные векторы обратных решеток получаются из базисных векторов прямых решеток заменой $a/2$ на $2\pi/a$. Зоны Бриллюэна рассматриваемых структур могут быть получены с помощью вышеописанной процедуры и имеют вид, изображенный на фиг. 1 и 2. Для точек зон, обладающих определенной симметрией, использованы обозначения работы Баукарта и др. (1936).

В обоих случаях центры зон обозначены через Γ , а оси вдоль направлений $[100]$, $[111]$ и $[110]$ — соответственно через Δ , Λ и Σ . В зоне о. ц. к.-решетки основными «симметричными точками» будут Γ , H , P , N . Последние три из них являются точками пересечения осей Δ , Λ и Σ с гранями зоны. Так, одна из точек H имеет координаты $(2\pi/a) (1, 0, 0)$. Остальные пять точек указанного типа могут быть получены из нее добавлением векторов обратной решетки вида $(2\pi/a) (-1, 1, 0)$ или $(2\pi/a) (-2, 0, 0)$

¹⁾ $\hat{i}$, $\hat{j}$ и $\hat{k}$ — орты вдоль направлений $[100]$, $[010]$ и $[001]$. — Прим. ред.

Общие положения теории твердого тела

Волновые векторы, значения которых лежат в центральной единичной ячейке обратной решетки, называются приведенными волновыми векторами, а сама центральная единичная ячейка — приведенной зоной Бриллюэна. Следовательно, всякая блоховская функция может быть охарактеризована некоторым приведенным волновым вектором $\mathbf{k}$. Отсюда непосредственно следует, что собственные значения уравнения (15.1) также будут функциями волнового вектора $\mathbf{k}$.

В действительности волновое уравнение (15.1) при всяком допустимом значении $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ имеет не одно собственное значение и собственную функцию. Будем нумеровать эти различные квантовые состояния, соответствующие одному и тому же значению приведенного волнового вектора, некоторым индексом n , причем этот индекс можно приписать различным квантовым состояниям в порядке возрастания их энергии, то есть состояния нумеруются значком n так, чтобы имело место $E_1(\mathbf{k}_0) \leq E_2(\mathbf{k}_0) \leq \dots \leq E_j(\mathbf{k}_0) \leq \dots$. Прделаав это для всех значений $\mathbf{k}$, получим систему энергетических функций

$$E_1(\mathbf{k}) \leq E_2(\mathbf{k}) \leq \dots$$

При изменении $\mathbf{k}$ в приведенной зоне Бриллюэна каждая из функций определяет в четырехмерном пространстве некоторую гиперповерхность. Следовательно, состояния электрона в кристаллической решетке

Общие положения теории твердого тела

характеризуются четырьмя квантовыми числами — тремя составляющими $\mathbf{k}$ и номером энергетической полосы n , то есть

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = G^{-3/2} \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (15.5)$$

$$E = E_n(\mathbf{k}). \quad (15.6)$$

Волновые функции ψ_n нормированы в основной области, тогда как $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ нормируются по элементарной ячейке ($G^{-3/2}$ в (15.5) — фактор нормировки):

$$\int u_n^* u_n d\tau_0 = \delta_{n'n}.$$

Таким образом, энергетический спектр электрона, движущегося в периодическом поле кристаллической решетки, состоит из отдельных областей $E = E_n(\mathbf{k})$, в каждой из которых энергия является функцией квазиимпульса $\mathbf{k}$. Эти области называют полосами дозированной энергии или просто энергетическими полосами. Следовательно, энергетический спектр электрона в кристалле состоит из чередующихся разрешенных и запрещенных полос энергии.

Энергетические полосы в приближении свободных электронов

Рассмотрим предельный случай, в котором периодический потенциал можно считать исчезающе малым, но полностью сохраним свойства симметрии волновых функций. Тогда, выбирая в качестве u_k какую-нибудь из функций вида $\exp(i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r})$, для энергии состояния с волновым вектором $\mathbf{k}$ будем иметь

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_n|^2, \quad (1.18)$$

где $\mathbf{K}_n$ — любой из векторов обратной решетки. Хотя это и кажется удивительным, но во многих металлах энергетические полосы могут быть приближенно получены уже с помощью этой простой модели¹⁾.

Для иллюстрации процедуры рассмотрим о.ц.к.-решетку. Волновой вектор $\mathbf{k}$ запишем в виде $(2\pi/a)(x, y, z)$, а векторы обратной решетки — в виде $(2\pi/a)(n_1, n_2, n_3)$. Полагая

$$\lambda = \frac{m_0 a^2 E}{2\hbar^2 \pi^2},$$

имеем

$$\lambda = (x + n_1)^2 + (y + n_2)^2 + (z + n_3)^2. \quad (1.19a)$$

Рассмотрим сначала, как изменяется λ при изменении волнового вектора вдоль оси Δ [100], т. е. при $y = z = 0$. Наимизшая полоса соответствует нулевым значениям n_1, n_2, n_3 и имеет вид параболы $\lambda_1 = x^2$. Следующие полосы получаются при значениях $\mathbf{K}_n$, соответствующих векторам обратной решетки типа (1, 1, 0). Это дает

$$\lambda_2 = (x - 1)^2 + 1, \quad \lambda_3 = x^2 + 2, \quad \lambda_4 = (x + 1)^2 + 1. \quad (1.19b)$$

Каждая из этих полос четырехкратно вырождена, т. е. существует четыре набора векторов обратной решетки, приводящих к выражениям (1.19b). Из векторов обратной решетки типа (2, 0, 0) получаются следующие полосы:

$$\lambda_5 = (x - 2)^2, \quad \lambda_6 = x^2 + 4, \quad \lambda_7 = (x + 2)^2. \quad (1.19в)$$

Вторая из этих полос четырехкратно вырождена, две другие — не вырождены.

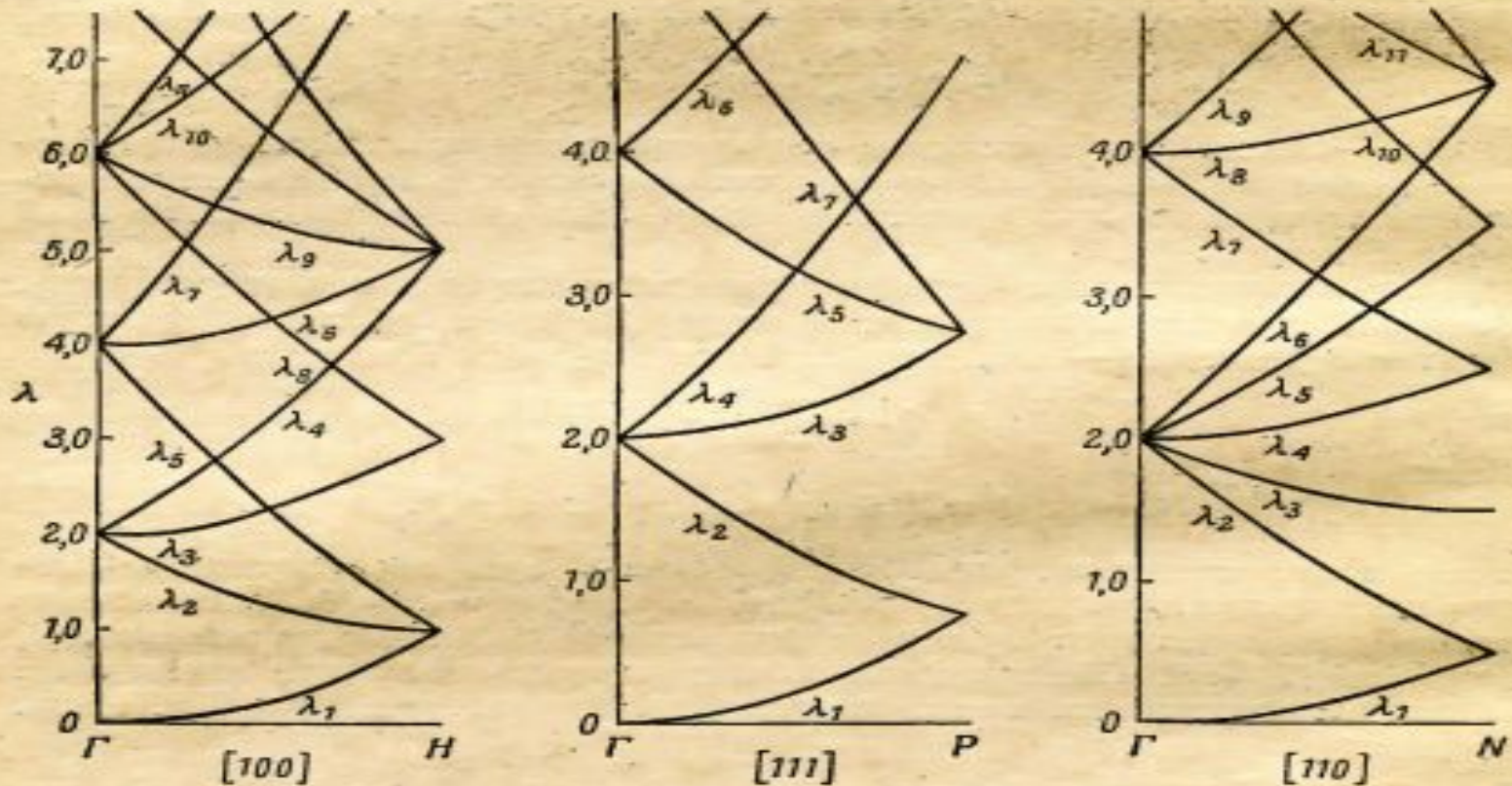
Рассмотрим, что происходит при изменении вектора $\mathbf{k}$ вдоль направления [111]: $x = y = z \leq 1/2$. Рассматривая те же самые

Энергетические полосы в приближении свободных электронов

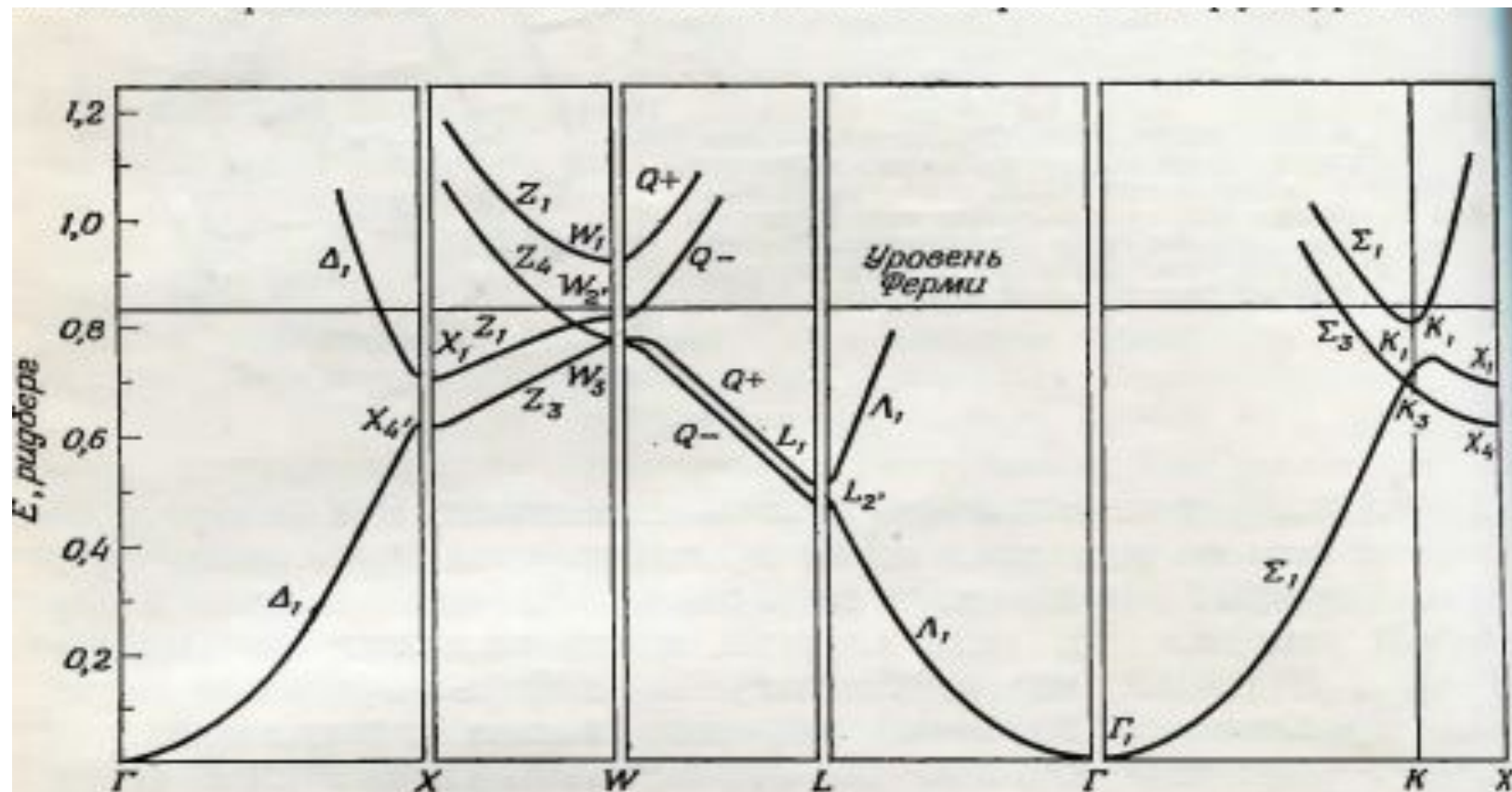
векторы обратной решетки, что и выше, получаем

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 3x^2, & \lambda_2 &= 2(x-1)^2 + x^2, & \lambda_3 &= 3x^2 + 2, \\ \lambda_4 &= 2(x+1)^2 + x^2, & \lambda_5 &= (x-2)^2 + 2x^2, & \lambda_6 &= (x+2)^2 + 2x^2; \end{aligned} \quad (1.19г)$$

λ_1 — невырожденная полоса, λ_3 — шестикратно вырожденная, остальные вырождены трехкратно. Наконец, когда волновой



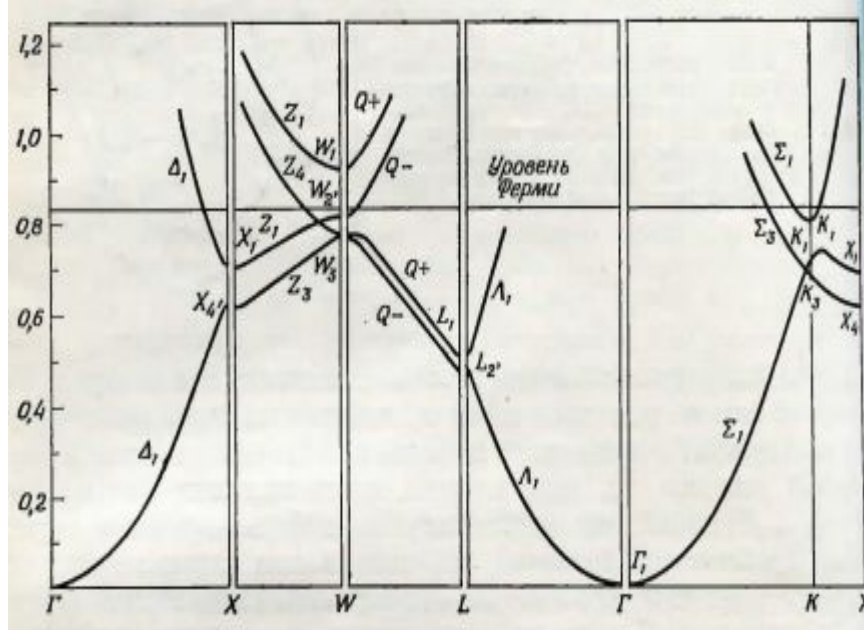
Ф и г. 3. Энергетические полосы в приближении свободных электронов. Безразмерная величина $\lambda = m_0 a^2 E / 2 \hbar^2 \pi^2$ изображена как функция волнового вектора вдоль направлений $[100]$, $[110]$ и $[111]$ в зоне Бриллюэна о. ц. к.-решетки.



Ф и г. 28. Энергетические зоны в алюминии для различных линий симметрии, рассчитанные Сегалом [26].

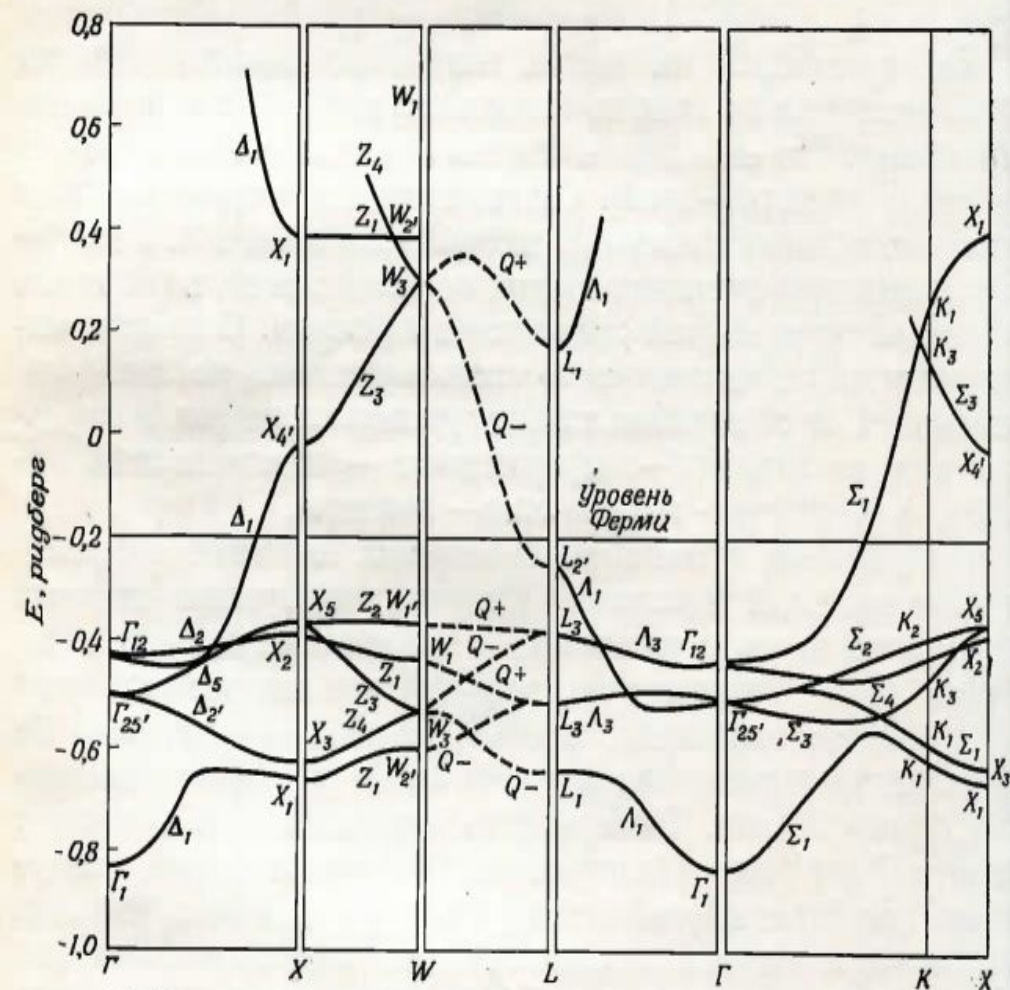
Показан также ферми-уровень, ниже которого все состояния заняты.

Каждая энергетическая зона может вместить по два электрона на примитивную ячейку (разные направления спинов). Гранецентрированная кубическая решетка Al содержит один атом на примитивную ячейку, а каждый атом может отдать три электрона (лежащих на внешних уровнях). Таким образом, в Al достаточно электронов чтобы заполнить полторы зоны. !



Ранее мы показали, что число состояний (волновых векторов) в зоне Бриллюэна равно числу примитивных ячеек в кристалле. Каждое из этих состояний дважды вырождено из-за спина, поэтому

чтобы заполнить ровно полторы зоны. В основном состоянии алюминия будут заняты все уровни вплоть до энергии, называемой *энергией Ферми*, или уровнем Ферми; в алюминии уровень Ферми проходит немного выше третьей зоны в точке W . Овечающая ему горизонтальная линия как раз указывает, до каких пор зоны заполнены. Оказывается, что в этом случае первая зона целиком заполнена, вторая и третья зоны заполнены частично, а четвертая и более высокие зоны пусты. Существование в основном состоянии частично заполненных зон — характерная черта металлов.



Ф и г. 30. Энергетические зоны в меди вдоль различных линий симметрии, рассчитанные Сегалом [8].

В переходных и благородных металлах состояния, соответствующие последней заполненной оболочке конфигурации инертных газов, почти ничем не отличаются от состояний сердцевины в свободном атоме. Следовательно, интересующие нас энергетические зоны отвечают состояниям, которые в свободном атоме были бы d - или наиболее высокими s -состояниями. На фиг. 30 показана зонная структура меди. Снова энергия наинизшей зоны возрастает из точки Γ как парабола для свободных электронов. Однако немного выше Γ , по шкале энергий в спектр врывается сложная группа зон, которые часто называют d -зонами. Но такое описание не более чем качественное, потому что s - и d -зоны сильно перемешаны. Выше этих d -зон энергетический спектр опять очень напоминает зоны свободных электронов, только щели между зонами значительно больше, чем у простых металлов.

Медь, как и алюминий, содержит в элементарной ячейке один атом, но на каждый атом в ней приходится 11 электронов (в свободном атоме они занимают состояния над заполненными оболочками конфигурации аргона). Этих электронов достаточно, чтобы заполнить пять с половиной зон. В результате уровень Ферми в меди проходит выше d -зон. Что же касается структуры зон вблизи энергии Ферми, то она напоминает зонную структуру для свободных электронов, отвечающую плотности, равной одному электрону на примитивную ячейку, но зоны сильно искажены. Переходя от меди

В отличие от благородных металлов для ферромагнитных металлов Fe, Co и Ni с незаполненной 3d оболочкой уровень Ферми попадает в d –зону, с большой плотностью состояний.

Основы квантовой оптики металлов

Теория оптических свойств металлов должна объяснить основные оптические характеристики: показатели преломления и поглощения, отражательную, излучательную и поглощательную способности, исходя из общих представлений квантовой теории твердого тела.

В наиболее общей форме задача ставится следующим образом: электроны проводимости в кристалле взаимодействуют с ионной решеткой и друг с другом; на поверхность металла падает электромагнитная волна определенной интенсивности, направления и поляризации. Требуется найти поляризуемость α и световую проводимость σ , а по ним n и k , а следовательно любые оптические характеристики. Для этого вычисляется плотность электрического тока в металле, обусловленная взаимодействием системы электронов с электромагнитным полем световой волны. С этой целью необходимо решить уравнение Шредингера для такой системы, то есть определить энергетический спектр и волновые функции электронов металла при их взаимодействии с электромагнитным полем и найти по общим формулам квантовой механики и квантовой статистики плотность электронного тока.

Основы квантовой оптики металлов

Однако решение так поставленной общей задачи практически в настоящее время невозможно. Поэтому приходится искать приближенные решения, используя методы теории возмущений, в которой применяется теория групп и учитываются свойства симметрии кристалла.

Прежде всего нам следует рассмотреть механизм взаимодействия световой волны с электронами металла.

С квантовой точки зрения взаимодействие электромагнитной волны с электронами в металле происходит путем поглощения и испускания фотонов. Этот процесс может протекать при столкновениях электронов с атомами примесей (или с дефектами решетки), друг с другом или с поверхностью металла, а также при поглощении или испускании фононов. Если при этом изменение энергии электрона $\hbar\omega$ мало по сравнению с областью размытости фермиевского распределения kT , то можно считать, что электрон получает энергию практически непрерывно.

С классической точки зрения электрический вектор световой волны в этом случае действует на электроны практически как постоянное поле: в каждый данный момент времени устанавливается ток, пропорциональный мгновенному значению напряженности электрического поля световой волны. Причем электрический ток находится в фазе с полем световой волны E . Поэтому в далекой инфракрасной области

Основы квантовой оптики металлов

Классическое поглощение - При котором электроны поглощают световую энергию за счет их ускорения электрическим полем световой волны $\omega \tau \ll 1$ и, кроме того, $\hbar \omega \ll kT$,

Когда частота электромагнитной волны возрастает, электроны уже не могут точно следовать за изменениями напряженности поля световой волны, ток отстает по фазе от возбуждающего поля. Это должно происходить тогда, когда период световых колебаний делается сравнимым с временем релаксации τ . Поэтому отклонений в поведении электронов от их поведения в статических полях следует ожидать, как только частота световой волны делается равной величине, обратной времени релаксации ($\omega \tau = 1$).

Если, наконец, период колебаний световой волны делается меньше времени между двумя столкновениями, то в первом приближении

Основы квантовой оптики металлов

можно пренебречь столкновениями электронов с фононами, так как малое число столкновений не может оказать существенного влияния на функцию распределения и на плотность тока. В этом случае основную роль играют так называемые квантовые переходы, при которых изменение энергии электрона велико сравнительно с областью размытости распределения Ферми, то есть $\hbar \omega \gg kT$. В этом процессе энергия, поглощаемая электроном от падающей световой волны, переводит электрон в возбужденное состояние, которое в нормальном состоянии не занято. В видимой части спектра при таком процессе поглощения электрон из полосы проводимости переходит в одну из вышележащих энергетических полос. Тот же самый процесс имеет

место в УФ области.

Условие $\hbar \omega \gtrsim kT$ выполняется даже при комнатных температурах почти во всей инфракрасной области спектра, а при гелиевых температурах оно выполняется уже в радиодиапазоне.

Основы квантовой оптики металлов

В оптике металлов следует различать три области поглощения света металлами:

1. классическое поглощение, при котором электроны ускоряются электрическим полем $\omega\tau \ll 1$ и $\hbar\omega \ll kT$ (далекая инфракрасная область)
2. внутризонное поглощение $\hbar\omega \sim kT$ при котором имеется поглощение и испускание фононов и учитываются столкновения электронов друг с другом, с примесями и т.д.
3. межзонное поглощение при котором кванты света перебрасывают электроны из заполненных зон в вышележащие свободные зоны и при этом поглощаются.

С использованием этих представлений были получены дисперсионные ф-лы квантовой оптики металлов.

Основы квантовой оптики металлов

Тензор диэлектрической проницаемости в приближении хаотических фаз для зонной теории при условии пренебрежения эффектами затухания и температурными эффектами может быть записан в виде :

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 N}{m\omega^2 V} + \sum_{ee'} \frac{\langle e_k | p | e'_k \rangle \langle e'_k | p | e_k \rangle}{\hbar(\omega - \omega_{ee'} - i\gamma)} (f_{e'} - f_e)$$

Где

ee'

Номера зон

(2.24)

$\langle e_k | p | e'_k \rangle$

Матричные элементы оператора импульса

f_e функция распределения Ферми при нулевой температуре
 $\omega_{e'e} = \omega_{e'} - \omega_e$

Основы квантовой оптики металлов

Уравнение 2-24 получено с помощью уравнения Лиувилля для одночастичной матрицы плотности

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H} \hat{\rho}] \quad (2.25)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

$\hat{H}_0$ - одноэлектронный гамильтониан в зонном приближении

$\Psi_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = |\mathbf{k}\rangle$ - собственные функции

$$\hat{H}' = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{P}}$$

описывает взаимодействие электромагнитного поля с веществом и рассматривается, как возмущение.

Для кубических кристаллов такой тензор дает только диагональные члены

Уравнение движения электрона в электромагнитном поле имеет вид

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{H}]. \quad (13.1)$$

Уравнения движения можно представить в форме Гамильтона

$$\dot{x}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (13.2)$$

Пока масса m считается постоянной, то есть пока можно пренебрегать релятивистской зависимостью массы от скорости, уравнения (13.1) и (13.2) эквивалентны друг другу, если только положить, что функция Гамильтона имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left[\left(p_x - \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left(p_y - \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left(p_z - \frac{e}{c} A_z \right)^2 \right] + e\varphi. \quad (13.3)$$

Потенциалы A и φ связаны с напряженностями поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ соотношениями

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (13.4)$$

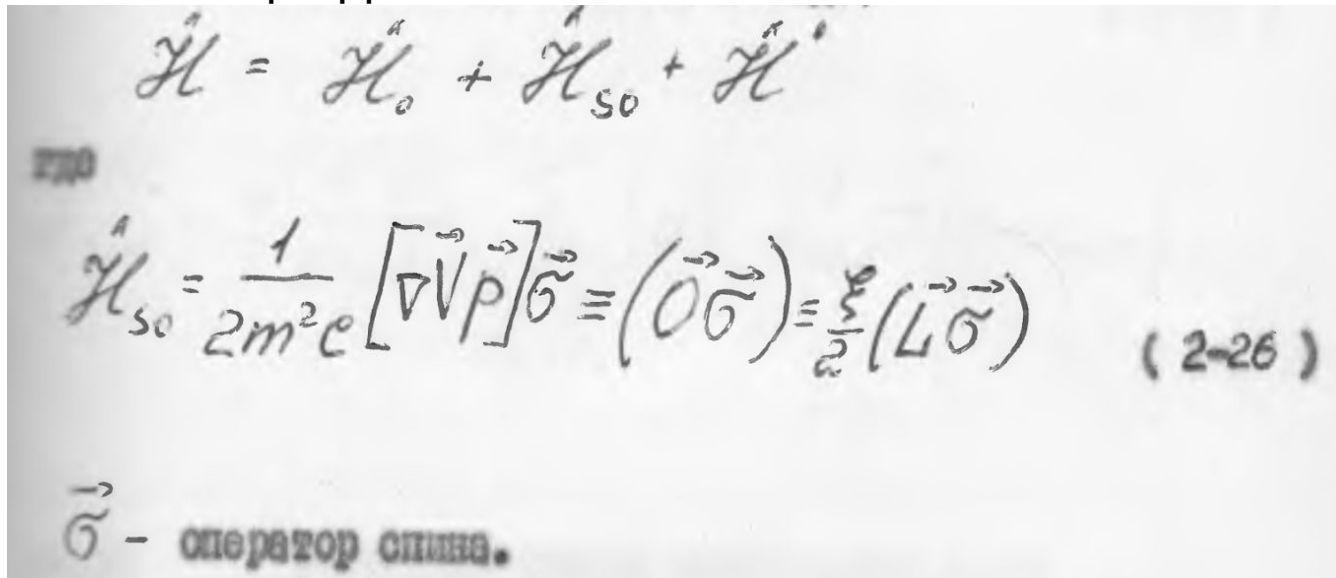
Первые попытки дать объяснение эффектам Фарадея и Керра на основе микроскопической теории сводились к тому, чтобы показать, как под действием внешнего магнитного поля показатели преломления для лево и право поляризованного света становятся различными.

Для получения, наблюдаемого в ферромагнетиках вращения плоскости поляризации, нужно было предположить, что в ФМ материалах существует эффективное магнитное поле порядка 10^6 - 10^7 эрстед, то есть на три порядка больше, чем существующие внешние магнитные поля, и приблизительно равное эффективному магнитному полю, постулированному Вейсом для объяснения ферромагнетизма в 3d-металлах. Природа Вейсовского поля, ответственного за ферромагнетизм металлов была объяснена Гейзенбергом, как результат обменного взаимодействия электронов, но учет только обменного взаимодействия не приводил к появлению магнитооптических явлений.

Как первым указал Хелм ответственным за магнитооптические эффекты является спин-орбитальное взаимодействие, которое устанавливает связь между импульсом электрона $\mathbf{p}$ и его магнитным моментом $\boldsymbol{\mu}$ при движении электрона в электрическом поле ∇V , и это взаимодействие должно обеспечивать связь между оптическими и ферромагнитными свойствами вещества.

Основы квантовой оптики металлов

Отличные от нуля недиагональные члены ϵ могут быть получены при учете спин-орбитального взаимодействия, что впервые было показано Аргирресом.



Handwritten mathematical derivation of the spin-orbit interaction term $\hat{H}_{so}$. The derivation starts with the total Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{so} + \hat{H}'$, where $\hat{H}_0$ is the free electron Hamiltonian. The spin-orbit term is derived from the Dirac equation as $\hat{H}_{so} = \frac{1}{2m^2c} [\nabla V \vec{p}] \vec{\sigma} = (\vec{O} \vec{\sigma}) = \frac{\hbar}{2} (\vec{L} \vec{\sigma})$, labeled as equation (2-26). Below the equation, it is noted that $\vec{\sigma}$ is the spin operator.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{so} + \hat{H}'$$

где

$$\hat{H}_{so} = \frac{1}{2m^2c} [\nabla V \vec{p}] \vec{\sigma} = (\vec{O} \vec{\sigma}) = \frac{\hbar}{2} (\vec{L} \vec{\sigma}) \quad (2-26)$$

$\vec{\sigma}$ - оператор спина.

В приближении полного «замораживания» орбитального момента не будет изменения структуры зон в первом приближении по H_{so} . Следуя Аргирресу учтем влияние спин-орбитального взаимодействия на волновые функции.

Основы квантовой оптики металлов

$$\psi_{ek} = \sum_{e'} \frac{\langle e' | \hat{O} | ek \rangle \sigma}{\hbar \omega_{ee'}} \psi_{e'k}$$

(2-27)

Подставляя (2-27) в (2-24) получим соответствующие выражения для действительной и мнимой частей недиагональной компоненты тензора диэлектрической проницаемости $\epsilon' = \epsilon_1' - i\epsilon_2'$

$$\epsilon_{1ij}'(\omega) = 2 \left(\epsilon_{ij}'^{(2)}(\omega)_{\uparrow} + \epsilon_{ij}'^{(2)}(\omega)_{\downarrow} \right)$$

$$\epsilon_{2ij}'(\omega) = \left(\epsilon_{ij}''^{(1)}(\omega)_{\uparrow} + \epsilon_{ij}''^{(1)}(\omega)_{\downarrow} \right)$$

(2-28)

Основы квантовой оптики металлов

где

$$\epsilon_{ij\sigma}^{(2)} = + \frac{i\hbar e^2}{m^2 \pi^2 \omega^2} \sum_{\substack{E_m > E_F \\ E_n < E_F}} p \int d^3k \frac{\omega_{mn\sigma} Q_{mn\sigma}^{2j}}{(\omega^2 - \omega_{mn}^2)}$$

(2-29)

$$\epsilon_{ij\sigma}^{(1)} = + \frac{e^2 \hbar}{2\pi m^2 \omega^2} \sum_{\substack{E_m > E_F \\ E_n < E_F}} \int d^3k Q_{mn\sigma}^{2j} \delta(\omega - \omega_{mn\sigma})$$

знаки $\pm$ учитывают разное направление спина

$$Q_{mn\sigma}^{2j} = \frac{i}{\hbar} \sum_e \left[\frac{\langle e | \rho_z | n \rangle \langle e | p_j | m \rangle \sigma \langle m | p_j | n \rangle \sigma}{\omega_{ne\sigma}} + \frac{\langle e | \rho_z | m \rangle \langle n | p_j | e \rangle \sigma \langle m | p_j | n \rangle \sigma}{\omega_{me\sigma}} \right]$$

В случае неферромагнитного металла вклады подзон с разным направлением спинов взаимно уничтожаются и никаких магнитооптических эффектов не возникает. Можно показать, что тензор ϵ является антисимметричным, т.е. в первом приближении учет спин-орбитального взаимодействия не изменяет диагональных членов тензора диэлектрической проницаемости.

Общий вид тензора ϵ для кубического кристалла совпадает с видом тензора для изотропной среды.

Внутризонные переходы

- Учет влияния спин-орбитального взаимодействия приводит не только к изменению вероятности межзонных переходов, но и к изменению рассеяния электронов в пределах одной зоны. Поэтому МОЭ, также как и оптические эффекты, следует рассматривать, как сумму вкладов за счет внутризонных и межзонных переходов. В области относительно низких частот /ИК область спектра и ниже/, когда основную роль в формировании оптических свойств играют ускорение и релаксация электронов проводимости, различные механизмы влияния спин-орбитального взаимодействия на рассеяние приведет к различной частотной зависимости эффектов Фарадея и Керра.
- В ИК области частот МОЭ имеют общую природу с аномальным эффектом Керра.
- Экспериментально показано, что для ФМ металлов вклад межзонных переходов в МОЭ начинается в области частот 0.1- 0.2 эВ.

Связь межзонных оптических переходов со структурой оптических и магнитооптических спектров

Вклад за счет межзонных переходов в компоненты тензора диэлектрической проницаемости, характеризующие поглощение можно записать в виде:

$$\begin{aligned}\epsilon_2 &\sim \sum_{\sigma, m, n} \int |P_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{mn}) d^3k \\ \epsilon_2' &\sim \pm \sum_{\sigma, m, n} Q_{mn} \delta(\omega - \omega_{mn}) d^3k\end{aligned}\quad (2-30)$$

Где m и n обозначают занятые и незанятые состояния

σ - спин, знаки (+) и (-) соответствуют разным направлениям спина.

$$\epsilon_2 \sim \epsilon_2' \sim \sum_{mn} f_{mn} \frac{dN}{dE_{mn}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} f_{mn} \int \frac{ds}{\nabla_k (E_m - E_n)} \quad (2-31)$$

Таким образом поведение ϵ_2 и ϵ_2' определяется величиной матричных элементов и межзонной плотностью состояний

Связь межзонных оптических переходов со структурой оптических и магнитооптических спектров

$$\epsilon_2 \sim \epsilon_2' \sim \sum_{mn} f_{mn} \frac{dN}{dE_{mn}} =$$

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{mn} f_{mn} \int \frac{ds}{\nabla_k (E_m - E_n)}$$

f_{mn} - межзонная сила осциллятора, а S одна из изоэнергетических поверхностей, определяемая условием:

$$\hbar\omega = E_m(K) - E_n(K)$$

В критических точках K_c где :

$$\nabla_k [E_m(k) - E_n(k)] = 0 \quad (2.32)$$

в непрерывных оптических и магнитооптических спектрах должны наблюдаться особенности.

Классификация такого типа особенностей была введена Ван-Ховом, а Филлипс показал, что наличие таких особенностей в электронном энергетическом спектре приводит к особенностям на кривых ϵ_2 и ϵ_2'

- В металлах существует и еще одна особенность появления аномалий в спектрах ϵ_2 и ϵ_2' , не обязательно связанная с критическими точками. Возможна такая локализация уровня Ферми и такая топология изоэнергетических поверхностей в некоторых частях зоны Бриллюэна где становятся возможны переходы между занятыми и свободными состояниями, то есть в спектрах появляются переходы к уровню Ферми. Такие переходы особенно сильно должны проявляться в магнитооптических спектрах.
- Изломы на кривых МОЭ или $\epsilon'(\omega)$ могут свидетельствовать о подключении (или выключении) переходов из новой зоны к уже имеющимся.
- Наряду с рассмотренными особенностями в спектрах могут появляться особенности, связанные с межзонными переходами, для которых происходит сильное увеличение силы осциллятора (переходы вблизи Бреговских плоскостей).

Зонная структура металлов

Таблица 2.3

Характеры неприводимых представлений групп X и L

Группа X

Представление	Базис	E	$2C_4 \perp$	$C_2 \parallel$	$2C_4 \parallel$	$2C_2$	I	$2C_4 \perp$	$C_2 \parallel$	$2C_4 \parallel$	$2C_2$
X_1	$1, 2x^2 - y^2 - z^2$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
X_2	$y^2 - z^2$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
X_3	yz	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
X_4	$yz (y^2 - z^2)$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
X_5	xy, xz	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
X'_1	$xyz (y^2 - z^2)$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
X'_2	xyz	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
X'_3	$x (y^2 - z^2)$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
X'_4	x	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
X'_5	y, z	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	-0

$$X = \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0)$$

Группа L

Представление	Базис	E	$2C_3$	$3C_2$	I	$2C_3$	$3C_2$
L_1	$1, xy + yz + xz$	1	1	1	1	1	1
L_2	$yz (y^2 - z^2) + xy (x^2 - y^2) + xz (z^2 - x^2)$	1	1	-1	1	1	-1
L_3	$2x^2 - y^2 - z^2, y^2 - z^2$	2	-1	0	2	-1	0
L'_1	$x (y^2 - z^2) + y (z^2 - x^2) + (x^2 - y^2)$	1	1	1	-1	-1	-1
L'_2	$x + y + z$	1	1	-1	-1	-1	1
L'_3	$y - z, 2x - y - z$	2	-1	0	-2	1	0

$$L = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$$

Обычно, когда приводится энергетический спектр реального кристалла энергетические зоны в нем задаются указывая неприводимые представления в точках высокой симметрии

Что можно узнать из такой таблицы?

1. Вырождение уровней
2. Симметрию базисных функций

Зонная структура металлов

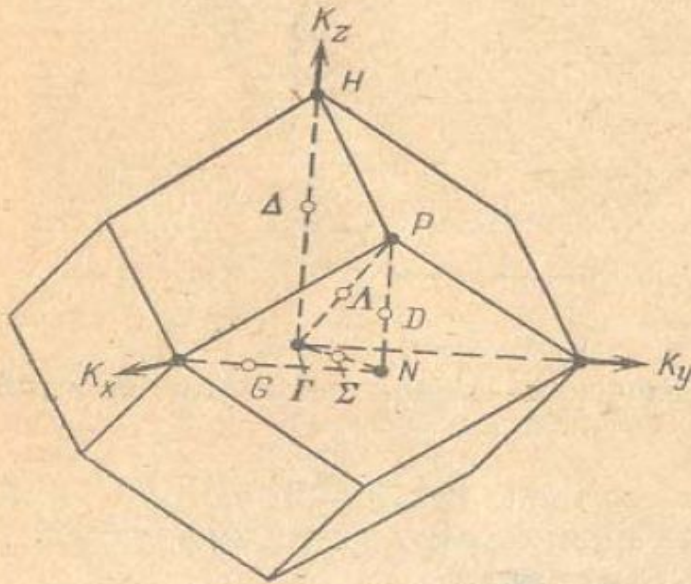


Рис. 2.14. Зона Бриллюэна объемноцентрированной кубической решетки

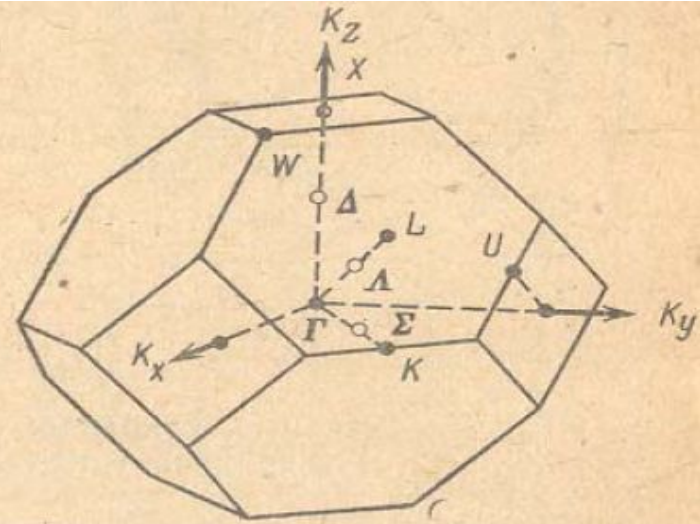


Рис. 2.15. Зона Бриллюэна граничноцентрированной кубической решетки

Не все неприводимые представления, соответствующие данной пространственной группе отвечают реальным энергетическим уровням. Большинство из них могут оставаться незанятыми. Конкретный порядок следования уровней, степень их заполнения и расстояние между ними, может быть установлено только после задания потенциала взаимодействия.

Зонная структура металлов

Методы расчета электронного энергетического спектра

Вычисление из первых принципов:

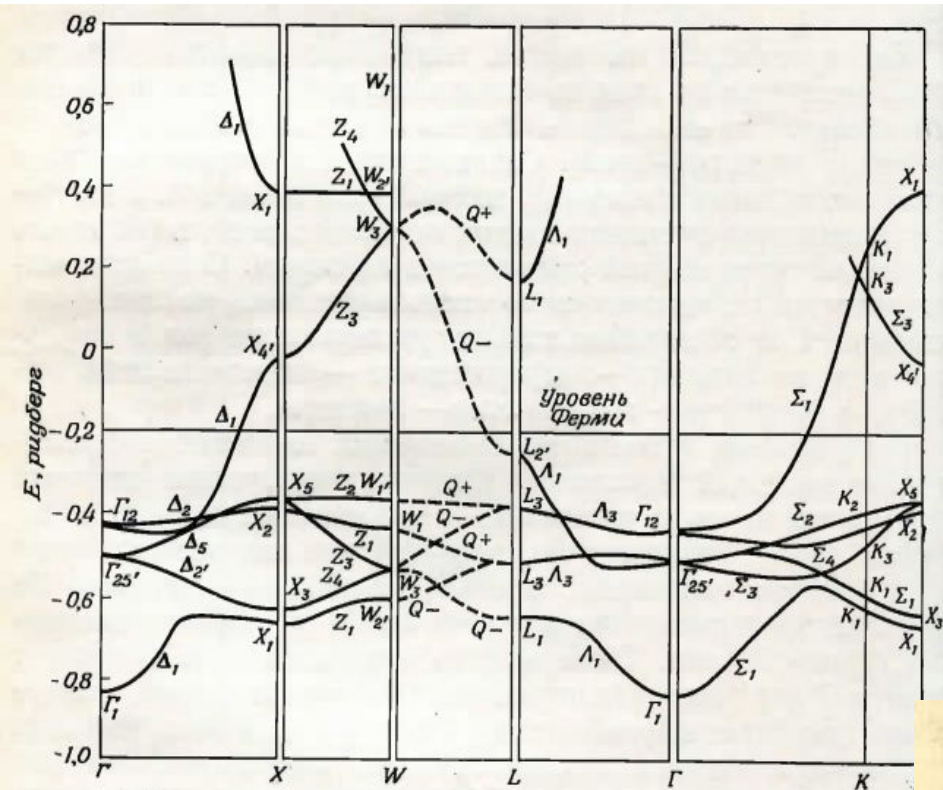
Метод присоединенных плоских волн (ППВ), метод ортогонализированных плоских волн, метод функций Грина - метод Коринги-Кона - Ростокера

Интерполяционные методы, в которых матричные элементы Гамильтониана рассматриваются, как некоторые подгоночные параметры.

Для переходных металлов d-зоны строятся в приближении сильной связи, а s-p зоны в приближении почти свободных электронов, кроме того учитывается гибридизация d и s зон.

Таким образом устанавливается **общий вид электронного энергетического спектра** с помощью одноэлектронных методов расчета – точность метода несколько десятых электрон вольт, а затем на основании имеющихся **экспериментальных данных о Ферми поверхности и определения различных межзонных интервалов из оптических и магнитооптических** методов проводится корректировка относительного расположения зон

Зонная структура металлов



Ф и г. 30. Энергетические зоны в меди вдоль различных линий симметрии рассчитанные Сегалом [8].

Медь содержит в элементарной ячейке 1 атом, но на каждый атом в ней приходится 11 электронов $3d^{10}s^1$. Этих электронов достаточно, чтобы заполнить пять с половиной зон.

В результате уровень Ферми попадает в S-зону. Структура зон вблизи поверхности Ферми напоминает зонную структуру для свободных электронов с плотностью 1 электрон на элементарную ячейку.

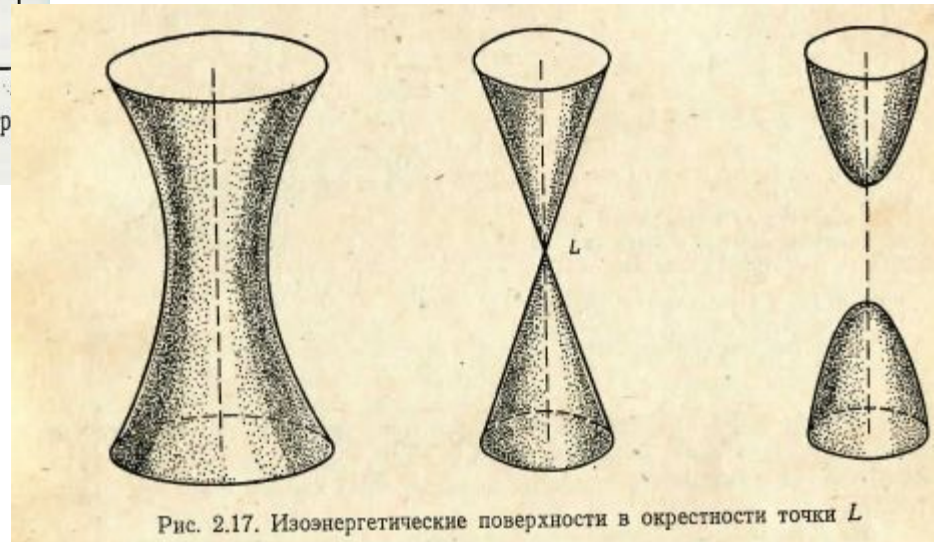
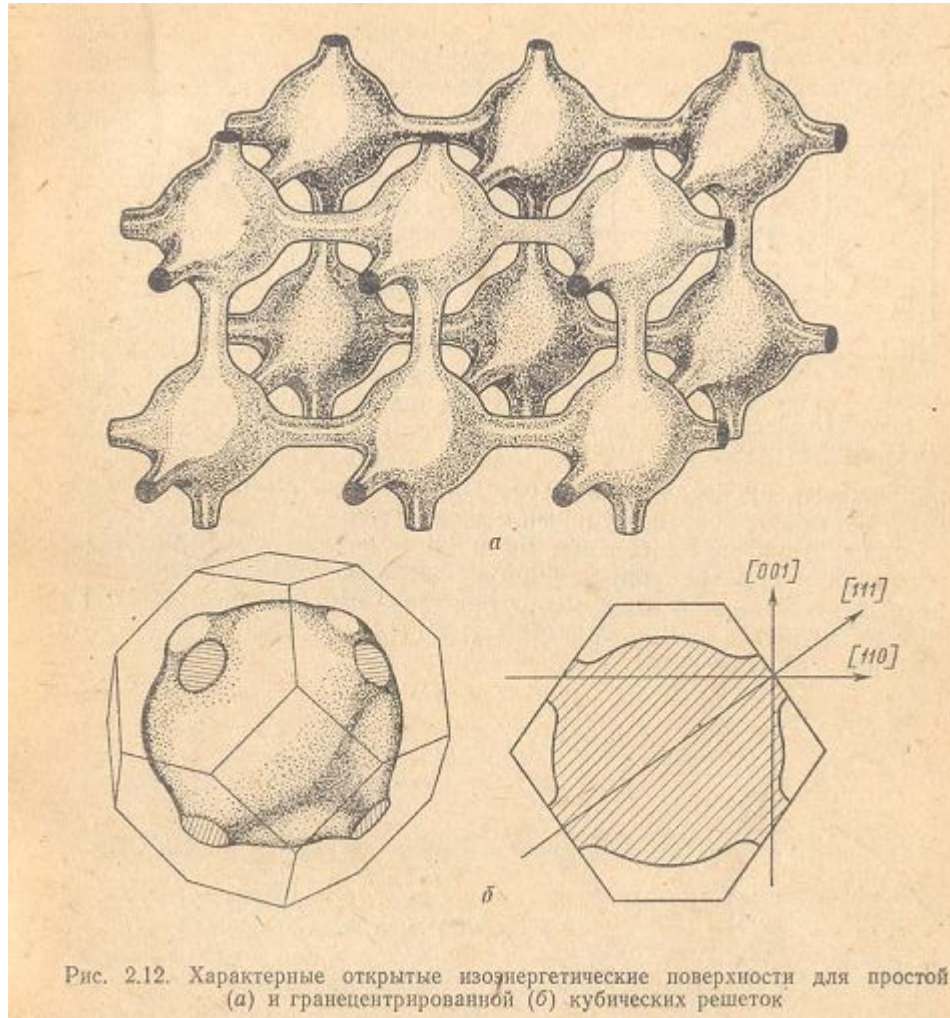


Рис. 2.17. Изоэнергетические поверхности в окрестности точки L

Зонная структура металлов



Радиус области соприкосновения, радиус шейки был определен по эффекту де Гааза-ван-Альфена, циклотронному резонансу, зависимости поглощения ультразвука от направления магнитного поля и др.

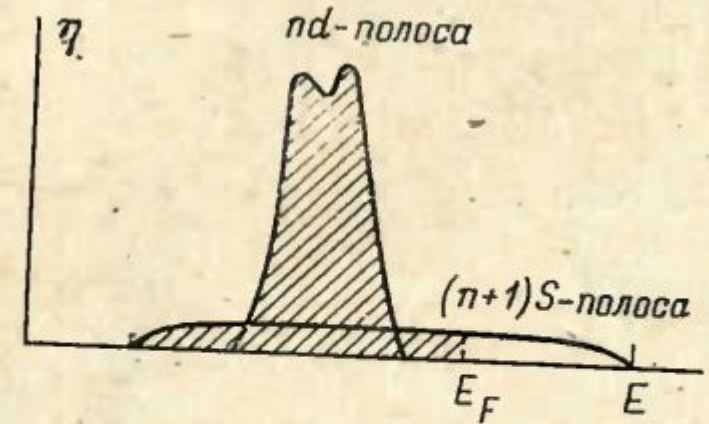
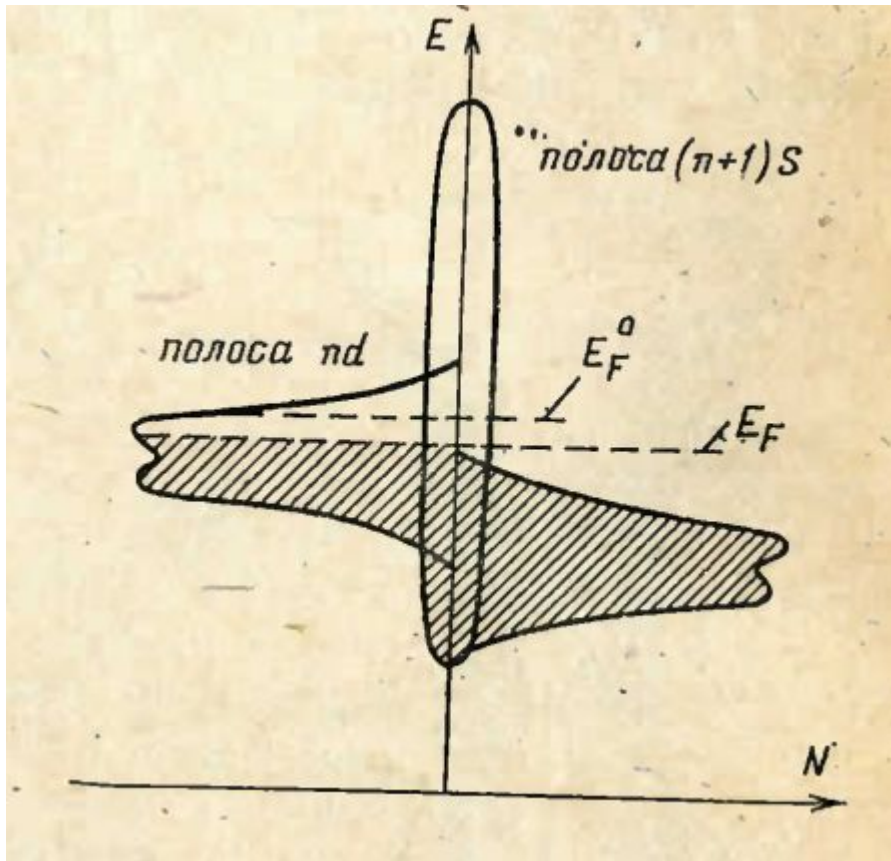


Рис. 2.18. Схематическое изображение кривой плотности состояний для Cu

Плотность состояний на поверхности Ферми меди мала

Зонная структура никеля



Переходя от меди к никелю мы вправе ожидать, что хотя общий вид d и s зон останется почти без изменений **число электронов**, которые могут заполнять те же зоны уменьшится. Теперь **уровень Ферми** попадает уже в d -зону и зонная структура вблизи поверхности Ферми становится более сложной

Ni и Cu – соседи по периодической таблице, одинаковые кристаллические структуры

Зонная структура никеля

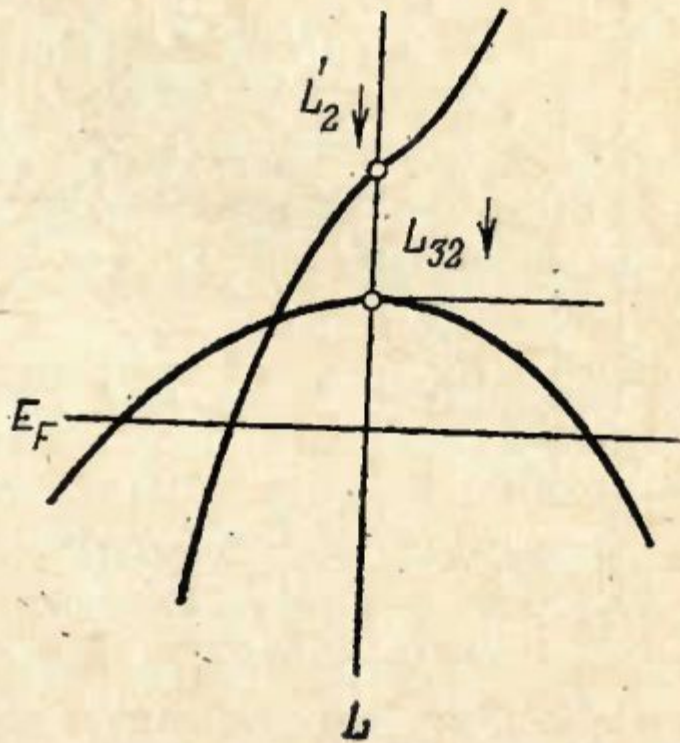


Рис. 2.20. Схема энергетических зон в окрестности L -точки (прямой порядок)

Первые модели зонной структуры Ni были построены по аналогии с медью. За счет опускания уровня Ферми вблизи точки L должен образовываться дырочный карман, кроме того вблизи L-точки должны наблюдаться самые низкоэнергетические межзонные переходы и наблюдаться особенности в спектральных зависимостях МОЭ.

Особенности действительно наблюдались, но их невозможно было расположить в данной модели (с прямым порядком уровней).

Зонная структура никеля

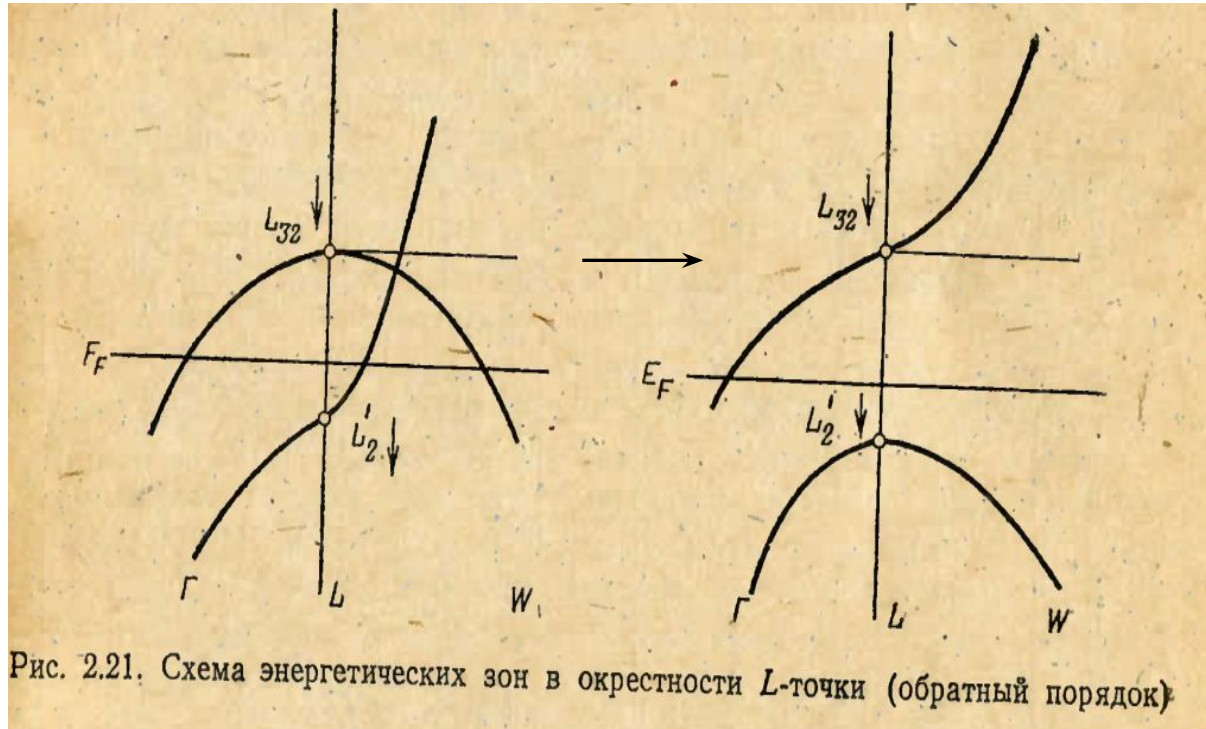
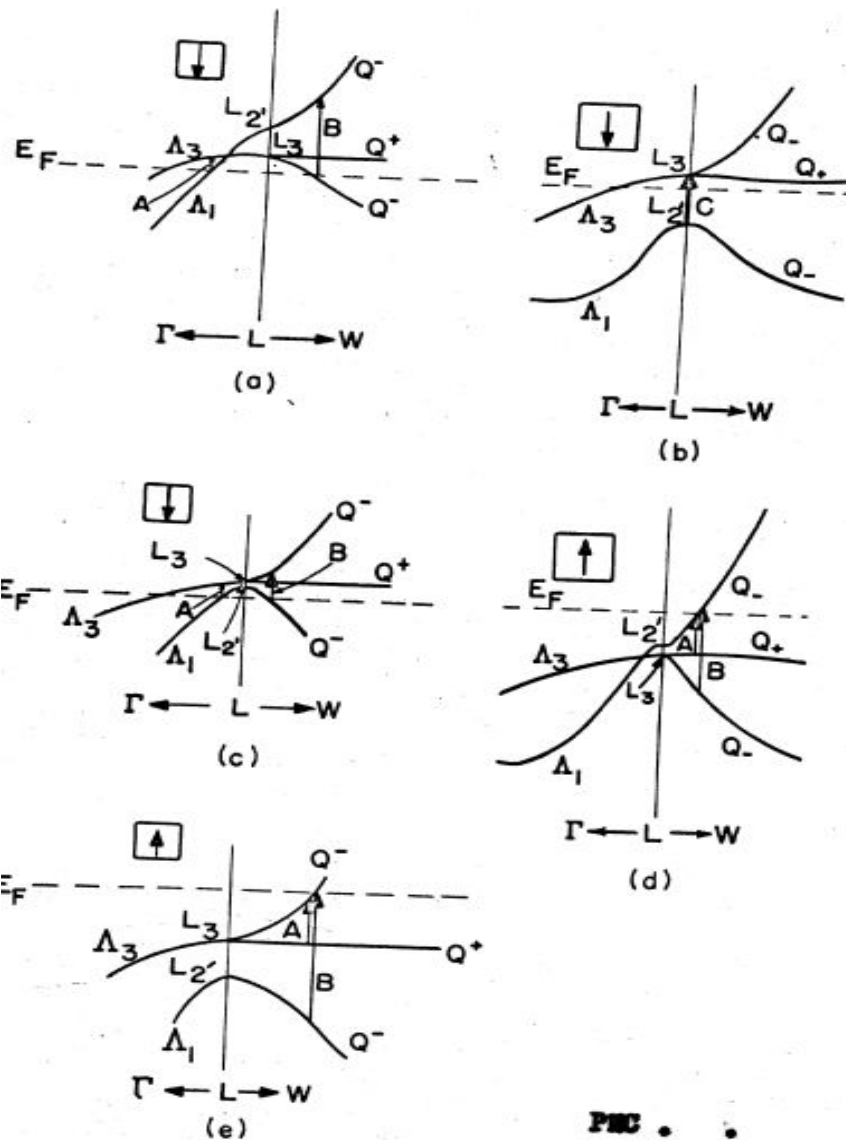


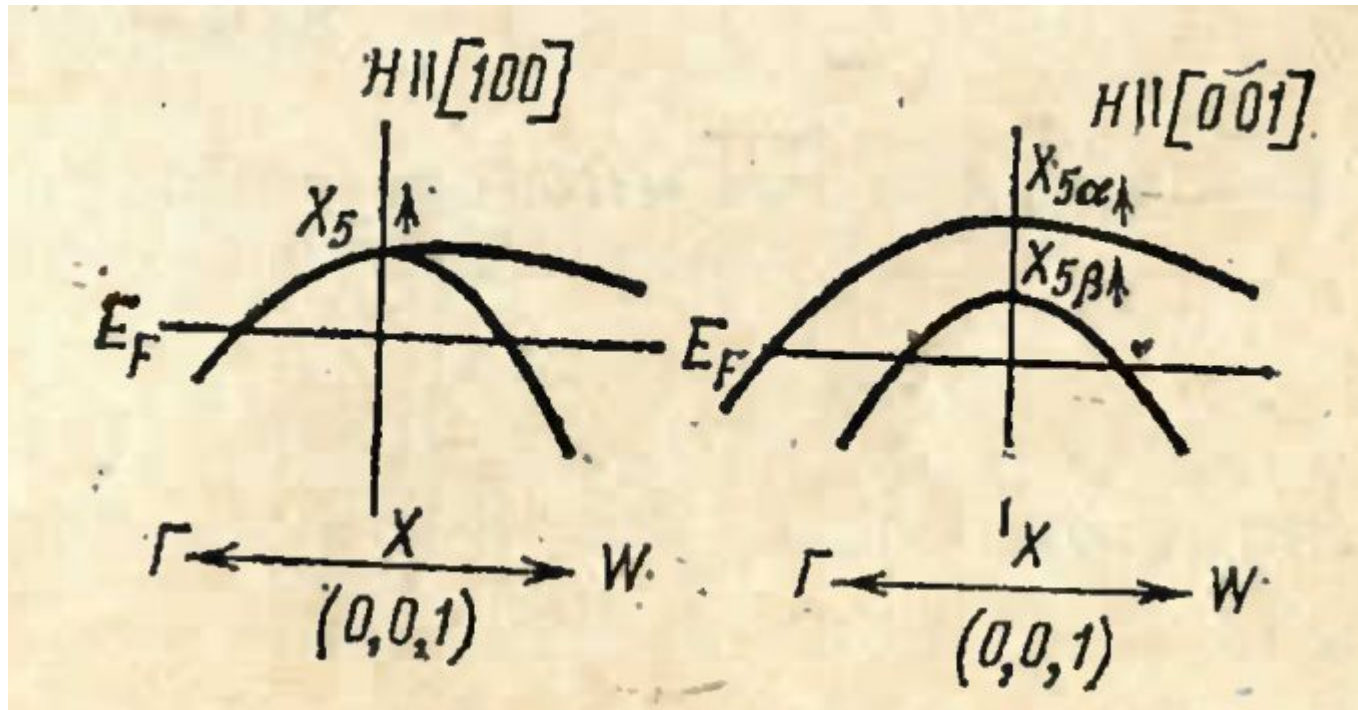
Рис. 2.21. Схема энергетических зон в окрестности L -точки (обратный порядок)

Для объяснения эксперимента пришлось сменить порядок уровней L_2' (s-p) и L_{32} (d- типа) и с учетом гибридизации была получена модель с обратным порядком уровней. При этом исчез карман в L -точке и шейка оказалась не в s-p зоне, а в d-зоне. В последующих экспериментах было доказано отсутствие кармана в L -точке, а прямые теоретические расчеты из первых принципов подтвердили модель с обратным порядком уровней.

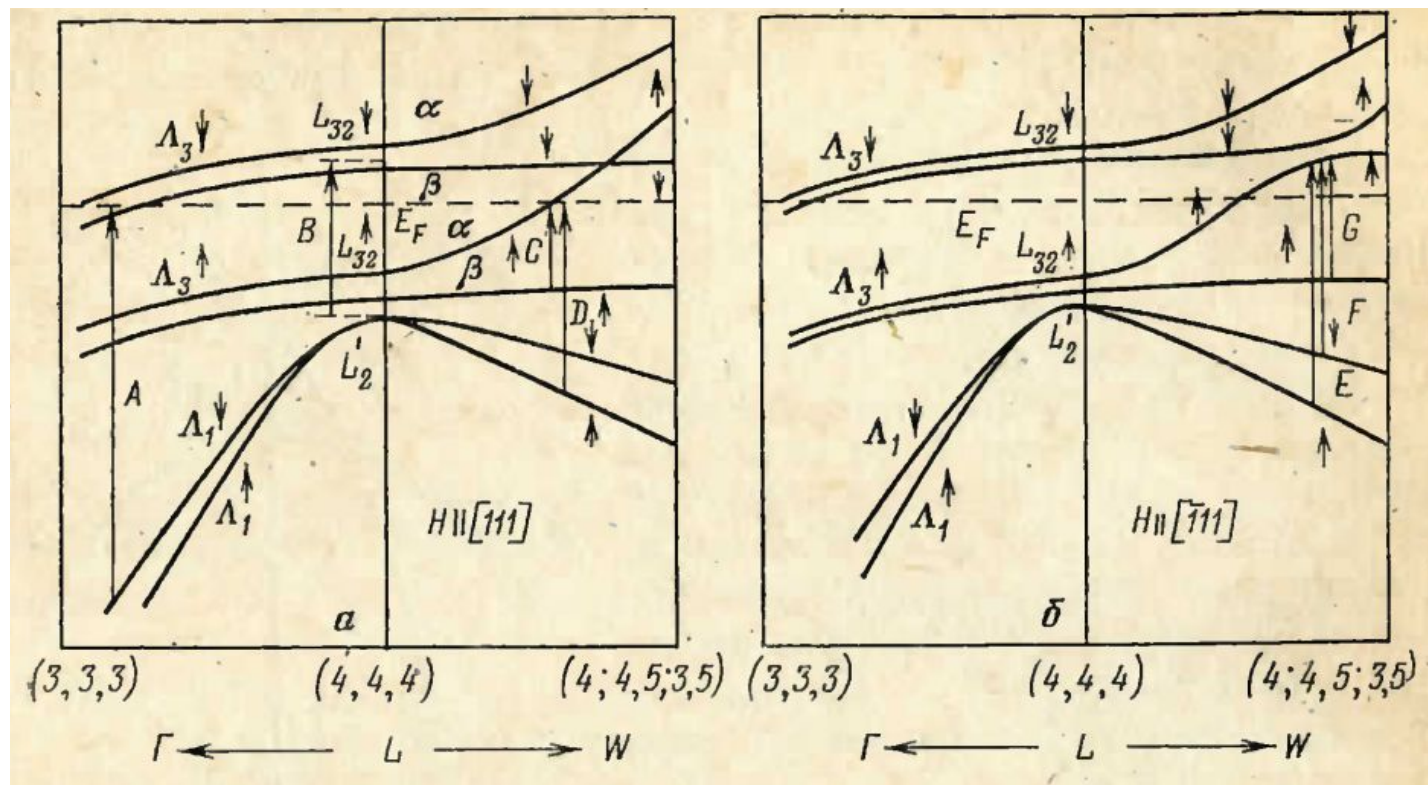


Возможные модели для зонной структуры Ni
вблизи L точки зоны Бриллюэна.

Зонная структура никеля



При исследовании Ферми поверхности Ni было обнаружено изменение формы дырочного кармана в точке X, в зависимости от направления магнитного поля, что было объяснено влиянием спин-орбитального взаимодействия. Спин-орбитальное взаимодействие, снимая вырождение энергетических зон, приводит к сильному изменению энергетического спектра в некоторых областях зоны Бриллюэна. Эти изменения при повороте вектора намагниченности должны наблюдаться оптическим методом для определенных межзонных переходов. Соответствующий –ориентационный эффект был впервые обнаружен на монокристалле никеля.



Механизмы возникновения ориентационных эффектов:

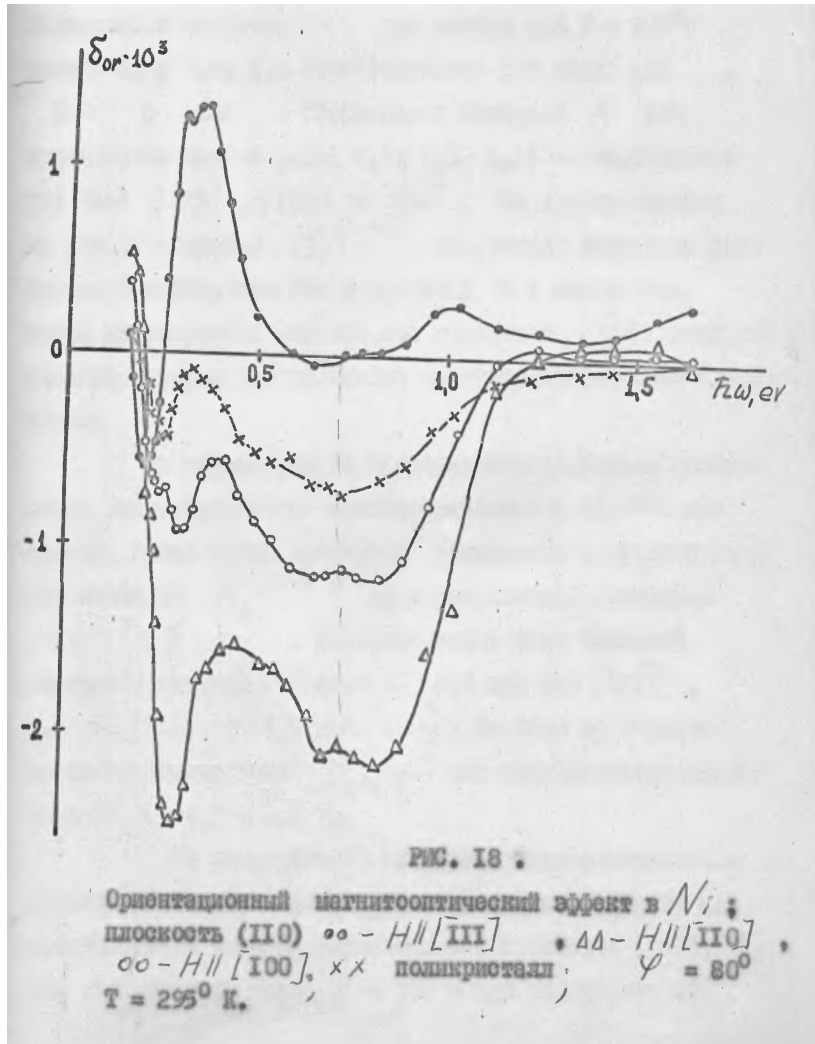
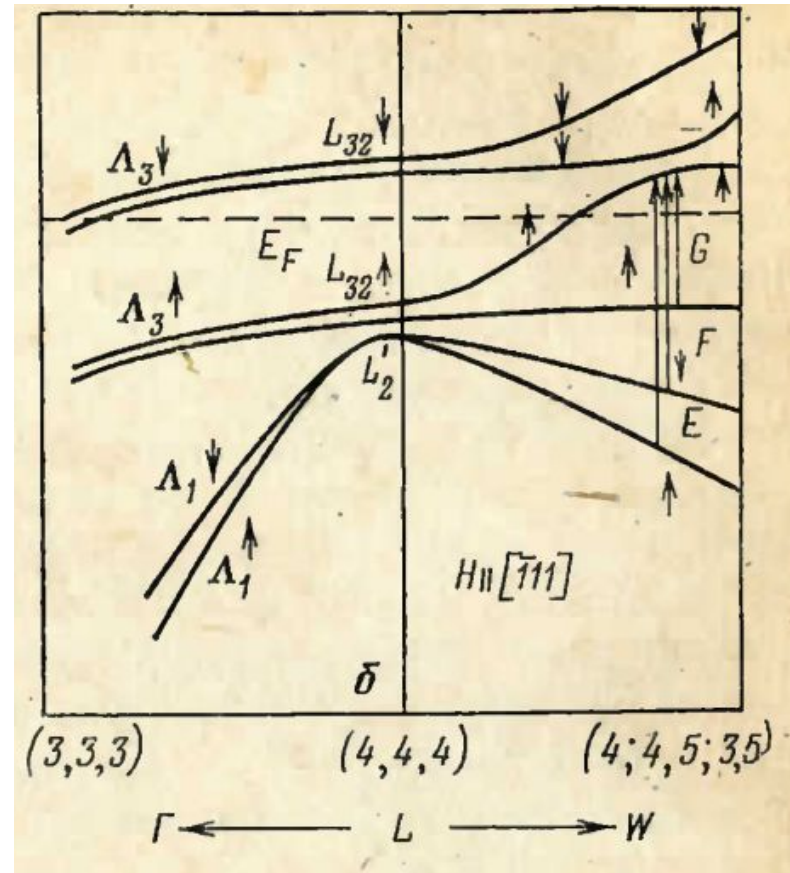
- Расщепление энергетических зон вдоль линии симметрии (вдоль Λ) переходы $\Lambda_1 \rightarrow \Lambda_3$ от B до A.
- Снятие спин-орбитальным взаимодействием случайного вырождения зон в точке пересечения зон с противоположным направлением спина для перехода E и G. В этом случае происходит изменение кривизны зон, эффективных масс, межзонной плотности состояний, что должно приводить к сильным оптическим ориентационным эффектам.

- Таким образом, появляется принципиальная возможность наблюдать указанное изменение электронной структуры ФМ металла при повороте вектора намагниченности оптическим методом на частотах межзонных переходов, а «локализация» этого изменения в определенных областях зоны Брюллиэна открывает перспективу надежной идентификации межзонных переходов.
- Мы считаем, что межзонные переходы, идущие в область снятия вырождения энергетических зон спин-орбитальным взаимодействием ответственны за появление структуры в спектрах ориентационного магнитооптического эффекта.

Переход : 0.3 eV

$$\hbar\omega = L_{32}(\downarrow) - L_{32}(\uparrow)$$

Прямое спектральное измерение обменного расщепления.



ОМЭ

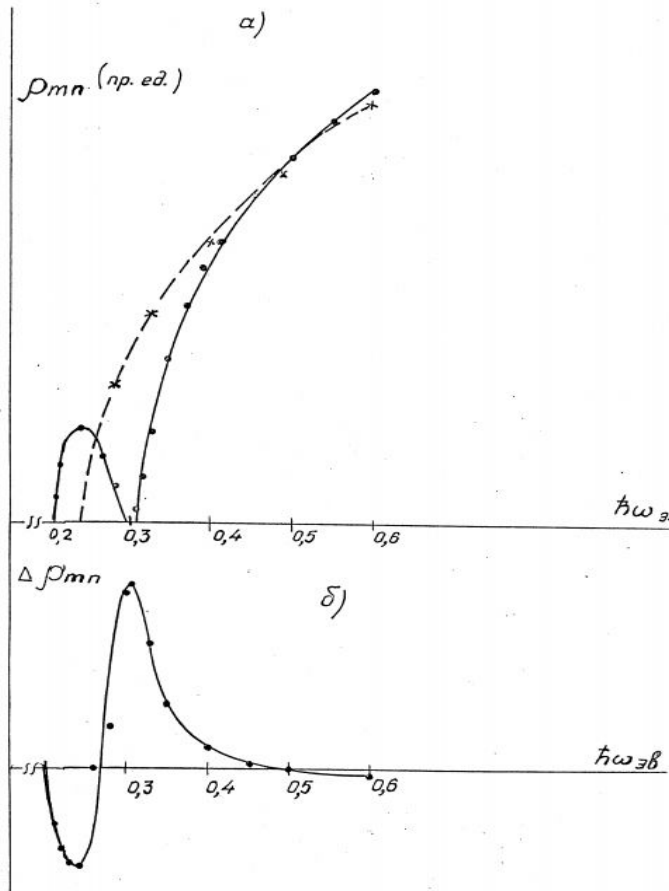


Рис. 4-15

Для вычисления межзонной плотности состояний необходимо вычислить интеграл:

$$\int_{E_l < 0, E_u > 0} \delta(\hbar\omega_{ul} - \hbar\omega) \partial^3 k$$

$$\hbar\omega_{ul} = E_u - E_l$$

Изменение межзонной плотности состояний при снятии случайного вырождения подзон с противоположным направлением спинов

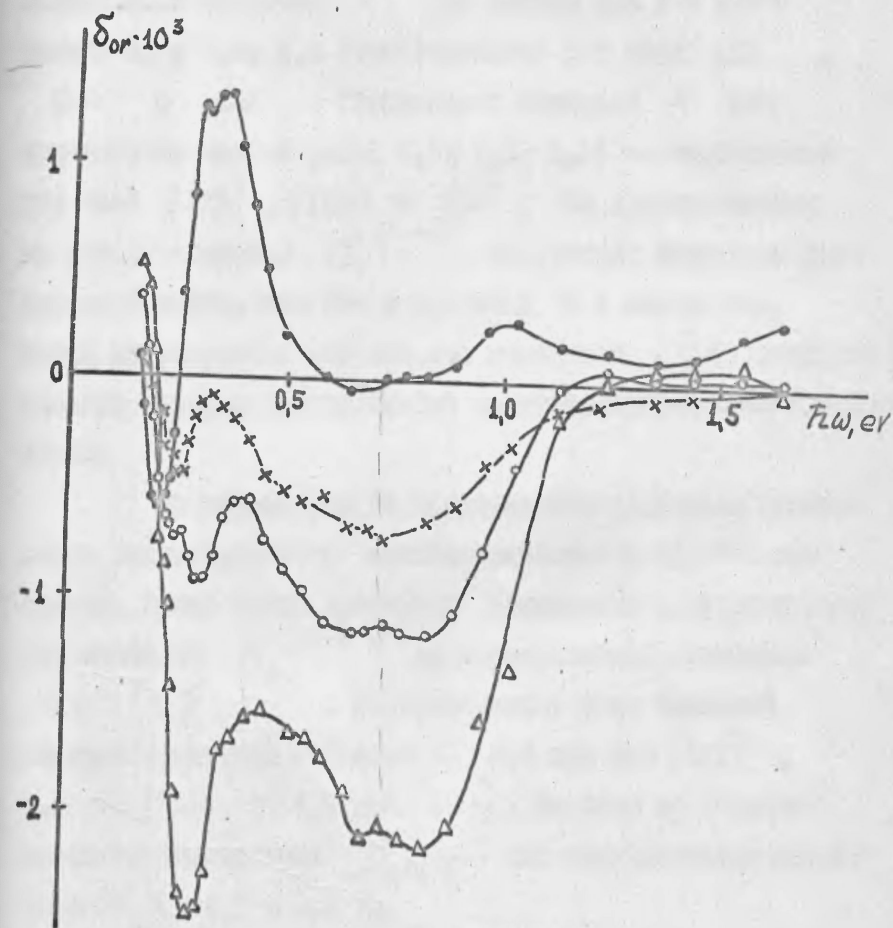


РИС. 18.

Ориентационный магнитооптический эффект в Ni ;
 плоскость (110) $\circ\circ - H \parallel [111]$, $\Delta\Delta - H \parallel [110]$,
 $\circ\circ - H \parallel [100]$, $\times\times$ поликристалл; $\varphi = 80^\circ$,
 $T = 295^\circ \text{ K}$.

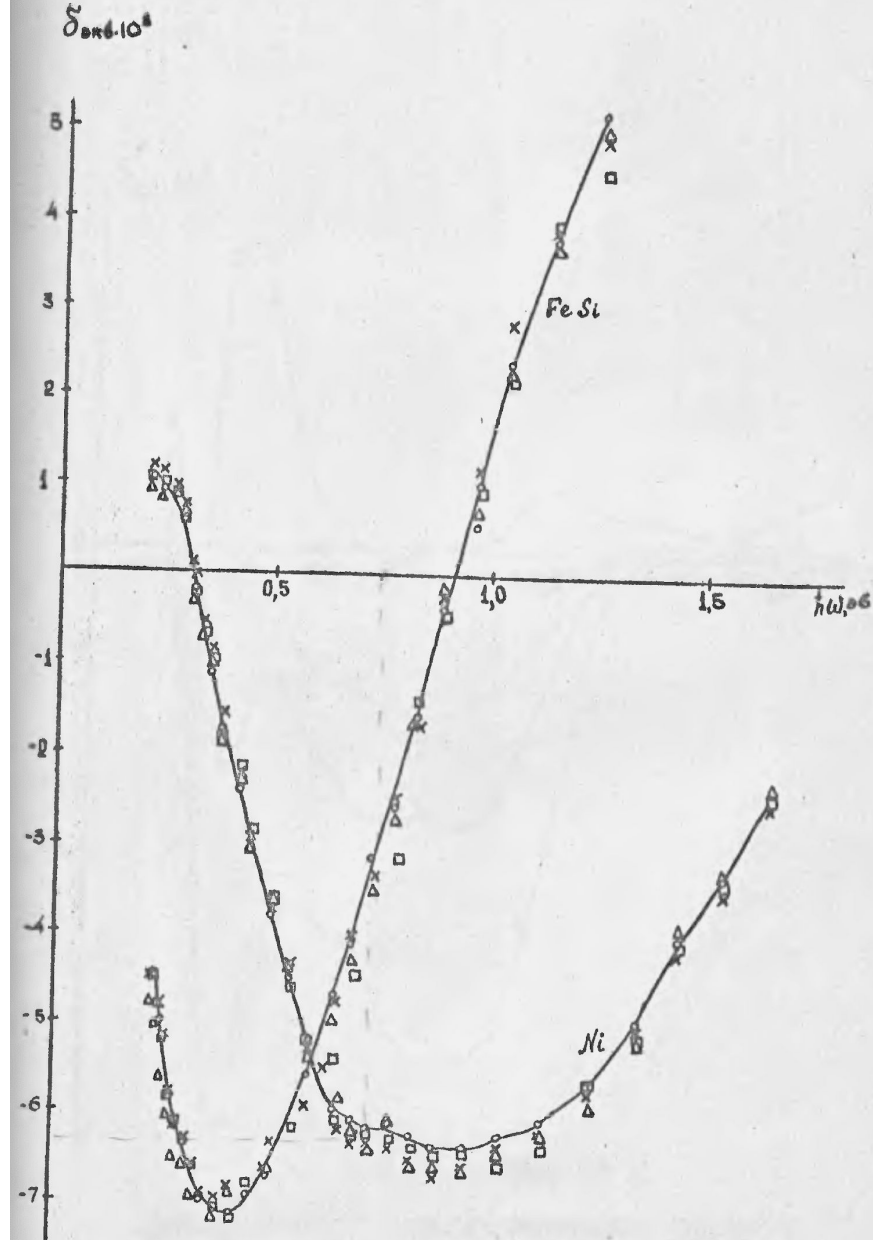


РИС. 17

ЗЭК в монокристаллах Ni и $FeSi$;
 $\times - H \parallel [111]$, $\Delta - H \parallel [110]$, $\square - H \parallel [100]$
 $\circ - \delta_s$, $\varphi = 80^\circ$, $T = 295^\circ \text{ K}$

ЭЭК

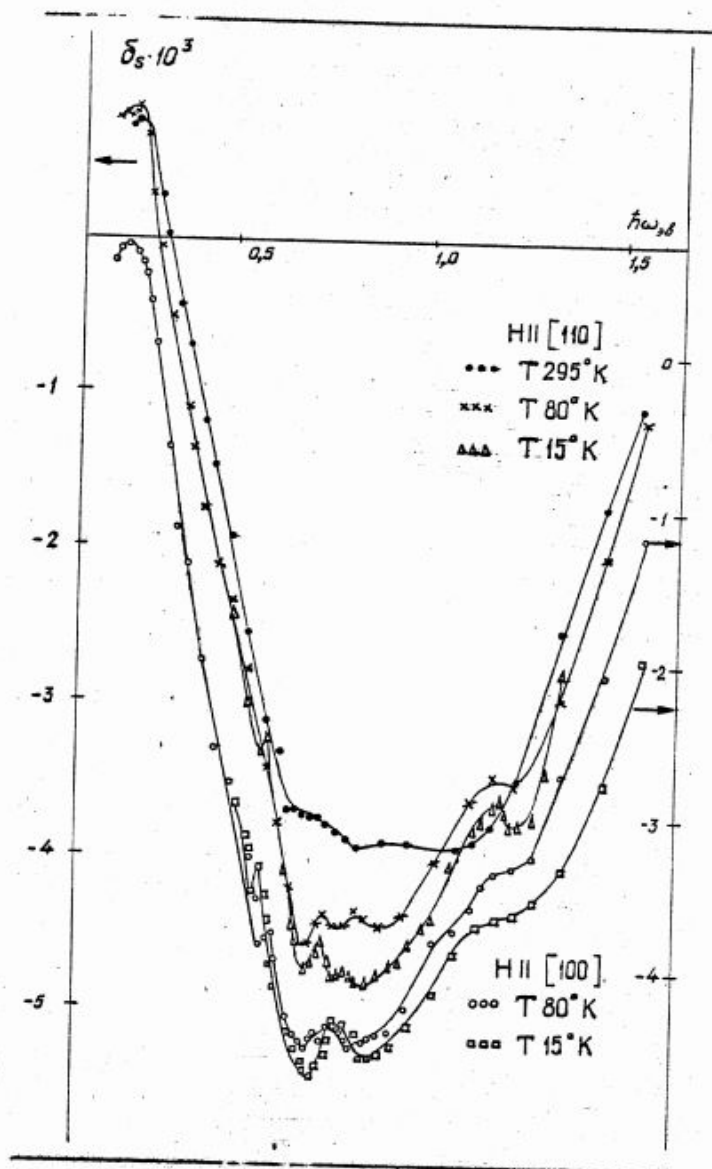


Рис. 4.
Экстремальный эффект Холла для монокристалла ниобия
при различных температурах $\varphi = 70^\circ$

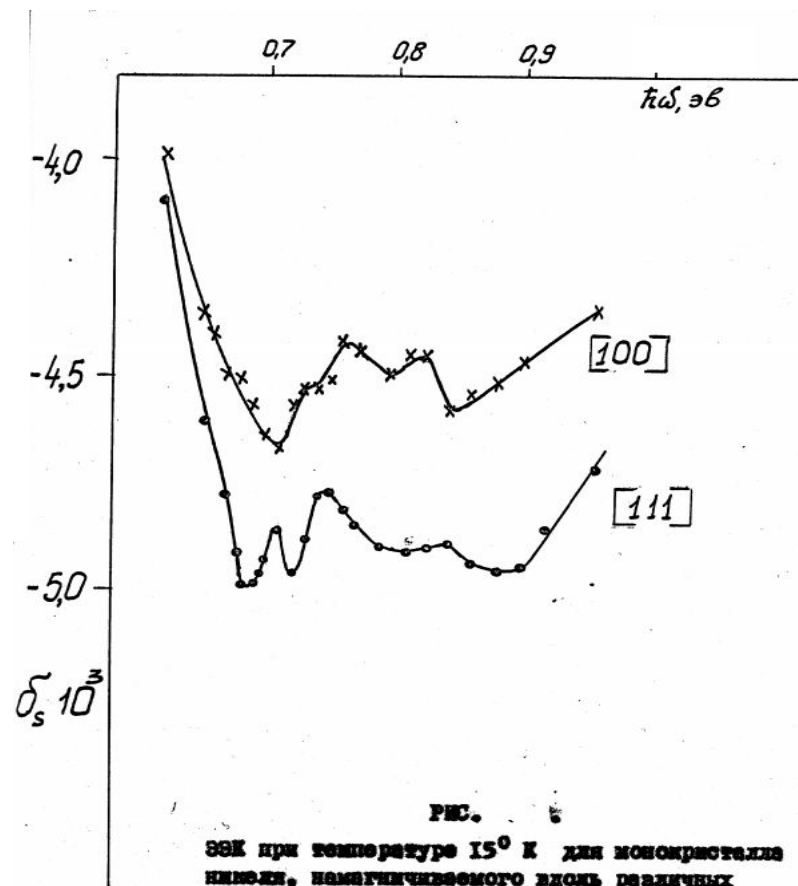


Рис. 5.
ЭЭК при температуре $15^\circ K$ для монокристалла
ниобия, намагничиваемого вдоль различных
кристаллографических осей $\varphi = 70^\circ$.

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ

§ 15. Общие положения квантовой теории твердого тела. Основы квантовой оптики металлов

Так как квантовая оптика металлов опирается на основные понятия квантовой теории твердого тела, то нам прежде всего следует рассмотреть эти представления.

Электроны в металле подчиняются уравнению Шредингера

$$\hat{\mathcal{H}}^0 \psi(\mathbf{r}) = E^0 \psi(\mathbf{r}), \quad (15.1)$$

где $\hat{\mathcal{H}}^0$ определяется по формуле (13.17). Наиболее характерной чертой потенциальной энергии в кристалле является ее симметрия

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U + \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}) = \hat{\mathcal{H}}^0 + \frac{e}{mc} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}). \quad (13.17)$$

той потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ для электрона в кристалле является его симметрия: потенциал электрона должен обладать той же симметрией, что и сам кристалл. В частности, функция $V(\mathbf{r})$ должна быть инвариантной под действием любой трансляции, которая совмещает кристалл сам с собой $V(\mathbf{r} + \mathbf{n}) = V(\mathbf{r})$, где $\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ — есть вектор решетки и $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — основные периоды решетки.

Для того чтобы избежать усложнений, которые возникают при попытке наложить на решения реальные граничные условия, обычно используют так называемый «циклический кристалл». Циклический кристалл есть не что иное, как бесконечный кристалл, разбиваемый на периодически повторяющиеся параллелепипеды с ребрами $G\mathbf{a}_1, G\mathbf{a}_2, G\mathbf{a}_3$. Число G является произвольно большим числом. Такой параллелепипед называется основной областью кристалла. Легко установить, что основная область содержит G^3 единичных ячеек с объемом $(\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])$. Циклические граничные условия требуют, чтобы любые две точки в пространстве, если они отличаются на вектор $G\mathbf{n}$, рассматривались как физически эквивалентные, то есть

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + G\mathbf{n}). \quad (15.2)$$