Спектр изгибных фононов в магнитном поле

И.Д. Петровский

руководитель И.С. Бурмистров

Постановка задачи

* Может ли магнитное поле влиять на фононы в двумерных мембранах, в частности, графене?

* Чем обусловлена возможность такого взаимодействия, если учесть, что фононы не несут электрического заряда?

* В конце прошлого века теоретически была обоснована возможность влияния магнитного поля на фононы в ионных кристаллах, например, в статьях [1], [2]. В частности, было предсказано изменение спектра и смена поляризации на эллиптическую для оптических фононов.

* Данные эффекты, указывающие на взаимодействие фононов и магнитного поля наблюдались, например, в статье [3].

[1] A. Holz, Phonons in a Strong Magnetic Field, Nuov Cim B **9**, 83-95 (1972)
[2] K. Regiński, Phonon Polaritons in the Presence of Magnetic Field, phys. stat. sol. (b) **118**, 587 (1983)
[3] Andrey Baydin et al., Magnetic Control of Soft Chiral Phonons in PbTe, Phys. Rev. Lett. **128**, 075901 (2022)

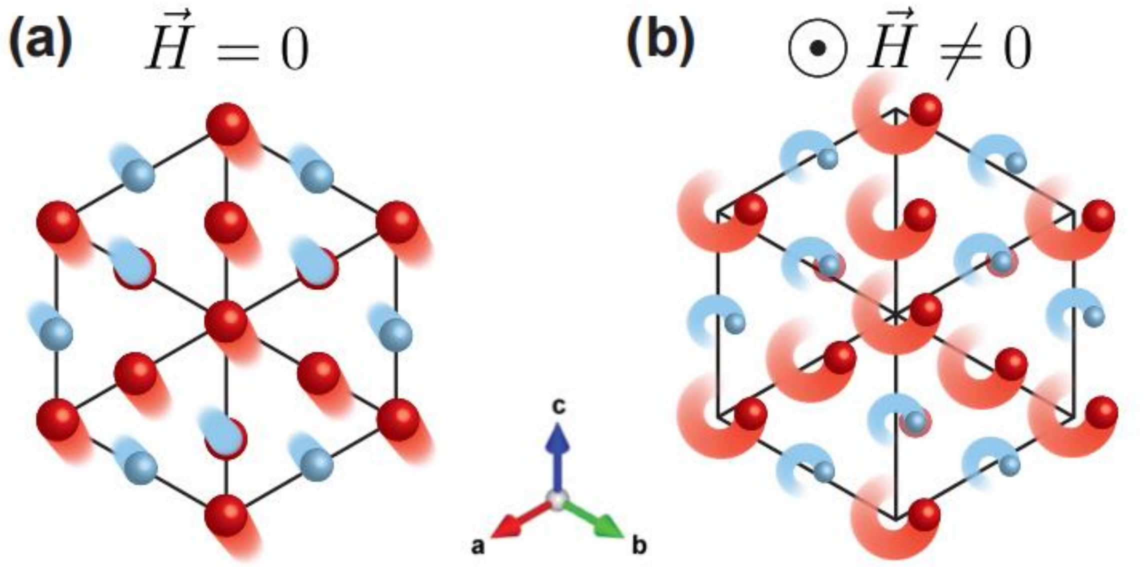
Ионный кристалл в магнитном поле

Взаимодействие ионов с магнитным полем можем описать добавлением к функции Лагранжа члена

$$\delta L = \sum_{\alpha} \sum_{k} Q_\alpha \mathbf{v}(\mathbf{r}_{k\alpha}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{k\alpha})$$

Для постоянного однородного магнитного поля, в симметричной калибровке, можем записать:

$$\mathbf{r}_{k\alpha} = \mathbf{r}_{k\alpha}^{(0)} + \mathbf{u}_{k\alpha}, \qquad \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$$



И в итоге, член, описывающий взаимодействия с магнитным полем примет вид

$$\delta L \sim \sum_{\alpha} \sum_{k} Q_\alpha \mathbf{B} \cdot [\mathbf{u}_{k\alpha} \times \dot{\mathbf{u}}_{k\alpha}] + \ldots$$

``Спин’’ фонона

Используя теорию упругости можем дать иную интерпретацию рассмотренной ``добавки’’ к функции Лагранжа.

Поле вектора деформации $\mathbf{u}(x,\tau)=\mathbf{x}'-\mathbf{x}$ в изотропной среде описывается плотностью Лагранжа

$$\mathscr{L}[u]=\frac{\rho}{2}\dot{u}_i\dot{u}_i-\frac{\lambda}{2}(\partial_i u_i)^2-\frac{\mu}{2}(\partial_i u_k\,\partial_i u_k+\partial_i u_k\,\partial_k u_i)$$

Отметим, что, в силу изотропности среды, данное выражение инвариантно относительно группы SO(3). Согласно теореме Нётер, такой симметрии соответствует первый интеграл - полный момент поля, складывающийся из орбитального и собственного момента (спина). Плотность орбитального момента $\mathbf{l}$ и спина $\mathbf{s}$ поля нетрудно получить явно, что было впервые сделано в статье [4], было получено

$$\mathbf{l}=\rho([\mathbf{x}\times\nabla]\mathbf{u})\cdot\dot{\mathbf{u}} \qquad\qquad \mathbf{s}=\rho\,[\mathbf{u}\times\dot{\mathbf{u}}]$$

Таким образом, полученную ранее ``добавку’’ к функции Лагранжа можно рассматривать как взаимодействие магнитного поля и спина поля вектора деформации

$$\delta\mathscr{L}\sim\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}=\rho\epsilon_{ijk}u_i\dot{u}_jB_k$$

[4] С.В. Вонсовский и М.С. Свирский, О Спине Фононов, Физика Твердого Тела **3**, 2160 (1961).

``Спин'' фонона

Рассмотрим, что произойдет с полем вектора $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ деформации при повороте на угол $\delta\theta$ вокруг оси $\mathbf{n}$
При таком повороте произвольный вектор $\mathbf{v}$ преобразуется следующим образом:

$$\mathbf{v} \quad \rightarrow \quad \mathbf{v} + \delta\theta\,[\mathbf{n}\times\mathbf{v}] = \mathsf{R}\mathbf{v}, \qquad \mathsf{R} = \begin{bmatrix} 1 & -\delta\theta\, n_z & \delta\theta\, n_y \\ \delta\theta\, n_z & 1 & -\delta\theta\, n_x \\ -\delta\theta\, n_y & \delta\theta n_x & 1 \end{bmatrix}$$

Тогда поле $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ преобразуется как

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) \quad \rightarrow \quad \mathsf{R}\mathbf{u}(\mathsf{R}^{-1}\mathbf{x}) \approx \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \delta\theta\,\mathbf{n}\cdot[\mathbf{x}\times\nabla]\mathbf{u}(\mathbf{x}) + \delta\theta[\mathbf{n}\times\mathbf{u}(\mathbf{x})] = \mathbf{u}(\mathbf{x}) + i\delta\theta\,\mathbf{n}\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S})\mathbf{u}(\mathbf{x})$$

При повороте системы координат указанным образом преобразуется поле, а значит преобразуется и плотность Лагранжа:

$$\mathscr{L} \quad \rightarrow \quad \mathscr{L} + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\mathbf{u}}}\,\delta\dot{\mathbf{u}} + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_i\mathbf{u})}\,\delta(\partial_i\mathbf{u})$$

Однако, как было отмечено, плотность Лагранжа должна быть инварианта относительно вращений:

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\mathbf{u}}}\,\delta\dot{\mathbf{u}} + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_i\mathbf{u})}\,\delta(\partial_i\mathbf{u}) = 0$$

Преобразуя данное выражение можем прийти к выражению $\displaystyle \frac{d}{dt}\int d^3x\,(\mathbf{l}+\mathbf{s}) = 0$

Где $\mathbf{l}$ есть плотность орбитального момента поля, а $\mathbf{s}$ плотность спина. Подробнее смотри [5], [6].

[5] С.В. Гупалов, Классические Задачи Теории Упругости и Квантовая Теория Углового Момента, Успехи Физических Наук **190**, 63 (2020).
[6] Jie Ren, From Elastic Spin to Phonon Spin: Symmetry and Fundamental Relations, Chinese Physics Letters **39**, 126301 (2022)

Спектр фононов в присутствии магнитного поля

Исследуем спектр фононов в изотропной среде, с учетом взаимодействия спина и магнитного поля, то есть рассматриваем плотность Лагранжа

$$\boxed{\mathscr{L} = \frac{\rho}{2}\dot{u}_i\dot{u}_i - \frac{\lambda}{2}(\partial_i u_i)^2 - \frac{\mu}{2}(\partial_i u_k\,\partial_i u_k + \partial_i u_k\,\partial_k u_i) - \frac{\gamma}{2}\rho\epsilon_{ijk}u_i\dot{u}_j B_k}$$

Здесь γ есть некоторый феноменологический коэффициент, оценку для которого дадим позднее.

Для определения спектра находим уравнения Эйлера-Лагранжа и выполняем преобразование Фурье. Тогда получим уравнение

$$Q_{ij}\,\hat{u}_j = 0 \qquad \text{где} \qquad Q_{ij} = (\omega^2 + k^2 c_t^2)\delta_{ij} + (c_l^2 - c_t^2)k_i k_j + 2\gamma\omega\epsilon_{ijk}B_k$$

И спектр фононов находим, разрешая относительно $\omega(\mathbf{k})$ уравнение $\det Q = 0$

Данное уравнение можно решить аналитически в следующих случаях:

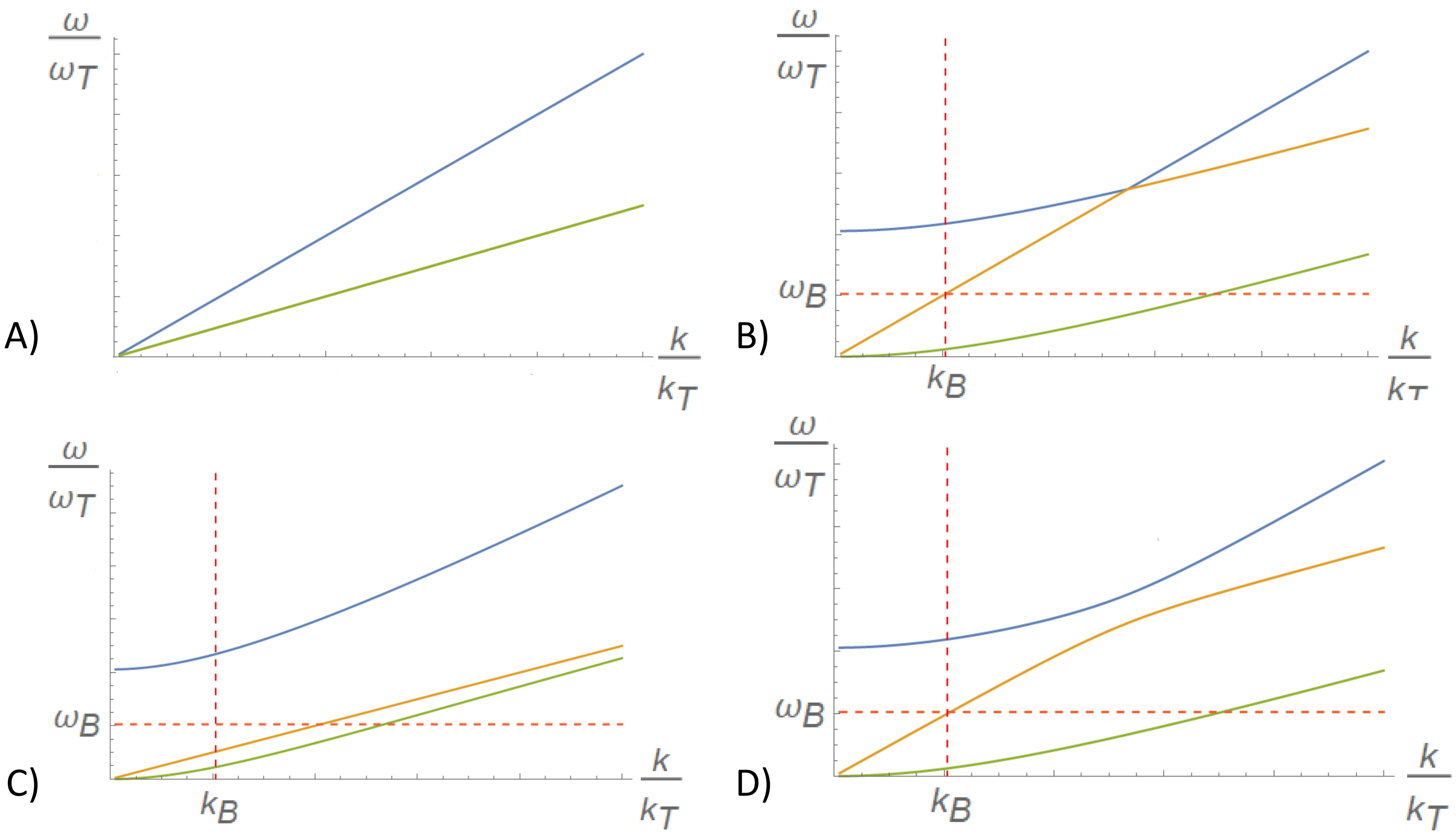
a) Поле B параллельно k: $\omega_1^2 = c_l^2 k^2$ $\qquad \omega_2^2 = 4\gamma^2 B^2 + 2c_t^2 k^2 + O(k^4)$ $\qquad \omega_3^2 = \dfrac{c_t^4}{4\gamma^2 B^2}k^4 + O(k^6)$

b) Поле B ортогонально k: $\omega_1^2 = \dfrac{c_l^2 c_t^2}{4\gamma^2 B^2}k^4 + O(k^6)$ $\qquad \omega_2^2 = c_t^2 k^2$ $\qquad \omega_3^2 = 4\gamma^2 B^2 + (c_t^2 + c_l^2)k^2 + O(k^4)$

Здесь c_l и c_t есть продольные и поперечные скорости звука соответственно. Ветви спектра, изменяющиеся в присутствии магнитного поля, даны в разложении при $k \to 0$

Спектр фононов в присутствии магнитного поля

Построим спектр в рассмотренных случаях получим следующие картинки:



A) Магнитное поле отсутствует

B) B параллельно k

C) B ортогонально k

D) Промежуточный случай

Здесь

$$\omega_T = \frac{k_B T}{\hbar}, \qquad k_T = \frac{\omega_T}{c_l}$$

$$\omega_B = \gamma B, \qquad k_B = \frac{\omega_B}{c_l}$$

$$T = 300\ \text{K}$$

Спектр фононов в графене

Исследуем спектр фононов в графене, с учетом взаимодействия спина и магнитного поля, то есть рассматриваем плотность Лагранжа

$$\boxed{\mathscr{L} = \frac{\rho}{2}\dot{r}_i\dot{r}_i - \frac{\lambda}{2}(\partial_\alpha u_\alpha)^2 - \frac{\mu}{2}(\partial_\alpha u_\beta\,\partial_\alpha u_\beta + \partial_\alpha u_\beta\,\partial_\beta u_\alpha) - \frac{\varkappa}{2}(\partial_{\alpha\alpha}h)^2 - \frac{\gamma}{2}\rho\epsilon_{ijk}r_i\dot{r}_jB_k}$$

$$r_i = (u_1, u_2, h)$$
$$i, j, k = 1, 2, 3$$
$$\alpha, \beta = 1, 2$$

Для определения спектра находим уравнения Эйлера-Лагранжа и выполняем преобразование Фурье. Тогда получим уравнение

$$Q_{ij}\,\hat{r}_j = 0$$

где

$$Q_{ij} = (\omega^2 + k^2c_t^2)\delta_{\alpha\beta} + (c_l^2 - c_t^2)k_\alpha k_\beta + \left(\omega^2 + \frac{\varkappa}{\rho}k^4\right)\delta_{3i}\delta_{3j} + 2\gamma\omega\epsilon_{ijk}B_k$$

И спектр фононов находим, разрешая относительно $\omega(\mathbf{k})$ уравнение $\det Q = 0$

Данное уравнение можно решить аналитически в трех следующих случаях:

a) Поле B нормально к мембране: $\omega_1^2 = 4\gamma^2B^2 + (c_l^2 + c_t^2)k^2 + O(k^4)$ $\quad \omega_2^2 = \frac{c_l^2c_t^2}{4\gamma^2B^2}k^4 + O(k^6)$ $\quad \omega_3^2 = \frac{\varkappa}{\rho}k^4$

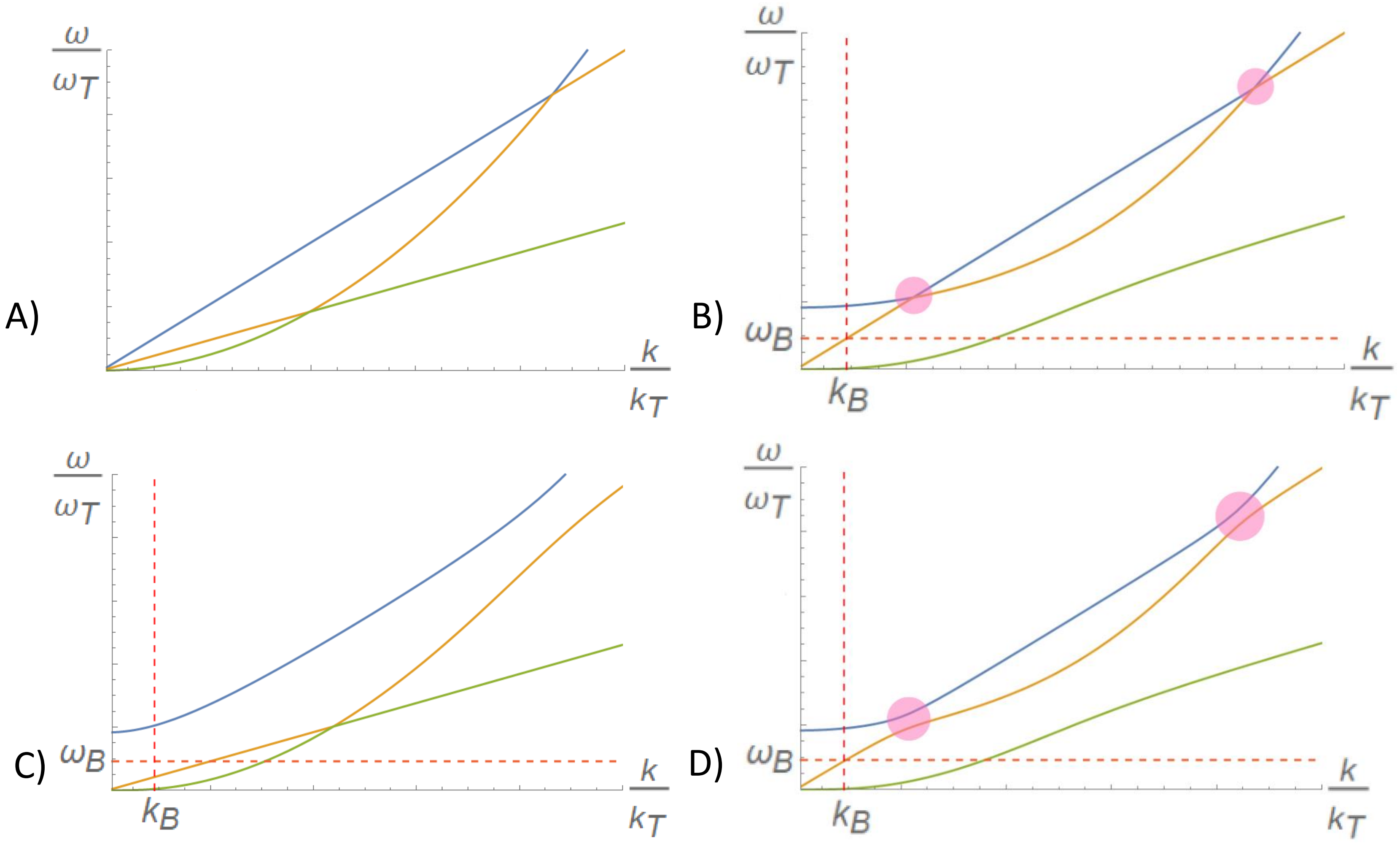
b) Поле B в плоскости, параллельно k: $\omega_1^2 = 4\gamma^2B^2 + c_l^2k^2 + O(k^4)$ $\quad \omega_2^2 = c_t^2k^2$ $\quad \omega_3^2 = \frac{\varkappa c_l^2}{4\rho\gamma^2B^2}k^6 + O(k^8)$

c) Поле B в плоскости, ортогонально k: $\omega_1^2 = c_l^2k^2$ $\quad \omega_2^2 = 4\gamma^2B^2 + c_t^2k^2 + O(k^4)$ $\quad \omega_3^2 = \frac{\varkappa c_t^2}{4\rho\gamma^2B^2}k^6 + O(k^8)$

Здесь c_l и c_t есть продольные и поперечные скорости звука соответственно. Ветви спектра изменяющиеся в присутствии магнитного поля даны в разложении при $k \to 0$

Спектр фононов в графене

Построим спектр для случая когда поле лежит в плоскости мембраны.



A) Поле B остутствует

B) Поле B параллельно k

C) Поле B ортогонально k

D) Поле B под углом к k

Здесь

$$\omega_T = \frac{k_B T}{\hbar}, \qquad k_T = \frac{\omega_T}{c_l}$$

$$\omega_B = \gamma B, \qquad k_B = \frac{\omega_B}{c_l}$$

$$T = 300\ \mathrm{K}$$

Графен. Оценка масштабов

* Характерная частота γB ``конкурирует'' с частотой ck
* Для мембраны характерным размером L имеем $\frac{1}{L} \lesssim k$

С учетом этого оценим размер мембраны L_B для которой существенным окажется поле $B = 1\ \mathrm{T}$

для этого хотим удовлетворить равенству

$$\hbar \frac{c}{L_B} \sim \gamma B$$

Предполагаем, что γ есть величина порядка магнетона Бора, с той лишь разницей, что массу электрона заменяем на массу атома углерода

$$\gamma \sim \mu_B \frac{m_e}{M} \quad \Longrightarrow \quad L_B \sim \frac{Mc\hbar}{\mu_B m_e B}$$

$$M = 12\ \mathrm{u} \approx 2 \times 10^{-26}\ \mathrm{kg}, \qquad m_e \approx 9 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$$

$$c_t \approx 1.3 \times 10^4\ \mathrm{m/s}, \qquad c_l \approx 2 \times 10^4\ \mathrm{m/s} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{L_B \sim 3\ \mathrm{mm}}$$

$$\hbar \approx 1 \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}, \qquad \mu_B \approx 9 \times 10^{-24}\ \mathrm{J/T}$$

Отметим, что здесь мы привели оценку сверху для γ . Вообще говоря, в силу экранирования ядра электронами, γ может стать меньше, а L_B соответственно больше.

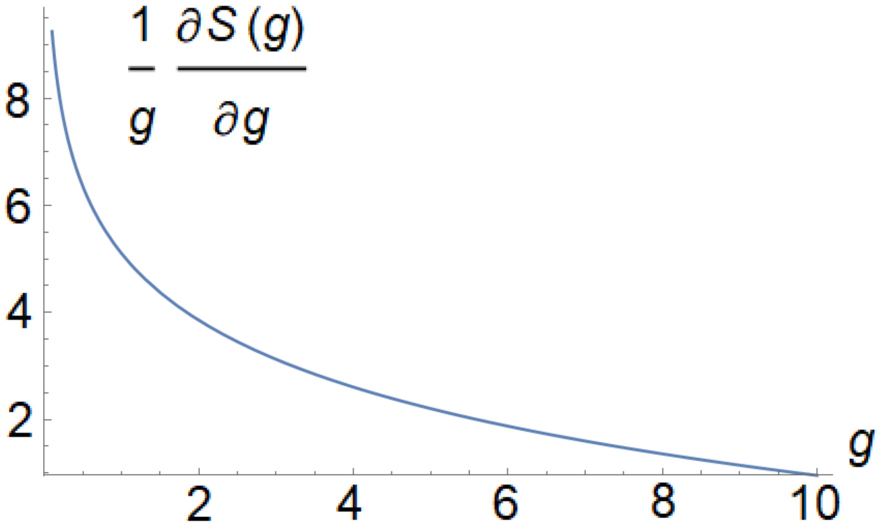
Следствия изменения спектра фононов

Если при температуре 0 К мембрана имеет некоторую площадь S, то при ненулевой температуре в следствии тепловых колебаний площадь мембраны становится $\xi^2 S$.

Причем имеем $\xi^2 = 1 - \frac{\langle \partial_\alpha r_i \, \partial_\alpha r_i \rangle}{2}$

В следствии изменения спектра фононов в присутствии магнитного поля мы можем ожидать изменение тепловых колебаний и соответственно изменение параметра ξ^2 . Рассчеты показывают, что

$$\delta\xi^2 = \frac{B^2\gamma^2}{(4\pi)^3 T\varkappa}\left[\frac{1}{g_t}\frac{\partial S(g_t)}{\partial g_t} + \{g_t \to g_l\}\right] \qquad S(g) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \frac{\pi\frac{g}{n} + 2\ln\left(\frac{n}{g}\right)}{1 + \frac{n^2}{g^2}}$$



Здесь $g_\# = \frac{c_\#^2(\hbar)}{2\pi T(k_B)}\sqrt{\frac{\rho}{\varkappa}}$ есть пара безразмерных параметров, которые для графена при $T = 300\ \mathrm{K}$ порядка 1:

$$g_t \approx 1, \qquad g_l \approx 3$$

Из графика видно, что для интересующего нас диапазона функция $S(g)$ возрастающая, а значит мембрана в присутствии магнитного поля должна растягиваться.

Выводы

* Предполагается, что в общем случае магнитное поле может взаимодействовать с фононами, и это может быть описано как взаимодействие магнитного поля со спином фононов.

* Ожидается, что для пленок размером порядка 100 мкм эффекты такого взаимодействия станут наблюдаемы в полях с индукцией выше 30 Т.

* В присутствие магнитного поля ожидается снижение тепловых колебаний и, как следствие, растяжение мембран из графена.