从古典海森堡模型到螺旋磁性

Yan Zha (查言)

2024.10.17

1 磁性材料的种类

物质可以大致分为显示磁性的物质和不显示磁性的物质。显示磁性的物质称为**磁性材料**，而不显示磁性的物质称为**非磁性材料**。磁性材料在升高温度时也会发生相变，转变为无磁性的状态（**顺磁性状态**）。

1.1 磁铁:强磁性(又称铁磁性)与亚铁磁性

在磁铁的情况下，磁性的来源是微观磁铁——**磁矩**的排列，当磁矩沿一个方向排列时，磁性就会显现出来。每个磁矩的大小虽然很小，但当磁矩朝同一方向整齐排列时，整体表现出大的磁矩，这种物质被称为**强磁性材料**。此时，磁矩的总和称为**磁化**。

强磁性材料的磁化曲线如图1所示。 即使在没有外部磁场的情况下，物质也可以具有非零的磁化，你可以绘制出依赖

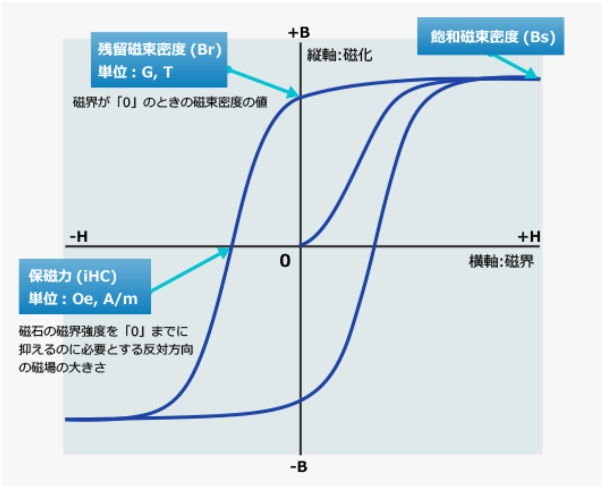

Figure 1: 强磁性材料的磁化曲线。

于过去磁化状态的曲线（磁滞现象）。图1中的**剩磁密度（剩余磁化）**和**矫顽力**是表征磁铁性能的重要参数。

在低磁场区域，**磁畴**[1]的形成会导致磁化的减少[2]。 在高磁场区域，当所有磁矩都朝向磁场方向时，磁化达到饱和状态（**饱和磁化**）。此外，将高磁场区域磁化曲线的微小斜率外推到零磁场时的磁化强度称为**自发磁化**。

某些磁铁也属于**亚铁磁性材料**。亚铁磁性是指，当物质中存在两种磁性原子/离子时，A类磁矩与B类磁矩大小不同且方向相反排列，这种情况下会出现铁磁性。虽然A类和B类磁矩相互抵消，但由于磁矩的大小不同，其差值表现为宏观磁化。亚铁磁性材料的磁化曲线与强磁性材料的磁化曲线非常相似(图3)。

1.2 反磁性

如同在亚铁磁性中看到的那样，除了磁矩相互平行排列的情况外，还存在相互反平行（即相反方向）排列的情况。在由一种原子或离子组成的磁性材料中，邻近的磁矩分别指向相反的方向排列，整个物质不表现出磁化，这种磁性被称为**反铁磁性**。在过渡金属氧化物中，反铁磁性材料有许多实例。

反铁磁性材料的磁化过程在低磁场区域表现为相对于磁场线性增加（线性响应）。当施加弱磁场时，反平行排列的磁矩会逐渐向磁场方向倾斜，但由于无法完全向磁场方向倾斜，因而只表现出微弱的磁化；而在强磁场下，磁矩可能会集体发生90度的旋转，试图向磁场方向倾斜（**自旋翻转转变**）。

[1]磁畴其实是一种拓扑孤子。孤子作为波包广泛存在于自然界中，例如潮汐波或台风。当它通过非线性弥散介质时，其形状和速度不会改变（Menzel 2011）。在数学中，孤子是非线性偏微分方程的解，例如Landau–Lifshitz方程和Yang–Mills方程。具有拓扑保护的孤子不能衰变为平庸解，这意味着拓扑保护解与平庸解不等价。在材料中存在许多拓扑孤子（Menzel 2011），例如晶体中的螺旋位错，铁磁体中的畴壁，以及其他自旋结构如涡旋、meron、气泡和斯格明子。对拓扑孤子的操控可能会带来磁存储和自旋电子学中的应用（Parkin et al. 2008; Pfleiderer and Rosch 2010; Jung et al. 2011; Zhang et al. 2015）。

[2]特别是对于铁这种物质，由于磁畴的存在一般情况下不表现出磁性。一旦施加外部磁场，则会显现磁性并且可以保持很长一段时间。所以说铁本质上和磁石是同一种磁性，即“强磁性”。

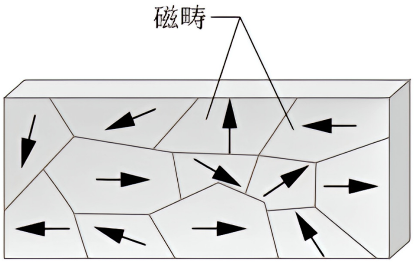

Figure 2: 磁畴。

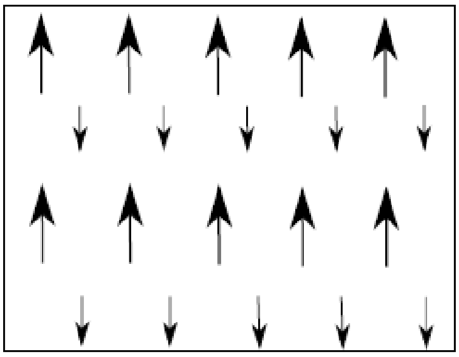

Figure 3: 亚铁磁性的示意图。

当用 Hamiltonian 来表示如上述那样平行或反平行排列的磁矩之间的相互作用时，可以用以下形式的矢量内积来表示（**交换相互作用**）：

$$\mathcal{H} = J\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$分别表示相邻的自旋。在过渡金属中，自旋是磁矩的主要来源。从内积形式可以看出，当$J < 0$时，相邻自旋平行排列时能量最低（强磁性），而在反铁磁性或铁磁性中，$J > 0$时，相邻自旋反平行排列（即相反方向）是稳定状态。

1.3 螺旋磁性 (Helical/Spiral magnetism)

磁矩不仅仅沿同一轴方向平行或反平行排列，还可以呈现螺旋状的有序结构（**螺旋磁性**）。这种磁有序与强磁性或反磁性等共线磁排列相比，被称为非共线磁排列。

螺旋磁性主要有两个已知起源。其一是**挫折机制**。例如，当最近邻的磁矩之间存在反铁磁性交互作用（对于最近邻，即使是强磁性交互作用也可以），并且次近邻磁矩之间也存在反铁磁性交互作用时，就会出现螺旋磁性。此外，即使只考虑最近邻的交互作用，也可能会产生**几何挫折机制**。 例如，如图4所示，当磁矩排列在三角晶格中并假设它们之

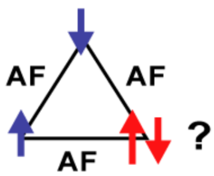

Figure 4: 在三角形上的自旋，由于反铁磁性交互作用，会产生几何挫折。

间存在反铁磁性交互作用时，无法形成理想的反铁磁性排列，而可能会出现倾斜的磁排列（120度）。这是因为当图4中三角形的两个顶点的自旋形成反铁磁性排列时，剩下的一个自旋必然会与其中一个自旋呈现强磁性排列。为了避免因强磁性排列带来的能量损失，螺旋磁结构可能作为一种折衷方案出现。接下来，我们将解释由挫折机制引起的螺旋磁性。

1.3.1 经典Heisenberg模型

在解释螺旋磁性之前，先介绍在螺旋磁性推导过程中使用的经典Heisenberg模型。经典Heisenberg模型的形式化定义如

下:在d维格子上，每个格点上配置一个具有x，y，z三个分量且长度为1的自旋向量[3]

$$\boldsymbol{S}_i \in \mathbb{R}^3,\ |\boldsymbol{S}_i| = 1 \tag{2}$$

这个系统的Hamiltonian定义如下:

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -2\sum_{\langle i,j\rangle} \mathcal{J}_{ij}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j \tag{3}$$

其中，耦合系数$\mathcal{J}_{ij}$为

$$\mathcal{J}_{ij} = \begin{cases} J & \text{如果 } i,j \text{ 是相邻点} \\ 0 & \text{其他情况} \end{cases} \tag{4}$$

这是自旋之间的耦合系数。如果第i个和第j个自旋是相邻的，则$\mathcal{J}_{ij}$取值为J，否则取值为0。

1.3.2 前提知识:Fourier变换时Fourier系数需满足的条件:$n_{-p}^* = n_p$的证明

首先我们考虑一个在方向x上周期为a的一维函数$n(x)$。我们将$n(x)$展开为正弦和余弦形式的Fourier级数:

$$n(x) = n_0 + \sum_{k>0}^{\infty}\left[C_k\cos kx + S_k\sin kx\right] \tag{5}$$

对于周期性条件$n(x) = n(x+a)$，

$$\begin{aligned} n(x+a) &= n_0 + \sum_{k>0}^{\infty}\left[C_k\cos k\left(x+a\right) + S_k\sin k\left(x+a\right)\right] \\ &= n_0 + \sum_{k>0}^{\infty}\left[C_k\cos kx\cos ka - C_k\sin kx\sin ka + S_k\sin kx\cos ka + S_k\sin ka\cos kx\right] \\ &= n(x) \end{aligned} \tag{6}$$

我们得到

$$\begin{aligned} &C_k\cos k\left(x+a\right) + S_k\sin k\left(x+a\right) \\ &= C_k\cos kx\cos ka - C_k\sin kx\sin ka + S_k\sin kx\cos ka + S_k\sin ka\cos kx \end{aligned} \tag{7}$$

因为a表示一个周期，因此显然$\cos ka = 1$且$\sin ka = 0$。这导致了条件:

$$ka = 2\pi p \Rightarrow k = \frac{2\pi p}{a} \tag{8}$$

其中p为代表周期指数(periodic index)的正整数。

我们将Fourier级数Eq.(5)重写，并不要忘记周期性条件:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0}^{\infty}\left[C_p\cos\frac{2\pi p}{a}x + S_p\sin\frac{2\pi p}{a}x\right] \tag{9}$$

其中C_p和S_p是实常数，称为展开的**Fourier系数**。参数$2\pi/a$确保了$n(x)$的周期为a。

我们称$2p\pi/a$为Fourier空间中晶体的倒格子点。在一维中，这些点位于一条线上。倒易格子点告诉我们Fourier级数中允许的项。如果一个项与晶体的周期性一致，它就是允许的，如图5所示；倒易空间中的其他点不允许出现在周期函数的Fourier展开中。

由于a表示一个周期，因此将Eq.(9)表达得更加紧凑为:

$$n(x) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} n_p\exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right) \tag{10}$$

其中求和范围涵盖所有整数p（正的，负的和零）。系数n_p是复数。为了确保$n(x)$是实函数，我们需要条件:

$$n_{-p}^* = n_p \tag{11}$$

其中星号表示n_{-p}的共轭复数。这确保了对应于p和$-p$的项之和为实数。

接下来我们将证明Eq.(11)。

如果Eq.(11)成立，Eq.(10)中p和$-p$的项之和将为实数。具体来说，这些项的和为:

$$n_p\exp(i\phi) + n_{-p}\exp(-i\phi) = \text{Real number} \tag{12}$$

[3]然而，在$4f$电子体系中，角动量算符由轨道和自旋角动量之和$\boldsymbol{J}$表示，向量的大小有时可能大于1。

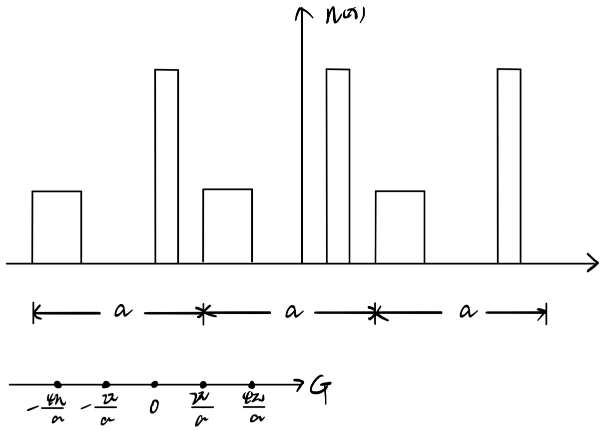

Figure 5: 周期函数$n(x)$的周期为a，在Fourier变换中可能出现的项$2\pi p/a$。$n(x)=\sum_{n_p}\exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right)$。

其中$\phi=\frac{2\pi p}{a}x$。 现在我们将n_p，n_{-p}，n_p^*和n_{-p}^*展开为:

$$\begin{aligned} n_p &= n_{pr}+in_{p_i}, \quad n_{-p}=n_{-pr}+in_{-p_i} \\ n_p^* &= n_{pr}-in_{p_i}, \quad n_{-p}^*=n_{-pr}-in_{-p_i} \end{aligned} \tag{13}$$

类似地，我们可以将$\exp\left(i\frac{2\pi p}{a}x\right)$展开为$\cos\left(\frac{2\pi p}{a}x\right)+i\sin\left(\frac{2\pi p}{a}x\right)$。因此，Eq.(12)的左侧变为:

$$\begin{aligned} &\left(n_{pr}+in_{p_i}\right)(\cos\phi+i\sin\phi)+\left(n_{-pr}+in_{-p_i}\right)(\cos\phi-i\sin\phi)= \\ &\left(n_{pr}+n_{-p_r}\right)\cos\phi-\left(n_{pi}-n_{-pi}\right)\sin\phi+i\left[\left(n_{pi}+n_{-p_i}\right)\cos\phi+\left(n_{pr}-n_{-p_r}\right)\sin\phi\right] \end{aligned} \tag{14}$$

由于$n(x)$必须是实函数，表达式中的虚部必须为零。对于任意p，这个条件必须成立，意味着Eq.(14)中$\sin(\phi)$和$\cos(\phi)$的系数必须为零。因此，为了确保$n(x)$是实数，条件为:

$$\begin{cases} n_{pr}=n_{-pr} \\ n_{pi}=-n_{-pi} \end{cases} \tag{15}$$

这些是确保$n(x)$为实函数的必要条件。

1.3.3 最低能量(基态)下的自旋排列的确定

求解经典Heisenberg模型Hamiltonian的特征值和特征函数通常是很难做到的，因为这是一个多体问题。即便只讨论基态问题，除非$\mathcal{J}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)$在所有情况下都为正，否则问题也会变得非常困难。因此，我们假设$\boldsymbol{S}_i$是一个经典向量。在这种情况下，基态就是能使式(3)中的能量最小的向量取向。在三维情况下，自旋的有序排列几乎不受量子效应的影响。

为了简化讨论，我们考虑自旋$\boldsymbol{S}$所在的晶格点构成了一个Bravais格子[4]。即，单位胞包含一个磁性离子(自旋)。另外，交换积分[5]只依赖于格子的相对位置，因此

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)=\mathcal{J}(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i) \tag{16}$$

满足这个偶函数关系。

为了使讨论更清晰，我们首先考虑$\boldsymbol{S}_i$的Fourier变换:

$$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i \boldsymbol{S}_i\exp\left(-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right) \tag{17}$$

其中，$\boldsymbol{r}_i$可以用基本平移向量$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$表示为:

$$\boldsymbol{r}_i=n_{1i}\boldsymbol{a}_1+n_{2i}\boldsymbol{a}_2+n_{3i}\boldsymbol{a}_3 \tag{18}$$

同时，与$\boldsymbol{a}$存在

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi\left(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3\right)}{\boldsymbol{a}_1\cdot\left(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3\right)},\quad \boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi\left(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1\right)}{\boldsymbol{a}_1\cdot\left(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3\right)},\quad \boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi\left(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2\right)}{\boldsymbol{a}_1\cdot\left(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3\right)} \tag{19}$$

关系的向量$\boldsymbol{b}$来表示的

$$\boldsymbol{K}_i=n_{1i}\boldsymbol{b}_1+n_{2i}\boldsymbol{b}_2+n_{3i}\boldsymbol{b}_3 \tag{20}$$

[4]当只包含一个原子时，自然地将该原子置于格点并以其为中心，这样的格子被称为**布拉菲格子(Bravais格子)**。

[5]交换积分$\mathcal{J}$可能难以直观理解，但可以看作电子1在位置$\boldsymbol{r}_1$的轨道ϕ_a与ϕ_b的重叠电荷密度$\rho_{ab}(\boldsymbol{r}_1)$与电子2在位置$\boldsymbol{r}_2$的重叠电荷密度$\rho_{ba}(\boldsymbol{r}_2)$之间的相互作用。

叫做**倒格子矢量**，倒格子矢量所结成的空间叫做**倒格子(空间)**。 以$\boldsymbol{b}$为基矢来表示$\boldsymbol{q}$:

$$\boldsymbol{q} = q_1\boldsymbol{b}_1 + q_2\boldsymbol{b}_2 + q_3\boldsymbol{b}_3 \tag{21}$$

这里q_n的值由周期性边界条件给出[6]:

$$q_n = \frac{n_n}{N_n} \quad (n_n = \text{integer}) \tag{22}$$

N_n为基本平移向量$\boldsymbol{a}_n$方向上的单位胞数，所有格点的总数N为N_1，N_2和N_3的乘积。

由于$\boldsymbol{S}_i$是实数，因此$\boldsymbol{q}$满足:

$$\boldsymbol{S}^*_{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}},\ \boldsymbol{S}^*_{-\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}} \tag{23}$$

这一点已在前一节的式(5)到(15)中证明。

通过逆Fourier变换，自旋向量$\boldsymbol{S}_i$可以表示为:

$$\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}} \exp\left(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right) \tag{24}$$

其中，对q_1，q_2和q_3的求和在第一Brillouin区内进行。

将式(24)代入式(3)，可以将经典Heisenberg模型的Hamiltonian用波矢量$\boldsymbol{q}$表示。详细计算如下[7]:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} \\
&= -2\sum_{\langle i,j\rangle} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j \\
&= -2\sum_{\langle i,j\rangle} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\left\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\exp\left(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)\right\}\cdot\left\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left(i\boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_j\right)\right\} \\
&= -\cancel{2}\frac{1}{\cancel{2}}\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}\sum_{\boldsymbol{r}_i} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_j\right)\right]\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}\sum_{\boldsymbol{r}_i} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_j\right)\right]\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}\sum_{\boldsymbol{r}_i} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q} + \boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\exp\left[i\boldsymbol{q}'\cdot\left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right)\right]\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\boldsymbol{q}'\cdot\left(\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i\right)\right]\sum_{\boldsymbol{r}_i}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q} + \boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\right\}
\end{aligned} \tag{25}$$

作为Delta函数δ的Fourier变换，有

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{r}_i}\exp\left(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right) = \delta(\boldsymbol{q}),\ \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}}\exp\left(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right) = \delta\left(\boldsymbol{r}_i\right) \tag{26}$$

[6]请注意，下标的n与基本平移矢量中的单位矢量的系数的n的含义不同。前者表示方向，例如作为下标的$n=1$时表示1号方向，或者用更通俗易懂的说法，x方向。所以作为下标的n可以取的最大值为空间的次元数；而后者表示基本平移矢量的系数，表示在某方向上移动几个单位矢量。

[7]关于式(25)等式最右边的部分，可能有人会想“把对i的求和$\sum_{\boldsymbol{r}_i}$拿到最后面真的没关系吗？”，实际上$\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i$表示的是相对的位置，对于绝对的位置$\boldsymbol{r}_i$没有影响。

这样的关系存在，带入上式的波浪线部分($\underset{\sim\sim\sim}{\sum_{\boldsymbol{r}_i} \exp\left[i\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]}$)，可得

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} &= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\frac{1}{\cancel{N}}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\boldsymbol{q}'\cdot(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i)\right]\cancel{N}\underset{\sim}{\delta\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)}\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\sum_{\boldsymbol{q}}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}'} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\boldsymbol{q}'\cdot(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i)\right]\delta\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}}\exp\left[-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_i)\right] \\
&= -\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}}\exp\left[i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\right] \\
&= -\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}}\left\{\sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}\mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\exp\left[i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\right]\right\} \\
&= -\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}}\mathcal{J}(\boldsymbol{q}) \\
&= -\sum_{\boldsymbol{q}} \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}^{*}\mathcal{J}(\boldsymbol{q})
\end{aligned} \tag{27}$$

其中，$\mathcal{J}\left(\boldsymbol{q}\right)$定义为相互作用的Fourier展开:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j} \mathcal{J}_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\exp\left[i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\right] = \mathcal{J}(-\boldsymbol{q}) = \mathcal{J}(\boldsymbol{q})^{*} \tag{28}$$

它是一个实数量。

1.3.4 螺旋排列的出现条件

设$\mathcal{J}\left(\boldsymbol{q}\right)$的最大值为$\mathcal{J}\left(\boldsymbol{Q}\right)$，根据式(28)，$\boldsymbol{Q}$可以从理论上确定。假设自旋$\boldsymbol{S}_i$的大小为$S$，则其平方为

$$\begin{aligned}
S^2 &= \boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_i \\
&= \left\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\exp\left(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)\right\}\cdot\left\{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left(i\boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{r}_i\right)\right\} \\
&= \frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\right\}
\end{aligned} \tag{29}$$

我们将对i进行求和，并使用Delta函数来处理这一式子:

$$\sum_{i}^{N} S^2 = \sum_{i}^{N}\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\right\} \tag{30}$$

化简后得到:

$$NS^2 = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\underset{\sim\sim\sim}{\left\{\sum_{i}^{N}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\right\}} \tag{31}$$

使用Delta函数的关系(式(26))，可以简化为:

$$\begin{aligned}
NS^2 &= \frac{1}{\cancel{N}}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}'}\cancel{N}\delta\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right) \\
&= \sum_{\boldsymbol{q}}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{-\boldsymbol{q}} \\
&= \sum_{\boldsymbol{q}}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}\cdot\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{q}}^{*}
\end{aligned} \tag{32}$$

根据Heisenberg模型的对称性，$\mathcal{J}(\boldsymbol{q})$是波矢$\boldsymbol{q}$的偶函数(式(28))。假设$\mathcal{J}(\boldsymbol{q})$在$\pm\boldsymbol{Q}$处取得极大值[8]，我们仅考虑单一波矢(Single-$\boldsymbol{Q}$)，即$\boldsymbol{S_Q}$和$\boldsymbol{S_{-Q}}$以外的$\boldsymbol{S_q}$皆为零[9]，展开式(32)并化简:

$$S^2=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{q}}\boldsymbol{S_q}\cdot\boldsymbol{S_{-q}}=\frac{1}{N}\left(\boldsymbol{S_{-Q}}\cdot\boldsymbol{S_Q}+\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\right)=\frac{2}{N}\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}} \tag{33}$$

把这个结果带入式(29)的左侧，则有

$$\begin{aligned}\frac{2}{N}\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}&=\frac{1}{N}\left\{\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\boldsymbol{S_q}\cdot\boldsymbol{S_{q'}}\exp\left[i\left(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\right\}\\&=\frac{1}{N}\left\{\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_Q}\exp\left[2i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]+\boldsymbol{S_{-Q}}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\exp\left[-2i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]+2\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\right\}\end{aligned} \tag{34}$$

通过消去$(2/N)\,\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}$，我们得到:

$$\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_Q}\exp\left[2i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]+\boldsymbol{S_{-Q}}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\exp\left[-2i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]=0 \tag{35}$$

由于指数项exp不为零，所以有:

$$\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_Q}=\boldsymbol{S_{-Q}}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}=0 \tag{36}$$

式(36)对于任何$\boldsymbol{r}_i$都成立。

现在我们引入实数矢量$\boldsymbol{R_Q}$，$\boldsymbol{I_Q}$($\boldsymbol{S_Q}$的实部和虚部)，将$\boldsymbol{S_Q}$用$\boldsymbol{R_Q}$，$\boldsymbol{I_Q}$来表示:

$$\begin{cases}\boldsymbol{S_Q}=\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\\\boldsymbol{S_{-Q}}=\boldsymbol{R_Q}-i\boldsymbol{I_Q}\end{cases} \tag{37}$$

然后将以$\boldsymbol{R_Q}$，$\boldsymbol{I_Q}$来表示的$\boldsymbol{S_Q}$带回式(36)，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_Q}&=\left(\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\right)\cdot\left(\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\right)\\&={\color{blue}\boldsymbol{R_Q}\cdot\boldsymbol{R_Q}-\boldsymbol{I_Q}\cdot\boldsymbol{I_Q}}+i{\color{red}2\boldsymbol{R_Q}\cdot\boldsymbol{I_Q}}\\&={\color{blue}\left|\boldsymbol{R_Q}\right|^2-\left|\boldsymbol{I_Q}\right|^2}+i{\color{red}2\boldsymbol{R_Q}\cdot\boldsymbol{I_Q}}\\&=0\end{aligned} \tag{38}$$

由于$\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_Q}$必须满足实部和虚部同时等于0这个条件，可得:

$$\begin{cases}\left|\boldsymbol{R_Q}\right|^2-\left|\boldsymbol{I_Q}\right|^2=0\\2\boldsymbol{R_Q}\cdot\boldsymbol{I_Q}=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\left|\boldsymbol{R_Q}\right|^2=\left|\boldsymbol{I_Q}\right|^2 & \text{实部与虚部的长度(大小)相等}\\\boldsymbol{R_Q}\perp\boldsymbol{I_Q} & \boldsymbol{R_Q}\text{与}\boldsymbol{I_Q}\text{相互垂直}\end{cases} \tag{39}$$

将这两个条件代回式(33)的等号最右边，得到:

$$S^2=\frac{2}{N}\left(\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\right)\cdot\left(\boldsymbol{R_Q}-i\boldsymbol{I_Q}\right)=\frac{4}{N}\left|\boldsymbol{R_Q}\right|^2=\frac{4}{N}\left|\boldsymbol{I_Q}\right|^2 \tag{40}$$

$$\left|\boldsymbol{R_Q}\right|^2=\left|\boldsymbol{I_Q}\right|^2=\frac{1}{4}NS^2 \tag{41}$$

所以，系统的最低能量为:

$$\begin{aligned}E_{\min}&=-\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\mathcal{J}(\boldsymbol{Q})-\boldsymbol{S_{-Q}}\cdot\boldsymbol{S_Q}\mathcal{J}(-\boldsymbol{Q})\\&=-2\boldsymbol{S_Q}\cdot\boldsymbol{S_{-Q}}\mathcal{J}(\boldsymbol{Q})\\&=-2\left(\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\right)\cdot\left(\boldsymbol{R_Q}-i\boldsymbol{I_Q}\right)\mathcal{J}(\boldsymbol{Q})\\&=-2\frac{2}{4}NS^2\mathcal{J}(\boldsymbol{Q})\\&=-NS^2\mathcal{J}(\boldsymbol{Q})\end{aligned} \tag{42}$$

最后，我们可以利用波矢$\boldsymbol{S_Q}$表达实空间中的自旋矢量$\boldsymbol{S}_i$。利用“$\boldsymbol{S_Q}$与$\boldsymbol{S_{-Q}}$之外的$\boldsymbol{S_q}$全部为0”这一条件，将$\boldsymbol{S_Q}$和$\boldsymbol{S_{-Q}}$的实部和虚部代入$\boldsymbol{S}_i$のFourier变换(式(17))，并且将含有虚数单位i的指数函数展开为sin与cos的函数:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_i&=\frac{1}{\sqrt{N}}\left[\boldsymbol{S_Q}\exp\left(i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)+\boldsymbol{S_{-Q}}\exp\left(-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{N}}\left[\left(\boldsymbol{R_Q}+i\boldsymbol{I_Q}\right)\left(\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i+i\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)+\left(\boldsymbol{R_Q}-i\boldsymbol{I_Q}\right)\left(\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i-i\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right)\right]\\&=\frac{2}{\sqrt{N}}\left[\boldsymbol{R_Q}\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{I_Q}\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\end{aligned} \tag{43}$$

---

[8]即:在有限的距离内具有一个重复的构造。

[9]对于强磁性($\boldsymbol{Q}=0$)和反强磁性($\boldsymbol{Q}=$第一Brillouin区的边界)的情况不做考虑，因为我们要求的是螺旋磁性。毫无疑问，强磁性和反强磁性的解答也是函数的极值。

利用$|\boldsymbol{R_Q}|^2 = |\boldsymbol{I_Q}|^2 = \frac{1}{4}NS^2$(式(41))，将$\boldsymbol{R_Q}$，$\boldsymbol{I_Q}$进行归一化，则有:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_i &= \frac{2}{\sqrt{N}}|\boldsymbol{R_Q}|\left[\frac{\boldsymbol{R_Q}}{|\boldsymbol{R_Q}|}\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i - \frac{\boldsymbol{I_Q}}{|\boldsymbol{I_Q}|}\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right] \\ &= \frac{2}{\sqrt{N}}\frac{1}{2}\sqrt{N}S\left[\boldsymbol{R}\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{I}\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right] \\ &= S\left[\boldsymbol{R}\cos\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{I}\sin\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i\right]\end{aligned} \tag{44}$$

此处的$\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{I}$满足

$$\begin{cases}\boldsymbol{R} = \frac{\boldsymbol{R_Q}}{|\boldsymbol{R_Q}|} \\ \boldsymbol{I} = \frac{\boldsymbol{I_Q}}{|\boldsymbol{I_Q}|}\end{cases} \tag{45}$$

，其中，$\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{I}$是相互垂直且长度为1的单位向量。取$\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{I}$所在平面为xy平面，与其垂直的轴为z轴，则得到:

$$\begin{aligned}S_i^x &= S\cos(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i + \theta) \\ S_i^y &= S\sin(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i + \theta) \\ S_i^z &= 0\end{aligned} \tag{46}$$

这里的θ是$\boldsymbol{R}$与x轴的夹角。由式(46)描述的自旋结构称为**螺旋自旋结构**，其特征是在垂直于向量$\boldsymbol{Q}$（波的传播方向）的平面内，所有自旋彼此平行并指向xy平面的某一方向。实际物质中，自旋排列会受到晶体各向异性的影响，但理论上的Heisenberg模型是各向同性的，因此$(\boldsymbol{R},\boldsymbol{I})$平面可以任意选择。 该自旋结构在沿$\boldsymbol{Q}$方向传播时，每前进一步会以固定

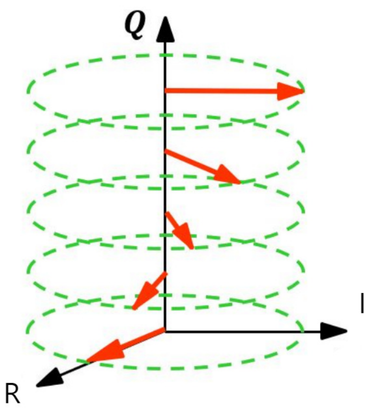

Figure 6: 螺旋自旋结构。

角度$a|\boldsymbol{Q}|$旋转。这里的a表示沿Q轴方向的晶面间距。从上述计算可以清楚地看出，自旋的旋转平面与向量$\boldsymbol{Q}$是独立的。特别是当z轴与$\boldsymbol{Q}$一致时，这种结构被称为**正常螺旋结构**。螺旋自旋结构最早由吉森在1959年作为MnO_2的自旋结构理论预测，之后在其他化合物以及镧系元素中，尤其是在比钆（英文：gadolinium，原子序数64，Gd）更重的稀土金属中被发现。

实际上，螺旋自旋结构要比强磁性($\boldsymbol{Q} = 0$)或反强磁性($\boldsymbol{Q} =$ 第一Brillouin区的边界)自旋状态更为稳定，例如，当最近邻自旋间的交换相互作用是强磁性的时，第二、第三最近邻自旋间的相互作用必须抑制强磁性自旋排列，即表现为反强磁性作用。因此，要求交换相互作用扩展到第二、第三最近邻自旋之间。对于稀土金属，交换相互作用是通过传导电子介导的间接交换相互作用（RKKY相互作用）。与超交换相互作用相比，这种相互作用的作用范围相当长，并且随距离改变符号，从而具备了螺旋结构出现的条件。

1.3.5 Dzyaloshinskii-Moriya相互作用

螺旋磁性出现的另一种机制来源于Dzyaloshinskii-Moriya相互作用。对于相邻的自旋$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$，其Hamiltonian可以表示为

$$\mathcal{H}_{\mathrm{DM}} = \boldsymbol{D}\cdot(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2) \tag{47}$$

其中，系数向量$\boldsymbol{D}$称为Dzyaloshinskii-Moriya向量，它的方向由晶体的对称性决定。$\boldsymbol{D}$的方向决定了螺旋自旋结构的旋转轴。例如，如果$\boldsymbol{D}$沿着z轴，则相邻自旋会在xy平面内形成螺旋结构。由于Hamiltonian中包含了自旋的外积而非内积形式，因此平行自旋状态不是该相互作用的最低能量状态。自旋互相垂直时，能量最低。当存在这种相互作用时，磁矩倾斜会更有利于能量稳定，进而可能导致螺旋磁性的出现。在某些情况下，可能会出现如**磁性斯格明子**（skyrmion）这样的特殊旋涡状自旋排列。

在数学上，包含最近邻$\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j$的交换相互作用和Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的Hamiltonian为:

$$\mathcal{H} = J\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j + \boldsymbol{D}\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j \tag{48}$$

为了简化讨论，仅考虑最近邻的两点自旋$\boldsymbol{S}_i$和$\boldsymbol{S}_j$，并设它们之间的夹角为θ，则系统的能量为:

$$E = JS^2 \cos\theta + DS^2 \sin\theta \tag{49}$$

化简后得:

$$E = S^2 \sqrt{J^2 + D^2} \cos(\theta - \alpha) \tag{50}$$

其中，

$$\alpha = \arctan \frac{D}{J} \tag{51}$$

考虑使的能量达到最低的角度θ，在$D = 0$时，平行或反平行的自旋排列是稳定的；但当$D \neq 0$时，自旋排列将具有与D大小相关的扭曲角α，从而形成螺旋磁性。

Dzyaloshinskii-Moriya相互作用出现在两个相互作用点之间缺乏晶体反演对称性时。因为如果$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$的中心存在反演中心，交换$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$后Hamiltonian不应发生变化，即:

$$\boldsymbol{D} \cdot (\boldsymbol{S}_1 \times \boldsymbol{S}_2) = \boldsymbol{D} \cdot (\boldsymbol{S}_2 \times \boldsymbol{S}_1) = -\boldsymbol{D} \cdot (\boldsymbol{S}_1 \times \boldsymbol{S}_2) \tag{52}$$

因此，$\mathcal{H}_{\mathrm{DM}} = 0$。反之，当反演对称性被破坏时，Dzyaloshinskii-Moriya相互作用通常不会为零。值得注意的是，通过自旋内积$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$表示的强磁性或反铁磁性相互作用与反演对称性无关，即$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{S}_2 \cdot \boldsymbol{S}_1$是始终成立的。

1.4 非磁性物质

非磁性物质可以分为**顺磁性体**和**抗磁性体**。

顺磁性体是指尽管存在磁矩，但这些磁矩并没有规则排列的物质。当温度升高时，任何磁性材料的磁矩之间的相互作用会被热扰动所破坏，导致磁矩失去自发对齐，从而发生**相变**进入顺磁性状态。对于顺磁性体，磁化强度与外加磁场成正比。可以理解为磁矩会在一定程度上沿着磁场方向排列（完全沿磁场方向排列需要非常强的磁场）。虽然电子本身具有产生磁性的自旋，但由于原子包含多个电子，整体上这些自旋可能会相互抵消（例如当电子壳层被完全填满时）。

在抗磁性体中，当施加磁场时，会产生与外加磁场方向相反的磁化效应。通过电磁感应的类比，抗磁性可以理解为电子在物质内部的圆周运动反向抵消了外加磁场。通常的电磁感应由于电子运动的散射而只能瞬时产生，但围绕原子核旋转的电子圆周运动不会受到扰动，因而持续地产生抗磁性。

References

[1] 盐见雄毅, 《新·物性物理入门》, 2023年8月1日初版第1次印刷, 朝仓书店.

[2] J Ping Liu, Zhidong Zhang, Guoping Zhao, 《Skyrmions Topological Structures, Properties, and Applications》, p2-p3.

[3] 西森秀稔, 新物理学系列35 《相变与临界现象的统计物理学》, 2020年9月23日初版第13次印刷, 培风馆.

[4] 查尔斯·基泰尔, 固体物理学导论 *(第8版)*, 第29-31页.

[5] 芳田奎, 《磁性》, 2015年7月10日按需印刷版, 岩波书店.

[6] 金森顺次郎, 新物理学系列7 《磁性》, 1969年, 培风馆.

[7] 胜本信吾, 《磁性》课程讲义 第9次, 东京大学物性研究所 (理学系研究科物理学系).

[8] 佐藤宪昭, 三宅和正, 《磁性与超导的物理》, 2020年4月20日初版第3次印刷, 名古屋大学出版社.