

МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА. ИЗД. 2-Е, ИСПРАВЛЕННОЕ И ДОПОЛНЕННОЕ

Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», М. 1975

Книга посвящена методам теоретического исследования магнитных свойств вещества на основе квантовой статистической физики. Даны краткие сведения из физики магнетизма и статистической механики, необходимые для дальнейшего изложения методов приближенного вторичного квантования (спиновых волн), молекулярного поля и функций Грина, широко используемых в современной теории ферромагнетиков, антиферромагнетиков и ферритов.

Разработка, обоснование и применение этих методов в физике магнетизма тесно связаны с оригинальными исследованиями автора.

В учебной и монографической литературе вопросы, составляющие основную тему книги, еще не нашли достаточного освещения. Изложенные методы в силу их общности можно применять не только в теории магнетизма, но и в значительно более широком круге проблем физики твердого тела.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие к второму изданию	6
Предисловие к первому изданию	8
Основные обозначения	11
Глава I. Введение	13
§ 1. Общие сведения и определения	13
§ 2. Элементы феноменологической теории	36
Глава II. Спиновые гамильтонианы	41
§ 3. Вторичное квантование	41
§ 4. Операторная форма теории возмущений	5в
§ 5. Формулы преобразований для спиновых операторов	61
§ 6. Гейзенберговская модель	67
§ 7. Обобщения гейзенберговской модели	73
Глава III. Элементы статистической механики	84
§ 8. Статистический оператор и термодинамические функции	84
§ 9. Статистические операторы комплексов частиц	93
§ 10. Статистическая теорема Вика — Блоха — Доминисиса	98
§ 11. Вырождение состояний и квазисредние	105
Глава IV. Метод приближенного вторичного квантования	111
§ 12. Квазиклассический метод и приближенное вторичное квантование	111
§ 13. Диагонализация квадратичных форм	119
§ 14. Об условиях применимости метода ПВК	127
Глава V. Приложения метода приближенного вторичного квантования	135
§ 15. Изотропный ферромагнетик	135
§ 16. Основное состояние антиферромагнетика	146
§ 17. Элементарные возбуждения в антиферромагнетике	152
§ 18. Спиновые волны в спиральных структурах	163

§ 19. Ферромагнитный резонанс и другие приложения метода ПВК	176
Глава VI. Метод молекулярного поля и теория возмущений	188
§ 20. Минимальный принцип для свободной энергии	188
§ 21. Изотропный ферромагнетик	196
§ 22. Ферримагнетики	201
§ 23. Приложения метода молекулярного поля	207
§ 24. Теория возмущений для высоких температур	208
Глава VII. Метод функций Грина	216
§ 25. Временные корреляционные функции и функции Грина	216
§ 26. Спектральные представления	221
§ 27. Дисперсионные соотношения	230
§ 28. Общие свойства функций Грина	232
§ 29. Теория возмущений для функций Грина	23У
§ 30. Некоторые свойства массового оператора	246
§ 31. Реакция системы на внешнее воздействие	248
Глава VIII. Приложения метода функций Грина	257
§ 32. Спиновые волны при конечных температурах	257
§ 33. Намагниченность при конечных температурах	262
§ 34. Средняя энергия ферромагнетика	269
§ 35. Изотропный ферромагнетик, случай $S \geq 1/2$	271
§ 36. Численное интегрирование уравнения для намагниченности	281
§ 37. Низкотемпературные разложения	284
§ 38. Ферромагнитный резонанс	286
§ 39. Резонанс в изотропном ферромагнетике	292
§ 40. Упругое рассеяние нейтронов	300
§ 41. Неупругое рассеяние нейтронов	312
§ 42. Некоторые дальнейшие применения метода функций Грина	319
Приложение	324
П. 1. Прямая и обратная решетки	324
П. 2. Волновые векторы и зоны	329
П. 3. Условия отражения Брегга — Вульфа	335
Дополнение. Приложения метода функций Грина к теории анизотропных гейзенберговских ферро- и антиферромагнетиков	
Введение	339
Глава I. Гамильтониан, уравнения движения и функции Грина	343
§ 1. Гамильтониан и свойства симметрии "	343
§ 2. Уравнения движения и интегралы движения	355
§ 3. Корреляционные функции	358
§ 4. Двухвременные функции Грина	362
Глава II. Обобщенное приближение Хартри — Фока (ОПХФ), или теории первого порядка для ферромагнетика	368
§ 1. Общая формулировка	368
§ 2. Спин-волновое (бозевское) приближение	375

§ 3. Низкотемпературная (хартри-фоковская) ренормировка	385
§ 4. Приближение Тябликова (приближение случайных фаз)	388
§ 5. «Точная» ренормировка в ОПХФ	394
§ 6. Некоторые другие приближения	307
§ 7. Исключение кинематического члена в модели «легкая ось»	402
Глава III. Теории второго порядка и анализ формально точного решения для модели «легкая ось»	406
§ 1. Спектр и затухание магнонов при низких температурах	406
§ 2. Обобщенная теория Тябликова для модели «легкая ось»	418
§ 3. Обобщенная теория Дайсона (приближение матрицы рассеяния)	424
§ 4. Метод уравнений движения в теории Дайсона и другие квазибозонные представления	438
Глава IV. Обобщенное приближение Харгри — Фока для антиферромагнетика (антиферромагнитная фаза)	449
§ 1. Гамильтониан и уравнения движения. Корреляционные функции и функции Грина	449
§ 2. Общая формулировка ОПХФ	455
§ 3. Спин-волновое приближение	460
§ 4. Низкотемпературная ренормировка	464
§ 5. Приближение Тябликова	467
§ 6. Некоторые другие приближения	469
Глава V. Спин-фононное взаимодействие в ангармоническом ферромагнитном кристалле	47!
§ 1. Спин-фононное взаимодействие в модели Гейзенберга	471
§ 2. Самосогласованные элементарные возбуждения в ферромагнитном ангармоническом кристалле	476
§ 3. Спиновые возбуждения в ангармоническом ферромагнитном кристалле	480
§ 4. Обсуждение результатов	491
Примечания	493
Литература	504
Литература к дополнению	517

ПРЕДИСЛОВИЕ К ВТОРОМУ ИЗДАНИЮ

За десятилетие, прошедшее с момента первого издания, монография С. В. Тябликова «Методы квантовой теории магнетизма» стала необходимым руководством практически для всех физиков, работающих как в этой области, так и в ряде других областей физики твердого тела не только в Советском Союзе, но и за рубежом.

Монография удостоена Государственной премии СССР в 1970 году и переведена в США и ГДР.

Методы квантовой статистической физики, развитие и применение которых связано с оригинальными исследованиями безвременно ушедшего из жизни Сергея Владимировича Тябликова, не только не утратили своей актуальности, но применяются все более широко при теоретических исследованиях.

Настоящее издание снабжено развернутым дополнением, в котором отражены некоторые новые результаты квантовой теории магнетизма. Большая часть из них получена в последние годы методом двухвременных функций Грина в работах учеников и последователей С. В. Тябликова. В этих работах удалось, в частности, точно воспроизвести теорию Дайсона и обобщить ее на случай анизотропной модели Гейзенберга, не используя каких-либо квазибозонных представлений для спиновых операторов. Оказалось возможным также построить улучшенное уравнение магнитного состояния, не содержащее кинематического члена при низких температурах и описывающее фазовый переход (при этом учтены сдвиг

и затухание спектра магнонов). Указанные результаты (и ряд других) не удавалось получить ранее в рамках других подходов (например, диаграммной техники для спиновых операторов, функционального интегрирования и т. п.). Метод функций Грина позволил более полно учесть динамические уравнения и кинематические свойства операторов Паули.

В основной текст монографии внесена имевшаяся авторская правка и исправлены опечатки; сделаны также немногочисленные примечания редактора. Библиография к основному тексту пополнена рядом работ, выполненных после 1965 года.

Главы I—III Дополнения написаны Ю. Г. Рудым и Ю. А. Церковниковым, глава IV — Ю. Г. Рудым при участии В. И. Лымаря, глава V — Н. М. Плакидой; редактирование 2-го издания осуществили Д. Н. Зубарев и Ю. Г. Рудой.

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Магнитные свойства в той или иной степени проявляются у всех веществ. Среди твердых тел можно выделить группу так называемых сильно магнитных веществ, обладающих особенно резко выраженными магнитными свойствами: ферромагнетики, ферримангнетики и антиферромагнетики. В книге рассматриваются некоторые вопросы теории магнитных явлений в этих веществах. В дальнейшем о теории явлений в сильно магнитных веществах будет говориться как о теории сильного магнетизма или просто магнетизма, поскольку слабо магнитные вещества (парамагнетики и диамагнетики) здесь не рассматриваются. Упор делается на изложение общих методов решения и особенностей, связанных со своеобразием магнитных задач. В постановке их всюду проводится микроскопический подход.

В последние годы были достигнуты большие успехи в исследовании задачи многих тел. В значительной мере они обязаны перенесению квантовополевых методов в статистическую механику. Как следствие этого имел место прогресс и в квантовой теории магнетизма. Однако результаты многих интересных работ систематически еще не излагались. Это составляет известные трудности для лиц, начинающих знакомиться с проблематикой и методами решения задач теории магнетизма.

В предлагаемой вниманию читателя книге делается попытка изложить с единой точки зрения некоторые методы, используемые в квантовой теории магнетизма. Своей основной целью автор считал последовательное изложение аппарата теории в такой форме, которая позволила бы читателю использовать его при исследовании других еще не решенных вопросов. В книгу включен также ряд вспомогательных сведений, чтобы по возмож-

ности избавить читателя от необходимости обращаться к другим литературным источникам, иногда труднодоступным. Изложение не претендует на полноту обзора результатов квантовой теории магнетизма. Оно представляет лишь одно из направлений, развивавшихся в послевоенные годы как в Советском Союзе, так и за рубежом.

Первая часть книги (гл. I—III) имеет методический характер. Она начинается кратким введением, в котором излагаются основные сведения и определения физики магнитных явлений и элементы феноменологической теории. Излагается метод вторичного квантования, рассматривается вопрос о спиновых гамильтонианах теории сильного магнетизма, коротко приводятся необходимые основные сведения из статистической механики.

Во второй части книги (гл. IV—VIII) излагаются метод приближенного вторичного квантования, или спиновых волн (гл. IV—V), метод молекулярного поля и элементы теории возмущений для высоких температур (гл. VI) и метод квантовых функций Грина (гл. VII—VIII).

Такое расположение материала позволяет последовательно рассмотреть расчетные методы для области низких температур, высоких температур (включая окрестность точки Кюри) и интерполяционные методы, охватывающие всю область температур. При этом сначала излагается общая теория и развивается необходимый математический аппарат, а затем рассматриваются ее приложения. Применения метода демонстрируются на более или менее подробном разборе одной-двух простейших задач теории магнетизма. О других приложениях коротко говорится в небольших обзорах, которыми заканчиваются главы, посвященные приложениям методов. Они не охватывают и небольшой части многочисленных результатов по теории магнетизма, поскольку это вообще не являлось целью настоящей монографии. В основном упоминаются работы, результаты которых в той или иной мере связаны с рассматриваемыми в книге вопросами. Исключения сделаны для некоторых вопросов теории, которые, по мнению автора, представляют интерес, но в книге из-за ограниченности ее объема не обсуждались.

В книге рассмотрение всюду ограничивается случаем монокристаллических однодоменных образцов. Во избежание повторений это далее не оговаривается.

Как правило, используется система единиц, в которой $\hbar = 1$.

В приложении приводятся для справок некоторые сведения о пространстве обратной решетки, формальных преобразованиях Фурье для дискретной среды и связанных с ними вопросах.

Книга в основном рассчитана на лиц, желающих ознакомиться с элементами квантовой теории магнетизма и методами последней, на аспирантов и студентов старших курсов. Предполагается, что читатель уже знаком с основами квантовой и статистической механики в объеме обычных курсов физических факультетов университетов или педвузов.

Еще в рукописи книга была прочитана А. А. Гусевым, А. Г. Гуревичем и В. А. Москаленко, которым автор благодарен за многочисленные советы и замечания. Он также весьма обязан своим коллегам за присланные ими препринты работ, что позволило ознакомиться с рядом интересных результатов до их опубликования.

Автор признателен академику Н. Н. Боголюбову за плодотворное обсуждение различных проблем квантовой теории магнетизма и просмотр рукописи.

С. В. Тябликов

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

$\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots$ — одночастичные, двухчастичные и т. д. операторы;

$C, C(\dots, n_f, \dots)$ — волновая функция в представлении вторичного квантования;

$E_v, E(v)$ — энергия элементарного возбуждения;

$\mathcal{E}, \mathcal{E}_n$ — энергия системы;

ϵ_0, E^0 — энергия основного состояния;

F — свободная энергия;

F_s — функция распределения s -частиц;

$G, G^{(j)}, \mathcal{G}$ — квантовые функции Грина;

H — постоянное магнитное поле;

H_0 — размагничивающее поле;

H_c — критическое поле;

\mathcal{H} — гамильтониан системы;

I, I_1 — обменный интеграл для ближайших соседей;

$I(f_1, f_2), I_{f_1-f_2}$ — обменный интеграл для атомов, находящихся в узлах f_1 и f_2 ;

$I(\omega), \Phi(\omega)$ — спектральная интенсивность или спектральная функция;

$I(v)$ — фурье-образ обменного интеграла $I(f)$;

K_i, K'_i — i -я константа анизотропии;

M — намагниченность образца;

M_0 — намагниченность насыщения;

$M_1, M(E)$ — массовый оператор для первой функции Грина;

\mathcal{M} — оператор магнитного момента системы;

N — число атомов в решетке, число частиц в системе;

$N_{\alpha\beta}$ — тензор размагничивающих факторов;

\bar{N}_v — среднее значение числа частиц (числа заполнения) в состоянии v ;

\mathcal{N} — оператор полного числа частиц;

\mathcal{N}_v, n_v — оператор числа частиц в состоянии v ;

P — оператор перестановки частиц, символ главного значения;

\mathcal{P} — проекционный оператор;

Q — статистическая сумма;

S_f^α — α -компонента спина, принадлежащего узлу f ;

S_f, S — величина спина, принадлежащего узлу f ;

S^α — оператор полного спина системы;

T — температура;

T_C — температура Кюри;

T_N — температура Нееля;

T_k — температура компенсации;

V — объем системы;

$Z_p(x)$ — модифицированная дзета-функция Римана;

b_f^\dagger, b_f — операторы Паули;

f, g — номера узлов решетки, номера одночастичных состояний;

$h(t)$ — переменное магнитное поле;	θ_c, ϑ_c — температура Кюри;
k, k_B — постоянная Больцмана;	θ_N, ϑ_N — температура Нееля;
\bar{m} — средняя намагниченность на один узел;	λ — химический потенциал;
t — время;	μ, μ_f — магнитный момент атома; магнитный момент атома в единицах S, S_f ;
v — объем на один узел, на одну частицу;	μ_B — магнетон Бора;
z — число ближайших соседей;	v, κ, k — волновой вектор;
Γ — затухание для элементарного возбуждения;	ρ — статистический оператор;
γ^α — направляющие косинусы вектора намагниченности;	ρ_s — статистический оператор комплекса из s частиц;
$\Delta(v_1 - v_2), \delta v_1, v_2$ — символ Кронекера;	$\sigma_s, \sigma_s^\alpha$ — относительная намагниченность;
δ — вектор, соединяющий двух ближайших соседей;	τ — безразмерная температура;
$\delta(x)$ — дельта-функция Дирака;	τ_c — безразмерная температура Кюри;
ϵ_k — энергия элементарного возбуждения;	χ — восприимчивость;
$\zeta(p)$ — дзета-функция Римана;	ψ_0 — квантовое сокращение спина;
θ, ϑ — температура в единицах k ; ступенчатая функция;	ω — частота;
	Ω — термодинамический потенциал.

ВВЕДЕНИЕ

В этой главе излагаются основные сведения и определения теории сильного магнетизма и дается сжатый обзор основных теоретических представлений о природе сильного магнетизма. На основе последних приводится качественная классификация основных типов сильно магнитных веществ.

§ 1. Общие сведения и определения ¹⁾

Твердые тела в отношении магнитных свойств можно разделить на слабо магнитные (диамагнетики и парамагнетики) и сильно магнитные (ферромагнетики, антиферромагнетики и ферримагнетики). Дальнейшее изложение будет посвящено вопросам теории сильно магнитных веществ.

¹⁾ Подробное изложение экспериментальных данных и теоретических вопросов ферромагнетизма см. в монографиях Н. С. Акулова (1939), С. В. Вонсовского и Я. С. Шура (1948), Н. Н. Боголюбова (1949), К. П. Белова (1951), (1959), С. В. Вонсовского (1953), (1971), Бозорта (1956), Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1959), А. Г. Гуревича (1960), (1973), А. И. Ахиезера и др. (1967), Маттиса (1967), Уайта (1972) и в сборниках (1951), (1952), (1959), (1961), (1973). См. также коллективную монографию «Магнетизм» (под ред. Радо и Сула) (1963—1966) и Физическую энциклопедию (под ред. Флюгге) (1966, 1968), и Труды Международной конференции по магнетизму (Москва, 1973 г.) (1974). По антиферромагнетизму см. также обзоры Нагамия и др. (1955), А. С. Боровика-Романова (1962), К. П. Белова и др. (1964), (1965) и сборник (1956); по слабому ферромагнетизму — обзор А. С. Боровика-Романова (1962) и монографию Е. А. Турова (1963); по ферримагнетизму обзоры Гортера (1955), А. С. Пахомова и Н. А. Смолькова (1962), монографии Смита и Вейна (1962), Ситадзе и Сато (1964), Смарта (1968) и К. П. Белова (1972).

Для ферромагнетиков, антиферромагнетиков и ферримагнетиков характерно возникновение при определенных условиях магнитного упорядочения в веществе и как следствие появление большого макроскопического момента у образца (у ферромагнетиков и ферримагнетиков — всегда). По порядку величины этот момент равен $N\mu_B$, где N — число атомов в образце, μ_B — борковский магнетон.

Типичными представителями ферромагнетиков являются переходные металлы: железо, кобальт и никель; представителями антиферромагнетиков — окислы переходных элементов и их соли (FeO , CoO , CoF_2 , NiSO_4 и т. д.); представителями ферримагнетиков — соединения переходных элементов типа комплексных солей ($\text{MnO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$, $3\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$ и т. д.) и некоторые другие.

По современным представлениям магнетизм твердых тел обусловлен электронами незаполненных внутренних оболочек атомов вещества. Во всяком случае сильный магнетизм наблюдается лишь в тех случаях, когда в состав кристаллической решетки вещества входят атомы с недостроенными внутренними оболочками.

Незаполненными внутренними оболочками обладают элементы переходных групп железа ($3d$ -оболочка), палладия ($4d$ -оболочка), платины ($5d$ -оболочка), актиния ($6d$ - и $5f$ -оболочки) и редкоземельные элементы ($4f$ -оболочка).

В табл. 1 для этих элементов приводятся электронные конфигурации незаполненных оболочек и оболочек, следующих за ними. Следует заметить, что наличие атомом с недостроенной внутренней оболочкой не является достаточным условием существования сильного магнетизма.

Так, в группе железа ($3d$ -металлы) чистые Sc, Ti, V парамагнитны, Cr, Mn антиферромагнитны, Fe, Co, Ni ферромагнитны.

В группе палладия ($4d$ -металлы) Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh парамагнитны, вопрос о магнитных свойствах Pd не ясен (по данным Абрагамса (1963) он не является антиферромагнетиком).

В группе платины ($5d$ -металлы) La, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir парамагнитны, Pt антиферромагнитна.

Т а б л и ц а 1

Электронные конфигурации незаполненных оболочек и оболочек, следующих за ними, для переходных элементов периодической системы *)

Группа железа (электронные конфигурации над оболочкой Ar)

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$3d^1 4s^2$	$3d^2 4s^2$	$3d^3 4s^2$	$3d^5 4s^1$	$3d^5 4s^2$	$3d^6 4s^2$	$3d^7 4s^2$	$3d^8 4s^2$

Группа палладия (электронные конфигурации над оболочкой Kr)

Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd
$4d^1 5s^2$	$4d^2 5s^2$	$4d^1 5s$	$4d^5 5s$	$4d^5 5s^2$	$4d^7 5s$	$4d^8 5s$	$4d^{10}$

Группа платины (электронные конфигурации над оболочкой Xe для La и над оболочкой Xe + $4f^{14}$ для остальных элементов)

La							
$5d^1 6s^2$							
Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt
$5d^1 6s^2$	$5d^2 6s^2$	$5d^3 6s^2$	$5d^4 6s^2$	$5d^5 6s^2$	$5d^6 6s^2$	$5d^7 6s^2$	$5d^9 6s$

Редкоземельные элементы (электронные конфигурации над оболочкой Xe)

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd
$4f^2 6s^2$	$4f^3 6s^2$	$4f^1 6s^2$	$4f^5 6s^2$	$4f^6 6s^2$	$4f^7 6s^2$	$4f^7 5d^1 6s^2$

*) Приводятся по монографиям Кондона и Шортли (1949) и Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963).

Продолжение табл. I

Ть	Dy	Ho	Er	Tu	Yb
$4f^8 5d^1 3s^2$	$4f^{10} 6s^2$	$4f^{11} 6s^2$	$4f^{12} 6s^2$	$4f^{13} 6s^2$	$4f^{14} 6s^2$

Группа актиния (электронные конфигурации над оболочкой Rn)

Ac	Th	Pa	U	Трансурановые элементы
$6d^1 7s^2$	$6d^2 7s^2$	$5f^2 6d^1 7s^2$	$5f^3 6d^1 7s^2$	

В группе редких земель (4f-металлы) у ряда элементов при низких температурах существуют две магнитные фазы. В подгруппе Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu в области очень низких температур антиферромагнитны Ce, Nd, Sm и Eu и парамагнитен Pm; в подгруппе Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tu все элементы ферромагнитны в «низкотемпературной» фазе и антиферромагнитны в «высокотемпературной» фазе (вопрос о существовании антиферромагнитной фазы у Gd окончательно не решен); Yb парамагнитен. Подробнее о магнитных свойствах редких земель см. обзор К. П. Белова и др. (1964), (1965).

Актиниды (6d- и 5f-металлы) Ac, Th, Pa, U парамагнитны.

Магнитные свойства веществ зависят от распределения плотности электронов незаполненных внутренних оболочек и плотности электронов проводимости в кристаллической решетке. Однако современное состояние теории не позволяет пока что сформулировать необходимые и достаточные условия существования в данном веществе сильного магнетизма на основе сведений об электронных конфигурациях свободных атомов, составляющих кристаллическую решетку рассматриваемого вещества.

Магнитный момент образца складывается как из собственных магнитных моментов атомных электронов, так

и их орбитальных моментов. Как известно, магнетомеханическое отношение g' (т. е. отношение магнитного момента к механическому) в единицах $e/2mc$ равно 2 для собственных моментов электронов и 1 для их орбитальных моментов. Первые измерения магнетомеханического отношения основывались на явлениях Эйнштейна — Де-Хааза и Барнетта. В последнее время значения магнетомеханического отношения с большой точностью определяются также из опытов по ферромагнитному резонансу. Результаты измерений дают для g' значения, близкие к значению g' для свободных электронов. В табл. 2 приведены результаты измерений магнетомеханического отношения для ряда магнитных материалов.

Т а б л и ц а 2

Значения магнетомеханического отношения
для некоторых магнитных материалов *)

Материал	g'
Fe	$1,919 \pm 0,002$
Co	$1,850 \pm 0,004$
Ni	$1,835 \pm 0,002$
Супермаллой ($\text{Ni}_{0,79}\text{Fe}_{0,16}\text{Mn}_{0,05}$)	$1,905 \pm 0,002$
Никелевый феррит стехиометрического состава ($\text{NiO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$)	$1,849 \pm 0,002$
Сплав Гейслера (Cu_2MnAl)	$1,993 \pm 0,002$
MNSb	$1,978 \pm 0,002$
Пирротин (Fe_7S_8)	$1,9 \pm 0,3$

*) По данным Скотта (1962).

Отсюда естественно заключить, что магнитные моменты сильно магнитных веществ складываются в основном из магнитных моментов электронов незаполненных оболочек и что орбитальные моменты этих электронов не дают заметного вклада. Далее можно предположить, что этот макроскопический магнитный момент появляется из-за возникновения, при определенных условиях, спинового упорядочения электронов незаполненных оболочек атомов. Причиной возникновения

упорядочения является, очевидно, взаимодействие между электронами.

Это предположение, сформулированное впервые Я. И. Френкелем (1928) и Гейзенбергом (1928), явилось фундаментом современной квантовой теории сильного магнетизма.

Упорядочение спинов возникает самопроизвольно (спонтанно) как только температура делается ниже некоторой критической. Появляющийся при этом магнитный момент, будучи отнесен к единице объема, носит название самопроизвольной намагниченности. Величина самопроизвольной намагниченности зависит от температуры и почти не зависит от величины внешнего поля. Наибольшее теоретически допустимое значение намагниченности носит название намагниченности насыщения.

Явление сильного магнетизма в веществах связано определенным образом с существованием кристаллической решетки, поскольку пока неизвестны сильно магнитные вещества, являющиеся жидкостями или газами. Влияние кристаллической структуры вещества на его магнитные свойства проявляется и в том, что при данной ориентировке кристалла магнитные характеристики зависят от того, по какому направлению они измеряются. Иначе говоря, в магнитных веществах имеется магнитно-кристаллографическая анизотропия.

Относительная ориентация спинов электронов соседних атомов определяется характером взаимодействия электронов друг с другом. Кулоновское взаимодействие между электронами может обеспечить появление упорядоченности во взаимном расположении спинов, однако направление их общей ориентации при этом не фиксируется. Спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействия снимают в значительной мере это вырождение по направлениям. В результате в кристаллических решетках имеется всего лишь несколько направлений, обладающих тем свойством, что термодинамический потенциал системы будет минимален при ориентации спинов (или групп спинов) по одному из этих направлений. Эти направления носят названия направлений легкого намагничивания. Исходя из соображений о связи магнитно-кристаллографической анизотропии с магнитными взаи-

модействиями, Н. С. Акулов (1939) развил феноменологическую теорию анизотропии.

В качестве примера приведем три классических ферромагнетика: железо, никель и кобальт. Железо имеет кубическую объемноцентрированную решетку; оси легкого намагничивания направлены по ребрам элементарного куба. Никель имеет кубическую гранецентрированную решетку; оси легкого намагничивания направлены по главным диагоналям куба. Низкотемпературная модификация кобальта имеет плотную гексагональную упаковку и одну ось легкого намагничивания — ось шестого порядка.

В любом монокристаллическом образце в отсутствие внешнего поля спины могут расположиться по любой из осей легкого намагничивания. Энергетически выгодным оказывается случай, когда монокристалл разбивается на ряд областей, в каждой из которых спины ориентированы по-своему. Эти области монокристалла носят название доменов или областей самопроизвольной намагниченности. Размеры доменов, их форма и взаимное расположение определяются условиями минимума термодинамического потенциала системы. Количественная теория доменных структур была развита Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшицем (1935, а), (1959). [См. также работы Д. А. Широбокова (1945), Е. А. Турова и М. М. Фарзтдинова (1970), И. А. Привороцкого (1971) и монографию Суху (1967). (Ред.)].

При определенных условиях удастся описать поведение электронов незаполненных оболочек как поведение системы спинов, расположенных в узлах решетки. Коэффициент пропорциональности, определяющий интенсивность взаимодействия между спинами разных узлов решетки (например, соседних), называется обменным интегралом. Считают, что по порядку величины обменный интеграл I равен обменной энергии электронов соответствующих узлов.

Количественные расчеты даже с такой упрощенной моделью реального вещества достаточно сложны. Однако оказывается возможным при определенных условиях и с известной степенью точности заменить операторы спинов электронов классическими векторами. Тогда в отношении магнитных свойств вещество моделируется

системой диполей, размещенных в узлах решетки и взаимодействующих друг с другом с энергией, равной по величине обменной. Эта так называемая квазиклассическая схема позволяет дать достаточно корректное качественное и отчасти количественное описание сильно магнитных веществ.

Обозначим через μ магнитный момент атома и через N число атомов в решетке. Тогда намагниченность насыщения равна

$$M_0 = N\mu.$$

Измерения дают для намагниченности M образца значения меньшие, чем M_0 . Это обстоятельство обязано размагничивающему влиянию тепловых колебаний спиновых моментов атомов, магнитно-кристаллографической анизотропии и влиянию границ образца. Если образец поместить во внешнее магнитное поле H , то его намагниченность будет расти с ростом поля. Величина

$$\chi(H) = \frac{\partial M}{\partial H}$$

называется (магнитной) восприимчивостью. С увеличением поля магнитные моменты постепенно начинают поворачиваться от направления по оси легкой намагниченности к направлению H (область «вращения») и при некоторых значениях H в среднем все ориентируются по полю. Дальнейшее увеличение M с ростом H связано с подавлением тепловых колебаний спиновых моментов внешним полем (область «парапроцесса»). В этой области восприимчивость убывает с ростом H . Намагниченность насыщения достигается в предельном случае $H \rightarrow \infty$; при этом восприимчивость стремится к нулю.

Квазиклассическую схему можно еще более упростить, если заменить взаимодействие магнитных моментов некоторым эффективным полем, пропорциональным обменному интегралу и средней намагниченности вещества. Введенное таким способом эффективное поле, действующее на магнитные моменты вещества, называется молекулярным полем Вейсса. Эта модель ферромагнетика, предложенная Б. Л. Розингом (1892), (1896), (1910) и Вейссом (1907) еще до создания квантовой механики, позволила качественно объяснить особенности

поведения ферромагнетиков при изменении температуры и внешнего поля.

Упорядоченное расположение спинов разрушается при некоторой критической температуре, называемой температурой Кюри T_C для ферромагнетиков и температурой Нееля T_N для антиферромагнетиков. Очевидно, что это — те температуры, при которых средняя тепловая энергия будет порядка энергии обменного взаимодействия. Для типичных ферромагнетиков температуры Кюри (см. табл. 3) порядка 10^3 °К или $kT_C \sim 10^{-13}$ эрг, где k — постоянная Больцмана. Энергия обменного взаимодействия I будет порядка e^2/a , где e — заряд электрона, a — постоянная решетки. Полагая для оценки $a \sim 2-3$ Å, получаем $I \sim 10^{-12} - 10^{-13}$ эрг. Отсюда видим, что эти две оценки согласуются по порядку величины.

Таблица 3

Температуры Кюри T_C и Нееля T_N для некоторых ферромагнетиков, ферримангнетиков и антиферромагнетиков *)

Вещество	T_C , °К	Вещество	T_N , °К
Ферромагнетики		Антиферромагнетики	
Fe	1043	NiSO ₄	37
Co	1393	CoSO ₄	12
Ni	631	FeSO ₄	21
		MnSO ₄	11,5
		NiO	520
Ферримангнетики		CoO	290
		FeO	188
FeO · Fe ₂ O ₃	863	MnO	118
CoO · Fe ₂ O ₃	793	NiF ₂	73,2
NiO · Fe ₂ O ₃	863	CoF ₂	37,2
MnO · Fe ₂ O ₃	593	FeF ₂	78,3
MgO · Fe ₂ O ₃	643	MnF ₂	66,5

*) Приводятся по монографии Бозорта (1956) и обзорам А. С. Боровика — Романова (1962) и А. С. Пахомова и Н. А. Смолькова (1962).

Энергия магнитной анизотропии сравнима с энергией магнитных взаимодействий электронов (спин-спинового

и спин-орбитального) и по порядку величины равна $\mu^2/a^3 \sim 10^{-16} - 10^{-17}$ эрг (a — постоянная решетки). Если образец из сильно магнитного вещества помещен во внешнее поле H , то последнее должно подавлять влияние анизотропии при $H \geq \mu/a^3$, т. е. при $H \geq 10^3 - 10^4$ э, что действительно наблюдается на опыте. Величина магнитно-кристаллографической анизотропии сильно зависит от температуры.

Из предыдущих оценок видна невозможность объяснения явления сильного магнетизма с классической точки зрения, при которой вещество моделируется системой магнитных моментов, размещенных по узлам решетки, с обычным дипольным взаимодействием между ними. Действительно, энергия дипольного взаимодействия по порядку величины равна $\mu^2/a^3 \sim 10^{-16} - 10^{-17}$ эрг, соответствующие ей температуры Кюри будут порядка $1 - 10^{-1}$ °К. Случаи дипольного магнетизма, по-видимому, наблюдаются, хотя и редко (Кук и др. (1959), Беккер и Плишке (1970)). Мы не будем в этом обсуждении останавливаться на них, поскольку они выпадают из группы типичных сильно магнитных веществ. Заметим только, что методы исследования, излагаемые в последующих главах, могут применяться без каких-либо особых изменений и для таких веществ.

В соединениях типа окислов или солей переходных металлов магнитно-активные атомы разделены нейтральными атомами. Так как прямое обменное взаимодействие быстро убывает с расстоянием, то в таких соединениях оно очень мало и не может объяснить наблюдаемых порядков величин температуры перехода. Считают, что в этом случае осуществляется так называемый косвенный обмен, впервые рассмотренный Крамерсом (1934), при котором взаимодействие электронов магнитных атомов осуществляется через посредство промежуточного немагнитного атома ¹⁾. В случае косвенного обмена также удастся моделировать систему электронов, ответственных за магнетизм, системой спинов, закреп-

¹⁾ Дальнейшее развитие теория косвенного обмена получила в работах Андерсона (1950, а), (1959), Ван Флека (1951), Шимицу (1952), Ямашиты (1954), С. В. Вонсовского и Ю. М. Сеидова (1956), Кеффера и Огучи (1959), Фукучи (1961, а, б) и др., Ю. М. Сеидова (1973).

ленных в узлах решетки. Величина I , аналогичная обменному интегралу ферромагнетиков, носит название интеграла косвенного обмена. Его значения, как правило, на один-два порядка меньше значений обменного интеграла для типичных ферромагнетиков (ср. значения температур Кюри и Нееля в табл. 3).

Воспользуемся теперь квазиклассическим приближением для того, чтобы наглядно представить модели ферромагнетиков, антиферромагнетиков и ферримагнетиков. Для простоты будем пренебрегать здесь влиянием магнитной анизотропии, считая ее малой.

Ферромагнетики. При температурах, меньших температуры Кюри, все спины в среднем ориентированы параллельно друг другу, вследствие чего в веществе имеется большой спонтанный магнитный момент. Во внешнем поле H магнитные моменты атомов, а следовательно, и результирующий момент ориентируются по полю (рис. 1).

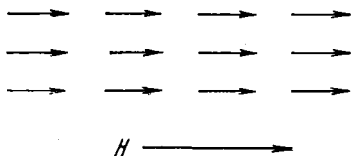


Рис. 1. Ферромагнитное упорядочение спинов.

В отсутствие внешнего поля направление результирующего магнитного момента M не определено. Но поскольку всегда имеется хотя бы слабая анизотропия, вектор M будет направлен вдоль одной из осей легкого намагничивания.

С повышением температуры самопроизвольная намагниченность убывает и при температуре Кюри T_c и в отсутствие внешнего поля исчезает. В точке Кюри имеет место фазовый переход второго рода (испытывают разрывы вторые производные термодинамического потенциала).

Выше точки Кюри ($T \gg T_c$) ферромагнетик ведет себя подобно классическим парамагнетикам, его парамагнитная восприимчивость χ удовлетворяет закону Кюри — Вейсса:

$$\chi = \frac{\text{const}}{T - T_c}. \quad (1.1)$$

В окрестности точки Кюри при $T \leq T_c$ зависимость

самопроизвольной намагниченности от температуры определяется выражением

$$M(T) \cong \text{const} \sqrt{1 - T/T_c}. \quad (1.2)$$

При $T \rightarrow 0$ температурная зависимость $M(T)$ имеет степенной характер:

$$M(T) = M_0 (1 - A_1 T^{3/2} - A_2 T^{5/2} - \dots), \quad (1.3)$$

где A — некоторые постоянные, M_0 — намагниченность насыщения.

Антиферромагнетики. Антиферромагнитное расположение спинов согласно гипотезе Нееля (1932), (1936) можно представить как совокупность двух или нескольких ферромагнитных подрешеток, вставленных одна в другую, при этом результирующий момент всех подрешеток равен нулю.

Схематическое изображение расположения спинов для случая изотропного двухподрешеточного антиферромагнетика приведено на рис. 2.

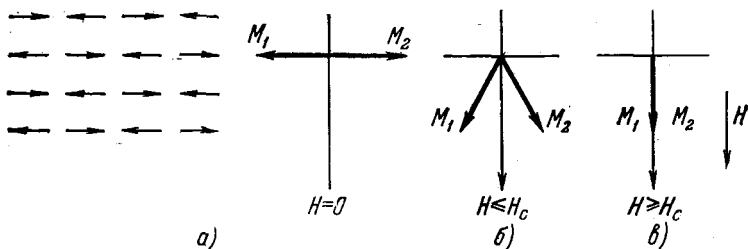


Рис. 2. Схематическое изображение расположения спинов в изотропном антиферромагнетике: а — в отсутствие внешнего поля; б — в «слабых» полях ($H \leq H_c$); в — в сильных полях ($H \geq H_c$).

Будем изображать моменты подрешеток, ориентированных «влево» и «вправо», векторами M_1 и M_2 ($|M_1| = |M_2|$). При $H = 0$ результирующая намагниченность равна нулю. При $H \leq H_c$, где H_c — некоторое критическое поле, магнитные моменты устанавливаются как на рис. 2, б. В интервале полей $0 \leq H \leq H_c$ результирующая намагниченность ориентирована по полю и растет с ростом его линейно. При $H > H_c$ спины обеих подре-

шетоков устанавливаются по полю и антиферромагнетик ведет себя далее подобно ферромагнетику (рис. 2, в). Зависимость результирующей намагниченности от величины внешнего поля для нуля температуры изображена на рис. 3.

Величина μH_c будет порядка энергии обменного взаимодействия, и потому участок кривой для $H \geq H_c$ может быть достигнут для веществ с достаточно низкой температурой Нееля.

При повышении температуры намагниченности подрешеток убывают и обращаются в нуль при температуре Нееля T_N (при $H = 0$). Как и для ферромагнетиков, при температуре $T = T_N$ имеет место фазовый переход второго рода. В области перехода теплоемкость как функция температуры имеет типичный «лямбда-образный» вид, наблюдаются также аномалии других свойств.

Выше точки Нееля восприимчивость меняется по закону Кюри — Вейсса. Характерны для антиферромагнетиков наличие максимума у восприимчивости при $T = T_N$ и резкая зависимость ее от температуры и поля при $T < T_N$.

Следует заметить, что в антиферромагнетиках анизотропия может качественно изменить картину явления по сравнению с тем, что имеет место для изотропного антиферромагнетика.

Слабые ферромагнетики (антиферромагнетики со слабым ферромагнетизмом). К ним принадлежат антиферромагнетики, в которых из-за анизотропии магнитные моменты подрешеток устанавливаются не строго антипараллельно, а повернуты на некоторый малый угол ($\sim 1^\circ$). В результате у таких антиферромагнетиков нет полной компенсации магнитных моментов подрешеток (даже при $H = 0$) и наблюдается отличная от нуля самопроизвольная намагниченность. Примерами таких

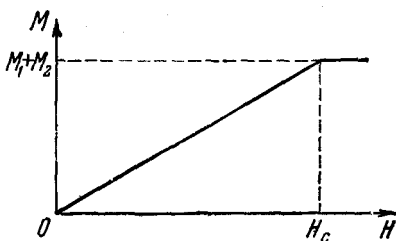


Рис. 3. Зависимость намагниченности изотропного антиферромагнетика от величины внешнего поля для нуля температуры.

веществ являются $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, MnCO_3 , CoCO_3 , CuSO_4 , NiF_2 , MnF_2 и некоторые другие.

Намагниченность слабых ферромагнетиков при определенных условиях может быть описана формулой

$$M = m + \chi H, \quad (1.4)$$

где H — внешнее магнитное поле, m и χ — некоторые постоянные, зависящие от температуры. Очевидно, что m и есть результирующая намагниченность, обязанная неколлинеарности магнитных моментов подрешеток. Температурная зависимость m подобна температурной зависимости намагниченности подрешеток. По величине m порядка намагниченности подрешетки, уменьшенной на отношение энергии магнитного взаимодействия спинов (спин-спинового и спин-орбитального) к энергии обменного взаимодействия. Поэтому самопроизвольная намагниченность слабых ферромагнетиков составляет примерно 10^{-3} от таковой для обычных ферромагнетиков.

Явление слабого ферромагнетизма существенно связано с магнитной симметрией кристалла; его можно также вызвать искусственным путем. Одна возможность связана с тем, что при наложении магнитного поля меняется магнитная структура вещества, в результате антиферромагнетик может превратиться в слабый ферромагнетик. Другая возможность состоит в изменении структуры путем деформации кристалла. Подробное изложение см. в обзоре А. С. Боровика-Романова (1962) и монографии Е. А. Турова (1963).

Ферримангнетики. Для ферримангнетиков, по гипотезе Нееля (1948), характерно наличие нескольких подрешеток с не равным нулю результирующим моментом, сравнимым по величине со спонтанными моментами подрешеток. Результирующий момент может возникнуть как из-за различия в числе «левых» и «правых» узлов и величины спинов в них, так и из-за неколлинеарного расположения моментов подрешеток.

Рассмотрим поведение ферримангнетика во внешнем поле. Примем для простоты, что имеется только две подрешетки с результирующими моментами M_1 и M_2 ($|M_1| < |M_2|$), и пренебрежем магнитной анизотропией. Тогда в зависимости от величины внешнего поля имеет место одна из возможностей, изображенных на

рис. 4. Заметим, что в достаточно слабых полях результирующий магнитный момент ферримагнетика всегда направлен по полю.

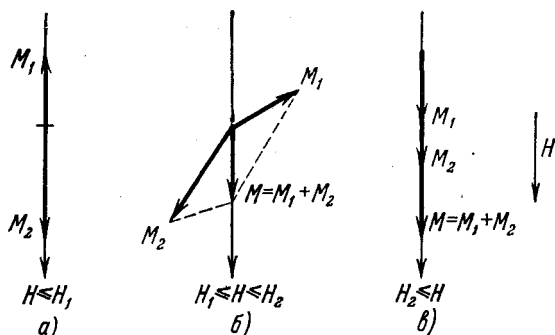


Рис. 4. Схематическое изображение расположения спинов в изотропном ферримагнетике: а — в слабых полях ($H \leq H_1$); б — в сильных полях ($H_1 \leq H \leq H_2$); в — в очень сильных полях ($H \geq H_2$).

В слабых полях $H \leq H_1$, где H_1 — первое критическое поле, векторы намагниченностей подрешеток расположены антипараллельно; результирующий момент M ориентирован по полю и равен разности $M_2 - M_1$. В сильных полях, $H_1 \leq H \leq H_2$, где H_1, H_2 — первое и второе критические поля, моменты M_1 и M_2 не совпадают по направлению с H , однако суммарный момент ориентирован по H . В очень сильных полях, $H \geq H_2$, моменты подрешеток ориентированы параллельно друг другу. Следует заметить, что, как и в случае антиферромагнетиков, величины $\mu H_1, \mu H_2$ (μ — магнитный момент узла) будут порядка энергии обменного взаимодействия, т. е. H_1 и H_2 будут порядка $10^6 - 10^7$ э (при $T < T_C$). На рис. 5 изображена зависимость намагниченности

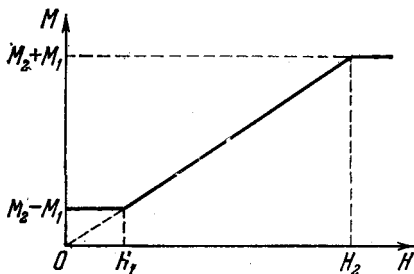


Рис. 5. Зависимость намагниченности изотропного двухподрешеточного ферримагнетика от внешнего поля для нуля температуры.

ферромагнетика от величины внешнего поля H для нуля температуры.

В опытах В. Е. Роде и А. В. Ведяева (1963) изучалась намагниченность медно-кадмиевого феррита $\text{Cu}_{0,8}\text{Cd}_{0,2}\cdot\text{Fe}_2\text{O}_3$, а также феррита-граната гадолиния $3\text{Gd}_2\text{O}_3\cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$ в сильных импульсных полях (до 220 кэ). У медно-кадмиевого феррита наблюдался линейный рост намагниченности с полем начиная со значения поля 110 кэ и у феррита-граната гадолиния — со значений поля 70 кэ, что интерпретировалось как переход через первое критическое поле H_1 .

В ферромагнетиках с числом подрешеток больше двух имеется интересная возможность существования при определенных условиях так называемой температуры компенсации T_K ($T_K < T_C$), при которой результирующая намагниченность обращается в нуль. Появление точки компенсации объясняется тем, что из-за разной температурной зависимости намагниченностей подрешеток их магнитные моменты при $T = T_K$ полностью компенсируют друг друга. Выше этой точки компенсация снова нарушается, и результирующий момент исчезает лишь в точке Кюри.

Выше точки Кюри ферромагнетики ведут себя как парамагнетики, при этом зависимость их восприимчивости от температуры определяется законом Кюри — Нееля:

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} + \frac{T}{C} - \frac{\Delta}{T - T_C}, \quad (1.5)$$

где χ_0 , Δ , C — некоторые постоянные.

Ферромагнетиками являются ферриты-шпинели, ферриты-гранаты, магнетоплюмбиты и многие другие вещества (см. литературу в прим. 1 на стр. 13).

Магнитные вещества со спиральными структурами. Возможные типы магнитных структур не исчерпываются простыми случаями, рассмотренными выше. У ряда веществ (редкоземельные элементы, соединения MnAu_2 , MnO_2 , $\text{Mn}_{2-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$ и, по-видимому, Cr) наблюдаются так называемые спиральные (или винтовые) структуры, в которых компоненты спиновых векторов периодически меняются при перемещении вдоль некоторого выделенного кристаллографического направления. Как правило,

они имеют одноосную симметрию. На рис. 6 приведены простейшие случаи спиральных структур. Случаи (а), (б) коллинеарного упорядочения ферромагнитного или антиферромагнитного типа включены по формальным соображениям, так как их можно рассматривать как вырожденные, когда при переходе к соседней плоскости спины поворачиваются на угол 0 или π соответственно.

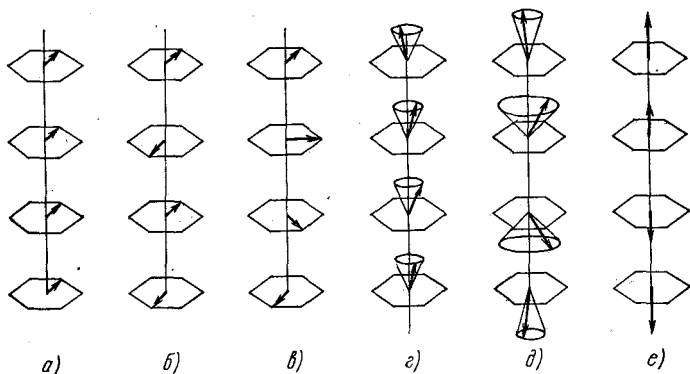


Рис. 6. Простейшие типы спиральных структур: а, б — коллинеарные структуры (ферромагнитная и антиферромагнитная); в — простая спираль; г — ферромагнитная спираль; д — циклоидальная структура; е — линейная спиновая волна.

Тип упорядочения в случае (в) называют простой или антиферромагнитной спиралью. В случае (г) z -компоненты спинов имеют фиксированное значение, тогда как две другие компоненты, лежащие в базисной плоскости, при смещении вдоль главной оси или меняются периодически, или остаются неупорядоченными. В случае (д) z -компонента меняется периодически, а две другие — как в предыдущем случае. Наконец, в случае (е) спины расположены вдоль главной оси, их z -компонента меняется периодически.

Из рассмотрения структур, приведенных на рис. 6, видим, что при учете спиральных структур возможен непрерывный переход от одних структур к другим и что, по существу, между ними нельзя установить резкого различия. По-видимому, более полной будет классификация, включающая число точек фазовых переходов.

Вещества со спиральными структурами имеют ряд особенностей, которые покажем на примере редкоземельных элементов. По данным нейтронографических исследований Tb, Dy, Ho, Er, Tm имеют две низкотемпературные фазы: при более низких температурах существует ферромагнитная фаза, а при более высоких — антиферромагнитная. Соответственно этому имеются две точки фазовых переходов: при температуре T_1 происходит переход из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное, при температуре T_2 — из антиферромагнитного состояния в парамагнитное. Спиральное упорядочение разрушается внешними полями при значениях H , больших некоторого критического H_c (см. табл. 4).

Таблица 4

Температуры фазовых переходов T_1 и T_2
и значения критических внешних полей H_c
для редкоземельных элементов *)

Редкоземельный элемент	T_1 , °К	T_2 , °К	H_c , э
Tb	219	230	200
Dy	85	179	11 000
Ho	20	133	18 000
Er	20	85	18 000
Tm	22	60	> 15 000

*) Приводятся по обзору К. П. Белова и др. (1964).

Ферромагнитная фаза, f , может осуществляться в структурах (а), (г) — (е), антиферромагнитная, a , — в структурах (б), (в), (д), (е). В табл. 5 приведены основные типы магнитных упорядочений для Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm. В ферромагнитной фазе Tm(f) спины направлены вдоль главной оси, при этом в четырех соседних плоскостях они направлены в одну сторону, а в трех следующих — в другую (эту структуру относим к случаю (е)).

Теория магнитных веществ с винтовыми структурами была разработана Йошимори (1959), Виллейном (1959),

Иосида и Мива (1961, а, б), Капланом (1961), Эллиоттом (1961) в предположении, что обменные интегралы между первыми, вторыми и третьими соседями различны по величине и знаку, в более детальных расчетах учитывалась одноосная анизотропия и анизотропия в базисной плоскости¹⁾. При этом были рассмотрены условия существования таких структур, их устойчивость и поведение при изменении температуры и внешнего поля.

Часто считают, что шаг винта в спиральных структурах несоизмерим с периодом кристаллографической решетки (см., например, В. Е. Найш (1963), И. Е. Дзялошинский (1964, а—в)).

Таблица 5

**Основные типы магнитных структур некоторых
редкоземельных элементов**

Столбцы соответствуют конфигурациям, изображенным на рис. 6; значок *f* обозначает ферромагнитную, *a* — антиферромагнитную фазу

Атомный номер	Элемент	Тип структуры					
		<i>a</i>	<i>б</i>	<i>в</i>	<i>г</i>	<i>д</i>	<i>е</i>
64	Gd	<i>f</i> <i>f</i> <i>f</i> <i>f</i>	<i>a</i> ?				
65	Tb						
66	Dy						
67	Ho						
68	Er						
69	Tm						

Представление о сильно магнитных веществах как о системах спинов, расположенных в узлах решетки, позволило получить ряд важных следствий, подтверждающихся на опыте. Однако в этой модели пренебрегается таким важным обстоятельством, как взаимодействие электронов незаполненных оболочек с электронами проводимости. В результате подобная упрощенная модель оказывается пригодной скорее для описания ферромагнитных диэлектриков, чем металлов. В рамках

¹⁾ См. также работы Эллиотта (1952), Нагамия и др. (1962, а, б), Херпина (1962), Каплана и Лайонса (1963).

ее оказывается невозможным дать объяснение ряду экспериментальных фактов, наблюдающихся в ферромагнитных металлах, например аномальному (по сравнению с обычными металлами) поведению электропроводности и теплоемкости, аномалиям гальваномагнитных явлений и некоторым другим. Более удовлетворительно эта модель описывает антиферромагнетики и ферримангнетики, являющиеся диэлектриками или полупроводниками.

В связи со сказанным представляет интерес вопрос о дробности магнитных моментов в монокристаллах $3d$ -металлов (Fe, Co, Ni), также не получивший достаточно полного объяснения¹⁾. Если рассматривать ферромагнитный $3d$ -металл как систему спиновых моментов незаполненных оболочек, то в предельном случае низких температур и достаточно больших внешних полей

Т а б л и ц а 6

Значения магнитных моментов атомов
некоторых переходных металлов *)

$\mu_{\text{св}}$ — в свободном состоянии, $\mu_{\text{кр}}$ — в кристалле

Элемент	$\mu_{\text{св}}, \mu_B$	$\mu_{\text{кр}}, \mu_B$
$3d$-металлы		
Cr	5	0,2—0,4
Mn	5	1,5
Fe	4	2,218
Co	3	1,715
Ni	2	0,604
$4f$-металлы		
Gd	7	7,12
Er	9	8—9

*) Приводятся по обзору С. В. Вонсовского и Ю. А. Изюмова (1962, а).

средняя намагниченность на один узел должна была бы совпадать с магнитными моментами свободных атомов или, по крайней мере, быть близкой к ним. В действи-

¹⁾ См. подробнее С. В. Вонсовский и Ю. А. Изюмов (1962, а, б).

тельности между этими величинами для ряда веществ имеются значительные различия. В табл. 6 приводятся магнитные моменты свободных атомов ($\mu_{\text{св}}$) и средние значения магнитных моментов на атом ($\mu_{\text{ср}}$) в кристаллах.

Из табл. 6 видим прежде всего, что для металлов с незаполненными $3d$ -оболочками $\mu_{\text{св}}$ и $\mu_{\text{ср}}$ заметно отличаются друг от друга, тогда как для металлов с незаполненными $4f$ -оболочками они довольно близки друг к другу. Далее, $\mu_{\text{ср}}$ значительно отклоняются от целочисленных (в единицах μ_B) значений для $3d$ -металлов и ближе к целочисленным значениям для $4f$ -металлов. В ферритах-шпинелях и ферритах-гранатах, являющихся полупроводниками или диэлектриками, средние значения $\mu_{\text{ср}}$ близки к значениям, рассчитанным по моментам свободных атомов (см. табл. 7).

Таблица 7

Значения магнитных моментов некоторых ферритов-шпинелей и ферритов-гранатов *)

(Значения магнитного момента отнесены на одну «молекулу»:
 $\mu_{\text{св}}$ — в свободном состоянии, $\mu_{\text{ср}}$ — в кристалле)

Соединение	$\mu_{\text{св}}, \mu_B$	$\mu_{\text{ср}}, \mu_B$
$\text{MnO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	5	4,40—5,00
$\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	4	4,03—4,08
$\text{CoO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	3	3,30—3,94
$\text{NiO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	2	2,22—2,40
$\text{CuO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	1	1,30—1,70
$\text{MgO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	0	0,86—2,20
$3\text{Y}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$	10	9,44
$3\text{Gd}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$	32	30,3
$3\text{Tb}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$	26	31,4
$3\text{Dy}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{Fe}_2\text{O}_3$	20	32,5

*) Приводятся по обзорам Гортера (1954) и А. С. Пахомова и Н. А. Смолькова (1962).

Можно думать, что значительное расхождение в величинах атомных и средних магнитных моментов и их дробность в $3d$ -металлах связаны, во-первых, с достаточно сильной коллективизацией электронов

незаполненных оболочек, делающей их подобными в какой-то мере коллективизированным электронам зоны проводимости, и, во-вторых, с взаимодействием электронов незаполненных и валентных оболочек друг с другом. Здесь, по-видимому, имеются значительные отклонения от предположений, при выполнении которых магнетики можно представлять в виде системы спинов, расположенных в узлах кристаллической решетки. Определенное подтверждение этому находим в аномально больших значениях электронной теплоемкости переходных металлов по сравнению с обычными металлами. В табл. 8 приведены для сравнения значения электронной теплоемкости непереходных и переходных металлов. Видно, что значения для переходных металлов от Fe до Pt много больше, чем для Li, Cu и Cd.

Таблица 8

Электронная теплоемкость непереходных и переходных металлов *)
(Приведены экспериментальные значения $C_{эл}$, измеренные при 1°K)

Элемент	Li	Cu	Cd	Fe	Co	Ni	Mn	Pd	Pt
$C_{эл} \cdot 10^{-3}$, дж/моль·град	1,75	0,686	0,71	5,0	5,0	7,3	15,8	13,0	6,6

*) Приводятся по обзору С. В. Вонсовского и Ю. А. Изюмова (1962, а).

Эти, а также и другие экспериментальные факты послужили основой для развития другого направления в теории сильного магнетизма — так называемой зонной теории магнетизма, в которой электроны незаполненных оболочек рассматриваются подобно электронам проводимости как полностью коллективизированные¹⁾. Зон-

¹⁾ Первые попытки создания зонной теории магнетизма принадлежат Я. И. Френкелю (1928) и Блоху (1929). Дальнейшее развитие зонная теория получила в работах Слэтера (1936), Стонера (1936), (1938), (1939), (1948), Мотта (1935), Херринга и Киттеля (1951), (1952, а, б), Бома и Пайнса (1951), (1953), Пайнса (1953), Пайнса и Бома (1952), Матцубары (1954), Шимицу (1960), С. В. Вонсовского и Л. Я. Кобелева (1961) и других авторов (см., например, Томпсон (1963, 1965)).

ная теория позволяет дать простое объяснение дробности магнитных моментов, аномально большим значениям электронных теплоемкостей и парамагнитных восприимчивостей $3d$ -металлов. В то же время она, в имеющихся вариантах, весьма недостаточно учитывает пространственную неоднородность электронной плотности, не может объяснить данные по измерению формфакторов и не дает количественного описания процессов рассеяния нейтронов и электронов на спиновых волнах. Можно думать, что зонная теория преувеличивает эффект коллективизации электронов, в результате чего теряется возможность объяснения части чисто магнитных свойств.

Наконец, можно отметить еще один, гибридный, вариант теории — так называемую $s-d$ -обменную модель С. В. Вонсовского (1946). В этой модели взаимодействие электронов незаполненных и валентных оболочек рассматривается как малое возмущение. В соответствии с этим приближенно считают, что d -электроны ответственны в основном за магнитные явления, а s -электроны — за явления, связанные с током¹⁾.

В этой модели взаимодействие s - и d -электронов считается малым, поэтому с ее помощью вряд ли можно дать объяснение таким фактам, как дробность средних атомных моментов $3d$ -металлов и аномалии электронной теплоемкости у переходных металлов²⁾.

Мы будем интересоваться главным образом магнитными явлениями и потому ограничимся исследованием гейзенберговской модели магнетиков.

¹⁾ Совершенно так же можно построить подобную модель для $4f$ -металлов; по аналогии ее следовало бы назвать $s-f$ -обменной моделью. Ниже, говоря об $s-d$ -обменной модели, мы будем понимать под ней и $s-f$ -обменную модель. Противное будет оговариваться только в случае необходимости.

²⁾ Дальнейшие усовершенствования теории и исследование следствий из нее можно найти в работах С. В. Вонсовского и Е. А. Турова (1953), Абрагамса (1954), Турова (1953), (1954), (1955, а, б), (1957), (1958), Е. А. Турова и С. В. Вонсовского (1953), Е. А. Турова и В. Г. Шаврова (1958), А. А. Бердышева и С. В. Вонсовского (1954), Ю. П. Ирхина и Е. А. Турова (1957), Иосиды (1957), Митчелла (1957), Касуи (1956), (1958), С. В. Вонсовского и Ю. А. Изюмова (1960), Н. А. Потапова и С. В. Тябликова (1960), Тахир-Кели и тер Хаара (1963), В. Г. Барьяхтара и С. В. Пелетминского (1960) и др. (современное состояние см. С. В. Вонсовский (1971), гл. 20).

§ 2. Элементы феноменологической теории¹⁾

В дальнейшем мы будем заниматься в основном следующими двумя группами вопросов теории магнетизма: во-первых, вопросами определения зависимостей от температуры и поля статических характеристик магнитных материалов (например, намагниченности) и, во-вторых, вопросами, относящимися к теории ферромагнитного резонанса. Поэтому приведем здесь некоторые положения и формулировки классической теории магнетизма, которыми позднее будем пользоваться. Это тем более полезно, что впоследствии мы переведем их на язык квантовомеханических представлений.

Для простоты изложения в этом параграфе ограничимся случаем ферромагнетиков. Распространение соответствующих положений на случаи антиферромагнетиков и ферримангнетиков не представляет принципиальных трудностей и потому здесь не приводится.

Прежде всего представляет интерес установление выражения для плотности свободной энергии ферромагнетика, поскольку по ней легко определить его основные характеристики.

Свободная энергия складывается из нескольких величин. Прежде всего в нее дает вклад обменное взаимодействие.

Будем характеризовать вещество спиновой плотностью — спиновым моментом на единицу объема. Если при этом ограничиться учетом колебаний с длиной волны, много большей расстояния между соседними спинами, то спиновую плотность можно рассматривать как непрерывную функцию точки пространства. Заметим, что этот переход к непрерывному распределению спинов подобен предельному переходу от дискретного распределения масс к непрерывному в теории колебаний кристаллических решеток и соответствует дебаевскому приближению. Рассмотрим, например, выражение для обменной энергии квазиклассической модели²⁾. Совер-

¹⁾ Более подробное изложение вопросов феноменологической теории см. в монографиях: Н. С. Акулов (1939), С. В. Вонсовский и Я. С. Шур (1948), С. В. Вонсовский (1952), (1971), К. П. Белов (1951), (1959), Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц (1959).

²⁾ См., например, Е. А. Туров (1963).

шая в нем предельный переход от дискретного распределения спинов к непрерывному, мы получим:

$$F_{\text{обм}} = -\frac{1}{2} N I z \left(\frac{M}{M_0} \right)^2 + \frac{N I}{2a} \sum_{\alpha} (\nabla \gamma^{\alpha})^2, \quad (2.1)$$

где M — намагниченность при температуре T , M_0 — намагниченность насыщения, a — постоянная решетки, N — число атомов в решетке, I — значение обменного интеграла для ближайших соседей, z — их число, γ — единичный вектор в направлении вектора M .

Далее следует учесть вклад в энергию ферромагнетика от внешних полей. Он равен, очевидно,

$$F_{\pi} = -(H, M). \quad (2.2)$$

В образце конечных размеров на поверхности (и внутри, если намагниченность неоднородна) возникают магнитные заряды, создающие поля, пропорциональные намагниченности и направленные навстречу ей. Эти так называемые размагничивающие поля H_{∞} также дают свой вклад в свободную энергию ферромагнетика; величина его существенно зависит от геометрии образца.

В общем случае связь между H_{∞} и M имеет тензорный характер:

$$H_{\infty}^{\alpha} = - \sum_{\beta} N_{\alpha\beta} M^{\beta}; \quad (2.3)$$

величины $N_{\alpha\beta}$ называются размагничивающими факторами. В случае тел в виде трехосного эллипсоида, диска и длинного цилиндра у тензора $N_{\alpha\beta}$ отличны от нуля только диагональные элементы. Плотность энергии размагничивающего поля равна

$$F_{\text{разм}} = -\frac{1}{2} (H_{\infty}, M) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} N_{\alpha\beta} M^{\alpha} M^{\beta}. \quad (2.4)$$

Магнитные материалы, как правило, обладают анизотропией магнитных свойств. Это связано с зависимостью свободной энергии ферромагнетика от ориентации вектора намагниченности относительно осей кристаллической решетки. Поэтому в свободной энергии кристалла должно иметься слагаемое, зависящее от направляющих косинусов γ вектора намагниченности;

кроме того, оно может зависеть также от компонент тензора деформаций. Наличие такого слагаемого в свободной энергии позволяет объяснить явление магнитострикции — изменение формы и размеров образца в зависимости от ориентации вектора намагниченности относительно кристаллографических осей. Соответствующее слагаемое будем называть магнито-упругой частью свободной энергии:

$$F_{\text{м. у}} = F_{\text{м. у}}(\gamma, A). \quad (2.5)$$

Разложим (2.5) в ряд по степеням деформаций:

$$F_{\text{м. у}} = F_{\text{ан}}(\gamma) + \sum F^{ik}(\gamma) A_{ik} + \\ + \sum F^{ik, lm}(\gamma) A_{ik} A_{lm} + \dots \quad (2.6)$$

Первое слагаемое в (2.6) зависит только от направляющих косинусов вектора намагниченности и носит название свободной энергии магнитно-кристаллографической анизотропии. Представим теперь $F_{\text{ан}}(\gamma)$ в виде степенной формы от γ . Величины γ могут входить в формулу $F_{\text{ан}}(\gamma)$ только в виде инвариантных комбинаций, допускаемых симметрией решетки.

Для кристаллов кубической симметрии свободная энергия анизотропии может быть записана следующим образом ¹⁾:

$$F_{\text{ан}} = K_1(\gamma_1^2\gamma_2^2 + \gamma_2^2\gamma_3^2 + \gamma_3^2\gamma_1^2) + K_2\gamma_1^2\gamma_2^2\gamma_3^2 + \\ + K_3(\gamma_1^2\gamma_2^2 + \gamma_2^2\gamma_3^2 + \gamma_3^2\gamma_1^2)^2 + \dots \quad (2.7)$$

Для кристаллов гексагональной симметрии

$$F_{\text{ан}} = K'_1\gamma_3^2 + K'_2\gamma_3^4 + \dots \quad (2.8)$$

(здесь γ_3 — косинус угла между вектором намагниченности и гексагональной осью кристалла).

Постоянные K_1, K_2, \dots и K'_1, K'_2, \dots носят название первой, второй и т. д. констант анизотропии. Абсолютные значения констант магнито-кристаллографиче-

¹⁾ Замечая, что $\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_3^2 = 1$, выражение (2.7) можно записать в эквивалентном виде:

$$F_{\text{ан}} = \frac{1}{2} K_1 - \frac{1}{2} K_1(\gamma_1^4 + \gamma_2^4 + \gamma_3^4) + \dots$$

ской анизотропии обычно убывают с ростом их порядкового номера.

Второе слагаемое в (2.6) связывает изменения магнитных и упругих величин и носит название свободной энергии магнитострикции:

$$F_{\text{м.с}} = \sum F^{ik}(\gamma) A_{ik}. \quad (2.9)$$

Обычно величины $F^{ik}(\gamma)$ также представляют в виде ряда по степеням γ , ограничиваясь первыми членами разложений.

Если в последнем слагаемом выражения (2.6) пренебречь зависимостью коэффициентов разложения от направляющих косинусов, то оно превратится в обычное выражение для энергии упругой деформации:

$$F_{\text{упр}} = \sum F^{ik, lm}(0) A_{ik} A_{lm}. \quad (2.10)$$

Ферромагнетик, помещенный в переменное магнитное поле, может поглощать из него энергию. При определенных условиях поглощение имеет резонансный характер: оно резко возрастает, когда частота переменного поля приближается к некоторой частоте, характерной для данного образца¹⁾. Обычно для исследования ферромагнитного резонанса на образец, кроме переменного поля $h(t)$, накладывают еще постоянное, подмагничивающее поле H_0 ; при этом имеет место так называемый резонанс во внешних полях. Но если образец обладает магнито-кристаллографической анизотропией, то резонансное поглощение может наблюдаться и при $H_0 = 0$. В этом случае говорят о естественном резонансе.

Переменное поле выводит спиновые моменты из равновесных положений, и они начинают прецессировать вокруг направления подмагничивающего поля (или поля анизотропии — в случае естественного резонанса) с частотой переменного поля. Резкое увеличение поглощения наблюдается при частотах переменного поля, близких к частоте свободной прецессии или резонансной частоте.

¹⁾ Классическая теория ферромагнитного резонанса подробно изложена в статье Г. В. Скроцкого и Л. В. Курбатова (сборник (1961)) и книгах А. Г. Гуревича (1960), (1973), а также Сликтера (1967).

Результирующий эффект состоит в появлении у вектора намагниченности составляющей δM , пропорциональной амплитуде переменного поля:

$$\delta M(t) = \chi h(t). \quad (2.11)$$

Такая зависимость имеет место только в случае слабых полей. В сильных полях δM зависит от h нелинейно¹⁾. Величина χ имеет тензорный характер и называется тензором комплексной магнитной восприимчивости. Вообще говоря, нужно учитывать, что полное поле, действующее на M , является суммой внешнего и внутреннего полей:

$H_{\text{полн}} = -\frac{\partial F}{\partial M}$, где F — свободная энергия образца. Характер явления ферромагнитного резонанса существенно зависит от вида внутреннего поля, связанного, в частности, с размагничивающими факторами и анизотропией.

При феноменологическом подходе мы можем установить только общий вид выражения для свободной энергии. В тех случаях, когда требуется найти конкретный вид каких-либо зависимостей, например зависимость констант анизотропии от температуры, необходимо использовать конкретные модельные представления о системе. В дальнейшем нашей задачей будет вычисление термодинамических характеристик системы по ее гамильтониану.

¹⁾ При достаточно больших значениях h , превышающих пороговое, в образце могут возникать неустойчивости, вызванные параметрическим возбуждением магнонов (так называемые явления продольной и поперечной накачки; см. работы Сула (1956), (1957), Шлёмана и др. (1960), а также В. Е. Захарова, В. С. Львова и С. С. Старобинца (1969), В. Г. Морозова (1971) и Загури и Резенде (1971)). Наличие нелинейности ведет также к появлению кратных резонансов (см., например, А. Б. Петровский (1972)); подробное изложение этого круга вопросов можно найти в монографии Я. А. Моносова (1971) (*Прим. ред.*).

СПИНОВЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ

Ниже излагается вспомогательный математический аппарат, необходимый в дальнейшем (метод вторичного квантования и диагонализация форм, квадратичных в операторах вторичного квантования). Далее обсуждаются условия, при которых истинный гамильтониан системы может быть сведен к спиновому гамильтониану гейзенберговского вида, и рассматриваются типичные спиновые гамильтонианы.

§ 3. Вторичное квантование ¹⁾

При исследовании задачи многих тел в квантовой механике весьма эффективным является использование представления вторичного квантования для операторов и волновых функций. Мы напомним здесь основные идеи метода вторичного квантования, поскольку в дальнейшем будем широко им пользоваться. С общими представлениями метода можно ознакомиться по любому достаточно полному курсу квантовой механики, например Д. И. Блохинцева (1963), Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963), (1974).

Рассмотрим систему N тождественных частиц. Через x_i ($i = 1, 2, \dots, N$) обозначим совокупность координат i -й частицы, например трех декартовых координат и спиновой переменной. Через \mathcal{H} обозначим гамильтониан системы. Для наглядности примем, что \mathcal{H} имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = \sum_i T(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi(i, j), \quad (3.1)$$

¹⁾ См. В. А. Фок (1932), (1957), Н. Н. Боголюбов (1949).

где $T(i)$ — гамильтониан i -й «свободной» частицы, являющийся суммой операторов кинетической энергии и энергии частицы во внешних полях (если последние имеются); $\Phi(i, j)$ — энергия взаимодействия i -й и j -й частиц.

В принципе задача описания поведения системы считается решенной, если удастся найти решение уравнения Шредингера:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H} \psi. \quad (3.2)$$

Для упрощения записи решения воспользуемся тождественностью частиц. Введем полную ортонормированную систему одночастичных функций $\{\varphi_f(x)\}$; например, это могут быть собственные функции гамильтониана свободной частицы $T(x)$; тогда f можно интерпретировать как номер одночастичного состояния. Разложим произвольную волновую функцию ψ в ряд Фурье по функциям φ_f :

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{f_1, \dots, f_N} \psi(f_1, \dots, f_N) \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N). \quad (3.3)$$

Волновая функция $\psi(x_1, \dots, x_N)$ должна быть симметричной относительно перестановок частиц, если частицы подчиняются статистике Бозе, и антисимметричной, если частицы подчиняются статистике Ферми. Следовательно, и фурье-образ $\psi(f_1, \dots, f_N)$ волновой функции должен быть либо симметричной, либо антисимметричной функцией относительно перестановки индексов f .

Рассмотрим случай статистики Бозе. Обозначим через P оператор перестановки частиц. Умножим обе части равенства (3.3) на P и просуммируем по всем возможным перестановкам P :

$$\begin{aligned} \sum_P P \psi(x_1, \dots, x_N) &= \\ &= \sum_{f_1, \dots, f_N} \psi(f_1, \dots, f_N) \sum_P P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N). \end{aligned}$$

Так как $\psi(x_1, \dots, x_N)$ симметрична относительно перестановок частиц, то $P \psi(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_N)$ и в

результате получим

$$\begin{aligned} \psi(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sum_{f_1, \dots, f_N} \frac{\psi(f_1, \dots, f_N)}{\sum_P 1} \varphi_{f_1 \dots f_N}^{(s)}(x_1, \dots, x_N), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где $\sum_P 1 = N!$ — число всех перестановок N частиц, включая тривиальную, $\varphi_{f_1 \dots f_N}^{(s)}$ — симметризованное произведение одночастичных функций:

$$\varphi_{f_1 \dots f_N}^{(s)}(x_1, \dots, x_N) = \sum_P P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N). \quad (3.5)$$

Таким образом, любая симметричная волновая функция N переменных может быть разложена в ряд Фурье по симметризованным произведениям одночастичных функций вида (3.5). В этом смысле система функций (3.5) является полной.

В силу тождественности частиц не существенно, какие именно частицы находятся, например, в состоянии f_i . Играет роль лишь общее число частиц n_{f_i} в этом состоянии. Поэтому функции (3.5) можно нумеровать, задавая значения чисел n_f для каждого одночастичного состояния. Далее можно показать, что функции (3.5) ортогональны и что из них может быть построена ортонормированная система функций:

$$\begin{aligned} \psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sqrt{\frac{\prod_f (n_f)!}{N!}} \varphi_{f_1 \dots f_N}^{(s)}(x_1, \dots, x_N), \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \int \psi_{\dots n_f \dots}^{*(s)}(x_1, \dots, x_N) \psi_{\dots n'_f \dots}^{(s)}(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N = \\ = \prod_f \Delta(n_f - n'_f), \end{aligned}$$

где $\Delta(n - n') = 1$, если $n = n'$, и $\Delta(n - n') = 0$, если $n \neq n'$. Система (3.6) также будет полной в пространстве симметричных волновых функций. Очевидно, что функция $\psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}$ (3.6) описывает состояние системы N

свободных частиц, в котором в одночастичном состоянии f_1 находится n_{f_1} частиц, в состоянии f_2 — n_{f_2} частиц и т. д. Числа n_f называются числами заполнений и могут принимать любые целые положительные значения:

$$n_f = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.7)$$

при дополнительном условии, что общее число занятых одночастичных состояний равно числу частиц в системе:

$$\sum_f n_f = N. \quad (3.8)$$

Номером волновой функции (3.6) будет являться совокупность чисел заполнений $\{\dots n_f \dots\}$. Поэтому разложение произвольной волновой функции в ряд Фурье по функциям (3.6) имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x_1, \dots, x_N) &= \\ &= \sum_{\dots n_f \dots} C(\dots, n_f, \dots) \psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}(x_1, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Представление волновых функций в виде (3.9) называется представлением вторичного квантования, а функции $C(\dots, n_f, \dots)$ от чисел заполнений (коэффициенты Фурье) называются волновыми функциями в представлении вторичного квантования.

В случае статистики Ферми умножим (3.3) на $(-1)^{PP}$ и просуммируем по всем P (по определению $(-1)^P$ равна 1, если перестановка P четная, и -1 , если перестановка P нечетная). Так как $\psi(x_1, \dots, x_N)$ антисимметрична, то

$$(-1)^{PP} \psi(x_1, \dots, x_N) = \psi(x_1, \dots, x_N)$$

и в результате получаем выражение вида

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{f_1, \dots, f_N} \frac{\psi(f_1, \dots, f_N)}{\sum_P 1} \varphi_{f_1 \dots f_N}^{(a)}(x_1, \dots, x_N), \quad (3.10)$$

где $\varphi_{f_1}^{(a)} \dots f_N$ — антисимметризованное произведение одночастичных функций

$$\begin{aligned} \varphi_{f_1}^{(a)} \dots f_N(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sum_P (-1)^P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N) = \text{Det} \|\varphi_{f_r}(x_s)\|; \end{aligned} \quad (3.11)$$

порядок индексов f в (3.10) считается фиксированным. Функции (3.11) ортогональны; из них точно так же может быть построена система нормированных функций:

$$\begin{aligned} \psi_{\dots n_f \dots}^{(a)}(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sqrt{\frac{\prod_f (n_f!)}{N!}} \varphi_{f_1}^{(a)} \dots f_N(x_1, \dots, x_N). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Числа заполнения n_f в этом случае могут принимать только два значения:

$$n_f = 0, 1, \quad (3.13)$$

так как если хотя бы две частицы находятся в одном и том же состоянии, то функция (3.11) [или (3.12)] тождественно обращается в нуль (две строки в детерминанте (3.11) совпадают); для чисел заполнения имеет место очевидное дополнительное условие:

$$\sum_f n_f = N. \quad (3.14)$$

Представление вторичного квантования для волновых функций в случае статистики Ферми имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sum_{\dots, n_f, \dots} C(\dots, n_f, \dots) \psi_{\dots n_f \dots}^{(a)}(x_1, \dots, x_N), \end{aligned} \quad (3.15)$$

где $C(\dots, n_f, \dots)$ — волновая функция в представлении вторичного квантования для случая статистики Ферми, ее аргументы n_f принимают значения 0 и 1.

Пусть функции $\psi(x_1, \dots, x_N)$ нормированы, тогда из ортогональности и нормировки функций $\psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}$ (3.6)

или $\psi^{(a)}_{\dots n_f \dots}$ (3.12) следует, что в обоих случаях:

$$\int |\psi(x_1, \dots, x_N)|^2 dx_1 \dots dx_N = \sum_{\dots, n_f, \dots} |C(\dots, n_f, \dots)|^2. \quad (3.16)$$

Следовательно, величину $|C(\dots, n_f, \dots)|^2$ можно интерпретировать как вероятность пребывания системы в состоянии, характеризующемся данным набором чисел заполнений $\{\dots, n_f, \dots\}$ одночастичных состояний.

Установим теперь правила, по которым операторам в координатном пространстве сопоставляются соответствующие операторы в представлении вторичного квантования.

Чтобы оператор был определен полностью, необходимо также указать пространство функций, на котором он задан. Поэтому, говоря ниже об операторах, мы будем подразумевать, что они заданы на пространстве симметричных волновых функций, если имеем дело с системами бозе-частиц, и на пространстве антисимметричных функций, если имеем дело с системами ферми-частиц.

Рассмотрим одночастичные, двухчастичные и т. д. операторы (т. е. операторы, зависящие от координат индивидуальных частиц, пар частиц и т. д.):

$$\mathcal{A}_1 = \sum_{1 \leq i \leq N} \mathcal{A}_1(i), \quad \mathcal{A}_2 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \mathcal{A}_2(i, j), \dots, \quad (3.17)$$

где $\mathcal{A}(i)$, $\mathcal{A}(i, j)$, ... — операторы, зависящие от координат i -й частицы, i -й и j -й частиц и т. д. В координатном представлении они будут описываться матрицами:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1(i) &= \mathcal{A}_1(x_i | x'_i) \prod_{r \neq i} \delta(x_r - x'_r), \\ \mathcal{A}_2(i, j) &= \mathcal{A}_2(x_i, x_j | x'_j, x'_i) \prod_{r \neq i, j} \delta(x_r - x'_r), \end{aligned} \quad (3.18)$$

где $\delta(x - x')$ — δ -функция Дирака. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением одночастичных и двухчастичных операторов; обобщение на более сложные случаи очевидно.

Для сокращения записи обозначим через x совокупность координат всех частиц и через n совокупность чисел заполнений, нумерующих функции (3.6) или (3.12):

$$x = \{x_1, \dots, x_N\}, \quad n = \{\dots, n_j, \dots\}.$$

В силу полноты системы функций $\{\varphi_f(x)\}$ формулы (3.17) — (3.18) можно переписать в следующем виде ¹⁾:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1 &= \mathcal{A}_1(x, x') = \sum_{f, f'} A_1(f | f') \sum_i \varphi_f(x_i) \varphi_{f'}^*(x'_i) \prod_{r \neq i} \delta(x_r - x'_r), \\ \mathcal{A}_2 &= \mathcal{A}_2(x, x') = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, f'_2, f'_1} A_2(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) \sum_{i, j} \varphi_{f_1}(x_i) \varphi_{f_2}(x_j) \times \\ &\quad \times \varphi_{f'_2}^*(x_j) \varphi_{f'_1}^*(x_i) \prod_{r \neq i, j} \delta(x_r - x'_r), \end{aligned} \quad (3.19)$$

где

$$A_1(f | f') = \int \varphi_f^*(x) A_1(x | x') \varphi_{f'}(x') dx dx',$$

$$\begin{aligned} A_2(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) &= \int \varphi_{f_1}^*(x_1) \varphi_{f_2}^*(x_2) A_2(x_1, x_2 | x'_2, x'_1) \times \\ &\quad \times \varphi_{f'_2}(x'_2) \varphi_{f'_1}(x'_1) dx_1 \dots dx'_1. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Совершим теперь с помощью обычных формул преобразований переход от координатного представления для операторов \mathcal{A}_1 и \mathcal{A}_2 к представлению вторичного квантования.

Рассмотрим какой-либо оператор \mathcal{A} (например, \mathcal{A}_1 или \mathcal{A}_2) в координатном представлении. По определению, в результате действия оператора $\mathcal{A}(x, x')$ на какую-то функцию $\psi(x)$ получим новую функцию $\psi'(x)$

$$\int \mathcal{A}(x, x') \psi(x') dx' = \psi'(x). \quad (3.21)$$

¹⁾ Эквивалентность формул (3.17) — (3.18) и (3.19) — (3.20) легко проверить, если принять во внимание, что

$$\sum_f \varphi_f^*(x) \varphi_f(x') = \delta(x - x').$$

Разложим функции ψ, ψ' по полной ортонормированной системе (3.6) или (3.12) и подставим в предыдущее равенство:

$$\sum_{n'} \int \mathcal{A}(x, x') \psi_{n'}(x') dx' C(n') = \sum_{n''} \psi_{n''}(x) C'(n'').$$

Умножим это равенство слева на $\psi_n^*(x)$ и проинтегрируем по x . В силу ортонормированности функций $\psi_n(x)$ получим:

$$\sum_{n'} \mathcal{A}(n, n') C(n') = C'(n), \quad (3.22)$$

где

$$\mathcal{A}(n, n') = \int \psi_n^*(x) \mathcal{A}(x, x') \psi_{n'}(x') dx dx'. \quad (3.23)$$

Матрица $\mathcal{A}(n, n')$ преобразует волновую функцию в представлении вторичного квантования $C(n)$ в некоторую другую функцию $C'(n)$. Поэтому выражение (3.23) можно рассматривать как запись оператора \mathcal{A} в представлении вторичного квантования.

В соответствии с (3.23) выражения для операторов $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ в представлении вторичного квантования имеют вид

$$\mathcal{A}_1(n, n') = \sum_{f, f'} A(f | f') a_{f'f}(n, n'),$$

$$\mathcal{A}_2(n, n') = \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, f'_2, f'_1} A(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) a_{f'_1 f'_2 f_2 f_1}(n, n'), \quad (3.24)$$

где величины

$$\begin{aligned} a_{f'f}(n, n') &= N \int \psi_{\dots n_f}^* \dots (x_1, x_2, \dots, x_N) \varphi_f(x_1) \varphi_{f'}^*(x'_1) \times \\ &\quad \times \psi_{\dots n'_f} \dots (x'_1, x_2, \dots, x_N) dx'_1 dx_1 \dots dx_N, \\ a_{f'_1 f'_2 f_2 f_1}(n, n') &= N(N-1) \int \psi_{\dots n_f}^* \dots (x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) \times \\ &\quad \times \varphi_{f_1}(x_1) \varphi_{f_2}(x_2) \varphi_{f'_2}^*(x'_2) \varphi_{f'_1}^*(x'_1) \times \\ &\quad \times \varphi_{\dots n'_f} \dots (x'_1, x'_2, x_3, \dots, x_N) dx'_1 dx'_2 dx_1 \dots dx_N \end{aligned} \quad (3.25)$$

рассматриваются как некоторые новые операторы в представлении вторичного квантования.

Можно показать непосредственными расчетами (см. Н. Н. Боголюбов (1949)), что величины (3.25) выражаются через матричные элементы от произведений операторов, которые, действуя на функции от чисел заполнения, меняют их аргументы на единицу.

В случае системы бозе-частиц для величин (3.25) получим выражения:

$$\begin{aligned} a_{ff}(n, n') &= \{\beta_f^+ \beta_f\}_{nn'}, \\ a_{f_1' f_2' f_2 f_1}(n, n') &= \{\beta_{f_1}^+ \beta_{f_2}^+ \beta_{f_2} \beta_{f_1}\}_{nn'}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

операторы β, β^+ удовлетворяют перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} \beta_f \beta_{f'}^+ - \beta_{f'}^+ \beta_f &= \Delta(f - f'); \quad \beta_f \beta_{f'} - \beta_{f'} \beta_f = 0, \\ n_f &= \beta_f^+ \beta_f = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.27)$$

Операторы β_f и β_f^+ — сопряженные, оператор n_f — самосопряженный. Матричные элементы операторов β, β^+ имеют вид

$$\begin{aligned} \{\beta_f\} \dots n_f \dots; \dots n_f' \dots &= \{\beta_f^+\} \dots n_f' \dots; \dots n_f \dots = \\ &= \sqrt{n_f'} \Delta(n_f' - n_f - 1) \prod_{g \neq f} \Delta(n_f - n_g). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Соотношения вида (3.27) называются бозевскими перестановочными соотношениями, а операторы, им удовлетворяющие, — бозе-операторами.

Для доказательства разложим функцию (3.6) в ряд Фурье по одночастичным функциям $\varphi_g(x_1)$. Величина (3.5), как функция переменной x_1 , является линейной комбинацией функций $\varphi_{f_1}(x_1), \varphi_{f_2}(x_1), \dots, \varphi_{f_N}(x_1)$. Поэтому коэффициенты разложения будут симметризованными произведениями вида

$$\varphi_{\bar{f}_2}(x_2) \varphi_{\bar{f}_3}(x_3) \dots \varphi_{\bar{f}_N}(x_N),$$

где $(\bar{f}_2, \dots, \bar{f}_N)$ получается из совокупности индексов (f_1, f_2, \dots, f_N) вычеркиванием одного, равного g . Поэтому функцию (3.5) можно записать в виде

$$\varphi_{f_1 \dots f_N}^{(s)} = \sum_g \varphi_g(x_1) \varphi_{\bar{f}_2 \dots \bar{f}_N}(x_2, \dots, x_N).$$

Используя полученное выражение, запишем (3.6) следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}(x_1, \dots, x_N) = \\ = \sum_g V \sqrt{\frac{\bar{n}_g \prod_f (\bar{n}_f)!}{N(N-1)!}} \varphi_g(x_1) \varphi_{\bar{f}_2, \dots, \bar{f}_N}^{(s)}(x_2, \dots, x_N), \end{aligned}$$

где $(\dots \bar{n}_f \dots)$ получается из набора чисел заполнений $(\dots n_f \dots)$ заменой n_g на $n_g - 1$. По определению,

$$V \sqrt{\frac{\prod_f (\bar{n}_f)!}{(N-1)!}} \varphi_{\bar{f}_2, \dots, \bar{f}_N}^{(s)}(x_2, \dots, x_N) = \psi_{\dots \bar{n}_f \dots}^{(s)}(x_2, \dots, x_N).$$

Следовательно, искомое разложение имеет вид

$$\psi_{\dots n_f \dots}^{(s)}(x_1, \dots, x_N) = \sum_g V \sqrt{\frac{n_g}{N}} \varphi_g(x_1) \psi_{\dots \bar{n}_f \dots}^{(s)}(x_2, \dots, x_N).$$

Нетрудно видеть, что интегралы по x_1 и x'_1 в (3.25) представляют собой не что иное, как коэффициенты Фурье для функций $\psi_{\dots n_f \dots}^*$ и $\psi_{\dots n'_f \dots}$. Следовательно,

$$\begin{aligned} a_{f'f}(n, n') &= V \sqrt{n_f n_{f'}} \int \psi_{\dots \bar{n}_f \dots}^{*(s)}(x_2, \dots, x_N) \times \\ &\quad \times \psi_{\dots \bar{n}'_f \dots}^{(s)}(x_2, \dots, x_N) dx_2 \dots dx_N = \\ &= V \sqrt{n_f n_{f'}} \prod_{\bar{f}} \Delta(n_{\bar{f}} - \bar{n}'_{\bar{f}} - \Delta(\bar{f} - f) + \Delta(\bar{f} - f')). \end{aligned}$$

Примем во внимание, что при $f = f'$

$$a_{ff}(n, n') = n_f \prod_{\bar{f}} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}) = n_f \{1\}_{n, n'},$$

тогда как при $f' \neq f$

$$\begin{aligned} a_{f'f}(n, n') &= V \sqrt{n_f n'_{f'}} \Delta(n_f - n'_{f'} - 1) \Delta(n_{f'} - n'_{f'} + 1) \times \\ &\quad \times \prod_{\bar{f} \neq \bar{f}', \bar{f}'} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}) = V \sqrt{n_f} V \sqrt{n_{f'} + 1} \Delta(n_f - n'_{f'} + 1) \times \\ &\quad \times \Delta(n_{f'} - n'_{f'} + 1) \prod_{\bar{f} \neq \bar{f}', \bar{f}'} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}). \end{aligned}$$

Введем теперь операторы β_f , β_f^+ , которые в матричном представлении имеют вид

$$\{\beta_f\}_{n, n'} = \sqrt{1 + n_f} \Delta(n_f - n'_f + 1) \prod_{\bar{f} \neq f} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}),$$

$$\{\beta_f^+\}_{n, n'} = \sqrt{n_f} \Delta(n_f - n'_f - 1) \prod_{\bar{f} \neq f} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}});$$

эти операторы можно также ввести, определив их действие на функции от чисел заполнения

$$\beta_f F(n_f) = \sqrt{1 + n_f} F(n_f + 1),$$

$$\beta_f^+ F(n_f) = \sqrt{n_f} F(n_f - 1).$$

В результате формула для $a_{f'f}(n, n')$ преобразуется к виду

$$a_{f'f}(n, n') = \sqrt{n_f} \Delta(n_f - n'_f - 1) \prod_{\bar{f} \neq f, f'} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}) \times$$

$$\times \sqrt{1 + n_{f'}} \Delta(n_{f'} - n'_{f'} + 1) \prod_{\bar{f} \neq f, f'} \Delta(n_{\bar{f}} - n'_{\bar{f}}) = \{\beta_f^+ \beta_{f'}\}_{n, n'}.$$

Этим заканчивается вывод первого из соотношений (3.26).

Для установления второго соотношения рассмотрим произведение двух произвольных динамических величин аддитивного типа

$$\sum_{1 \leq i \leq N} A(i) \sum_{1 \leq j \leq N} B(j) \equiv$$

$$\equiv \sum_{1 \leq i \leq N} A(i) B(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \{A(i) B(j) + A(j) B(i)\}.$$

Перейдем в этом тождестве к представлению вторичного квантования, используя формулы (3.24); будем иметь

$$\sum_{f_1, f'_1} A(f_1, f'_1) a_{f'_1 f_1} \sum_{f_2, f'_2} B(f_2, f'_2) a_{f'_2 f_2} =$$

$$= \sum_{f_1, f'_1, f'_2} A(f_1, f'_1) B(f'_1, f'_2) a_{f'_2 f_1} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, f'_2, f'_1} \{A(f_1, f'_1) B(f_2, f'_2) + A(f_2, f'_2) B(f_1, f'_1)\} a_{f'_2 f_2 f'_1 f_1}.$$

Примем во внимание, что из определения (3.25) операторов $a_{f_1' f_2' f_1}$ следует условие симметрии $a_{f_1' f_2' f_1} = a_{f_2' f_1' f_2}$, и перепишем предыдущее равенство в виде

$$\sum A(f_1, f_1') B(f_2, f_2') \{a_{f_1' f_1} a_{f_2' f_2} - \Delta(f_1' - f_2) a_{f_2' f_1} - a_{f_1' f_2' f_2} f_1\} = 0.$$

В силу произвольности величин A, B имеем

$$a_{f_1' f_2' f_1} = a_{f_1' f_1} a_{f_2' f_2} - \Delta(f_1' - f_2) a_{f_2' f_1}.$$

Подставляя сюда выражения для $a_{f' f}$ через $\beta_f^+ \beta_{f'}$, получаем окончательно

$$\begin{aligned} a_{f_1' f_2' f_1}(n, n') &= \left\{ \beta_{f_1}^+ \beta_{f_1'} \beta_{f_2}^+ \beta_{f_2'} - \Delta(f_2' - f_2) \beta_{f_1}^+ \beta_{f_2'} \right\}_{nn'} = \\ &= \left\{ \beta_{f_1}^+ \beta_{f_2}^+ \beta_{f_2'} \beta_{f_1'} \right\}_{nn'}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом можно получить представление величины $a_{f_1' \dots f_s' f_s \dots f_1}(n, n')$ через операторы вторичного квантования β_f, β_f^+ из (3.27) — (3.28).

В случае системы ферми-частиц будем соответственно иметь:

$$\begin{aligned} a_{f' f}(n, n') &= \{ \alpha_f^+ \alpha_{f'} \}_{nn'}, \\ a_{f_1' f_2' f_1}(n, n') &= \left\{ \alpha_{f_1}^+ \alpha_{f_2}^+ \alpha_{f_2'} \alpha_{f_1'} \right\}_{nn'}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

и перестановочные соотношения для операторов α, α^+ :

$$\begin{aligned} \alpha_f \alpha_{f'}^+ + \alpha_{f'}^+ \alpha_f &= \Delta(f - f'), \quad \alpha_f \alpha_{f'} + \alpha_{f'} \alpha_f = 0, \\ n_f &= \alpha_f^+ \alpha_f = 0, 1; \end{aligned} \quad (3.30)$$

операторы α_f и α_f^+ также являются взаимно сопряженными, а n_f — самосопряженным. Соотношения вида (3.30) называются фермиевскими перестановочными соотношениями, а операторы α, α^+ , им удовлетворяющие, — ферми-операторами.

Формулы (3.29) — (3.30) можно установить таким же путем, как и в случае бозе-частиц.

Из приведенных формул можно видеть, что оператор β_f (или α_f), действуя на функцию от чисел заполнений, уменьшает ее аргумент n_f на единицу, а оператор β_f^+ (или α_f^+) увеличивает на единицу. Поэтому их называют операторами уничтожения и порождения частиц соответственно. Далее видим, что действие оператора β_f (или α_f) на функцию с аргументом $n_f = 0$ дает нуль; это означает, что нельзя уменьшить число частиц в состоянии f , если их там нет. Действие ферми-оператора α_f^+ на функцию с аргументом $n_f = 1$ также дает нуль в соответствии с тем фактом, что в данном состоянии не может находиться более одной ферми-частицы.

Величины (3.24) действуют на функции от чисел заполнений; в то же время они могут рассматриваться как матричные элементы операторов $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ по функциям от чисел заполнений. Следовательно, в операторной форме они запишутся следующим образом:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_1 &= \sum_{f, f'} A(f | f') \Delta_f^+ \Delta_{f'}, \\ \mathcal{A}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, f'_2, f'_1} A(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) \Delta_{f_1}^+ \Delta_{f_2}^+ \Delta_{f'_2} \Delta_{f'_1},\end{aligned}\tag{3.31}$$

где $\Delta_f = \beta_f$ (3.27) в случае бозе-систем и $\Delta_f = \alpha_f$ (3.30) в случае ферми-систем.

Следует заметить, что если первоначально $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ были определены на пространстве симметричных функций, то при переходе к представлению вторичного квантования они определяются на пространстве функций от чисел заполнений $n_f = 0, 1, 2, \dots$; если первоначально $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ были определены на пространстве антисимметричных функций, то в представлении вторичного квантования они определяются на пространстве функций от чисел заполнений $n_f = 0, 1$.

Уравнение Шредингера (3.2) в представлении вторичного квантования в матричной записи имеет вид

$$i \frac{\partial}{\partial t} C(n) = \sum_{n'} \mathcal{H}(n, n') C(n'),\tag{3.32}$$

где $\mathcal{H}(n, n')$ — гамильтониан в представлении вторичного квантования. Согласно (3.23) и (3.26) или (3.29) \mathcal{H} имеет вид

$$\mathcal{H}(n, n') = \sum T(f|f') \{\Delta_f^+ \Delta_{f'}\}_{nn'} + \frac{1}{2} \sum \Phi(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) \left\{ \Delta_{f_1}^+ \Delta_{f_2}^+ \Delta_{f'_2} \Delta_{f'_1} \right\}_{nn'}, \quad (3.33)$$

где

$$\begin{aligned} T(f|f') &= \int \varphi_f^*(x) T(x) \varphi_{f'}(x) dx, \\ \Phi(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) &= \\ &= \int \varphi_{f_1}^*(x_1) \varphi_{f_2}^*(x_2) \Phi(x_1, x_2) \varphi_{f'_2}(x_2) \varphi_{f'_1}(x_1) dx_1 dx_2. \end{aligned} \quad (3.34)$$

В операторной записи уравнение Шредингера имеет вид

$$i \frac{\partial}{\partial t} C(n) = \mathcal{H} C(n), \quad (3.35)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum T(f|f') \Delta_f^+ \Delta_{f'} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum \Phi(f_1, f_2 | f'_2, f'_1) \Delta_{f_1}^+ \Delta_{f_2}^+ \Delta_{f'_2} \Delta_{f'_1}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Рассмотрим для определенности случай статистики Бозе. Введем по определению операторную функцию

$$\psi(x) = \sum_f \beta_f \varphi_f(x); \quad \psi^+(x) = \sum_f \beta_f^+ \varphi_f^*(x). \quad (3.37)$$

Нетрудно проверить, что в силу перестановочных соотношений для операторов β , β^+ (3.27) и условия полноты для $\{\varphi_f(x)\}$ функции $\psi(x)$ и $\psi^+(x)$ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} \psi(x) \psi^+(x') - \psi^+(x') \psi(x) &= \delta(x - x'), \\ \psi(x) \psi(x') - \psi(x') \psi(x) &= 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

В случае статистики Ферми соответствующие операторные функции

$$\psi(x) = \sum_f \alpha_f \varphi_f(x), \quad \psi^+(x) = \sum_f \alpha_f^+ \varphi_f^*(x) \quad (3.39)$$

удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned}\psi(x)\psi^+(x') + \psi^+(x')\psi(x) &= \delta(x - x'), \\ \psi(x)\psi(x') + \psi(x')\psi(x) &= 0.\end{aligned}\quad (3.40)$$

Функции (3.37), (3.39) называют вторично квантованными волновыми функциями.

С помощью функций (3.37) или (3.39) — в зависимости от типа статистики — операторы \mathcal{A}_1 , \mathcal{A}_2 (3.31) в представлении вторичного квантования можно записать следующим образом:

$$\mathcal{A}_1 = \int \psi^+(x_1) \mathcal{A}(1) \psi(x_1) dx_1, \quad (3.41)$$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{2} \int \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) \mathcal{A}(1, 2) \psi(x_2) \psi(x_1) dx_1 dx_2. \quad (3.42)$$

Точно так же можно записать через вторично квантованные функции и гамильтониан системы (3.36)

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \int \psi^+(x_1) T(1) \psi(x_1) dx_1 + \\ &+ \frac{1}{2} \int \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) \Phi(1, 2) \psi(x_2) \psi(x_1) dx_1 dx_2.\end{aligned}\quad (3.43)$$

Вторично квантованную функцию можно рассматривать как динамическую переменную, эволюция которой во времени определяется уравнениями движения в форме Гейзенберга:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \psi(x) \mathcal{H} - \mathcal{H} \psi(x). \quad (3.44)$$

Коммутатор в правой части (3.44) следует вычислять при учете перестановочных соотношений (3.38) или (3.40). В результате получим:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1) = T(1) \psi(x_1) + \int \Phi(1, 2) \psi^+(x_2) \psi(x_2) dx_2 \cdot \psi(x_1). \quad (3.45)$$

По виду второе слагаемое в правой части напоминает потенциал от взаимодействия частиц в уравнениях

самосогласованного поля. Однако в отличие от последних уравнение (3.45) есть точное уравнение. Это связано с тем, что величина $\psi^+(x_2)\psi(x_2)dx_2$ — точное значение числа частиц в объеме dx_2 .

§ 4. Операторная форма теории возмущений¹⁾

Рассмотрим независимо от каких-либо моделей уравнение

$$(\mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1 + \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 + \dots - \mathcal{E})C = 0, \quad (4.1)$$

где $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1 + \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 + \dots$ — самосопряженный оператор, \mathcal{E} — собственное значение, а C — соответствующая собственная функция, ε — малый параметр ($\varepsilon \ll 1$), и изложим операторную форму теории возмущений, считая $\varepsilon \mathcal{H}_1$, $\varepsilon^2 \mathcal{H}_2$, ... малыми величинами возрастающих порядков малости.

Обозначим через \mathcal{E}_0 и C_0 собственное значение и соответствующую собственную функцию оператора \mathcal{H}_0 :

$$(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)C_0 = 0. \quad (4.2)$$

Допустим, что уровень \mathcal{E}_0 вырожден. Тогда множество функций C_0 , принадлежащих этому уровню, образует линейное пространство (их любая линейная комбинация также будет собственной функцией оператора \mathcal{H}_0 , принадлежащей уровню \mathcal{E}_0). Обозначим это пространство через \mathcal{L} .

Допустим далее, что все остальные уровни \mathcal{E}_n («возбужденные» состояния) оператора \mathcal{H}_0 отделены щелью от уровня \mathcal{E}_0 :

$$\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_0 \geq \Delta > 0. \quad (4.3)$$

где Δ — некоторая постоянная.

Если Q — кратность вырождения уровня \mathcal{E}_0 , то из функций C_0 можно, как известно, составить Q линейно независимых ортонормированных решений $C_{0,q}$ ($q = 1, \dots, Q$).

¹⁾ Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, а).

Обозначим через \mathcal{P} оператор, который проектирует произвольную волновую функцию C на пространство \mathcal{L}^1):

$$\mathcal{P}C = \sum_{q=1}^Q C_{0,q} (C_{0,q}^*, C). \quad (4.4)$$

Заметим, что по определению

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}, \quad \mathcal{P}C_0 = C_0. \quad (4.5)$$

Положим теперь в уравнении (4.1)

$$C = \mathcal{P}C + (1 - \mathcal{P})C = \mathcal{P}C + C_1. \quad (4.6)$$

Такое разбиение C на два слагаемых соответствует выделению из C части $\mathcal{P}C$, принадлежащей пространству \mathcal{L} невозмущенных функций уравнения (4.2), и ортогонального дополнения к ней $-C_1 = (1 - \mathcal{P})C$ (согласно (4.5) $\mathcal{P}C_1 = \mathcal{P}(1 - \mathcal{P})C \equiv 0$), обязанного действию возмущения $\varepsilon \mathcal{H}_1 + \varepsilon^2 \dots$. При $\varepsilon \rightarrow 0$ уравнение (4.1) должно переходить в (4.2); следовательно, C_1 должна обращаться в нуль вместе с ε . Далее будем считать, что $C_1 \sim O(\varepsilon)$.

В результате подстановки получим:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{H}_0 - \varepsilon \mathcal{H}_1 - \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 - \dots) \mathcal{P}C + \\ + (\mathcal{E} - \mathcal{H}_0 - \varepsilon \mathcal{H}_1 - \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 - \dots) C_1 = 0. \quad (4.7)$$

Умножим это уравнение слева на \mathcal{P} , учитывая, что

$$\mathcal{P}\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0\mathcal{P},$$

$$\mathcal{P}(\mathcal{E} - \mathcal{H}_0)C_1 = (\mathcal{E} - \mathcal{H}_0)\mathcal{P}(1 - \mathcal{P})C = 0.$$

Это дает нам следующее уравнение:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{H}_0 - \varepsilon \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P} - \varepsilon^2 \mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P} - \dots) \mathcal{P}C - \\ - \varepsilon \mathcal{P}\mathcal{H}_1 C_1 - \varepsilon^2 \mathcal{P}\mathcal{H}_2 C_1 - \dots = 0. \quad (4.8)$$

¹⁾ Через (C_1^*, C_2) будем обозначать скалярное произведение функций C_1, C_2 ; при этом $(C_1^*, C_2) = \int C_1^*(x) C_2(x) dx$, если функции зависят от непрерывных аргументов, и $(C_1^*, C_2) = \sum_n C_1^*(n) C_2(n)$, если функции зависят от дискретных аргументов. Функции C_1 и C_2 ортогональны, если равно нулю их скалярное произведение.

Вычтем (4.8) из (4.7):

$$(\mathcal{E} - \mathcal{H}_0 - \varepsilon \mathcal{H}_1 - \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 - \dots + \varepsilon \mathcal{P} \mathcal{H}_1 + \\ + \varepsilon^2 \mathcal{P} \mathcal{H}_2 + \dots) C_1 + \varepsilon (\mathcal{P} \mathcal{H}_1 \mathcal{P} - \mathcal{H}_1) \mathcal{P} C + \\ + \varepsilon^2 (\mathcal{P} \mathcal{H}_2 \mathcal{P} - \mathcal{H}_2) \mathcal{P} C + \dots = 0. \quad (4.9)$$

Принимая во внимание, что $\mathcal{E} - \mathcal{E}_0$ и C_1 будут величинами первого порядка малости, положим:

$$\mathcal{E} - \mathcal{E}_0 = \varepsilon \mathcal{E}_0^{(1)} + \varepsilon^2 \mathcal{E}_0^{(2)} + \dots, \\ C_1 = \varepsilon K_1 + \varepsilon^2 K_2 + \dots \quad (4.10)$$

Подставляя эти разложения в уравнение (4.9) и собирая члены одинакового порядка малости, получаем:

$$(\mathcal{E}_0 - \mathcal{H}_0) K_1 = (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P} \mathcal{H}_1 \mathcal{P}) \mathcal{P} C, \\ (\mathcal{E}_0 - \mathcal{H}_0) K_2 = (\mathcal{H}_2 - \mathcal{P} \mathcal{H}_2 \mathcal{P}) \mathcal{P} C + \\ + (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P} \mathcal{H}_1 \mathcal{P} - \mathcal{E}_0^{(1)}) K_1, \\ \dots \dots \dots \quad (4.11)$$

Отсюда находим выражение для K_1 :

$$K_1 = (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{P} \mathcal{H}_1 \mathcal{P} - \mathcal{H}_1) \mathcal{P} C. \quad (4.12)$$

Заметим, что функция $C' = (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P} \mathcal{H}_1 \mathcal{P}) \mathcal{P} C$ ортогональна ко всем функциям пространства \mathcal{L} . Поэтому результат действия на нее оператора $(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1}$ будет конечным в силу условия (4.3) относительно конечности ширины щели между уровнями \mathcal{E}_0 и \mathcal{E}_n оператора \mathcal{H}_0 .

Действительно, обозначим через $C_n (n \neq 0)$ собственные функции оператора \mathcal{H}_0 для возбужденных состояний и будем считать, как обычно, что система функций $\{C_0, C_n\}$ полная. Разложение функции C по собственным функциям оператора \mathcal{H}_0 имеет вид

$$C' = \sum_{n \neq 0} C_n (C_n^*, C').$$

Действуя на обе части этого равенства оператором $(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1}$, получим:

$$(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} C' = \sum_{n \neq 0} C_n \frac{(C_n^*, C')}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_0}.$$

Так как знаменатели слагаемых правых частей конечны в силу (4.3), конечным будет и результат действия оператора $(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1}$ на C' .

В результате подстановки (4.12) во второе из уравнений (4.11) имеем:

$$\begin{aligned} K_2 = & (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P} - \mathcal{H}_2) \mathcal{P}C + \\ & + (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{E}_0^{(1)} + \mathcal{P}\mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_1) K_1 = \\ = & (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P} - \mathcal{H}_2) \mathcal{P}C + \\ & + (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{E}_0^{(1)} + \mathcal{P}\mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_1) (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} \times \\ & \times (\mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P} - \mathcal{H}_1) \mathcal{P}C. \quad (4.13) \end{aligned}$$

Подставим теперь разложения (4.10) в уравнение (4.8):

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} - \mathcal{H}_0 - \varepsilon \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P} - \varepsilon^2 \mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P} - \dots) \mathcal{P}C - \\ - \varepsilon^2 \mathcal{P}\mathcal{H}_1 K_1 - \varepsilon^3 \mathcal{P}\mathcal{H}_1 K_2 - \varepsilon^3 \mathcal{P}\mathcal{H}_2 K_1 - \dots = 0. \quad (4.14) \end{aligned}$$

Поскольку

$$\mathcal{P}K_1 = 0, \quad \mathcal{P}K_2 = 0,$$

можем тождественно записать:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\mathcal{H}_1 K_1 &= \mathcal{P}(\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) K_1, \\ \mathcal{P}\mathcal{H}_1 K_2 &= \mathcal{P}(\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) K_2, \\ \mathcal{P}\mathcal{H}_2 K_1 &= \mathcal{P}(\mathcal{H}_2 - \mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P}) K_1. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Подставляя в уравнение (4.14) выражения (4.12), (4.13) для K_1, K_2, \dots и принимая во внимание (4.15), (4.5), получаем, наконец, уравнение для определения функции C_0 :

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) C_0 = & \mathcal{P} \{ \varepsilon \mathcal{H}_1 + \varepsilon^2 \mathcal{H}_2 + \varepsilon^3 \mathcal{H}_3 + \dots - \\ & - \varepsilon^2 (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) - \\ & - \varepsilon^3 (\mathcal{H}_2 - \mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P}) (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) + \\ & + \varepsilon^3 (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1 - \mathcal{E}_0^{(1)}) \times \\ & \times (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) - \varepsilon^3 (\mathcal{H}_1 - \mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P}) \times \\ & \times (\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-1} (\mathcal{H}_2 - \mathcal{P}\mathcal{H}_2\mathcal{P}) + \varepsilon^4 \dots \} \mathcal{P}C_0. \quad (4.16) \end{aligned}$$

В уравнение (4.16) величина $\mathcal{E}_0^{(1)}$ входит с множителем ε^3 . Используя (4.10), запишем выражение для нее в виде

$$\varepsilon^3 \mathcal{E}_0^{(1)} = \varepsilon^2 (\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) + \varepsilon^4 \dots$$

Поэтому с точностью до величин порядка ε^4

$$\varepsilon^3 \mathcal{E}_0^{(1)} = \varepsilon^2 (\mathcal{E}^{(1)} - \mathcal{E}_0), \quad (4.17)$$

где $\mathcal{E}^{(1)}$ — значение \mathcal{E} , вычисленное из уравнения (4.16) с точностью до величин порядка ε включительно.

Отметим, что во всех приближениях уравнение для волновой функции C_0 можно записать в виде

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) C_0 = \tilde{\mathcal{H}} C_0, \quad (4.18)$$

где «эквивалентный» гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}$ есть самосопряженный оператор, преобразующий пространство \mathcal{L} само в себя.

Остановимся теперь на условии нормировки для функции C_0 .

Полная волновая функция C нормируется, как всегда, на единицу

$$(C^*, C) = 1. \quad (4.19)$$

Принимая во внимание (4.6), мы получаем:

$$(C_0^*, C_0) + (C_1^*, C_1) = 1, \quad (4.20)$$

Отсюда согласно (4.10), (4.12) получим:

$$\begin{aligned} (C_0^*, C_0) &= 1 - \varepsilon^2 (K_1^*, K_1) - \varepsilon^3 \dots = \\ &= 1 - \varepsilon^2 (C_0^*, \mathcal{P}(\mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P} - \mathcal{H}_1)(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0)^{-2} \times \\ &\quad \times (\mathcal{P}\mathcal{H}_1\mathcal{P} - \mathcal{H}_1)\mathcal{P}C_0 - \varepsilon^3 \dots \end{aligned} \quad (4.21)$$

Этим завершается задача построения операторной формы теории возмущений для вырожденного уровня.

Отметим, что операторная форма теории возмущений совпадает со стандартной формой теории возмущений для вырожденного уровня (см., например, учебники по квантовой механике Д. И. Блохинцева (1963) или Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1963)). Операторная форма оказывается технически удобной в случае большой кратности вырождения.

§ 5. Формулы преобразований для спиновых операторов

В последующих разделах мы будем пользоваться гамильтонианами, записанными в спиновых переменных. При решении конкретных задач иногда удобнее перейти от спиновых операторов к некоторым новым операторам «порождения и уничтожения частиц». Ниже мы рассмотрим формулы преобразований к операторам Паули, преобразование Гольштейна — Примакова — Изюмова и преобразование к операторам идеальных спиновых волн Дайсона.

Компоненты векторного оператора спина удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} S_f^x S_{f'}^y - S_{f'}^y S_f^x &= i S_f^z \Delta(f - f'), \\ S_f^y S_{f'}^z - S_{f'}^z S_f^y &= i S_f^x \Delta(f - f'), \\ S_f^z S_{f'}^x - S_{f'}^x S_f^z &= i S_f^y \Delta(f - f'), \end{aligned} \quad (5.1)$$

где f — номер узла решетки.

Учтем далее, что квадрат оператора спина равен $S(S+1)$ и что его z -компонента может принимать только $2S+1$ значений (в представлении, где z -компонента диагональна). Это даст следующие уравнения:

$$(S_f, S_f) = S(S+1), \quad (5.2)$$

$$\prod_{r=-S}^S (S_f^z - r) = 0. \quad (5.3)$$

Вместо операторов S_f^α ($\alpha = x, y, z$) введем операторы

$$S_f^\pm = S_f^x \pm i S_f^y \quad ((S_f^+)^+ = S_f^-); \quad S_f^z. \quad (5.4)$$

Из (5.1) вытекает, что эти операторы удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$S_f^+ S_{f'}^- - S_{f'}^- S_f^+ = 2 S_f^z \Delta(f - f'), \quad (5.5)$$

$$S_f^\pm S_{f'}^\pm - S_{f'}^\pm S_f^\pm = \mp S_f^\pm \Delta(f - f'), \quad (5.6)$$

а из (5.2), (5.4), (5.5) следует, что

$$\begin{aligned} S_f^- S_f^+ &= S(S+1) - S_f^z - (S_f^z)^2, \\ S_f^+ S_f^- &= S(S+1) + S_f^z - (S_f^z)^2. \end{aligned} \quad (5.7)$$

В некоторых приложениях удобно использовать формулы преобразований от представления, в котором осью квантования является ось z , к *собственному представлению*, в котором за ось квантования выбрано направление единичного вектора γ .

Рассмотрим операторы

$$S_f'^\alpha = \gamma_f^\alpha S_f^z + A_f^\alpha S_f^+ + A_f^{\alpha*} S_f^-, \quad \alpha = x, y, z, \quad (5.8)$$

где S_f^\pm , S_f^z — спинные операторы (5.4); коэффициенты преобразования (векторы γ_f , A_f), удовлетворяют условиям:

$$\begin{aligned} (\gamma_f, \gamma_f) &= 1, \quad \gamma_f^\alpha = \gamma_f^{\alpha*}, \\ (A_f^*, A_f) &= \frac{1}{2}, \quad (A_f, A_f) = 0, \quad (A_f, \gamma_f) = 0, \\ |A_f^\alpha|^2 &= \frac{1}{4} (1 - (\gamma_f^\alpha)^2), \quad iA_f^\alpha = [\gamma_f \times A_f]_\alpha. \end{aligned} \quad (5.9)$$

В частности, для векторов A_f можно взять следующие выражения:

$$\begin{aligned} A_f^x &= -e^{i\varphi_f} \frac{1 + \gamma_f^z}{4} + e^{-i\varphi_f} \frac{1 - \gamma_f^z}{4}, \\ A_f^y &= i \left(e^{i\varphi_f} \frac{1 + \gamma_f^z}{4} + e^{-i\varphi_f} \frac{1 - \gamma_f^z}{4} \right), \\ A_f^z &= \frac{1}{2} \sqrt{1 - (\gamma_f^z)^2}, \quad \operatorname{tg} \varphi_f = \frac{\gamma_f^y}{\gamma_f^x}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Нетрудно проверить, что операторы S_f' (5.8) удовлетворяют перестановочным соотношениям для спинных операторов (5.1), если коэффициенты преобразований γ_f , A_f удовлетворяют условиям (5.9).

Ось квантования новых спинных операторов S_f' действительно совпадает с направлением вектора γ_f , так как проекция вектора S_f' на γ_f равна S_f^z и диагональна по условию, а проекция S_f' на любое направление a , перпендикулярное к γ_f , не диагональна по условию

$$\begin{aligned} (S_f', \gamma_f) &= S_f^z, \quad (S_f', [a \times \gamma_f]) = \\ &= i(a, A_f) S_f^+ + i(a, A_f^*) S_f^-. \end{aligned} \quad (5.11)$$

В частном случае $\gamma_f^z = 1$, $\gamma_f^x = \gamma_f^y = 0$, $\varphi_f = \pi$ за ось квантования выбирается ось z :

$$\overline{S_f^x} = \frac{1}{2}(S_f^- + S_f^+), \quad S_f'^y = \frac{i}{2}(S_f^- - S_f^+), \quad S_f'^z = S_f^z. \quad (5.12)$$

Представление спиновых операторов через операторы Паули ($S = 1/2$). Условимся называть операторами Паули операторы со следующими перестановочными соотношениями:

$$\begin{aligned} b_f b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f &= (1 - 2n_f) \Delta(f - f'), \\ b_f b_{f'} - b_{f'} b_f &= 0, \quad b_f^2 = b_f^{+2} = 0, \\ n_f &= b_f^+ b_f = 0, \quad 1. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Для случая спина $S = 1/2$ операторы b_f , b_f^+ совпадают с операторами S_f^+ , S_f^- . Общее преобразование имеет вид

$$S_f^a = \gamma_f^a \left(\frac{1}{2} - n_f \right) + A_f^a b_f + A_f^{*a} b_f^+; \quad (5.14)$$

коэффициенты преобразования определяются формулами (5.9) — (5.10). В частном случае (5.12) имеем:

$$S_f^x = \frac{1}{2}(b_f^+ + b_f), \quad S_f^y = \frac{i}{2}(b_f^+ - b_f), \quad S_f^z = \frac{1}{2} - n_f. \quad (5.15)$$

Представление Гольштейна — Примакова — Изюмова ($S \geq 1/2$). Гольштейн и Примаков (1940) предложили следующее представление спиновых операторов через операторы вторичного квантования:

$$S_f^+ = \sqrt{2S} \varphi(n_f) a_f, \quad S_f^- = \sqrt{2S} a_f^+ \varphi(n_f), \quad S_f^z = S - n_f, \quad (5.16)$$

где

$$\varphi(n_f) = \left(1 - \frac{n_f}{2S} \right)^{1/2}, \quad n_f = a_f^+ a_f \quad (5.17)$$

и где операторы a , a^+ удовлетворяют бозевским перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} a_f a_{f'}^+ - a_{f'}^+ a_f &= \Delta(f - f'), \quad a_f a_{f'} - a_{f'} a_f = 0, \\ n_f &= a_f^+ a_f = 0, \quad 1, \dots \end{aligned} \quad (5.18)$$

Операторы (5.16)–(5.17) заданы на пространстве функций от чисел заполнений $n_f = 0, 1, 2, \dots$. Они оставляют инвариантными (преобразуют каждое само в себя) подпространства функций от чисел заполнений $n_f = 0, 1, \dots, 2S$ и $n_f \geq 2S + 1$ (см. Гольштейн и Примаков (1940)). Подпространство функций от чисел заполнений $n_f \geq 2S + 1$ называется нефизическим; ему соответствуют значения спина большие, чем S . При расчетах нужно учитывать, строго говоря, только физические состояния ($n_f = 0, 1, \dots, 2S$), так как нефизические состояния ($n_f \geq 2S + 1$) могут дать неконтролируемую ошибку. Непосредственный учет этого дополнительного условия представляет значительные трудности. Мы можем удовлетворить ему, полагая (Ю. А. Изюмов (1959)):

$$\begin{aligned} a_f a_{f'}^+ - a_{f'}^+ a_f &= \left(1 - \frac{2S+1}{(2S)!} a_f^{+2S} a_f^{2S}\right) \Delta(f - f'), \\ a_f a_{f'} - a_{f'} a_f &= 0, \quad a_f^{+2S+1} = a_f^{2S+1} = 0. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Запишем оператор в правой части первой формулы (5.19) следующим образом:

$$(a_f^+)^{2S+1} a_f^{2S+1} = \prod_{p=0}^{2S-1} (a_f^+ a_f - p). \quad (5.20)$$

Так как

$$n_f C(\dots, n_f^0, \dots) = n_f^0 C(\dots, n_f^0, \dots),$$

то

$$\prod_{p=0}^{2S-1} (n_f - p) C(\dots, n_f^0, \dots) = \prod_{p=0}^{2S-1} (n_f^0 - p) C(\dots, n_f^0, \dots).$$

Отсюда видим, что если $n_f^0 \leq 2S - 1$, то один из сомножителей произведения в правой части обращается в нуль. Следовательно, при действии оператора (5.20) на функцию от чисел заполнений получим результат, отличный от нуля, если аргумент волновой функции $n_f^0 \geq 2S$. Таким образом, отличие операторов (5.19) от бозевских скажется только при учете сильно возбужденных состояний (состояний с большими n_f^0). В случае низких температур вероятность встретить их не велика ($\langle n_f \rangle \ll 1$) и операторы (5.19) можно рассматривать как

бозевские. Это приближение будет тем лучше, чем больше S .

При $S = 1/2$ операторы (5.19) совпадают с паули-операторами (5.13), при $S \geq 1$ они могут рассматриваться как обобщение последних.

Приближенные формулы преобразований от спиновых операторов к операторам a_f^+ , a_f получим, раскладывая операторы (5.17) в ряд (см. Огучи (1960)):

$$\varphi(n_f) = 1 - \frac{n_f}{4S} - \frac{n_f^2}{32S^2} - \dots \quad (5.21)$$

В результате будем иметь:

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S} \left(a_f - \frac{1}{4S} n_f a_f - \frac{1}{32S^2} n_f^2 a_f - \dots \right), \\ S_f^- &= \sqrt{2S} \left(a_f^+ - \frac{1}{4S} a_f^+ n_f - \frac{1}{32S^2} a_f^+ n_f^2 - \dots \right). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Заметим, что использование приближенных формул (5.22) имеет смысл при $S \gg 1$; при $S = 1/2$ они не точны.

Операторы идеальных спиновых волн Дайсона ($S \geq 1/2$). По Дайсону (1956, а, б), операторам для реальной спиновой системы можно сопоставить, в некотором фиктивном пространстве, операторы «идеальных спиновых волн», которые обладают бозевскими свойствами. Для низких температур, когда только и имеет смысл говорить о почти независимых возбуждениях, вероятности процессов, вычисленные при помощи идеальных спиновых волн, равны вероятностям процессов в реальной системе. На основе этих соображений можно получить (С. В. Малеев (1957)) следующее представление для спиновых операторов:

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{1}{2S} a_f^+ a_f \right) a_f, \quad S_f^- = \sqrt{2S} a_f^+, \\ S_f^z &= S - a_f^+ a_f; \end{aligned} \quad (5.23)$$

a_f^+ , a_f — операторы порождения и уничтожения идеальных спиновых волн Дайсона, подчиняющиеся бозевским перестановочным соотношениям. Заметим, что здесь операторы S_f^+ и S_f^- не являются сопряженными. Соответственно этому преобразование (5.23) приводит к неэрмитовскому гамильтониану.

Огучи (1961, 1963) показал, что представления Дайсона (5.23) и Гольштейна — Примакова (5.16) эквивалентны.

Пусть гамильтониан системы \mathcal{H} записан в переменных Гольштейна — Примакова (5.16). Произведем преобразование \mathcal{H} с помощью некоторой неунитарной матрицы T :

$$\mathcal{H}' = T^{-1} \mathcal{H} T \quad (TT^{-1} = 1), \quad (5.24)$$

где \mathcal{H}' есть гамильтониан \mathcal{H} , в котором операторы a^+ , a заменены на

$$a^{+'} = T^{-1} a^+ T, \quad a' = T^{-1} a T. \quad (5.25)$$

Нетрудно видеть, что штрихованные операторы обладают теми же перестановочными соотношениями, что и нештрихованные. Операторы $a^{+'}$, a' уже не являются эрмитовски сопряженными, однако собственные значения \mathcal{H}' те же, что и \mathcal{H} .

При этом операторы (5.16) примут вид

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_f^{+'} a_f'}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} a_f', \\ S_f^- &= \sqrt{2S} a_f^{+'} \left(1 - \frac{a_f^{+'} a_f'}{2S} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ S_f^z &= S - a_f^{+'} a_f'. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Введем операторы α^+ , α по формулам

$$a_f^{+'} = \alpha_f^+ \left(1 - \frac{\alpha_f^+ \alpha_f}{2S} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad a_f' = \left(1 - \frac{\alpha_f^+ \alpha_f}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} \alpha_f. \quad (5.27)$$

Легко видеть, что $\alpha_f^+ \alpha_f = a_f^{+'} a_f'$ и что новые операторы α^+ , α удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и $a^{+'}$, a' . Подставляя (5.27) в (5.26), получаем для операторов S_f^{\pm} , S_f^z представление вида (5.23). Отсюда следует эквивалентность представлений Дайсона и Гольштейна — Примакова.

Задачу построения операторов порождения и уничтожения в теории Дайсона рассматривал также Правецки (1961), который получил формулы, эквивалентные формулам (5.16), (5.19). Критический анализ вопросов, связанных с введением операторов идеальных спиновых волн, проведен Дембинским (1964). В частности, им показано, что переход к этим операторам возможен, строго говоря, только на физическом пространстве.

[В этой связи см. также содержательную работу Миллса и Кенана (1966). Подробнее о теории Дайсона и других квазибозонных и квазифермионных представлениях в теории магнетизма см. Дополнения. (Ред.)].

§ 6. Гейзенберговская модель

Для описания поведения системы многих тел, в нашем случае — сильно магнитного вещества, необходимо задать явный вид гамильтониана системы. Обычно при написании последнего никогда не учитывают всех особенностей системы и пытаются передать лишь ее наиболее важные характеристики.

В квантовой теории сильного магнетизма достаточно общей можно считать следующую постановку задачи.

Пусть: 1) известны сорта атомов, из которых состоит кристалл, и электронные конфигурации незаполненных (внутренних) оболочек атомов и их валентных (внешних) оболочек в свободном состоянии; 2) известны внешние силы, действующие на систему; 3) задано распределение атомов по узлам кристаллической решетки; 4) решетка считается упорядоченной.

По гамильтониану этой системы требуется определить, хотя бы приближенно, энергетический спектр системы, время жизни возбужденных состояний и рассчитать такие макроскопические величины, как намагниченность, теплоемкость, константы анизотропии, электропроводность, ширина линии (ферро)магнитного резонанса, зависимость этих величин от температуры, внешних полей и др. при учете симметрии кристаллической решетки.

В таком виде задача слишком сложна для решения, и пока вряд ли можно получить для нее даже качественные результаты. Поэтому в теории магнетизма рассматри-

ваются значительно более простые системы, которые моделируют только наиболее важные, или считающиеся таковыми, черты реальных магнетиков. Мы поступим так же и рассмотрим здесь несколько простых моделей, широко применяющихся в квантовой теории магнетизма.

Часто сильно магнитное вещество представляют как систему спинов, расположенных в узлах кристаллической решетки и связанных обменным взаимодействием. Выведем теперь гамильтониан для этой модели.

Примем, что кристалл состоит из N одинаковых атомов, расположенных в узлах простой решетки. Взаимодействие электронов незаполненных внутренних оболочек с электронами валентных оболочек (или с электронами проводимости) будем считать малым. Тогда электроны незаполненных оболочек и электроны проводимости можно приближенно рассматривать как две независимые подсистемы. Поскольку нас интересуют магнитные свойства системы, дальше будем рассматривать только электроны незаполненных внутренних оболочек (d - или f -оболочек).

Предположим, что у каждого атома имеется по одному d -электрону. Пренебрежем орбитальным моментом d -электрона и опустим из рассмотрения взаимодействие магнитных моментов электронов с орбитальными и их взаимодействие между собой. Иначе говоря, будем рассматривать d -электрон как s -электрон. Внешнее магнитное поле пока будем считать равным нулю.

В результате реальный ферро- (антиферро- или ферри-) магнетик моделируется ферро- (антиферро- или ферри-) магнитным диэлектриком, решетка которого образована из атомов одного сорта, имеющих в нормальном состоянии по одному валентному s -электрону, которые и считаются ответственными за магнетизм. Допустим, что низший энергетический уровень \mathcal{E}_0 системы электронов в нулевом приближении характеризуется единичными значениями чисел заполнения N_f электронов в узлах решетки:

$$N_f = n_{f, -1/2} + n_{f, 1/2} = 1, \quad (6.1)$$

где $n_{f\sigma}$ ($\sigma = \pm 1/2$) — число электронов в узле f со спином, направленным «влево» ($\sigma = -1/2$) или «вправо»

($\sigma = 1/2$), и что уровень \mathcal{E}_0 отделен щелью от остальных, возбужденных, уровней системы. Взаимодействие электронов друг с другом будем рассматривать как возмущение.

Покажем, что уровень \mathcal{E}_0 вырожден, и исследуем расщепление уровня \mathcal{E}_0 под действием возмущения (Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, а)).

Обозначим через \mathcal{H}_0 гамильтониан нулевого приближения и через C_0 собственную функцию основного состояния:

$$(\mathcal{H}_0 - \mathcal{E}_0) C_0 = 0. \quad (6.2)$$

Уровень \mathcal{E}_0 будет спиново вырожденным, так как он определяется только заданием единичных значений чисел заполнений электронов в узлах, тогда как значение спина в узле остается неопределенным ($\sigma = -1/2$ или $1/2$).

Функции C_0 определяются наборами чисел заполнения $n_{f\sigma}$:

$$C_0 = C_0(\dots, n_{f\sigma}, \dots). \quad (6.3)$$

Поскольку их любая линейная комбинация также является собственной функцией оператора \mathcal{H} , принадлежащей уровню \mathcal{E}_0 , они образуют линейное пространство. Обозначим его через \mathcal{L} .

Вычислим теперь расщепление уровня \mathcal{E}_0 , обязанное влиянию возмущения. Используя операторную форму теории возмущений § 4, можно видеть, что в любом заданном порядке теории возмущений расщепление уровня \mathcal{E}_0 определяется из уравнения

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) C_0 = \tilde{\mathcal{H}} C_0, \quad (6.4)$$

где C_0 — функция из пространства \mathcal{L} , а $\tilde{\mathcal{H}}$ — некоторый самосопряженный оператор, который любую функцию из пространства \mathcal{L} преобразует в функцию, принадлежащую этому же пространству.

Так как в каждом узле кристаллической решетки имеется по одному электрону, направление спина которого («левое» или «правое») не фиксировано, то уровень \mathcal{E}_0 можно определить заданием z -компонент спинов

электронов в каждом узле. Тогда C_0 можно рассматривать как функцию от z -компонент спиновых операторов:

$$C_0 = C_0(\dots, S_f^z, \dots). \quad (6.5)$$

Следовательно, эквивалентный гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}$ (6.4) также можно рассматривать как функцию от спиновых операторов. Представляя $\tilde{\mathcal{H}}$ в виде ряда по степеням спиновых операторов S_f^a ($a = x, y, z$), будем иметь:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = G_0 + \sum G_a(f) S_f^a + \sum G_{\alpha_1 \alpha_2}(f_1, f_2) S_{f_1}^{a_1} S_{f_2}^{a_2} + \\ + \sum G_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}(f_1, f_2, f_3) S_{f_1}^{a_1} S_{f_2}^{a_2} S_{f_3}^{a_3} + \dots, \end{aligned} \quad (6.6)$$

где коэффициенты G — обычные функции номеров (координат) узлов решетки. Суммирование производится по всем f и α , входящим в данные выражения, причем учитываются только комбинации не равных друг другу индексов f . В противном случае в силу условий коммутации для спиновых операторов для $S = 1/2$:

$$\begin{aligned} 2S_f^x S_f^y = iS_f^z, \quad 2S_f^y S_f^z = iS_f^x, \quad 2S_f^z S_f^x = iS_f^y, \\ (S_f^x)^2 = (S_f^y)^2 = (S_f^z)^2 = \frac{1}{4}, \end{aligned}$$

их можно свести к членам низшего порядка, у которых все индексы f различны. При этом условии суммирования операторы S_f^a под знаком сумм в (6.6) всегда коммутируют. Отметим, что так как оператор $\tilde{\mathcal{H}}$ самосопряженный, то коэффициенты G разложения (6.6) являются вещественными функциями.

Условимся пока учитывать только электростатические силы, пренебрегая магнитными.

Поскольку электростатические силы не зависят от ориентации спинов, то $\tilde{\mathcal{H}}$ должен быть инвариантен относительно преобразования поворота спинов. Поэтому все члены разложения (6.6) должны быть скалярными функциями спиновых векторов.

Совершим каноническое преобразование спиновых операторов¹⁾

$$S_f^a \rightarrow -S_f^a, \quad i \rightarrow -i. \quad (6.7)$$

¹⁾ Каноническими будем называть преобразования, сохраняющие перестановочные соотношения.

Оператор $\tilde{\mathcal{H}}$ остается инвариантным при этом преобразовании, так как исходный гамильтониан не зависит от направления спинов и является функцией операторов с вещественными коэффициентами.

Следовательно, оператор $\tilde{\mathcal{H}}$ должен быть скалярным, составленным из четного числа спиновых операторов. Поэтому формулу (6.6) можно переписать в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = G_0 + \sum G(f_1, f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}) + O(S_{f_1}^{\alpha_1} S_{f_2}^{\alpha_2} S_{f_3}^{\alpha_3} S_{f_4}^{\alpha_4}).$$

Или, вводя симметризованные обозначения для коэффициентов:

$$\tilde{\mathcal{H}} = G_0 - \frac{1}{2} \sum I(f_1, f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}), \quad (6.8)$$

где I — так называемый обменный интеграл:

$$\begin{aligned} I(f_1, f_2) &= -G(f_1, f_2) - G(f_2, f_1), \\ I(f_1, f_2) &= I(f_2, f_1). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Следующие слагаемые в формуле (6.8) начинаются с членов четвертого порядка относительно S_f^α .

Электростатическое взаимодействие не меняется при изменении на обратные направлений осей в обычном пространстве:

$$f^\alpha \rightarrow -f^\alpha \quad (\alpha = x, y, z); \quad (6.10)$$

поэтому

$$I(f_1, f_2) = I(-f_1, -f_2). \quad (6.11)$$

Наконец, примем во внимание, что атомы расположены в узлах кристаллической решетки и что для кристаллических решеток имеет место инвариантность относительно трансляций на величину f_0 , кратную постоянной решетки:

$$f^\alpha \rightarrow f^\alpha + f_0^\alpha \quad (\alpha = x, y, z). \quad (6.12)$$

Величины I не должны меняться при этом преобразовании и, следовательно, должны быть функциями только относительных расстояний. Если все узлы решетки эквивалентны друг другу, то

$$I(f_1, f_2) = I(|f_1 - f_2|). \quad (6.13)$$

Пусть теперь на систему действует внешнее магнитное поле H . Обозначим через μ магнитный момент атома. Тогда гамильтониан изотропного вещества будет иметь вид

$$\mathcal{H} = G_0 - \mu \sum (H, S_f) - \frac{1}{2} \sum I(f_1, f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}). \quad (6.14)$$

Итак, используя только общие сведения относительно данной модели (см. стр. 67), мы установили, что ее гамильтониан записывается через спиновые операторы электронов «незаполненных» оболочек. Это позволяет описывать магнитные материалы как совокупности спинов, расположенных в узлах кристаллической решетки и (попарно) взаимодействующих друг с другом с энергией, равной I . Явный вид обменных интегралов I через атомные величины не определяется, и они входят здесь как некоторые феноменологические величины. Ферромагнитному упорядочению спинов соответствует положительный знак I , антиферромагнитному — отрицательный.

Такую модель сильно магнитного вещества обычно называют гейзенберговской моделью, а соответствующий ей гамильтониан вида (6.8) или (6.14) — гейзенберговским спиновым гамильтонианом. Впервые подобная модель была рассмотрена в работах Я. И. Френкеля (1928) и Гейзенберга (1928), заложивших основы современной теории магнетизма.

Возможность сведения кулоновского взаимодействия к эффективному спиновому гамильтониану (6.14) впервые была установлена Дираком (1929), (1960). Используя близкие представления, Араи (1962) в весьма общем виде показал, что гамильтониан (6.14) является первым приближением к истинному и что следующими поправками к нему можно пренебречь, если перекрытие соответствующих атомных волновых функций считать малым.

Довольно часто при выводе гейзенберговского гамильтониана используют приближение Гайтлера — Лондона, применяющееся в теории гомеопольярной связи в молекулах (Гайтлер и Лондон (1927)). При этом как нулевое приближение рассматриваются свободные атомы, перекрытие атомных волновых функций соседних

узлов — как малое возмущение (Гейзенберг (1928)). На этом пути удастся получить явные выражения для обменных интегралов через атомные волновые функции и энергию взаимодействия электронов друг с другом (Слэтер (1953), Лёвдин (1962), Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, 6)).

Однако численные расчеты I по атомным функциям для металлов группы железа дают противоречивые результаты как в отношении величины интеграла I , так и его знака. При этом ни один из них не говорит в пользу ожидавшегося результата. Так, Вольфарт (1949) получил для I отрицательный знак. Стюарт и Маршалл (1960) получили положительное значение, однако примерно на два порядка меньше, чем следует из оценки по температуре Кюри. Фримен и Ватсон (1961) нашли, что в случае $3d^1$ -конфигурации обменный интеграл имеет большую отрицательную величину, а в случае $3d^9$ -конфигурации — малую, но по-прежнему отрицательную величину. Более полные расчеты Фримена и др. (1962) также дали отрицательные значения обменного интеграла.

В связи с этим высказываются предположения (например, Зинер (1951), Гудинаф (1960)) о том, что прямой обмен не может быть причиной спинового упорядочения. Учет косвенного обмена через электроны проводимости для некоторых редкоземельных металлов позволил получить более разумные оценки для обменного интеграла.

Вместе с тем следует иметь в виду, что спиновые гамильтонианы позволяют достаточно хорошо описывать магнитные характеристики сильно магнитных веществ. Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать обменные интегралы как некоторые феноменологические величины теории.

§ 7. Обобщения гейзенберговской модели

В этом параграфе мы рассмотрим некоторые простейшие обобщения гейзенберговской модели, которые можно получить, если, кроме электростатического взаимодействия электронов незаполненных оболочек друг с другом, принять во внимание и другие взаимодействия.

Введение магнитной анизотропии. Рассмотрим прежде всего влияние магнитного взаимодействия электронов на свойства магнитных веществ. Не повторяя рассуждений, укажем здесь на те изменения, которые надо внести в выражение для \mathcal{H} в этом случае [Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, а)]. Для простоты временно будем считать, что внешнего магнитного поля нет.

Магнитное взаимодействие электронов (см., например, Бете и Солпитер (1960)) складывается из взаимодействия спиновых магнитных моментов электронов друг с другом (спин-спиновое взаимодействие) и из взаимодействия спиновых и орбитальных магнитных моментов электронов (спин-орбитальное взаимодействие). Остановимся на строении этих величин, имеющем для нас существенное значение.

Вклад от спин-спинового взаимодействия в полный гамильтониан многоэлектронной системы имеет вид

$$\mathcal{H}'_{ss} = \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} D(f_1, f_2) [(S_{f_1}, S_{f_2}) - 3(e_{f_1 f_2}, S_{f_1})(e_{f_1 f_2}, S_{f_2})] - \\ - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} 4\mu_B^2 \frac{8\pi}{3} (S_{f_1}, S_{f_2}) \delta(r_{f_1 f_2}), \quad (7.1)$$

где

$$D(f_1, f_2) = \frac{4\mu_B^2}{|r_{f_1 f_2}|^3}, \quad e_{f_1 f_2} = \frac{r_{f_1 f_2}}{|r_{f_1 f_2}|}, \quad (7.2)$$

$\mu_B = \frac{e}{2mc} (\hbar)$ — магнитный момент электрона; $r_{f_1 f_2} = r_{f_1} - r_{f_2}$ — расстояние между электронами, принадлежащими узлам f_1 и f_2 .

Вклад от спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$\mathcal{H}'_{s.o.} = \frac{\mu_B}{mc} \sum_f ([\nabla_{r_f} U \times p_f], S_f) + \\ + \frac{\mu_B}{mc} \sum_{f_1, f_2} \frac{2e}{|r_{f_1 f_2}|^3} ([r_{f_1 f_2} \times p_{f_2}], S_{f_1}), \quad (7.3)$$

где $\nabla_r U$ — кулоновское поле всех зарядов (атомных остовов и электронов), действующих на данный электрон,

$p_f = -i \frac{\partial}{\partial r_f}$ — оператор импульса f -го электрона. Иногда ограничиваются учетом взаимодействия спинового магнитного момента электрона только с его орбитальным моментом для данного атома. В этом случае выражение (7.3) можно упростить:

$$\mathcal{H}_{s.o}'' = \frac{\mu_B}{mc} \sum_f \frac{1}{r_f} \frac{\partial U}{\partial r_f} (L_f, S_f), \quad (7.4)$$

где L_f — оператор орбитального момента электрона f -го атома, U — потенциальная энергия электрона в поле атомного остова.

Для нас существенно, что энергия спин-спинового взаимодействия (7.1) является квадратичной формой по спинным операторам S_f , а энергия спин-орбитального взаимодействия (7.3) или (7.4) — билинейной формой по спинным операторам S_f и операторам количества движения p_f с вещественными коэффициентами. В этом случае нет инвариантности полного гамильтониана относительно преобразования поворота спинов, однако сохраняется инвариантность относительно преобразования (6.7).

Возвратимся к эквивалентному гамильтониану общего вида (6.6). Будем считать, что при его выводе были учтены магнитные взаимодействия электронов вида (7.1) и (7.3) или (7.4). Поскольку эквивалентный гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}$ допускает те же преобразования, что и исходный гамильтониан, то, очевидно, $\tilde{\mathcal{H}}$ уже не будет инвариантен относительно преобразования поворота спинов, но сохранит инвариантность относительно преобразования (6.7).

Примем во внимание, что коэффициенты разложения по степеням спинных операторов являются вещественными функциями (в силу самосопряженности $\tilde{\mathcal{H}}$). Следовательно, эквивалентный гамильтониан будет парным скаляром относительно спинных операторов.

Запишем $\tilde{\mathcal{H}}$ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = & G_0 - \frac{1}{2} \sum I_{\alpha_1 \alpha_2} (f_1, f_2) S_{f_1}^{\alpha_1} S_{f_2}^{\alpha_2} - \\ & - \frac{1}{4!} \sum I_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4} (f_1, f_2, f_3, f_4) S_{f_1}^{\alpha_1} S_{f_2}^{\alpha_2} S_{f_3}^{\alpha_3} S_{f_4}^{\alpha_4}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Заметим, что величины $I_{a_1 a_2}$, $I_{a_1 a_2 a_3 a_4}$ преобразуются как тензоры относительно допускаемых данной задачей преобразований спиновых и обычных переменных.

Величину $I_{a_1 a_2}$ будем называть тензором обменного взаимодействия. Для нее имеют место условия:

$$I_{a_1 a_2}(f_1, f_2) = I_{a_2 a_1}(f_2, f_1) = I_{a_2 a_1}(f_1, f_2). \quad (7.6)$$

Так как рассматриваемые здесь взаимодействия не меняются при изменении направлений в обычном пространстве на обратные (6.10), то

$$I_{a_1 a_2}(f_1, f_2) = I_{a_1 a_2}(-f_1, -f_2), \\ I_{a_1 a_2 a_3 a_4}(f_1, f_2, f_3, f_4) = I_{a_1 a_2 a_3 a_4}(-f_1, -f_2, -f_3, -f_4). \quad (7.7)$$

Наконец, из инвариантности гамильтониана системы относительно трансляций на величину, кратную периоду решетки (6.12), и из (7.7) следует, что величины I для простой решетки должны быть функциями относительных расстояний:

$$I_{a_1 a_2}(f_1, f_2) = I_{a_1, a_2}(|f_1 - f_2|), \\ I_{a_1 a_2 a_3 a_4}(f_1, f_2, f_3, f_4) = I_{a_1 a_2 a_3 a_4}(|f_1 - f_2|, |f_2 - f_3|, \dots). \quad (7.8)$$

Как и в предыдущем параграфе, мы можем теперь включить в рассмотрение внешнее магнитное поле, добавляя к полученному выражению оператор зеемановской энергии.

Условимся разделять в гамильтониане спиновой системы изотропную и анизотропную части энергии взаимодействия спинов. Последнюю будем называть оператором энергии магнитно-кристаллографической анизотропии¹⁾.

¹⁾ Конкретная форма оператора энергии магнитно-кристаллографической анизотропии определяется группой симметрии магнитной решетки.

Н. В. Белов, Н. Н. Непорова и Т. С. Смирнова (1956), Б. А. Тавгер и В. М. Зайцев (1956) табулировали магнитные пространственные и точечные группы. В. Л. Инденбом (1960) показал, что эти группы изоморфны обычным пространственным и точечным группам.

Виллейн (1959), Йошимори (1959), Каплан (1959), Каплан и Лайонс (1960), Берто (1960), (1961, а, б) и др. рассмотрели распре-

Изотропную часть взаимодействия обычно записывают в виде (6.8). Но, вообще говоря, в нее могут входить и скалярные функции более высоких порядков по степеням спиновых операторов:

$$-\frac{1}{2} \sum I(f_1, f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}) - \\ - \frac{1}{4!} \sum I(f_1, f_2, f_3, f_4)([S_{f_1} \times S_{f_2}], [S_{f_3} \times S_{f_4}]) - \dots$$

При вычислениях вклады от четверной и более высоких форм считают ничтожно малыми и потому их не учитывают¹⁾. В дальнейшем мы будем поступать так же.

Для одноосного ферромагнетика энергия анизотропии в низшем порядке по степеням спиновых операторов имеет, очевидно, следующий вид:

$$\mathcal{H}_A = -\frac{1}{2} \sum I_a(f_1, f_2) S_{f_1}^z S_{f_2}^z. \quad (7.9)$$

Для ферромагнетика с кубической симметрией энергия анизотропии в низшем порядке имеет вид

$$\mathcal{H}_A = -\frac{1}{4!} \sum_{(\alpha_1 \neq \alpha_2)} I_a(f_1, f_2, f_3, f_4) S_{f_1}^{\alpha_1} S_{f_2}^{\alpha_1} S_{f_3}^{\alpha_2} S_{f_4}^{\alpha_2}. \quad (7.10)$$

Величины $I_a(f_1, f_2)$, $I_a(f_1, f_2, f_3, f_4)$ будем называть интегралами магнитно-кристаллографической анизотропии. Из предыдущих соображений видно, что они порядка спин-спиновой и спин-орбитальной энергии взаимодействия.

Если спин в узле $S \geq 1$, то при представлении гамильтониана через спиновые операторы возможно появление произведений операторов, относящихся к одному узлу. В этом случае оператор энергии анизотропии будет содержать слагаемые, относящиеся к одному узлу

деление магнитных моментов в решетке при определенных предположениях об их энергии взаимодействия (об обменных интегралах). При этом обычно учитывалась только трансляционная симметрия решетки.

Александр (1962) и Зак (1964) рассмотрели связь между магнитными структурами и симметрией кристаллической решетки. Димок и Уилер (1962) исследовали симметричные свойства волновых функций магнитных кристаллов в спин-волновом приближении; общий обзор этого круга вопросов дан Крекнеллом (1969).

¹⁾ См. также Араи (1962).

каждое. Эта часть анизотропии носит название одноионной. Для одноосных и кубических кристаллов она соответственно имеет вид

$$\mathcal{H}'_A = -\frac{1}{2} \sum I_a(f) (S_f^z)^2, \quad (7.11)$$

$$\mathcal{H}'_A = -\frac{1}{4!} \sum I_a(f) \{(S_f^x)^4 + (S_f^y)^4 + (S_f^z)^4\}. \quad (7.12)$$

Выражения подобного вида используются, например, в теории парамагнитного резонанса (см. С. А. Альтшулер и Б. М. Козырев) (1961)).

Иногда одноосная анизотропия вводится как некоторое эффективное поле анизотропии, подобное внешнему магнитному полю. Рассмотрим выражение (7.9) для энергии анизотропии. Если величина $I_a(f_1, f_2)$ убывает с увеличением расстояния $|f_1 - f_2|$ достаточно медленно и решетка простая, то сумму

$$\frac{1}{2} \sum_{f'} I_a(f - f') S_{f'}^z$$

можем приближенно заменить постоянной. Запишем ее как μH_a^z , тогда выражение (7.9) переписется следующим образом:

$$\mathcal{H}_A \cong -\mu \sum H_a^z S_f^z. \quad (7.13)$$

Приближения такого вида используются, например, при исследовании одноосных антиферромагнетиков. Однако ввиду весьма приближенного характера выражения (7.13) даже качественный характер эффектов, связанных с анизотропией, передается не вполне точно (см. § 19).

Явление магнитной анизотропии в монокристаллах связано, как уже отмечалось, с существованием магнитных взаимодействий между электронами незаполненных внутренних оболочек. Микроскопическая теория магнитной анизотропии на основе учета магнитных взаимодействий электронов рассматривалась Гейзенбергом (1930), Пауэллом (1930), Блохом и Джентилем (1931), Ван Флеком (1937), (1947), С. В. Вонсовским (1940, а), Н. А. Потапковым (1962, а) и другими авторами.

Гамильтониан с дипольным взаимодействием. Такой гамильтониан был предложен Гольштейном и Примаковым (1940). Он также может быть рассмотрен в рамках приведенной схемы.

Выделим из квадратичной формы в (7.5) изотропную часть, относящуюся к собственно обменной энергии, и будем считать, что анизотропная часть полностью обязана дипольному взаимодействию магнитных моментов электронов различных узлов. Спин-орбитальное взаимодействие учитывать не будем. Тогда гамильтониан системы запишется в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = - \sum (H, S_f) - \frac{1}{2} \sum I(f_1, f_2) (S_{f_1}, S_{f_2}) - \frac{1}{2} \sum D(f_1, f_2) \{ (S_{f_1}, S_{f_2}) - 3(e_{f_1 f_2}^a, S_{f_1})(e_{f_1 f_2}^a, S_{f_2}) \}, \quad (7.14)$$

где $D(f_1, f_2)$ и $e_{f_1 f_2}^a$ — коэффициенты дипольного взаимодействия:

$$D(f_1, f_2) = \frac{\mu^2}{|f_1 - f_2|^3}, \quad e_{f_1 f_2}^a = \frac{f_1^a - f_2^a}{|f_1 - f_2|}. \quad (7.15)$$

Дипольное взаимодействие обычно на два-три порядка меньше обменного и потому может рассматриваться как малое возмущение. Однако ввиду «дальнодействующего» характера дипольное взаимодействие в ряде случаев оказывается весьма существенным. В частности, оно ведет к появлению размагничивающих факторов.

Размагничивающие факторы. Для случая эллипсоида их можно ввести, не учитывая в явном виде дипольного взаимодействия, более простым, хотя и менее точным способом (Огучи (1957)). Для этого к гамильтониану системы добавим оператор энергии размагничивания, который запишем по аналогии с классическим выражением (2.4):

$$\mathcal{H}_{\text{разм}} = \frac{1}{2N} \sum N_{\alpha\beta} \mathcal{M}^\alpha \mathcal{M}^\beta, \quad (7.16)$$

где $N_{\alpha\beta}$ — классические размагничивающие факторы, \mathcal{M}^α — компоненты оператора полного магнитного момента:

$$\mathcal{M}^\alpha = \mu \sum S_f^\alpha, \quad (7.17)$$

Заметим, что в предыдущих рассуждениях не делалось предположений относительно характера спинового упорядочения и соответствующие результаты в равной мере относятся к ферромагнетикам, антиферромагнетикам и ферримагнетикам. Кроме того, они также могут быть обобщены на случаи решеток, состоящих из нескольких сортов «магнитных» атомов.

Гамильтониан $s-d$ -обменной модели¹⁾. В этой модели рассматриваются две группы уровней электронной системы: d - (или f -) уровни электронов внутренних незаполненных оболочек и s -уровни валентных электронов. Взаимодействие между электронами, находящимися на d -уровнях и на s -уровнях, рассматривается как малое возмущение.

В этих предположениях (С. В. Вонсовский и Е. А. Туров (1953)) гамильтониан этой модели может быть записан следующим образом:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{dd} + \mathcal{H}_{ss} + \mathcal{H}_{sd}, \quad (7.18)$$

где \mathcal{H}_{dd} представляет оператор энергии взаимодействия d -электронов, \mathcal{H}_{ss} — s -электронов и \mathcal{H}_{sd} — энергии взаимодействия d - и s -электронов:

$$\mathcal{H}_{dd} = -\frac{1}{2} \sum I(f_1, f_2) (S_{f_1}, S_{f_2}), \quad (7.19)$$

$$\mathcal{H}_{ss} = \sum E_{v\sigma} a_{v\sigma}^+ a_{v\sigma}, \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{sd} = & -\frac{1}{2N} \sum B(v_1 - v_2) e^{-i(v_1 - v_2, f)} \times \\ & \times \{ S_f^z (a_{v_1, -1/2}^+ a_{v_2, -1/2} - a_{v_1, 1/2}^+ a_{v_2, 1/2}) + \\ & + S_f^x (a_{v_1, -1/2}^+ a_{v_2, 1/2} + a_{v_1, 1/2}^+ a_{v_2, -1/2}) + \\ & + i S_f^y (a_{v_1, 1/2}^+ a_{v_2, -1/2} - a_{v_1, -1/2}^+ a_{v_2, 1/2}) \}, \end{aligned} \quad (7.21)$$

где S_f^a — оператор спина электрона, принадлежащего узлу f ; $a_{v\sigma}^+$, $a_{v\sigma}$ ($\sigma = \pm 1/2$) — ферми-операторы порождения и уничтожения s -электрона в состоянии с волновым вектором v и спином σ ; $E_{v\sigma}$ — энергия электрона в состоянии (v, σ) ; I — интеграл $d-d$ -обмена; B — интеграл $s-d$ -обмена; N — число узлов в решетке.

¹⁾ См. примечания на стр. 35.

Выясним физический смысл оператора \mathcal{H}_{sd} . Введем обозначения:

$$a_{g\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} a_{\nu\sigma} e^{i(\nu, g)}, \quad I(f) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} B(\nu) e^{i(f, \nu)}. \quad (7.22)$$

Очевидно, что операторы $a_{g\sigma}^+$, $a_{g\sigma}$ могут быть истолкованы как операторы порождения и уничтожения s -электрона со спином σ в узле g . В этих обозначениях (7.21) переписывается в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{sd} = & -\frac{1}{2} \sum I(f-g) \{ S_f^z (a_{g,-1/2}^+ a_{g,-1/2} - a_{g,1/2}^+ a_{g,1/2}) + \\ & + S_f^x (a_{g,-1/2}^+ a_{g,1/2} + a_{g,1/2}^+ a_{g,-1/2}) + \\ & + i S_f^y (a_{g,1/2}^+ a_{g,-1/2} - a_{g,-1/2}^+ a_{g,1/2}) \}. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Введем по определению следующие операторы (Н. Н. Боголюбов (1949)):

$$\begin{aligned} \sigma_g^x &= \frac{1}{2} (a_{g,-1/2}^+ a_{g,1/2} + a_{g,1/2}^+ a_{g,-1/2}), \\ \sigma_g^y &= \frac{i}{2} (a_{g,1/2}^+ a_{g,-1/2} - a_{g,-1/2}^+ a_{g,1/2}), \\ \sigma_g^z &= \frac{1}{2} (a_{g,-1/2}^+ a_{g,-1/2} - a_{g,1/2}^+ a_{g,1/2}); \end{aligned} \quad (7.24)$$

допустим, что эти операторы определены на пространстве функций от чисел заполнения, удовлетворяющих условию:

$$n_{f,-1/2} + n_{f,1/2} = 1, \quad n_{f\sigma} = a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} \quad (\sigma = \pm 1/2). \quad (7.25)$$

Легко проверить, что при этом операторы (7.24) будут удовлетворять перестановочным соотношениям (5.1) для спиновых операторов (в случае $S = 1/2$). Для s -электронов условие (7.25) не имеет места, но если этим обстоятельством пренебречь, то оператор $s-d$ -взаимодействия примет вид обычного обменного взаимодействия

$$\mathcal{H}_{sd} = - \sum I(f-g) (S_f, \sigma_g). \quad (7.26)$$

Таким образом, принятое в теории $s-d$ -модели выражение для взаимодействия s - и d -электронов действительно может интерпретироваться как обменное,

Спин-фононный гамильтониан. До сих пор мы считали узлы решетки неподвижными. Однако при температурах, отличных от нуля, атомы совершают тепловые колебания. Из-за этого меняется энергия обменного взаимодействия и возникает взаимодействие спинов с колебаниями решетки или фононами.

Рассмотрим для простоты изотропный ферромагнетик. Обозначим через δf величину смещения атома из равновесного положения и разложим обменный интеграл по относительным смещениям, ограничиваясь линейными по δf членами. Представим далее смещения в виде суммы нормальных колебаний, добавим к первоначальному оператору оператор энергии собственных колебаний решетки и перейдем к представлению вторичного квантования. В результате получим следующее выражение для полного гамильтониана системы:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_{dd} + \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_{d-ph}, \quad (7.27)$$

где \mathcal{H}_{dd} , \mathcal{H}_{ph} — операторы собственных энергий спиновой и фононной подсистем:

$$\mathcal{H}_{dd} = -\mu \sum (H, S_f) - \frac{1}{2} \sum I(f_1 - f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}), \quad (7.28)$$

$$\mathcal{H}_{ph} = \sum \omega_k \beta_k^+ \beta_k,$$

β_k^+ , β_k — операторы порождения и уничтожения фонона с энергией ω_k (индекс k включает в себя волновой вектор фонона и номер соответствующей ветви фононного спектра), удовлетворяющие бозевским перестановочным соотношениям; \mathcal{H}_{d-ph} — оператор спин-фононной энергии взаимодействия:

$$\mathcal{H}_{d-ph} = \sum A_k(f_1 - f_2)(S_{f_1}, S_{f_2})(b_k - b_{-k}^+)(e^{i(f_1, v)} - e^{i(f_2, v)}),$$

$$A_k(f) = i \sqrt{\frac{1}{2V\rho\omega_k}} (e_k, \nabla_f I(f)), \quad (7.29)$$

V — объем системы, ρ — плотность вещества, e_k — единичный вектор поляризации фонона k . [Физические свойства системы, описываемой гамильтонианом вида (7.27), рассмотрены в главе V Дополнения (Ред.).]

Слабый ферромагнетизм. Это явление обязано небольшому отклонению магнитных моментов подрешеток антиферромагнетика от строго антипараллельного расположения (см. также § 1). Появление этого отклонения объясняется (по И. Е. Дзялошинскому (1957), (1958)) существованием магнитно-кристаллографической анизотропии вида

$$\sum_{f_1, f_2} (D(f_1, f_2), [S_{f_1} \times S_{f_2}]), \quad (7.30)$$

где $D(f_1, f_2)$ — некоторая функция от координат узлов решетки; по порядку величины она равна энергии спин-спинового или спин-орбитального взаимодействия. Мория (1960) и Ю. М. Сеидов (1963), (1973) показали, что косвенный обмен также может привести к выражению вида (7.30). Вопросы феноменологической теории слабого ферромагнетизма подробно рассматриваются в монографии Е. А. Турова (1963).

ЭЛЕМЕНТЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Для квантовой статистической механики основными задачами являются определение термодинамических характеристик системы по заданному гамильтониану системы и вычисление средних значений динамических переменных, которые, собственно, и являются наблюдаемыми величинами.

В этой главе мы приведем сводку тех ее положений и результатов, на которые будем опираться в последующем изложении. Отдельно рассмотрим вопрос о вырождении состояний в случае статистического равновесия и квазисредних.

§ 8. Статистический оператор и термодинамические функции¹⁾

Рассмотрим систему, состоящую из N частиц, заключенных в объеме V ; гамильтониан системы обозначим через \mathcal{H} . Далее условимся рассматривать только объемные свойства, сохраняющиеся при предельном переходе $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $N/V = v^{-1} = \text{const}$.

Максимально полное описание системы в квантовой статистической механике дается статистическим оператором ρ , введенным впервые Нейманом (1927, а, б) для произвольных температур и Л. Д. Ландау (1927) для нуля температуры. В «координатном» представлении

¹⁾ См. монографии Гиббса (1946), Неймана (1932) и Н. Н. Боголюбова (1949), а также статьи Неймана (1927, а, б) и Л. Д. Ландау (1927).

статистический оператор¹⁾ записывается в виде

$$\rho(\xi, \xi', t) = \sum_n W_n \psi_n(\xi, t) \psi_n^*(\xi', t),$$

$$\sum_n W_n = 1 \quad (W_n \geq 0), \quad (8.1)$$

где $\psi_n(\xi, t)$ — нормированная волновая функция n -го состояния системы, ξ — совокупность независимых переменных («координат»), t — время, W_n — вероятность пребывания системы в n -ом состоянии. Например, для системы N частиц под ξ будем понимать совокупность всех координат x и спинов σ частиц системы, $\xi = (x_1\sigma_1; x_2\sigma_2; \dots; x_N\sigma_N)$, или совокупность их импульсов и спинов, $\xi = (p_1\sigma_1; p_2\sigma_2; \dots; p_N\sigma_N)$ и т. д.

Так как эволюция n -го состояния системы во времени определяется уравнением

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(\xi, t) = \mathcal{H} \psi_n(\xi, t),$$

где \mathcal{H} — оператор полной энергии системы, то уравнение движения для оператора ρ имеет вид

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{H} \rho - \rho \mathcal{H}. \quad (8.2)$$

Согласно определению (8.1) оператор ρ нормирован на единицу

$$\text{Sp}_{(\xi)} \rho = 1; \quad (8.3)$$

значком под символом шпура будем обозначать переменные, по которым берется шпур.

В квантовой механике каждой физической величине A сопоставляется оператор \mathcal{A} . Наблюдаемыми на опыте значениями этой величины в состоянии, характеризующемся собственной функцией ψ_n , будут квантовомеханические средние $A = (\psi_n, \mathcal{A} \psi_n)$. Если ψ_n является собственной функцией оператора \mathcal{A} , то наблюдаемое значение величины A будет собственным значением оператора \mathcal{A} .

В квантовой статистической механике наблюдаемыми величинами будут средние статистические значения или

¹⁾ Статистический оператор называют также матрицей плотности.

средние по ансамблю, которые определяются следующим образом:

$$A = \langle \mathcal{A} \rangle = \text{Sp} (\mathcal{A} \rho). \quad (8.4)$$

В случае статистического равновесия выражение (8.1) можно переписать в виде

$$\rho(\xi, \xi') = \sum_n W_n \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi'), \quad (8.5)$$

где $\psi_n(\xi)$ — собственные функции оператора полной энергии системы:

$$\mathcal{H} \psi_n(\xi) = \mathcal{E}_n \psi_n(\xi).$$

Для систем тождественных частиц нужно иметь в виду, что волновые функции ψ_n должны удовлетворять условиям симметрии или антисимметрии в зависимости от того, какой статистике, Бозе или Ферми, подчиняются частицы. В соответствии с этим в выражении (8.5) суммирование распространяется лишь на состояния, обладающие должной симметрией или антисимметрией относительно перестановок частиц.

Уравнение (8.2) в стационарном случае принимает вид

$$\mathcal{H} \rho - \rho \mathcal{H} = 0, \quad (8.6)$$

при этом выражение (8.5) можно рассматривать как решение уравнения (8.6).

Распределение вероятностей W_n для случая статистического равновесия выбирается в виде

$$W_n = Q^{-1} e^{-\frac{\mathcal{E}_n}{\vartheta}}, \quad (8.7)$$

где Q — нормировочный множитель, $\vartheta = kT$ — модуль канонического распределения (T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана), \mathcal{E}_n — собственные значения гамильтониана системы.

Величина Q носит название статистической суммы или суммы состояний и определяется из условия нормировки W_n (8.7) на единицу:

$$Q = \sum_n e^{-\frac{\mathcal{E}_n}{\vartheta}}. \quad (8.8)$$

Статистическая сумма Q связана со свободной энергией F системы соотношением:

$$F = -\vartheta \ln Q. \quad (8.9)$$

Принимая во внимание (8.7), (8.9) перепишем выражение (8.5) для ρ в следующем виде:

$$\rho(\xi, \xi') = \sum_n e^{\frac{F - \varepsilon_n}{\vartheta}} \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi'). \quad (8.10)$$

Величину ρ можно рассматривать как оператор, который задан только на подпространстве функций, удовлетворяющих условиям симметрии или антисимметрии, и переписать выражение для нее в виде

$$\rho = \exp \frac{1}{\vartheta} (F - \mathcal{H}). \quad (8.11)$$

При этом формулы (8.8), (8.9) для суммы состояний и свободной энергии принимают вид

$$Q = \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right) = \sum_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{\vartheta}}, \quad (8.12)$$

$$F = -\vartheta \ln \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right). \quad (8.13)$$

Выражение (8.11) называется каноническим распределением и является, как нетрудно заметить, обобщением известного канонического распределения Гиббса в классической статистике на случай квантовой статистики. Заметим, что распределение (8.11) можно рассматривать как решение операторного уравнения (8.6).

Если, кроме полной энергии, имеются и другие интегралы движения I_1, \dots, I_q , например компоненты полного импульса системы, полного момента количества движения и др., то распределение (8.11) заменяется следующим:

$$\rho = \exp \frac{1}{\vartheta} \left(F - \mathcal{H} + \sum_{1 \leq \alpha \leq q} \lambda_\alpha I_\alpha \right), \quad (8.14)$$

где λ_α — некоторые числа.

При использовании распределения (8.11) для систем с постоянным числом частиц N нужно иметь в виду, что

шпуры в формулах для свободной энергии и для средних значений динамических переменных должны браться только по состояниям с данным N . Обычно это обстоятельство усложняет вычисления. В таких случаях удобнее перейти к большому каноническому распределению Гиббса.

Введем оператор полного числа частиц \mathcal{N} в системе. В представлении вторичного квантования

$$\mathcal{N} = \sum_r n_r, \quad (8.15)$$

где n_r — оператор числа частиц в r -м одночастичном состоянии. В случае статистики Бозе

$$n_r = \beta_r^+ \beta_r \quad (= 0, 1, 2, \dots),$$

в случае статистики Ферми

$$n_r = \alpha_r^+ \alpha_r \quad (= 0, 1).$$

Так как число частиц N в системе задано, то оператор полного числа частиц \mathcal{N} является интегралом движения и распределение должно иметь вид (8.14).

Заменим это распределение большим каноническим распределением Гиббса¹⁾:

$$\rho = \exp \frac{1}{\vartheta} (\Omega - \mathcal{H} + \lambda \mathcal{N}) \quad (8.16)$$

(учитываются состояния с любыми значениями N); Ω — термодинамический потенциал системы в переменных λ , ϑ , V , определяется из условия нормировки распределения (8.16) на единицу

$$\Omega = -\vartheta \ln \text{Sp} \exp \frac{1}{\vartheta} (\lambda \mathcal{N} - \mathcal{H}), \quad (8.17)$$

λ — химический потенциал, определяется из условия равенства среднего значения \mathcal{N} числу частиц в системе

$$N = \langle \mathcal{N} \rangle = \text{Sp} \langle \mathcal{N} \rho \rangle. \quad (8.18)$$

¹ Возможность такой замены основывается на термодинамической эквивалентности ансамблей. См., например, книгу Хилла (1960).

В соответствии с определением (8.16) шнуры вычисляются по всем состояниям, без ограничения на число частиц в системе.

Для систем, в которых число частиц в системе неопределенно, $\lambda = 0$. В этом случае гамильтониан системы всегда таков, что \mathcal{H} не является интегралом движения.

Для случая идеальных газов (Бозе или Ферми) с переменным числом частиц может возникнуть кажущееся противоречие в связи с тем, что операторы полной энергии и полного числа частиц для них коммутируют и, казалось бы, химический потенциал должен быть отличен от нуля. Оно снимается тем, что для установления статистического равновесия в гамильтониан необходимо включить еще сколь угодно малое, но конечное взаимодействие, которое не сохраняет числа частиц в системе.

Установим теперь некоторые термодинамические соотношения для канонического (8.11) и большого канонического (8.16) распределения Гиббса.

Рассмотрим совокупность внешних параметров a_1, \dots, a_r , характеризующих макроскопическое состояние статистического равновесия. Такими параметрами могут быть, например, объем системы V , напряженность внешнего магнитного поля H и т. д. Пусть параметры a меняются столь медленно, что на интервалах порядка времени установления статистического равновесия их можно считать постоянными. Тогда можно считать, что в каждый данный момент времени система находится в состоянии статистического равновесия.

Обратимся к случаю канонического распределения Гиббса (8.11).

Будем рассматривать величины a как обобщенные координаты. Тогда их изменение вызывает появление соответствующих обобщенных сил:

$$\mathcal{A}_i = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_i}.$$

Их наблюдаемые значения, в соответствии с общими правилами, определяются следующим образом:

$$\langle \mathcal{A}_i \rangle = - \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_i} \right\rangle, \quad (8.19)$$

где усреднение производится с весом ρ (8.11). С другой стороны, дифференцируя (8.13) по a , получаем:

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial a_i} \right\rangle = \frac{\partial F}{\partial a_i}. \quad (8.20)$$

Из сравнения последних двух выражений находим:

$$\langle \mathcal{A}_i \rangle = - \frac{\partial F}{\partial a_i}. \quad (8.21)$$

Например, если H — внешнее магнитное поле, то средняя намагниченность

$$M^\alpha = - \frac{\partial F}{\partial H^\alpha} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (8.22)$$

Средняя энергия системы U равна

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle. \quad (8.23)$$

Продифференцируем по ϑ равенство

$$e^{-\frac{F}{\vartheta}} = \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right),$$

являющееся определением свободной энергии. Это дает нам:

$$\left(\frac{F}{\vartheta^2} - \frac{1}{\vartheta} \frac{\partial F}{\partial \vartheta} \right) e^{-\frac{F}{\vartheta}} = \frac{1}{\vartheta^2} \text{Sp} \left(\mathcal{H} e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right).$$

Используя определение средней энергии (8.23), получаем отсюда уравнение Гиббса — Гельмгольца

$$F = \langle \mathcal{H} \rangle + \vartheta \frac{\partial F}{\partial \vartheta}. \quad (8.24)$$

При нуле температуры свободная и средняя энергии совпадают. Поэтому уравнение (8.24) можно проинтегрировать при начальном условии

$$F_{\vartheta=0} = \langle \mathcal{H} \rangle_{\vartheta=0}.$$

В результате получим следующее выражение свободной энергии через среднюю энергию:

$$F = \langle \mathcal{H} \rangle_{\vartheta=0} - \vartheta \int_0^{\vartheta} \frac{d\vartheta'}{(\vartheta')^2} \{ \langle \mathcal{H} \rangle_{\vartheta'} - \langle \mathcal{H} \rangle_{\vartheta'=0} \}. \quad (8.24a)$$

Из сравнения (8.24) с термодинамической формулой для свободной энергии:

$$F = U - \vartheta S,$$

где S — энтропия системы, получаем:

$$S = - \frac{\partial F}{\partial \vartheta} = - \frac{1}{\vartheta} (F - \langle \mathcal{H} \rangle). \quad (8.25)$$

Энтропию системы можно также записать в следующем виде (Нейман (1927, 6)):

$$S = - \text{Sp} (\rho \ln \rho). \quad (8.26)$$

Тождественность формул (8.26) и (8.25) видна из того, что согласно (8.11)

$$\ln \rho = \frac{1}{\vartheta} (F - \mathcal{H}).$$

Выражение для намагниченности можно записать в несколько ином виде. Для этого примем во внимание, что при любом гамильтониане \mathcal{H}_0 , описывающем спиновую систему, оператор энергии взаимодействия с внешним полем (см., например, (6.14), или (7.14)) имеет вид

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_f \mu_f (H, S_f),$$

где S_f — оператор спина в узле f , μ_f — соответствующий магнитный момент. Полный гамильтониан системы при этом запишется в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1,$$

где \mathcal{H}_0 не зависит от H . Используя (8.9), (8.12), имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial H^\alpha} &= - \vartheta \frac{1}{Q} \frac{\partial Q}{\partial H^\alpha} = \\ &= - \frac{1}{Q} \text{Sp} \left\{ \sum_f \mu_f S_f^\alpha e^{-\frac{1}{\vartheta} (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} \right\} = - \sum_f \mu_f \langle S_f^\alpha \rangle. \end{aligned}$$

Так как $\mathcal{M}^\alpha = \sum_f \mu_f S_f^\alpha$ — оператор полного магнитного момента системы, а $-\frac{\partial F}{\partial H^\alpha} = M^\alpha$ — средняя

намагниченность, то отсюда получаем:

$$M^a = \langle \mathcal{M}^a \rangle = \sum_f \mu_f \langle S_f^a \rangle. \quad (8.27)$$

Для системы, состоящей из N одинаковых спинов,

$$M^a = M_0 \sigma_S^a, \quad M_0 = N \mu S \quad (\mu_f = \mu), \quad (8.28)$$

$$\sigma_S^a = S^{-1} \langle S_f^a \rangle, \quad (8.29)$$

где M_0 — полный магнитный момент системы, σ_S — относительная намагниченность на один узел.

В частном случае, когда гамильтониан системы представляется в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \sum_v E_v n_v \quad (n_v = 0, 1, 2, \dots), \quad (8.30)$$

где \mathcal{E}_0 , E_v — некоторые функции внешнего магнитного поля H , выражение для намагниченности можно представить еще в одной форме. С этой целью вычислим статистическую сумму для гамильтониана (8.30):

$$Q = \sum_{\dots, n_v, \dots} e^{-\frac{1}{\vartheta} \left(\mathcal{E}_0 + \sum_v E_v n_v \right)} = e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\vartheta}} \prod_v \left(1 - e^{-\frac{E_v}{\vartheta}} \right)^{-1}. \quad (8.31)$$

Согласно (8.9) для свободной энергии получаем следующее выражение:

$$F = -\vartheta \ln Q = \mathcal{E}_0 + \vartheta \sum_v \ln \left(1 - e^{-\frac{E_v}{\vartheta}} \right). \quad (8.32)$$

Дифференцируя (8.31) по E_μ , получаем выражения для средних значений чисел заполнений:

$$\langle n_\mu \rangle = \frac{\partial F}{\partial E_\mu} = \frac{\sum_{\dots, n_v, \dots} n_\mu e^{-\frac{1}{\vartheta} \left(\mathcal{E}_0 + \sum_v E_v n_v \right)}}{\sum_{\dots, n_v, \dots} e^{-\frac{1}{\vartheta} \left(\mathcal{E}_0 + \sum_v E_v n_v \right)}} \quad (8.33)$$

или

$$\langle n_\mu \rangle = \left(e^{\frac{E_\mu}{\vartheta}} - 1 \right)^{-1}. \quad (8.34)$$

Наконец, подставляя (8.32) в (8.22), получаем:

$$M^{\alpha} = - \frac{\partial F}{\partial H^{\alpha}} = - \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial H^{\alpha}} - \sum_{\mu} \langle n_{\mu} \rangle \frac{\partial E_{\mu}}{\partial H^{\alpha}} \quad (\alpha = x, y, z). \quad (8.35)$$

Формула (8.35) оказывается удобной при конкретных вычислениях для систем с гамильтонианом вида (8.30).

Теплоемкость C_v при постоянном объеме равна

$$C_v = k \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial \theta} = - k \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \frac{F}{\theta} = k \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \ln Q, \quad (8.36)$$

где k — постоянная Больцмана.

Для систем с гамильтонианом вида (8.30) получаем:

$$C_v = \frac{k}{\theta^2} \sum_v E_v^2 (\langle n_v^2 \rangle - \langle n_v \rangle^2) = \frac{k}{\theta^2} \sum_v E_v^2 (\langle n_v \rangle + \langle n_v \rangle^2). \quad (8.37)$$

Подобным же образом можно определить термодинамические функции для большого канонического распределения Гиббса.

§ 9. Статистические операторы комплексов частиц¹⁾

Рассмотрим для простоты случай системы, состоящей из N одинаковых частиц. Обозначим через $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ переменные первой, второй, ..., N -й частицы. Тогда волновые функции всей системы будут являться функциями от ξ_1, \dots, ξ_N .

$$\psi_n(\xi, t) = \psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N, t), \quad (9.1)$$

а операторы, действующие на эти функции, будут матрицами вида

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N). \quad (9.2)$$

Например, уравнение Шредингера для системы частиц с парным взаимодействием в координатном представлении

$$\left\{ \sum_i \left(-\frac{1}{2m} \Delta_{x_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \Phi(x_i - x_k) \right\} \psi(x_1, \dots, x_N) = \mathcal{E} \psi(x_1, \dots, x_N),$$

¹⁾ См. монографию Н. Н. Боголюбова (1949).

где $\Phi(x_i - x_k)$ — энергия взаимодействия i -й и k -й частиц, можно записать в виде

$$\int \mathcal{H}(x_1, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_N) \psi(x'_1, \dots, x'_N) dx'_1 \dots dx'_N = \mathcal{E} \psi(x_1, \dots, x_N),$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(x_1, \dots, x_N; x'_1, \dots, x'_N) &= \\ &= \sum_i \delta(x_i - x'_i) \left(-\frac{1}{2m} \Delta_{x'_i} \right) \prod_{l \neq i} \delta(x_l - x'_l) + \\ &+ \sum_{\substack{i, k \\ (i \neq k)}} \delta(x_i - x'_i) \delta(x_k - x'_k) \Phi(x'_i - x'_k) \prod_{l \neq i, k} \delta(x_l - x'_l). \end{aligned}$$

Уравнение для частицы в поле центральных сил

$$-\frac{1}{2m} \Delta_x \psi(x) + \Phi(x) \psi(x) = \mathcal{E} \psi(x)$$

в импульсном представлении имеет вид

$$\frac{p^2}{2m} \psi(p) + \int v(p - p') \psi(p') dp' = \mathcal{E} \psi(p),$$

где $v(p)$ — фурье-образ потенциала $\Phi(x)$. Это уравнение в матричной форме переписывается следующим образом

$$\int \mathcal{H}(p, p') \psi(p') dp' = \mathcal{E} \psi(p),$$

где

$$\mathcal{H}(p, p') = \delta(p - p') \frac{p'^2}{2m} + v(p - p').$$

Рассмотрим статистический оператор

$$\begin{aligned} \rho(\xi_1, \dots, \xi_N; \xi'_1, \dots, \xi'_N; t) &= \\ &= \sum_n W_n \psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N, t) \psi_n^*(\xi'_1, \dots, \xi'_N, t). \end{aligned} \quad (9.3)$$

В случае частиц, подчиняющихся статистике Бозе,

$$P \psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N, t) = \psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N; t), \quad (9.4)$$

где P — оператор перестановки переменных ξ_i ($i = 1, 2, \dots, N$).

$$P\psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N, t) = (-1)^p \psi_n(\xi_1, \dots, \xi_N, t); \quad (9.5)$$

Поэтому в обоих случаях

$$P\rho = \rho P, \quad (9.6)$$

$$P\rho P^{-1} = \rho. \quad (9.7)$$

При исследовании конкретных динамических систем обычно не требуется знания полного статистического оператора. Действительно, при вычислении средних значений динамических переменных приходится иметь дело с операторами, зависящими от переменных одной, двух, ..., s частиц:

$$\begin{aligned} A_1 &= \sum_{1 \leq r \leq N} \mathcal{A}(r), \quad \mathcal{A}_2 = \sum_{1 \leq r_1 < r_2 \leq N} \mathcal{A}(r_1, r_2), \dots, \\ \mathcal{A}_s &= \sum_{1 \leq r_1 < r_2 < \dots < r_s \leq N} \mathcal{A}(r_1, r_2, \dots, r_s), \end{aligned} \quad (9.8)$$

где аргумент r_i обозначает зависимость от координат i -й частицы.

Их средние значения вычисляются через частичные свертки¹⁾ оператора ρ . В самом деле, учитывая условие симметрии (9.7) оператора ρ относительно перестановки частиц, мы получаем:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_1 \rangle &= N \operatorname{Sp}_{(1)} \{ \mathcal{A}(1) \rho_1(1) \}, \\ \langle \mathcal{A}_2 \rangle &= \frac{N(N-1)}{2!} \operatorname{Sp}_{(1,2)} \{ \mathcal{A}(1, 2) \rho_2(1, 2) \}, \\ &\dots \dots \dots (9.9) \\ \langle \mathcal{A}_s \rangle &= \frac{N(N-1) \dots (N-s+1)}{s!} \times \\ &\quad \times \operatorname{Sp}_{(1,2,\dots,s)} \{ \mathcal{A}(1, 2, \dots, s) \rho_s(1, 2, \dots, s) \}, \end{aligned}$$

¹⁾ То есть через шпуры от ρ по части переменных.

где введены обозначения:

$$\rho_1(1) = \text{Sp}_{(2, \dots, N)} \rho(1, 2, \dots, N), \quad (9.10)$$

$$\rho_2(1, 2) = \text{Sp}_{(3, \dots, N)} \rho(1, 2, 3, \dots, N),$$

.....

$$\rho_s(1, 2, \dots, s) = \text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} \rho(1, 2, \dots, s, s+1, \dots, N);$$

для краткости используется следующая форма записи:

$$\rho_2(1, 2) \equiv \rho_2(\xi_1, \xi_2; \xi'_1, \xi'_2; t);$$

$$\text{Sp}_{(2)} \rho_2(1, 2) = \text{Sp}_{(\xi_2)} \rho_2(\xi_1, \xi_2; \xi'_1, \xi'_2; t) \text{ и т. п.}$$

Величины ρ_s условимся называть статистическими операторами комплексов из s частиц или s -частичными операторами плотности¹⁾.

Для операторов ρ_s , в силу (9.7) и (9.10), имеют место соотношения:

$$P_s \rho_s P_s^{-1} = \rho_s \quad (9.11)$$

$$\rho_s(1, \dots, s) = \text{Sp}_{(s+1)} \rho_{s+1}(1, \dots, s, s+1), \quad (9.12)$$

где P_s — оператор перестановки частиц комплекса.

Перейдем от операторов ρ_s к операторам F_s по формулам

$$F_s(1, \dots, s) = N(N-1) \dots (N-s+1) \rho_s(1, \dots, s). \quad (9.13)$$

Для них, согласно (9.12), будут иметь место соотношения

$$F_s(1, \dots, s) = \frac{1}{N-s} \text{Sp}_{(s+1)} F_{s+1}(1, \dots, s, s+1),$$

В пределе при фиксированном s и $N \rightarrow \infty$ в первом множителе справа можно пренебречь числом s по срав-

¹⁾ Статистические операторы комплексов частиц в связи с задачами квантовой статистики были введены в работах К. П. Гурова (1946), (1947), Н. Н. Боголюбова и К. П. Гурова (1947), а также Борна и Грина (1947). В этих и последующих работах был рассмотрен ряд задач статистической механики, в частности вопросы теории кинетических уравнений для квантовых систем. Ранние замечания о целесообразности введения статистических операторов комплексов частиц принадлежат, по-видимому, Хусими (1940).

нению с N . В результате для операторов F_s получим следующие соотношения:

$$P_s F_s P_s^{-1} = F_s, \quad (9.14)$$

$$F_s(1, \dots, s) = \frac{1}{N} \operatorname{Sp}_{(s+1)} F_{s+1} \quad (1, \dots, s, s+1). \quad (9.15)$$

Величины F_s по аналогии со случаем классической статистики будем называть операторами распределения или — не вполне точно, но более привычно — функциями распределения.

При этом выражения (9.9) для средних принимают вид

$$\langle \mathcal{A}_s \rangle = \frac{1}{s!} \operatorname{Sp}_{(1, \dots, s)} \{ \mathcal{A}(1, \dots, s) F_s(1, \dots, s) \}. \quad (9.16)$$

Запишем оператор \mathcal{A}_s (9.9) в представлении вторичного квантования (см. (3.41) и (3.42)):

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_s &= \sum_{1 \leq r_1 < \dots < r_s \leq N} \mathcal{A}(r_1, \dots, r_s) = \\ &= \frac{1}{s!} \sum A(f_1, \dots, f_s; f'_1, \dots, f'_s) a_{f_1}^+ \dots a_{f_s}^+ a_{f'_s} \dots a_{f'_1}, \end{aligned} \quad (9.17)$$

где a_f^+ , a_f — операторы порождения и уничтожения в одночастичном состоянии f ; $A_s(f_1, \dots, f_s; f'_1, \dots, f'_s)$ — соответствующие матричные элементы оператора \mathcal{A}_s . Возьмем среднее от \mathcal{A}_s (9.17) по ансамблю (см. (8.4)):

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_s \rangle &= \frac{1}{s!} \sum A(f_1, \dots, f_s; f'_1, \dots, f'_s) \times \\ &\quad \times \langle a_{f_1}^+ \dots a_{f_s}^+ a_{f'_s} \dots a_{f'_1} \rangle. \end{aligned} \quad (9.18)$$

Сравнивая (9.18) и (9.16), получаем для оператора F_s следующее выражение в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} F_s(1, \dots, s) &= F_s(f_1, \dots, f_s; f'_1, \dots, f'_s) = \\ &= \langle a_{f_1}^+ \dots a_{f_s}^+ a_{f'_s} \dots a_{f'_1} \rangle. \end{aligned} \quad (9.19)$$

В принципе задачи статистической механики в значительной мере решены, если известны операторы ρ_s или F_s . Основная трудность состоит именно в вычислении этих величин. Одним из методов является определение их из цепочки зацепляющихся уравнений, в каждое из которых входят F_s и F_{s+1} (К. П. Гуров (1946), (1947), Н. Н. Боголюбов и К. П. Гуров (1947), Н. Н. Боголюбов (1949)). Ниже мы будем пользоваться другим способом — определением F_s по функциям Грина (см. гл. VII—VIII).

§ 10. Статистическая теорема Вика — Блоха — Доминисиса¹⁾

При вычислении средних от произведений операторов порождения и уничтожения частиц в ряде случаев весьма полезной оказывается так называемая статистическая теорема Вика — Блоха — Доминисиса²⁾. Рассмотрим отдельно случаи ферми- и бозе-систем³⁾.

Пусть имеется система из N тождественных частиц, и пусть ее гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum E_f n_f \quad (n_f = a_f^\dagger a_f), \quad (10.1)$$

$$E_f = E'_f - \lambda,$$

где E'_f — энергия частицы в f -м состоянии, λ — химический потенциал, который введен для того, чтобы учесть постоянство числа частиц, и определяется обычным уравнением

$$\sum_f \langle n_f \rangle = N. \quad (10.2)$$

Усреднение здесь ведется со статистическим оператором

$$\rho = e^{\frac{\mathcal{Q} - \mathcal{H}}{\theta}} = \prod_f \rho_1(f), \quad \rho_1(f) = \frac{e^{-\frac{E_f}{\theta} n_f}}{\sum_{n_f} e^{-\frac{E_f}{\theta} n_f}}. \quad (10.3)$$

¹⁾ См. Блох и де Доминисис (1958).

²⁾ Приводимый ниже метод доказательства принадлежит Латтинжеру (1961, а).

³⁾ Обобщение на случай паули-операторов см. в работе С. В. Тябликова и В. А. Москаленко (1964) (см. также работу Кюнеля (1969)).

Будем называть *спариванием двух операторов* \mathcal{A}_1 и \mathcal{A}_2 среднее значение произведения этих операторов:

$$\overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2} = \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \rangle, \quad (10.4)$$

где \mathcal{A} обозначает оператор либо порождения, либо уничтожения.

Для произведения нескольких операторов назовем *системой спариваний* попарную расстановку операторов с соответствующим спариванием их. *Полной системой спариваний* будем называть такие системы спариваний, при которых не остается ни одного не спаренного оператора. При этом получающемуся выражению в случае статистики Ферми приписывается знак $(-1)^P$, где P — перестановка, переводящая исходное произведение операторов в данное.

Например, рассмотрим систему спариваний

$$\begin{aligned} & \overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4 \mathcal{A}_5 \mathcal{A}_6} = \\ & = \overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_3} \overline{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_5} \overline{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_6} \times \begin{cases} (-1)^P & \text{для статистики Ферми;} \\ 1 & \text{для статистики Бозе;} \end{cases} \end{aligned}$$

P — перестановка, меняющая порядок индексов (123456) на (134526).

При условиях (10.1), (10.3) имеет место следующая ТЕОРЕМА. Среднее значение произведения операторов порождения и уничтожения $\langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \dots \mathcal{A}_{2p} \rangle$ для системы с гамильтонианом вида (10.1) равно сумме всех возможных полных систем спариваний этого произведения.

Это и есть статистическая теорема Вика — Блоха — Доминисиса.

Например, в случае статистики Ферми

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4 \rangle = \\ & = \overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2} \overline{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4} + \overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_3} \overline{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_4} - \overline{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_4} \overline{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3} = \\ & = \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \rangle \langle \mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4 \rangle - \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_3 \rangle \langle \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_4 \rangle + \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_4 \rangle \langle \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3 \rangle; \end{aligned}$$

в случае статистики Бозе

$$\langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4 \rangle =$$

$$= \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \rangle \langle \mathcal{A}_3 \mathcal{A}_4 \rangle + \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_3 \rangle \langle \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_4 \rangle + \langle \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_4 \rangle \langle \mathcal{A}_2 \mathcal{A}_3 \rangle.$$

Заметим прежде всего, что если имеем произведение двух операторов порождения и уничтожения, \mathcal{A}_1 и \mathcal{A}_2 , то единственные ненулевые спаривания будут $\overline{a_f^+ a_f}$ и $\overline{a_f a_f^+}$. Действительно, любая другая комбинация операторов a_f^+ , a_f не будет иметь диагональных элементов и ее среднее значение будет равно нулю, так как оператор ρ (10.3) имеет только диагональные элементы. Используя (10.4), (10.3), получаем:

для случая статистики Ферми

$$\begin{aligned} \overline{a_{f_1}^+ a_{f_2}} &= \Delta(f_1 - f_2) n_{f_1}^+ = \frac{\Delta(f_1 - f_2)}{1 + e^{\frac{E_f}{\theta}}}, \\ \overline{a_{f_2} a_{f_1}^+} &= \Delta(f_1 - f_2) n_{f_1}^- = \frac{\Delta(f_1 - f_2)}{1 + e^{-\frac{E_f}{\theta}}}, \\ \overline{a_{f_1} a_{f_2}} &= \overline{a_{f_1}^+ a_{f_2}^+} = 0 \quad (n_{f_1}^+ + n_{f_1}^- = 1) \end{aligned} \quad (10.5)$$

и для случая статистики Бозе

$$\begin{aligned} \overline{a_{f_1}^+ a_{f_2}} &= -\Delta(f_1 - f_2) n_{f_1}^+ = -\frac{\Delta(f_1 - f_2)}{1 - e^{\frac{E_f}{\theta}}}, \\ \overline{a_{f_2} a_{f_1}^+} &= \Delta(f_1 - f_2) n_{f_1}^- = \frac{\Delta(f_1 - f_2)}{1 - e^{-\frac{E_f}{\theta}}}, \\ \overline{a_{f_1} a_{f_2}} &= \overline{a_{f_1}^+ a_{f_2}^+} = 0 \quad (n_{f_1}^+ + n_{f_1}^- = 1). \end{aligned} \quad (10.6)$$

Пусть имеем случай статистики Ферми.

Тогда формулы (10.5) можно переписать в виде (через \mathcal{A}_f обозначается оператор порождения (a_f^+) или уничтожения (a_f) частицы)

$$\langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \rangle = \frac{[\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_2}]}{1 + e^{\pm \frac{1}{\theta} E_{f_1}}} = n_{f_1}^{\pm} [\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_2}], \quad (10.7)$$

где $[A_{f_1}, A_{f_2}]$ — антикоммутатор операторов A_{f_1} и A_{f_2} .
Рассмотрим среднее от произведения

$$\langle A_{f_1} A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} \rangle. \quad (10.8)$$

Выпишем тождество

$$\begin{aligned} A_{f_1} \cdot A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} + A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} \cdot A_{f_1} &= \\ &= [A_{f_1}, A_{f_2} A_{f_3} \dots A_{f_{2p}}] = \\ &= [A_{f_1}, A_{f_2}] A_{f_3} \dots A_{f_{2p}} - A_{f_2} [A_{f_1}, A_{f_3}] A_{f_4} \dots A_{f_{2p}} + \dots \end{aligned} \quad (10.9)$$

и вычислим средние значения от обеих частей. Заметим, что

$$\begin{aligned} \langle A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} A_{f_1} \rangle &= \text{Sp} (A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} A_{f_1} \rho) = \\ &= e^{\pm \frac{E_f}{\theta}} \text{Sp} (A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} \rho A_{f_1}) = e^{\pm \frac{E_f}{\theta}} \langle A_{f_1} A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} \rangle, \end{aligned} \quad (10.10)$$

так как

$$a_f^+ \rho = \rho a_f^+ e^{\frac{E_f}{\theta}}, \quad a_f \rho = \rho a_f e^{-\frac{E_f}{\theta}}. \quad (10.11)$$

Для доказательства формул (10.11) рассмотрим оператор

$$a_f(\alpha) = e^{\alpha n_f} a_f e^{-\alpha n_f}, \quad a_f(0) \equiv a_f.$$

Продифференцируем обе части предыдущего равенства по α :

$$\begin{aligned} \frac{da_f(\alpha)}{d\alpha} &= e^{\alpha n_f} n_f a_f e^{-\alpha n_f} - e^{\alpha n_f} a_f n_f e^{-\alpha n_f} = \\ &= e^{\alpha n_f} (n_f a_f - a_f n_f) e^{-\alpha n_f} = -e^{\alpha n_f} a_f e^{-\alpha n_f}. \end{aligned}$$

Принимая во внимание определение оператора $a_f(\alpha)$, получаем:

$$\frac{da_f(\alpha)}{d\alpha} = -a_f(\alpha).$$

Проинтегрируем это уравнение. Легко видеть, что в результате получим:

$$a_f(\alpha) = a_f e^{-\alpha}$$

или, согласно определению $a_f(\alpha)$,

$$e^{\alpha n_f} a_f e^{-\alpha n_f} = a_f e^{-\alpha}.$$

Умножая слева обе части этого равенства на e^{-an_f} , получим:

$$a_f e^{-an_f} = e^{-an_f} a_f e^{-\alpha}$$

и далее, так как $(\mathcal{A}\mathcal{B})^+ = \mathcal{B}^+ \mathcal{A}^+$,

$$a_f^+ e^{-an_f} = e^{-an_f} a_f^+ e^{\alpha}.$$

Положим $\alpha = \frac{1}{\Phi} E_f$ и примем во внимание, что $\rho_1(f)$ отличается от $\exp\left(-\frac{1}{\Phi} E_f n_f\right)$ только нормирующим множителем и что $\rho_1(g)$ и a_f коммутируют, если $f \neq g$. Тогда из последних двух формул и из (10.3) вытекают равенства (10.11).

В результате мы получаем:

$$\begin{aligned} \left(1 + e^{\pm \frac{1}{\Phi} E_{f_1}}\right) \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle = \\ = [\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_2}] \langle \mathcal{A}_{f_3} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle - \\ - [\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_3}] \langle \mathcal{A}_{f_2} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \dots, \end{aligned} \quad (10.12)$$

где знак плюс в экспоненте стоит, если $\mathcal{A}_{f_1} = a_{f_1}^+$, и знак минус, если $\mathcal{A}_{f_1} = a_{f_1}$. Деля это выражение на $\left(1 + e^{\pm \frac{1}{\Phi} E_{f_1}}\right)$ и используя (10.7), получаем отсюда

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle = \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \rangle \langle \mathcal{A}_{f_3} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle - \\ - \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_3} \rangle \langle \mathcal{A}_{f_2} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \dots \end{aligned} \quad (10.13)$$

Повторяя этот процесс для средних, стоящих в правой части (10.13), мы приходим к представлению величины (10.8) через сумму полных систем спариваний с коэффициентами, равными ± 1 , в зависимости от четности или нечетности перестановки, переводящей исходную расстановку операторов в данную.

Убедимся еще, что если рядом стоят два (или более) одинаковых оператора a_f (или a_f^+), то сумма всех спариваний равна нулю. Действительно, по предыдущему

мы имеем:

$$\begin{aligned} \langle A_{f_1} \dots A_{f_i} A_f A_f A_{f_{i+3}} \dots A_{f_{2p}} \rangle = \\ = \dots + (-1)^{i-2} \langle A_{f_1} A_{f_i} \rangle \langle A_{f_2} \dots A_{f_{i-1}} A_f A_f A_{f_{i+3}} \dots A_{f_{2p}} \rangle + \\ + (-1)^{i-1} \langle A_{f_1} A_f \rangle \langle A_{f_2} \dots A_{f_i} A_f A_{f_{i+3}} \dots A_{f_{2p}} \rangle + \\ + (-1)^i \langle A_{f_1} A_f \rangle \langle A_{f_2} \dots A_{f_i} A_f A_{f_{i+3}} \dots A_{f_{2p}} \rangle + \\ + (-1)^{i+1} \langle A_{f_1} A_{f_{i+3}} \rangle \langle A_{f_2} \dots A_{f_i} A_f A_f A_{f_{i+4}} \dots A_{f_{2p}} \rangle + \dots \end{aligned}$$

Отсюда видим, что слагаемые справа, получившиеся из-за расщепления произведения $A_f A_f$, взаимно сокращаются (члены с $(-1)^i$ и $(-1)^{i-1}$). Все остальные слагаемые обращаются в нуль из-за того, что $A_f A_f = 0$. Повторяя эти рассуждения, убеждаемся, что

$$\begin{aligned} \langle A_{f_1} \dots A_{f_i} A_f A_f A_{f_{i+3}} \dots A_{f_{2p}} \rangle = \\ = \dots \langle A_{f_i} A_f A_f A_{f_{i+3}} \rangle \dots = 0. \quad (10.14) \end{aligned}$$

Этим исчерпывается доказательство для случая статистики Ферми.

Теперь рассмотрим *случай статистики Бозе*.

Перепишем формулы (10.6) в виде

$$\langle A_{f_1} A_{f_2} \rangle = n_{f_1}^{\pm} [A_{f_1}, A_{f_2}], \quad (10.15)$$

где $[A_{f_1}, A_{f_2}]$ — коммутатор операторов A_{f_1} и A_{f_2} . Для доказательства представимости среднего

$$\langle A_{f_1} \dots A_{f_{2p}} \rangle$$

и в этом случае в виде суммы произведений всех спариваний используем тождество для коммутатора произведения:

$$\begin{aligned} A_{f_1} A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} - A_{f_2} \dots A_{f_{2p}} A_{f_1} = [A_{f_1}, A_{f_2} \dots A_{f_{2p}}] = \\ = [A_{f_1}, A_{f_2}] A_{f_3} A_{f_4} \dots A_{f_{2p}} + A_{f_2} [A_{f_1}, A_{f_3}] A_{f_4} \dots A_{f_{2p}} + \dots \end{aligned} \quad (10.16)$$

Примем во внимание, что имеют место равенства

$$a_f^+ \rho = \rho a_f^+ e^{\frac{E_f}{\phi}}, \quad a_f \rho = \rho a_f e^{-\frac{E_f}{\phi}}$$

(доказываются так же, как в предыдущем случае).

Следовательно,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \mathcal{A}_{f_1} \rangle &= \text{Sp} (\mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \mathcal{A}_{f_1} \rho) = \\ &= \text{Sp} (\mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rho \mathcal{A}_{f_1}) e^{\pm \frac{E_{f_1}}{\Theta}} = \\ &= e^{\pm \frac{E_{f_1}}{\Theta}} \text{Sp} (\mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rho). \quad (10.17) \end{aligned}$$

В результате тождество (10.16) для коммутатора произведения может быть записано в виде

$$\begin{aligned} (1 - e^{\pm \frac{1}{\Theta} E_{f_1}}) \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle &= \\ &= [\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_2}] \langle \mathcal{A}_{f_3} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \\ &+ [\mathcal{A}_{f_1}, \mathcal{A}_{f_3}] \langle \mathcal{A}_{f_2} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \dots \quad (10.18) \end{aligned}$$

или, согласно (10.15), в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \mathcal{A}_{f_3} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle &= \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_2} \rangle \langle \mathcal{A}_{f_3} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \\ &+ \langle \mathcal{A}_{f_1} \mathcal{A}_{f_3} \rangle \langle \mathcal{A}_{f_2} \mathcal{A}_{f_4} \dots \mathcal{A}_{f_{2p}} \rangle + \dots \quad (10.19) \end{aligned}$$

Справа под знаком средних стоят произведения операторов в меньшем числе $(2p-2)$; и потому, повторяя этот процесс, получаем представление среднего от произведения операторов через сумму произведений всех спариваний. Этим доказывается утверждение теоремы для случая статистики Бозе.

Подчеркнем в заключение, что в таком виде теорема справедлива только для систем с гамильтонианом вида (10.1).

Если гамильтониан не сохраняет числа частиц, например, имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum E_f a_f^+ a_f + \sum A_{f_1 f_2} a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ + \sum A_{f_1 f_2}^* a_{f_1} a_{f_2}, \quad (10.20)$$

то в отличие от рассмотренного случая не будут тождественно равны нулю и так называемые аномальные спаривания, или аномальные средние

$$\overline{a_{f_1} a_{f_2}} = \langle a_{f_1} a_{f_2} \rangle \neq 0. \quad (10.21)$$

Можно построить соответствующий аналог только что доказанной теоремы и для этого случая; он будет включать и аномальные спаривания.

Аномальные средние были введены при исследовании неидеальных квантовых газов [см. Н. Н. Боголюбов (1947), (1958), Н. Н. Боголюбов и др. (1958)]. В теории магнетизма они встречаются во всех случаях, когда гамильтониан не сохраняет числа частиц (элементарных возбуждений), например в случаях антиферромагнетизма и ферромагнетизма, при наличии анизотропии и т. п.

§ 11. Вырождение состояний и квазисредние¹⁾

В задачах статистической механики, как правило, всегда имеется вырождение из-за наличия аддитивных интегралов движения. Поэтому при исследовании различных задач, особенно при применении теории возмущений, следует соблюдать известную осторожность, так как хорошо известно, например, что теория возмущений для вырожденного уровня отличается от теории возмущений для невырожденного уровня. Оказывается, что в задачах статистической механики в случаях вырождения мы имеем дело не с обычными средними, а со средними особого вида, так называемыми квазисредними. Представления о квазисредних и их роль в задачах с вырождением были изучены Н. Н. Боголюбовым (1961). Мы приведем здесь только некоторые соображения этой работы, относящиеся к теории магнетизма.

В квантовомеханических задачах с вырождением одному уровню энергии отвечает несколько собственных функций оператора полной энергии. Поэтому собственная функция определена с точностью до произвольных постоянных.

В статистической механике обычное среднее любой динамической величины \mathcal{A} определено однозначно:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\text{Sp} \left(\mathcal{A} e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{\vartheta}} \right)}.$$

¹⁾ См. Н. Н. Боголюбов (1961, 1971), а также сборник (1973).

Поэтому и различные величины (в том числе и наблюдаемые), построенные из обычных средних, должны определяться однозначно. Отсюда могло бы показаться, что здесь вырождение не играет роли и его можно не принимать во внимание, например, при использовании теории возмущений.

На самом деле положение здесь значительно сложнее. Для того чтобы представить себе действительное положение вещей, рассмотрим случай изотропного ферромагнетика.

Запишем гамильтониан системы в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I(f_1 - f_2) (S_{f_1}, S_{f_2}), \quad (11.1)$$

где f — номер узла решетки, I — обменный интеграл, S_f^α — оператор спина электрона в узле f . Для определенности примем, что $I(f) \geq 0$ для всех f .

Обозначим через S^α оператор полного спина системы

$$S^\alpha = \sum_f S_f^\alpha \quad (\alpha = x, y, z) \quad (11.2)$$

и заметим, что каждая компонента оператора полного спина является интегралом движения, т. е.

$$S^2 \tilde{\mathcal{H}} - \tilde{\mathcal{H}} S^2 = 0. \quad (11.3)$$

Для операторов S^2 имеют место следующие перестановочные соотношения:

$$\begin{aligned} S^x S^y - S^y S^x &= i S^z, & S^y S^z - S^z S^y &= i S^x, \\ S^z S^x - S^x S^z &= i S^y. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Вычислим теперь среднее по ансамблю какой-либо компоненты полного спина. Например,

$$\langle S^z \rangle = \frac{\text{Sp} \left(S^z e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right)}. \quad (11.5)$$

Принимая во внимание перестановочные соотношения (11.4), имеем:

$$\text{Sp} \left(S^z e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right) = -i \text{Sp} \left([S^x S^y - S^y S^x] e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right).$$

Но так как S^x коммутирует с $\tilde{\mathcal{H}}$, то

$$\text{Sp} \left(S^y S^x e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right) = \text{Sp} \left(S^y e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} S^x \right) = \text{Sp} \left(S^x S^y e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right)$$

и, следовательно,

$$\langle S^z \rangle = 0. \quad (11.6)$$

Аналогично получаем, что

$$\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle = 0.$$

Введем оператор полного магнитного момента

$$\mathcal{M}^a = \mu S^a \quad (a = x, y, z), \quad (11.7)$$

где μ — магнитный момент на атом.

Очевидно, что

$$\text{Sp} \left(\mathcal{M}^a e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \right) = 0,$$

и потому средний момент системы равен нулю

$$M^a = \langle \mathcal{M}^a \rangle = 0 \quad (a = x, y, z). \quad (11.8)$$

Таким образом, мы получили, что обычное среднее для магнитного момента системы равно нулю. Это обстоятельство связано с изотропией гамильтониана (10.1) относительно группы вращений спина.

Результат (11.8) верен для всех температур θ , в том числе и для температур ниже точки Кюри. Однако известно, что при температурах ниже точки Кюри магнитный момент системы отличен от нуля, хотя направление его не фиксировано. В этом смысле рассматриваемые состояния статистического равновесия являются вырожденными.

Включим внешнее поле

$$H^a = h \gamma^a, \quad h > 0, \quad \sum_a (\gamma^a)^2 = 1 \quad (a = x, y, z).$$

Тогда гамильтониан (11.1) заменяется на следующий:

$$\mathcal{H}_{h\gamma} = \tilde{\mathcal{H}} - h(\gamma, \mathcal{M}). \quad (11.9)$$

Примем на время, что поле направлено по оси z . В этом случае с гамильтонианом (11.9) будет коммутировать только оператор S^z или \mathcal{M}^z . Рассуждая подобно

предыдущему, убеждаемся, что $\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle = 0$. Действительно,

$$\text{Sp} \left(S^x e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{h\gamma}} \right) = -i \text{Sp} \left([S^y S^z - S^z S^y] e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{h\gamma}} \right).$$

Величина S^z коммутирует с $\mathcal{H}_{h\gamma}$ и потому

$$\text{Sp} \left(S^z S^y e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{h\gamma}} \right) = \text{Sp} \left(S^y e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{h\gamma}} S^z \right) = \text{Sp} \left(S^y S^z e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{h\gamma}} \right).$$

Отсюда видим, что среднее значение $\langle S^x \rangle$ равно нулю (и аналогично $\langle S^y \rangle$). Для $\langle S^z \rangle$ подобные рассуждения не проходят. Принимая во внимание, что в изотропном ферромагнетике при температуре ниже температуры Кюри θ_c имеется спонтанный момент, ориентированный по внешнему полю, мы можем положить $\langle \mathcal{M}^z \rangle = M_h$, где M_h — некоторое число такое, что

$$\lim_{h \rightarrow 0} M_h = M_0 \quad (M_0 \neq 0). \quad (11.10)$$

Величина M_0 имеет смысл магнитного момента в исчезающе слабых полях при температуре $\theta < \theta_c$.

Для гамильтониана (11.9) будем иметь:

$$\langle \mathcal{M}^a \rangle = \gamma^a M_h \quad (a = x, y, z); \quad (11.11)$$

в пределе при h , стремящемся к нулю,

$$\langle \mathcal{M}^a \rangle = \gamma^a M_0 \quad (a = x, y, z). \quad (11.12)$$

Таким образом, мы наблюдаем здесь нестабильность обычных средних относительно бесконечно малого¹⁾ возмущения — $h(\gamma, \mathcal{M})$. Она состоит в том, что при включении этого возмущения среднее значение $\langle \mathcal{M}^a \rangle$ получает конечное, отличное от нуля, приращение, равное

$$\gamma^a M_0 \quad (M_0 = \lim_{h \rightarrow 0} M_h). \quad (11.13)$$

Введем понятие квазисредней для систем, описываемых гамильтонианом (11.1).

¹⁾ Под предельным переходом $h \rightarrow 0$ понимается переход, когда сначала осуществляется предельный переход статистической механики $N \rightarrow \infty$ (N — число частиц в системе), а потом переход $h \rightarrow 0$.

Рассмотрим какую-либо динамическую величину \mathcal{A} , являющуюся линейной комбинацией произведений спинных операторов,

$$\mathcal{A} = S_{f_1}^{a_1} \dots S_{f_p}^{a_p}$$

и определим квазисреднее $\{\mathcal{A}\}$ следующим образом:

$$\{\mathcal{A}\} = \lim_{h \rightarrow 0} \langle \mathcal{A} \rangle_{h\gamma}, \quad (11.14)$$

где $\langle \mathcal{A} \rangle_{h\gamma}$ — обычное среднее от \mathcal{A} для гамильтониана $\mathcal{H}_{h\gamma}$ (11.9).

Таким образом, при наличии вырождения квазисреднее зависит от произвольного единичного вектора γ .

Легко видеть, что квазисреднее $\{\mathcal{A}\}$ связано с обычным средним $\langle \mathcal{A} \rangle$ соотношением

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int \{\mathcal{A}\} d\gamma. \quad (11.15)$$

Для описания состояний статистического равновесия в данном случае квазисредние являются более физическими величинами, чем обычные средние. Последние представляют те же квазисредние, но усредненные по всем направлениям единичного вектора γ .

Обычные средние

$$\langle S_{f_1}^{a_1} \dots S_{f_p}^{a_p} \rangle \quad (11.16)$$

должны быть инвариантны относительно преобразования поворота спинов. Соответствующие квазисредние

$$\{S_{f_1}^{a_1} \dots S_{f_p}^{a_p}\} \quad (11.17)$$

будут обладать только свойством ковариантности, т. е. выражение (11.17) остается инвариантным при вращении спинов, если такому же преобразованию подвергается вектор γ .

Произвол в направлении вектора M или единичного вектора γ характеризует вырождение состояний статистического равновесия рассматриваемой динамической системы. Вырождение можно снять, если фиксировать направление вектора γ , например считать его направленным по оси z . При этом квазисредние становятся

определенными числами. Именно с такими средними имеет дело теория ферромагнетизма.

Другими словами, для того чтобы снять вырождение, надо включить в гамильтониан оператор возмущения, не инвариантный относительно группы преобразований, соответствующей вырождению. В рассмотренном примере изотропного ферромагнетика таким возмущением была энергия взаимодействия системы с внешним магнитным полем.

Заметим, что анизотропия снимает вырождение только частично, так как гамильтониан остается инвариантным относительно преобразований, меняющих направления всех спинов на обратные.

[Некоторые свойства симметрии (в том числе наличие интегралов движения) анизотропного спинowego гамильтониана по отношению к унитарным преобразованиям группы трехмерных вращений рассмотрены в главе I Дополнения. (Ред.).]

МЕТОД ПРИБЛИЖЕННОГО ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ

Один из способов расчета равновесных характеристик вещества состоит в определении термодинамических функций через суммы состояний, для чего необходимо знать энергетический спектр системы. Задача точного определения спектра сильно магнитных веществ очень сложна, поэтому мы рассмотрим здесь один простой метод приближенного определения нижней части энергетического спектра или, говоря иначе, метод определения слабо возбужденных состояний системы.

§ 12. Квазиклассический метод и приближенное вторичное квантование¹⁾

Перейдем к изложению метода расчета нижней части энергетического спектра, который известен как метод приближенного вторичного квантования (метод ПВК) или, применительно к сильно магнитным веществам, как метод спиновых волн. Основные представления впервые были высказаны Блохом (1930), (1932), которому удалось представить нижнюю часть спектра спиновой системы в виде набора одночастичных возбуждений, названных им спиновыми волнами. Полученные результаты справедливы только в области достаточно низких температур, поскольку при низких температурах возбуждаются главным образом состояния, близкие к основному. Это служит основанием для того, чтобы точный спектр расчета приближенно заменять спектром слабо возбужденных состояний.

¹⁾ См. Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, в), (1957).

Идея метода очень проста¹⁾. Представим мысленно, что операторы S_f^z заменены на классические векторы $\gamma_f^z S_f$, где γ_f — единичный вектор, S_f — значение спина в узле f . Тогда определение основного состояния системы сводится к исследованию на минимум классической формы \mathcal{E}_0 , получающейся из гамильтониана системы \mathcal{H} при замене спиновых операторов классическими векторами. Условие обращения в нуль первой вариации

$$\delta \mathcal{E}_0 = 0$$

дает уравнения для определения классических векторов γ_f . Достаточные условия минимума состоят в положительности второй вариации

$$\delta^2 \mathcal{E}_0 > 0.$$

Выражение для $\delta^2 \mathcal{E}_0$ описывает «малые колебания около положения равновесия» и может быть приведено к диагональному виду соответствующим каноническим преобразованием. Поэтому положительность $\delta^2 \mathcal{E}_0$ означает положительность всех частот малых колебаний, спектр которых и представляет спектр слабо возбужденных состояний системы²⁾.

Мы рассмотрели здесь эту мысленную ситуацию для того, чтобы нагляднее изложить существо метода. Установим теперь, какой приближенной собственной функции соответствует такой выбор основного состояния и каковы условия применимости этого метода определения спектра слабо возбужденных состояний.

Для большей простоты исключим из рассмотрения кристаллы с одноионной анизотропией³⁾. Примем, что решетка кристалла занимает объем V и состоит из N узлов, в каждом из которых помещен спин S_f . Пусть, далее, μ_f — магнитный момент f -го узла; $I(f_1 - f_2)$ — обменный интеграл для спинов, находящихся в узлах f_1 и f_2 ; H — внешнее магнитное поле. Ограничимся, кроме

¹⁾ Мы ограничиваемся здесь спиновыми гамильтонианами, более общий случай рассмотрен в работах, указанных в прим. 1 на стр. 111.

²⁾ В теории магнетизма этот прием впервые использовал Хультен (1936) при исследовании изотропных антиферромагнетиков.

³⁾ Относительно одноионной анизотропии см. § 18.

того, случаем простейших решеток; обобщение на случай сложных решеток не представляет существенных трудностей.

Условно запишем гамильтониан нашей системы в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{H}}(S_f^a). \quad (12.1)$$

Основной уровень системы определим из минимального принципа В. А. Фока

$$\mathcal{E}_0 = \min \frac{(C_0^*, \tilde{\mathcal{H}} C_0)}{(C_0^*, C_0)}, \quad (12.2)$$

где C_0 — пробная волновая функция. Совершим в гамильтониане (12.1) переход от спиновых переменных S_f^a к переменным S_f^x, S_f^y, S_f^z по формулам (5.8) — (5.10). Выберем за функцию C_0 вакуумную волновую функцию¹⁾:

$$C_0(\dots, S_f^z, \dots) = \prod_f \Delta(S_f^z - S_f). \quad (12.3)$$

Вариационный метод дает для энергии основного состояния \mathcal{E}_0 (12.2), вообще говоря, завышенное значение. Поэтому определим коэффициенты преобразования (5.8) так, чтобы величина \mathcal{E}_0 была наименьшей.

В гамильтониан (12.1) входят произведения операторов S_f^a для разных узлов. Поэтому в выражение (12.2) войдут только средние значения от операторов (5.8) по функциям $C_0(S_f^z) = \Delta(S_f^z - S_f)$. Очевидно, что

$$(C_0^*(S_f^z), S_f^a C_0(S_f^z)) = \gamma_f^a S_f. \quad (12.4)$$

Следовательно, выражение для \mathcal{E}_0 (12.2) получается из $\tilde{\mathcal{H}}$ (12.1) заменой операторов S_f^a на классические векторы $\gamma_f^a S_f$ и последующей минимизацией по γ_f :

$$\mathcal{E}_0 = \min \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f), \quad \sum_a (\gamma_f^a)^2 = 1. \quad (12.5)$$

¹⁾ Как вакуумное здесь рассматривается состояние системы, в котором все спины ориентированы в одном направлении и z-компонента каждого из них имеет максимальное значение. Прочие состояния рассматриваются как возбужденные.

Параметрами, подлежащими определению, являются компоненты единичных векторов γ_f . Из условия минимума формы (12.5) получаем следующие уравнения для них:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \gamma_f^\alpha} \left\{ \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f) - \sum_f S_f \lambda_f (\gamma_f^2 - 1) \right\} = \\ = \frac{\partial \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_f^\alpha} - 2 S_f \lambda_f \gamma_f^\alpha = 0, \quad (12.6) \\ \sum_\alpha (\gamma_f^\alpha)^2 = 1 \quad (\alpha = x, y, z), \end{aligned}$$

где λ_f — неопределенные множители Лагранжа.

Итак, определение энергии основного состояния (в нулевом приближении) по классической форме (12.5) соответствует так называемому квазиклассическому методу. В этом методе операторы спинов электронов заменяются на классические векторы, а энергия их взаимодействия берется равной обменной энергии (см. § 1).

Мы связали здесь квазиклассический метод вычисления энергии основного состояния с вариационным методом В. А. Фока (1930). При этом установили, что пробная волновая функция характеризуется нулевыми значениями спиновых отклонений: $S_f - S_f^z = 0$. Далее нужно решить две задачи: во-первых, оценить степень точности расчета основного состояния, во-вторых, найти энергетические уровни хотя бы слабо возбужденных состояний и установить критерии применимости метода.

Заметим прежде всего, что если величины γ_f определены из условия минимума энергии основного состояния в квазиклассическом приближении, то низшие по степеням операторов S_f^\pm , S_f^z члены в \mathcal{H} будут линейны по спиновым отклонениям $S_f - S_f^z$ и квадратичны по S_f^\pm . Действительно, по предыдущему

$$\mathcal{E}_0(\gamma_f S_f) = [\tilde{\mathcal{H}}]_{S_f^\alpha \rightarrow \gamma_f^\alpha S_f}. \quad (12.7)$$

Запишем преобразование (5.8) в виде

$$S_f^\alpha = \gamma_f^\alpha S_f + \delta S_f^\alpha, \quad (12.8)$$

где

$$\delta S_f^\alpha = -\gamma_f^\alpha (S_f - S_f^z) + A_f^\alpha S_f^+ + A_f^{\alpha*} S_f^- \quad (12.9)$$

рассматривается как «малая» операторная добавка к числам $\gamma_f^a S_f$. Подставляя (12.8) в $\tilde{\mathcal{H}}$, получим:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}} &= \tilde{\mathcal{H}}(S_f^a) = \mathcal{H}(\gamma_f^a S_f + \delta S_f^a) = \\ &= \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f) + \sum_{a, f} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_f^a} S_f^{-1} \delta S_f^a + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\substack{a_1, a_2, \\ f_1, f_2}} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \delta S_{f_1}^{a_1} \delta S_{f_2}^{a_2} + \dots\end{aligned}$$

Умножим скалярно уравнение (12.6) на $S_f^{-1} \delta S_f^z$, просуммируем по α и примем во внимание условия (5.9) для векторов γ_f и A_f . Это даст следующее равенство:

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_f^{\alpha}} S_f^{-1} \delta S_f^{\alpha} &= 2\lambda_f(\gamma_f, \delta S_f) = \\ &= -2\lambda_f(S_f - S_f^z).\end{aligned}\quad (12.10)$$

Аналогично

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_f^{\alpha}} S_f^{-1} \gamma_f^{\alpha} = 2\lambda_f. \quad (12.11)$$

В результате $\tilde{\mathcal{H}}$ преобразуется к виду

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}} &= \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f) - \sum_f 2\lambda_f(S_f - S_f^z) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2, a_1, a_2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \delta S_{f_1}^{a_1} \delta S_{f_2}^{a_2} + \dots\end{aligned}\quad (12.12)$$

Согласно (5.7) можно считать, что $S_f - S_f^z$ порядка $S_f^{-1} S_f^{\pm 1}$. Следовательно, если разложить $\tilde{\mathcal{H}}$ по степеням спиновых операторов $S_f - S_f^z$, S_f^{\pm} , то получим:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}} &= \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \dots = \\ &= \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f) - \sum_f 2\lambda_f(S_f - S_f^z) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\gamma_f S_f)}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \tau_{f_1}^{a_1} \tau_{f_2}^{a_2} + \mathcal{H}_3 + \dots,\end{aligned}\quad (12.13)$$

¹⁾ В квазиклассическом приближении аналогичная оценка следует из условия нормировки (5.2).

где

$$\tau_f^a = A_f^a S_f^+ + A_f^{*a} S_f^-, \quad (12.14)$$

\mathcal{H}_3, \dots — третья и т. д. формы по степеням операторов; \mathcal{E}_0 определяется согласно (12.7); γ_f, λ_f находятся из решения системы уравнений (12.6); A_f — коэффициенты преобразования (5.8).

Спектр квадратичной формы \mathcal{H}_2 аппроксимирует нижнюю часть спектра полного гамильтониана \mathcal{H} . Поэтому основное состояние \mathcal{E}_0 будет устойчивым, если все собственные значения \mathcal{H}_2 будут положительны.

Для определения основного состояния мы использовали вариационный метод. При этом волновые функции основного состояния выбирались так, чтобы числа спиновых отклонений равнялись нулю

$$S_f - S_f^z = 0. \quad (12.15)$$

Допустим теперь, что для возбужденных состояний условия (12.15) выполняются только приближенно, в том смысле, что вероятность встретить значения $S_f - S_f^z \neq 0$ мала. В соответствии с этим будем рассматривать средние значения от произведений спиновых отклонений как величины возрастающих порядков малости:

$$1 \gg \{\langle S_f - S_f^z \rangle\} \gg \{\langle (S_{f_1} - S_{f_1}^z)(S_{f_2} - S_{f_2}^z) \rangle_{f_1 \neq f_2}\} \gg \dots \quad (12.16)$$

При этом условии в гамильтониане главной будет форма \mathcal{H}_2 и приближенно спектр будет определяться выражением

$$\tilde{\mathcal{H}} \cong \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2, \quad (12.17)$$

где \mathcal{E}_0 — энергия основного состояния (12.7), \mathcal{H}_2 — форма (12.13).

В соответствии с предположением о малости математических ожиданий спиновых отклонений пренебрежем далее отличиям правых частей перестановочных соотношений (5.5) от их значений для основного состояния. Иначе говоря, приближенно примем для операторов

ров $S_f - S_f^z$, S_f^\pm перестановочные соотношения бозевского типа:

$$\begin{aligned} S_f^+ S_g^- - S_g^- S_f^+ &\cong 2S_f^z \Delta(f - g), \\ S_f^\pm (S_g - S_g^z) - (S_g - S_g^z) S_f^\pm &= \pm S_f^\pm \Delta(f - g). \end{aligned} \quad (12.18)$$

Переходя к обычной нормировке операторов, можем записать:

$$S_f^+ = \sqrt{2S_f} b_f^+, \quad S_f^- = \sqrt{2S_f} b_f^-, \quad S_f - S_f^z = n_f = b_f^+ b_f^-, \quad (12.19)$$

где b_f , b_f^\pm — операторы, удовлетворяющие чисто бозевским перестановочным соотношениям вида (3.27). В результате задача приближенного вычисления нижней части спектра спиновой системы сводится к исследованию квадратичной по бозе-операторам формы, которая определяется формулами (12.13), (12.14) и (12.19).

В важном частном случае магнитно-изотропного кристалла спиновая система описывается гамильтонианом (6.14). Повторяя предыдущие расчеты, без труда получаем для гамильтониана следующее выражение:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4, \quad (12.20)$$

где

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_f \mu_f S_f(\gamma_f, H) - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} S_{f_1} S_{f_2} I(f_1 - f_2)(\gamma_{f_1}, \gamma_{f_2}), \quad (12.21)$$

$$\mathcal{H}_2 = - \sum_f 2\lambda_f (S_f - S_f^z) - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2)(\tau_{f_1}, \tau_{f_2}), \quad (12.22)$$

$$\mathcal{H}_3 = - \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2)(\gamma_{f_1}, \tau_{f_2})(S_{f_1} - S_{f_1}^z), \quad (12.23)$$

$$\mathcal{H}_4 = - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2)(\gamma_{f_1}, \gamma_{f_2})(S_{f_1} - S_{f_1}^z)(S_{f_2} - S_{f_2}^z), \quad (12.24)$$

τ_f — операторы (12.14); γ_f , λ_f определяются из условия минимума энергии основного состояния (12.6):

$$- \sum_{f'} I(f - f') S_f \gamma_{f'}^a - \mu_f H^a = 2\lambda_f \gamma_f^a, \quad (12.25)$$

$$\sum_a (\gamma_f^a)^2 = 1.$$

При вычислениях для λ_f удобна форма записи (12.11):

$$2\lambda_f = -\mu_f(\gamma_f, H) - \sum_{f'} I(f-f') S_{f'}(\gamma_f, \gamma_{f'}). \quad (12.26)$$

Согласно (12.17) энергия основного состояния и приближенный вид нижней части спектра определяются классической формой \mathcal{E}_0 (12.21) и операторной формой \mathcal{H}_2 (12.22). При этом для спиновых операторов используются приближенные формулы (12.19). В результате для магнитно-изотропного кристалла задача сводится к исследованию квадратичной формы:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \simeq \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2 = \mathcal{E}_0 - \sum_f 2\lambda_f n_f - \\ - \sum_{f_1, f_2} \sqrt{S_{f_1} S_{f_2}} I(f_1 - f_2) \{ 2(A_{f_1}^*, A_{f_2}) b_{f_1}^+ b_{f_2} + \\ + (A_{f_1}, A_{f_2}) b_{f_1} b_{f_2} + (A_{f_1}^*, A_{f_2}^*) b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ \}, \end{aligned} \quad (12.27)$$

где b_f, b_f^+ — бозе-операторы, $n_f = b_f^+ b_f$, величины γ_f, λ_f определяются из уравнений (12.25).

Основное состояние в методе приближенного вторичного квантования определяется тем, что для него все спиновые отклонения равны нулю. Иными словами, для волновой функции основного состояния имеем:

$$(S_f - S_f^z) C_0 = 0. \quad (12.28)$$

Рассмотрим теперь состояние C_{f_0} , в котором спиновое отклонение в узле f_0 равно единице:

$$(S_f - \Delta(f - f_0) - S_f^z) C_{f_0} = 0. \quad (12.29)$$

Функцию C_{f_0} можно представить как результат действия оператора $S_{f_0}^-$ на функцию C_0 . В силу трансляционного вырождения равновероятно встретить такое отклонение на любом из эквивалентных узлов решетки. Поэтому волновая функция состояния с одним «возбужденным» спином будет иметь вид

$$C_v = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{i(f,v)} C_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{i(f,v)} S_f^- C_0. \quad (12.30)$$

Функция C_v описывает состояние, в котором, как говорят, возбуждена одна спиновая волна с волновым

вектором v и при $S_f = S$ является собственной функцией (12.27). По этой причине рассмотренный выше приближенный метод расчета слабо возбужденных состояний спиновой системы называют также методом спиновых волн, а переход от полного гамильтониана \mathcal{H} к гамильтониану \mathcal{H}_2 с последующей заменой спиновых операторов бозевскими — переходом к спин-волновому приближению.

По существу, метод приближенного вторичного квантования опирается на возможности рассмотрения квадратичной формы в гамильтониане как главной его части и приближенной замены спиновых операторов бозе-операторами.

§ 13. Диагонализация квадратичных форм¹⁾

В представлении вторичного квантования приближенные гамильтонианы часто представляются в виде квадратичных форм по бозе-операторам. Ниже мы рассмотрим задачу о диагонализации таких форм²⁾.

Пусть имеется квадратичная форма вида

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} R_{\alpha\beta} x_{\alpha}^{+} x_{\beta}^{+} + \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha\beta} x_{\alpha}^{+} x_{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} R_{\alpha\beta}^{*} x_{\alpha} x_{\beta}, \quad (13.1)$$

коэффициенты которой удовлетворяют условиям:

$$S_{\alpha\beta} = S_{\beta\alpha}^{*}, \quad R_{\alpha\beta} = R_{\beta\alpha}, \quad (13.2)$$

переменные x_{α} могут быть или операторами Бозе, или обычными числами (не операторами).

Из условий (13.2) следует, что \mathcal{H} — эрмитовская форма.

Обозначим через E_v и $u_{\alpha v}$, $v_{\alpha v}$ собственные значения и собственные функции системы уравнений:

$$\begin{aligned} E_v u_{\alpha v} &= \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} u_{\beta v} + \sum_{\beta} R_{\alpha\beta} v_{\beta v}, \\ -E_v v_{\alpha v} &= \sum_{\beta} S_{\alpha\beta}^{*} v_{\beta v} + \sum_{\beta} R_{\alpha\beta}^{*} u_{\beta v}. \end{aligned} \quad (13.3)$$

¹⁾ См. С. В. Тябликов (1947), Н. Н. Боголюбов (1949), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, в).

²⁾ Распространение результатов на диагонализацию квадратичных форм от операторов Ферми не составляет труда.

Для функций $u_{\alpha\nu}$, $v_{\alpha\nu}$ имеют место следующие условия ортогональности и нормировки:

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} (u_{\alpha\nu} u_{\alpha\mu}^* - v_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu}^*) &= \Delta(\nu - \mu), \\ \sum_{\alpha} (u_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu} - u_{\alpha\mu} v_{\alpha\nu}) &= 0\end{aligned}\quad (13.4)$$

и соответственно

$$\begin{aligned}\sum_{\nu} (u_{\alpha\nu} u_{\beta\nu}^* - v_{\beta\nu} v_{\alpha\nu}^*) &= \Delta(\alpha - \beta), \\ \sum_{\nu} (u_{\beta\nu} v_{\alpha\nu}^* - u_{\alpha\nu} v_{\beta\nu}^*) &= 0.\end{aligned}\quad (13.5)$$

Если x_{α} , x_{α}^+ — бозе-операторы, то каноническим преобразованием

$$x_{\alpha} = \sum_{\nu} (u_{\alpha\nu} \xi_{\nu} + v_{\alpha\nu}^* \xi_{\nu}^+), \quad (13.6)$$

где ξ_{ν} , ξ_{ν}^+ — новые бозе-операторы, квадратичная форма \mathcal{H} (13.1) приводится к диагональному виду

$$\mathcal{H} = \Delta \mathcal{E}_0 + \sum_{\nu} E_{\nu} \xi_{\nu}^+ \xi_{\nu}, \quad (13.7)$$

$$\Delta \mathcal{E}_0 = - \sum_{\alpha, \nu} E_{\nu} |v_{\alpha\nu}|^2. \quad (13.8)$$

Если x_{α} , x_{α}^+ — обычные числа, то квадратичная форма (13.1) каноническим преобразованием вида (13.6), где ξ_{ν} , ξ_{ν}^+ — также обычные числа, приводится к виду:

$$\mathcal{H} = \sum_{\nu} E_{\nu} \xi_{\nu}^+ \xi_{\nu}. \quad (13.9)$$

Обратное преобразование имеет вид

$$\xi_{\nu} = \sum_{\alpha} (u_{\alpha\nu}^* x_{\alpha} - v_{\alpha\nu} x_{\alpha}^+). \quad (13.10)$$

Поясним результаты (13.3) — (13.8). Операторную форму (13.1) будем рассматривать как гамильтониан \mathcal{H} некоторой системы, записанный в бозе-операторах. Тогда уравнения движения для операторов x_{α} , x_{α}^+ будут иметь вид

$$i \frac{dx_{\alpha}}{dt} = [x_{\alpha}, \mathcal{H}], \quad i \frac{dx_{\alpha}^+}{dt} = [x_{\alpha}^+, \mathcal{H}]$$

или, подробнее,

$$\begin{aligned} i \frac{dx_a}{dt} &= \sum_{\beta} S_{a\beta} x_{\beta} + \sum_{\beta} R_{a\beta} x_{\beta}^+, \\ -i \frac{dx_a^+}{dt} &= \sum_{\beta} S_{a\beta}^* x_{\beta}^+ + \sum_{\beta} R_{a\beta}^* x_{\beta}. \end{aligned} \quad (13.11)$$

Произведем в (13.11) преобразование переменных вида (13.6), где ξ_v, ξ_v^+ — новые бозе-операторы, а u_{av}, v_{av} — некоторые функции, подлежащие определению.

Потребуем теперь, чтобы новые бозе-операторы ξ_v, ξ_v^+ удовлетворяли следующим уравнениям движения:

$$i \frac{d\xi_v}{dt} = E_v \xi_v, \quad i \frac{d\xi_v^+}{dt} = -E_v \xi_v^+. \quad (13.12)$$

Подставляя (13.6) в (13.11) и используя (13.12), получим:

$$\begin{aligned} \sum_v (E_v u_{av} \xi_v - E_v v_{av}^* \xi_v^+) &= \\ &= \sum_{\beta, v} (S_{a\beta} u_{\beta v} \xi_v + S_{a\beta} v_{\beta v}^* \xi_v^+ + R_{a\beta} u_{\beta v}^* \xi_v^+ + R_{a\beta} v_{\beta v} \xi_v). \end{aligned}$$

Так как операторы ξ_v, ξ_v^+ линейно независимы, то должны по-разному обращаться в нуль коэффициенты при них. Это даст нам уравнения (13.3) для определения функций u_{av}, v_{av} .

Потребуем, чтобы преобразование (13.6) было каноническим, т. е. потребуем, чтобы операторы x_a, x_a^+ , определенные этими формулами, удовлетворяли бозевским перестановочным соотношениям, если ξ_v, ξ_v^+ — бозе-операторы.

Для этого составим коммутаторы

$$x_a x_{\beta}^+ - x_{\beta}^+ x_a, \quad x_a x_{\beta} - x_{\beta} x_a$$

и подставим в них выражения (13.6). В результате несложных вычислений получаем:

$$\begin{aligned} x_a x_{\beta}^+ - x_{\beta}^+ x_a &= \sum_v (u_{av} u_{\beta v}^* - v_{\beta v} v_{av}^*), \\ x_a x_{\beta} - x_{\beta} x_a &= \sum_v (v_{av}^* u_{\beta v} - v_{\beta v}^* u_{av}). \end{aligned}$$

Приравнявая левые части этих выражений $\Delta(\alpha - \beta)$ и 0 соответственно, приходим к условиям ортонормировки (13.5) для функций u_{av}, v_{av} .

Установим теперь формулы (13.4) — (13.5) и (13.7) — (13.9), исходя из уравнений (13.3) и условий (13.2) на их коэффициенты.

Заметим прежде всего, что собственные значения E_v системы уравнений (13.3) вещественны. Действительно, из (13.3) следует, что

$$E_v \sum_a (u_{av} u_{av}^* - v_{av} v_{av}^*) = \\ = \sum_{a, \beta} (S_{a\beta} u_{\beta v} u_{av}^* + S_{a\beta}^* v_{\beta v} v_{av}^* + R_{a\beta} v_{\beta v} u_{av}^* + R_{a\beta}^* u_{\beta v} v_{av}^*).$$

Легко видеть, что сумма в левой части равенства вещественна по построению, а двойная сумма в правой части — в силу (13.2). Следовательно,

$$E_v^* = E_v. \quad (13.13)$$

Установим теперь справедливость условий ортогональности и нормировки (13.4). Используя уравнения (13.3), получаем:

$$E_v \sum_a (u_{av} u_{a\mu}^* - v_{av} v_{a\mu}^*) = \\ = \sum_{a, \beta} (S_{a\beta} u_{\beta v} u_{a\mu}^* + R_{a\beta} v_{\beta v} u_{a\mu}^* + S_{a\beta}^* v_{\beta v} v_{a\mu}^* + R_{a\beta}^* u_{\beta v} v_{a\mu}^*).$$

Поменяем здесь местами индексы v и μ и перейдем к сопряженному выражению, в результате будем иметь:

$$E_\mu \sum_a (u_{a\mu}^* u_{av} - v_{a\mu}^* v_{av}) = \\ = \sum_{a, \beta} (S_{a\beta}^* u_{\beta\mu}^* u_{av} + R_{a\beta}^* v_{\beta\mu}^* u_{av} + S_{a\beta} v_{\beta\mu} v_{av} + R_{a\beta} u_{\beta\mu} v_{av}).$$

Составляя разность этих двух выражений, находим:

$$(E_v - E_\mu) \sum_a (u_{av} u_{a\mu}^* - v_{av} v_{a\mu}^*) = 0.$$

Отсюда обычным путем устанавливаем справедливость первого из соотношений (13.4).

Далее из (13.3) получаем равенство

$$E_v \sum_a (u_{av} v_{a\mu} - v_{av} u_{a\mu}) = \\ = \sum_{a, \beta} (S_{a\beta} u_{\beta v} v_{a\mu} + R_{a\beta} v_{\beta v} v_{a\mu} + S_{a\beta}^* v_{\beta v} u_{a\mu} + R_{a\beta}^* u_{\beta v} u_{a\mu})$$

и заменой $\mu \rightleftharpoons \nu$ аналогичное равенство

$$\begin{aligned} E_\mu \sum_\alpha (u_{\alpha\mu} v_{\alpha\nu} - v_{\alpha\mu} u_{\alpha\nu}) = \\ = \sum_{\alpha, \beta} (S_{\alpha\beta} u_{\beta\mu} v_{\alpha\nu} + R_{\alpha\beta} v_{\beta\mu} v_{\alpha\nu} + S_{\alpha\beta}^* v_{\beta\mu} u_{\alpha\nu} + R_{\alpha\beta}^* u_{\beta\mu} u_{\alpha\nu}). \end{aligned}$$

Их разность дает следующее выражение:

$$(E_\nu + E_\mu) \sum_\alpha (u_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu} - v_{\alpha\nu} u_{\alpha\mu}) = 0.$$

Отсюда следует второе из соотношений (13.4).

Покажем теперь, что в силу (13.4) преобразование, обратное к (13.6), имеет вид (13.10).

Возьмем произвольную систему величин $\{X_\alpha\}$ и представим ее в виде разложения

$$X_\alpha = \sum_\nu (u_{\alpha\nu} E_\nu + v_{\alpha\nu}^* E_\nu^*); \quad (13.14)$$

и аналогично

$$X_\alpha^* = \sum_\nu (u_{\alpha\nu}^* E_\nu^* + v_{\alpha\nu} E_\nu). \quad (13.15)$$

Умножим (13.14) на $u_{\alpha\mu}^*$ и (13.15) на $v_{\alpha\mu}^*$, просуммируем по α и вычтем одно из другого:

$$\begin{aligned} \sum_\alpha (u_{\alpha\mu}^* X_\alpha - v_{\alpha\mu}^* X_\alpha^*) = \\ = \sum_\nu E_\nu \sum_\alpha (u_{\alpha\nu} u_{\alpha\mu}^* - v_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu}^*) + \sum_\nu E_\nu^* \sum_\alpha (v_{\alpha\nu}^* u_{\alpha\mu}^* - v_{\alpha\mu}^* u_{\alpha\nu}^*). \end{aligned}$$

Отсюда при учете соотношений (13.4) получаем:

$$E_\nu = \sum_\alpha (X_\alpha u_{\alpha\nu}^* - X_\alpha^* v_{\alpha\nu}^*). \quad (13.16)$$

Преобразование (13.16) будет обратным к преобразованию (13.14). Если величины X_α , E_ν заменить на операторы x_α , ξ_ν , мы придем к взаимным преобразованиям (13.6) и (13.10).

Подставляя значения «коэффициентов» E_ν (13.16) в разложение (13.14), получаем равенство:

$$X_\alpha = \sum_{\beta\nu} [(X_\beta u_{\beta\nu}^* - X_\beta^* v_{\beta\nu}^*) u_{\alpha\nu} + (X_\beta^* u_{\beta\nu} - X_\beta v_{\beta\nu}) v_{\alpha\nu}^*],$$

которое должно быть справедливо при любых комплексных значениях величин X_α . Приравнявая здесь нулю коэффициенты при X_α , X_α^* , получаем соотношения (13.5).

Покажем, что преобразование (13.6) является каноническим. Иначе говоря, если операторы ξ_v^+ , ξ_v удовлетворяют перестановочным соотношениям бозе-статистики, то и операторы x_α^+ , x_α удовлетворяют перестановочным соотношениям бозе-статистики.

Для доказательства составим коммутаторы. Используя условия ортонормировки (13.5), получаем:

$$\begin{aligned} x_\alpha x_\beta^+ - x_\beta^+ x_\alpha &= \\ &= \sum_{\nu, \mu} \{ (u_{\alpha\nu} \xi_\nu + v_{\alpha\nu}^* \xi_\nu^+) (u_{\beta\mu}^* \xi_\mu^+ + v_{\beta\mu} \xi_\mu) - \\ &\quad - (u_{\beta\mu}^* \xi_\mu^+ + v_{\beta\mu} \xi_\mu) (u_{\alpha\nu} \xi_\nu + v_{\alpha\nu}^* \xi_\nu^+) \} = \\ &= \sum_{\nu, \mu} (u_{\alpha\nu} u_{\beta\mu}^* - v_{\beta\mu} v_{\alpha\nu}^*) \Delta(\nu - \mu) = \Delta(\alpha - \beta), \\ x_\alpha x_\beta - x_\beta x_\alpha &= \sum_\nu (v_{\alpha\nu}^* u_{\beta\nu} - v_{\beta\nu}^* u_{\alpha\nu}) = 0. \end{aligned}$$

Отсюда видим, что если ξ — бозе-операторы, то x — тоже бозе-операторы. Аналогичным образом доказывается и обратное утверждение.

Для диагонализации квадратичной формы (13.1) произведем в ней каноническое преобразование переменных (13.6). После очевидных преобразований получим:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\nu, \mu} \xi_\nu \xi_\mu \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} v_{\beta\mu} + S_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} u_{\beta\mu} + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* u_{\alpha\nu} u_{\beta\mu} \right) + \\ &+ \sum_{\nu, \mu} \xi_\nu^+ \xi_\mu^+ \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* v_{\alpha\nu}^* v_{\beta\mu}^* + S_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* v_{\beta\mu} + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* u_{\beta\mu}^* \right) + \\ &+ \sum_{\nu, \mu} \xi_\nu^+ \xi_\mu \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* v_{\beta\mu} + S_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* u_{\beta\mu} + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* v_{\alpha\nu}^* u_{\beta\mu} \right) + \\ &+ \sum_{\nu, \mu} \xi_\nu \xi_\mu^+ \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} u_{\beta\mu}^* + S_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} v_{\beta\mu}^* + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* u_{\alpha\nu} v_{\beta\mu}^* \right). \end{aligned} \quad (13.17)$$

Преобразуем суммы по α, β , используя уравнения (13.3). Например, для первой из них получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} v_{\beta\mu} + S_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} u_{\beta\mu} + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* u_{\alpha\nu} u_{\beta\mu} \right) = \\ = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} v_{\alpha\nu} \sum_{\beta} (R_{\alpha\beta} v_{\beta\mu} + S_{\alpha\beta} u_{\beta\mu}) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\beta} u_{\beta\mu} \sum_{\alpha} (S_{\alpha\beta} v_{\alpha\nu} + R_{\alpha\beta}^* u_{\alpha\nu}) = \\ = \frac{1}{2} (E_{\mu} - E_{\nu}) \sum_{\alpha} u_{\alpha\mu} v_{\alpha\nu} = Q_{\mu\nu}. \end{aligned}$$

В силу второго из условий (13.4) величина $Q_{\mu\nu}$ антисимметрична относительно перестановки индексов

$$Q_{\mu\nu} + Q_{\nu\mu} = 0$$

и потому

$$\sum_{\nu, \mu} \xi_{\nu} \xi_{\mu} Q_{\mu\nu} = 0.$$

Точно так же показывается, что и второе слагаемое в (13.17) равно нулю.

Сумма по α, β в третьем слагаемом преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{1}{2} R_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* v_{\beta\mu} + S_{\alpha\beta} u_{\alpha\nu}^* u_{\beta\mu} + \frac{1}{2} R_{\alpha\beta}^* v_{\alpha\nu} u_{\beta\mu} \right) = \\ = \frac{1}{2} (E_{\mu} + E_{\nu}) \sum_{\alpha} u_{\alpha\nu}^* u_{\alpha\mu} \end{aligned}$$

и в последнем слагаемом — к виду

$$- \frac{1}{2} (E_{\mu} + E_{\nu}) \sum_{\alpha} v_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu}^*.$$

В результате выражение (13.17) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\nu, \mu} \left\{ \xi_{\nu}^+ \xi_{\mu} (E_{\nu} + E_{\mu}) \sum_{\alpha} u_{\alpha\nu}^* u_{\alpha\mu} - \right. \\ \left. - \xi_{\nu} \xi_{\mu}^+ (E_{\nu} + E_{\mu}) \sum_{\alpha} v_{\alpha\nu} v_{\alpha\mu}^* \right\}. \quad (13.18) \end{aligned}$$

Во втором слагаемом в фигурной скобке переставим операторы ξ_v и ξ_μ^+ и произведем замену индексов $v \rightleftharpoons \mu$. Тогда \mathcal{H} примет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \sum_{\alpha, v} E_v |v_{\alpha v}|^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{v, \mu} \xi_v^+ \xi_\mu (E_v + E_\mu) \sum_{\alpha} (u_{\alpha v}^* u_{\alpha \mu} - v_{\alpha v}^* v_{\alpha \mu}) = \\ &= - \sum_{\alpha, v} E_v |v_{\alpha v}|^2 + \sum_v E_v \xi_v^+ \xi_v, \quad (13.19) \end{aligned}$$

что, как легко видеть, совпадает с формулами (13.7) — (13.8).

Если величины x (и соответственно ξ) — обычные числа, то квадратичная форма (13.1) по-прежнему приводится каноническим преобразованием (13.6) к диагональному виду. Отличие от предыдущего, операторного, случая заключается в том, что здесь величины ξ , ξ^+ коммутируют друг с другом и потому форма (13.18) приводится к виду (13.9)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{v, \mu} \xi_v^+ \xi_\mu (E_v + E_\mu) \sum_{\alpha} (u_{\alpha v}^* u_{\alpha \mu} - v_{\alpha v}^* v_{\alpha \mu}) = \sum_v E_v \xi_v^+ \xi_v, \quad (13.20)$$

не содержащему слагаемого, подобного $\Delta \mathcal{H}_0$ (13.8).

Заметим, что число собственных значений линейной системы уравнений (13.3) будет четным, так как функции u , v входят попарно. При этом если E_v — собственное значение, то и $-E_v$ тоже собственное значение. По предположению квадратичная форма (13.1) описывает состояния динамической системы, близкие к основному. Достаточным условием этого является положительность формы (13.1). Поэтому при расчетах будем принимать во внимание решения с $E_v > 0$. Решения, для которых $E_v < 0$, следует отбрасывать как лишние.

Действительно, пусть имеется решение $(u_{\alpha v}, v_{\alpha v})$ системы (13.3), отвечающее собственному значению $E_v > 0$ и удовлетворяющее условиям нормировки (13.4). Произведем замену:

$$(u, v) \rightarrow (v^*, u^*); \quad E \rightarrow -E'. \quad (13.21)$$

Получим:

$$\begin{aligned} E'_v u'_{av} &= \sum_{\beta} S_{a\beta} u'_{\beta v} + \sum_{\beta} R_{a\beta} v'_{\beta v}, \\ -E'_v v'_{av} &= \sum_{\beta} S_{a\beta}^* v'_{\beta v} + \sum_{\beta} R_{a\beta}^* u'_{\beta v}. \end{aligned} \quad (13.22)$$

Эта система уравнений имеет такой же вид, как исходная система (13.3), но принадлежит собственному значению $E'_v = -E_v$. Условия нормировки для новых функций можно получить тем же путем, что и выше. Очевидно, что они будут похожи на условия (13.4). Принимая во внимание преобразование (13.21), будем иметь:

$$\sum_a (u'_{av} u'^*_{av} - v'_{av} v'^*_{av}) = \sum_a (v^*_{av} v_{av} - u^*_{av} u_{av}) = -\Delta(v - \mu). \quad (13.23)$$

Отсюда видим, что условия нормировки (13.23) для новых функций отличаются знаком от условий нормировки (13.4) для исходных функций. Таким образом, выбор решений, отвечающих $E_v > 0$ и условиям нормировки (13.4), исключает решения с $E_v < 0$.

§ 14. Об условиях применимости метода ПВК

Рассмотрим более подробно условия применения метода приближенного вторичного квантования, излагавшегося в § 12.

Первое из них представляет условие малости высших по степеням операторов форм по сравнению с квадратичной.

Гамильтониан \mathcal{H}_2 (12.13) является квадратичной по «бозе-операторам» b , b^+ формой вида (13.1). Каноническим преобразованием вида (13.6) она преобразуется к диагональной форме (13.7) — (13.8):

$$\mathcal{H}_2 = \Delta \mathcal{E}_0 + \sum_v E_v n_v \quad (n_v = \xi_v^+ \xi_v).$$

В таком виде гамильтониан подобен гамильтониану системы невзаимодействующих бозе-частиц. При этом v

имеет значение номера одночастичного состояния, E_v — энергии частицы, находящейся в состоянии v ($n_v = 0, 1, 2, \dots$). Полное число частиц не сохраняется. Соответственно этому каждое собственное значение \mathcal{H}_2 представляется в виде суммы энергий отдельных «элементарных возбуждений»¹⁾. Операторы ξ_v^+ , ξ_v называют операторами порождения или уничтожения элементарных возбуждений и т. д. Состояние, в котором имеется одно элементарное возбуждение номера v (одна спиновая волна с волновым вектором v), эквивалентно рассматривавшимся выше одночастичным состояниям (12.30).

В принципе задача определения собственных значений гамильтониана «нулевого приближения» \mathcal{H}_2 может считаться решенной. Условия малости тройной, четверной, ... форм в полном гамильтониане системы по сравнению с \mathcal{H}_2 или условия применимости метода приближенного вторичного квантования (12.16) выполняются, если малы средние значения чисел заполнений (или спиновых отклонений $S_f - S_f^z$):

$$\langle n_f \rangle = \langle b_f^+ b_f \rangle \ll 1. \quad (14.1)$$

Используя формулы (13.6), перепишем эти условия в виде

$$\langle n_f \rangle = \sum_v \{ |u_{fv}|^2 + |v_{fv}|^2 \} \bar{N}_v + \sum_v |v_{fv}|^2 \ll 1, \quad (14.2)$$

где \bar{N}_v — средние значения чисел заполнений квазичастиц или спиновых волн,

$$\bar{N}_v = \langle \xi_v^+ \xi_v \rangle = \left\{ \exp \frac{E_v}{\theta} - 1 \right\}^{-1}. \quad (14.3)$$

Условия (14.2) соблюдаются при выполнении следующих неравенств:

$$D_f = \sum_v |v_{fv}|^2 \ll 1, \quad \bar{N}_v \ll 1. \quad (14.4)$$

Так как $E_v \geq 0$, то второе из неравенств (14.4) всегда выполняется для достаточно низких температур. Пер-

¹⁾ Или «квазичастиц», или «спиновых волн» (для спиновых систем).

вое из неравенств (14.4) является более жестким, и, по существу, именно оно дает критерий применимости метода приближенного вторичного квантования. Если коэффициенты R формы \mathcal{H}_2 равны нулю, то $v_{fv} \equiv 0$ и метод всегда применим; если $R \neq 0$, требуется дополнительное исследование условий (14.4).

В ряде случаев точность, даваемая этим приближением, недостаточна и требуется найти поправки к нему. Они будут двоякого характера. Во-первых, поправки от форм более высокого порядка по степеням операторов в полном гамильтониане, которые описывают взаимодействие квазичастиц друг с другом; они могут быть рассчитаны по любой стандартной теории возмущений. Об учете этих форм при построении вышших приближений говорят также как об «учете динамического взаимодействия (спинов, спиновых волн)». Во-вторых, будут поправки из-за не бозевских, в действительности, свойств операторов, из которых построен гамильтониан. Своим происхождением они обязаны особенностям перестановочных соотношений для спиновых операторов — кинематическим свойствам последних. В этом случае говорят о задаче «учета кинематического взаимодействия». Именно с ней связаны специфические трудности квантовой теории магнетизма¹⁾.

Рассмотрим сначала более характерный случай спина $S = 1/2$. Для него спиновые операторы удобно записать через паули-операторы. Согласно (5.15) будем иметь:

$$\begin{aligned} S_f^+ &= b_f, & S_f^- &= b_f^+, & S_f - S_f^z &= n_f, \\ n_f &= b_f^+ b_f, & b_f^2 &= b_f^{+2} = 0 & (n_f^0 &= 0, 1). \end{aligned} \quad (14.5)$$

Паули-операторы определены на подпространстве функций с числами заполнения $n_f^0 = 0, 1$ (иначе говоря, на подпространстве функций, для которых спин в узле принимает значения $S_f^z = \pm 1/2$). Для одного узла они имеют фермиевские перестановочные соотношения (см.

¹⁾ Детальный анализ трудностей, связанных с учетом кинематического взаимодействия, был проведен Дайсоном (1956, а, б) в связи с исследованием низкотемпературных разложений для изоотропного ферромагнетика.

(5.13)). Поэтому при действии операторов b_i^+ , b_i на волновую функцию $C(n_i^0)$ от чисел заполнений будем иметь:

$$\begin{aligned} b_i C(n_i^0) &= \Delta(n_i^0 - 1) C(n_i^0 - 1), \\ b_i^+ C(n_i^0) &= \Delta(n_i^0) C(n_i^0 + 1). \end{aligned} \quad (14.6)$$

В результате видим, что подпространство функций $\{C(0), C(1)\}$ при действии операторов b_i , b_i^+ преобразуется само в себя. Точно так же остается инвариантным при действии операторов b_i , b_i^+ подпространство функций $\{C(2), C(3), \dots\}$. Очевидно, что таким свойством обладает и гамильтониан системы, поскольку он построен из произведений паули-операторов. Следуя Дайсону (1956, а, б), первое подпространство будем называть физическим, а второе — нефизическим (см. также § 5).

Задача состоит в определении собственных значений \mathcal{H} на физическом пространстве. Однако при переходе к спинволновому приближению автоматически включаются нефизические состояния (из-за существования сколь угодно больших чисел заполнений для спиновых волн). Включение нефизического пространства ведет к неконтролируемым ошибкам, связанным с тем, что в узле проекция спина на ось квантования может принимать значения $|S_i^z| > 1/2$, вопреки постановке задачи. В связи с этим возникает весьма сложная задача исключения вкладов от нефизических состояний. Ее формулируют также как задачу учета ограничений на числа заполнений при переходе к бозе-операторам (или учета ограничений на числа заполнений для спиновых волн). Ограничение на числа заполнений эквивалентно как бы некоторому взаимодействию (подробнее см. § 37).

Для спина $S \geq 1$ по-прежнему наибольшие трудности составляет учет кинематических эффектов. Однако в этом случае физическое пространство шире, чем для спина $S = 1/2$, и можно думать, что ограничения на числа заполнений будут менее жесткими, поскольку $n_i^0 = 0, 1, \dots, 2S$. В случае низких температур ($\theta \rightarrow 0$) вклад от нефизических состояний будет асимптотически мал при $S \gg 1$, так как нефизическими будут состояния

с $n_f^0 \geq 2S + 1$, вероятность возбуждения которых мала при низких температурах (подробнее см. Ю. А. Изюмов (1959), Огучи (1960) и § 5).

Рассмотрим на примере изотропного ферромагнетика способы учета динамического и кинематического взаимодействий.

Гамильтониан спиновой системы возьмем в виде (12.20) — (12.24). Условимся считать, что решетка состоит из N эквивалентных узлов, которые все заняты атомами одного сорта со спином S , и что $I(f) \geq 0$ для всех $|f|$. Магнитное поле будем считать направленным по оси z .

Из вида формы (12.21) легко усмотреть, что при этих условиях она имеет минимум, когда все классические векторы γ_f ориентированы параллельно внешнему полю:

$$\gamma_f \parallel H, \quad H^a = H \delta_{az}. \quad (14.7)$$

Но тогда γ_f не зависят от f и из (5.9) следует, что

$$(A_{f_1}^*, A_{f_2}) = \frac{1}{2}, \quad (A_{f_1}, A_{f_2}) = (A_{f_1}, \gamma_{f_2}) = 0. \quad (14.8)$$

В результате гамильтониан системы преобразуется к виду

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4, \quad (14.9)$$

где

$$\mathcal{H}_0 = -N\mu HS - \frac{1}{2} NS^2 J(0), \quad (14.10)$$

$$\mathcal{H}_2 = (\mu H + SJ(0)) \sum_f (S - S_f^z) - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) S_{f_1}^- S_{f_2}^+, \quad (14.11)$$

$$\mathcal{H}_4 = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) (S - S_{f_1}^z) (S - S_{f_2}^z) \quad (14.12)$$

$$\left(J(v) = \sum_f I(f) e^{i(f, v)} \right).$$

Для расчетов удобнее использовать представление спиновых операторов через операторы с более простыми коммутационными свойствами. Мы ограничимся здесь представлениями спиновых операторов, которые рассматривались в § 5.

В качестве нулевого приближения обычно берется гамильтониан, соответствующий гамильтониану метода приближенного вторичного квантования (см. § 12). Для этого из полного гамильтониана (14.9) выделяется квадратичная форма (14.11), спиновые операторы в ней заменяются бозевскими по формулам (12.9). В результате получаем:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_0 &= \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}'_2 = \\ &= \mathcal{E}_0 + (\mu H + SJ(0)) \sum_f n_f - \sum_{f_1, f_2} SI(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}. \quad (14.13)\end{aligned}$$

Учет поправок от динамического и кинематического взаимодействий производится в зависимости от вида представления для спиновых операторов. Остановимся коротко на каждом из них.

Паули-операторы (14.5) для спина $S = 1/2$. Формулы (14.10) — (14.12) в результате подстановки принимают вид

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} N\mu H - \frac{1}{8} NJ(0), \quad (14.14)$$

$$\mathcal{H}_2 = \left(\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right) \sum_f n_f - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}, \quad (14.15)$$

$$\mathcal{H}_4 = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}. \quad (14.16)$$

При использовании гамильтониана (14.9), (14.15) — (14.16) можно в случае низких температур приближенно считать операторы b_f, b_f^+ бозевскими и рассматривать \mathcal{H}_2 (14.15) как гамильтониан нулевого приближения. Динамическое взаимодействие описывается оператором \mathcal{H}_4 (14.15), кинематическое взаимодействие входит здесь через перестановочные соотношения для паули-операторов (5.13) — как ограничения на числа заполнения. Предположение о том, что кинематическое и динамическое взаимодействия можно рассматривать как малое возмущение, можно оправдать при использовании уравнений движения для операторов b_f, b_f^+ (см. § 37).

Представление Гольштейна — Примакова — Изюмова (5.16)—(5.17) для спина $S \geq 1/2$. Формулы (14.11)—(14.12) принимают вид

$$\mathcal{H}_2 = (\mu H + SJ(0)) \sum_f n_f - \sum_{f_1, f_2} SI(f_1 - f_2) a_{f_1}^+ \Phi(n_{f_1}) \Phi(n_{f_2}) a_{f_2}, \quad (14.17)$$

$$\mathcal{H}_4 = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}, \quad (14.18)$$

где $n_f = a_f^+ a_f$, $\Phi(n_f) = \left(1 - \frac{n_f}{2S}\right)^{1/2}$, энергия основного состояния \mathcal{E}_0 определяется согласно (14.10). Для низких температур вклад от нефизических состояний асимптотически мал при $S \gg 1$. Поэтому можно попытаться учесть кинематические эффекты, раскладывая операторы $\Phi(n_f)$ в ряд

$$\Phi(n_f) = 1 - \frac{n_f}{4S} - \frac{n_f^2}{32S^2} - \dots \quad (14.19)$$

и пренебрегая, далее, не бозевским характером операторов a_f , a_f^+ (5.18). Подставляя (14.19) в гамильтониан (14.17), (14.18), получим

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}' + \mathcal{H}'', \quad (14.20)$$

где

$$\mathcal{H}_2 = (\mu H + SJ(0)) \sum_f n_f - \sum_{f_1, f_2} SI(f_1 - f_2) a_{f_1}^+ a_{f_2}, \quad (14.21)$$

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}, \quad (14.22)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'' = & \frac{1}{4} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) \left(1 + \frac{1}{8S}\right) (a_{f_1}^+ a_{f_1}^+ a_{f_1} a_{f_2} + a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2} a_{f_2}) + \\ & + \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) \frac{1}{32S} (a_{f_1}^+ a_{f_1}^+ a_{f_1}^+ a_{f_1} a_{f_1} a_{f_2} + a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2} a_{f_2} a_{f_2}) - \\ & - \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) \frac{1}{16S} a_{f_1}^+ a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f_2} a_{f_2} a_{f_1} + O(S^{-2}). \end{aligned} \quad (14.23)$$

Оператор \mathcal{H}_2 (14.21) описывает невзаимодействующие спиновые волны, \mathcal{H}' (14.22) — обычное динамическое

взаимодействие спиновых волн, \mathcal{H}'' (14.23) — кинематическое взаимодействие. В случае низких температур \mathcal{H} , \mathcal{H}'' рассматриваются как малое возмущение по сравнению с \mathcal{H}_0 . Гамильтониан (14.20) — (14.23) тем точнее описывает поведение системы, чем больше S .

Представление Дайсона (5.23). В этом случае гамильтониан (14.9), (14.11) — (14.12) преобразуется к виду

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}' + \mathcal{H}'', \quad (14.24)$$

где

$$\mathcal{H}_2 = (\mu H + SJ(0)) \sum_{\vec{f}} n_{\vec{f}} - \sum_{\vec{f}_1, \vec{f}_2} SI(\vec{f}_1 - \vec{f}_2) \alpha_{\vec{f}_1}^+ \alpha_{\vec{f}_2}, \quad (14.25)$$

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{f}_1, \vec{f}_2} I(\vec{f}_1 - \vec{f}_2) n_{\vec{f}_1} n_{\vec{f}_2}, \quad (14.26)$$

$$\mathcal{H}'' = \frac{1}{2} \sum_{\vec{f}_1, \vec{f}_2} I(\vec{f}_1 - \vec{f}_2) \alpha_{\vec{f}_1}^+ n_{\vec{f}_2} \alpha_{\vec{f}_2}, \quad (14.27)$$

а \mathcal{E}_0 определяется согласно (14.10).

Оператор \mathcal{H}_2 (14.25) по-прежнему описывает невзаимодействующие спиновые волны, \mathcal{H}' (14.26) — динамическое взаимодействие спиновых волн, \mathcal{H}'' (14.27) — кинематическое взаимодействие спиновых волн. Следует отметить, что в этом случае, как видно из (14.27), гамильтониан в новых переменных неэрмитов. [Подробнее см. §§ 3, 4 гл. III Дополнения. (Ред.)].

Для случая низких температур операторы \mathcal{H}' , \mathcal{H}'' можно рассматривать как малое возмущение и использовать методы теории возмущений. Из эквивалентности представлений Дайсона и Гольштейна — Примакова — Изюмова следует, что и здесь при низких температурах вклад от нефизических состояний будет асимптотически малым при $S \gg 1$.

ГЛАВА V

ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА ПРИБЛИЖЕННОГО ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ

В настоящей главе рассматриваются конкретные примеры изотропного ферромагнетика и изотропного антиферромагнетика; для них вычисляются спектры элементарных возбуждений и намагниченность как функция температуры и внешнего магнитного поля. В заключение указываются некоторые дальнейшие применения метода.

§ 15. Изотропный ферромагнетик

Ферромагнетик с простой решеткой. В качестве простейшего примера рассмотрим задачу о приближенном определении нижней части энергетического спектра изотропного ферромагнетика и температурной зависимости намагниченности.

Условимся считать, что решетка состоит из N эквивалентных узлов, занятых атомами одного сорта, поэтому

$$S_f = S, \mu_f = \mu.$$

Объем системы обозначим через V . Относительно обменных интегралов предположим, что

$$I(f_1 - f_2) \geq 0 \text{ при всех } |f_1 - f_2|.$$

Магнитное поле для определенности будем считать направленным по оси z .

В этих предположениях спиновая система приближенно описывается гамильтонианом (14.13):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_2, \quad (15.1)$$

где

$$\mathcal{E}_0 = -N\mu SH - \frac{1}{2} NS^2 J(0), \quad (15.2)$$

$$\mathcal{H}_2 = (\mu H + SJ(0)) \sum_f n_f - \sum_{f_1, f_2} SI(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}, \quad (15.3)$$

b_f^+ , b_f — бозе-операторы.

Квадратичная форма (15.3) диагонализуется каноническим преобразованием¹⁾

$$b_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_v e^{i(f, v)} \xi_v, \quad (15.4)$$

где ξ_v^+ , ξ_v — новые бозе-операторы. Подставляя (15.4) в (15.3), получаем искомую формулу для энергии слабо возбужденных состояний:

$$\mathcal{H}_2 = \sum_v E_s(v) N_v \quad (N_v = \xi_v^+ \xi_v), \quad (15.5)$$

$E_s(v)$ — энергия элементарного возбуждения или спиновой волны с волновым вектором v :

$$E_s(v) = \mu H + SJ(0)(1 - \gamma_v) = \mu H + SJ(0) \mathcal{E}_v, \quad (15.6)$$

где

$$\gamma_v = J(v)/J(0), \quad J(v) = \sum_f I(f) e^{i(f, v)}. \quad (15.7)$$

Операторы ξ_v , ξ_v^+ называют также операторами уничтожения и порождения спиновых волн. В этом приближении свободная энергия системы равна

$$F = \mathcal{E}_0 + \theta \sum_v \ln \left(1 - e^{-\frac{1}{\theta} E_s(v)} \right). \quad (15.8)$$

Отсюда дифференцированием по H получаем выражение для намагниченности (8.35)

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = N\mu S - \sum_v \frac{\partial E_s(v)}{\partial H} \bar{N}_v^{(S)} = M_0 \left(1 - \frac{1}{S} P_S \right), \quad (15.9)$$

¹⁾ Преобразование (15.4) является частным случаем общего преобразования (13.6), когда $u_{fv} = N^{-1/2} \exp i(f, v)$; $v_{fv} = 0$.

где $M_0 = N\mu S$ — намагниченность насыщения образца, $\bar{N}_v^{(S)}$ — средние числа заполнений спиновых волн, P_S — сумма по числам заполнений:

$$P_S = \frac{1}{N} \sum_v \bar{N}_v^{(S)}, \quad \bar{N}_v^{(S)} = \langle N_v \rangle = \left(e^{\frac{1}{\Phi} E_S(v)} - 1 \right)^{-1}. \quad (15.10)$$

Согласно (П2.14) перейдем в (15.10) от суммы к интегралу, полагая

$$\frac{1}{N} \sum_v \bar{N}_v^{(S)} \rightarrow \frac{v}{(2\pi)^3} \int \bar{N}_v^{(S)} dv, \quad (15.11)$$

где $v = V/N$ — объем на один узел. Интегрирование по v идет по первой, приведенной, зоне Бриллюэна для волновых векторов.

Так как $E_S(v) \geq 0$, то для низких температур $\exp\left(-\frac{1}{\Phi} E_S(v)\right)$ можно рассматривать как малую величину и выражение для P_S переписать в виде

$$\begin{aligned} P_S &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{v}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{n}{\Phi} E_S(v)} dv = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n}{\Phi} \mu H} \frac{v}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{n}{\Phi} S J(0) \xi_v} dv. \end{aligned} \quad (15.12)$$

При $\Phi \rightarrow 0$ основной вклад в намагниченность дают спиновые волны с малыми волновыми векторами, так как возбуждаются главным образом спиновые волны с малой энергией. Поэтому можно разложить $E_S(v)$ (15.6) в ряд по степеням v и ограничиться членами порядка v^2 включительно. Заметим, что $E_S(v)$ — четная функция v и что разложения начинаются с членов v^2 .

Действительно,

$$\begin{aligned} J(0) - J(v) &= \sum I(f) (1 - e^{i(f, v)}) \cong \\ &\cong \frac{1}{2} \sum (f, v)^2 I(f) = \frac{v^2}{6} \sum f^2 I(f). \end{aligned}$$

Подставляя это выражение в (15.6), получаем приближенное выражение для энергии спиновой волны:

$$E_S(v) \cong \mu H + \frac{1}{6} S J(0) \bar{\delta}^2 \cdot v^2, \\ \bar{\delta}^2 = \frac{\sum f^2 I(f)}{\sum I(f)} \quad (J(0) = \sum I(f)). \quad (15.13)$$

Подставим (15.13) в интеграл (15.12) и распространим интегрирование на область всех значений v . В результате приближенное выражение для величины P_S легко вычисляется:

$$P_S \cong \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{n}{\vartheta} \mu H} \frac{v}{(2\pi)^3} \int e^{-\frac{n}{6\vartheta} S J(0) \bar{\delta}^2 \cdot v^2} dv = \\ = \frac{v}{(\bar{\delta}^2)^{3/2}} \left(\frac{\vartheta}{\frac{2\pi}{3} S J(0)} \right)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{n}{\vartheta} \mu H}}{n^{3/2}}. \quad (15.14)$$

Используя (15.14), выражению (15.9) можно придать следующий вид:

$$\sigma_S = 1 - S^{-1} P_S \cong 1 - \frac{S^{-1} v}{(\bar{\delta}^2)^{3/2}} \left(\frac{\vartheta}{\frac{2\pi}{3} S J(0)} \right)^{3/2} Z_{3/2} \left(\frac{\mu H}{\vartheta} \right), \quad (15.15)$$

где $\sigma_S = M/M_0$ — намагниченность на один узел (8.29), и при $H = 0$

$$\sigma_S = 1 - \frac{S^{-1} v}{(\bar{\delta}^2)^{3/2}} \left(\frac{\vartheta}{\frac{2\pi}{3} S J(0)} \right)^{3/2} \zeta \left(\frac{3}{2} \right), \quad (15.16)$$

где

$$Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p} e^{-nx}, \quad \zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p}, \quad (15.17)$$

($\zeta(p)$ — дзета-функция Римана).

Формулы вида (15.15), (15.16), определяющие зависимость намагниченности изотропного ферромагнетика от температуры и поля или только от температуры, впервые были получены Блохом (1930), (1932). Из (15.16) видим, что при $H = 0$ и низких температурах

намагниченность изотропного ферромагнетика меняется с температурой как $\theta^{3/2}$ — это так называемый «закон трех вторых Блоха». Нетрудно заметить, что он является следствием квадратичной зависимости $E_S(v)$ от v при малых v .

Учтем теперь вклад в намагниченность от следующих членов разложения энергии спиновых волн по степеням волнового вектора.

Ограничимся приближением ближайших соседей. Тогда

$$I(f) = \begin{cases} I, & f = \delta, \\ 0, & f \neq \delta, \end{cases} \quad J(v) = Iz\gamma_v, \quad \gamma_v = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i(v, \delta)}, \quad (15.18)$$

где δ — вектор, соединяющий два ближайших соседних узла; суммирование по δ обозначает суммирование по всем ближайшим соседям; z — число ближайших соседей.

Для простейших кубических решеток (простой кубической, объемноцентрированной и гранецентрированной) разложение для намагниченности по степеням температуры имеет вид (Дайсон (1956, 6))

$$\sigma_S = 1 - S^{-1}P_S = 1 - S^{-1} \left\{ \rho Z_{3/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{3/2} + \right. \\ \left. + \frac{3\pi}{4} \rho Z_{5/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{5/2} + \pi^2 \omega \rho Z_{7/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{7/2} + \dots \right\}, \quad (15.19)$$

где введены безразмерные величины:

$$\tau = \frac{\theta}{\frac{2\pi}{3} SIz}, \quad h = \frac{\mu H}{\frac{2\pi}{3} SIz}, \quad \rho = \frac{v}{\delta^3}, \quad (15.20)$$

ω — число, зависящее от геометрии решетки:

$$\left. \begin{array}{l} \text{простая кубическая решетка: } z=6, \quad \omega = \frac{33}{32}; \\ \text{объемноцентрированная кубическая: } z=8, \quad \omega = \frac{281}{288}; \\ \text{гранецентрированная кубическая: } z=12, \quad \omega = \frac{15}{16}. \end{array} \right\} \quad (15.21)$$

В этом же приближении для теплоемкости спиновой системы получим, согласно (8.36) и (15.8), следующее выражение:

$$C = k \left\{ \frac{15}{4} \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \tau^{3/2} + \frac{105}{16} \pi \rho \zeta \left(\frac{7}{2} \right) \tau^{5/2} + \right. \\ \left. + \frac{63}{4} \pi^2 \omega \zeta \left(\frac{9}{2} \right) \tau^{7/2} + \dots \right\}. \quad (15.22)$$

Разложения (15.19), (15.22) получены в приближении спиновых волн. Поэтому в дальнейшем будем называть их разложениями Блоха для изотропного ферромагнетика. Следует иметь в виду, что в разложениях (15.19), (15.22) не учитываются поправки от динамического и кинематического взаимодействий спиновых волн. Исследования Дайсона (1956, а, б) показали, что поправки от динамического и кинематического взаимодействий в значительной мере взаимно компенсируются. Так, например, формула для намагниченности (15.19) справедлива с точностью до членов порядка $\tau^{7/2}$ включительно.

Критерий применимости метода приближенного второго квантования (14.4) выполняется для изотропного ферромагнетика тождественно. Действительно, каноническое преобразование (15.4) можно рассматривать как частный случай преобразования (13.6) при $v_{fv} = 0$. Следовательно, $D_f = 0$. Это связано с тем обстоятельством, что для изотропного ферромагнетика волновая функция состояния с параллельной ориентацией всех спинов

$$C_0 = \prod_f \Delta(S - S_f^z)$$

является точной собственной функцией основного состояния гамильтониана

$$\mathcal{H}C_0 = \mathcal{E}_0 C_0,$$

где \mathcal{E}_0 , \mathcal{H} определяются выражениями (14.9) — (14.12).

В реальных ферромагнетиках сравнительно редко спиновая система моделируется изотропным обменным гамильтонианом. Среди факторов, более или менее искажающих картину явления, нужно отметить магнитную анизотропию, стрикцию, влияние электронов про-

водимости в ферромагнитных проводниках и др. Поэтому рассмотренная здесь модель имеет в основном эвристический характер.

Достаточно полно требованиям модели, по-видимому, удовлетворяет соединение SrVg_3 . Госсард и др. (1961) по измерению ядерного магнитного резонанса в нем нашли, что в интервале $1-4^\circ \text{K}$ ($T_c \sim 38^\circ \text{K}$) температурная зависимость намагниченности SrVg_3 хорошо описывается трехчленной формулой (15.19) (с точностью до величин порядка $\theta^{3/2}$ включительно)¹⁾.

Другим примером вещества, удовлетворяющего требованиям модели, является EuS . Прямой обмен между электронами $4f$ -оболочек вряд ли возможен, и, видимо, имеет место косвенный обмен. Соединение EuS имеет ионную решетку типа NaCl . Основным состоянием иона Eu^{++} является состояние ^8S ; значение спина иона европия в решетке близко к значению $S = 7/2$, температура Дебая $T_D \approx 200^\circ \text{K}$. По данным Макколума (мл.) и Колловея (1962), экспериментальный ход теплоемкости как функции температуры в интервале $1-4^\circ \text{K}$ с большой точностью описывается первыми двумя слагаемыми формулы вида (15.22); температура Кюри определена равной $T_c = 17 \pm 1^\circ \text{K}$. По данным Чарапа и Бойда (1964), формула вида (15.16) для намагниченности, полученная при учете первых и вторых соседей и учете спин-спинового (дипольного) взаимодействия, хорошо описывает экспериментальную температурную зависимость намагниченности; для T_c найдено значение $16,4 \pm 1^\circ \text{K}$.

Спиновые волны в сложных решетках²⁾. Имеется большое сходство между спиновыми волнами для гейзенберговского ферромагнетика и колебаниями решетки, так как те и другие являются нормальными колебаниями дисконтинуума. Поэтому ряд соображений о характере спектра колебаний решетки можно перенести на спектр спиновых волн. В частности, в сложных магнитных решетках в спектре спиновых волн могут иметься ветви

¹⁾ В работе Самуэльсена и др. (1971) методом неупругого рассеяния нейтронов было подтверждено хорошее согласие с теорией Дайсона и найдена температурная ренормировка двух ветвей спиновых волн вплоть до $T_c = 32,5^\circ \text{K}$. (Прим. ред.)

²⁾ См. Саенц (1962), Уоллес (1962).

типа акустических и оптических колебаний. Поскольку для ряда эффектов характер спектра имеет существенное значение, рассмотрим этот вопрос подробнее.

Пусть решетка состоит из N элементарных ячеек, в каждой из которых имеется n узлов, занятых магнитно-активными атомами. Будем обозначать номер элементарной ячейки и ее радиус-вектор индексом f , а номер атома в ячейке и его радиус-вектор индексом j . Координата каждого атома (спина) в решетке будет записываться как $r_{fj} = f + j$. Спин узла r_{fj} обозначим через S_{fj} и будем считать, что величина спина зависит только от индекса j ; величину спинов будем считать произвольной: $S_j \geq 1/2$.

Условимся считать, что имеется одноосная анизотропия, которая может быть представлена как некоторое внутреннее поле H_a , направленное по оси z ; внешнее магнитное поле H также будем считать направленным по оси z . Рассмотрим конфигурацию, в которой спины расположены коллинеарно этой оси, и примем, что она устойчива. Введем матрицу $\varepsilon = (\varepsilon_j \delta_{jj'})$, где $\varepsilon_j = +1 (-1)$, когда S_{fj} направлен параллельно (антипараллельно) оси z .

Запишем гамильтониан спиновой системы в виде

$$\mathcal{H} = - \sum_{f, l} A_l S_{fl}^z - \frac{1}{2} \sum_{f, f', l, l'} I(f, j; f', j') (S_{fl}, S_{f'l'}), \quad (15.23)$$

где $I(f, j, f', j')$ — обменные интегралы, зависящие только от разности координат узлов r_{fl} и $r_{f'l'}$; A_l — линейные и однородные функции внешнего поля и поля анизотропии ($A_j = H + \varepsilon_j H_{aj}$). Так как мы ограничиваемся здесь спин-волновым приближением, то для операторов S_{fj} можно использовать приближенное представление через бозе-операторы (12.19):

$$S_{fl}^x = \sqrt{S_l} \frac{a_{fl}^\dagger + a_{fl}}{\sqrt{2}}, \quad S_{fl}^y = i\varepsilon_l \sqrt{S_l} \frac{a_{fl}^\dagger - a_{fl}}{\sqrt{2}}, \quad (15.24)$$

$$S_{fl}^z = \varepsilon_l (S_l - n_{fl}).$$

Подставим (15.24) в (15.23) и произведем каноническое преобразование переменных:

$$a_{fl} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} a_{\nu l} e^{i(f, \nu)}. \quad (15.25)$$

В результате выражение для \mathcal{H} преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \sum_{v, j} \left[\varepsilon_j A_j + \sum_{j'} \varepsilon_j \varepsilon_{j'} S_{j'} I_{jj'}(0) \right] a_{vj}^+ a_{vj} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{v, j, j'} \varepsilon_j \varepsilon_{j'} \sqrt{S_j S_{j'}} I_{jj'}(v) \left(\frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j'} - 1}{2} a_{vj}^+ a_{-vj'}^+ + \right. \\ \left. + 2 \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j'} + 1}{2} a_{vj}^+ a_{vj'} + \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j'} - 1}{2} a_{-vj'} a_{vj} \right), \quad (15.26) \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{E}_0 = - \sum_{j, j'} \left[\varepsilon_j A_j S_{j'} + \frac{1}{2} \sum_{j''} \varepsilon_j \varepsilon_{j''} S_{j''} I_{jj''}(0) \right], \quad (15.27)$$

$$I_{jj'}(v) = \sum_f I(j, j; j', j') e^{-i(v, t-t')}. \quad (15.28)$$

Так как обменный интеграл веществен и зависит только от разности координат узлов, то

$$I_{jj'}^*(v) = I_{jj'}(v) = I_{jj'}(-v). \quad (15.29)$$

Следовательно, квадратичная форма (15.26) эрмитова и ее собственные значения вещественны.

Состояния системы будут устойчивы, если энергия возбужденных состояний будет положительна. Поэтому форма (15.26) не должна быть отрицательной. В дальнейшем мы будем считать это условие выполненным¹⁾.

Запишем преобразованный гамильтониан \mathcal{H} в стандартном виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \frac{1}{2} \sum \{ R_{jj'}(v) a_{vj}^+ a_{-vj'}^+ + \\ + 2 S_{jj'}(v) a_{vj}^+ a_{vj'} + R_{jj'}^*(v) a_{-vj'} a_{vj} \}, \quad (15.30) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} S_{jj'}(v) = \left[\varepsilon_j A_j + \sum_{j''} \varepsilon_j \varepsilon_{j''} S_{j''} I_{jj''}(0) \right] \Delta(j - j') - \\ - \varepsilon_j \varepsilon_{j'} \sqrt{S_j S_{j'}} I_{jj'}(v) \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j'} + 1}{2}, \quad (15.31) \end{aligned}$$

$$R_{jj'}(v) = - \varepsilon_j \varepsilon_{j'} \sqrt{S_j S_{j'}} I_{jj'}(v) \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j'} - 1}{2}.$$

¹⁾ Относительно этого условия устойчивости в теории магнетизма см. § 12, а также работы Ван Кранендонка и Ван Флека (1958) и Каплана (1960).

Согласно (13.1)–(13.8) форма (15.30) приводится к диагональному виду

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{E}_0 + \Delta \mathcal{E}_0 + \sum_{\mathbf{v}, p} E^{(p)}(\mathbf{v}) \xi_{\mathbf{v}p}^+ \xi_{\mathbf{v}p}, \\ \Delta \mathcal{E}_0 &= - \sum_{\mathbf{v}, p, j} E^{(p)}(\mathbf{v}) |v_{jp}(\mathbf{v})|^2,\end{aligned}\quad (15.32)$$

каноническим преобразованием

$$a_{\mathbf{v}j} = \sum_p \{u_{jp}(\mathbf{v}) \xi_{\mathbf{v}p} + v_{jp}^*(\mathbf{v}) \xi_{\mathbf{v}p}^+\} \quad (p = 1, 2, \dots, n), \quad (15.33)$$

где $\xi_{\mathbf{v}p}^+$, $\xi_{\mathbf{v}p}$ — новые бозе-операторы, (u, v) — собственные векторы, а $E(p)$ — собственные значения системы уравнений:

$$\begin{aligned}E^{(p)} u_{jp}(\mathbf{v}) &= \sum_{j'} S_{jj'}(\mathbf{v}) u_{j'p}(\mathbf{v}) + \sum_{j'} R_{jj'}(\mathbf{v}) v_{j'p}(\mathbf{v}), \\ -E^{(p)} v_{jp}(\mathbf{v}) &= \sum_{j'} S_{jj'}^*(\mathbf{v}) v_{j'p}(\mathbf{v}) + \sum_{j'} R_{jj'}^*(\mathbf{v}) u_{j'p}(\mathbf{v}) \\ (j, j' &= 1, 2, \dots, n),\end{aligned}\quad (15.34)$$

для векторов (u, v) имеют место следующие условия ортогональности и нормировки:

$$\begin{aligned}\sum_j \{u_{jp}(\mathbf{v}) u_{jp'}^*(\mathbf{v}) - v_{jp}(\mathbf{v}) v_{jp'}^*(\mathbf{v})\} &= \Delta(p - p'), \\ \sum_j \{u_{jp}(\mathbf{v}) v_{jp'}(\mathbf{v}) - u_{jp'}(\mathbf{v}) v_{jp}(\mathbf{v})\} &= 0.\end{aligned}\quad (15.35)$$

Система $2n$ линейных уравнений (15.34) зависит от \mathbf{v} как от параметра. При фиксированном \mathbf{v} она имеет $2n$ линейно независимых решений, принадлежащих $2n$ собственным значениям: $\pm E^{(p)}$, $p = 1, 2, \dots, n$. Квази-непрерывный индекс \mathbf{v} принимает N значений, соответствующих точкам первой зоны Бриллюэна в пространстве обратной решетки векторов \mathbf{j} , при этом каждое из собственных значений $E^{(p)}$ принимает N значений $E^{(p)}(\mathbf{v})$. В силу условия положительности формы (15.26) имеется n собственных значений, которые положительны при всех \mathbf{v} . Условимся считать, что $E^{(p)}(\mathbf{v}) \geq 0$, $p = 1, 2, \dots, n$. Будем называть величины $E^{(p)}(\mathbf{v})$ ветвями

спектра элементарных возбуждений или спиновых волн, а p — номером ветви. Число различных ветвей, вообще говоря, может быть меньше n , так как некоторые из них могут совпадать (вырождение в квантовомеханическом смысле). Остальные n ветвей спектра ($-E^{(p)}(v) \leq 0$) в окончательном результате исключаются как лишние (см. § 13).

Покажем, что при $A_j = 0$ [см. (15.23)] имеется, по крайней мере, одна акустическая ветвь, т. е. что имеется $E^{(p)}(0) = 0$.

Запишем систему уравнений (15.34) в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} S(v) & R(v) \\ R^*(v) & S^*(v) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E(v) & 0 \\ 0 & -E(v) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (15.36)$$

где $S(v)$, $R(v)$ — квадратные матрицы n -го порядка с элементами (15.31), O — квадратная матрица n -го порядка, все элементы которой равны нулю, $E(v)$ — диагональная матрица n -го порядка.

Обозначим штрихами величины для случая $A_j = 0$ (например, $S'(v) = S(v)|_{A_j=0}$ и т. д.). Положим $v = 0$.

Так как $E^{(p)}$ — собственные значения системы уравнений (15.36), то

$$(-1)^n \prod_p \{E^{(p)}(0)\}^2 = \text{Det} \begin{vmatrix} S'(0) & R'(0) \\ S'^*(0) & R'^*(0) \end{vmatrix}. \quad (15.37)$$

Умножим каждый из столбцов детерминанта (15.37) на $\sqrt{S'_j}$ того же номера и из суммы первых n столбцов вычтем сумму n последних. В результате при любом j будем иметь тождество

$$\sum_j S'_{jj'}(0) \sqrt{S'_j} - \sum_j R'_{jj'}(0) \sqrt{S'_j} = 0 \quad (15.38)$$

(оно делается очевидным при подстановке (15.31) в (15.38)). Отсюда видим, что детерминант в (15.37) обращается в нуль и, следовательно, имеется, по крайней мере, одна акустическая ветвь.

§ 16. Основное состояние антиферромагнетика¹⁾

Простейший случай. Ферромагнитное упорядочение спинов в магнитно-изотропном веществе является простым следствием положительности обменного интеграла для всех пар узлов. Обратимся теперь к случаю, когда обменный интеграл положителен для одних пар узлов и отрицателен для других, и покажем, что при определенных условиях это ведет к антиферромагнитному упорядочению.

Рассмотрим изотропный кристалл. Для простоты примем, что имеется всего две эквивалентных подрешетки, вставленных одна в другую. Узлы соответствующих подрешеток условимся обозначать буквами f и g . Далее примем, что обменные интегралы для спинов в подрешетке f или g положительны, а для спинов между подрешетками f и g отрицательны:

$$I(f_1 - f_2) \geq 0, \quad I(g_1 - g_2) \geq 0, \quad I(f - g) \leq 0.$$

Число узлов в подрешетках обозначим через N :

$$\sum_f 1 = \sum_g 1 = N.$$

Наконец, ограничимся здесь случаем, когда спин каждого атома $S = 1/2$, а магнитный момент равен μ . В спин-волновом приближении гамильтониан нашей модели запишется в виде (12.27), если считать, что индексы суммирования пробегают обе подрешетки:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2, \quad (16.1)$$

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{\mu}{2} \sum (\gamma_h, H) - \frac{1}{8} \sum I(h_1 - h_2) (\gamma_{h_1}, \gamma_{h_2}), \quad (16.2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = & -\sum 2\lambda_h n_h + \frac{1}{2} \sum R^*(h_1, h_2) b_{h_1} b_{h_2} + \\ & + \sum S(h_1, h_2) b_{h_1}^+ b_{h_2} + \frac{1}{2} \sum R(h_1, h_2) b_{h_1}^+ b_{h_2}^+, \end{aligned} \quad (16.3)$$

где введены обозначения:

$$\begin{aligned} R(h_1, h_2) &= -I(h_1 - h_2) (A_{h_1}^*, A_{h_2}^*), \\ \hat{S}(h_1, h_2) &= -I(h_1 - h_2) (A_{h_1}^*, A_{h_2}) \quad (h = f, g). \end{aligned} \quad (16.4)$$

¹⁾ См. Хультен (1936), С. В. Тябликов (1956, а).

Классические векторы γ_h и множители Лагранжа λ_h определяются из условий (12.25):

$$-\frac{1}{2} \sum_{h'} I(h-h') \gamma_{h'}^\alpha - \mu H^\alpha = 2\lambda_h \gamma_h^\alpha, \quad (16.5)$$

$$\sum_\alpha (\gamma_h^\alpha)^2 = 1 \quad (\alpha = x, y, z).$$

Классические векторы A_h определяются через векторы γ_h по формулам (5.10).

Перейдем к исследованию основного состояния. Примем, что в нулевом приближении каждая из магнитных подрешеток f и g намагничена до насыщения. Следовательно, векторы S_f (и S_g) имеют общую ось квантования. Поэтому положим:

$$\gamma_f^\alpha = \gamma_1^\alpha, \quad \gamma_g^\alpha = \gamma_2^\alpha \quad (\alpha = x, y, z), \quad \lambda_f = \lambda_1, \quad \lambda_g = \lambda_2. \quad (16.6)$$

Так как спиновый гамильтониан нашей системы изотропен, то без нарушения общности можно принять, что магнитное поле направлено по оси z . В результате уравнения (16.5) принимают вид

$$\left. \begin{aligned} -\left(\frac{1}{2} J_{11}(0) + 2\lambda_1\right) \gamma_1^\alpha - \frac{1}{2} J_{12}(0) \gamma_2^\alpha &= \mu H \delta_{\alpha, z}, \\ -\frac{1}{2} J_{21}(0) \gamma_1^\alpha - \left(\frac{1}{2} J_{22}(0) + 2\lambda_2\right) \gamma_2^\alpha &= \mu H \delta_{\alpha, z}, \end{aligned} \right\} \quad (16.7)$$

$$\sum_\alpha (\gamma_1^\alpha)^2 = 1, \quad \sum_\alpha (\gamma_2^\alpha)^2 = 1, \quad (16.8)$$

где введены обозначения:

$$\begin{aligned} J_{11}(0) &= \sum_{f'} I(f-f'), & J_{22}(0) &= \sum_{g'} I(g-g'), \\ J_{12}(0) &= J_{21}(0) = \sum_g I(f-g). \end{aligned} \quad (16.9)$$

Уравнения (16.7) — (16.8) имеют решения двух типов. Одно из них соответствует случаю обращения в нуль определителя Δ системы (16.7), другое — случаю, когда определитель Δ отличен от нуля.

Пусть $\Delta = 0$. Из условия разрешимости уравнений находим лагранжевы множители:

$$2\lambda_1 = -\frac{1}{2} J_{11}(0) + \frac{1}{2} J_{21}(0), \quad 2\lambda_2 = -\frac{1}{2} J_{22}(0) + \frac{1}{2} J_{12}(0).$$

В результате из уравнений (16.7) получаем

$$\gamma_1^\alpha + \gamma_2^\alpha = 0 \quad (\alpha = x, y), \quad \gamma_1^z = \gamma_2^z = \frac{\mu H}{|J_{12}(0)|}.$$

Пусть $\Delta \neq 0$. Тогда из (16.7) следует

$$\gamma_1^\alpha = \gamma_2^\alpha = 0 \quad (\alpha = x, y), \quad \gamma_1^z, \gamma_2^z = \pm 1.$$

В силу условия минимума формы \mathcal{E}_0 (16.2) осуществляется в зависимости от величины внешнего поля одно из этих решений.

1. Слабые поля: $H \leq H_c = \frac{1}{\mu} |J_{12}(0)|$.

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = \frac{H}{H_c}, \quad \gamma_1^\alpha + \gamma_2^\alpha = 0 \quad (\alpha = x, y),$$

$$\mathcal{E}'_0 = -\frac{N}{8} (J_{11}(0) + J_{22}(0) - 2J_{12}(0)) - \frac{N}{2} |J_{12}(0)| \left(\frac{H}{H_c} \right)^2, \quad (16.10)$$

$$2\lambda_i = -\frac{1}{2} J_{ii}(0) + \frac{1}{2} J_{12}(0) \quad (i = 1, 2).$$

В исчезающе слабых полях это решение соответствует расположению спинов подрешеток антипараллельно друг другу и перпендикулярно к направлению вектора H .

2. Сильные поля: $H > H_c = \frac{1}{\mu} |J_{12}(0)|$,

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = 1, \quad \gamma_1^\alpha = \gamma_2^\alpha = 0 \quad (\alpha = x, y),$$

$$\mathcal{E}''_0 = -\frac{N}{8} (J_{11}(0) + J_{22}(0) - 2J_{12}(0)) + \frac{N}{2} |J_{12}(0)| \left(1 - 2 \frac{H}{H_c} \right), \quad (16.11)$$

$$2\lambda_i = -\frac{1}{2} J_{ii}(0) - \frac{1}{2} J_{12}(0) - |J_{12}(0)| \frac{H}{H_c}.$$

Спины обеих подрешеток ориентированы вдоль внешнего поля и в спиновой системе имеется ферромагнитное упорядочение: Заранее можно ожидать, что в этом случае система будет вести себя подобно ферромагнетику.

Значение напряженности внешнего поля, при которой происходит переход от одного типа решения к другому, условимся называть критическим полем:

$$H_c = \frac{1}{\mu} |J_{12}(0)|. \quad (16.12)$$

По порядку величины $|J_{12}(0)| \sim \vartheta_N$, где $\vartheta_N = kT_N$ — температура Нееля. Так как для типичных антиферромагнетиков $T_N \sim 10^1 - 10^2$ °K, $\mu \sim 10^{-20}$, то для критического поля получаем такую оценку: $H_c \sim 10^5 - 10^6$ э. Поэтому эффект «схлопывания» магнитных моментов подрешеток можно наблюдать лишь в достаточно сильных полях.

Величина \mathcal{E}_0 представляет энергию основного состояния в нулевом приближении. Намагниченность и восприимчивость антиферромагнетика в этом приближении равны

$$M_0 = - \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial H} = \begin{cases} N\mu \frac{H}{H_c}, & H \leq H_c, \\ N\mu, & H > H_c, \end{cases} \quad (16.13)$$

$$\chi_0 = \frac{\partial M_0}{\partial H} = \begin{cases} N \frac{\mu}{H_c}, & H \leq H_c, \\ 0, & H > H_c. \end{cases} \quad (16.14)$$

При $H = H_c$ намагниченность M_0 меняется непрерывно, тогда как восприимчивость χ_0 терпит разрыв.

Из формул (16.10) для случая исчезающе малых полей следует известный вывод Хультена (1936) о том, что в изотропном антиферромагнетике спины становятся поперек поля. С ростом напряженности поля ($H \leq H_c$) моменты обеих подрешеток все более отклоняются по направлению поля и, наконец, устанавливаются параллельно при достижении критических значений поля ($H = H_c$). В сильных полях ($H > H_c$) моменты подрешеток ориентированы по полю и антиферромагнетик ведет себя подобно ферромагнетику.

Направление проекций векторов намагниченностей подрешеток в плоскости (x, y) , перпендикулярной к направлению поля H , остается неопределенным, и можно только сказать, что слагающая намагниченности в плоскости (x, y) пропорциональна $1 - (H/H_c)^2$. Это связано

с вырождением по направлениям относительно одновременного поворота подрешеток вокруг направления вектора H (см. § 11). Вырождение частично снимается при

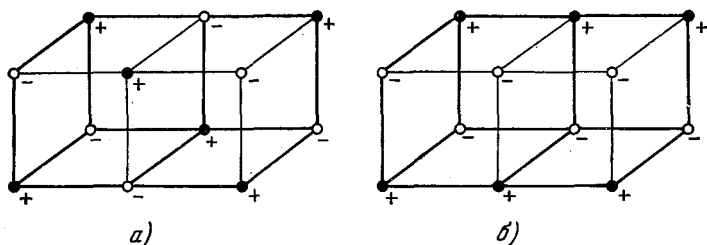


Рис. 7. Простая кубическая решетка:
а — случай $r < 1/4$; б — случай $r > 1/4$.

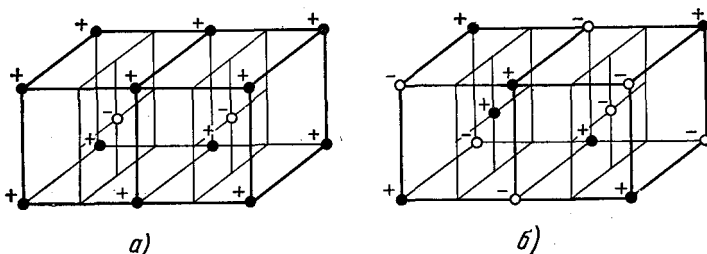


Рис. 8. Объемноцентрированная кубическая решетка:
а — случай $r < 2/3$; б — случай $r > 2/3$.

учете анизотропии, например при введении в гамильтониан слагаемых вида

$$- \sum I_a (f_1 - f_2) S_{f_1}^x S_{f_2}^x - \sum I_a (g_1 - g_2) S_{g_1}^x S_{g_2}^x,$$

где I_a — положительные величины.

Наши результаты относятся фактически к случаю одноосно-анизотропных антиферромагнетиков и внешнего поля, приложенного перпендикулярно к оси анизотропии.

Некоторые конфигурации при $H=0$. Первые соображения об антиферромагнетиках как о системах спинов с антипараллельным расположением были развиты Нелем (1932), (1936), (1948), предположившим шахмат-

ное антипараллельное расположение, и Л. Д. Ландау (1934), предположившим слоистое расположение спинов.

Вообще говоря, спиновые конфигурации определяются знаками и величинами обменных интегралов для разных соседств и геометрией кристаллической решетки. С этой точки зрения вопрос о возможных конфигурациях

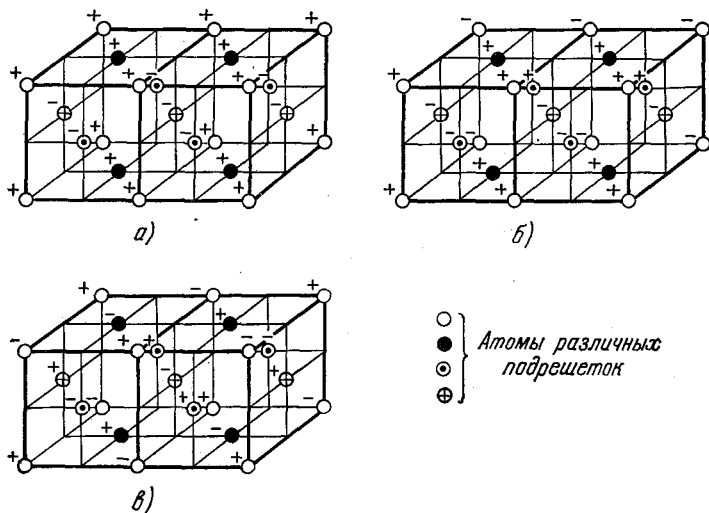


Рис. 9. Гранецентрированная кубическая решетка:
 а — случай $r < 1/3$; б — случай $r < 1/2$; в — случай $r > 1/2$.

спинов для простейших кубических решеток рассматривали Ван Флек (1941), (1951), Андерсон (1950, 6), Латтинжер (1951), Сمارт (1952) и для гексагональных решеток с плотной упаковкой — Ли (1950) и Смарт (1953).

Мы приведем здесь результаты Латтинжера (1951) для кубических решеток. Будем описывать спиновую систему с помощью гамильтониана (модель Изинга)

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} I_1 \sum_{f, \delta_1} S_f^z S_{f+\delta_1}^z - \frac{1}{2} I_2 \sum_{f, \delta_2} S_f^z S_{f+\delta_2}^z; \quad (16.15)$$

в первом слагаемом суммирование идет только по первым соседям, а во втором — только по вторым соседям;

I_1 — значения обменного интеграла для первых соседей и I_2 — для вторых соседей; считается, что $I_1, I_2 < 0$; S_i^z — операторы, принимающие значения ± 1 .

В зависимости от типа решетки и величины $r = I_2/I_1$ минимуму энергии формы (16.15) соответствуют конфигурации, приведенные на рис. 7, 8, 9. Простая кубическая решетка допускает две конфигурации, изображенные на рис. 7. Объемноцентрированная кубическая решетка также допускает только две конфигурации (рис. 8). Гранецентрированную решетку можно представить в виде совокупности четырех простых кубических решеток, вставленных одна в другую. Возможные конфигурации (см. также Ван Флек (1951)) приведены на рис. 9.

Подобного рода рассмотрения основаны на весьма упрощенной гейзенберговской модели. Более полно вопрос о магнитных структурах антиферромагнетиков излагается в сборнике (1956), обзорах Нагамия и др. (1955) и А. С. Боровика-Романова (1962).

§ 17. Элементарные возбуждения в антиферромагнетике¹⁾

Перейдем к исследованию спектра элементарных возбуждений (спиновых волн) в нашей модели.

Квадратичная форма (16.3) приводится к диагональному виду (13.7) — (13.8) преобразованием (13.6), где ξ^+ , ξ — новые бозе-операторы; u , v — собственные векторы системы уравнений (13.3). В данном случае величины R , S определяются формулами (16.4), λ — из решения системы (16.7) — (16.8).

Рассмотрим отдельно случаи слабых и сильных полей. Для удобства будем измерять поле в единицах H_c :

$$h = \frac{H}{H_c}, \quad H_c = \mu^{-1} |J_{12}(0)|. \quad (17.1)$$

1. Слабые поля: $h \leq 1$. Для определения спектра элементарных возбуждений вычислим по формулам

¹⁾ См. Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, в), С. В. Тябликов (1956, а).

(16.4), (5.10) функции R , S . Используя выражения (16.10) для γ и λ , получаем:

$$\begin{aligned} A_f^x &= -\frac{h}{2}, & A_f^y &= \frac{i}{2}, & A_f^z &= \frac{1}{2} \sqrt{1-h^2}, \\ A_g^x &= \frac{h}{2}, & A_g^y &= -\frac{i}{2}, & A_g^z &= \frac{1}{2} \sqrt{1-h^2}. \end{aligned} \quad (17.2)$$

И соответственно

$$\begin{aligned} R(f_1, f_2) &= R(g_1, g_2) = 0, & R(f, g) &= -\frac{1}{2} (1-h^2) I(f-g), \\ S(f_1, f_2) &= -\frac{1}{2} I(f_1-f_2), & S(g_1, g_2) &= -\frac{1}{2} I(g_1-g_2), \\ S(f, g) &= \frac{1}{2} h^2 I(f-g). \end{aligned} \quad (17.3)$$

В результате уравнения (13.3) принимают вид

$$\begin{aligned} (E_v + 2\lambda_1) u_{fv} + \sum_{f'} \frac{1}{2} I(f-f') u_{f'v} - h^2 \sum_g \frac{1}{2} I(f-g) u_{gv} + \\ + (1-h^2) \sum_g \frac{1}{2} I(f-g) v_{gv} = 0, \\ (-E_v + 2\lambda_1) v_{fv} + \sum_{f'} \frac{1}{2} I(f-f') v_{f'v} - h^2 \sum_g \frac{1}{2} I(f-g) v_{gv} + \\ + (1-h^2) \sum_g \frac{1}{2} I(f-g) u_{gv} = 0; \end{aligned} \quad (17.4)$$

имеется еще два таких же уравнения, получающихся заменой $f \rightleftharpoons g$, $\lambda_1 \rightleftharpoons \lambda_2$.

Решение системы уравнений (17.4) ищем в виде

$$\begin{aligned} u_{fv} &= \frac{u_{1v}}{\sqrt{N}} e^{i(f, v)}, & u_{gv} &= \frac{u_{2v}}{\sqrt{N}} e^{i(g, v)}, \\ v_{fv} &= \frac{v_{1v}}{\sqrt{N}} e^{i(f, v)}, & v_{gv} &= \frac{v_{2v}}{\sqrt{N}} e^{i(g, v)}. \end{aligned} \quad (17.5)$$

Для определения величин u_{1v} , u_{2v} , v_{1v} , v_{2v} получаем систему четырех алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} (2E_v - A_1) u_{1v} - h^2 J_{12}(v) u_{2v} + (1-h^2) J_{12}(v) v_{2v} &= 0, \\ -h^2 J_{21}(v) u_{1v} + (2E_v - A_2) u_{2v} + (1-h^2) J_{21}(v) v_{1v} &= 0, \\ (1-h^2) J_{12}(v) u_{2v} - (2E_v + A_1) v_{1v} - h^2 J_{12}(v) v_{2v} &= 0, \\ (1-h^2) J_{21}(v) u_{1v} - h^2 J_{21}(v) v_{1v} - (2E_v + A_2) v_{2v} &= 0, \end{aligned} \quad (17.6)$$

где введены обозначения:

$$A_i = -4\lambda_i - J_{ii}(\nu) = J_{ii}(0) - J_{i2}(0) - J_{ii}(\nu) \quad (i=1, 2),$$

$$J_{11}(\nu) = \sum_{f'} I(f - f') e^{i(f-f', \nu)}, \dots \quad (17.7)$$

Из условия разрешимости этой системы определяем спектр собственных значений E_ν :

$$E_\nu^{(1, 2)} = \frac{1}{4} \{2A_1^2 + 2A_2^2 - 4(1 - 2h^2) J_{12}^2(\nu) \pm$$

$$\pm 2 \sqrt{(A_1 - A_2)^2 [(A_1 + A_2)^2 - 4(1 - 2h^2) J_{12}^2(\nu)] + 16h^4 A_1 A_2 J_{12}^2(\nu)}\}^{1/2}. \quad (17.8)$$

В данном случае имеем два положительных корня — две ветви в спектре элементарных возбуждений. Два других корня, отличающихся знаком минус перед всем выражением, являются лишними и потому отбрасываются¹⁾.

Операторная форма (16.3) принимает следующий вид:

$$\mathcal{H}_2 = \Delta \mathcal{E}_0 + \sum_\nu E_\nu^{(1)} N_\nu^{(1)} + \sum_\nu E_\nu^{(2)} N_\nu^{(2)}, \quad (17.9)$$

где $N_\nu^{(1)}$, $N_\nu^{(2)}$ — операторы чисел заполнения спиновых волн (или элементарных возбуждений) для первой и второй ветвей энергетического спектра.

Полагая $h = 0$, мы приходим к выражению (Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1949, в))

$$E_\nu^{(1, 2)} = \frac{1}{4} \{ \pm (A_1 - A_2) + \sqrt{(A_1 + A_2)^2 - 4J_{12}^2(\nu)} \}, \quad (17.10)$$

где A_1 , A_2 определяются по формулам (17.7).

Рассмотрим длинноволновые возбуждения ($\nu \rightarrow 0$). Приближенное выражение для E_ν получим, разлагая величины, входящие в (17.10) в ряд по степеням ν . Введем обозначения:

$$J_{11}(0) - J_{11}(\nu) = \alpha_{11}\nu^2 + \beta_{11}\nu^4 + \dots,$$

$$-J_{12}(0) + J_{12}(\nu) = \alpha_{12}\nu^2 + \beta_{12}\nu^4 + \dots, \quad (17.11)$$

¹⁾ См. замечание в конце § 13 относительно исключения решений $E_\nu < 0$.

где

$$\alpha_{11} = \frac{1}{6} \sum_{f'} |f - f'|^2 I(f - f'), \quad \alpha_{12} = -\frac{1}{6} \sum_g |f - g| I(f - g). \quad (17.12)$$

Подставляя (17.11) в (17.10), получаем следующее приближенное выражение для спектра длинноволновых элементарных возбуждений:

$$E_v^{(1,2)} = \omega v + O(v^2), \quad (17.13)$$

$$\omega = \frac{1}{2} \sqrt{|J_{12}(0)|(\alpha_{11} + \alpha_{22} + 2\alpha_{12})}. \quad (17.14)$$

Отсюда видим, что при $\hbar = 0$ энергия длинноволновых элементарных возбуждений изотропного антиферромагнетика линейно зависит от волнового вектора, тогда как у изотропного ферромагнетика соответствующая зависимость — квадратичная. При этом спектр двукратно вырожден.

Далее, при $\hbar = 0$ система уравнений (17.6) распадается на две независимые подсистемы для функций (u_1, v_2) и (u_2, v_1) соответственно. При этом, используя условия нормировки (13.4),

$$u_{1v}^2 - v_{2v}^2 = 1, \quad u_{2v}^2 - v_{1v}^2 = 1,$$

нетрудно найти явный вид функций (u, v) .

Рассмотрим решение $u_{1v} \neq 0$, $v_{2v} \neq 0$, $u_{2v} = v_{1v} = 0$. Несложными расчетами получаем:

$$u_{1v} = \frac{2E_v^{(1)} + A_2}{[(2E_v^{(1)} + A_2)^2 - J_{12}^2(v)]^{1/2}}, \quad (17.15)$$

$$v_{2v} = \frac{J_{12}(v)}{[(2E_v^{(1)} + A_2)^2 - J_{12}^2(v)]^{1/2}},$$

где $E_v^{(1)}$ — ветвь спектра (17.10) с двумя знаками плюс в правой части. Второе решение $u_{2v} \neq 0$, $v_{1v} \neq 0$, $u_{1v} = v_{2v} = 0$ получается из первого заменой индексов $1 \rightleftharpoons 2$ в (17.15) (при этом, очевидно, $E_v^{(1)}$ переходит в $E_v^{(2)}$).

Используя выражения (17.15) для v_{1v} , v_{2v} , выясним, насколько хорошо удовлетворяется условие применимости метода приближенного вторичного квантования

(14.4) для антиферромагнетиков. Принимая во внимание формулы (17.5), (17.15), запишем условие (14.4) в виде

$$D_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} \frac{J_{12}^2(\mathbf{v})}{(2E_{\mathbf{v}}^{(1)} + A_2)^2 - J_{12}^2(\mathbf{v})} \ll 1 \quad (17.16)$$

(еще одно условие получается заменой индексов $1 \rightleftharpoons 2$). Заметим прежде всего, что если пренебречь взаимодействием подрешеток и положить $J_{12}(\mathbf{v}) = 0$, то (17.16) удовлетворяются тождественно: $D_1 = 0$. Этот результат очевиден, поскольку получаем совокупность двух независимых ферромагнитных подрешеток. Далее, в силу непрерывности D_1 как функции J_{12} , $D_1 \ll 1$ при $|J_{12}| \ll |J_{11}|$. Несколько сложнее положение при $|J_{12}| \gtrsim |J_{11}|$.

Рассмотрим случай, когда имеется взаимодействие только между подрешетками. Тогда

$$J_{11} = J_{22} = 0, \quad A_1 = A_2 = |J_{12}(0)|, \quad E_{\mathbf{v}}^{(1,2)} = \frac{1}{2} \sqrt{J_{12}^2(0) - J_{12}^2(\mathbf{v})}$$

и выражение для $D_{1,2}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\gamma_{\mathbf{v}}^2}{(1 + \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2})^2 - \gamma_{\mathbf{v}}^2} = \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\gamma_{\mathbf{v}}^2}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2} (1 + \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2})}, \quad (17.17) \\ \gamma_{\mathbf{v}} &= \frac{J_{12}(\mathbf{v})}{J_{12}(0)} \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

Заменяя в знаменателе формулы (17.17) $\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2}$ на нуль и единицу ($0 \leq \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2} \leq 1$), получаем для D_i оценки сверху и снизу:

$$\frac{1}{4} \kappa < D_i < \frac{1}{2} \kappa \quad (i = 1, 2), \quad (17.18)$$

где κ — число, зависящее от геометрии решетки,

$$\kappa = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\gamma_{\mathbf{v}}^2}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{v}}^2}}. \quad (17.19)$$

В приближении ближайших соседей по порядку величины $\kappa \sim 1/2$, что в общем дает благоприятную оценку возможности применения метода приближенного вторичного квантования¹⁾. В этом случае

$$\frac{1}{4z} < D_i < \frac{1}{2z} \quad (i = 1, 2) \quad (17.20)$$

(z — число ближайших соседей).

Учет взаимодействия внутри каждой из подрешеток ведет к дополнительному упорядочению в спиновой системе. Поэтому при $J_{11}, J_{22} \neq 0$ критерий применимости метода должен выполняться лучше.

Рассмотрим далее случай эквивалентных подрешеток. Для них по определению

$$\begin{aligned} J_{11}(\nu) &= J_{22}(\nu), & A_1 &= A_2, \\ A_1 &= J_{11}(0) - J_{12}(0) - J_{11}(\nu). \end{aligned} \quad (17.21)$$

При этом выражение (17.8) для энергии элементарных возбуждений упрощается:

$$E_{\nu}^{(1,2)} = \frac{1}{2} \sqrt{A_1^2 - J_{12}^2(\nu) + 2h^2 J_{12}(\nu) [J_{12}(\nu) \pm A_1]}. \quad (17.22)$$

При $h = 0$ обе ветви сливаются и спектр становится двукратно вырожденным. Если при этом ограничиться случаем малых волновых векторов, то для обеих ветвей получим выражение вида (17.13) с тем несущественным отличием, что здесь $\alpha_{11} = \alpha_{22}$.

До сих пор изложение не ограничивалось какими-либо определенными типами решеток. Рассмотрим

¹⁾ Для объемноцентрированной кубической решетки Девис (1962) вычислил интегралы

$$B_1 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\nu \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\nu}^2}} - 1 \right\},$$

$$B_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\nu \sqrt{1 - \gamma_{\nu}^2},$$

$$B_1 = 0,118 \dots, \quad B_2 = 0,926 \dots$$

Отсюда* получаем $\kappa = 1 + B_1 - B_2 \cong 0,19$, к этому значению довольно близка оценка $\kappa \sim 1/z$.

теперь для определенности антиферромагнетик, у которого магнитно-активные атомы расположены в узлах простой кубической решетки. Поскольку в данном случае $I_{11}, I_{22} > 0$, $I_{12} < 0$, то при $H = 0$ спиновая конфигурация будет иметь вид, изображенный на рис. 7, а. Постоянная магнитной решетки равна удвоенной постоянной кристаллической решетки. Обозначим через b' ($r = 1, 2, 3$) вектор обратной магнитной решетки. Так как расстояние между ближайшими узлами спиновых подрешеток равно половине постоянной решетки, то

$$J_{12}(2\pi b - v) = -J_{12}(v), \quad J_{11}(2\pi b - v) = J_{11}(v).$$

Следовательно, корни (17.22) отличаются друг от друга сдвигом на $2\pi b$. Поэтому можно ограничиться исследованием одного из них, например $E_v^{(1)}$.

В случае $v \ll 2\pi b$, подставляя разложения (17.11) в (17.22), получаем приближенное выражение:

$$E_v^{(1)} \cong v\omega \sqrt{1 - h^2}, \quad (17.23)$$

где ω определяется выражением (17.14).

В случае $2\pi b - v \ll 2\pi b$, принимая во внимание, что $E_{2\pi b - v}^{(1)} = E_v^{(2)}$, получаем аналогичным путем:

$$E_{2\pi b - v}^{(1)} \cong \sqrt{h^2 J_{12}^2(0) + \omega^2 \left(1 + h^2 \frac{\alpha_{11} - 3\alpha_{12}}{\alpha_{11} + \alpha_{12}}\right) v^2}. \quad (17.24)$$

При $h \rightarrow 0$ формулы (17.23), (17.24) переходят в формулу (17.13).

Перейдем к вычислению намагниченности. Используя (8.35), мы можем записать выражение для намагниченности в виде

$$M = M_0 + M_\theta, \quad (17.25)$$

где M_0 — часть намагниченности, не зависящая от температуры и определяющаяся по формулам (16.13), а M_θ — часть, зависящая от температуры,

$$M_\theta = - \sum_v \frac{\partial E_v^{(1)}}{\partial H} \bar{N}_v^{(1)} - \sum_v \frac{\partial E_v^{(2)}}{\partial H} \bar{N}_v^{(2)}. \quad (17.26)$$

Перейдем здесь от сумм к интегралам (см. (П2.14)) и примем во внимание, что все рассмотренное ограничено

случае низких температур. Тогда интеграл по ν для первой ветви спектра ($E_\nu^{(1)}$) можно заменить двумя по интервалам около точек $\nu = 0$ и $\nu = 2\pi b$, используя для $E_\nu^{(1)}$ приближенные выражения (17.23) и (17.24) соответственно. Так как множитель $\bar{N}_\nu^{(1)}$ эффективно отличен от нуля только для достаточно малых ν (или $2\pi b - \nu$), область интегрирования можно распространить на все значения ν . Вторая ветвь спектра $E_\nu^{(2)}$ отличается от первой только сдвигом на $2\pi b$, и потому при расчетах можно ее учесть, удваивая результат для $E_\nu^{(1)}$. В результате несложных вычислений получаем:

$$M_0 = N \frac{v\mu}{\pi^2} \left(\frac{J_{12}(0)}{\omega} \right)^3 h\varphi(h, \tau), \quad (17.27)$$

где введены обозначения:

$$\left. \begin{aligned} \varphi(h, \tau) &= \int_0^\infty \frac{1}{r_1} \frac{x^4 dx}{e^{\frac{x}{\tau}} - 1} - \int_0^\infty \frac{1 + \gamma x^2}{r_2} \frac{x^2 dx}{e^{\frac{x}{\tau}} - 1}, \\ r_1 &= x \sqrt{1 - h^2}, \quad r_2 = \sqrt{h^2 + (1 + \gamma h^2)x^2}, \quad \gamma = \frac{\alpha_{11} - 3\alpha_{12}}{\alpha_{11} + \alpha_{12}}, \end{aligned} \right\} \quad (17.28)$$

$$\tau = \frac{\theta}{|J_{12}(0)|}, \quad h = \frac{H}{H_c}, \quad V = Nv, \quad x = \frac{\omega\nu}{|J_{12}(0)|}. \quad (17.29)$$

При $h = 0$ имеем:

$$\begin{aligned} \varphi(0, \tau) &= - \int_0^\infty \frac{x dx}{e^{\frac{x}{\tau}} - 1} + \\ &+ (1 - \gamma) \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^{\frac{x}{\tau}} - 1} \cong - \frac{\tau^2 \pi^2}{6} + O(\tau^4). \end{aligned} \quad (17.30)$$

Используя формулы (16.13), (17.27), (17.28), получаем выражение для поперечной намагниченности в предельном случае исчезающе малых полей:

$$M = M_0 \left\{ 1 - \frac{v}{6} \left(\frac{|J_{12}(0)|}{\omega} \right)^3 \tau^2 \right\} \quad (M_0 = N\mu h), \quad (17.31)$$

где h — внешнее поле в единицах H_c (16.12), τ — температура в безразмерных единицах (17.29), v — объем на один узел, w — величина (17.14), играющая роль скорости распространения длинноволновых колебаний.

Аналогичным способом получаем выражение для поперечной восприимчивости в исчезающе малых полях:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{N\mu^2}{|J_{12}(0)|} \left\{ 1 - \frac{v}{6} \left(\frac{|J_{12}(0)|}{w} \right)^3 \tau^2 \right\}. \quad (17.32)$$

Если учитывать взаимодействие только ближайших соседей, то

$$v = a^3, \quad w = \frac{a}{\sqrt{12}} |J_{12}(0)|, \quad \frac{v}{6w^3} |J_{12}(0)|^3 = \sqrt{48}$$

и для $E_v^{(1)}$, M , χ будем иметь следующие формулы:

$$E_v^{(1)} = v w \sqrt{1 - h^2},$$

$$M = N\mu h (1 - \sqrt{48} \tau^2), \quad \chi = \frac{N\mu^2}{|J_{12}(0)|} (1 - \sqrt{48} \tau^2). \quad (17.33)$$

При учете только ближайших соседей главный член для энергии элементарных возбуждений $E_v^{(1)}$ и формулы для намагниченности и восприимчивости (17.33) впервые были получены Хульеном (1936). В этой работе в квазиклассическом приближении была найдена равновесная конфигурация спинов и рассмотрены малые колебания спиновых векторов около нее, которые затем были проквантованы. Легко видеть, что эта процедура соответствует методу приближенного вторичного квантования.

2. *Сильные поля:* $h > 1$. Подставляя величины γ (16.11) в (5.10), найдем векторы A и затем по формулам (16.4) — коэффициенты квадратичной формы (16.3):

$$S(f_1, f_2) = -\frac{1}{2} I(f_1 - f_2),$$

$$S(g_1, g_2) = -\frac{1}{2} I(g_1 - g_2),$$

$$S(f, g) = \frac{1}{2} I(f - g),$$

$$R(f_1, f_2) = R(g_1, g_2) = R(f, g) = 0. \quad (17.34)$$

В результате для определения функций u, v получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} (2E_v + A_1) u_{1v} - J_{12}(v) u_{2v} &= 0, \\ -J_{21}(v) u_{1v} + (2E_v + A_2) u_{2v} &= 0, \\ v_{iv} &= 0 \quad (i = 1, 2), \end{aligned} \quad (17.35)$$

где

$$A_i = 4\lambda_i + J_{ii}(v) = -J_{ii}(0) + J_{ii}(v) - J_{12}(0) - 2\mu H. \quad (17.36)$$

Аналогичная система уравнений для функций v отличается от (17.35) знаком E_v . Мы имеем здесь два решения: $u \neq 0, v = 0$ и $u = 0, v \neq 0$. Второму решению отвечают отрицательные значения E_v и потому оно отбрасывается.

Спектр элементарных возбуждений определяется, как обычно, из условия разрешимости системы (17.35):

$$E_v^{(1,2)} = -\frac{1}{4}(A_1 + A_2) \pm \frac{1}{4} \sqrt{(A_1 - A_2)^2 + 4J_{12}^2(v)}. \quad (17.37)$$

Для эквивалентных подрешеток $A_1 = A_2, J_{11}(v) = J_{22}(v)$. Учитывая далее (17.36), (17.1), получаем:

$$\begin{aligned} E_v^{(1,2)} = \frac{1}{2} \{ J_{11}(0) - J_{11}(v) + 2(h-1) |J_{12}(0)| + \\ + |J_{12}(0)| \pm J_{12}(v) \}. \end{aligned} \quad (17.38)$$

Заметим, что, как и в предыдущем случае слабых полей, $E_v^{(2)} = E_{2\pi b-v}^{(1)}$. Поэтому дальше рассмотрим первую ветвь спектра элементарных возбуждений. Используя разложения (17.11), мы получаем:

$$E_v^{(1)} \cong \begin{cases} (h-1) |J_{12}(0)| + \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{12}) v^2, & v \ll 2\pi b, \\ h |J_{12}(0)| + \frac{1}{2}(\alpha_{11} - \alpha_{12})(2\pi b - v)^2, & |2\pi b - v| \ll 2\pi b. \end{cases} \quad (17.39)$$

Часть намагнитченности, не зависящая от температуры, определяется формулами (16.13), а часть, зависящая от температуры, — выражением вида (17.26), где для $E_v^{(1,2)}$ берутся выражения (17.38). Так как $E_v^{(2)} = E_{2\pi b-v}^{(1)}$, то вклады в намагнитченность от обеих ветвей спектра одинаковы. Перейдем, согласно (П2.14), от

сумм по ν к интегралам и возьмем для $E_\nu^{(1)}$ приближенные выражения, годные при $\nu \sim 0$ и $\nu \sim 2\pi b$. В безразмерных переменных получим следующее выражение для температурной части намагниченности:

$$M_0 = N\nu \frac{\mu}{\pi^2} \left(\frac{|J_{12}(0)|}{w} \right)^3 \psi(h, \tau), \quad (17.40)$$

где

$$\psi(h, \tau) = - \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{\frac{h-1+x^2}{\tau}} - 1} - \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{\frac{h+\alpha x^2}{\tau}} - 1}, \quad (17.41)$$

$$\alpha = \frac{\alpha_{11} - \alpha_{12}}{\alpha_{11} + \alpha_{12}},$$

где h , τ , w определяются формулами (17.29), (17.14), v — объем на один узел.

Так как в этом случае $h \geq 1$, то второе слагаемое в ψ можно опустить:

$$\psi(h, \tau) \cong - \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{\frac{h-1+x^2}{\tau}} - 1} = - \tau^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} Z_{3/2} \left(\frac{h-1}{\tau} \right). \quad (17.42)$$

Используя (17.25) и (16.13), (17.40), (17.42), получаем окончательные формулы для намагниченности и восприимчивости:

$$M = N\mu \left\{ 1 - \frac{v}{4\pi^{3/2}} \left(\frac{|J_{12}(0)|}{w} \right)^3 \tau^{3/2} Z_{3/2} \left(\frac{h-1}{\tau} \right) \right\},$$

$$\chi = N \frac{\mu^2 v}{4\pi^{3/2} |J_{12}(0)|} \left(\frac{|J_{12}(0)|}{w} \right)^3 \tau^{1/2} Z_{1/2} \left(\frac{h-1}{\tau} \right), \quad (17.43)$$

где Z_p определяется согласно (15.17).

Заметим, что в области $h \sim 1$ метод спиновых волн в том виде, как он здесь использован, дает некорректные результаты для температурных вкладов в намагниченность и восприимчивость. Это связано с тем, что определение критического поля из условия минимума энергии основного состояния недостаточно точно. Определение его из условия минимума свободной энергии позволяет получить корректные результаты и в этом интервале полей. Подробно этот вопрос рассмотрен Е. А. Туровым и Ю. П. Ирхиным (1958).

§ 18. Спировые волны в спиральных структурах¹⁾

Перейдем к исследованию элементарных возбуждений в веществах со спиральными структурами. Мы ограничимся здесь рассмотрением случаев простой и ферромагнитной спирали [см. рис. 6, в, г (стр. 29)]; внешнее поле, чтобы упростить вычисления, будем считать равным нулю.

Принято считать, что в таких веществах магнитнокристаллографическая анизотропия частично является одноионной. Поэтому укажем сначала на изменения, которые в этом случае надо внести в стандартную схему метода ПВК, изложенную в § 12. Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_U + \mathcal{H}_A, \quad (18.1)$$

где \mathcal{H}_U — гамильтониан, зависящий от произведения спиновых операторов для разных узлов, \mathcal{H}_A — гамильтониан одноионной анизотропии,

$$\mathcal{H}_A = - \sum \frac{I_{na}(f)}{n!} (S_f^a)^n. \quad (18.2)$$

Выделим в \mathcal{H} члены, которые приближенно описывали бы слабо возбужденные состояния системы. Согласно (12.13), они имеют вид

$$\mathcal{H} \cong \mathcal{E}_0 - \sum 2\lambda_f (S_f - S_f^z) + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \tau_{f_1}^{a_1} \tau_{f_2}^{a_2}, \quad (18.3)$$

где \mathcal{E}_0 — классическая форма, получающаяся из операторной формы \mathcal{H} заменой операторов S_f^a на классические векторы $\gamma_f^a S_f$ (γ_f^a — компоненты направляющего вектора оси квантования f -го спина) при переходе к собственному представлению для спиновых операторов (5.8). Величины λ_f , γ_f^a определяются из уравнений (12.6), τ_f^a — формулами (12.14). Запишем форму \mathcal{E}_0 в виде суммы двух слагаемых, одно из которых соответ-

¹⁾ См. Каплан (1961), Купер и др. (1962), В. Г. Барьяхтар и др. (1964, а).

ствует операторной форме \mathcal{H}_U (18.1), а другое — \mathcal{H}_A (18.1):

$$\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_U + \mathcal{E}_A = \mathcal{E}_U - \sum \frac{I_{na}(f)}{n!} (S_f \gamma_f^a)^n. \quad (18.4)$$

Подставляя (18.4) в (18.3), получим:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \mathcal{E}_0 - \sum 2\lambda_f (S_f - S_f^z) + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_U}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \tau_{f_1}^{a_1} \tau_{f_2}^{a_2} - \\ - \sum \frac{I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} (\tau_f^a)^2. \end{aligned} \quad (18.5)$$

В третьем слагаемом этого выражения узлы f_1 и f_2 не совпадают, и его можно записать в обычном виде:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_U}{\partial \gamma_{f_1}^{a_1} \partial \gamma_{f_2}^{a_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \{ A_{f_1}^{a_1} A_{f_2}^{a_2} S_{f_1}^+ S_{f_2}^+ + 2 A_{f_1}^{a_1} A_{f_2}^{a_2} S_{f_1}^- S_{f_2}^+ + \\ + A_{f_1}^{a_1} A_{f_2}^{a_2} S_{f_1}^- S_{f_2}^- \}. \end{aligned} \quad (18.6)$$

Четвертое слагаемое в (18.5) при учете перестановочных соотношений для спиновых операторов запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} - \sum \frac{I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} \{ 2 S_f |A_f^a|^2 + \\ + 2 (S_f + S_f^z) (S_f - S_f^z) |A_f^a|^2 + (A_f^a)^2 (S_f^+)^2 + (A_f^{*a})^2 (S_f^-)^2 \}. \end{aligned}$$

Замечая, что в данном приближении

$$(S_f + S_f^z)(S_f - S_f^z) \cong 2 S_f (S_f - S_f^z)$$

и что, согласно (5.9),

$$|A_f^a|^2 = \frac{1}{4} [1 - (\gamma_f^a)^2],$$

получаем далее

$$\begin{aligned} - \sum \frac{S_f I_{na}(f)}{4(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} [1 - (\gamma_f^a)^2] - \\ - \sum \frac{S_f I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} [1 - (\gamma_f^a)^2] (S_f - S_f^z) - \\ - \sum \frac{I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} \{ (A_f^a)^2 (S_f^+)^2 + (A_f^{*a})^2 (S_f^-)^2 \}. \end{aligned} \quad (18.7)$$

Подставляя (18.6), (18.7) в (18.5) и группируя члены при одинаковых степенях операторов, будем иметь:

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \delta\mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2, \quad (18.8)$$

где

$$\delta\mathcal{E}_0 = - \sum \frac{S_f I_{na}(f)}{4(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} [1 - (\gamma_f^a)^2], \quad (18.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = & - \sum_f \left\{ 2\lambda_f + \frac{S_f I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} [1 - (\gamma_f^a)^2] \right\} (S_f - S_f^z) + \\ & + \frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_U}{\partial \gamma_{f_1}^{\alpha_1} \partial \gamma_{f_2}^{\alpha_2}} S_{f_1}^{-1} S_{f_2}^{-1} \{ A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} S_{f_1}^+ S_{f_2}^+ + \\ & + 2A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} S_{f_1}^- S_{f_2}^+ + A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} S_{f_1}^- S_{f_2}^- \} - \\ & - \sum \frac{I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f \gamma_f^a)^{n-2} \{ (A_f^a)^2 (S_f^+)^2 + (A_f^a)^2 (S_f^-)^2 \} \end{aligned} \quad (18.10)$$

и где λ_f , γ_f^a определяются из системы уравнений:

$$\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial \gamma_f^a} - 2S_f \lambda_f \gamma_f^a = 0, \quad (18.11)$$

$$\sum_a (\gamma_f^a)^2 = 1.$$

Вообще говоря, величины λ_f , γ_f^a следовало бы определять из условия минимума $\mathcal{E}_0 + \delta\mathcal{E}_0$. Мы примем, что $S^{-1} \ll 1$ (S — величина спина в узле). Но тогда по порядку величины $\delta\mathcal{E}_0/\mathcal{E}_0 \sim S^{-1}$. Рассматривая далее $\delta\mathcal{E}_0$ как малую величину порядка S^{-1} , получим выражение для энергии основного состояния с точностью до величин порядка S^{-1} включительно при использовании условий минимума только для \mathcal{E} . Первые поправки в коэффициентах квадратичной формы \mathcal{H}_2 будут порядка S^{-1} . Мы их не будем учитывать, поскольку не будем учитывать и поправок порядка S^{-1} и выше, появляющихся при замене, в соответствии с методом ПВК, спиновых операторов бозевскими (ср. (12.19) и (5.22)).

В бозе-операторах (12.19) квадратичная форма (18.10) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = & - \sum \left\{ 2\lambda_f + \frac{S_f I_{na}(f)}{2(n-2)!} (S_f v_f^\alpha)^{n-2} [1 - (v_f^\alpha)^2] \right\} n_f + \\ & + \sum \frac{\partial^2 \mathcal{E}_U}{\partial v_{f_1}^{\alpha_1} \partial v_{f_2}^{\alpha_2}} (S_{f_1} S_{f_2})^{-1/2} \{ A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} b_{f_1}^- b_{f_2}^+ + \\ & + 2 A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ + A_{f_1}^{\alpha_1} A_{f_2}^{\alpha_2} b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ \} - \\ & - \sum \frac{S_f I_{na}(f)}{(n-2)!} (S_f v_f^\alpha)^{n-2} \{ (A_f^\alpha)^2 b_f^2 + (A_f^{\alpha*})^2 b_f^{+2} \}. \quad (18.12) \end{aligned}$$

Перейдем теперь к исследованию двух простейших примеров спиральных структур.

Простая спираль. Рассмотрим спиновую систему, которая описывается гамильтонианом вида (Купер и Эллиотт (1963))

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum I(f_1 - f_2) (S_{f_1}, S_{f_2}) + \frac{K_2}{2} \sum (S_f^z)^2. \quad (18.13)$$

Очевидно, что ось z является осью симметрии магнитной решетки. Сопоставим операторной форме (18.13) классическую форму:

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} \sum S^2 I(f_1 - f_2) (v_{f_1}, v_{f_2}) + \frac{1}{2} S^2 K_2 \sum (v_f^z)^2. \quad (18.14)$$

Будем считать узлы магнитной решетки эквивалентными. Тогда условия (18.11) минимума формы (18.14) запишутся в виде

$$\begin{aligned} - \sum SI(f - f') v_f^z + SK_2 v_f^z - 2\lambda v_f^z &= 0, \\ - \sum SI(f - f') v_f^\pm - 2\lambda v_f^\pm &= 0, \end{aligned} \quad (18.15)$$

где введены обозначения:

$$v_f^\pm = v_f^x \pm i v_f^y, \quad S = S_f. \quad (18.16)$$

Ищем такое решение, чтобы спины каждой базисной плоскости были ориентированы параллельно (ферромагнитное упорядочение) и лежали в ней, а их направление

менялось бы при переходе от одной базисной плоскости к другой. В соответствии с этим положим:

$$\gamma_f^z = \gamma_z = \text{const}, \quad \gamma_f^\pm = \rho e^{\pm i(q \cdot f)} \quad (\rho = \sqrt{1 - (\gamma_z)^2}), \quad (18.17)$$

где q — вектор, параллельный оси z . Уравнения (18.15) при этом принимают вид

$$\begin{aligned} (-2\lambda - SJ(0) + SK_2) \gamma_z &= 0, \\ (-2\lambda - SJ(q)) \rho &= 0. \end{aligned}$$

Из трех возможных решений

$$\begin{aligned} \text{I } \rho &= 1, \quad \gamma_z = 0, & -2\lambda &= SJ(q), \\ \text{II } \rho &= 0, \quad \gamma_z = 1, & -2\lambda &= SJ(0) - SK_2, \\ \text{III } \rho &\neq 0, \quad \gamma_z \neq 0, & -2\lambda &= SJ(q) - SJ(0) - SK_2 \end{aligned} \quad (18.18)$$

выбираем первое. Ему соответствует энергия основного состояния

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} S^2 J(q). \quad (18.19)$$

Два других решения отбрасываем, считая, что им соответствуют большие значения энергии основного состояния \mathcal{E}_0 (второе решение соответствует чисто ферромагнитному упорядочению с ориентацией спинов параллельно оси симметрии; третье решение возможно при некотором фиксированном значении q и ему, вообще говоря, не обязательно соответствует минимум энергии). Решение I (18.18) описывает конфигурацию типа простой спирали (см. рис. 6, в), если функция

$$J(q) = \sum I(f) e^{i(f \cdot q)}$$

имеет максимум при некотором $q \neq 0$. Угол, на который поворачиваются спины при переходе от данной базисной плоскости к соседней, равен qa , где a — расстояние между соседними плоскостями. Для существования спирали необходимо, чтобы в \mathcal{H} имелись взаимодействия первых и следующих соседей.

Например, если имеется взаимодействие только между первыми и вторыми соседями, то

$$J(q) = I_1 \cos(qa) + I_2 \cos(2qa).$$

В зависимости от величин и знаков обменных интегралов I_1, I_2 возможны следующие конфигурации, при которых \mathcal{E}_0 минимальна:

- $I_1 > 0, I_2 > 0$: ферромагнитное упорядочение ($\cos(qa) = 1$);
 $I_1 < 0, I_2 > 0$: антиферромагнитное упорядочение ($\cos(qa) = -1$);
 $I_1 > 0, I_2 < 0$: при $|I_1/4I_2| < 1$ — простая спираль ($\cos(qa) = I_1/4I_2$),
 при $|I_1/4I_2| > 1$ — ферромагнитное упорядочение;
 $I_1 < 0, I_2 < 0$: при $|I_1/4I_2| < 1$ — простая спираль ($\cos(qa) = -I_1/4I_2$),
 при $|I_1/4I_2| > 1$ — антиферромагнитное упорядочение ($\cos(qa) = -1$).

Перейдем к определению спектра элементарных возбуждений.

Для оператора (18.13) квадратичная форма (18.12) имеет вид

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_2 = \sum_f \left\{ -2\lambda + \frac{1}{2} SK_2 \rho^2 \right\} n_f - \\
 - \sum SI(f_1 - f_2) \{ (A_{f_1}, A_{f_2}) b_{f_1} b_{f_2} + \\
 + 2(A_{f_1}^*, A_{f_2}) b_{f_1}^+ b_{f_2} + (A_{f_1}^*, A_{f_2}^*) b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ \} + \\
 + \sum SK_2 \{ (A_f^z)^2 b_f^2 + (A_f^{*z})^2 b_f^{+2} \}. \quad (18.20)
 \end{aligned}$$

Векторы A_f определяются через векторы γ_f по формулам (5.10). Согласно (18.15), для случая решения I [см. (18.18)]

$$\gamma_z = 0, \quad \gamma_f^x = \cos(q, f), \quad \gamma_f^y = \sin(q, f),$$

и формулы (5.10) принимают вид

$$\begin{aligned}
 A_f^x = \frac{1}{4} (e^{-i(f, q)} - e^{i(f, q)}), \quad A_f^y = \frac{i}{4} (e^{-i(f, q)} + e^{i(f, q)}), \\
 A_f^z = \frac{1}{2} \left(\varphi_f = (f, q) = \arctg \frac{\gamma_f^y}{\gamma_f^x} \right). \quad (18.21)
 \end{aligned}$$

Используя эти выражения, легко находим:

$$\begin{aligned} (A_{f_1}, A_{f_2}) &= \frac{1}{4} \left(1 - \frac{e^{i(q, f_1 - f_2)} + e^{-i(q, f_1 - f_2)}}{2} \right), \\ (A_{f_1}^*, A_{f_2}) &= \frac{1}{4} \left(1 + \frac{e^{i(q, f_1 - f_2)} + e^{-i(q, f_1 - f_2)}}{2} \right), \quad (A_f^z)^2 = \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (18.22)$$

Наконец, подставляя λ_f (18.18) и (18.22) в (18.20), получаем:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2} \sum R_{ff'} b_f^* b_{f'} + \sum S_{ff'} b_f^+ b_{f'} + \frac{1}{2} \sum R_{ff'} b_f^+ b_{f'}^+, \quad (18.23)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} S_{ff'} &= \left\{ SJ(q) + \frac{1}{2} SK_2 \right\} \delta_{ff'} - \\ &\quad - \frac{S}{2} I(f - f') \left\{ 1 + \frac{e^{i(q, f - f')} + e^{-i(q, f - f')}}{2} \right\}, \\ R_{ff'} &= \frac{1}{2} SK_2 \delta_{ff'} - \\ &\quad - \frac{S}{2} I(f - f') \left\{ 1 - \frac{e^{i(q, f - f')} + e^{-i(q, f - f')}}{2} \right\}, \\ R_{ff'}^* &= R_{ff'}. \end{aligned} \quad (18.24)$$

Квадратичная форма (18.23) приводится к диагональному виду:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 &= \Delta \mathcal{E}_0 + \sum E_v \xi_v^+ \xi_v, \\ \Delta \mathcal{E}_0 &= - \sum E_v |v_{fv}|^2 \end{aligned} \quad (18.25)$$

с помощью (13.6). Коэффициенты преобразования (u_{fv} , v_{fv}) определяются из решения системы уравнений (13.3)

$$\begin{aligned} E_v u_{fv} &= \sum_{f'} S_{ff'} u_{f'v} + \sum R_{ff'} v_{f'v}, \\ -E_v v_{fv} &= \sum_{f'} S_{ff'} v_{f'v} + \sum R_{ff'} u_{f'v}. \end{aligned} \quad (18.26)$$

Ищем решение системы (18.26) в виде

$$u_{fv} = \frac{u_v}{\sqrt{N}} e^{-i(f, v)}, \quad v_{fv} = \frac{v_v}{\sqrt{N}} e^{-i(f, v)}. \quad (18.27)$$

Подставляя (18.27) в (18.26), будем иметь:

$$\begin{aligned} \{E_v - S(v)\} u_v - R(v) v_v &= 0, \\ -R(v) u_v + \{-E_v - S(v)\} v_v &= 0, \end{aligned} \quad (18.28)$$

где

$$S(v) = \sum_{f'} S_{ff'} e^{i(v, f-f')}, \quad R(v) = \sum_{f'} R_{ff'} e^{i(v, f-f')}. \quad (18.29)$$

Из условия разрешимости системы (18.28) находим спектр элементарных возбуждений:

$$\begin{aligned} E_v &= \sqrt{S^2(v) - R^2(v)} = \\ &= \{SJ(q) + SK_2 - SJ(v)\}^{1/2} \left\{ SJ(q) - \frac{SJ(q+v) + SJ(q-v)}{2} \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (18.30)$$

Для малых значений волнового вектора ($v \rightarrow 0$) подкоренные выражения можно разложить в ряд по степеням v . Принимая во внимание, что $J(v)$ достигает максимального значения при $v = q$, положим:

$$J(q \pm v) \cong J(q) - \beta v^2, \quad \beta > 0. \quad (18.31)$$

Подставляя (18.31) в (18.30), получаем:

$$\begin{aligned} E_v &\cong \omega v, \\ \omega &= S \sqrt{\beta \{J(q) + K_2 - J(0)\}}. \end{aligned} \quad (18.32)$$

Наконец, используя уравнения (18.28) и условие нормировки для функций (u, v) , которое в данном случае имеет вид

$$u_v^2 - v_v^2 = 1,$$

и принимая во внимание, что величины $S(v)$, $R(v)$ (18.29) вещественны, нетрудно показать, что

$$u_v^2 = \frac{S(v) + E_v}{2E_v}, \quad v_v^2 = \frac{S(v) - E_v}{2E_v}, \quad u_v v_v = \frac{R(v)}{2E_v}. \quad (18.33)$$

Таким образом, мы получили полное решение задачи о спектре спиновых волн для простой спирали.

Ферромагнитная спираль. Вещества со спиральной структурой типа редких земель имеют плотную гексагональную упаковку. Вместо реальной решетки мы будем рассматривать простейшую решетку, что существен-

но упрощает задачу в отношении вычислений. При этом теряются оптические ветви спектра; но, поскольку мы вообще ограничиваемся рассмотрением слабо возбужденных состояний, это обстоятельство здесь не имеет существенного значения. Далее потребуем, чтобы гамильтониан системы обладал должной симметрией и мог обеспечить появление спинового упорядочения типа ферромагнитной спирали (см. рис. 6, z). Выберем гексагональную ось за ось z . Тогда гамильтониан системы можно записать в виде (Каплан (1961), Купер и др. (1962))

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum I(f_1 - f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}) - \frac{1}{2} \sum I_a(f_1 - f_2) S_{f_1}^z S_{f_2}^z + \\ + \sum \frac{K_4}{4!} (S_f^z)^4 + \sum \frac{K_6}{6!} (S_f^z)^6. \quad (18.34)$$

Последнее слагаемое в гамильтониане учитывает анизотропию в базисной плоскости. Для сокращения расчетов мы будем пренебрегать ею, считая $K_6 = 0$.

Классическая форма \mathcal{E}_0 , соответствующая операторной форме (18.34), имеет вид

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} \sum S^2 I(f_1 - f_2)(\gamma_{f_1}, \gamma_{f_2}) - \\ - \frac{1}{2} \sum S^2 I_a(f_1 - f_2) \gamma_{f_1}^z \gamma_{f_2}^z + \frac{1}{4!} S^4 K_4 \sum (\gamma_f^z)^4. \quad (18.35)$$

Условия минимума (18.11) формы (18.35) запишем следующим образом:

$$-\sum_f SI(f - f') \gamma_{f'}^z - \sum_f SI_a(f - f') \gamma_{f'}^z + \\ + \frac{1}{3!} S^3 K_4 (\gamma_f^z)^3 - 2\lambda_f \gamma_f^z = 0, \quad (18.36) \\ -\sum_f SI(f - f') \gamma_{f'}^\pm - 2\lambda_f \gamma_f^\pm = 0,$$

где

$$\gamma_f^\pm = \gamma_f^x \pm i\gamma_f^y, \quad (\gamma_f^z)^2 + \gamma_f^- \gamma_f^+ = 1. \quad (18.37)$$

Будем искать решение системы (18.36) в виде

$$\gamma_f^\pm = \rho e^{\pm i(q, f)}, \quad \gamma_f^z = \gamma_z = \text{const} \quad (\rho = \sqrt{1 - (\gamma_z)^2}); \quad (18.38)$$

для него параметр λ_f не зависит от номера узла:

$$-2\lambda = SJ(q) - SJ(0) + SJ_a(0) - \frac{1}{3!} S^3 K_4 \gamma_z^2. \quad (18.39)$$

Очевидно, что это решение соответствует упорядочению спинов типа ферромагнитной спирали.

Еще два решения системы (18.36),

$$\gamma_z = 0, \quad \rho = 1, \quad -2\lambda = SJ(q)$$

и

$$\gamma_z = 1, \quad \rho = 0, \quad -2\lambda = SJ(0) + SJ_a(0) - \frac{1}{3!} S^3 K_4,$$

соответствуют упорядочениям типа простой спирали и ферромагнитному. Далее будем считать, что \mathcal{E}_0 принимает наименьшее значение для решения (18.38).

Подставляя (18.38) в (18.35), легко убедиться, что минимум \mathcal{E}_0 достигается при условии

$$J(q) = \max. \quad (18.40)$$

Если максимум $J(q)$ достигается при $q \neq 0$, то устойчивой будет спиральная конфигурация спинов; если при $q = 0$, то устойчивой будет ферромагнитная конфигурация. Шаг спирали d определяется из условия $\gamma_{f+d}^\pm = \gamma_f^\pm$ и равен, очевидно, $2\pi/q$.

Перейдем к определению спектра элементарных возбуждений в системе. Квадратичная форма (18.12) для оператора (18.34) имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = & \sum \left\{ -2\lambda + \frac{1}{4} S K_4 (S \gamma_z)^2 \rho^2 \right\} n_f - \\ & - \frac{1}{2} \sum \left\{ 2SI(f_1 - f_2)(A_{f_1}, A_{f_2}) + \frac{1}{2} \rho^2 SI_a(f_1 - f_2) \right\} b_{f_1} b_{f_2} - \\ & - \sum \left\{ 2SI(f_1 - f_2)(A_{f_1}^*, A_{f_2}) + \frac{1}{2} \rho^2 SI_a(f_1 - f_2) \right\} b_{f_1}^+ b_{f_2} - \\ & - \frac{1}{2} \sum \left\{ 2SI(f_1 - f_2)(A_{f_1}^*, A_{f_2}^*) + \frac{1}{2} \rho^2 SI_a(f_1 - f_2) \right\} b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ + \\ & + \frac{1}{2} \sum \frac{S K_4}{4} (S \gamma_z)^2 \rho^2 \{ b_f^2 + b_f^{+2} \}. \quad (18.41) \end{aligned}$$

Скалярные произведения (A_{f_1}, A_{f_2}) , $(A_{f_1}^*, A_{f_2})$ в (18.41) при учете формул (5.10) легко вычисляются. Принимая во внимание, согласно (5.10) и (18.37), (18.38), что

$$\varphi_f = (q, f) = \arctg \frac{\gamma_f^y}{\gamma_f^x}, \quad (18.42)$$

получаем

$$(A_{f_1}, A_{f_2}) = \frac{\rho^2}{4} [1 - \cos(q, f_1 - f_2)], \quad (18.43)$$

$$(A_{f_1}^*, A_{f_2}) = \frac{\rho^2}{4} [1 - \cos(q, f_1 - f_2)] + \\ + \frac{1}{2} [\cos(q, f_1 - f_2) - i\gamma_z \sin(q, f_1 - f_2)].$$

Подставляя (18.39), (18.43) в (18.41) и вводя стандартные обозначения, будем иметь:

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2} \sum R_{f_1 f_2} b_{f_1} b_{f_2} + \sum S_{f_1 f_2} b_{f_1}^+ b_{f_2} + \frac{1}{2} \sum R_{f_1 f_2} b_{f_1}^+ b_{f_2}^+, \quad (18.44)$$

где

$$R_{f_1 f_2} = \frac{1}{4} SK_4 (S\gamma_z)^2 \rho^2 \delta_{f_1, f_2} - \\ - \frac{1}{2} \rho^2 S \{I(f_1 - f_2) [1 - \cos(q, f_1 - f_2)] + I_a(f_1 - f_2)\}, \\ S_{f_1 f_2} = \left\{ SJ(q) + \frac{1}{4} SK_4 (S\gamma_z)^2 \rho^2 \right\} \delta_{f_1, f_2} - \\ - \frac{1}{2} \rho^2 S \{I(f_1 - f_2) [1 - \cos(q, f_1 - f_2)] + I_a(f_1 - f_2)\} - \\ - SI(f_1 - f_2) [\cos(q, f_1 - f_2) - i\gamma_z \sin(q, f_1 - f_2)]. \quad (18.45)$$

Квадратичная форма (18.44) приводится к диагональному виду (13.7), (13.8)

$$\mathcal{H}_2 = \Delta \mathcal{E}_0 + \sum E_\nu \xi_\nu^+ \xi_\nu, \quad (18.46) \\ \Delta \mathcal{E}_0 = - \sum E_\nu |v_{f\nu}|^2,$$

каноническим преобразованием переменных (13.6):

$$b_f = \sum (u_{f\nu} \xi_\nu + v_{f\nu} \xi_\nu^+),$$

где ξ^+ , ξ — новые бозе-операторы, E_v и u_{fv} , v_{fv} — собственные значения и собственные векторы системы уравнений:

$$\begin{aligned} E_v u_{fv} &= \sum_{f'} S_{ff'} u_{f'v} + \sum_{f'} R_{ff'} v_{f'v}, \\ -E_v v_{fv} &= \sum_{f'} S_{ff'}^* v_{f'v} + \sum_{f'} R_{ff'}^* u_{f'v}. \end{aligned}$$

Так как величины $S_{ff'}$, $R_{ff'}$ зависят только от разностей координат узлов, то решение будем искать в виде

$$u_{fv} = \frac{u_v}{\sqrt{N}} e^{-i(f, v)}, \quad v_{fv} = \frac{v_v}{\sqrt{N}} e^{-i(f, v)}. \quad (18.47)$$

Для определения u_v , v_v получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} [E_v - S(v)] u_v - R(v) v_v &= 0, \\ -R(-v) u_v - [E_v + S(-v)] v_v &= 0, \end{aligned} \quad (18.48)$$

где

$$S(v) = \sum_{f'} S_{f-f'} e^{i(v, f-f')}, \quad R(v) = \sum_{f'} R_{f-f'} e^{i(v, f-f')}. \quad (18.49)$$

Условия нормировки (13.4) для функций u_v , v_v имеют вид

$$|u_v|^2 - |v_v|^2 = 1. \quad (18.50)$$

Из (18.48), (18.50) без труда находим:

$$E_v = \frac{1}{2} \{S(v) - S(-v) \pm \sqrt{[S(v) + S(-v)]^2 - 4R(v)R(-v)}\}, \quad (18.51)$$

$$\begin{aligned} |u_v|^2 &= \frac{[E_v + S(-v)]^2}{[E_v + S(-v)]^2 - R(v)R(-v)} = \\ &= \frac{S(v) + S(-v) + \sqrt{[S(v) + S(-v)]^2 - 4R(v)R(-v)}}{2\sqrt{[S(v) + S(-v)]^2 - 4R(v)R(-v)}}, \\ -|v_v|^2 &= 1 - |u_v|^2, \end{aligned} \quad (18.52)$$

$$|u_v v_v| = \frac{|R(v)|}{\sqrt{[S(v) + S(-v)]^2 - 4R(v)R(-v)}}.$$

где, согласно (18.45), (18.49),

$$R(v) = \frac{1}{4} SK_4 (S\gamma_z)^2 \rho^2 - \frac{1}{2} \rho^2 S \left[J(v) + J_a(v) - \frac{J(v+q) + J(v-q)}{2} \right], \quad (18.53)$$

$$S(v) = SJ(q) + \frac{1}{4} SK_4 (S\gamma_z)^2 \rho^2 - \frac{1}{2} \rho^2 S \left[J(v) + J_a(v) - \frac{J(v+q) + J(v-q)}{2} \right] - S \left[\frac{J(v+q) + J(v-q)}{2} - \gamma_z \frac{J(v+q) - J(v-q)}{2} \right].$$

Подставляя (18.53) в (18.51), получаем окончательное выражение для спектра элементарных возбуждений спиновой системы с упорядочением спинов типа ферромагнитной спирали:

$$E_v = \frac{1}{2} S\gamma_z [J(q+v) - J(q-v)] \pm \left\{ SJ(q) + 2R(v) - S \frac{J(q+v) + J(q-v)}{2} \right\}^{1/2} \times \times \left\{ SJ(q) - S \frac{J(q+v) + J(q-v)}{2} \right\}^{1/2}. \quad (18.54)$$

Приближенное выражение для спектра получим, раскладывая величины в правой части (18.54) в ряд по степеням v с точностью до членов порядка v^2 включительно. Принимая во внимание, что $J(v)$ имеет максимум при $v = q$, получим:

$$E_v \cong \omega v, \\ \omega = S^2 \gamma_z \rho \sqrt{\frac{1}{3} \beta K_4} \quad (\rho = \sqrt{1 - \gamma_z^2}), \quad (18.55)$$

где β определяется согласно (18.31). Укажем в связи с замечаниями в § 13 о выборе знака E_v , что в формулах (18.51), (18.54) перед корнем следует брать знак плюс.

Нетрудно видеть, что изложенный метод расчета может быть применен как для расчета элементарных возбуждений при других типах упорядочения спинов, так и для учета влияния внешнего магнитного поля.

§ 19. Ферромагнитный резонанс и другие приложения метода ПВК

Элементарная теория ферромагнитного резонанса¹⁾. Явление ферромагнитного резонанса состоит в том, что при определенных условиях с помощью переменного магнитного поля в веществе возбуждаются нормальные колебания спиновой системы (спиновые волны). Этот процесс сопровождается, очевидно, поглощением энергии переменного поля спиновой системой. Так как обычно возбуждаются только некоторые из нормальных колебаний, то поглощение имеет более или менее резко выраженный максимум при частоте переменного поля, равной энергии возбуждаемых колебаний²⁾. Эту частоту называют резонансной частотой.

Так как между нормальными колебаниями имеется взаимодействие, то далее энергия колебаний, возбужденных полем, перераспределяется между всеми остальными колебаниями. Как следствие этого резонансные максимумы оказываются в той или иной мере размытыми.

При ферромагнитном резонансе образец помещают в скрещенное постоянное (H) и переменное ($h(t)$) магнитные поля. Классическим аналогом возбуждения спиновых волн является возбуждение вынужденной прецессии спинов вокруг направления постоянного (подмагничивающего) поля. При этом резонанс наблюдается, когда частота внешнего поля совпадает с частотой свободной прецессии. Нетрудно заметить, что если образец изотропен, то резонанс возможен, если подмагничивающее поле $H \neq 0$. Если образец анизотропен, то возможен резонанс и при $H = 0$. В последнем случае имеет место так называемый естественный ферромагнитный резонанс; при этом роль подмагничивающего поля играет поле магнитно-кристаллографической анизотропии. Здесь мы рассмотрим вопрос о том, какие типы колебаний могут быть возбуждены в спиновых

¹⁾ Более общий подход см. в §§ 31, 38 и 39.

²⁾ Напомним, что мы используем систему единиц, в которой $\hbar = 1$ и, следовательно, частота и энергия имеют одинаковую размерность.

системах. Переменное поле будем считать однородным на протяжении образца.

Запишем оператор энергии взаимодействия спиновой системы с переменным полем в виде

$$\mathcal{V}(t) = - \sum_f \mu_f (S_f, h(t)). \quad (19.1)$$

В соответствии с общей процедурой метода ПВК мы должны по формулам (5.8) перейти к новым спиновым операторам:

$$\mathcal{V}(t) = - \sum_f \mu_f (\gamma_f, h(t)) S_f^z - \\ - \sum_f \mu_f \{ (A_f, h(t)) S_f^+ + (A_f^*, h(t)) S_f^- \}, \quad (19.2)$$

а затем по формулам (12.19) — от спиновых операторов к бозе-операторам. В результате будем иметь:

$$\mathcal{V}(t) = - \sum_f \mu_f S_f (\gamma_f, h(t)) + \sum_f \mu_f (\gamma_f, h(t)) n_f - \\ - \sum_f \mu_f \sqrt{2S_f} \{ (A_f, h(t)) b_f + (A_f^*, h(t)) b_f^+ \}. \quad (19.3)$$

Перейдем по формулам (13.6) от переменных b_f^+ , b_f к переменным ξ_v^+ , ξ_v , в которых главная часть гамильтониана (квадратичная форма) диагональна. В результате получим выражение для $\mathcal{V}(t)$ в нормальных координатах:

$$\mathcal{V}(t) = - \sum_f \mu_f (\gamma_f, h(t)) \left(S_f - \sum_v |v_{fv}|^2 \right) + \\ + \sum_f \mu_f (\gamma_f, h(t)) \{ (u_{fv_1}^* u_{fv_2} + v_{fv_1}^* v_{fv_2}) \xi_{v_1}^+ \xi_{v_2} + \\ + v_{fv_1} u_{fv_2} \xi_{v_1} \xi_{v_2}^+ + u_{fv_1}^* v_{fv_2}^* \xi_{v_1}^+ \xi_{v_2}^+ \} - \\ - \sum_f \mu_f \sqrt{2S_f} \{ (A_f, h(t)) + (A_f^*, h(t)) \} \times \\ \times \{ (u_{fv} + v_{fv}) \xi_v + (u_{fv}^* + v_{fv}^*) \xi_v^+ \}. \quad (19.4)$$

Очевидно, что переменное поле $h(t)$ в первую очередь может возбуждать в системе нормальные колебания с такими v , которые присутствуют в $\mathcal{V}(t)$,

Первая сумма в (19.4) описывает изменение энергии основного состояния. Она непосредственно не ведет к возбуждению колебаний в системе и обычно в ферромагнитном резонансе не рассматривается. Ниже это слагаемое в $\mathcal{V}(t)$ мы будем опускать.

Вторая сумма представляет процессы, в которых участвуют две спиновые волны. Первое слагаемое в ней описывает процессы неупругого рассеяния, а два других — процессы с уничтожением или порождением двух спиновых волн.

Третья сумма описывает процессы с порождением или уничтожением одной спиновой волны. Обычно они только и рассматриваются в теории ферромагнитного резонанса.

Рассмотрим теперь два примера ферромагнитного резонанса.

Для большей простоты примем, что решетка состоит из N эквивалентных узлов, занятых атомами одного сорта. В соответствии с этим далее будем считать:

$$S_f = S, \quad \mu_f = \mu.$$

Поле $h(t)$ будем считать периодическим:

$$h(t) = h e^{i\omega t} + h^* e^{-i\omega t}.$$

Как будет видно из дальнейшего, это ограничение не является существенным.

Изотропный ферромагнетик. Пусть подмагничивающее поле направлено по оси z . Тогда, согласно (14.7) и (15.4) имеем:

$$\gamma_f^z = 1, \quad \gamma_f^x = \gamma_f^y = 0; \quad A_f^x = 1/2, \quad A_f^y = -i/2, \quad A_f^z = 0; \quad (19.5)$$

$$u_{fv} = N^{-1/2} \exp i(f, v), \quad v_{fv} = 0.$$

Если поле $h(t)$ направлено по оси x , то

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(t) &= -\mu \frac{\sqrt{2S}}{\sqrt{N}} \sum_{f,v} (e^{i(f,v)} \xi_v + e^{-i(f,v)} \xi_v^+) h(t) = \\ &= -\mu \sqrt{2SN} (\xi_0 + \xi_0^+) h(t). \end{aligned} \quad (19.6)$$

Отсюда видим, что возбуждаться могут только спиновые волны с $v = 0$. Вероятность перехода спиновой

системы под действием возмущения (19.5) будет содержать δ -функцию по энергиям:

$$\delta(\omega - E_0),$$

где ω — частота внешнего поля, E_0 — энергия спиновой волны с $\nu = 0$. Следовательно, резонанс возможен, если частота внешнего поля

$$\omega = E_0 = \mu H. \quad (19.7)$$

Легко видеть, что это — частота однородной прецессии спиновых моментов в поле H . При $H = 0$ резонансная частота здесь также обращается в нуль — резонанс невозможен.

Если поле $h(t)$ направлено по оси z , то

$$\mathcal{V}(t) = \frac{\mu}{N} \sum_{f, \nu', \nu} e^{-i(f, \nu - \nu')} \xi_{\nu'}^+ \xi_{\nu} h(t) = \mu \sum_{\nu} n_{\nu} h(t). \quad (19.8)$$

Так как оператор энергии возмущений (19.8) в данном приближении диагонален по числам заполнения спиновых волн, то он не вызывает переходов с изменением числа последних — резонанс невозможен.

Простая спираль. Рассмотрим случай естественного резонанса. Согласно (18.18), (18.21), (18.27) в этом случае

$$\begin{aligned} \gamma_f^x &= \cos(q, f), & \gamma_f^y &= \sin(q, f), & \gamma_f^z &= 0; \\ A_f^x &= -\frac{i}{2} \sin(q, f), & A_f^y &= \frac{i}{2} \cos(q, f), & A_f^z &= \frac{1}{2}; \end{aligned} \quad (19.9)$$

$$u_{fv} = \frac{u_{\nu}}{\sqrt{N}} \exp(-i(f, \nu)), \quad v_{fv} = \frac{v_{\nu}}{\sqrt{N}} \exp(-i(f, \nu)).$$

Пусть поле $h(t)$ направлено по оси анизотропии:

$$h_{\alpha}(t) = h(t) \delta_{\alpha, z}. \quad (19.10)$$

Подставляя (19.9), (19.10) в (19.4), после несложных вычислений получим:

$$\mathcal{V}(t) = -\frac{\mu}{2} \sqrt{2SN} (u_0 + v_0) (\xi_0 + \xi_0^+) h(t). \quad (19.11)$$

Следовательно, могут возбуждаться спиновые волны с $\nu = 0$. Но так как $E_0 = 0$ согласно (18.32), то из закона сохранения энергии

$$\omega - E_0 = 0$$

вытекает, что резонансная частота равна нулю — резонанс в продольном переменном поле невозможен.

Пусть $h(t)$ направлено по оси x :

$$h_a(t) = h(t) \delta_{a,x}. \quad (19.12)$$

В этом случае подстановка (19.9), (19.12) в (19.4) дает:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}(t) = & \mu h(t) \sum_{\nu_1, \nu_2} \{ \Delta(q + \nu_1 - \nu_2) + \Delta(-q + \nu_1 - \nu_2) \} \times \\ & \times (u_{\nu_1}^* u_{\nu_2} + v_{\nu_1}^* v_{\nu_2}) \xi_{\nu_1}^+ \xi_{\nu_2} + \\ & + \mu h(t) \sum_{\nu_1, \nu_2} \{ \Delta(q + \nu_1 + \nu_2) + \Delta(-q + \nu_1 + \nu_2) \} \times \\ & \times (u_{\nu_1}^* v_{\nu_2}^* \xi_{\nu_1}^+ \xi_{\nu_2}^+ + u_{\nu_1} v_{\nu_2} \xi_{\nu_1} \xi_{\nu_2}) - \\ & - \frac{1}{4} \mu h(t) \sqrt{2SN} \{ (u_q - v_q)(\xi_{-q} - \xi_q) + (u_q^* - v_q^*)(\xi_{-q}^+ - \xi_q^+) \}. \end{aligned} \quad (19.13)$$

Первое слагаемое описывает неупругое рассеяние спиновых волн. Эти процессы возможны, если одновременно выполняются законы сохранения импульса и энергии:

$$\pm q + \nu_1 - \nu_2 = 0, \quad \omega - E_{\nu_1} + E_{\nu_2} = 0. \quad (19.14)$$

Второе слагаемое описывает процессы с одновременным возбуждением или уничтожением двух спиновых волн. Законы сохранения для них имеют вид

$$\pm q + \nu_1 + \nu_2 = 0, \quad \pm \omega + E_{\nu_1} + E_{\nu_2} = 0. \quad (19.15)$$

Наконец, последнее слагаемое описывает процессы с возбуждением или уничтожением одной спиновой волны с волновым вектором $\nu = q$. Они возможны, если выполняется условие

$$\pm \omega + E_{\pm q} = 0. \quad (19.16)$$

Процессы (19.14), (19.15) не имеют резко выраженного максимума при одной определенной частоте ω .

В процессах (19.16) поглощение происходит при фиксированной частоте, соответствующей возбуждению спиновых волн с волновым вектором, равным обратной величине шага спирали.

Случай $q = 0$ соответствует резонансу при ферромагнитном упорядочении спинов, а случай $q = \pi/a$ — резонансу при антиферромагнитном упорядочении спинов.

Дальнейшие применения метода ПВК. Ниже мы остановимся на некоторых приложениях метода приближенного вторичного квантования, чтобы составить представление о его возможных применениях. Такой обзор полезен еще и потому, что в ряде случаев решение в приближении спиновых волн может рассматриваться как достаточно удовлетворительное нулевое приближение при исследовании задачи другими методами, например при использовании метода функций Грина (см. гл. VIII). Вопросы кинетических процессов в сильно магнитных веществах здесь опущены. Они достаточно полно освещены в обзорах Ван-Кранендонка и Ван-Флека (1958), А. И. Ахиезера, В. Г. Барьяхтара и М. И. Каганова (1960, а, б), А. С. Боровика-Романова (1962) и А. С. Пахомова и Н. А. Смолькова (1962), в сборнике (1961) и монографиях А. Г. Гуревича (1960), (1973), Смита и Вейна (1962).

Одноосные ферромагнетики. В работах С. В. Тябликова (1950) и С. В. Тябликова и Т. Шиклоша (1959) была рассчитана температурная и полевая зависимость намагниченности одноосного ферромагнетика для случаев, когда внешнее поле наложено вдоль или поперек оси анизотропии, а также определена зависимость первой константы анизотропии от температуры и поля. Рассматривался случай спина $S = 1/2$. [См. также гл. II и III Дополнения. (Ред.)]

Е. А. Туров и Ю. П. Ирхин (1958) показали, что при расчетах температурных эффектов в окрестности критических значений поля равновесные значения вектора намагниченности надо определять из условий минимума свободной энергии, а не энергии основного состояния. Это связано с тем, что в последнем случае ошибка от неточного определения критического поля оказывается больше вычисляемых температурных вкладов.

Н. А. Потапков (1958) определил температурную и полевую зависимость первой константы анизотропии для произвольного спина, используя спин-волновую модель Дайсона.

В сильных внешних полях, $H \gg H_a$ (H_a — эффективное поле анизотропии), приближенное выражение для первой константы анизотропии имеет вид

$$K_1 = \frac{1}{2} I_a S^2 \left\{ 1 - 3vS^{-1} Z_{3/2} \left(\frac{\mu H}{\vartheta} \right) \left(\frac{\vartheta}{4\pi\alpha} \right)^{3/2} \right\},$$

$$I_a \ll \vartheta \ll 1, \quad I_a = \frac{1}{N} \sum_{f_1, f_2} I_a(f_1, f_2), \quad (19.17)$$

где I_a определяется согласно (7.9), α — коэффициент при v^2 в формуле (15.13).

Анизотропия кубических кристаллов. Расчеты первой константы анизотропии для гамильтониана (7.10) в обычном спин-волновом приближении были выполнены для случая $S = 1/2$ С. В. Тябликовым и А. А. Гусевым (1956) и для случая $S \geq 1/2$ и полного насыщения Палом (1954). Н. А. Потапков (1957) рассчитал первую константу для спина $S \geq 1/2$ в спин-волновой модели Дайсона.

Результаты расчетов дают следующее выражение для первой константы анизотропии:

$$K_1 = \frac{2}{4!} I_4 S^4 \left\{ 1 - 10vS^{-1} Z_{3/2} \left(\frac{\mu H}{\vartheta} \right) \left(\frac{\vartheta}{4\pi\alpha} \right)^{3/2} \right\}, \quad (19.18)$$

$$I_4 = \frac{1}{N} \sum_{f_1, \dots, f_4} I_4(f_1, f_2, f_3, f_4),$$

где I_4 определяется согласно (7.11).

Следует иметь в виду, что разложения констант анизотропии по степеням температуры вида (19.17), (19.18) вообще имеют смысл только при $\vartheta \gg I_a, I_4$.

Температурная и полевая зависимость констант анизотропии вида (19.17), (19.18) согласуется с экспериментальными данными И. М. Пузеля (1957), (1963)¹⁾.

¹⁾ Дальнейшее развитие теории магнитной анизотропии см., например, в работах Г. Келлена и Э. Келлена (1966), Л. А. Максимова и А. Л. Куземского (1971), Н. А. Потапкова и Ю. Г. Рудого (1971) (*Прим. ред.*).

Ферромагнетики со сложной решеткой (упорядоченный бинарный сплав) рассматривали Е. И. Кондорский и А. С. Пахомов (1953). Они определили спектр элементарных возбуждений и температурную зависимость намагниченности.

Ферримагнетики. Изотропные ферримагнетики рассматривались по методу ПВК в работах С. В. Вонсовского и Ю. М. Сеидова (1954), Е. И. Кондорского и др. (1956), Т. Шиклоша (1957), С. В. Тябликова (1956, б), (1959,). При этом в зависимости от частных предположений относительно модели были получены температурные зависимости $\vartheta^{3/2}$ и ϑ^2 для спонтанной намагниченности¹⁾.

Выражение для намагниченности двухподрешеточного ферримагнетика в нулевом приближении имеет вид

$$M_0 = \begin{cases} M_2 - M_1, & 0 \leq H \leq H_1; \\ \sqrt{M_1 M_2} \frac{H}{H_e}, & H_1 \leq H \leq H_2; \\ M_2 + M_1, & H_2 \leq H, \end{cases} \quad (19.19)$$

где M_1, M_2 — суммарные моменты первой и второй подрешеток;

$$H_1 = H_e \frac{M_2 - M_1}{\sqrt{M_1 M_2}}, \quad H_2 = H_e \frac{M_2 + M_1}{\sqrt{M_1 M_2}}, \quad H_e = \left(\frac{J_{12}(0) J_{21}(0)}{4\mu_1 \mu_2} \right)^{1/2}, \quad (19.20)$$

$$J_{ij}(0) = \sum_{h_j} I(h_i - h_j)$$

или

$$H_e = \left(\frac{K^2}{4M_1 M_2} \right)^{1/2}, \quad K = \sum_{f, g} I(f - g).$$

Относительное расположение магнитных моментов подрешеток и зависимость суммарной намагниченности от поля схематически изображены на рис. 4 и 5.

Е. Н. Яковлев (1957), (1958) рассмотрел основное состояние *одноосно-анизотропного ферримагнетика* с двумя подрешетками, зависимость намагниченности от внешнего поля и температурные поправки к ней.

¹⁾ Работу С. В. Вонсовского и Ю. М. Сеидова (1954) следует понимать не буквально, а так, как формулируется в нашей работе (1959, а).

В общем случае магнитная структура ферримagnетиков значительно сложнее, и только иногда ее можно рассматривать как совокупность двух подрешеток, вставленных одна в другую. Исследование возможных типов структур в приближении молекулярного поля¹⁾ и пренебрежении магнитной анизотропией было проведено Яфетом и Киттелем (1952). Они показали, что в зависимости от предположений о константах молекулярного поля каждая из подрешеток f и g может в свою очередь разбиться на две или несколько подрешеток.

При нуле температуры намагниченность каждой из подрешеток максимальна и приближение молекулярного поля соответствует квазиклассическому приближению. Поэтому результаты, полученные в приближении молекулярного поля и экстраполированные на нуль температуры, могут быть использованы как нулевое приближение при решении задачи в методе ПВК.

Основное состояние *трехподрешеточного ферримagnетика* рассмотрели А. А. Гусев и А. С. Пахомов (1961), (1964). Они показали, что при определенных предположениях о знаках обменных интегралов устойчивыми будут конфигурации с коллинеарным расположением спинов²⁾. Для суммарного магнитного момента было получено выражение, дающее лучшее согласие с экспериментальными значениями, нежели эмпирическая формула Нееля (см. К. П. Белов и М. А. Зайцева (1958)).

Спектр спиновых волн в ферритах-шпинелях исследовали Каплан (1958) и иттриевых ферритах-гранатах — Мейер и Гаррис (1962). Как и следовало ожидать, одна из ветвей спектра соответствует «акустическим» колебаниям, а остальные — «оптическим».

Анизотропные антиферромагнетики. Магнитные и термодинамические характеристики антиферромагнетиков существенно зависят от магнитной анизотропии кристаллов. Очевидно, что последняя сказывается наиболее сильно, когда энергия кристалла во внешнем поле меньше или порядка энергии анизотропии. Из общих

¹⁾ Относительно приближения молекулярного поля см. §§ 1 и 21.

²⁾ Аналогичный расчет с учетом кубической анизотропии проведен в работе А. С. Пахомова и В. А. Гербутова (1971) (см. также обзор А. С. Пахомова (1971)) (Прим. ред.)

соображений можно видеть, что для одноосных антиферромагнетиков должны существовать два критических поля: одно, при котором внешнее поле подавляет анизотропию, и другое, при котором антиферромагнитное упорядочение переходит в ферромагнитное.

Низкотемпературные свойства антиферромагнетиков в спин-волновом приближении были предметом исследования ряда работ. Магнитная анизотропия учитывалась при этом либо как некоторое эффективное поле анизотропии вида (7.13), либо добавлением к чисто обменному гамильтониану слагаемого типа «обменной» анизотропии (7.9) или одноионной анизотропии (7.11).

В работах Андерсона (1950, 6), (1952) и Тессмана (1952) использовался полуклассический метод и учитывалась одноионная анизотропия; Накамура (1952) использовал представление Гольштейна — Примакова (5.16) и учитывал одноионную анизотропию вида (7.11); в работах Займана (1952, а, б) и Кубо (1953) также использовалось представление Гольштейна — Примакова, анизотропия вводилась как некоторое эффективное поле вида (7.13). Детальный анализ основных положений спин-волнового приближения был проведен Маршаллом (1955, а, б) на модели антиферромагнетика с одноионной одноосной анизотропией. В этой работе, по-видимому, впервые были достаточно отчетливо сформулированы затруднения спин-волновой теории, связанные с появлением нефизических состояний. Некоторым недостатком указанных работ является ограничение случаем слабых полей ($H < H_a$), при которых еще не происходит перестройки (опрокидывания) спинов.

Случай произвольных внешних полей был рассмотрен С. В. Тябликовым и А. Ц. Аматуни (1956), А. Ц. Аматуни (1956, 1957) с введением анизотропии как эффективного поля. Были рассчитаны энергия основного состояния, намагниченность и восприимчивость и найдены температурные поправки к ним. Зависимость намагниченности от внешнего поля при разных ориентациях последнего относительно оси анизотропии в общем получилась соответствующей экспериментальным данным Ван ден Ханделя и др. (1952). Однако в продольных полях при опрокидывании спинов (при первом критическом значении поля) получался переход второго рода;

что не соответствовало экспериментальным данным. Введение анизотропии обменного типа позволило А. Ц. Аматауни (1958) снять это затруднение. Спектр элементарных возбуждений и термодинамические характеристики для системы с гамильтонианом подобного вида были рассмотрены в работе Ю. Г. Рудого (1963). [См. также гл. IV Дополнения. (Ред)].

Спин-волновое рассмотрение кубических антиферромагнетиков с гранецентрированной и объемноцентрированной решетками было предпринято тер Хааром и Лайнсом (1962), Лайнсом (1963). В этих работах учитывалась анизотропия типа ромбоэдрической. Эти авторы фактически рассмотрели энергию основного состояния, спектр элементарных возбуждений и намагниченность подрешеток для случая $H = 0$.

Магнитострикция ферромагнетиков. Магнитострикция гексагональных кристаллов с анизотропией типа ромбоэдрической рассматривалась в спин-волновом приближении А. А. Гусевым (1955), что позволило определить константы магнитострикции как функции температуры и внешнего магнитного поля. Необходимость такой зависимости ранее указывалась Н. С. Акуловым (1939) (см. также Е. А. Тузов (1963)).

Константы магнитострикции в данном случае могут быть как положительными, так и отрицательными. Впервые на эту особенность квантовой теории указал С. В. Вонсовский (1940, 6). [Связь магнитострикции и магнитной анизотропии рассмотрена в работе Брукса и Эгами (1973). (Ред)].

Магнитные вещества со спиральными структурами. Каплан (1961), Купер и др. (1962) показали, что для таких веществ можно подобрать спиновые гамильтонианы, которые обладают должной симметрией и позволяют исследовать возможные типы упорядочений, наблюдающиеся на опыте. Далее был рассмотрен ферромагнитный резонанс в таких структурах и показано, что условия его осуществления заметно отличаются от таковых для коллинеарных структур¹⁾.

¹⁾ Наиболее полно эти вопросы рассмотрены (с учетом анизотропии и магнитоупругих взаимодействий) в работе Гудингса и Саутерна (1971) (Прим. ред.)

Нагамия (1962), Нагамия и др. (1962, а) исследовали изменения в расположении спинов для простой спирали под действием внешнего поля, лежащего в базисной плоскости. Оказалось, что в слабых полях ориентация спинов меняется незначительно, результирующий магнитный момент направлен по полю. При достижении полем первого критического значения, H_c , имеет место переход первого рода, когда спиральная конфигурация перестраивается в веерообразную; при этом возникает большой результирующий момент. Дальнейшее увеличение поля ведет к непрерывному уменьшению угла раствора веера. При достижении полем второго критического значения H_f ($\sim 2H_c$) он обращается в нуль; в этой точке имеет место переход второго рода.

Лайонс (1963) исследовал спиральные структуры в приближении молекулярного поля (см. также работу Каплана (1961)); частью результаты могут быть применены для расчета основного состояния в методе ПВК, если намагниченность при данной температуре заменить на намагниченность при нуле температуры.

Купер и Эллиотт (1963), Купер и др. (1962) исследовали в спин-волновом приближении условия ферромагнитного резонанса для конфигураций типа простой и ферромагнитной спиралей; при этом учитывалось влияние внешнего поля. В. Г. Барьяхтар и др. (1964, а) вычислили в спин-волновом приближении тензор восприимчивости ферромагнитного резонанса для ферромагнитной спирали. [См. также В. Г. Барьяхтар и Е. П. Стефановский (1969) для антиферромагнитного случая. (Ред)].

В рамках $s-f$ -обменной модели Мива (1963) показал, что спиральное упорядочение f -электронов ведет к разрывам в спектре электронов проводимости. Савченко и Барьяхтар (1963) исследовали в этой же модели релаксационные процессы.

ГЛАВА VI

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ И ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

В теории магнетизма для области высоких температур используется так называемое приближение молекулярного поля. Оно состоит в том, что гамильтониан обменного взаимодействия на основе тех или иных «наглядных» физических соображений заменяется гамильтонианом взаимодействия спинов с некоторым эффективным полем (молекулярным полем), которое само пропорционально намагниченности вещества. Мы используем здесь теоремы о минимальных свойствах свободной энергии и с их помощью сформулируем вариационный принцип, который далее применим для вывода уравнений молекулярного поля. В заключение главы рассмотрим простейший вариант теории возмущений для высоких температур.

§ 20. Минимальный принцип для свободной энергии

ТЕОРЕМА 1¹⁾. Если $\{\varphi_n\}$ — произвольная полная система ортонормированных функций, не являющихся собственными функциями гамильтониана системы \mathcal{H} , то

$$F(\mathcal{H}) \leq F_{\text{mod}}(\mathcal{H}), \quad (20.1)$$

где $F(\mathcal{H})$ — истинная свободная энергия системы;

$$F(\mathcal{H}) = -\vartheta \ln Q, \quad Q = \sum_v e^{-\frac{\varepsilon_v}{\vartheta}}, \quad (20.2)$$

¹⁾ См. Пайерлс (1938).

\mathcal{E}_v — собственные значения гамильтониана \mathcal{H} , $F_{\text{mod}}(\mathcal{H})$ — «модельная» свободная энергия, аппроксимирующая истинную свободную энергию сверху,

$$F_{\text{mod}}(\mathcal{H}) = -\theta \ln Q_{\text{mod}}, \quad Q_{\text{mod}} = \sum_n e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{nn}},$$

$$\mathcal{H}_{nn} = (\varphi_n^*, \mathcal{H} \varphi_n). \quad (20.3)$$

Очевидно, что неравенство (20.1) можно также переписать в следующем виде:

$$Q \geq Q_{\text{mod}}. \quad (20.4)$$

Равенство в формулах (20.1) или (20.4) имеет место, если φ_n — собственные функции гамильтониана системы.

Доказательство (от противного). Рассмотрим функцию, удовлетворяющую условиям:

$$\frac{df}{d\xi} < 0, \quad \frac{d^2 f}{d\xi^2} > 0, \quad (20.5)$$

и покажем, что если

$$Q = \sum_n f(\mathcal{E}_n), \quad Q_{\text{mod}} = \sum_n f(\mathcal{H}_{nn}), \quad (20.6)$$

то имеет место неравенство (20.4). В частности, условиям (20.5) удовлетворяет функция $f(\xi) = \exp(-\xi/\theta)$.

Условимся нумеровать величины \mathcal{E}_n и \mathcal{H}_{nn} в порядке их возрастания:

$$\mathcal{E}_n \leq \mathcal{E}_m, \quad \mathcal{H}_{nn} \leq \mathcal{H}_{mm}, \quad \text{если } n < m.$$

Введем частичные суммы ¹⁾

$$Q^{(N)} = \sum_{n=1}^N f(\mathcal{E}_n), \quad Q_{\text{mod}}^{(N)} = \sum_{n=1}^N f(\mathcal{H}_{nn}) \quad (20.7)$$

и сначала покажем, что неравенство (20.4) выполняется для них, а потом перейдем к пределу при $N \rightarrow \infty$.

Предположим, что функции $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ не являются собственными функциями гамильтониана системы и что

¹⁾ Так как в силу условий (20.5) функция $f(\xi)$ монотонно убывает с ростом аргумента, то суммы (20.7) ограничены сверху:

$$Q^{(N)} \leq Nf(\mathcal{E}_1), \quad Q_{\text{mod}}^{(N)} \leq Nf(\mathcal{H}_{11}).$$

для них частичная сумма $Q_{\text{mod}}^{(N)}$ (20.7) достигает максимума. Тогда имеется, по крайней мере, один недиагональный элемент, отличный от нуля:

$$\mathcal{H}_{n_0 m_0} \neq 0, \quad m_0 \leq N, \quad n_0 \neq m_0. \quad (20.8)$$

Рассмотрим три возможных случая:

$$\begin{aligned} \text{а) } n_0 > N; \\ \text{б) } n_0 \leq N, \quad \mathcal{H}_{m_0 m_0} &\neq \mathcal{H}_{n_0 n_0}; \\ \text{в) } n_0 \leq N, \quad \mathcal{H}_{m_0 m_0} &= \mathcal{H}_{n_0 n_0}. \end{aligned} \quad (20.9)$$

а) Введем новые функции:

$$\varphi'_n = \varphi_n + \varepsilon \varphi_{n_0} \Delta(m_0 - n), \quad (20.10)$$

где ε — малый параметр ($|\varepsilon| \ll 1$). Тогда с точностью до членов порядка ε включительно

$$\mathcal{H}'_{m_0 m_0} = (\varphi'_{m_0}, \mathcal{H} \varphi'_{m_0}) = \mathcal{H}_{m_0 m_0} + (\varepsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \varepsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0}). \quad (20.11)$$

Следовательно, приращение $Q_{\text{mod}}^{(N)}$ равно:

$$Q_{\text{mod}}^{(N)} - Q_{\text{mod}}^{(N)} = \left(\frac{df}{d\xi} \right)_{\xi = \mathcal{H}_{m_0 m_0}} (\varepsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \varepsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0}). \quad (20.12)$$

Выбором знака ε правая часть (20.12) может быть сделана положительной и потому $Q_{\text{mod}}^{(N)} > Q_{\text{mod}}^{(N)}$. Следовательно, не верно предположение о том, что $Q_{\text{mod}}^{(N)}$ имеет максимум на функциях $\varphi_1, \dots, \varphi_N$.

б) Введем новые функции:

$$\varphi'_n = \varphi_n + \varepsilon \varphi_{n_0} \Delta(m_0 - n) - \varepsilon \varphi_{m_0} \Delta(n_0 - n). \quad (20.13)$$

Тогда с точностью до членов порядка ε включительно

$$\mathcal{H}'_{m_0 m_0} = \mathcal{H}_{m_0 m_0} + (\varepsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \varepsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0}), \quad (20.14)$$

$$\mathcal{H}'_{n_0 n_0} = \mathcal{H}_{n_0 n_0} - (\varepsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \varepsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0}),$$

и приращение $Q_{\text{mod}}^{(N)}$ равно:

$$\begin{aligned} Q_{\text{mod}}^{(N)} - Q_{\text{mod}}^{(N)} = \\ = \left\{ \left(\frac{df}{d\xi} \right)_{\xi = \mathcal{H}_{m_0 m_0}} - \left(\frac{df}{d\xi} \right)_{\xi = \mathcal{H}_{n_0 n_0}} \right\} (\varepsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \varepsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0}). \end{aligned} \quad (20.15)$$

Так как по условию функция f монотонна и $\mathcal{H}_{m_0 m_0} \neq \mathcal{H}_{n_0 n_0}$, то фигурная скобка в (20.15) отлична от нуля

и правая часть (20.15) может быть сделана положительной за счет подбора ϵ , но это опять противоречит исходному предположению.

в) В этом случае $\mathcal{H}_{m_0 m_0} = \mathcal{H}_{n_0 n_0}$ и нужно учитывать члены порядка ϵ^2 включительно. Принимая во внимание условие нормировки для пробных функций, положим:

$$\varphi'_n = \begin{cases} \varphi_n, & n \neq m_0, n_0; \\ \frac{\varphi_{m_0} + \epsilon \varphi_{n_0}}{\sqrt{1 + |\epsilon|^2}}, & n = m_0; \\ \frac{\varphi_{n_0} - \epsilon \varphi_{m_0}^*}{\sqrt{1 + |\epsilon|^2}}, & n = n_0. \end{cases} \quad (20.16)$$

Нетрудно видеть, что приращение $Q_{\text{mod}}^{(N)}$

$$Q_{\text{mod}}'^{(N)} - Q_{\text{mod}}^{(N)} = \left(\frac{d^2 f}{d \xi^2} \right)_{\xi = \mathcal{H}_{m_0 m_0}} (\epsilon \mathcal{H}_{m_0 n_0} + \epsilon^* \mathcal{H}_{n_0 m_0})^2 \quad (20.17)$$

всегда положительно, что противоречит исходному предположению.

Следовательно, для конечных N величина $Q_{\text{mod}}^{(N)}$ не достигает максимума ни на какой системе функций $\varphi_1, \dots, \varphi_N$, не являющихся собственными функциями гамильтониана системы. И так как частичные суммы ограничены сверху, то всегда

$$Q^{(N)} > Q_{\text{mod}}^{(N)}. \quad (20.18)$$

Пусть при $N \rightarrow \infty$ суммы (20.7) сходятся, и притом равномерно, к значениям (20.6). При этом для предельных значений (20.6) будет иметь место неравенство (20.4). Действительно, если бы Q_{mod} превосходила Q , то всегда можно было найти число N такое, что $Q_{\text{mod}}^{(N)} > Q^{(N)}$, но это невозможно по доказанному. Этим исчерпывается доказательство теоремы 1.

Используя теорему 1, можно сформулировать *вариационный принцип* для приближенного определения свободной энергии системы.

Пусть функции $\{\varphi_n\}$ зависят от некоторого произвольного параметра σ . Тогда и модельная свободная

энергия также будет зависеть от σ . Так как по условию теоремы 1

$$F \leq F_{\text{mod}} = -\theta \ln \sum_n e^{-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{nn}(\sigma)}, \quad (20.19)$$

то наилучшее приближение для свободной энергии F сверху получим, выбирая значения параметра σ из условия минимума модельной свободной энергии F_{mod} .

Пусть гамильтониан системы \mathcal{H} можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(\sigma) + \mathcal{H}'(\sigma) \equiv \mathcal{H}_0(\sigma) + [\mathcal{H} - \mathcal{H}_0(\sigma)], \quad (20.20)$$

где $\mathcal{H}_0(\sigma)$ — какой-либо оператор, зависящий от параметра σ . Вид оператора $\mathcal{H}_0(\sigma)$ выберем из соображений удобства вычислений. Обозначим через \mathcal{E}_n^0 и φ_n собственные значения и собственные функции оператора \mathcal{H}_0 и через \mathcal{H}'_{nn} диагональные матричные элементы оператора \mathcal{H}' по функциям φ_n . Будем считать, что φ_n не являются собственными функциями полного гамильтониана \mathcal{H} . Очевидно, что \mathcal{E}_n^0 и \mathcal{H}'_{nn} также являются некоторыми функциями параметра σ . Используем систему функций $\{\varphi_n\}$ в качестве пробной системы функций теоремы 1. Тогда

$$\mathcal{H}_{nn} = \mathcal{E}_n^0 + \mathcal{H}'_{nn} \equiv \mathcal{E}_n^0 + [\mathcal{H}_{nn} - \mathcal{E}_n^0]. \quad (20.21)$$

Согласно (20.1) — (20.3) для свободной энергии имеет место неравенство

$$F(\mathcal{H}) \leq -\theta \ln \sum_n e^{-\frac{1}{\theta} (\mathcal{E}_n^0 + \mathcal{H}'_{nn})}.$$

Допустим теперь, что оператор \mathcal{H}' можно рассматривать как «малое возмущение» по сравнению с оператором \mathcal{H} . С точностью до величин первого порядка малости относительно \mathcal{H}' имеем:

$$Q_{\text{mod}} = \sum_n e^{-\frac{\mathcal{E}_n^0}{\theta}} - \frac{1}{\theta} \sum_n \mathcal{H}'_{nn} e^{-\frac{\mathcal{E}_n^0}{\theta}}. \quad (20.22)$$

Подставляя (20.22) в (20.1), получаем в этом же приближении

$$F(\mathcal{H}) \leq F(\mathcal{H}_0) + \frac{\text{Sp} \left(\mathcal{H}' e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}. \quad (20.23)$$

В этом случае наилучшее приближение для свободной энергии сверху получим, выбирая значение параметра σ из условия минимума правой части (20.23). Очевидно, что формулировка вариационного принципа (20.23) является более ограниченной по сравнению с исходной формулировкой (20.1).

Вариационный принцип в форме (20.23) можно усилить, сняв ограничение малости оператора \mathcal{H}' . Для этого используем следующую теорему.

ТЕОРЕМА 2¹⁾. Пусть гамильтониан системы \mathcal{H} можно представить в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'. \quad (20.24)$$

Тогда имеет место неравенство

$$F(\mathcal{H}) \leq F_{\text{mod}}(\mathcal{H}), \quad (20.25)$$

где $F(\mathcal{H})$ — истинная свободная энергия системы, а $F_{\text{mod}}(\mathcal{H})$ — модельная свободная энергия системы,

$$F_{\text{mod}}(\mathcal{H}) = F(\mathcal{H}_0) + \frac{\text{Sp} \left(\mathcal{H}' e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}, \quad (20.26)$$

$$F(\mathcal{H}_0) = -\vartheta \ln \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right).$$

Доказательство. Пусть \mathcal{H} зависит от некоторого параметра ξ : $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\xi)$. Рассмотрим величину $\exp \mathcal{H}(\xi)t$, где t — также некоторый параметр. Легко увидеть, что

$$\frac{d}{dt} e^{\mathcal{H}(\xi)t} = \mathcal{H}(\xi) e^{\mathcal{H}(\xi)t}. \quad (20.27)$$

¹⁾ Н. Н. Боголюбов (1956).

Отсюда получаем уравнение для определения производной по ξ от $\exp \mathcal{H}(\xi)t$:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t} \right\} = \mathcal{H}(\xi) \frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t} + \frac{d\mathcal{H}(\xi)}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t}, \quad (20.28)$$

$$\frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t} = 0 \quad \text{при} \quad t=0.$$

Положим

$$\frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t} = e^{\mathcal{H}(\xi)t} V(t). \quad (20.29)$$

Тогда для V будем иметь уравнение

$$\frac{dV(t)}{dt} = e^{-\mathcal{H}(\xi)t} \frac{d\mathcal{H}(\xi)}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t}, \quad (20.30)$$

$$V(t) = 0 \quad \text{при} \quad t=0.$$

Значит,

$$\frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)} = e^{\mathcal{H}(\xi)} V(1) = e^{\mathcal{H}(\xi)} \int_0^1 e^{-\mathcal{H}(\xi)t} \frac{d\mathcal{H}(\xi)}{d\xi} e^{\mathcal{H}(\xi)t} dt. \quad (20.31)$$

Рассмотрим частный случай

$$\mathcal{H}(\xi) = \mathcal{A} + \mathcal{B}\xi, \quad (20.32)$$

где \mathcal{A} , \mathcal{B} — эрмитовские операторы, и покажем, что имеет место условие выпуклости

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \text{Sp } e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} \geq 0. \quad (20.33)$$

Действительно, согласно (20.31) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \text{Sp } e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} &= \text{Sp } \frac{d}{d\xi} e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} = \\ &= \text{Sp } e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} \int_0^1 e^{-(\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi)t} \mathcal{B} e^{(\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi)t} dt = \text{Sp } (e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} \mathcal{B}). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} \text{Sp } (e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi}) &= \frac{d}{d\xi} \text{Sp } (e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} \mathcal{B}) = \\ &= \text{Sp } \left(e^{\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi} \int_0^1 e^{-(\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi)t} \mathcal{B} e^{(\mathcal{A} + \mathcal{B}\xi)t} dt \mathcal{B} \right). \end{aligned}$$

Возьмем представление, в котором оператор (20.32) диагонален, его собственные значения обозначим через \mathcal{E}_n . Тогда

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} \text{Sp}(e^{\mathcal{A} + \xi \mathcal{B}}) &= \sum_{m, n} e^{\mathcal{E}_m} \int_0^1 e^{-\mathcal{E}_m t} \mathcal{B}_{mn} e^{\mathcal{E}_n t} dt \mathcal{B}_{nm} = \\ &= \sum_{m, n} |\mathcal{B}_{mn}|^2 \frac{e^{\mathcal{E}_n} - e^{\mathcal{E}_m}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \geq 0, \end{aligned}$$

что и доказывает неравенство (20.33).

Но если

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} \geq 0,$$

где $f(\xi)$ — некоторая непрерывная дифференцируемая функция, то

$$f(\xi) \geq f(0) + \xi f'(0).$$

Следовательно,

$$\text{Sp}(e^{\mathcal{A} + \xi \mathcal{B}}) \geq \text{Sp}(e^{\mathcal{A}}) + \xi \text{Sp}(\mathcal{B}e^{\mathcal{A}}). \quad (20.34)$$

Полагая

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= -\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}, \quad \mathcal{B} = -\frac{\mathcal{H}' - \bar{\mathcal{H}}'}{\Phi}, \quad \xi = 1, \\ \bar{\mathcal{H}}' &= \frac{\text{Sp}\left(\mathcal{H}' e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}}\right)}{\text{Sp}\left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}}\right)}, \end{aligned} \quad (20.35)$$

получаем из предыдущего неравенства

$$\text{Sp}\left(e^{-\frac{1}{\Phi}(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')} \right) \geq e^{-\frac{\bar{\mathcal{H}}'}{\Phi}} \text{Sp}\left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}}\right). \quad (20.36)$$

Принимая во внимание определение свободной энергии (8.9), (8.13), получаем отсюда

$$F(\mathcal{H}) \leq F(\mathcal{H}_0) + \bar{\mathcal{H}}' = F(\mathcal{H}_0) + \frac{\text{Sp}\left(\mathcal{H}' e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}}\right)}{\text{Sp}\left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}}\right)}. \quad (20.37)$$

Из (20.37) следует неравенство (20.25) теоремы 2.

На основе неравенства (20.37), как и в предыдущем случае, можно сформулировать приближенный метод определения свободной энергии системы. Представим для этого гамильтониан системы в виде (20.20) — (20.21). Тогда правая часть неравенства (20.37) дает наилучшее приближение свободной энергии сверху, если значение параметра σ определить из условия минимума модельной свободной энергии. Этот вариационный принцип всегда позволяет получить оценку сверху для свободной энергии, хотя и довольно грубую. Успешность применения его при решении конкретных задач в значительной мере зависит от того, насколько удачно осуществлено разбиение гамильтониана на части \mathcal{H}_0 и \mathcal{H}' .

В заключение заметим, что минимальный принцип (20.37) можно также рассматривать как обобщение известного минимального принципа В. А. Фока (1930) для энергии основного состояния. Действительно, пусть \mathcal{E} — первое собственное значение полного гамильтониана $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$, а \mathcal{E}_0 , φ_0 — первое собственное значение и первая собственная функция оператора \mathcal{H} . Согласно этому принципу

$$\mathcal{E} \leq \frac{(\varphi_0^*, \mathcal{H}\varphi_0)}{(\varphi_0^*, \varphi_0)},$$

следовательно,

$$\mathcal{E} \leq \mathcal{E}_0 + \frac{(\varphi_0^*, \mathcal{H}'\varphi_0)}{(\varphi_0^*, \varphi_0)}.$$

Перейдем теперь к приложениям вариационного принципа для свободной энергии в задачах теории магнетизма¹⁾.

§ 21. Изотропный ферромагнетик

Рассмотрим изотропный ферромагнетик. Условимся считать, что решетка состоит из N эквивалентных узлов, в каждом из которых находится спин $S = 1/2$. Гамиль-

¹⁾ Связь вариационного принципа с диаграммной техникой, т.е. стационарность функционала свободной энергии по отношению к вариациям полной функции Грина (или массового оператора), установлена в работе Латтинжера и Уорда (1960). (Прим. ред.)

тоннан изотропного ферромагнетика (14.14) — (14.16) перепишем в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}', \quad (21.1)$$

где

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N J(0) \left(J(0) = \sum_f I(f) \right), \quad (21.2)$$

$$\mathcal{H}_0 = \left(\mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \right) \sum_f n_f, \quad (21.3)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & \frac{1}{2} (1 - \sigma_{1/2}) J(0) \sum_f n_f - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}. \end{aligned} \quad (21.4)$$

Здесь b_f^+ , b_f — операторы Паули; $\sigma_{1/2}$ — параметр, подлежащий определению из условия минимума модельной свободной энергии (20.37). Очевидно, что $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$ не зависит от $\sigma_{1/2}$.

Примем во внимание, что числа заполнения n_f принимают значения 0 и 1 и что операторы b_f^+ , b_f не диагональны по числам заполнения. Введем обозначение

$$\alpha = \mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \quad (21.5)$$

и вычислим шпуры в (20.37) для операторов \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}' определяемых формулами (21.3), (21.4).

Легко видеть, что

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right) &= \text{Sp}_{(\dots, n_f, \dots)} \left(e^{-\frac{\alpha}{\vartheta} \sum_f n_f} \right) = \\ &= \prod_f \sum_{n_f} e^{-\frac{\alpha}{\vartheta} n_f} = \left(1 + e^{-\frac{\alpha}{\vartheta}} \right)^N. \end{aligned} \quad (21.6)$$

Замечая, что

$$\text{Sp} \left(n_f e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right) = e^{-\frac{\alpha}{\vartheta}} \left(1 + e^{-\frac{\alpha}{\vartheta}} \right)^{N-1},$$

$$\text{Sp} \left(b_f e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right) = 0,$$

имеем далее

$$\frac{\text{Sp} \left(\mathcal{H}' e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)} = \frac{N}{2} (1 - \sigma_{1/2}) \bar{n} J(0) - \frac{N}{2} \bar{n}^2 J(0), \quad (21.7)$$

$$\bar{n} = \frac{\text{Sp} \left(n_f e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}} \right)} = \left(e^{\frac{\alpha}{\vartheta}} + 1 \right)^{-1}. \quad (21.8)$$

Подставим выражения (21.6), (21.7) в (20.37) и примем во внимание вклад в свободную энергию $F(\mathcal{H}_0)$ от энергии основного состояния \mathcal{E}_0 . В результате для модельной свободной энергии получим следующее выражение:

$$F_{\text{mod}} = \mathcal{E}_0 - N\vartheta \ln \left(1 + e^{-\frac{\alpha}{\vartheta}} \right) + \frac{N}{2} (1 - \sigma_{1/2}) \bar{n} J(0) - \frac{N}{2} \bar{n}^2 J(0), \quad (21.9)$$

где α и \bar{n} определяются согласно формулам (21.5), (21.8).

Из условия минимума формы (21.9) по $\sigma_{1/2}$ получаем следующее уравнение для определения $\sigma_{1/2}$:

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2\bar{n} \quad (21.10)$$

или, в более привычной форме,

$$\sigma_{1/2} = \text{th} \frac{\mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0)}{2\vartheta}. \quad (21.11)$$

Так как $S_f^z = 1/2 - n_f$, то $\sigma_{1/2}$ есть относительная намагниченность на один узел.

Полная намагниченность системы равна $\frac{N}{2} \mu \sigma_{1/2}$. Это же значение получим и дифференцированием модельной свободной энергии (21.9) по внешнему полю. Действительно, принимая во внимание условие минимума F_{mod} по $\sigma_{1/2}$, получим:

$$M = - \frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial H} = \frac{1}{2} N \mu - \frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial H} = M_0 \sigma_{1/2}, \quad (21.12)$$

где $M_0 = \frac{1}{2} N \mu$ — намагниченность насыщения образца.

Приближенное значение для свободной энергии равно

$$F = \min F_{\text{mod}} = \mathcal{E}_0 - N\theta \ln \left(1 + e^{-\frac{\alpha}{\theta}} \right) + \frac{1}{2} NJ(0) \bar{n}^2, \quad (21.13)$$

где \mathcal{E}_0 , α , \bar{n} определяются формулами (21.2), (21.5) и (21.8).

Уравнение (21.11) для относительной намагниченности σ обычно называют уравнением молекулярного поля. Это название связано с тем, что выражение под знаком гиперболического тангенса можно интерпретировать как энергию магнитного момента в некотором эффективном поле:

$$H_{\text{eff}} = H + H_W, \quad H_W = \frac{\sigma_{1/2}}{2\mu} J(0), \quad (21.14)$$

складывающемся из внешнего поля H и внутреннего или молекулярного поля Вейсса H_W . Обычно в H_W выделяют зависимость от намагниченности и пишут:

$$H_W = \frac{1}{2} \sigma_{1/2} H'_W, \quad H'_W = \frac{1}{\mu} J(0), \quad (21.15)$$

величину H'_W называют константой молекулярного поля.

Используя обозначения (21.14), (21.15), запишем уравнение (21.11) в стандартной форме:

$$m = m_0 \operatorname{th} \frac{\mu H + m H'_W}{2\theta}, \quad (21.16)$$

где $m = \frac{1}{2} \mu \sigma_{1/2}$ — намагниченность при температуре θ , а $m_0 = \frac{1}{2} \mu$ — намагниченность насыщения на один узел.

Из (21.14) видим, что молекулярное поле имеет ясный физический смысл: это — величина размерности магнитного поля, пропорциональная средней энергии обменного взаимодействия на один узел $J(0)$ и относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$. Из определения (21.14) или (21.15) видно также, что введение молекулярного поля является весьма грубым приближением к действительности. Поэтому при использовании его можно рассчитывать только на получение общей качественной картины.

Анализ уравнений молекулярного поля общеизвестен, и его можно найти в любом учебнике (см., например,

книгу С. В. Вонсовского и Я. С. Шура (1948)). Поэтому мы ограничимся здесь формулировкой основных результатов.

Рассмотрим случай $H = 0$. Тогда уравнение (21.11) принимает вид

$$\sigma_{1/2} = \text{th} \frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \quad \left(\tau = \frac{4\theta}{J(0)} \right). \quad (21.17)$$

Во-первых, уравнение (21.17) имеет тривиальное решение $\sigma_{1/2} = 0$. Очевидно, что для него спонтанная намагниченность равна нулю.

Во-вторых, имеется нетривиальное решение $\sigma_{1/2} \neq 0$, если $\tau < \tau_c$, где τ_c — критическая температура или температура Кюри.

Рассмотрим поведение намагниченности в окрестности точки τ_c . Так как

$$\left(\frac{d}{d\sigma_{1/2}} \text{th} \frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \right)_{\sigma_{1/2}=0} = \tau^{-1} \quad \text{и} \quad \text{th} \frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \leq \frac{\sigma_{1/2}}{\tau},$$

то отсюда следует, что при $\tau \geq 1$ нет решения кроме тривиального. Критическая температура τ_c , при которой исчезает нетривиальное решение, равна

$$\tau_c = 1 \quad \text{или} \quad \theta_c = \frac{1}{4} J(0). \quad (21.18)$$

В окрестности точки Кюри правую часть уравнения (21.17) можно разложить в ряд по степеням аргумента и ограничиться первыми двумя членами разложения:

$$\text{th} y = y - \frac{y^3}{3} + O(y^5).$$

Это дает следующее приближенное выражение для температурной зависимости намагниченности в окрестности точки Кюри:

$$\sigma_{1/2} \cong \sqrt{3\tau^2(1-\tau)} \cong \sqrt{3(1-\tau)}. \quad (21.19)$$

Отсюда следует, что точка Кюри является точкой фазового перехода второго рода. Это согласуется с результатами термодинамической теории фазовых переходов для ферромагнетиков (Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц (1959)).

Если $\tau \rightarrow 0$, то для $\sigma_{1/2}$ нетрудно получить следующее асимптотическое выражение:

$$\sigma_{1/2} \sim 1 - 2e^{-\frac{2}{\tau}}. \quad (21.20)$$

В предыдущей главе мы отмечали, что при низких температурах намагниченность изотропного ферромагнетика меняется с температурой как $\tau^{3/2}$ (см. § 15). Поэтому при низких температурах приближение молекулярного поля, ведущее к экспоненциальной зависимости, является слишком грубым; оно передает только общую тенденцию приближения намагниченности к насыщению¹⁾.

Оценим теперь порядок величины молекулярного поля. Для типичных ферромагнетиков температуры Кюри $T_C \sim 10^3$ °K (см. табл. 3), $\mu \sim 10^{-20}$ СГСМ (см. табл. 7). Подставляя эти значения в (21.15), получаем при учете (21.18)

$$H'_W = 4 \frac{kT_C}{\mu} \sim 10^7 \text{ э.} \quad (21.21)$$

Это чрезвычайно большие поля. Поэтому ниже точки Кюри намагниченность ферромагнетиков близка к намагниченностям насыщения.

В заключение следует подчеркнуть, что величины H_W или H'_W только формально входят как некоторое поле; фактически мы имеем дело с электростатическим взаимодействием электронов.

§ 22. Ферримагнетики

Ферримагнетики обычно моделируются совокупностью нескольких ферромагнитных подрешеток, между которыми имеется обменное взаимодействие того или иного знака. Мы рассмотрим здесь распространение приближения молекулярного поля на двухподрешеточную систему. Как и в предыдущем случае, для вывода

¹⁾ Уточнение теории молекулярного поля, дающее сдвиг точки Кюри и полученное на основе связи вариационного принципа с диаграммной техникой см. в работе Ю. Г. Рудого (1970) (см. также примечание 1 к Дополнению на стр. 493) (*Прим. ред.*)

уравнений используем минимальный принцип для свободной энергии (см. § 20).

Ограничимся случаем магнитно-изотропного кристалла. Обозначим через f и g узлы первой и второй подрешеток и условимся считать, что внутри подрешеток имеет место ферромагнитное упорядочение, а между подрешетками — антиферромагнитное. В соответствии с этим положим:

$$I(f_1 - f_2) \geq 0, \quad I(g_1 - g_2) \geq 0, \quad I(f - g) \leq 0. \quad (22.1)$$

Величины, относящиеся к первой и второй подрешеткам, будем отмечать индексами 1 и 2. Через N_i , S_i , μ_i обозначим число атомов в подрешетке, величину спина и магнитный момент атома сорта i . В общем случае $N_1 \neq N_2$, $S_1 \neq S_2$, $\mu_1 \neq \mu_2$, так что магнитные моменты подрешеток различны. Без нарушения общности будем считать, что

$$M_{10} > M_{20} \quad (M_{10} = N_1 S_1 \mu_1, \quad M_{20} = N_2 S_2 \mu_2), \quad (22.2)$$

$$H^a = H \delta_{a,z} \quad (a = x, y, z)$$

(H — внешнее магнитное поле).

Запишем гамильтониан системы в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\mu_1 \sum (H, S_f) - \mu_2 \sum (H, S_g) - \\ & - \frac{1}{2} \sum I(f_1 - f_2) (S_{f_1}, S_{f_2}) - \frac{1}{2} \sum I(g_1 - g_2) (S_{g_1}, S_{g_2}) - \\ & - \sum I(f - g) (S_f, S_g), \quad (22.3) \end{aligned}$$

где S_f , S_g — спиновые операторы атомов первой и второй подрешеток.

Перейдем по формулам (5.8) — (5.10), (5.16) к операторам S_f^z , S_f^\pm и предположим, что в каждой из подрешеток спины ориентированы параллельно друг другу. Тогда для классических векторов γ , входящих в коэффициенты преобразования (5.8), можно положить:

$$\gamma_f^a = \gamma_1^a, \quad \gamma_g^a = \gamma_2^a \quad (a = x, y, z), \quad (22.4)$$

$$\sum_a (\gamma_1^a)^2 = 1, \quad \sum_a (\gamma_2^a)^2 = 1.$$

В результате для $\tilde{\mathcal{H}}$ получим выражение

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = & \mathcal{E}_0 + \sum a_1 n_f + \sum a_2 n_g - \\ & - \frac{1}{2} \sum \gamma_1^2 I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2} - \frac{1}{2} \sum \gamma_2^2 I(g_1 - g_2) n_{g_1} n_{g_2} - \\ & - \sum (\gamma_1, \gamma_2) I(f - g) n_f n_g + \mathcal{H}' \quad (22.5) \\ & (n_h = 0, \dots, 2S_h \quad (h = f, g)), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0 = & -N_1 \mu_1 S_1(\gamma_1, H) - N_2 \mu_2 S_2(\gamma_2, H) - \\ & - \frac{1}{2} N_1 J_{11}(0) S_1^2 \gamma_1^2 - \frac{1}{2} N_2 J_{22}(0) S_2^2 \gamma_2^2 - N_1 J_{12}(0) S_1 S_2(\gamma_1, \gamma_2), \end{aligned} \quad (22.6)$$

$$N_1 J_{11}(0) = \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2),$$

$$N_1 J_{12}(0) = N_2 J_{21}(0) = \sum_{f, g} I(f - g), \dots,$$

$$a_1 = \mu_1(\gamma_1, H) + J_{11}(0) S_1 \gamma_1^2 + J_{12}(0) S_2(\gamma_1, \gamma_2), \quad (22.7)$$

$$a_2 = \mu_2(\gamma_2, H) + J_{22}(0) S_2 \gamma_2^2 + J_{21}(0) S_1(\gamma_1, \gamma_2).$$

\mathcal{H}' — не диагональная по числам заполнений n_h часть оператора $\tilde{\mathcal{H}}$.

Получим теперь уравнения молекулярного поля для рассматриваемой системы. С этой целью воспользуемся минимальным принципом для свободной энергии в виде (20.37).

Разобьем гамильтониан (22.5) на две части:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (22.8)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \mathcal{E}_0 + \sum a_1 n_f + \sum a_2 n_g, \\ \mathcal{H}_1 = & \tilde{\mathcal{H}} - \mathcal{H}_0. \end{aligned} \quad (22.9)$$

Неопределенные параметры α_1, α_2 определим из условия минимума модельной энергии (20.37). Вычислим прежде всего модельную свободную энергию.

Так как гамильтониан \mathcal{H}_0 (22.9) распадается на сумму индивидуальных гамильтонианов для каждого узла, то легко видеть, что

$$Q_0 = \text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\Phi}} \right) = e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\Phi}} \left(\sum_{n=0}^{2S_1} e^{-\frac{a_1 n}{\Phi}} \right)^{N_1} \left(\sum_{n=0}^{2S_2} e^{-\frac{a_2 n}{\Phi}} \right)^{N_2}.$$

Отсюда

$$F(\mathcal{H}_0) = \mathcal{E}_0 - N_1 \theta \ln \left(\sum_{n=0}^{2S_1} e^{-\frac{\alpha_1}{\theta} n} \right) - N_2 \theta \ln \left(\sum_{n=0}^{2S_2} e^{-\frac{\alpha_2}{\theta} n} \right). \quad (22.10)$$

Принимая во внимание эквивалентность узлов каждой из подрешеток, имеем далее:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H}_1 \rangle &= \frac{\text{Sp} \left(\mathcal{H}_1 e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\theta}} \right)}{\text{Sp} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{\theta}} \right)} = \\ &= N_1 (a_1 - \alpha_1) \bar{n}_1 + N_2 (a_2 - \alpha_2) \bar{n}_2 - \frac{N_1}{2} J_{11}(0) \gamma_1^2 \bar{n}_1^2 - \\ &\quad - \frac{N_2}{2} J_{22}(0) \gamma_2^2 \bar{n}_2^2 - N_1 J_{12}(0) (\gamma_1, \gamma_2) \bar{n}_1 \bar{n}_2, \quad (22.11) \end{aligned}$$

где

$$\bar{n}_i = B_{S_i} \left(\frac{\alpha_i}{\theta} \right) \quad (i = 1, 2), \quad (22.12)$$

$$B_S(x) = \frac{\sum_{n=0}^{2S} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{2S} e^{-nx}} \quad (22.13)$$

(B_S — функция Бриллюэна).

Модельная свободная энергия равна сумме выражений (22.10) и (22.11):

$$F_{\text{mod}}(\tilde{\mathcal{H}}) = F(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H}_1 \rangle. \quad (22.14)$$

Из условия минимума выражения (22.14) получаем уравнения для определения величин α_i , γ_i :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \alpha_i} &= \left(\frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \alpha_i} \right)_{\bar{n}_i} + \sum_j \left(\frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \bar{n}_j} \right)_{\alpha_i} \frac{\partial \bar{n}_j}{\partial \alpha_i} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial \gamma_i^\alpha} \left(F_{\text{mod}} - \frac{1}{2} \sum_{i, \beta} \lambda_i N_i (\gamma_i^\beta)^2 \right) &= \\ &= \left(\frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \gamma_i^\alpha} \right)_{\bar{n}_j} + \sum_j \left(\frac{\partial F_{\text{mod}}}{\partial \bar{n}_j} \right)_{\gamma^\alpha} \frac{\partial \bar{n}_j}{\partial \gamma_i^\alpha} - \lambda_i N_i \gamma_i^\alpha = 0 \end{aligned}$$

(λ_i — неопределенные множители Лагранжа).

Замечая, что $\left(\frac{\partial F}{\partial \alpha_i}\right)_{\bar{n}_i} = 0$, и принимая во внимание

явный вид величин α_i (22.7), получаем отсюда следующую систему уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \mu_1(\gamma_1, H) + J_{11}(0) S_1 \sigma_1 \gamma_1^2 + J_{12}(0) S_2 \sigma_2 (\gamma_1, \gamma_2), \\ \alpha_2 &= \mu_2(\gamma_2, H) + J_{21}(0) S_1 \sigma_1 (\gamma_2, \gamma_1) + J_{22}(0) S_2 \sigma_2 \gamma_2^2, \end{aligned} \right\} \quad (22.15)$$

$$\left. \begin{aligned} (J_{11}(0) S_1^2 \sigma_1^2 + \lambda_1) \gamma_1^\alpha + J_{12}(0) S_1 S_2 \sigma_1 \sigma_2 \gamma_2^\alpha &= -S_1 \sigma_1 \mu_1 H \delta_{\alpha, z}, \\ J_{21}(0) S_2 S_1 \sigma_2 \sigma_1 \gamma_1^\alpha + (J_{22}(0) S_2^2 \sigma_2^2 + \lambda_2) \gamma_2^\alpha &= -S_2 \sigma_2 \mu_2 H \delta_{\alpha, z}, \\ \sum_{\alpha} (\gamma_1^\alpha)^2 &= 1, \quad \sum_{\alpha} (\gamma_2^\alpha)^2 = 1, \end{aligned} \right\} \quad (22.16)$$

где $\sigma_i = S_i^{-1} \langle S_{h_i} \rangle = 1 - \frac{\bar{n}_i}{S_i}$ — относительная намагниченность на один узел в подрешетке i ; согласно (22.12) она равна

$$\sigma_i = 1 - S_i^{-1} B_{S_i} \left(\frac{\alpha_i}{\Phi} \right) \quad (i = 1, 2). \quad (22.17)$$

где B_S — функция Бриллюэна (22.13).

Система уравнений (22.15) — (22.17) и представляет искомые уравнения молекулярного поля для двухподрешеточного изотропного ферримагнетика.

В частном случае $S_1 = S_2 = 1/2$ уравнения вида (22.15) — (22.17) были получены таким путем А. А. Гусевым (1959). Для этого случая ($S = 1/2$) мы имеем:

$1 - 2B_{1/2} \left(\frac{\alpha}{\Phi} \right) = \text{th} \frac{\alpha}{2\Phi}$ и уравнения (22.17) принимают стандартный вид:

$$\sigma_1 = \text{th} \frac{\alpha_1}{2\Phi}, \quad \sigma_2 = \text{th} \frac{\alpha_2}{2\Phi}. \quad (22.18)$$

Равновесные конфигурации спиновых моментов определяются из решения системы уравнений (22.16). При $\sigma_i = 1$ она совпадает с системой уравнений, определяющих равновесные конфигурации спинов для нуля температуры в методе приближенного вторичного квантования (см. § 16). Поэтому можно воспользоваться здесь известными результатами, рассматривая парциальные намагниченности σ_i как некоторые параметры.

Введем для удобства следующие обозначения для намагниченностей подрешеток:

$$M_i^a = M_i \gamma_i^a, \quad M_i = M_{i0} \sigma_i = N_i S_i \mu_i \sigma_i, \quad (22.19)$$

результатирующая намагниченность равна, очевидно,

$$M^z = M_1^z + M_2^z. \quad (22.20)$$

Принимая во внимание условие минимума свободной энергии, нетрудно показать, что в зависимости от величины внешнего поля реализуется одно из следующих решений.

а) *Слабые поля*: $0 \leq H \leq H'_1$. В этом случае

$$\gamma_1^z = 1, \quad \gamma_2^z = -1; \quad (22.21)$$

магнитные моменты подрешеток расположены антипараллельно друг другу, результирующий момент ориентирован по полю и равен

$$M = M_1 - M_2 = M_{10} \sigma_1 - M_{20} \sigma_2. \quad (22.22)$$

Система уравнений (22.15) — (22.17) сводится к следующей:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \mu_1 H + J_{11}(0) S_1 \sigma_1 + |J_{12}(0)| S_2 \sigma_2, \\ \alpha_2 &= -\mu_2 H + |J_{21}(0)| S_1 \sigma_1 + J_{22}(0) S_2 \sigma_2, \end{aligned} \right\} \quad (22.23)$$

$$\sigma_i = 1 - S_i^{-1} B_{S_i} \left(\frac{\alpha_i}{\Phi} \right) \quad (i = 1, 2). \quad (22.24)$$

Обычно в приближении молекулярного поля рассматривается случай «слабых» полей, в связи с чем в литературе под уравнениями молекулярного поля понимают уравнения вида (22.23) — (22.24). При феноменологическом выводе этих уравнений величины, соответствующие средним значениям обменных интегралов I , вводятся как некоторые константы.

б) *Промежуточные поля*: $H'_1 \leq H \leq H'_2$. В этом случае

$$\begin{aligned} \gamma_1^x &= -\frac{J_{12}(0) S_2 \sigma_2 \mu_2}{J_{21}(0) S_1 \sigma_1 \mu_1} \gamma_2^x, & \gamma_1^y &= -\frac{J_{12}(0) S_2 \sigma_2 \mu_2}{J_{21}(0) S_1 \sigma_1 \mu_1} \gamma_2^y, \\ \gamma_1^z &= -\frac{\mu_2 H}{J_{21}(0) S_1 \sigma_1} - \frac{J_{12}(0) S_2 \sigma_2 \mu_2}{J_{21}(0) S_1 \sigma_1 \mu_1} \gamma_2^z \end{aligned} \quad (22.25)$$

или в компонентах векторов намагниченностей подрешеток

$$\begin{aligned} M_1^x + M_2^x &= 0, \quad M_1^y + M_2^y = 0, \\ M^z &= M_1^z + M_2^z = \frac{1}{S_1 S_2} \sqrt{M_{10} M_{20}} \frac{H}{H_e}. \end{aligned} \quad (22.26)$$

в) *Сильные поля*: $H \geq H'_2$. В случае сильных полей $\gamma_1^z = \gamma_2^z = 1$ и результирующая намагниченность равна

$$M^z = M_1^z + M_2^z = M_{10} \sigma_1 + M_{20} \sigma_2. \quad (22.27)$$

Критические поля H'_1 , H'_2 , при которых происходит переход от одной конфигурации к другой, приближенно имеют следующий вид:

$$H'_1 \cong \frac{M_1 - M_2}{\sqrt{M_{10} M_{20}}} H_e, \quad H'_2 \cong \frac{M_1 + M_2}{\sqrt{M_{10} M_{20}}} H_e, \quad (22.28)$$

$$H_e = \sqrt{\frac{N_1 J_{12}(0) N_2 J_{21}(0)}{M_1 M_2}} = \sqrt{\frac{J_{12}(0) J_{21}(0)}{S_1 \mu_1 S_2 \mu_2}}, \quad (22.29)$$

где M_i , M_{i0} — намагниченность при данной температуре и намагниченность насыщения подрешетки i (см. (22.2) и (22.17)). Для нуля температуры значения H'_1 , H'_2 совпадают с соответствующими значениями, полученными при определении устойчивых спиновых конфигураций в методе приближенного вторичного квантования.

§ 23. Приложения метода молекулярного поля

Теоретический анализ магнитных характеристик ферромагнетиков на основе модели нескольких связанных ферромагнитных подрешеток впервые был проведен Неелем (1932), (1936), (1948) и Ван-Флеком (1941), (1951) в приближении молекулярного поля, введившего феноменологически. Позднее эти результаты были уточнены Яфетом и Киттелем (1952). К. Б. Власов и Б. Х. Ишмухаметов (1954) дали квантовомеханический вывод уравнений молекулярного поля для ферромагнетиков методом энергетических центров тяжести. Вариационный принцип в приведенной выше формулировке был распространен И. А. Квасниковым (1957) на случай антиферромагнетиков, А. А. Гусевым (1959), (1960)

на двухподрешеточную модель ферромагнетика и А. А. Гусевым и А. С. Пахомовым (1961), (1963) — на трехподрешеточную модель.

Применения метода молекулярного поля никоим образом не исчерпываются упомянутыми работами. Многочисленные приложения метода в теории антиферромагнетизма и ферримагнетизма имеются, например, в сборниках (1952), (1956), (1961), обзорах А. С. Боровика-Романова (1962), А. С. Пахомова и Н. А. Смолькова (1962) и монографии Смита и Вейна (1962) и Смарта (1968).

§ 24. Теория возмущений для высоких температур

Элементарная теория. Приближение молекулярного поля применимо в области температур, близких к температуре Кюри. В окрестности точки Кюри оно дает результаты, совпадающие с результатами термодинамического рассмотрения (см. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц (1959)).

Для температур выше точки Кюри можно считать, что средняя энергия обменного взаимодействия мала по сравнению с тепловой энергией: $J(0)/\theta \ll 1$. Тогда это отношение можно рассматривать как малый параметр теории и использовать метод теории возмущений для вычисления свободной энергии системы.

Запишем гамильтониан системы в виде

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}', \quad (24.1)$$

где $\varepsilon \mathcal{H}'$ — «малое» возмущение.

Свободную энергию (8.13) перепишем следующим образом:

$$F = \mathcal{E}_0 - \theta \ln \text{Sp } U_\beta \quad (\beta = \theta^{-1}), \quad (24.2)$$

где

$$U_\beta = e^{-\beta (\mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}')}. \quad (24.3)$$

Представим теперь U_β в виде ряда по степеням ε с помощью термодинамической теории возмущений. При этом будем считать, что свободная энергия и средние от различных операторов для невозмущенной системы известны.

Величину U_β (24.3) можно рассматривать как решение уравнения

$$\frac{dU_\beta}{d\beta} = -(\mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}') U_\beta \quad (24.4)$$

при начальном условии $U_0 = 1$. Произведем в (24.4) подстановку

$$U_\beta = e^{-\beta \mathcal{H}_0} \mathcal{U}_\beta. \quad (24.5)$$

Для новой неизвестной функции \mathcal{U}_β получим уравнение

$$\frac{d\mathcal{U}_\beta}{d\beta} = -\varepsilon \mathcal{H}'(\beta) \mathcal{U}_\beta, \quad \mathcal{U}_{\beta=0} = 1, \quad (24.6)$$

где введено обозначение

$$\mathcal{H}'(\beta) = e^{\beta \mathcal{H}_0} \mathcal{H}' e^{-\beta \mathcal{H}_0}. \quad (24.6a)$$

Интегрируя это уравнение по методу последовательных приближений, получим решение в виде ряда по степеням ε :

$$\mathcal{U}_\beta = \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \varepsilon^p \int_0^\beta \dots \int_0^{\beta_{p-1}} d\beta_1 \dots d\beta_p \mathcal{H}'(\beta_1) \mathcal{H}'(\beta_2) \dots \mathcal{H}'(\beta_p). \quad (24.7)$$

Очевидно, что статистическая сумма равна следующей величине:

$$Q = \text{Sp } U_\beta = Q_0 \langle \mathcal{U}_\beta \rangle, \quad (24.8)$$

где символ $\langle \dots \rangle$ обозначает, в отличие от остальных параграфов, усреднение по статистическому оператору с невозмущенным гамильтонианом,

$$\langle \mathcal{U}_\beta \rangle = \frac{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_0} \mathcal{U}_\beta)}{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_0})}, \quad Q_0 = \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}_0}). \quad (24.9)$$

Выражение для свободной энергии переписывается следующим образом:

$$F = \mathcal{E}_0 - \theta \ln Q_0 - \theta \ln \langle \mathcal{U}_\beta \rangle. \quad (24.10)$$

Таким образом, задача вычисления свободной энергии в виде ряда по степеням возмущения свелась к вычислению среднего значения оператора \mathcal{U}_β (24.7).

Вычислим шпур (24.9) в базисной системе собственных функций невозмущенного гамильтониана \mathcal{H}_0 . Обозначим через \mathcal{E}_v , C_v собственные значения и собственные функции оператора \mathcal{H}_0 . Интегрирование по β_i в (24.7) при этом легко выполняется, и мы получаем следующее выражение:

$$\langle \mathcal{U}_\beta \rangle = \sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon^p x_p, \quad (24.11)$$

где

$$\begin{aligned} x_0 &= 1, \quad x_1 = -\beta Q_0^{-1} \sum_v e^{-\beta \mathcal{E}_v} \mathcal{H}'_{vv}, \\ x_2 &= Q_0^{-1} \sum_{\mu, v} e^{-\beta \mathcal{E}_v} \mathcal{H}'_{v\mu} \mathcal{H}'_{\mu v} \frac{e^{\beta (\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_\mu)} - 1 - \beta (\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_\mu)}{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_\mu)^2}, \dots, \\ \mathcal{H}'_{v\mu} &= (C_v^*, \mathcal{H}' C_\mu). \end{aligned} \quad (24.12)$$

В случае высоких температур $\beta(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_\mu)$ в экспонентах формул (24.12) можно считать малыми величинами. Поэтому приближенно

$$x_2 = \frac{\beta^2}{2} Q_0^{-1} \sum_{v, \mu} e^{-\beta \mathcal{E}_v} \mathcal{H}'_{v\mu} \mathcal{H}'_{\mu v} + O(\beta^3). \quad (24.13)$$

Подставим (24.11) в (24.10) и разложим правую часть полученного выражения в ряд по степеням ε . В результате для свободной энергии получаем следующее выражение:

$$F = \mathcal{E}_0 - \vartheta \ln Q_0 - \varepsilon \vartheta x_1 - \varepsilon^2 \vartheta \left(x_2 - \frac{x_1^2}{2} \right) - O(\varepsilon^3). \quad (24.14)$$

Применим полученные результаты к расчету намагниченности изотропного ферромагнетика со спином $S = 1/2$. Запишем гамильтониан в виде (24.1), полагая

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N J(0), \quad (24.15)$$

$$\mathcal{H}_0 = \left(\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right) \sum_f n_f, \quad (24.16)$$

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2} - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}. \quad (24.17)$$

Проведем вычисления с точностью до членов порядка ϵ^2 включительно. Ограничимся приближением ближайших соседей, тогда величины x_1 , x_2 легко вычисляются:

$$\begin{aligned} x_1 &= N \frac{Iz}{2\theta} \bar{n}^2, \\ x_2 &= N \frac{I^2 z}{4\theta^2} \bar{n} (1 - \bar{n}) \left\{ \frac{1}{2} + \bar{n} (1 - \bar{n}) + 2z\bar{n}^2 \right\} + N^2 \frac{I^2 z^2}{8\theta^2} \bar{n}^4, \end{aligned} \quad (24.18)$$

$$\bar{n} = \left(e^{\frac{a}{\theta}} + 1 \right)^{-1}, \quad a = \mu H + \frac{1}{2} Iz, \quad I = \frac{1}{z} J(0),$$

где z — число ближайших соседей, I — обменная энергия взаимодействия двух соседних спинов.

Подставляя (24.15), (24.18) в (24.14), получаем следующее выражение для свободной энергии во втором приближении термодинамической теории возмущений:

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N I z - N \theta \ln \left(1 + e^{-\frac{a}{\theta}} \right) - \\ &- \frac{\epsilon}{2} N I z \bar{n}^2 - \frac{\epsilon^2}{4\theta} N I^2 z \bar{n} (1 - \bar{n}) \left\{ \frac{1}{2} + \bar{n} (1 - \bar{n}) + 2z\bar{n}^2 \right\}. \end{aligned} \quad (24.19)$$

Заметим, что в ходе вычислений F при использовании формул (24.7), (24.9) появляются нефизические члены, содержащие степени числа частиц N (или объема системы) выше первой. Только в окончательном результате они исчезают за счет полной компенсации друг друга в каждом порядке ряда теории возмущений. В нашем случае слагаемое N^2 в x_2 компенсируется слагаемым $x_1^2/2$ в (24.14) и т. д.

В области высоких температур малой величиной является разность

$$t = 1 - 2\bar{n} = \text{th} \frac{a}{2\theta}. \quad (24.20)$$

Поэтому выражение для F удобнее переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N I z - N \theta \ln \left(1 + e^{-\frac{a}{\theta}} \right) - \\ &- \frac{\epsilon}{8} N I z (1 - t)^2 - \frac{\epsilon^2}{16\theta} N I^2 z (1 - t^2) \left(\frac{1}{2} + \frac{1 - t^2}{4} + \frac{z}{2} (1 - t)^2 \right). \end{aligned} \quad (24.21)$$

Отсюда для относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$ получаем дифференцированием по H следующее выражение:

$$\sigma_{1/2} = -\frac{2}{N\mu} \frac{\partial F}{\partial H} = t - \varepsilon(1-t^2)(1-t)(4\tau)^{-1} - \\ - \varepsilon^2(1-t^2)\left(1 + \frac{2t}{z} - 3t^2 + \frac{2z-1}{z}t^3\right)(4\tau)^{-2} + O(\varepsilon^3), \quad (24.22)$$

где введены обозначения:

$$\tau = \frac{\phi}{Iz}, \quad h = \frac{\mu H}{Iz}, \quad t = \text{th} \frac{2h + \varepsilon}{4\tau}. \quad (24.23)$$

Легко видеть, что разложение для намагниченности по степеням малого параметра (24.22), по существу, представляет разложение по обратным степеням температуры: $\tau = \phi/Iz$.

Обычно в качестве \mathcal{H}_0 берут оператор зеемановской энергии: $-\mu H \sum n_f$. Чтобы перейти к этому случаю, положим $t = \text{th} \frac{2h + \varepsilon}{4\tau}$ и доразложим в (24.22) коэффициенты при разных степенях ε . При этом получим:

$$\sigma_{1/2} = t_0 + \varepsilon(1-t_0^2)\frac{t_0}{4\tau} + \\ + \varepsilon^2(1-t_0^2)\left(\frac{z-2}{z} - \frac{2z-1}{z}t_0^2\right)\frac{t_0}{(4\tau)^2} + O(\varepsilon^3), \quad (24.24)$$

где

$$t_0 = \text{th} \frac{h}{2\tau}. \quad (24.25)$$

Впервые разложение (24.24) было получено В. Опеховским (1937) именно таким способом. Общий недостаток этой элементарной теории возмущений — появление в процессе расчета нефизических членов, пропорциональных степеням N выше первой. В последнее время теория возмущений для больших систем в работах Ван Хоа (1955), (1956), Голдстоуна (1957), Гугенгольца (1957, а, б), Дайсона (1956, а), Блоха и де Доминиса (1958) была усовершенствована таким образом, что нефизические члены вообще не появляются при расчетах. Этот вариант теории возмущений в теории магнетизма был использован Ю. Г. Рудым (1963) для исследования высокотемпературных разложений. В работе Стинчкомба и др. (1963) в рамках теории возмущений были исследованы случаи как высоких, так и низких температур.

По разложению (24.24) легко найти выражение для восприимчивости в виде ряда по обратным степеням температуры:

$$\chi_{1/2} = \mu \left(\frac{\partial \sigma_{1/2}}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{\mu^2}{4\theta} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{(4\tau)^n}; \quad (24.26)$$

первые три коэффициента имеют вид

$$a_0 = 1, \quad a_1 = 1, \quad a_2 = \frac{z-1}{z}. \quad (24.27)$$

В случае произвольного спина ($S \geq 1/2$):

$$\chi_S = \frac{\mu^2 S(S+1)}{3\theta} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(\frac{S(S+1)}{3\tau} \right)^n; \quad (24.28)$$

коэффициенты a_0, a_1, a_2 определяются согласно (24.27).

Примем во внимание, что для восприимчивости выше точки Кюри имеет место закон Кюри — Вейсса (1.1). Поэтому можно определить температуру Кюри как нуль обратной восприимчивости: $\chi^{-1}(\theta_C) = 0$. Значения температуры Кюри в четвертом и пятом порядках теории возмущений были определены таким способом Брауном и Латтинджером (1955) и Брауном (1956). В табл. 9 приведены значения температуры Кюри в единицах Iz для простой кубической, объемноцентрированной и гранецентрированной решеток.

Поведение восприимчивости в окрестности точки Кюри. В грубом приближении ряд теории возмущений для χ (24.28) можно аппроксимировать выражением вида (1.1) (закон Кюри — Вейсса). Действительно, ограничиваясь в (24.28) первыми тремя слагаемыми и пренебрегая отличием коэффициента a_2 от единицы, будем иметь:

$$\begin{aligned} \chi_S &\cong \frac{\mu^2 S(S+1)}{3\theta} \left\{ 1 + \left(\frac{3\tau}{S(S+1)} \right)^{-1} + \left(\frac{3\tau}{S(S+1)} \right)^{-2} + O(\tau^{-3}) \right\} = \\ &= \frac{\mu^2 S(S+1)}{3\theta} \frac{1}{1 - \theta/\theta_{Cp}} + O(\theta^{-4}), \end{aligned} \quad (24.29)$$

где

$$\theta_{Cp} = \frac{S(S+1)}{3} Iz \quad (24.30)$$

— парамагнитная температура Кюри.

Таблица 9

Значения температуры ϑ_C в единицах Iz

Значения ϑ_C рассчитаны по статистической теории возмущений (I — обменный интеграл для ближайших соседей, z — их число)*)

Тип решетки	Спин					
	$1/2$	1	$3/2$	2	$5/2$	3
Простая кубическая	0,161	0,447	0,886	1,455	2,151	2,978
Объемноцентрированная кубическая	0,149	0,488	0,964	1,573	2,319	3,199
Гранецентрированная кубическая	0,177	0,531	1,028	1,667	2,447	3,370

*) Приводятся по данным Брауна и Латтинжера (1955). В работе Брауна (1956) приводятся несколько улучшенные ϑ_C , полученные из пятого приближения.

Более детальный анализ ряда теории возмущений¹⁾ приводит к выводу, что восприимчивость имеет в точке Кюри особенность другого вида, чем (24.29). В работах по этому вопросу исследовалось поведение восприимчивости для изотропного ферромагнетика при учете взаимодействия только ближайших соседей. Домб и Сайкс (1962) для анализа температурной зависимости восприимчивости вычислили коэффициенты a_n (24.28), подобрали для них асимптотические выражения и по ним восстановили поведение χ в окрестности точки Кюри. Гаммель и др. (1963) определили зависимость χ от температуры, приближая выражение для нее с помощью так называемых аппроксимантов Паде. Мы приведем только общие сведения о результатах этих работ, поскольку более полное изложение потребовало бы проведения довольно громоздких расчетов. При этом ради большей простоты используем метод аппроксимантов Паде.

¹⁾ См. работы Домба и Сайкса (1962), Гаммеля и др. (1963); там же приводятся ссылки на более ранние работы.

Рассмотрим какую-либо функцию $f(x)$, представимую в виде ряда

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n, \quad C_0 = 1. \quad (24.31)$$

Будем называть аппроксимантом Паде $P_n^m(x)$ для функции $f(x)$ дробно-рациональную функцию

$$P_n^m(x) = \frac{A_m(x)}{B_n(x)} = \frac{1 + a_1 x + \dots + a_m x^m}{1 + b_1 x + \dots + b_n x^n}, \quad (24.32)$$

коэффициенты которой, a_p, b_q , определяются из условия обращения в нуль коэффициентов при степенях x , до степени x^{m+n} включительно, у функции

$$f(x) B_n(x) - A_m(x). \quad (24.33)$$

Если $f(x)$ — полином степени L , то $m + n < L$.

Пусть известны первые L коэффициентов ряда. В этом случае можно найти явный вид аппроксимантов $P_n^m(x)$ и по ним восстановить поведение функции $f(x)$ ¹⁾.

В работе Гаммеля и др. (1963) для интерполяции были взяты функции $\ln \chi$ и $\chi^{3/4}$. Численные значения первых коэффициентов C_n ($n = 1, 2, \dots, 5$), необходимые для расчетов, были определены по коэффициентам разложения χ по ϑ^{-1} , найденным Рашбруком и Вудом (1958). В результате удалось установить, что температурная зависимость начальной восприимчивости (при $H \rightarrow 0$) с довольно большой точностью описывается формулой

$$\chi \sim (\vartheta - \vartheta_c)^{-1/2}. \quad (24.34)$$

Аналогичный результат получается и другими методами (с такой же степенью строгости); в настоящее время принято считать, что он надежно установлен.

Бейкер и др. (1964, 1967) развили метод построения высокотемпературных разложений с помощью неприводимых представлений групп симметрии. Войтович и Джозеф (1964) построили разложение для случая, когда учитываются взаимодействия первых и вторых соседей [см. также Чен и Джозеф (1972) (Ред.)].

¹⁾ Относительно деталей этого метода см. работы Бейкера и Гаммеля (1961) и Бейкера и др. (1961, 1965).

ГЛАВА VII

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА

В этой главе мы перейдем к изложению метода двух-временных температурных функций Грина (запаздывающих и опережающих)¹⁾. Этот метод получил широкое распространение в статистической механике в связи с тем, что он дает эффективное средство как для вычисления наблюдаемых макроскопических характеристик системы, так и микроскопических (например, энергий элементарных возбуждений и времен их жизни). Метод функций Грина удобен также при вычислении кинетических коэффициентов, таких, как электропроводность, восприимчивость и др. При этом полученные результаты оказываются применимыми в широком интервале температур. Ниже будут приведены основные сведения о функциях Грина и развит аппарат, необходимый для решения конкретных задач.

§ 25. Временные корреляционные функции и функции Грина

Пусть $\mathcal{A}(t)$ и $\mathcal{B}(t')$ — какие-либо операторы в гейзенберговском представлении:

$$\mathcal{A}(t) = e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{A}(0) e^{-i\mathcal{H}t}, \quad \mathcal{B}(t') = e^{i\mathcal{H}t'} \mathcal{B}(0) e^{-i\mathcal{H}t'}, \quad (25.1)$$

¹⁾ Заметим, что широко используются также температурные функции Грина, предложенные Мацубара (1955). С изложениями различных вариантов метода функций Грина и их многочисленными применениями в других областях статистической механики можно ознакомиться по обзорам Д. Н. Зубарева (1960), А. И. Алексеева (1961) и книгам В. Л. Бонч-Бруевича и С. В. Тябликова (1961) и А. А. Абрикосова, Л. П. Горькова и И. Е. Дзялошинского (1962).

где \mathcal{H} — гамильтониан системы. Условимся считать, что \mathcal{H} включает в себя слагаемое — $\lambda \mathcal{N}$ (λ — химический потенциал, \mathcal{N} — оператор полного числа частиц в системе). В общем случае операторы \mathcal{A} , \mathcal{B} являются произведениями квантованных волновых функций или операторов порождения и уничтожения частиц.

Уравнения движения для операторов имеют вид:

$$i \frac{d\mathcal{A}(t)}{dt} = [\mathcal{A}(t), \mathcal{H}] = \mathcal{A}(t)\mathcal{H} - \mathcal{H}\mathcal{A}(t). \quad (25.2)$$

Вообще говоря, коммутатор в правой части уравнения (25.2) содержит произведения большего числа операторов вторичного квантования, чем сам оператор \mathcal{A} .

Определим временные корреляционные функции соотношениями

$$F_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(t, t') = \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle, \quad (25.3)$$

где символ $\langle \dots \rangle$ обозначает, как обычно, статистическое усреднение с гамильтонианом \mathcal{H} (см. (8.4)).

Нетрудно видеть, что функции (25.3) зависят только от разностей временных аргументов. Действительно, в силу инвариантности шпура относительно циклической перестановки сомножителей имеем:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left\{ \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') e^{-\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \right\} &= \\ &= \text{Sp} \left\{ e^{i\mathcal{H}(t-t')} \mathcal{A}(0) e^{-i\mathcal{H}(t-t')} \mathcal{B}(0) e^{-\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ \mathcal{A}(0) e^{-i\mathcal{H}(t-t')} \mathcal{B}(0) e^{i\mathcal{H}(t-t')} e^{-\frac{\mathcal{H}t}{\hbar}} \right\}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$F_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(t, t') = F_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(t - t'). \quad (25.4)$$

При совпадении временных аргументов, $t = t'$, временные средние (25.3) переходят в обычные статистические средние:

$$F_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(t, t) = F_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(0) = \langle \mathcal{A}(0) \mathcal{B}(0) \rangle. \quad (25.5)$$

Дифференцируя корреляционную функцию по одному из аргументов, например по первому, можно получить уравнение, определяющее ее эволюцию во времени. Но так как в правой части будут стоять в общем случае

произведения большего числа операторов вторичного квантования, чем в исходном выражении, мы получим бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений для корреляционных функций все более высокого порядка:

$$i \frac{d}{dt} \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle = \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{H}] \mathcal{B}(t') \rangle; \\ i \frac{d}{dt} \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{H}] \mathcal{B}(t') \rangle = \langle [[\mathcal{A}(t), \mathcal{H}], \mathcal{H}] \mathcal{B}(t') \rangle; \dots \quad (25.6)$$

По структуре эта цепочка уравнений близка цепочкам уравнений для классических корреляционных функций, введенных Н. Н. Боголюбовым (1946). Эта система уравнений может быть использована для определения интересующих нас корреляционных функций путем обрыва ее тем или иным способом. Более удобным представляется определение временных корреляционных функций через так называемые функции Грина.

Определим двухвременные температурные запаздывающие (r), опережающие (a) и причинные (c) функции Грина соотношениями¹⁾:

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(t, t') = \langle \langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle \rangle^{(r)} = \theta(t - t') \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')] \rangle_{\eta}, \quad (25.7)$$

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(t, t') = \langle \langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle \rangle^{(a)} = -\theta(t' - t) \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')] \rangle_{\eta}, \quad (25.8)$$

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(t, t') = \langle \langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle \rangle^{(c)} = \langle T_{\eta} \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle, \quad (25.9)$$

¹⁾ Определения функций Грина вида (25.7) — (25.9) у различных авторов отличаются постоянным множителем в правой части. Так, у Д. Н. Зубарева (1960) $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \dots \rangle$; у В. Л. Бонч-Бруевича и С. В. Тябликова (1961) $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(t, t') = i\theta(t - t') \langle \dots \rangle$ и т. д.

Возможно также введение некоммутаторных функций Грина вида

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(t, t') = \theta(t - t') \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle; \dots$$

и многовременных функций Грина (см., например, В. Л. Бонч-Бруевич (1959), С. В. Тябликов и Пу Фу-чо (1961)).

где

$$[\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_{\eta} = \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') - \eta \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t), \quad (25.10)$$

$$T_{\eta} \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') = \theta(t - t') \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') + \eta \theta(t' - t) \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t), \quad (25.11)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (25.12)$$

Значение $\eta = 1$ или -1 выбирается из соображений удобства, независимо от вида перестановочных соотношений для операторов \mathcal{A} , \mathcal{B} . Обычно берут $\eta = 1$, если они представляются через бозе-операторы, и $\eta = -1$, если представляются через ферми-операторы.

Поскольку функции Грина определяются через временные корреляционные функции вида (25.3), они также зависят только от разности временных аргументов:

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(t, t') = G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(t - t') \quad (j = r, a, c). \quad (25.13)$$

По определению функция Грина $\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle^{(j)}$ зависит линейно от каждого из операторных аргументов, \mathcal{A} или \mathcal{B} , следовательно,

$$\langle\langle \alpha_1 \mathcal{A}_1 + \alpha_2 \mathcal{A}_2 | \mathcal{B} \rangle\rangle^{(j)} = \alpha_1 \langle\langle \mathcal{A}_1 | \mathcal{B} \rangle\rangle^{(j)} + \alpha_2 \langle\langle \mathcal{A}_2 | \mathcal{B} \rangle\rangle^{(j)}, \quad (25.14)$$

где α_1, α_2 — произвольные числа.

Составим теперь цепочку уравнений для функций Грина. Для этого продифференцируем по t выражения (25.7) — (25.9). Запишем разрывную функцию $\theta(t)$ следующим образом:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t e^{\varepsilon t'} \delta(t') dt' \quad (\varepsilon \rightarrow +0), \quad (25.15)$$

где $\delta(t)$ — δ -функция Дирака. Принимая во внимание, что

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \delta(t),$$

и уравнения движения (25.2) для операторов в гейзенберговском представлении, получаем:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(j)} = i \delta(t - t') \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_{\eta} \rangle + \\ + \langle\langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{H}] | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(j)} \quad (j = r, a, c). \quad (25.16)$$

Уравнения (25.16) отличаются от уравнений (25.6) для корреляционных функций наличием неоднородного слагаемого с δ -образными множителями. В результате мы имеем дело с уравнениями, подобными обычным уравнениям математической физики для функций влияния (функций Грина). По этой причине выражения вида (25.7) — (25.9) и называются функциями Грина.

Подобно уравнениям для временных корреляционных функций, в правой части уравнения (25.16) стоит функция Грина от произведений большего числа операторов, чем исходная. Дифференцируя по t функцию $\langle\langle[\mathcal{A}(t), \mathcal{H}]|\mathcal{B}(t')\rangle\rangle^{(j)}$, получим уравнение вида (25.16), в правую часть которого будет входить функция $\langle\langle[[\mathcal{A}(t), \mathcal{H}], \mathcal{H}]|\mathcal{B}(t')\rangle\rangle^{(j)}$. В результате мы приходим к бесконечной цепочке зацепляющихся уравнений для последовательности функций:

$$\langle\langle\mathcal{A}|\mathcal{B}\rangle\rangle^{(j)}; \langle\langle[\mathcal{A}, \mathcal{H}]|\mathcal{B}\rangle\rangle^{(j)}; \langle\langle[[\mathcal{A}, \mathcal{H}], \mathcal{H}]|\mathcal{B}\rangle\rangle^{(j)}; \dots$$

Отметим, что цепочка уравнений будет одной и той же для запаздывающих, опережающих и причинных функций Грина.

Перейдем к фурье-образам по времени для функций Грина:

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(E) e^{-iE(t-t')} dE, \quad (25.17)$$

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(t) e^{iEt} dt \quad (j=r, a, c).$$

Цепочка уравнений (25.16) принимает соответственно вид

$$E \langle\langle\mathcal{A}|\mathcal{B}\rangle\rangle_E^{(j)} = \frac{i}{2\pi} \langle[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_{\eta}\rangle + \langle\langle[\mathcal{A}, \mathcal{H}]|\mathcal{B}\rangle\rangle_E^{(j)}; \dots \quad (25.18)$$

В дальнейшем фурье-образы функций Грина по времени мы будем называть E -представлением для функций Грина или, когда это не ведет к недоразумениям, просто функциями Грина.

Для решения цепочки уравнений (25.16) нужно также задать граничные условия по t (различные для запаздывающих, опережающих и причинных функций). Вид

этих условий можно было бы попытаться установить из определений (25.7) — (25.9) самих функций Грина. Удобнее использование фурье-образов функций Грина по времени. В этом случае роль граничных условий играют спектральные представления для функций Грина или дисперсионные соотношения, которые определяют правила обхода полюсов фурье-образов функций Грина, а тем самым и граничные условия для них (см. В. Л. Бонч-Бруевич и С. В. Тябликов (1961)).

Заметим, что появление бесконечных цепочек зацепляющихся уравнений вида (25.6) или (25.16), по-видимому, неизбежно для систем взаимодействующих частиц и связано с тем, что невозможно рассматривать одну частицу или группу их независимо от остального коллектива. При излагаемом здесь подходе основной задачей является разработка приближенных методов решения цепочки уравнений для функций Грина. По существу, они сводятся к обрыву этой цепочки тем или иным способом.

§ 26. Спектральные представления¹⁾

а. Спектральные представления для корреляционных функций. Обозначим через \mathcal{E}_v и C_v собственные значения и собственные функции гамильтониана системы:

$$(\mathcal{H} - \mathcal{E}_v) C_v = 0. \quad (26.1)$$

Используя полноту системы функций $\{C_v\}$, запишем среднее значение произведения двух операторов в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle &= Q^{-1} \sum_v (C_v^*, \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) C_v) e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\Phi}} = \\ &= Q^{-1} \sum_{\mu, v} (C_v^*, \mathcal{B}(t') C_\mu) (C_\mu^*, \mathcal{A}(t) C_v) e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\Phi}}, \end{aligned}$$

где Q — статистическая сумма (8.12).

Принимая во внимание, что временная зависимость операторов \mathcal{A} , \mathcal{B} определяется формулами (25.1) и что

$$(\exp i\mathcal{H}t) C_v = (\exp i\mathcal{E}_v t) C_v,$$

¹⁾ В изложении будем следовать работам Н. Н. Боголюбова и С. В. Тябликова (1959) и Н. Н. Боголюбова (1961).

имеем далее:

$$\langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle =$$

$$= Q^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_{\nu}^*, \mathcal{B}(0) C_{\mu}) (C_{\mu}^*, \mathcal{A}(0) C_{\nu}) e^{-\frac{\mathcal{E}_{\nu}}{\hbar}} e^{-i(\mathcal{E}_{\nu} - \mathcal{E}_{\mu})(t-t')}$$

и соответственно

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle &= Q^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_{\nu}^*, \mathcal{B}(0) C_{\mu}) \times \\ &\times (C_{\mu}^*, \mathcal{A}(0) C_{\nu}) e^{-\frac{\mathcal{E}_{\nu}}{\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{\mu} - \mathcal{E}_{\nu})} e^{-i(\mathcal{E}_{\nu} - \mathcal{E}_{\mu})(t-t')}. \end{aligned}$$

Эти выражения перепишем в следующем виде:

$$\langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (26.2)$$

$$\langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) e^{\frac{\omega}{\hbar}} e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (26.3)$$

где введено обозначение

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) =$$

$$= Q^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_{\nu}^*, \mathcal{B}(0) C_{\mu}) (C_{\mu}^*, \mathcal{A}(0) C_{\nu}) e^{-\frac{\mathcal{E}_{\nu}}{\hbar}} \delta(\mathcal{E}_{\nu} - \mathcal{E}_{\mu} - \omega). \quad (26.4)$$

Формулы (26.2), (26.3) называются спектральными представлениями для временных корреляционных функций. Величина $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$ носит название спектральной интенсивности или спектральной функции. По существу, это — формулы разложения в интеграл Фурье по разностному аргументу $t - t'$.

При $t = t'$ формулы (26.2), (26.3) принимают вид

$$\langle \mathcal{B}(0) \mathcal{A}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) d\omega, \quad (26.5)$$

$$\langle \mathcal{A}(0) \mathcal{B}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) e^{\frac{\omega}{\hbar}} d\omega. \quad (26.6)$$

Формулы (26.2), (26.3) и (26.5), (26.6) позволяют представить временные и обычные корреляционные

функции через спектральную интенсивность. Дальше мы покажем, что она определяется через функции Грина. Таким образом, задача вычисления корреляционных функций сводится к нахождению соответствующих функций Грина.

Умножим (26.2), (26.5) на η и вычтем из (26.3), (26.6) соответственно. В результате получим:

$$\langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_{\eta} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (26.7)$$

$$\langle [\mathcal{A}(0), \mathcal{B}(0)]_{\eta} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) d\omega. \quad (26.8)$$

Это — точные соотношения, которые могут быть полезны при контроле вычислений.

б. Спектральные представления для функций Грина. Установим теперь спектральные представления для функций Грина.

Для запаздывающей функции Грина, согласно (25.7), (25.10) и (25.17), имеем:

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iE(t-t')} \theta(t-t') \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') - \eta \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle \end{aligned}$$

или, при учете (26.2), (26.3),

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \theta(t).$$

Примем во внимание, что разрывную функцию $\theta(t)$ можно представить в виде контурного интеграла¹⁾

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{E + i\varepsilon} \quad (\varepsilon > 0). \quad (26.9)$$

¹⁾ Формула (26.9) получается из (25.15) подстановкой

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt}.$$

Действительно, будем считать переменную E комплексной. Пусть $t > 0$, тогда в комплексной плоскости E контур γ следует замкнуть в нижней полуплоскости. Так как подынтегральное выражение имеет там полюс $E = -i\varepsilon$, то по теореме о вычетах

$$\theta(t) = -\frac{i}{2\pi} \int_{\gamma} dE \frac{e^{-iEt}}{E + i\varepsilon} = 1.$$

При $t < 0$ замыкание контура нужно производить в верхней полуплоскости, где подынтегральная функция

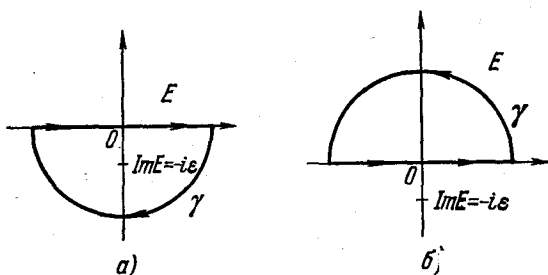


Рис. 10. Контур интегрирования γ в формуле для $\theta(t)$ (26.9):
а — при $t > 0$; б — при $t < 0$.

не имеет особенностей, $\theta(t) = 0$. На рис. 10 изображены контуры интегрирования в формуле (26.9) для $t > 0$ и $t < 0$.

Используя (26.9), получаем для интеграла по t следующее выражение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E-\omega)t} \theta(t) = \frac{i}{E - \omega + i\varepsilon}. \quad (26.10)$$

В результате для запаздывающей функции получаем следующее выражение:

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega + i\varepsilon}; \quad (26.11)$$

таким же способом для опережающей функции получим:

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\Phi}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon}. \quad (26.12)$$

Будем далее рассматривать E как комплексную переменную. Принимая во внимание, что спектральная интенсивность $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$ в формулах (26.11), (26.12) по определению одна и та же, можем объединить эти две формулы:

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\Phi}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \\ &= \begin{cases} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E), & \text{Im } E > 0, \\ G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(E), & \text{Im } E < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (26.13)$$

Формулы (26.11) — (26.13) называются спектральными представлениями для функций Грина. Функции $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E)$, $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(E)$ аналитичны в верхней и нижней полуплоскостях соответственно. Их можно рассматривать как единую аналитическую функцию $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E)$, имеющую особенности на вещественной оси (полюсы, линии разреза). Поэтому далее индексы r , a будут опускаться всюду, где это не может привести к недоразумениям.

Аналитичность функции $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E)$ следует из теоремы Н. Н. Боголюбова и О. С. Парасюка (1956) о том, что обобщенная в смысле Соболева — Шварца комплексная функция $G(E)$ допускает аналитическое продолжение в верхнюю (нижнюю) полуплоскость комплексной переменной E , если ее преобразование Фурье $G(t)$ обращается в нуль при $t < 0$ ($t > 0$). Последнее условие является необходимым и достаточным.

Вообще говоря, функция Грина является многозначной функцией комплексной переменной. Ее особенности лежат на вещественной оси на первом листе римановой поверхности; при переходе на другие листы они могут смещаться в комплексную плоскость. В результате могут появиться, например, комплексные полюсы.

Подобным же методом можно установить спектральные представления для причинной функции Грина (25.9).

Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(E) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left\{ \frac{e^{\frac{\omega}{\vartheta}}}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{\eta}{E - \omega - i\varepsilon} \right\} d\omega = \\
 &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left\{ P \frac{1}{E - \omega} - i\pi \frac{e^{\frac{\omega}{\vartheta}} + \eta}{e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta} \delta(E - \omega) \right\} d\omega.
 \end{aligned} \quad (26.14)$$

Причинные функции Грина определены только на вещественной оси и при $\vartheta \neq 0$ не могут быть продолжены в комплексную плоскость. Это несколько осложняет возможность их применения. Мы в дальнейшем будем пользоваться только запаздывающими и опережающими функциями Грина.

Если функция $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E)$ известна, то по ней можно восстановить спектральную интенсивность $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$ по соотношению

$$\left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) = G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega + i\varepsilon) - G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega - i\varepsilon). \quad (26.15)$$

Действительно, примем во внимание известное соотношение для δ -функции (Дирак (1960)):

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (\varepsilon \rightarrow +0), \quad (26.16)$$

где P — символ главного значения. Используя далее формулы (26.13), убеждаемся, что (26.15) удовлетворяется тождественно:

$$\begin{aligned}
 &G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega + i\varepsilon) - G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega - i\varepsilon) = \\
 &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega - \omega' - i\varepsilon} \right) d\omega' = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \delta(\omega - \omega') d\omega' = \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega).
 \end{aligned}$$

После того как найдена спектральная интенсивность $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$, мы имеем возможность вычислять средние статистические от произведения операторов вида (25.3),

(25.5). Именно такие величины представляют основной интерес для задач статистической механики, поскольку при $t = t'$ они дают обычные корреляционные функции, а при $t \neq t'$ — временные корреляционные функции. Последние часто применяются при исследовании нестационарных процессов.

Покажем теперь, что особенности функций Грина определяют энергию элементарных возбуждений в системе (см. В. Л. Бонч-Бруевич и С. В. Тябликов (1961)).

Пусть функция Грина имеет только полюсы в точках ω_j вещественной оси. Согласно (26.15), (26.16) спектральная интенсивность будет иметь δ -образные особенности в точках ω_j , а корреляционная функция (26.2) будет осциллировать с частотами ω_j . Из определения спектральной интенсивности (26.4) следует, что при $\Phi = 0$ величины ω_j являются точными собственными значениями гамильтониана системы. При $\Phi \neq 0$ величины ω_j являются функциями температуры и химического потенциала и потому не допускают чисто механического толкования. Но и в этом случае они характеризуют затухающие колебания в системе.

В общем случае на вещественной оси могут возникнуть особенности более сложной природы, но тогда можно выбрать такой лист аналитической функции $G(E)$, на котором особенности смещаются в комплексную плоскость и имеют, хотя бы приближенно, вид полюсов. Мнимые части полюсов при этом будут характеризовать затухание соответствующих колебаний в системе. При достаточно малом затухании можно ввести представление о квазистационарных состояниях. Корреляционные функции будут иметь вид $f(t) \exp(-i\omega_j t)$, где $f(t)$ описывает затухание состояний ($f(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$). Константы, характеризующие затухание, должны быть малы по сравнению с частотами ω_j , отсчитанными от основного состояния, так как в противном случае теряет смысл само понятие элементарных возбуждений. В дальнейшем, говоря о спектре системы при $\Phi \geq 0$, мы будем иметь в виду именно такие, квазистационарные, состояния.

Вопрос о связи элементарных возбуждений с полюсами функций Грина на модельных примерах рассматривали тер Хаар и Перри (1962), Болстерли (1960).

Подробнее он был разобран Пайком (1964), который показал возможность сведения этой задачи к исследованию полюсов функции Грина, полученной усреднением по основному состоянию системы.

в. Спектральные представления для нуля температуры. Рассмотрим отдельно спектральные представления для временных корреляционных функций и функций Грина в случае нуля температуры ($\vartheta = 0$).

Собственные функции основного состояния обозначим через C_v^0 , энергию его положим равной нулю:

$$\mathcal{H}C_v^0 = 0. \quad (26.17)$$

Используя определение (26.4) для спектральной интенсивности, вычислим далее пределы функций $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$, $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)e^{\frac{\omega}{\vartheta}}$ при $\vartheta \rightarrow 0$. Например,

$$\begin{aligned} \lim_{\vartheta \rightarrow 0} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) &= \lim_{\vartheta \rightarrow 0} Q^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_\nu^*, \mathcal{B}(0) C_\mu) (C_\mu^*, \mathcal{A}(0) C_\nu) \times \\ &\quad \times e^{-\frac{\mathcal{E}_\nu}{\vartheta}} \delta(\mathcal{E}_\nu - \mathcal{E}_\mu - \omega) = \\ &= Q_0^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_\nu^0, \mathcal{B}(0) C_\mu) (C_\mu^*, \mathcal{A}(0) C_\nu^0) \delta(\mathcal{E}_\mu^0 + \omega), \end{aligned}$$

где \mathcal{E}_μ^0 — собственные значения \mathcal{H} при $\vartheta = 0$ (напомним, что \mathcal{H} включает в себя химический потенциал), Q_0 — значение Q при $\vartheta = 0$. Так как $\mathcal{E}_\mu^0 \geq 0$, то нетрудно видеть, что

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) = \theta(-\omega) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) \quad (26.18)$$

и аналогично

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) e^{\frac{\omega}{\vartheta}} = \theta(\omega) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega), \quad (26.19)$$

где

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) = \begin{cases} Q_0^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_\nu^0, \mathcal{B}(0) C_\mu) (C_\mu^*, \mathcal{A}(0) C_\nu^0) \delta(\mathcal{E}_\mu^0 + \omega), & \omega < 0, \\ Q_0^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_\nu^0, \mathcal{A}(0) C_\mu) (C_\mu^*, \mathcal{B}(0) C_\nu^0) \delta(\mathcal{E}_\mu^0 - \omega), & \omega > 0. \end{cases} \quad (26.20)$$

Заметим, что функция $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega)$ непрерывна в нуле, поскольку пределы

$$\lim_{\omega \rightarrow -0} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) = Q_0^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_{\nu}^{*0}, \mathcal{B}(0) C_{\mu}^0) (C_{\mu}^{*0}, \mathcal{A}(0) C_{\nu}^0),$$

$$\lim_{\omega \rightarrow +0} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) = Q_0^{-1} \sum_{\mu, \nu} (C_{\nu}^{*0}, \mathcal{A}(0) C_{\mu}^0) (C_{\mu}^{*0}, \mathcal{B}(0) C_{\nu}^0)$$

совпадают.

Спектральные представления для временных корреляционных функций, согласно (26.2), (26.3) и (26.18), (26.19), в случае нуля температуры имеют следующий вид:

$$\langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^0 I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (26.21)$$

$$\langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle = \int_0^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (26.22)$$

Совершим теперь предельный переход $\theta \rightarrow 0$ в спектральных представлениях (26.11), (26.12), (26.14) для запаздывающих, опережающих и причинных функций Грина. В результате получим (Н. Н. Боголюбов (1961), В. Л. Бонч-Бруевич (1956)):

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(\omega) - \eta\theta(-\omega)}{E - \omega + i\varepsilon} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) d\omega, \quad (26.23)$$

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(\omega) - \eta\theta(-\omega)}{E - \omega - i\varepsilon} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) d\omega, \quad (26.24)$$

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(\omega) - \eta\theta(-\omega)}{E - \omega + i\varepsilon [\theta(\omega) - \theta(-\omega)]} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) d\omega. \quad (26.25)$$

Отсюда видим, что запаздывающая и опережающая функции Грина $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(r)}(E)$, $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(a)}(E)$ всегда являются граничными значениями ($\varepsilon \rightarrow +0$) функции комплексного переменного E :

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^0(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega}.$$

тогда как причинная функция Грина $G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(E)$ обладает этим свойством только для нуля температуры. Для конечных температур функция

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \left\{ \frac{e^{\frac{\omega}{\theta}}}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{\eta}{E - \omega - i\varepsilon} \right\} d\omega$$

не может быть продолжена в комплексную плоскость.

Эффективность метода функций Грина в значительной мере обязана использованию спектральных представлений. Первоначально они были введены в квантовой теории поля Челеном (1952) и Леманом (1954). Для функций Грина в статистической механике спектральные представления вводили В. Л. Бонч-Бруевич (1956), Л. Д. Ландау (1958), Л. П. Горьков (1958), Мартин и Швингер (1958), Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1959), Ш. М. Коган (1959), В. Л. Бонч-Бруевич и Ш. М. Коган (1960). Впервые спектральные представления такого вида в статистической механике (теория флуктуаций и статистическая механика необратимых процессов) были введены Келленом и Вельтоном (1951).

§ 27. Дисперсионные соотношения¹⁾

Для вещественных значений E ($E = \omega$) имеют место формулы, связывающие вещественные и мнимые части функций Грина, — так называемые дисперсионные соотношения.

Используя соотношение (26.16), преобразуем формулы (26.11), (26.12) к виду

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(\omega) = \pm \frac{1}{2} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) + \\ + \frac{i}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} \quad (j=r, a). \quad (27.1)$$

P — символ главного значения, знак плюс берется для запаздывающей функции и знак минус — для опере-

¹⁾ Дисперсионные соотношения рассматривались рядом авторов. По существу, они представляют свойства граничных значений интегралов типа Коши, установленные впервые Ю. В. Сохоцким в 1873 г. и затем К. Племельем в 1908 г. См., например, М. А. Лаврентьев и Б. В. Шабат (1958).

жающей. Предположим далее, что спектральная интенсивность вещественна.

Вещественные и мнимые части функций (27.1) в этом случае примут вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(\omega) &= \pm \frac{1}{2} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega), \\ \operatorname{Im} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \frac{d\omega'}{\omega - \omega'}. \end{aligned} \quad (27.2)$$

Отсюда получаем формулы, связывающие вещественные и мнимые части функций Грина и известные как дисперсионные соотношения:

$$\operatorname{Im} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(\omega) = \pm \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(j)}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega', \quad (27.3)$$

знак плюс берется для запаздывающих функций и знак минус — для опережающих.

Формула (26.14) для причинных функций Грина может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(\omega) &= \frac{1}{2} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} + \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) + \\ &+ \frac{i}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \frac{d\omega'}{\omega - \omega'}. \end{aligned} \quad (27.4)$$

Замечая, что вещественная и мнимая части причинной функции Грина имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(\omega) &= \frac{1}{2} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} + \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega), \\ \operatorname{Im} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega') \frac{d\omega'}{\omega - \omega'}, \end{aligned} \quad (27.5)$$

получаем отсюда дисперсионное соотношение

$$\operatorname{Im} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{\omega'}{\theta}} - \eta}{e^{\frac{\omega'}{\theta}} + \eta} \frac{\operatorname{Re} G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^{(c)}(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega'. \quad (27.6)$$

Сопоставляя формулы (27.2) — (27.3) и (27.5) — (27.6), видим, что если известна одна из функций, например причинная, то по ней через спектральную интенсивность могут быть восстановлены и две другие функции. В этом смысле запаздывающая, опережающая и причинная функции Грина равноценны друг другу.

§ 28. Общие свойства функций Грина¹⁾

Для функций Грина кроме дисперсионных имеется еще ряд соотношений, не зависящих от конкретного вида гамильтониана системы. В этом параграфе мы рассмотрим некоторые из них.

Чтобы избежать отдаленных ссылок, выпишем еще раз определения запаздывающей и опережающей функций Грина

$$\langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(r)} = \theta(t-t') \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') - \eta \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle, \quad (28.1)$$

$$\langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(a)} = -\theta(t'-t) \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') - \eta \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle \quad (28.2)$$

и спектральные представления для них

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_E^{(l)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega \pm i\varepsilon} \quad (28.3)$$

($j = r, a$)

(в (28.3) знак плюс берется для запаздывающей функции и знак минус — для опережающей).

Для временных корреляционных функций имеют место формулы

$$\langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) e^{\frac{\omega}{\theta}} e^{-i\omega(t-t')} d\omega, \quad (28.4)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{B}^+(t') \mathcal{A}^+(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{B}^+\mathcal{A}^+}(\omega) e^{\frac{\omega}{\theta}} e^{-i\omega(t'-t)} d\omega = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}^+\mathcal{B}^+}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \end{aligned} \quad (28.5)$$

¹⁾ См. Н. Н. Боголюбов (1961); относительно соотношений симметрии для корреляционных функций см. также Кубо (1957).

Функцию (28.5) можно рассматривать как сопряженную к (28.4) и потому

$$\langle \mathcal{B}^+(t') \mathcal{A}^+(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega) e^{\frac{\omega}{\hbar}} e^{i\omega(t-t')} d\omega. \quad (28.6)$$

Свойства симметрии функций Грина. Используя определение (28.2), без труда получаем:

$$\begin{aligned} \langle \langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle \rangle^{(a)} &= -\theta(t' - t) \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') - \eta \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle = \\ &= \eta \theta(t' - t) \langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) - \eta \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle. \end{aligned}$$

Принимая во внимание определение (28.1) запаздывающей функции, видим, что

$$\langle \langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle \rangle^{(a)} = \eta \langle \langle \mathcal{B}(t') | \mathcal{A}(t) \rangle \rangle^{(r)}. \quad (28.7)$$

Переходя здесь к фурье-образам по времени, будем иметь:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_E^{(a)} e^{-iE(t-t')} dE = \eta \int_{-\infty}^{\infty} \langle \langle \mathcal{B} | \mathcal{A} \rangle \rangle_E^{(r)} e^{-iE(t'-t)} dE.$$

Следовательно, для вещественных значений аргумента ($E = \omega$)

$$\langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_{\omega}^{(a)} = \eta \langle \langle \mathcal{B} | \mathcal{A} \rangle \rangle_{-\omega}^{(r)}. \quad (28.8)$$

Чтобы перейти в комплексную плоскость E , рассмотрим спектральные представления (28.3) для этих функций:

$$\begin{aligned} \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_E^{(a)} &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\hbar}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon}, \\ \langle \langle \mathcal{B} | \mathcal{A} \rangle \rangle_{-E}^{(r)} &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\hbar}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{-E - \omega + i\varepsilon}. \end{aligned}$$

Из них видим, что обе функции будут аналитичны в нижней полуплоскости. Поэтому для комплексных значений аргумента вместо (28.8) будем иметь:

$$\langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_E = \eta \langle \langle \mathcal{B} | \mathcal{A} \rangle \rangle_{-E}. \quad (28.9)$$

Рассмотрим выражение, сопряженное к (28.1):

$$\begin{aligned} \{\langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(r)}\}^* &= \\ &= -\eta \theta(t-t') \langle \mathcal{A}^+(t) \mathcal{B}^+(t') - \eta \mathcal{B}^+(t') \mathcal{A}^+(t) \rangle = \\ &= \theta(t-t') \langle \mathcal{B}^+(t') \mathcal{A}^+(t) - \eta \mathcal{A}^+(t) \mathcal{B}^+(t') \rangle. \end{aligned}$$

Согласно определению запаздывающих и опережающих функций (см. (28.1), (28.2)) эти равенства можно переписать в следующем виде:

$$\{\langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(r)}\}^* = -\eta \langle\langle \mathcal{A}^+(t) | \mathcal{B}^+(t') \rangle\rangle^{(r)} = \quad (28.10)$$

$$= -\langle\langle \mathcal{B}^+(t') | \mathcal{A}^+(t) \rangle\rangle^{(a)}. \quad (28.11)$$

Из сравнения коэффициентов Фурье получаем, что на вещественной оси

$$\{\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_{\omega}^{(r)}\}^* = -\eta \langle\langle \mathcal{A}^+ | \mathcal{B}^+ \rangle\rangle_{-\omega}^{(r)} = \quad (28.12)$$

$$= -\langle\langle \mathcal{B}^+ | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_{\omega}^{(a)}. \quad (28.13)$$

Для спектральных интенсивностей сравнением коэффициентов Фурье выражений (28.5), (28.6) получаем соотношения

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega) = I_{\mathcal{B}^+\mathcal{A}^+}(\omega), \quad (28.14)$$

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega) e^{\frac{\omega}{\theta}} = I_{\mathcal{A}^+\mathcal{B}^+}(-\omega). \quad (28.15)$$

Пусть $\mathcal{B}^+ = \mathcal{A}$. Тогда из (28.14) следует, что $I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}$ вещественна:

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}^*(\omega) = I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega). \quad (28.16)$$

При этом функция Грина

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} \quad (28.17)$$

будет функцией комплексной переменной с чисто мнимыми коэффициентами. Следовательно,

$$\{\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_E\}^* = -\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_{E^*}. \quad (28.18)$$

Из вещественности $I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega)$ (28.10) следует вещественность обычных средних:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{A}\mathcal{A}^+ \rangle &= \langle \mathcal{A}\mathcal{A}^+ \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega) e^{\frac{\omega}{\vartheta}} d\omega, \\ \langle \mathcal{A}^+ \mathcal{A} \rangle &= \langle \mathcal{A}^+ \mathcal{A} \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega) d\omega.\end{aligned}\quad (28.19)$$

Согласно (26.8) имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) d\omega = \langle \mathcal{A}\mathcal{B} - \eta \mathcal{B}\mathcal{A} \rangle. \quad (28.20)$$

Пусть $\mathcal{B} = \mathcal{A}$, $\eta = 1$. Тогда получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{A}}(\omega) \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - 1 \right) d\omega = 0. \quad (28.21)$$

Пусть $\mathcal{A} = a_f$, $\mathcal{B} = a_{f'}^+$, где a_f^+ , a_f — операторы с перестановочными соотношениями бозевского или фермиевского типа:

$$a_f a_{f'}^+ - \eta a_{f'}^+ a_f = \Delta(f - f').$$

Тогда из (28.20) следует соотношение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - \eta \right) I_{a_f a_{f'}^+}(\omega) d\omega = \Delta(f - f'). \quad (28.22)$$

Для операторов Паули имеем:

$$b_f b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f = (1 - 2n_f) \Delta(f - f'),$$

поэтому, в соответствии с (28.20), будем иметь:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\vartheta}} - 1 \right) I_{b_f b_{f'}^+}(\omega) d\omega = \langle 1 - 2n_f \rangle \Delta(f - f'). \quad (28.23)$$

Свойства симметрии функций Грина в случае инвариантности относительно инверсии времени. Пусть уравнения движения для операторов \mathcal{A} , \mathcal{B} инвариантны относительно инверсии времени:

$$t \rightarrow -t, \quad i \rightarrow -i. \quad (28.24)$$

Тогда при преобразовании (28.24) операторы $\mathcal{A}(t)$, $\mathcal{B}(t)$ переходят сами в себя.

Рассмотрим формулу (28.4). Произведем преобразования: $t \rightarrow -t$, $t' \rightarrow -t'$, $i \rightarrow -i$. При этом в правой части $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)$ заменится, вообще говоря, на $I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega)$. Но так как левая часть формулы остается неизменной, то отсюда следует вещественность спектральной интенсивности:

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega) = I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega). \quad (28.25)$$

Соответствующая функция Грина

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} \quad (28.26)$$

будет функцией комплексной переменной с чисто мнимыми коэффициентами. Поэтому

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_E^* = -\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_{E^*}. \quad (28.27)$$

Из формул (28.4), (28.6) и (28.25) следует, что

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle &= \langle \mathcal{B}^+(t) \mathcal{A}^+(t') \rangle, \\ \langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle &= \langle \mathcal{A}^+(t') \mathcal{B}^+(t) \rangle. \end{aligned} \quad (28.28)$$

Умножим второе равенство (28.28) на η и вычтем из первого; помножая результат на $\theta(t - t')$ или $-\theta(t' - t)$, получим:

$$\langle\langle \mathcal{A}(t) | \mathcal{B}(t') \rangle\rangle^{(j)} = \langle\langle \mathcal{B}^+(t) | \mathcal{A}^+(t') \rangle\rangle^{(j)} \quad (j = r, a). \quad (28.29)$$

Отсюда для фурье-образов по времени получаем следующие соотношения:

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_{\omega}^{(j)} = \langle\langle \mathcal{B}^+ | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_{\omega}^{(j)}, \quad (28.30)$$

$$\langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle_E = \langle\langle \mathcal{B}^+ | \mathcal{A}^+ \rangle\rangle_E. \quad (28.31)$$

Пусть \mathcal{A} , \mathcal{B} — самосопряженные операторы. Тогда при $t = t'$ из (28.28) следует, что $\langle \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A} \rangle = 0$. Используя далее (28.20), находим, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) d\omega = (1 - \eta) \langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle. \quad (28.32)$$

Отметим, что формулы этого раздела ((28.25) — (28.32)) имеют место только для операторов, инвариантных относительно инверсии времени (28.24).

Поведение запаздывающих функций Грина на вещественной оси. Введем матрицу

$$G(\omega) = \begin{pmatrix} G_{11}(\omega) & G_{12}(\omega) \\ G_{21}(\omega) & G_{22}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (28.33)$$

где

$$G_{11}(\omega) = \langle\langle \mathcal{B} | \mathcal{B} \rangle\rangle_{\omega}^{(r)}, \quad G_{12}(\omega) = \langle\langle \mathcal{B} | \mathcal{B}^+ \rangle\rangle_{\omega}^{(r)}, \dots, \quad (28.34)$$

и обратную матрицу $F(\omega) = G^{-1}(\omega)$.

Принимая во внимание формулы (28.12), имеем:

$$G_{11}(\omega) = -\eta G_{22}^*(-\omega), \quad G_{12}(\omega) = -\eta G_{21}^*(-\omega) \quad (28.35)$$

и в случае инвариантности уравнений движения относительно инверсии времени при учете (28.30) дополнительно

$$G_{11}(\omega) = G_{22}(\omega). \quad (28.36)$$

Такие же соотношения имеют место и для элементов обратной матрицы, $F(\omega)$. Для определителей матриц G и F имеют место условия:

$$\begin{aligned} D(\omega) &= D^*(-\omega) = G_{11}G_{22} - G_{12}G_{21}, \\ \Delta(\omega) &= \Delta^*(-\omega) = F_{11}F_{22} - F_{12}F_{21}. \end{aligned} \quad (28.37)$$

Пусть $G(\omega)$ имеет полюс в точке $\omega = \omega_R$. В полюсах функции $G(\omega)$ функция $F(\omega)$ регулярна. Поэтому, выражая $G_{ij}(\omega)$ через $F_{ij}(\omega)$, видим, что полюсам функции $G(\omega)$ соответствуют нули уравнений $\Delta(\omega) = 0$, $\Delta(-\omega) = 0$. Следовательно, в окрестности полюса

$$\begin{aligned} \Delta^{-1}(\omega) &= R(\omega) \{2\omega_R \Lambda(\omega)\}^{-1}, \\ R(\omega) &= \frac{1}{\omega - \omega_R + i\varepsilon} - \frac{1}{\omega + \omega_R + i\varepsilon}, \end{aligned} \quad (28.38)$$

где $\Lambda(\omega)$ — некоторая функция, регулярная в окрестности точки $\omega = \omega_R$.

Одно неравенство для спектральных интенсивностей и функций Грина. Для спектральных интенсивностей согласно (26.4) и (28.14) имеют место соотношения

$$\begin{aligned} I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega) &\geq 0, \\ I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}^*(\omega) &= I_{\mathcal{B}^+\mathcal{A}^+}(\omega). \end{aligned} \quad (28.39)$$

Далее из определения (26.4) следует, что спектральная интенсивность является билинейной формой относительно операторов \mathcal{A} , \mathcal{B} .

Используя эти обстоятельства, можно показать (Н. Н. Боголюбов, (1961)), что для спектральных интенсивностей имеет место неравенство

$$I_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(\omega) I_{\mathcal{B}\mathcal{B}^+}^*(\omega) \geq |I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega)|^2, \quad (28.40)$$

а для коммутаторных функций Грина при $E = 0$ неравенство

$$G_{\mathcal{A}\mathcal{A}^+}(0) G_{\mathcal{B}\mathcal{B}^+}^*(0) \geq |G_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(0)|^2. \quad (28.41)$$

Для доказательства рассмотрим произвольную билинейную форму $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B})$, обладающую свойствами

$$\begin{aligned} \Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) &\geq 0, \quad \Phi(\mathcal{B}, \mathcal{B}^+) \geq 0, \\ (\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}))^* &= \Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{A}^+), \end{aligned} \quad (28.42)$$

и покажем, что для Φ имеет место неравенство

$$\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) \Phi^*(\mathcal{B}, \mathcal{B}^+) \geq |\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B})|^2. \quad (28.43)$$

Для доказательства примем во внимание, что согласно (28.42)

$$\begin{aligned} &\Phi(x\mathcal{A} + y^*\mathcal{B}^+, x^*\mathcal{A}^+ + y\mathcal{B}) \geq 0 \\ &(x, y - \text{произвольные комплексные числа}) \text{ или} \\ &|x|^2 \Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) + x^*y^* \Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{A}^+) + xy \Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) + \\ &\quad + |y|^2 \Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{B}) \geq 0. \end{aligned} \quad (28.44)$$

Положим теперь

$$\begin{aligned} x^* &= -\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}), \quad x = -\Phi^*(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = -\Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{A}^+), \\ y &= y^* = \Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+). \end{aligned}$$

Тогда (28.44) преобразуется к виду

$$-|\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B})|^2 \Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) + |\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+)|^2 \Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{B}) \geq 0.$$

Если $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) \neq 0$, то отсюда следует неравенство (28.43). Покажем теперь, что если $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) = 0$, то $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = 0$.

Для этого положим в (28.44)

$$x^* = -q\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}), \quad x = -q\Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{A}^+),$$

$$\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) = 0, \quad y = y^* = 1,$$

где q — произвольное положительное число.

В результате получим:

$$-2q|\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B})|^2 + \Phi(\mathcal{B}^+, \mathcal{B}) \geq 0.$$

При $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) \neq 0$ и q достаточно больших левая часть этого неравенства может быть сделана отрицательной. Так как это невозможно, то, следовательно, $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = 0$ при $\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{A}^+) = 0$.

Примем во внимание, что условиям (28.42) удовлетворяют билинейные формы

$$\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega),$$

$$\Phi(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = iG_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\omega) \frac{e^{\frac{\omega}{\phi}} - 1}{\omega} d\omega.$$

Следовательно, для них имеют место неравенства (28.43) или (28.40), (28.41).

§ 29. Теория возмущений для функций Грина ¹⁾

Рассмотрим цепочку уравнений

$$E \langle\langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle[\mathcal{A}, \mathcal{B}]_{\eta}\rangle + \langle\langle [\mathcal{A}, \mathcal{H}] | \mathcal{B} \rangle\rangle. \quad (29.1)$$

Допустим, что гамильтониан системы \mathcal{H} можно представить в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_1, \quad (29.2)$$

где «гамильтониан нулевого приближения» \mathcal{H}_0 выбран так, что

$$[\mathcal{A}, \mathcal{H}_0] = K\mathcal{A}, \quad (29.3)$$

где K — линейный оператор, ε — некоторый параметр. Тогда уравнение движения для оператора \mathcal{A} запишется следующим образом:

$$i \frac{d\mathcal{A}}{dt} = K\mathcal{A} + \varepsilon R_1 \mathcal{A}_1, \quad (29.4)$$

¹⁾ См. С. В. Тябликов и В. Л. Бонч-Бруевич (1962).

где R_1 — также линейный оператор, \mathcal{A}_1 — новый оператор, построенный из произведения большего числа операторов вторичного квантования, чем \mathcal{A} . В результате цепочку уравнений (29.1) можно записать в виде

$$\begin{aligned}(E - K) \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} \langle [\mathcal{A}, \mathcal{B}]_{\eta} \rangle + \varepsilon R_1 \langle \langle \mathcal{A}_1 | \mathcal{B} \rangle \rangle, \\ (E - K_1) \langle \langle \mathcal{A}_1 | \mathcal{B} \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} \langle [\mathcal{A}_1, \mathcal{B}]_{\eta} \rangle + \varepsilon R_2 \langle \langle \mathcal{A}_2 | \mathcal{B} \rangle \rangle, \dots\end{aligned}\quad (29.5)$$

или, вводя очевидные обозначения, в виде

$$\begin{aligned}L_1 G_1 &= I_1 + \varepsilon R_1 G_2, \\ L_2 G_2 &= I_2 + \varepsilon R_2 G_3,\end{aligned}\quad (29.6)$$

где G_1, G_2, \dots — первая, вторая и т. д. функции Грина.

Возьмем для примера систему частиц с парным взаимодействием. Гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования имеет вид (3.36). Выберем за \mathcal{H}_0 гамильтониан свободных частиц и за \mathcal{H}_1 — гамильтониан взаимодействия. Тогда если за \mathcal{A} взять оператор уничтожения (или порождения) частицы, то K (29.4), (29.5) будет собственной энергией свободной частицы, а R_1 (29.4), (29.5) — интегральным оператором, ядром которого является матричный элемент энергии взаимодействия двух частиц. Аналогичный смысл имеют операторы K_1, K_2, \dots и R_2, R_3, \dots .

В общем случае величины L_n и I_n будут некоторыми функциями параметра ε :

$$\begin{aligned}L_n &= L_n(\varepsilon), \\ I_n &= I_n(\varepsilon).\end{aligned}\quad (29.7)$$

В операторе $L_n(\varepsilon)$ можно выделить оператор собственной энергии свободных частиц L_n^0 и оператор εL_n^1 , зависящий от энергии взаимодействия, обязанный тем же членам в гамильтониане, что и операторы R_i . Величины $I_n(\varepsilon)$ представляют собой корреляционные функции. Иногда бывает возможно представить $I_n(\varepsilon)$ в виде суммы корреляционной функции свободных частиц I_n^0 и

так называемой неприводимой части, которая будет порядка энергии взаимодействия (ϵ). Поэтому обычно

$$\begin{aligned} L_n(\epsilon) &= L_n^0 + \epsilon L_n^1, \\ L_1 &= L_1^0, \quad L_n^0 = \Sigma L_1, \\ I_n(\epsilon) &= I_n^0 + O(\epsilon). \end{aligned} \quad (29.8)$$

Условимся обозначать через G_n^0 решения следующих уравнений:

$$L_n G_n^0 = I_n. \quad (29.9)$$

Перейдем теперь к формулировке метода теории возмущений для цепочки уравнений (29.6). Будем рассматривать ϵ как формальный малый параметр ($\epsilon \ll 1$) и называть \mathcal{H}_0 — гамильтонианом «свободных частиц», а \mathcal{H}_1 — оператором взаимодействия.

Полюсы функций Грина определяют энергию элементарных возбуждений и, естественно, зависят от взаимодействия между частицами. Попытка построения решений цепочки уравнений (29.6) в виде формальных разложений по степеням малого параметра ϵ эквивалентна разложению функций в ряд по полюсам. Мы попытаемся развить теорию возмущений для обратной функции, строя формальные разложения по ϵ для нее, а не для G . Прямая же функция Грина будет восстанавливаться по обратной. При таком подходе можно надеяться, по крайней мере, на правильное описание поведения функции Грина в окрестности полюсов.

Определим массовый оператор M_1 для первой функции Грина по уравнению ¹⁾

$$(L_1 - M_1) G_1 = I_1, \quad (29.10)$$

где L_1 — оператор энергии свободных частиц, а M_1 включает в себя взаимодействие. Из сравнения (29.10) с первым уравнением (29.6) видим, что

$$M_1 = \epsilon R_1 G_2 G_1^{-1}, \quad (29.11)$$

где G_1^{-1} — оператор, обратный к G_1 . Введем обозначение

$$X_1 = R_1 G_2 I_1^{-1}. \quad (29.12)$$

¹⁾ См. также Клейн и Прейндж (1958).

Подставляя G_1 (29.10) в (29.11), получаем:

$$M_1 = \varepsilon X_1 (L_1 - M_1). \quad (29.13)$$

Отсюда находим M_1 :

$$M_1 = (1 + \varepsilon X_1)^{-1} \varepsilon X_1 L_1 \quad (29.14)$$

или, раскладывая в ряд по степеням явно входящего параметра ε ,

$$M_1 = \{\varepsilon X_1 - (\varepsilon X_1)^2 + (\varepsilon X_1)^3 - \dots\} L_1, \quad (29.15)$$

где X_1 определяется выражением (29.12).

Полюсами массового оператора M_1 будут нули оператора $1 + \varepsilon X_1$ (т. е. нули $(G_1^0)^{-1} G_1$). В разложении (29.15) полюсы оператора M_1 , соответствующие нулям $1 + \varepsilon X_1$, потеряны. Поэтому разложение (29.15) имеет смысл только вдали от нулей $1 + \varepsilon X_1$. В противном случае следует пользоваться выражением (29.14).

В окрестности полюсов M_1 приближенно имеем:

$$M_1 = \{1 - (1 + \varepsilon X_1)^{-1}\} L_1 \cong - (1 + \varepsilon X_1)^{-1} L_1. \quad (29.16)$$

В окрестности полюсов X_1 ($\varepsilon X_1 \gg 1$) формальные разложения по ε смысла не имеют. При этом нужно заметить, что так как $X_1 = R_1 G_2 I_1^{-1}$, то полюсам X_1 соответствуют полюсы G_2 .

Формулы (29.14), (29.15) дают представление массового оператора M_1 через вторую функцию Грина. Поскольку M_1 — величина, в известном смысле обратная к G_1 , то для ее вычисления воспользуемся обычной теорией возмущений.

Из системы уравнений (29.6) находим:

$$\begin{aligned} G_2 &= G_2^0 + \varepsilon L_2^{-1} R_2 G_3 = \\ &= G_2^0 + \varepsilon L_2^{-1} R_2 G_3^0 + \varepsilon^2 L_2^{-1} R_2 L_3^{-1} R_3 G_4^0 + \dots \end{aligned} \quad (29.17)$$

Подстановка (29.17) в (29.12) дает X_1 в виде ряда по степеням ε :

$$\begin{aligned} X_1 &= R_1 G_2^0 I_1^{-1} + \varepsilon R_1 L_2^{-1} R_2 G_3^0 I_1^{-1} + \\ &+ \varepsilon^2 R_1 L_2^{-1} R_2 L_3^{-1} R_3 G_4^0 I_1^{-1} + \dots \end{aligned} \quad (29.18)$$

Наконец, принимая во внимание (29.15), получаем разложения массового оператора по степеням энергии взаимодействия:

$$M_1 = \varepsilon M'_1 + \varepsilon^2 M''_1 + \dots, \quad (29.19)$$

где

$$M'_1 = R_1 G_2^0 I_1^{-1} L_1 = R_1 G_2^0 (G_1^0)^{-1}, \quad (29.20)$$

$$M''_1 = R_1 L_2^{-1} R_2 G_3^0 (G_1^0)^{-1} - R_1 G_2^0 (G_1^0)^{-1} L_1^{-1} R_1 G_2^0 (G_1^0)^{-1}, \dots \quad (29.21)$$

Заметим, что разложение (29.17) для функции G_2 соответствует решению для оборванной цепочки уравнений (29.6):

$$\begin{aligned} L_2 G_2 &= I_2 + \varepsilon R_2 G_3, \\ &\dots \dots \dots \\ L_n G_n &= I_n. \end{aligned} \quad (29.22)$$

При решении конкретных задач может оказаться более удобным построение приближенного решения для G_2 в виде ряда по ε непосредственно по системе уравнений (29.22)¹⁾.

Для пространственно однородных систем массовый оператор диагонален в импульсном представлении.

Действительно, в координатном представлении операторы \mathcal{A} , \mathcal{B} , на которых построена функция Грина, будут функциями точек пространства: $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x)$, $\mathcal{B} = \mathcal{B}(y)$, а первая функция Грина — функцией пары точек: $G_1 = G_1(x, y)$. В силу трансляционной инвариантности G_1 будет функцией только разности координат: $G_1 = G_1(x - y)$. Поэтому в координатном представлении уравнение (29.10) запишется в виде

$$\begin{aligned} \{E - K(x)\} G_1(x - y) - \\ - \int M_1(x, x') G_1(x' - y) dx' = \frac{i}{2\pi} \sigma(x - y), \end{aligned} \quad (29.23)$$

где $K(x)$ — оператор собственной энергии свободной частицы, например оператор кинетической энергии, а $\sigma = \frac{2\pi}{i} I_1$ — некоторая функция. Это уравнение должно быть инвариантно (для однородных систем) относительно сдвига всех координат на произвольный вектор. Следовательно, массовый оператор должен зависеть только от раз-

¹⁾ Другой вариант теории возмущений для массового оператора см. в работе Ю. А. Церковникова (1962) (Прим. ред.).

ности координат: $M_1(x, x') = M_1(x - x')$. В результате уравнение (29.23) принимает вид

$$\{E - K(\xi)\} G_1(\xi) - \int M_1(\xi - \xi') G_1(\xi') d\xi' = \frac{i}{2\pi} \sigma(\xi), \quad (29.24)$$

где $\xi = x - y$, $\xi' = x' - y$. Переходя в (29.24) к фурье-образам по координатам, получаем:

$$(E - K_v) G_v - M_v G_v = \frac{i}{2\pi} \sigma_v, \quad (29.25)$$

где

$$G_v = \int G_1(\xi) e^{i(\xi, v)} d\xi, \quad M_v = \int M(\xi) e^{i(\xi, v)} d\xi, \quad (29.26)$$

$$\sigma_v = \int \sigma(\xi) e^{i(\xi, v)} d\xi.$$

Из изложенного следует, что для пространственно однородных систем первая функция Грина и ее массовый оператор диагональны по импульсам. В случае кристаллических решеток вместо интегралов будут стоять соответствующие суммы по узлам решеток.

По построению массовый оператор зависит от переменной E . Будем считать явный вид этой зависимости известным, а M_v — «малой величиной», в духе теории возмущений. Чтобы отметить последнее обстоятельство, далее будем писать при M_v формальный малый параметр ε . Из (29.25) для функции G_v получаем следующее выражение:

$$G_v(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma_v}{E - K_v - \varepsilon M_v(E)}. \quad (29.27)$$

Энергия элементарных возбуждений и время их жизни, согласно § 26, б, определяются полюсами функции Грина:

$$E = K_v + \varepsilon M_v(E). \quad (29.28)$$

В нулевом приближении по ε полюсы являются чисто вещественными $E = K_v$. Так как εM_v рассматривается как «малая поправка», ищем решение уравнения (29.28) в виде $E = \omega + i\Gamma$, где Γ — малая вещественная величина. Положим:

$$M_v(\omega \pm i\Gamma) = M'_v(\omega, \Gamma) \mp iM''_v(\omega, \Gamma), \quad (29.29)$$

где M'_v , M''_v — вещественные функции. Для определения энергии элементарных возбуждений ω и времени их

жизни Γ получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned}\omega &= K_v + \varepsilon M'_v(\omega, \Gamma), \\ \Gamma &= -\varepsilon M''_v(\omega, \Gamma)\end{aligned}\quad (29.30)$$

или приближенно, считая Γ малой величиной,

$$\omega \cong K_v + \varepsilon M'_v(\omega, 0), \quad \Gamma \cong -\varepsilon M''_v(\omega, 0). \quad (29.31)$$

Для спектральной интенсивности, согласно (26.15), получаем:

$$\begin{aligned}\left(e^{\frac{\omega}{\hbar}} - \eta\right) I_v(\omega) &= G_v(\omega + i\Gamma) - G_v(\omega - i\Gamma) = \\ &= \frac{\sigma_v}{\pi} \frac{M''_v}{(\omega - M'_v)^2 + (M''_v)^2}.\end{aligned}\quad (29.32)$$

Наконец, для функций Грина будем иметь следующие выражения:

$$G_v(E) \cong \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma_v}{E - (K_v + M'_v) + iM''_v}. \quad (29.33)$$

Ниже мы рассмотрим некоторые свойства массового оператора, которые иногда позволяют сделать конкретные суждения относительно поведения энергии элементарных возбуждений и времени их жизни без детального анализа задачи.

Формальные разложения по параметру ε , использованные здесь, пригодны, если «энергия взаимодействия» \mathcal{H}_1 достаточно мала и в выражениях, приведенных выше, нет особенностей. Следует обратить внимание на два важных случая, когда такие разложения не пригодны. Это — системы со взаимодействием типа твердых шаров и системы с кулоновским взаимодействием. В первом случае взаимодействие на малых расстояниях не мало, но зато мал радиус действия сил; поэтому можно перестроить разложения (29.19) в разложения по степеням плотности. Во втором случае существенную роль играют коллективные (поляризационные) эффекты, которые не учитываются достаточно корректно при последовательных разложениях по степеням ε . Для массового оператора можно и в этом случае сохранить формулу вида (29.19), но при этом под величинами M'_1, M'_2, \dots нужно понимать не полностью разложенные выражения или, говоря иначе, частичные суммы ряда теории возмущений.

§ 30. Некоторые свойства массового оператора¹⁾

Для массового оператора также можно установить спектральные представления и некоторые общие соотношения, подобно тому как это делается для функций Грина. При этом удобно использовать запаздывающие и опережающие функции Грина, которые обладают простыми аналитическими свойствами при любых температурах.

Рассмотрим пространственно однородную систему. Обозначим через $G(E)$ фурье-образ одночастичной запаздывающей или опережающей функции Грина в представлении, диагональном по импульсам:

$$G(E) = \langle\langle \mathcal{A}_p | \mathcal{A}_p^+ \rangle\rangle_E, \quad (30.1)$$

где $\mathcal{A}_p, \mathcal{A}_p^+$ — одночастичные операторы порождения и уничтожения частицы (Ферми, Бозе или Паули).

Запишем уравнение (29.10) в виде

$$(E - E_p - M(E))G(E) = \frac{i\sigma}{2\pi}, \quad \sigma = \langle[\mathcal{A}_p, \mathcal{A}_p^+]_\eta\rangle, \quad (30.2)$$

где E_p — собственная энергия частицы в состоянии p , $\sigma > 0$ (полагаем $\eta = -1$ для ферми-операторов и $\eta = 1$ для бозе- и паули-операторов). Отсюда для массового оператора получим следующее выражение:

$$-M(E) = \frac{i\sigma}{2\pi} G^{-1}(E) - \frac{i\sigma}{2\pi} G_0^{-1}(E), \quad (30.3)$$

$$G_0(E) = (E - E_p)^{-1} \frac{i\sigma}{2\pi}.$$

Допустим, что спектр системы ограничен ($I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) = 0$ при $|\omega| \geq \omega_{\max}$). Тогда для $|E| \rightarrow \infty$, согласно (26.13) и

¹⁾ Случай нуля температуры рассмотрели Латтинжер (1961, а) и С. В. Малеев (1961) и конечных температур — В. Л. Бонч-Бруевич (1962).

(26.8), будем иметь:

$$\begin{aligned} G(E) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\varepsilon}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega} = \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{\omega}{\varepsilon}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) \frac{d\omega}{E} + O(E^{-2}) = \\ &= \frac{i}{2\pi E} \langle [\mathcal{A}_p, \mathcal{A}_p^+]_{\eta} \rangle + O(E^{-2}) = \frac{i\sigma}{2\pi E} + O(E^{-2}). \end{aligned}$$

Отсюда получаем ¹⁾:

$$\lim_{|E| \rightarrow \infty} EG(E) = \frac{i\sigma}{2\pi}. \quad (30.4)$$

Согласно (30.3) имеем далее:

$$\lim_{|E| \rightarrow \infty} EG_0(E) = \frac{i\sigma}{2\pi}. \quad (30.5)$$

Поэтому из определения (30.2) и формул (30.4), (30.5) следует, что

$$\lim_{|E| \rightarrow \infty} E^{-1} M(E) = 0. \quad (30.6)$$

Для вещественных E ($E = \omega + i\varepsilon$, $\varepsilon \rightarrow +0$) выражение для спектральной интенсивности, согласно (27.2), можно записать в виде

$$\pm \left(e^{\frac{\omega}{\varepsilon}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) = 2 \operatorname{Re} G(\omega). \quad (30.7)$$

Введем обозначение

$$M(\omega + i\varepsilon) = M'(\omega) - iM''(\omega) (\varepsilon \rightarrow +0), \quad (30.8)$$

где M' , M'' — вещественные функции. Тогда, учитывая (30.2), выражение (30.7) можно переписать следующим

¹⁾ Приведенные выше соображения о поведении $G(E)$ при больших E имеют качественный характер. Более строгие формулировки см. в работах С. В. Малеева (1961) и В. Л. Бонч-Бруевича (1962).

образом:

$$\begin{aligned} \pm \left(e^{\frac{\omega}{\Phi}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) &= 2 \operatorname{Re} \frac{i\sigma}{2\pi} \frac{1}{(\omega - E_p - M') + iM''} = \\ &= \frac{\sigma}{\pi} \frac{M''}{(\omega - E_p - M')^2 + (M'')^2}. \end{aligned} \quad (30.9)$$

Принимая во внимание (30.6), видим, что

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} \omega \left(e^{\frac{\omega}{\Phi}} - \eta \right) I_{\mathcal{A}_p \mathcal{A}_p^+}(\omega) = 0, \quad (30.10)$$

следовательно,

$$\lim_{|\omega| \rightarrow \infty} \frac{M''(\omega)}{M'(\omega)} = 0. \quad (30.11)$$

По (30.3) полюсами массового оператора могут быть нули $G_0(E)$, $G(E)$. Так как $G_0^{-1}(E)$ (30.3) полюсов не имеет, то таковыми могут быть только нули полной функции Грина $G(E)$.

Наконец, можно показать, что полюсы массового оператора лежат на вещественной оси и что для него имеют место спектральные представления, подобные соответствующим представлениям для функций Грина.

§ 31. Реакция системы на внешнее воздействие¹⁾

Одной из задач статистической механики является вычисление кинетических коэффициентов и комплексной восприимчивости системы при действии на нее внешней силы, например, в случае ферромагнитного резонанса, электропроводности и др.

В последнее время в ряде работ был развит общий статистико-механический метод расчета кинетических коэффициентов через временные корреляционные функции от динамических переменных, описывающих рассматриваемую величину и внешнее воздействие на систему. Более общий подход к этому кругу вопросов связан с развитием термодинамики необратимых процессов (см., например, Мори (1956), Кубо и др. (1957) и

¹⁾ См. Келлен и Вельтон (1951), Кубо и Томита (1954), Кубо (1957), Д. Н. Зубарев (1960), (1971).

Д. Н. Зубарев (1961, а)). На этом пути оказывается возможным получить общие выражения для кинетических коэффициентов и установить ряд точных соотношений для них.

Мы рассмотрим здесь только более простой способ представления кинетических величин через временные корреляционные функции и свяжем полученные выражения с запаздывающими функциями Грина. Это позволит в дальнейшем получить общие формулы ферромагнитного резонанса (см. §§ 38, 39).

Пусть на систему действует возмущение, зависящее от времени. Представим полный гамильтониан системы в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}(t), \quad (31.1)$$

где \mathcal{H}_0 — не зависящий от времени гамильтониан невозмущенной задачи, $\mathcal{V}(t)$ — возмущение. Будем считать, что система с гамильтонианом \mathcal{H}_0 находится в состоянии статистического равновесия. Далее примем, что возмущение имеет следующий вид:

$$\mathcal{V}(t) = \sum_{\Omega} e^{\varepsilon t} e^{-i\Omega t} \mathcal{V}_{\Omega} \quad (\varepsilon > 0), \quad (31.2)$$

где \mathcal{V}_{Ω} — некоторые операторы, не зависящие от времени.

Согласно (8.2) статистический оператор ρ системы с гамильтонианом (31.1) удовлетворяет уравнению

$$i \frac{d\rho}{dt} = [\mathcal{H}, \rho] = [\mathcal{H}_0, \rho] + [\mathcal{V}(t), \rho]. \quad (31.3)$$

Пусть возмущение включается в момент времени t_0 , т. е.

$$\mathcal{V}(t) = \begin{cases} 0, & t < t_0, \\ \mathcal{V}(t), & t > t_0. \end{cases} \quad (31.4)$$

Будем искать решение уравнения (31.3) в виде

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho, \quad (31.5)$$

$$\rho_0 = Q_0^{-1} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}\right), \quad Q_0 = \text{Sp} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}_0}{\vartheta}\right) \quad (31.6)$$

при начальном условии

$$\rho|_{t=t_0} = \rho_0. \quad (31.7)$$

Очевидно, что ρ_0 — равновесный статистический оператор системы с гамильтонианом \mathcal{H}_0 , $\Delta\rho$ — приращение ρ , обязанное действию возмущения на систему.

Считая возмущение $\mathcal{V}(t)$ малым, нетрудно построить формальное решение для $\Delta\rho$ в виде ряда по степеням $\mathcal{V}(t)$. Подставляя (31.5) в (31.3), получим:

$$i \frac{d}{dt} \Delta\rho = [\mathcal{H}_0, \Delta\rho] + [\mathcal{V}(t), \rho_0] + [\mathcal{V}(t), \Delta\rho],$$

$$\Delta\rho|_{t=t_0} = 0. \quad (31.8)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$\Delta\rho = e^{-i\mathcal{H}_0 t} \widetilde{\Delta\rho} e^{i\mathcal{H}_0 t}. \quad (31.9)$$

Для $\widetilde{\Delta\rho}$ получим следующее уравнение:

$$i \frac{d}{dt} \widetilde{\Delta\rho} = [\widetilde{\mathcal{V}}(t), \rho_0] + [\widetilde{\mathcal{V}}(t), \widetilde{\Delta\rho}],$$

$$\widetilde{\Delta\rho}|_{t=t_0} = 0, \quad (31.10)$$

где введено обозначение

$$\widetilde{\mathcal{V}}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{V}(t) e^{-i\mathcal{H}_0 t}. \quad (31.11)$$

Решая уравнение (31.10) итерациями (в предположении малости $\widetilde{\Delta\rho}$), получаем, наконец

$$\Delta\rho = \sum_{n=1}^{\infty} (-t)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_1 dt_2 \dots dt_n \times$$

$$\times e^{-i\mathcal{H}_0 t} [\widetilde{\mathcal{V}}(t_1), [\widetilde{\mathcal{V}}(t_2), \dots, [\widetilde{\mathcal{V}}(t_n), \rho_0]] \dots] e^{i\mathcal{H}_0 t}. \quad (31.12)$$

Среднее значение любой динамической величины $\mathcal{A}(t)$ равно

$$\langle \mathcal{A}(t) \rangle = \text{Sp} \{ \mathcal{A}(t) \rho \} \quad (\text{Sp} \rho = 1) \quad (31.13)$$

или

$$\langle \mathcal{A}(t) \rangle = \text{Sp} \{ \mathcal{A}(t) \rho_0 \} + \text{Sp} \{ \mathcal{A}(t) \Delta\rho \}, \quad (31.14)$$

где второе слагаемое справа описывает приращение среднего значения величины $\mathcal{A}(t)$ под действием возмущения $\mathcal{V}(t)$, приложенного к системе.

Примем во внимание, что $\text{Sp} \{\Delta\rho\} = 0$ по построению. Поэтому, подставляя (31.12) в (31.14), получаем следующее выражение для приращения среднего значения величины $\mathcal{A}(t)$:

$$\delta \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \text{Sp} \{ \mathcal{A}(t) \rho \} - \text{Sp} \{ \mathcal{A}(t) \rho_0 \} = \sum_{n=1}^{\infty} \delta^{(n)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle, \quad (31.15)$$

где

$$\delta^{(n)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = (-i)^n \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_1 \dots dt_n \times \\ \times \langle [\dots [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{V}}(t_1)], \dots, \tilde{\mathcal{V}}(t_n)] \rangle, \quad (31.16)$$

величина $\tilde{\mathcal{A}}(t)$ определяется аналогично $\tilde{\mathcal{V}}(t)$ (31.11).

Используя (31.2), перепишем выражение (31.16) в следующем виде (см. также Кубо (1957)):

$$\delta^{(n)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \sum_{\Omega_1, \dots, \Omega_n} (-i)^n \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_1 \dots dt_n \times \\ \times e^{\sum_{j=1}^n \varepsilon t_j - i \sum_{j=1}^n \Omega_j t_j} \langle [\dots [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{V}}_{\Omega_1}(t_1)], \dots, \tilde{\mathcal{V}}_{\Omega_n}(t_n)] \rangle, \quad (31.17)$$

где $\tilde{\mathcal{V}}_{\Omega}(t)$ — гейзенберговское представление оператора \mathcal{V}_{Ω} (28.2) для невозмущенной системы:

$$\tilde{\mathcal{V}}_{\Omega}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{V}_{\Omega} e^{-i\mathcal{H}_0 t}. \quad (31.18)$$

Заметим, что в (31.15) — (31.17) символ $\langle \dots \rangle$ означает усреднение со статистическим оператором ρ_0 .

Вычисление средних по формулам (31.16) — (31.17) может оказаться затруднительным. Удобнее вычислять их через запаздывающие функции Грина, с которыми они связаны простыми соотношениями.

Для простоты сначала рассмотрим *линейное приближение* по возмущению $\mathcal{V}(t)$. Формулы линейного приближения широко используются при расчете таких величин, как, например, электропроводность, магнитная восприимчивость и др. В этом приближении формула (31.17)

для приращения среднего при мгновенном включении возмущения имеет вид

$$\begin{aligned}\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle &= \sum_{\Omega} (-i) \int_{t_0}^t dt_1 e^{et_1 - i\Omega t_1} \langle [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega}(t_1)] \rangle = \\ &= \sum_{\Omega} (-i) \int_{t_0}^t dt_1 e^{et_1 - i\Omega t_1} \theta(t - t_1) \langle [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega}(t_1)] \rangle.\end{aligned}$$

Принимая во внимание определение запаздывающей функции Грина (25.7), перепишем эту формулу следующим образом:

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \sum_{\Omega} (-i) \int_{t_0}^t dt_1 e^{et_1 - i\Omega t_1} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}}(t) | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega}(t_1) \rangle \rangle^{(r)}. \quad (31.19)$$

Переходя к фурье-образам функций Грина (25.17) и выполняя интегрирование по t_1 , получим:

$$\begin{aligned}\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle &= - \sum_{\Omega} e^{et - i\Omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_E^{(r)} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{E - \Omega - i\varepsilon} - \frac{\exp[-i(E - \Omega)(t - t_0) - \varepsilon(t - t_0)]}{E - \Omega - i\varepsilon} \right\}.\end{aligned}$$

Будем рассматривать E как комплексную переменную и применим теорему Коши о вычетах. Поскольку запаздывающая функция аналитична в верхней полуплоскости E (см. (26.11)), то для вычисления первого интеграла удобно замкнуть контур в этой же полуплоскости. В результате получим для приращения среднего значения при включении взаимодействия в момент времени t_0 ($t_0 > -\infty$) следующее выражение:

$$\begin{aligned}\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle &= -2\pi i \sum_{\Omega} e^{et - i\Omega t} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} + \\ &+ \sum_{\Omega} e^{et_0 - i\Omega t_0} \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_E^{(r)} \frac{e^{-iE(t - t_0)}}{E - \Omega - i\varepsilon}. \quad (31.20)\end{aligned}$$

Контур интегрирования второго интеграла следует замыкать, поскольку $t - t_0 > 0$, в нижней полуплоскости (если это вообще возможно).

Если возмущение включается адиабатически, в момент времени $t_0 = -\infty$, то формула (31.20) принимает вид

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = -2\pi i \sum_{\Omega} e^{i\Omega t} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)}. \quad (31.21)$$

Если в момент времени t_0 возмущение, ранее включенное адиабатически, мгновенно выключается, то изменение среднего приращения \mathcal{A} будет равно разности выражений (31.21) и (31.20)

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = - \sum_{\Omega} e^{i\Omega t_0 - i\Omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_E^{(r)} \frac{e^{-iE(t-t_0)}}{E - \Omega - i\epsilon}. \quad (31.22)$$

Формулы (31.20) — (31.22) представляют искомые выражения для приращения среднего значения динамической переменной \mathcal{A} при действии на систему внешнего возмущения, зависящего от времени.

Они имеют простой физический смысл. При бесконечно медленном, адиабатическом включении возмущения среднее значение динамической переменной \mathcal{A} получает приращение $\delta \langle \mathcal{A} \rangle$ (31.21). Если включение произошло мгновенно в момент времени $t_0 > -\infty$, то в системе возбуждаются собственные колебания, которые ведут к дополнительному изменению приращения среднего значения \mathcal{A} , описываемому вторым слагаемым формулы (31.20). Собственные колебания возбуждаются и при мгновенном выключении возмущения, что ведет к изменению $\delta \langle \mathcal{A} \rangle$ согласно (31.22).

Допустим теперь, что функция Грина в нижней полуплоскости (на нефизическом листе) имеет комплексный полюс

$$E = E_v - i\Gamma_v \quad (\Gamma_v > 0).$$

Тогда, согласно (31.20), (31.22), при мгновенном включении возмущения в момент времени t_0

$$\begin{aligned} \delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = & -2\pi i \sum_{\Omega} e^{i\Omega t - i\Omega t_0} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} + \\ & + 2\pi i \sum_{\Omega} e^{i\Omega t_0 - i\Omega t} e^{-iE_v(t-t_0) - \Gamma_v(t-t_0)} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{Y}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} \end{aligned} \quad (31.23)$$

и при мгновенном выключении в момент времени t_0

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = -2\pi i \sum_{\Omega} e^{st_0 - i\Omega t_0} e^{-iE_{\nu}(t-t_0) - \Gamma_{\nu}(t-t_0)} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{V}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)}. \quad (31.24)$$

Мы видим отсюда, что изменение $\langle \mathcal{A} \rangle$, обязанное возникновению собственных колебаний в системе, меняется с частотой E_{ν} и затухает с декрементом Γ_{ν} . Это соответствует интерпретации вещественных частей полюсов функций Грина как энергий элементарных возбуждений (или собственных частот) системы, а их мнимых частей — как времен жизни элементарных возбуждений.

Пусть

$$\mathcal{V}_{\Omega} = \mathcal{B}_{\Omega} h,$$

где h — число, характеризующее интенсивность возмущения. Например, h — напряженность переменного магнитного поля в задаче о ферромагнитном резонансе или напряженность электрического поля в задаче об электропроводности. Перепишем выражение (31.21) в виде

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} \chi_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\Omega) h, \quad (31.25)$$

где χ — комплексная восприимчивость системы,

$$\chi_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\Omega) = -2\pi i \langle \langle \tilde{\mathcal{A}} | \tilde{\mathcal{B}}_{\Omega} \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} \quad (31.26)$$

(параметр ϵ , обеспечивающий адиабатичность включения возмущения, полагаем равным нулю).

Принимая во внимание формулу (25.17), восприимчивости можно придать еще одну часто употребляемую форму записи:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(\Omega) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\Omega(t-t')} \langle \langle \tilde{\mathcal{A}}(t) | \tilde{\mathcal{B}}_{\Omega}(t') \rangle \rangle^{(r)} = \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\Omega(t-t')} \theta(t-t') \langle [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{B}}_{\Omega}(t')] \rangle. \end{aligned} \quad (31.27)$$

Соотношения вида (31.27), устанавливающие связь восприимчивости системы с фурье-компонентой среднего

значения коммутатора $[\mathcal{A}(t), \mathcal{B}_\Omega(t')]$, обычно называются флуктуационно-диссипационной теоремой (см. Келлен и Вельтон (1951), Кубо (1957)).

Поскольку комплексная восприимчивость системы выражается через функцию Грина по формуле (31.26), то для нее имеют место дисперсионные формулы и общие соотношения, установленные в §§ 27, 28.

Высшие приближения в рамках принятого рассмотрения можно получить, учитывая следующие по степеням \mathcal{V} члены разложения $\delta \langle \mathcal{A} \rangle$ в (31.17).

Будем для простоты считать, что возмущение включено адиабатически. Тогда (31.17) можно переписать в виде (С. В. Тябликов и Пу Фу-чо (1961))

$$\begin{aligned} \delta^{(n)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \\ = \sum_{\Omega_1, \dots, \Omega_n} (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n \exp \left(i \sum_{j=1}^n t_j - i \sum_{j=1}^n \Omega_j t_j \right) \times \\ \times G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)}(t - t_1, t_1 - t_2, \dots, t_{n-1} - t_n), \quad (31.28) \end{aligned}$$

где $G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)}$ есть n -временная запаздывающая функция Грина вида

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)}(t - t_1, t_1 - t_2, \dots, t_{n-1} - t_n) = \\ = \theta(t - t_1) \theta(t_1 - t_2) \dots \theta(t_{n-1} - t_n) \times \\ \times \langle [\dots [\tilde{\mathcal{A}}(t), \tilde{\mathcal{V}}_{\Omega_1}(t_1)], \dots, \tilde{\mathcal{V}}_{\Omega_n}(t_n)] \rangle. \quad (31.29) \end{aligned}$$

Из циклической инвариантности шпура следует, что среднее значение в (31.29) зависит только от разностей $t - t_1, \dots, t_{n-1} - t_n$. Фурье-образ этой функции определяется выражением

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)}(t - t_1, t_1 - t_2, \dots, t_{n-1} - t_n) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 \dots dE_n G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)}(E_1, E_2, \dots, E_n) \times \\ \times e^{-iE_1(t-t_1) - \dots - iE_n(t_{n-1}-t_n)}. \quad (31.30) \end{aligned}$$

Из (31.28), (31.30) следует формула, являющаяся обобщением формулы (31.21) ¹⁾:

$$\delta^{(n)} \langle \mathcal{A}(t) \rangle = \sum_{\Omega_1, \dots, \Omega_n} (-2\pi i)^n e^{-i \sum_{j=1}^n \Omega_j t} \times \\ \times G_{\mathcal{A}; \nu_{\Omega_1} \dots \nu_{\Omega_n}}^{(n)} (\Omega_1 + \Omega_2 + \dots + \Omega_n + i\epsilon n, \\ \Omega_2 + \dots + \Omega_n + i\epsilon(n-1), \dots, \Omega_{n-1} + \Omega_n + 2i\epsilon, \Omega_n + i\epsilon). \quad (31.31)$$

Для определения многовременных функций, так же как для двухвременных, можно составить цепочки уравнений дифференцированием по одному из временных аргументов и затем искать их решения. Далее для них можно установить соответствующие аналоги спектральных представлений. Спектральные представления для некоммутаторных многовременных запаздывающих и опережающих функций Грина рассматривались В. Л. Бонч-Бруевичем (1959).

¹⁾ Формулы такого типа применялись Мадсенем и Танакой (1969) при описании нелинейных и параметрических явлений в ферромагнетиках (Прим. ред.).

ГЛАВА VIII

ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА ФУНКЦИЙ ГРИНА

В настоящей главе будут разобраны приложения метода функций Грина к нескольким типичным задачам теории магнетизма: расчет намагниченности ферромагнетика в широком интервале температур, низкотемпературные разложения, приложения к теории ферромагнитного резонанса и рассеяния нейтронов спиновыми системами. В заключение указываются некоторые дальнейшие приложения метода.

§ 32. Спиновые волны при конечных температурах ¹⁾

В этом и следующих двух параграфах мы рассмотрим задачу о приближенном определении намагниченности изотропного ферромагнетика в широком интервале температур. Для простоты ограничимся сначала исследованием случая спина $S = 1/2$.

Гамильтониан изотропного ферромагнетика в паули-операторах (см. (14.14) — (14.16)) имеет вид

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}, \quad (32.1)$$

где

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N J(0), \quad (32.2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \left[\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right] \sum_f n_f - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2} \end{aligned} \quad (32.3)$$

¹⁾ См. Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов (1959), С. В. Тябликов (1959, б).

и где

$$J(v) = \sum_f I(f) e^{i(f, v)}, \quad I(0) = 0. \quad (32.4)$$

Уравнения движения для операторов b имеют, согласно (5.13), следующий вид:

$$i \frac{db_f}{dt} = \left[\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right] b_f - \frac{1}{2} \sum_{f'} I(f - f') b_{f'} + \\ + \sum_{f'} I(f - f') n_f b_{f'} - \sum_{f'} I(f - f') b_f n_{f'}. \quad (32.5)$$

Введем функции Грина $\langle\langle b_f | b_g^+ \rangle\rangle$, $\langle\langle n_f b_{f_2} | b_g^+ \rangle\rangle$, ... Для них, в соответствии с (25.18), получим цепочку уравнений

$$E \langle\langle b_f | b_g^+ \rangle\rangle = \frac{i\sigma_{1/2}}{2\pi} \Delta(f - g) + \left[\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right] \langle\langle b_f | b_g^+ \rangle\rangle - \\ - \frac{1}{2} \sum_{f'} I(f - f') \langle\langle b_{f'} | b_g^+ \rangle\rangle + \sum_{f'} I(f - f') \langle\langle n_f b_{f'} | b_g^+ \rangle\rangle - \\ - \sum_{f'} I(f - f') \langle\langle n_{f'} b_f | b_g^+ \rangle\rangle, \dots \\ \sigma_{1/2} = \langle b_f b_f^+ - b_f^+ b_f \rangle = \langle 1 - 2n_f \rangle. \quad (32.6)$$

Мы не выписываем уравнений для высших функций Грина, поскольку ограничимся здесь рассмотрением низшего приближения. Цепочку уравнений (32.6) оборвем с помощью приближенного приема, выражая вторые функции Грина через первые:

$$\langle\langle n_{f_1} b_{f_2} | b_g^+ \rangle\rangle \rightarrow \langle n_{f_1} \rangle \langle\langle b_{f_2} | b_g^+ \rangle\rangle. \quad (32.7)$$

Заметим, что в силу трансляционной инвариантности величины $\langle n_f \rangle$ не зависят от индекса узла и связаны со средней намагниченностью, отнесенной к одному узлу, соотношением

$$\bar{m} = \mu \langle S_f^z \rangle = \frac{\mu}{2} \sigma_{1/2}, \quad \sigma_{1/2} = \langle 1 - 2n_f \rangle = 1 - 2\bar{n}. \quad (32.8)$$

В результате для первой функции получаем следующее уравнение:

$$\left\{ E - \left[\mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \right] \right\} \langle\langle b_f | b_g^+ \rangle\rangle + \\ + \sum \frac{1}{2} \sigma_{1/2} I(f - f') \langle\langle b_{f'} | b_g^+ \rangle\rangle = \frac{i\sigma_{1/2}}{2\pi} \Delta(f - g). \quad (32.9)$$

В применении к теории ферромагнетизма предложенный метод расщепления (32.7) соответствует улучшенному методу приближенного вторичного квантования.

Действительно, в методе приближенного вторичного квантования операторы Паули b_f, b_g^+ приближенно объявляют бозевскими, а вкладом от третьего члена в гамильтониане (32.3) пренебрегают. Если написать при этих ограничениях уравнения для функций Грина, то они будут соответствовать уравнению (32.9) для $\sigma_{1/2} = 1$ или $\langle n_f \rangle = 0$. При этом цепочка обрывается на первом из них.

Далее можно попытаться улучшить метод приближенного вторичного квантования, перестроив гамильтониан (32.3) следующим образом:

$$\mathcal{H} = \Delta \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1,$$

где

$$\Delta \mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} N J(0) \bar{n}^2,$$

$$\mathcal{H}_0 = \left[\mu H + \left(\frac{1}{2} - \bar{n} \right) J(0) \right] \sum_f n_f - \sum_{f_1, f_2} \left(\frac{1}{2} - \bar{n} \right) I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2},$$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) (n_{f_1} - \bar{n})(n_{f_2} - \bar{n}) - \sum_{f_1, f_2} \bar{n} I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}.$$

При достаточно низких температурах малыми величинами будут средние значения спиновых отклонений \bar{n} и разности $n_f - \bar{n}$. Поэтому оператор \mathcal{H}_1 можно рассматривать как малое возмущение по сравнению с \mathcal{H}_0 . Легко видеть, что в спин-волновом приближении (при пренебрежении оператором \mathcal{H}_1) цепочка уравнений будет обрываться на первом из них, совпадая с уравнением (32.9).

Отметим также, что расщепление (32.7) соответствует пренебрежению флуктуациями спиновых отклонений.

В силу трансляционной инвариантности задачи функция Грина

$$G_{f-g}(E) = \langle\langle b_f | b_g^+ \rangle\rangle \quad (32.10)$$

зависит только от разности координат узлов решетки. Поэтому уравнение (32.9) легко решается с помощью преобразования Фурье:

$$G_h(E) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} e^{i(h, \nu)} G_{\nu}(E). \quad (32.11)$$

Для $G_{\nu}(E)$ получаем выражение

$$G_{\nu}(E) = \frac{i\sigma_{1/2}}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\nu}}, \quad (32.12)$$

где E_{ν} — энергия элементарных возбуждений или спиновых волн,

$$E_{\nu} = \mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) (1 - \gamma_{\nu}) = \mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_{\nu},$$

$$\gamma_{\nu} = J(\nu)/J(0), \quad (32.13)$$

величины $J(0)$, $J(\nu)$ и $\sigma_{1/2}$ определяются формулами (32.4) и (32.8).

Мы ограничились здесь нулевым приближением по энергии взаимодействия элементарных возбуждений. Поэтому одночастичная функция Грина (32.12) имеет только простые полюсы на вещественной оси. Время жизни элементарных возбуждений в этом приближении равно бесконечности.

Сравнивая выражение (32.13) с полученным ранее выражением (15.6), видим, что различие обязано появлению в качестве множителя в (32.13) относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$. Так как последняя зависит от температуры, то и энергия E_{ν} также зависит от температуры. Таким образом, мы получили, как это вообще характерно для метода функций Грина, спектр элементарных возбуждений, зависящий от температуры.

Первые попытки введения в спектр спиновых волн поправок на относительную намагниченность принадлежит Геберу (1954) и Шафроту (1954). Эти авторы использовали преобразование Гольштейна — Примакова и пытались улучшить результаты путем термодинамического учета обычно отбрасываемых членов. Однако они получили несамосогласованные решения. Более корректными оказались попытки Браута и Хакена (1960), Энглерта (1960) и В. Л. Гинзбурга и В. М. Файна (1960),

которым другими методами также удалось получить выражение вида (32.13) для энергии спиновых волн.

В выражение для элементарных возбуждений (спиновых волн) (32.13) входит оставшаяся пока неизвестной величина относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$. Получим уравнение для нее.

Определим спектральную интенсивность для функции (32.12). Подставляя (32.12) в (26.15), получаем при учете (26.16):

$$I_v(\omega) = \sigma_{1/2} \bar{N}_v \delta(\omega - E_v), \quad (32.14)$$

$$\bar{N}_v = (e^{E_v/kT} - 1)^{-1}. \quad (32.15)$$

Для функции (32.10) спектральная интенсивность будет иметь вид

$$I_{fg}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_v e^{i(f-g, v)} I_v(\omega) = \frac{\sigma_{1/2}}{N} \sum_v e^{i(f-g, v)} \bar{N}_v \delta(\omega - E_v). \quad (32.16)$$

Воспользуемся теперь формулами (26.5), определяющими среднее значение произведения двух операторов через спектральную интенсивность. Подставляя (32.16) в (26.5), будем иметь:

$$\langle b_g^+ b_f \rangle = \frac{\sigma_{1/2}}{N} \sum_v e^{i(f-g, v)} \bar{N}_v. \quad (32.17)$$

Отсюда для $g = f$ находим:

$$\bar{n} = \frac{\sigma_{1/2}}{N} \sum_v \bar{N}_v \quad (\bar{n} = \langle b_f^+ b_f \rangle). \quad (32.18)$$

Замечая, что $\sigma_{1/2} = 1 - 2\bar{n}$, этому уравнению удобно придать следующий вид:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{1}{N} \sum_v \text{cth} \frac{E_v}{2\theta} \quad (32.19)$$

или

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{1/2} &= \frac{1}{1 + 2P_{1/2}}, \\ P_{1/2} &= \frac{1}{N} \sum_v \bar{N}_v. \end{aligned} \right\} \quad (32.20)$$

Итак, в рассматриваемом приближении спектр элементарных возбуждений (32.13) оказывается зависящим от температуры через относительную намагниченность. Для определения последней имеем трансцендентное уравнение (32.19) или (32.20). Перейдем к исследованию решений этих уравнений.

§ 33. Намагниченность при конечных температурах¹⁾

Определение намагниченности $\sigma_{1/2}$ как функции температуры и поля сводится в данном приближении к решению трансцендентного уравнения (32.19) или (32.20). Покажем, что оно дает достаточно хорошую интерполяцию для намагниченности во всем интервале температур, а именно: в пределе при $\vartheta \rightarrow 0$ первые члены разложения $\sigma_{1/2}$ по степеням ϑ совпадают с соответствующими членами разложения спин-волнового приближения (см. § 15); при $\vartheta \leq \vartheta_c$ (ϑ_c — температура Кюри) имеет место совпадение с результатами приближения молекулярного поля (см. § 21); наконец, при $\vartheta > \vartheta_c$ — совпадение разложения для $\sigma_{1/2}$ по степеням ϑ^{-1} с первыми членами ряда теории возмущений для высоких температур (см. § 24).

Перейдем в (32.19), (32.20) по формуле (П2.14) от сумм к интегралам:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \operatorname{cth} \frac{\mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_v}{2\vartheta} dv, \quad (33.1)$$

$$\sigma_{1/2} = \frac{1}{1 + 2P_{1/2}}, \quad P_{1/2} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \bar{N}_v dv, \quad (33.2)$$

где $v = V/N$ — объем на один узел. Интегралы в (33.1), (33.2) берутся по первой приведенной зоне.

Определим зависимость намагниченности от температуры и поля в разных интервалах температур.

а) *Низкие температуры* ($\vartheta \rightarrow 0$). В этом случае удобнее использовать уравнение для $\sigma_{1/2}$ в форме (33.2). Величина $P_{1/2}$ описывает отклонение намагниченности от насыщения и при $\vartheta \rightarrow 0$ может рассматриваться как

¹⁾ С. В. Тябликов (1959, 6).

малая, поэтому уравнение для $\sigma_{1/2}$ можно переписать в виде ряда

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2P_{1/2} + (2P_{1/2})^2 - \dots \quad (33.3)$$

Отличие $P_{1/2}$ (33.2) от $P_{1/2}$ (15.10) состоит в том, что теперь энергия спиновой волны зависит от намагниченности $\sigma_{1/2}$. Поэтому, используя разложение вида (15.12), можем записать:

$$P_{1/2} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n \frac{\mu H}{\Phi}} \frac{v}{(2\pi)^3} \int e^{-n \frac{\sigma_{1/2}}{2\Phi} J_0 \mathcal{E}_v} dv. \quad (33.4)$$

При $\Phi \rightarrow 0$ основной вклад в (33.4) дадут спиновые волны с малыми v . Поэтому, повторяя соответствующие рассуждения § 15 после формулы (15.12), получим в низшем порядке по степеням температуры:

$$P_{1/2} = \frac{v}{(\bar{\delta}^2)^{3/2}} \left(\frac{\Phi}{\frac{\pi}{3} J(0) \sigma_{1/2}} \right)^{1/2} Z_{1/2} \left(\frac{\mu H}{\Phi} \right) + O(\Phi^{1/2}), \quad (33.5)$$

где

$$\bar{\delta}^2 = \frac{\sum f^2 I(f)}{\sum I(f)}.$$

Подставляя (33.5) в (33.3) и ограничиваясь учетом членов порядка $\Phi^{3/2}$ включительно, получаем для $\sigma_{1/2}$ приближенное выражение следующего вида:

$$\sigma_{1/2} \cong 1 - 2P_{1/2} \cong 1 - \frac{2v}{(\bar{\delta}^2)^{3/2}} \left(\frac{\Phi}{\frac{\pi}{3} J(0)} \right)^{1/2} Z_{1/2} \left(\frac{\mu H}{\Phi} \right). \quad (33.6)$$

Как легко видеть, формула (33.6) совпадает с формулой (15.15) Блоха (1930), (1932), полученной в методе приближенного вторичного квантования.

Вычислим следующие по степеням температуры слагаемые в $\sigma_{1/2}$. Ограничимся рассмотрением простейших кубических решеток (простой, объемноцентрированной и гранецентрированной) и приближения ближайших соседей. В этом случае

$$\bar{\delta}^2 = \delta^2, \quad J(0) = Iz,$$

где δ — расстояние между ближайшими соседями, I — значение обменного интеграла для ближайших соседей, z — их число. Далее аналогично (15.19) получим:

$$\begin{aligned} \sigma_{1/2} = 1 - 2 \left[\rho Z_{3/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \left(\frac{\tau}{\sigma_{1/2}} \right)^{3/2} + \frac{3\pi}{4} \rho Z_{5/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \left(\frac{\tau}{\sigma_{1/2}} \right)^{5/2} + \right. \\ \left. + \pi^2 \omega \rho Z_{7/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \left(\frac{\tau}{\sigma_{1/2}} \right)^{7/2} + \dots \right] + \\ + 4 \left[\rho Z_{3/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \left(\frac{\tau}{\sigma_{1/2}} \right)^{1/2} + \dots \right]^2 - \dots, \quad (33.7) \end{aligned}$$

где

$$\tau = \frac{3\vartheta}{\pi I z}, \quad h = \frac{3\mu H}{\pi I z}, \quad (33.8)$$

ω — численный множитель, зависящий от геометрии решетки (см. (15.21)).

Будем решать это уравнение методом итераций. Возьмем за нулевое приближение $\sigma_{1/2} = 1$, тогда нетрудно найти следующее разложение $\sigma_{1/2}$ по степеням температуры:

$$\begin{aligned} \sigma_{1/2} = 1 - 2\rho Z_{3/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{1/2} - \frac{3\pi}{2} \rho Z_{5/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{3/2} - \\ - 2\rho^2 Z_{3/2}^2 \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{5/2} - 2\pi^2 \omega \rho Z_{7/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{7/2} - \dots \quad (33.9) \end{aligned}$$

Появление членов порядка $\tau^{3/2}$ и выше обязано следующим причинам. Во-первых, зависимости энергии спиновой волны от волнового вектора (32.13), как следствие ведущей к тривиальным разложениям вида (15.19). Во-вторых, особенностям кинематических условий для спиновых операторов, которые ведут к зависимости $\sigma_{1/2}$ от $P_{1/2}$ вида (33.2) или (33.3). В-третьих, зависимости энергии спиновой волны от температуры только через $\sigma_{1/2}$. В случае низких температур последний результат не точен; он связан с приближенным характером расщепления (32.7). Поэтому разложение (33.9) годно только с точностью до членов порядка $\tau^{5/2}$ включительно.

б) *Высокие температуры* ($\vartheta \leq \vartheta_c$, $H = 0$)¹⁾. Уравнение для $\sigma_{1/2}$ (33.1) не имеет решения $\sigma_{1/2} \neq 0$ при

¹⁾ Случай $H \neq 0$ детально изучен Флэксом (1972) (Прим. ред.).

$H = 0$ и $\vartheta \rightarrow \infty$. Действительно, пусть $\sigma_{1/2}$ конечна при некоторой достаточно большой ϑ ; тогда

$$\operatorname{cth} \frac{\sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_v}{4\vartheta} \cong \frac{4\vartheta}{\sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_v}.$$

Подставляя это выражение в (33.1), видим, что правая часть его может быть сделана сколь угодно большой за счет выбора ϑ , тогда как левая остается конечной. Отсюда следует, что при достаточно больших ϑ и $H = 0$ намагниченность не может оставаться конечной.

Примем теперь, что (при $H = 0$) $\sigma_{1/2} \neq 0$, если $\vartheta < \vartheta_c$, и $\sigma_{1/2} \rightarrow 0$, если $\vartheta \rightarrow \vartheta_c$, где ϑ_c — некоторая постоянная, имеющая смысл температуры Кюри.

Пусть $\sigma_{1/2} \ll 1$, тогда $\frac{\sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_v}{4\vartheta} \ll 1$ и для гиперболического котангенса можно воспользоваться разложением (см. И. М. Рыжик и И. С. Градштейн (1951))

$$\operatorname{cth} \xi = \frac{1}{\xi} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{(2n)!} \xi^{2n-1}, \quad (33.10)$$

где B_{2n} — числа Бернулли ($B_2 = \frac{1}{6}$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_6 = \frac{1}{42}$, ...).

Подставляя (33.10) в (33.1), получим:

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{\tau}{\sigma_{1/2}} C + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{(2n)!} C_{2n-1} \left(\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \right)^{2n-1}, \quad (33.11)$$

где τ — безразмерная температура,

$$\tau = \frac{4\vartheta}{J(0)} \quad (33.12)$$

и где

$$C = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{dv}{\mathcal{E}_v}, \quad C_m = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \mathcal{E}_v^m dv. \quad (33.13)$$

В приближении ближайших соседей нетрудно показать, что первые три коэффициента C_m имеют вид

$$C_1 = 1, \quad C_2 = 1 + \frac{1}{z}, \quad C_3 = 1 + \frac{3}{z}, \quad (33.14)$$

где z — число ближайших соседей.

Перепишем уравнение (33.11) в виде

$$\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} = \sqrt{\frac{3}{\tau} (1 - C\tau)} \left\{ 1 + 3 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2^{2n} B_{2n}}{(2n)!} C_{2n-1} \left(\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \right)^{2n-2} \right\}^{-1/2} \quad (33.15)$$

и будем решать его методом итераций. Возьмем за нулевое приближение $\sigma_{1/2} = 0$, тогда в первом приближении

$$\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} = \sqrt{\frac{3}{\tau} (1 - C\tau)}. \quad (33.16)$$

Полученное выражение удобно переписать несколько иначе:

$$\sigma_{1/2} = \sqrt{3\tau \left(1 - \frac{\tau}{\tau_C} \right)} \cong \sqrt{3\tau_C \left(1 - \frac{\tau}{\tau_C} \right)}, \quad (33.17)$$

где

$$\tau_C^{-1} = C = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{dv}{\mathcal{E}_v} \quad (33.18)$$

— значение температуры, при которой исчезает намагниченность. Очевидно, что τ_C можем отождествить с температурой Кюри. В обычных единицах она равна

$$\theta_C = \frac{1}{4} J(0) \tau_C = \frac{J(0)}{4C}. \quad (33.19)$$

Сравнивая (33.17) с (21.19), видим, что вблизи точки Кюри уравнение (33.1) дает такую же температурную зависимость, как и приближение молекулярного поля. Выражение для температуры Кюри вида (33.18) впервые получил Лэкс (1955) при рассмотрении модели Изинга.

Постоянная C зависит от геометрии кристаллической решетки. Для простой кубической, объемноцентрированной и гранецентрированной решеток и приближения ближайших соседей она равна (см., например, И. М. Рыжик и И. С. Градштейн (1951))

$$C = 1,5164; 1,393; 1,345. \quad (33.20)$$

Приведенная температура Кюри равна соответственно

$$\tau_C = 0,659; 0,718; 0,743. \quad (33.21)$$

Следующие поправки к решению (33.16) также не-
трудно найти. Так, во втором приближении

$$\sigma_{1/2} = \tau \zeta \left(1 + \frac{1}{30} \frac{z+3}{z} \zeta^2 \right), \quad \zeta = \sqrt{\frac{3}{\tau} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_C} \right)} \quad (33.22)$$

и т. д. (z — число ближайших соседей).

в) *Высокие температуры* ($\vartheta > \vartheta_C$, $H \neq 0$). Для этого случая воспользуемся разложениями другого вида, а именно:

$$\begin{aligned} \text{cth} \frac{\mu H + \frac{1}{2} \sigma_{1/2} J(0) \mathcal{E}_v}{2\vartheta} &= \text{cth} \left(\frac{h}{\tau} + \frac{\sigma_{1/2} \mathcal{E}_v}{\tau} \right) = \\ &= \frac{1}{t_0} \left\{ 1 + (1 - t_0^2) \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_1}{t_0} \right)^n \right\}, \end{aligned} \quad (33.23)$$

где

$$t_0 = \text{th} \frac{h}{\tau}, \quad t_1 = \text{th} \frac{\sigma_{1/2} \mathcal{E}_v}{\tau}, \quad (33.24)$$

τ , h — безразмерные величины:

$$\tau = \frac{4\vartheta}{J(0)}, \quad h = \frac{2\mu H}{J(0)}. \quad (33.25)$$

При этом уравнение (33.1) принимает вид

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{1}{t_0} \left\{ 1 + (1 - t_0^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{t_0^n} \frac{v}{(2\pi)^3} \int t_1^n d\mathbf{v} \right\}. \quad (33.26)$$

Разложим, далее, t_1 в ряд по степеням τ^{-1} :

$$t_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2^{2k} (2^{2k} - 1)}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{\sigma_{1/2} \mathcal{E}_v}{\tau} \right)^{2k-1}. \quad (33.27)$$

Подставим (33.27) в (33.26) и ограничимся членами порядка τ^{-2} включительно. Тогда приближенное уравнение для $\sigma_{1/2}$ будет иметь вид

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{1}{t_0} \left\{ 1 - C_1 \frac{1 - t_0^2}{t_0} \frac{\sigma_{1/2}}{\tau} + C_2 \frac{1 - t_0^2}{t_0^2} \left(\frac{\sigma_{1/2}}{\tau} \right)^2 - \dots \right\}, \quad (33.28)$$

где коэффициенты C_n определяются формулами (33.13), (33.14). Возьмем за нулевое приближение

$$\sigma_{1/2} = t_0 = \operatorname{th} \frac{h}{\tau}. \quad (33.29)$$

Далее методом итераций нетрудно получить выражение для $\sigma_{1/2}$ с любой заданной степенью точности относительно τ^{-1} . Во втором приближении будем иметь:

$$\sigma_{1/2} = t_0 + t_0(1 - t_0^2)\tau^{-1} + t_0(1 - t_0^2)\left(\frac{z-1}{z} - 2t_0^2\right)\tau^{-2} + \dots \quad (33.30)$$

Разложение (33.30) хорошо сходится для температур выше точки Кюри. В этой области можно рассматривать как малый параметр безразмерное отношение τ_C/τ , что делает возможным применение стандартной теории возмущений (см. § 24). Сравним теперь выражение для $\sigma_{1/2}$ (33.30), найденное из приближенного уравнения (33.1), с выражением (24.24), полученным по теории возмущений для высоких температур. Так как $t_0 = \operatorname{th} \frac{h}{\tau} \ll 1$, то приближенно:

$$\Delta\sigma_{1/2} = \sigma_{(33.30)} - \sigma_{(24.24)} \cong \frac{t_0}{z\tau^2}.$$

Относительная ошибка невелика,

$$\frac{\Delta\sigma_{1/2}}{\sigma_{1/2}} \cong \frac{1}{z\tau^2}, \quad (33.31)$$

и мы видим, что и в этом случае приближенное уравнение (33.1) дает достаточно удовлетворительное описание зависимости намагниченности от температуры и поля.

В окрестности точки Кюри разложения вида (33.30) сходятся медленно, здесь можно найти более удобные разложения. Однако более существенной задачей для этой области температур является построение более точных решений системы уравнений для функций Грина, чем уравнения (33.1) или (33.2).

Возвращаясь к предыдущим результатам, видим, что приближенное уравнение для относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$ (33.1) или (33.2) в главных членах разло-

жений в предельных случаях $\vartheta \rightarrow 0$, $\vartheta \leq \vartheta_c$ ($H = 0$) и $\vartheta \gg \vartheta_c$ приводит к результатам теории спиновых волн приближения молекулярного поля и теории возмущений для высоких температур. Можно думать, что оно дает достаточно удовлетворительное описание и в промежуточных областях температур.

§ 34. Средняя энергия ферромагнетика¹⁾

В этом параграфе мы покажем, как можно вычислить среднюю энергию по первой функции Грина.

Возьмем гамильтониан системы в виде (14.14) — (14.16)

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4, \quad (34.1)$$

где

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} NJ(0), \quad (34.2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = \mu H \sum_f n_f + \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} - \\ - \frac{1}{2} \sum I(f_1 - f_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}, \end{aligned} \quad (34.3)$$

$$\mathcal{H}_4 = -\frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) n_{f_1} n_{f_2}. \quad (34.4)$$

Умножим уравнение движения для оператора b_f (32.5) слева на b_f^+ и просуммируем по всем f . Усредняя полученное равенство, получим:

$$\sum_f \langle b_f^+ i \frac{db_f}{dt} \rangle = \langle \mathcal{H}_2 \rangle + 2 \langle \mathcal{H}_4 \rangle. \quad (34.5)$$

С другой стороны,

$$\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle = \mathcal{E}_0 + \langle \mathcal{H}_2 \rangle + \langle \mathcal{H}_4 \rangle. \quad (34.6)$$

Исключая из (34.5), (34.6) среднее значение четверной формы, получаем следующее выражение для средней энергии системы:

$$\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle = \mathcal{E}_0 + \frac{1}{2} \langle \mathcal{H}_2 \rangle + \frac{1}{2} \sum_f \langle b_f^+ i \frac{db_f}{dt} \rangle. \quad (34.7)$$

¹⁾ Д. Н. Зубарев (1961, 6), Бэйм и Сесслер (1963).

Примем во внимание, что согласно (26.2):

$$\langle b_g^+(t') b_f(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{fg}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega,$$

где $I_{fg}(\omega)$ — спектральная интенсивность. Дифференцируя это выражение по t и переходя к пределу при $t' \rightarrow t$, получим:

$$\langle b_g^+ i \frac{db_f}{dt} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{fg}(\omega) \omega d\omega, \quad (34.8)$$

кроме того,

$$\langle b_g^+ b_f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I_{fg}(\omega) d\omega. \quad (34.9)$$

Подставим в (34.7) выражение для \mathcal{H}_2 (34.3) и примем во внимание формулы (34.8), (34.9). В результате будем иметь:

$$\begin{aligned} 2\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle = & 2\mathcal{E}_0 + \left(\mu H + \frac{1}{2} J(0) \right) \sum_f \int_{-\infty}^{\infty} I_{ff}(\omega) d\omega - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) \int_{-\infty}^{\infty} I_{ff_2}(\omega) d\omega + \sum_f \int_{-\infty}^{\infty} I_{ff}(\omega) \omega d\omega. \end{aligned} \quad (34.10)$$

Введем преобразование Фурье для спектральной интенсивности

$$I_{fg}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_v I_v(\omega) e^{i(f-g, v)}. \quad (34.11)$$

Тогда (34.10) преобразуется к виду

$$\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle = \mathcal{E}_0 + N \frac{1}{2N} \sum_v \int_{-\infty}^{\infty} (E_v^B + \omega) I_v(\omega) d\omega, \quad (34.12)$$

где E_v^B — блоховская энергия спиновой волны,

$$E_v^B = \mu H + \frac{1}{2} [J(0) - J(v)] = \mu H + \frac{1}{2} J(0) \mathcal{E}_v. \quad (34.13)$$

В частности, если использовать для $I_v(\omega)$ приближенное выражение (32.14), выражение для средней энергии может быть записано в следующем виде (Уортис (1963)):

$$\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle = \mathcal{E}_0 + N \frac{\sigma_{1/2}}{2N} \sum_v (E_v^B + E_v) \bar{N}_v, \quad (34.14)$$

где \mathcal{E}_0 , \bar{N}_v определяются формулами (34.2), (32.15), E_v^B , E_v — формулами (34.13), (32.13), $\sigma_{1/2}$ — относительная намагниченность.

Подставляя (34.14) в (8.24а), получим в этом же приближении выражение для свободной энергии

$$F = \mathcal{E}_0 - \vartheta \int_0^{\vartheta} \frac{d\vartheta'}{(\vartheta')^2} \frac{\sigma_{1/2}}{2} \sum_v (E_v^B + E_v) \bar{N}_v. \quad (34.15)$$

При использовании этой формулы следует иметь в виду, что от переменной интегрирования зависят также $\sigma_{1/2}$ и E_v (последняя через относительную намагниченность $\sigma_{1/2}$). Если пренебречь зависимостью $\sigma_{1/2}$ (а следовательно, и E_v) от температуры, то (34.15) легко приводится к формуле для свободной энергии идеального газа (8.32)

$$F = \mathcal{E}_0 - \vartheta \int_0^{\vartheta} \frac{d\vartheta'}{(\vartheta')^2} \sum_v E_v^B \bar{N}_v = \mathcal{E}_0 + \vartheta \sum_v \ln \left(1 - e^{-\frac{E_v^B}{\vartheta}} \right).$$

§ 35. Изотропный ферромагнетик, случай $S \geq 1/2$ ¹⁾

Мы видели, что решение приближенного уравнения для намагниченности для случая $S = 1/2$ (см. §§ 32, 33) удовлетворительно интерполирует температурную зависимость ее во всем интервале температур. Распространим эти результаты на случай произвольного спина.

Введем спиновые переменные

$$S_f^{\pm} = S_f^x \pm i S_f^y; \quad S_f^z. \quad (35.1)$$

¹⁾ См. Тахир-Кели и тер Хаар (1962, а), Хьюсон и тер Хаар (1963, а), С. В. Тябликов (1963, г), Келлен (1963, б).

В случае спина $S = 1/2$ операторы S_f^+ и S_f^- совпадают с паули-операторами b_f и b_f^+ . Для операторов (35.1) имеют место перестановочные соотношения (5.5), (5.6) и соотношения (5.2), (5.3), (5.7).

Запишем гамильтониан системы в переменных (35.1)

$$\mathcal{H} = -\mu H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) (S_{f_1}^+ S_{f_2}^- + S_{f_1}^- S_{f_2}^+). \quad (35.2)$$

Уравнения движения для операторов (35.1) имеют вид

$$\begin{aligned} \pm i \frac{dS_f^\pm}{dt} &= \mu H S_f^\pm + \sum_{f'} I(f - f') (S_f^z S_{f'}^\pm - S_{f'}^z S_f^\pm), \\ i \frac{dS_f^z}{dt} &= -\frac{1}{2} \sum_{f'} I(f - f') (S_f^+ S_{f'}^- - S_{f'}^+ S_f^-). \end{aligned} \quad (35.3)$$

В случае спина $S \geq 1$ для определения намагнитченности $\langle S_f^z \rangle = S \sigma_S$ не достаточно одной первой функции Грина $\langle\langle S_f^+ | S_f^- \rangle\rangle$. По ней можно найти корреляционную функцию $\langle S_f^- S_f^+ \rangle$, которая в силу (5.7) связывает средние значения z -компоненты спина и ее квадрата. Поэтому в данном случае нужно ввести систему функций Грина, из которой можно было бы определить $2S$ линейно независимых величин $\langle S_f^z \rangle, \dots, \langle (S_f^z)^{2S} \rangle$. Более высокие степени, согласно (5.3), не являются линейно независимыми (Тахир-Кели и тер Хаар (1962,а)).

Составим систему уравнений для средних значений степеней S_f^z , умножая первое из равенств (5.7) на $(S_f^z)^n$ слева:

$$\begin{aligned} \langle (S_f^z)^n S_f^- S_f^+ \rangle &= S(S+1) \langle (S_f^z)^n \rangle - \langle (S_f^z)^{n+1} \rangle - \langle (S_f^z)^{n+2} \rangle, \\ n &= 0, 1, \dots, 2S-1. \end{aligned} \quad (35.4)$$

Для $n = 2S-1$ последнее слагаемое в правой части можно с помощью (5.3) представить в виде

$$\langle (S_f^z)^{2S+1} \rangle = \sum_{r=1}^{2S} a_r^{(S)} \langle (S_f^z)^r \rangle \quad (35.5)$$

($a_r^{(S)}$ — некоторые числа) и потому цепочка уравнений для средних обрывается автоматически.

Величины в левых частях уравнений (35.4) определим через функции Грина вида

$$\langle\langle S_f^+(t) | (S_g^z(t'))^n S_g^-(t') \rangle\rangle, \quad n=0, 1, \dots, 2S-1. \quad (35.6)$$

Дифференцируя по аргументу t и переходя к фурье-образам по времени, получим систему цепочек уравнений

$$\begin{aligned} E \langle\langle S_f^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle = \\ = \frac{i}{2\pi} \Delta(f-g) \langle[S_g^+, (S_g^z)^n S_g^-]\rangle + \mu H \langle\langle S_f^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle + \\ + \sum_{f'} I(f-f') \{ \langle\langle S_f^z S_{f'}^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle - \langle\langle S_{f'}^z S_f^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle \}, \dots \\ n=0, 1, \dots, 2S-1. \end{aligned} \quad (35.7)$$

Подобно случаю спина $S=1/2$ оборвем цепочку уравнений (35.7), полагая:

$$\langle\langle S_{f_1}^z S_{f_2}^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle \rightarrow S\sigma_S \langle\langle S_{f_1}^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle, \quad (35.8)$$

где σ_S — относительная намагниченность:

$$\langle S_f^z \rangle = S\sigma_S. \quad (35.9)$$

При этом получается система $2S$ независимых уравнений для функций (35.6), которая решается с помощью преобразования Фурье:

$$S_f^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} S_{\nu}^+ e^{-i(f, \nu)}.$$

В результате для функций (35.6) получаем выражения

$$\begin{aligned} \langle\langle S_f^+ | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{N} \sum_{\nu} \frac{e^{i(g-f, \nu)}}{E - E_S(\nu)} \langle[S_g^+, (S_g^z)^n S_g^-]\rangle, \\ n=0, 1, \dots, 2S-1, \end{aligned} \quad (35.10)$$

где $E_S(\nu)$ — энергия элементарных возбуждений:

$$E_S(\nu) = \mu H + S\sigma_S J(0)(1 - \gamma_{\nu}) = \mu H + S\sigma_S J(0) \mathcal{E}_{\nu}, \quad (35.11)$$

$$\gamma_{\nu} = \frac{J(\nu)}{J(0)}.$$

$J(\nu)$ — фурье-образ обменного интеграла. Для функции (35.10) находим по (26.15) спектральную интенсивность

$$I_{fg}^{(n)}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} e^{i(g-f, \nu)} \bar{N}_{\nu}^{(S)} \delta(\omega - E_S(\nu)) \langle [S_g^+, (S_g^z)^n S_g^-] \rangle \quad (35.12)$$

и по (26.5) средние значения

$$\langle (S_g^z)^n S_g^- S_g^+ \rangle = \langle [S_g^+, (S_g^z)^n S_g^-] \rangle P_S, \quad n=0, 1, \dots, 2S-1. \quad (35.13)$$

Здесь введены обозначения:

$$P_S = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \bar{N}_{\nu}^{(S)}, \quad (35.14)$$

$$\bar{N}_{\nu}^{(S)} = \left(e^{\frac{1}{\theta} E_S(\nu)} - 1 \right)^{-1}. \quad (35.15)$$

Замечая, что $S_g^+ (S_g^z)^n = (S_g^z - 1)^n S_g^+$, для коммутатора в правой части (35.13) получаем выражение

$$[S_g^+, (S_g^z)^n S_g^-] = 2S_g^z (S_g^z - 1)^n + [S(S+1) - S_g^z - (S_g^z)^2][(S_g^z - 1)^n - (S_g^z)^n]. \quad (35.16)$$

Подставим (35.13), (35.16) в (35.4). В результате получим систему уравнений для средних $\langle (S_g^z)^n \rangle$ в виде

$$\begin{aligned} S(S+1) \langle (S_g^z)^n \rangle - \langle (S_g^z)^{n+1} \rangle - \langle (S_g^z)^{n+2} \rangle = \\ = P_S \{ \langle [S(S+1) - S_g^z - (S_g^z)^2][(S_g^z - 1)^n - (S_g^z)^n] \rangle + \\ + 2 \langle S_g^z (S_g^z - 1)^n \rangle \}, \quad n=0, 1, \dots, 2S-1. \end{aligned} \quad (35.17)$$

Система уравнений (35.17), (35.5) достаточна для определения всех искоемых средних. Рассмотрим теперь случай $S = 1/2, 1, \dots, 3$.

Случай $S = 1/2$. В этом случае $n=0$ и система (35.17), (35.5) сводится всего к двум уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{3}{4} - \frac{1}{2} \sigma_{1/2} - \langle (S_g^z)^2 \rangle &= \sigma_{1/2} P_{1/2}, \\ \langle (S_g^z)^2 \rangle &= \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (35.18)$$

Отсюда получаем уравнение для $\sigma_{1/2}$

$$\frac{1}{2} \sigma_{1/2} = \frac{1/2}{1 + 2P_{1/2}}, \quad (35.19)$$

которое, как легко видеть, совпадает с уравнением (32.20).

Случай $S = 1$. Система уравнений (35.17), (35.5) имеет вид

$$\begin{aligned} 2 - \sigma_1 - \langle (S_g^z)^2 \rangle &= 2\sigma_1 P_1, \\ 2\sigma_1 - \langle (S_g^z)^2 \rangle - \langle (S_g^z)^3 \rangle &= P_1 \{ \langle 3(S_g^z)^2 \rangle - \sigma_1 - 2 \}, \\ \langle (S_g^z)^3 \rangle &= \sigma_1. \end{aligned} \quad (35.20)$$

Отсюда получаем уравнение для σ_1 и выражение для среднего квадратичного значения z -компоненты спина:

$$\sigma_1 = \frac{1 + 2P_1}{1 + 3P_1 + 3P_1^2}, \quad (35.21)$$

$$\langle (S_g^z)^2 \rangle = \frac{2P_1}{1 + 3P_1} + \frac{1 + P_1}{1 + 3P_1} \sigma_1. \quad (35.22)$$

Случай $S > 1$. Подобным образом нетрудно получить уравнения для σ_S в случаях $S = 3/2, 2, \dots$. Опуская элементарные выкладки, приведем уравнение для σ_S в общем случае (Правецки (1963))

$$S\sigma_S = \frac{(S - P_S)(1 + P_S)^{2S+1} + (1 + S + P_S)P_S^{2S+1}}{(1 + P_S)^{2S+1} - P_S^{2S+1}}$$

или

$$S\sigma_S = \frac{S + (S + 1) \sum_{n=1}^{2S} \frac{2S - n}{n} C_{2S+1}^n P_S^n}{1 + \sum_{n=1}^{2S} C_{2S+1}^n P_S^n}, \quad (35.23)$$

где C_l^k — число сочетаний из l элементов по k , P_S — функция (35.14). Для случаев $S = 1, 3/2, \dots, 3$ уравнение было получено Тахир-Кели и тер Хааром (1962, а).

В случае низких температур решение уравнения (35.23) представляется в виде ряда по степеням

температуры. Разложим правую часть (35.23) по степеням P_S :

$$S\sigma_S = \begin{cases} \frac{1}{2} - P_{1/2} + 2P_{1/2}^2 + O(P_{1/2}^3), & S = \frac{1}{2}, \\ S - P_S + O(P_S^3), & S \geq 1. \end{cases} \quad (35.24)$$

Далее примем во внимание, что для низких температур P_S и соответственно σ_S представляются разложениями вида (15.19), но с заменой τ на τ/σ_S . Рассмотрим приближение ближайших соседей для случая простейших кубических решеток: простой, объемноцентрированной и гранецентрированной. Решая уравнения (35.24), (35.25) так же, как и в § 33, получаем следующие разложения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sigma_{1/2} = & \frac{1}{2} - \rho Z_{1/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{1/2} - \frac{3\pi}{4} \rho Z_{5/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{5/2} - \\ & - 2\rho^2 Z_{9/2}^2 \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{9/2} - \pi^2 \omega \rho Z_{7/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{7/2} - \dots, \end{aligned} \quad (35.26)$$

$$\begin{aligned} S\sigma_S = & S - \rho Z_{1/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{1/2} - \frac{3\pi}{4} \rho Z_{5/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{5/2} - \\ & - \frac{3}{2S} \rho^2 Z_{9/2}^2 \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{9/2} - \pi^2 \omega \rho Z_{7/2} \left(\frac{h}{\tau} \right) \tau^{7/2} - \dots, \end{aligned} \quad (35.27)$$

где введены обозначения:

$$\tau = \frac{\theta}{\frac{2\pi}{3} S l z}, \quad h = \frac{\mu H}{\frac{2\pi}{3} S l z}. \quad (35.28)$$

Отметим, что как в случае спина $S = 1/2$, так и в случае $S \geq 1$ первые поправки в данном приближении начинаются с членов $\tau^{1/2}$. Для спина $S = 1/2$ они появляются, во-первых, из-за слагаемого $2P_{1/2}^2$ в разложении (35.24) и, во-вторых, из-за зависимости энергии спиновых волн от температуры через $\sigma_{1/2}$ (см. также § 33). Для спина $S \geq 1$ поправки порядка $\tau^{1/2}$ появляются только из-за зависимости энергии спиновых волн от σ_S . Поправки такого рода связаны с погрешностью, вносимой расщеплением (35.8). В случае высоких температур ($\theta \leq \theta_c$, $H = 0$) предыдущие разложения по степеням τ сходятся слабо и удобнее строить решение в виде ряда

по степеням какой-либо другой величины, которую можно рассматривать как малую. В этой области температур $\sigma_S \ll 1$ и как малую можно рассматривать величину P_S^{-1} . Действительно, запишем (35.14) в виде

$$1 + 2P_S = \frac{1}{N} \sum_v \text{cth} \frac{\sigma_S \mathcal{E}_v}{\tau} \quad \left(\mathcal{E}_v = 1 - \frac{J(v)}{J(0)} \right),$$

где введено обозначение

$$\tau = \frac{2\theta}{SJ(0)}. \quad (35.29)$$

Используя (33.10), находим отсюда

$$P_S^{-1} = \frac{2\sigma_S}{C\tau} \left(1 + \frac{1}{C} \frac{\sigma_S}{\tau} + \frac{3-C}{3C^2} \frac{\sigma_S^2}{\tau^2} + \dots \right), \quad (35.30)$$

где C определяется формулой (33.13). Разложим правую часть уравнения (35.23) в ряд по степеням P_S^{-1} :

$$\begin{aligned} S\sigma_S &= \frac{S(S+1)}{3} \times \\ &\times P_S^{-1} \frac{1 + \frac{2 \cdot 3!}{4!} (2S-1) P_S^{-1} + \frac{3 \cdot 3!}{5!} (2S-1)(2S-2) P_S^{-2} + \dots}{1 + \frac{2S}{2!} P_S^{-1} + \frac{2S(2S-1)}{3!} P_S^{-2} + \dots} = \\ &= \frac{S(S+1)}{3} P_S^{-1} - \frac{S(S+1)}{6} P_S^{-2} + \frac{S(S+1)}{3} \frac{9-2S-2S^2}{30} P_S^{-3} - \dots \end{aligned} \quad (35.31)$$

Подставим (35.30) в (35.31) и ограничимся учетом членов порядка σ_S^3 включительно. В этом приближении нетрудно получить для σ_S следующее выражение:

$$\sigma_S = \sqrt{\Gamma_S \tau_C \left(1 - \frac{\tau}{\tau_C} \right)}, \quad (35.32)$$

где τ_C — температура Кюри,

$$\tau_C = \frac{2(S+1)}{3C}, \quad (35.33)$$

Γ_S — постоянная, зависящая от величины спина и геометрии решетки (см. табл. 10),

$$\Gamma_S = \frac{10C(S+1)}{4S^2 + 4S + 5C - 3}, \quad (35.34)$$

где

$$C = \frac{1}{N} \sum_v \mathcal{E}_v^{-1}. \quad (35.34a)$$

Легко проверить, что для спина $S = 1/2$ формулы (35.32), (35.33) переходят в формулы (33.17), (33.18).

Таблица 10

Значения постоянной Γ_S

Значения Γ_S вычислены по формуле (35.34); зависимость от типа решетки входит через постоянную C (35.34a)

Тип решетки	Спин					
	$1/2$	1	$3/2$	2	$5/2$	3
Простая кубическая	3	2,410	1,936	1,592	1,341	1,154
Объемноцентрированная кубическая	3	2,328	1,836	1,494	1,251	1,072
Гранецентрированная кубическая	3	2,294	1,796	1,455	1,216	1,040

В обычных единицах температура Кюри (35.33) имеет вид (см. табл. 11)

$$\vartheta_C = \frac{S\tau_C}{2} J(0) = \frac{S(S+1)}{3C} J(0), \quad (35.35)$$

где C определяется согласно (35.34a). Выражение вида (35.35) для температуры Кюри ранее было получено Брауном и Латтинжером (1955) с помощью теории возмущений для высоких температур.

В случае температур выше точки Кюри ($\vartheta > \vartheta_C$, $H \neq 0$) можно построить для σ_S разложение по степеням обратной температуры, аналогичное разложению (33.30). Вычисляя затем восприимчивость при $H = 0$, получим (Тахир-Кели и тер Хаар (1962, а)):

$$\chi_S = \left[\frac{\partial}{\partial H} (S\mu\sigma_S) \right]_{H=0} = \mu^2 \frac{S(S+1)}{3\vartheta} \left\{ 1 + \frac{\vartheta_{CP}}{\vartheta} + \frac{z-1}{z} \left(\frac{\vartheta_{CP}}{\vartheta} \right)^2 + O(\vartheta^{-3}) \right\}, \quad (35.36)$$

где ϑ_{CP} — парамагнитная температура Кюри,

$$\vartheta_{CP} = \frac{S(S+1)}{3} J(0). \quad (35.37)$$

С точностью до величин порядка z^{-1} формуле (35.36) можно придать вид закона Кюри — Вейсса (1.1)

$$\chi = \frac{\mu^2 S(S+1)}{3(\vartheta - \vartheta_{CP})}. \quad (35.38)$$

Выражение (35.36) для восприимчивости весьма близко к результату, полученному Брауном и Латтинжером (1955) по теории возмущений. В рассматриваемом приближении температура Кюри (35.35) и парамагнитная температура Кюри (35.38) связаны соотношением

$$C\vartheta_C = \vartheta_{CP}. \quad (35.39)$$

Из сравнения данных табл. 9 (см. стр. 214) и 11 видим, что значения температуры Кюри, рассчитанные по формуле (35.33), близки к значениям, рассчитанным по теории возмущений для высоких температур.

Таблица 11

**Значения температуры Кюри τ_C и величины ϑ_C/Iz
для кубических решеток**

Значения τ_C вычислены по формуле (35.33), а отношения ϑ_C/Iz — по формуле (35.35); I — обменный интеграл для ближайших соседей, z — их число, C — постоянная (3.34а), зависящая от типа решетки

Тип решетки		Спин					
		$1/2$	1	$3/2$	2	$5/2$	3
Простая кубическая	τ_C	0,659	0,879	1,099	1,319	1,539	1,759
	ϑ_C/Iz	0,165	0,440	0,824	1,319	1,923	2,638
Объемноцентрированная кубическая	τ_C	0,718	0,972	1,196	1,436	1,675	1,914
	ϑ_C/Iz	0,179	0,479	0,897	1,436	2,094	2,871
Гранецентрированная кубическая	τ_C	0,743	0,991	1,239	1,487	1,735	1,983
	ϑ_C/Iz	0,186	0,496	0,929	1,487	2,168	2,974

Следует отметить, что расщепление вида (35.8) не является единственно возможным. В связи с этим Келлен (1963, б) предложил расщепления для вторых функций, которые, по-видимому, являются более точными при больших значениях спина. Они представляют определенный интерес еще и потому, что с их помощью можно попытаться построить более точные приближенные решения.

Согласно (5.7), (5.5) имеем:

$$S_f^z = S(S+1) - (S_f^z)^2 - S_f^- S_f^+, \quad (35.40)$$

$$S_f^z = \frac{1}{2} (S_f^+ S_f^- - S_f^- S_f^+). \quad (35.41)$$

Умножая первое из этих соотношений на произвольный параметр α , а второе — на $1 - \alpha$, получим:

$$S_f^z = \alpha S(S+1) - \alpha (S_f^z)^2 - \frac{1+\alpha}{2} S_f^- S_f^+ + \frac{1-\alpha}{2} S_f^+ S_f^-. \quad (35.42)$$

Рассмотрим функцию Грина

$$\langle\langle S_f^z S_{f'}^+ | \dots \rangle\rangle \quad (f' \neq f). \quad (35.43)$$

Подставим в (35.43) выражение (35.42) и пренебрежем флуктуацией $(S_f^z)^2$. Функции $\langle\langle S_f^- S_f^+ S_{f'}^- | \dots \rangle\rangle$ расцепим следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_f^- S_f^+ S_{f'}^+ | \dots \rangle\rangle &\rightarrow \langle S_f^- S_f^+ \rangle \langle\langle S_{f'}^+ | \dots \rangle\rangle + \\ &+ \langle S_f^- S_{f'}^+ \rangle \langle\langle S_f^+ | \dots \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (35.44)$$

В результате для функции (35.43) получим расщепление

$$\begin{aligned} \langle\langle S_f^z S_{f'}^+ | \dots \rangle\rangle &\rightarrow \\ &\rightarrow \langle S_f^z \rangle \langle\langle S_{f'}^+ | \dots \rangle\rangle - \alpha \langle S_f^- S_{f'}^+ \rangle \langle\langle S_f^+ | \dots \rangle\rangle \quad (f' \neq f). \end{aligned} \quad (35.45)$$

Согласно Келлену, α следует взять в виде

$$\alpha = (2S)^{-1} \sigma_S. \quad (35.46)$$

Действительно, при низких температурах расщепление (35.45) должно соответствовать спин-волновому приближению. Используя для S_f^+ , S_f^z приближенные формулы (12.19) и применяя затем теорему Вика — Блоха — Доминисиса (см. § 10), видим, что искомое со-

ответствие имеет место, если $\alpha \rightarrow 1/2 S$ при $\theta \rightarrow 0$. При высоких температурах $\langle S_f^z \rangle \cong 0$ и потому правая часть (35.45) должна исчезать вместе с $\langle S_f^z \rangle$. Этим двум условиям удовлетворяет α в виде (35.46); заметим кстати, что выбор α неоднозначен.

§ 36. Численное интегрирование уравнения для намагниченности

Уравнение для намагниченности (33.1) при $h = 0$ принимает вид

$$\frac{1}{\sigma_{1/2}} = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \text{cth} \frac{\sigma_{1/2} \mathcal{E}_v}{\tau} dv, \quad \tau = \frac{4\theta}{Iz}. \quad (36.1)$$

Оно было решено С. П. Ломневым численно для случая простой кубической решетки и приближения ближайших соседей¹⁾. Результаты вычислений приводятся в табл. 12.

Таблица 12

Температурная зависимость относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$

Значения $\sigma_{1/2}$ вычислялись по формуле (33.1) (второй столбец) и по формуле (36.2) (третий столбец)

τ/τ_C	$\sigma_{1/2}$ (36.1)	$\sigma_{1/2}$ (36.2)	τ/τ_C	$\sigma_{1/2}$ (36.1)	$\sigma_{1/2}$ (36.2)
0	1	1	0,75820	0,654	0,7534
0,15164	0,981	0,9802	0,90984	0,430	0,6677
0,30328	0,941	0,9424	0,98560	0,20—0,21	0,6207
0,45496	0,881	0,8912	1		0,6110
0,60656	0,790	0,8280			

В третьем столбце табл. 12 для сравнения приведены значения намагниченности, рассчитанные по формуле (33.9), соответствующей спин-волновому приближению:

$$\sigma_{1/2} = 1 - 2\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{3\tau}{4\pi}\right)^{3/2} - \frac{3\pi}{2}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)\left(\frac{3\tau}{4\pi}\right)^{5/2}, \quad \tau = \frac{4\theta}{Iz}. \quad (36.2)$$

¹⁾ Автор выражает признательность С. П. Ломневу за проведение расчетов на электронной вычислительной машине.

На рис. 11 приведены графики $\sigma_{1/2}(\tau)$, рассчитанные по уравнению (36.1), приближенной формуле (36.2), уравнению молекулярного поля (21.17), и экспериментальные данные для железа¹⁾.

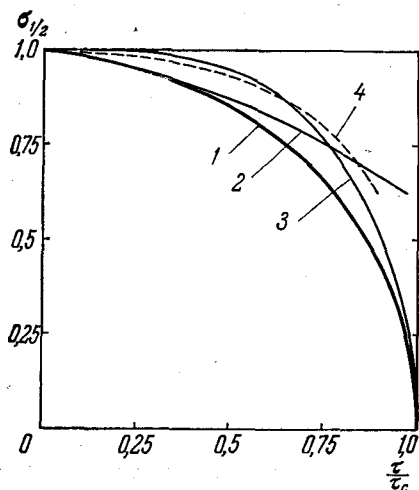


Рис. 11. Графики зависимости относительной намагниченности $\sigma_{1/2}$ от относительной температуры τ/τ_c : 1 — по уравнению (36.1); 2 — по формуле (36.2); 3 — по уравнению молекулярного поля (21.17); 4 — экспериментальные данные для железа (Поттер (1934)).

Для малых волновых чисел энергия спиновой волны приближенно равна

$$E_S(v) = \alpha_S v^2, \quad (36.3)$$

где $\alpha_S = S\sigma_S \cdot \text{const.}$ В опытах по неупругому рассеянию нейтронов на спиновых волнах (см., например, обзор Ю. А. Изюмова (1963, а)) измеряется параметр α_S

¹⁾ Лоусон и Бриент (1973), применив расщепление вида (32.7) для антикоммутаторной спиновой функции Грина, получили хорошее согласие с данными для никеля, используя для обменного интеграла приближение типа экранированного кулоновского взаимодействия (Прим. ред.).

в законе дисперсии (36.3). По измерениям при разных температурах можно установить, зависит ли α_S от температуры, и если зависит, то как. На рис. 12 приведены для магнетита значения относительной намагниченности по данным Потене (1952) и параметра α_S по данным Брокхауза и Ватанабе (1962).

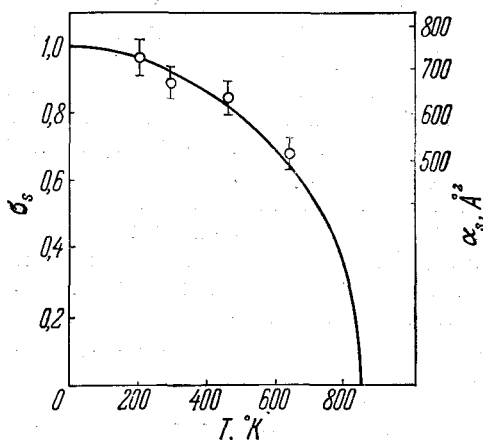


Рис. 12. Зависимость энергии спиновой волны от температуры для магнетита: сплошная кривая представляет экспериментальные значения намагниченности σ_S , кружки — экспериментальные значения параметра $\alpha_S = S\sigma_S \cdot \text{const}$ в приближенной формуле (36.3) для энергии спиновой волны (вертикальная черта показывает ошибку измерений).

Как видно, измеренные значения α_S ложатся на кривую. Таким образом, в общих чертах формула (36.3) более или менее удовлетворительно передает вид зависимости энергии спиновой волны от температуры. По данным Хазерли и др. (1963) при низких температурах энергия спиновых волн меняется как $\vartheta^{5/2}$, а не как $\vartheta^{3/2}$. Этот результат находится в согласии с теоретическими соображениями о том, что при $\vartheta \rightarrow 0$ зависимость вида $\vartheta^{3/2}$ для $E_S(\nu)$ связана с приближенным характером решения и что в действительности имеет место зависимость вида $\vartheta^{5/2}$ (см. §§ 33, 35 и 37).

§ 37. Низкотемпературные разложения

Выше мы исследовали приближенные решения уравнения для намагниченности, которые пригодны в широком интервале температур. При этом, естественно, возникает вопрос о том, какова точность полученных решений и как строить следующие приближения. Для случая низких температур Дайсоном (1956, а, б) были получены последовательные разложения по степеням температуры для свободной энергии, теплоемкости и намагниченности, которые можно рассматривать как стандартные.

Мы ограничимся здесь случаем низких температур и рассмотрим задачу построения следующих приближений в методе функций Грина.

В случае произвольного спина намагниченность является функцией от сумм по числам заполнения спиновых волн P_S (35.14). В области низких температур P_S можно считать малыми величинами ($P_S = O(\vartheta^{3/2})$) и разложить выражение для намагниченности σ_S в ряд по степеням P_S . С точностью до членов третьего порядка будем иметь:

$$\sigma_S = \begin{cases} \frac{1}{2} - P_{1/2} + 2P_{1/2}^2 + O(P_{1/2}^3), & S = 1/2, \\ S - P_S + O(P_S^3), & S \geq 1. \end{cases} \quad (37.1)$$

В грубом приближении (при использовании расщеплений (32.7) или (35.8)) величины P_S сами зависят от σ_S через энергию спиновых волн $E_S(\nu)$ согласно (32.13) или (35.11).

В спин-волновом приближении энергия элементарных возбуждений имеет вид

$$E_S(\nu) = \mu H + S[J(0) - J(\nu)]. \quad (37.2)$$

Перепишем (35.11) следующим образом:

$$E_S(\nu) = \mu H + S[J(0) - J(\nu)] - S(1 - \sigma_S)[J(0) - J(\nu)]. \quad (37.3)$$

Последнее слагаемое в (37.3) по происхождению может быть истолковано как массовый оператор в приближении, соответствующем расщеплениям (32.7) или (35.8). При этом массовый оператор зависит от температуры как от параметра; при низких температурах эта зависимость будет вида $\vartheta^{3/2}$.

Будем рассматривать взаимодействие спиновых волн как малое возмущение и воспользуемся теорией возмущений § 29 для решения системы уравнений для функций Грина. При этом в низшем приближении выражение для энергии (37.2) заменяется на следующее:

$$E_S(\nu) = \mu H + S[J(0) - J(\nu)] + M_S(\nu), \quad (37.4)$$

где $M_S(\nu)$ — массовый оператор для первых функций в случае произвольного спина $S (\geq 1/2)$. Намагниченность σ_S по-прежнему будет определяться формулами вида (37.1). Оказывается, что в случае $S = 1/2$ массовый оператор зависит от температуры как $\vartheta^{1/2}$. Кинематическое взаимодействие, как отмечалось Дайсоном (1956, а), не сказывается на динамических характеристиках системы. Поэтому можно ожидать, что и в случае спина $S \geq 1$ температурная зависимость будет в главном приближении такой же. В соответствии с этим первые поправки по степеням температуры в намагниченности от взаимодействия спиновых волн будут порядка $\vartheta^{1/2}$ для спина $S = 1/2$ (от слагаемого $2P_{1/2}^2$) и порядка $\vartheta^{3/2}$ для спина $S \geq 1$.

Непосредственное решение по теории возмущений § 29 цепочек уравнений для спиновых операторов для случая $S = 1/2$ (С. В. Тябликов (1963, а—в), (1964)) и случая $S \geq 1$ (Бросс (1964, а, б)) дает температурные зависимости указанного вида. Аналогичный результат получил Правецки (1963). Однако использование того же самого метода теории возмущений для гамильтониана идеальных спиновых волн Дайсона (1956, а, б) при любом $S (\geq 1/2)$ дает для массового оператора зависимость вида $\vartheta^{1/2}$ и как следствие разложение для намагниченности, не содержащее слагаемого порядка $\vartheta^{1/2}$ (С. В. Тябликов и Е. Н. Яковлев (1962), (1963)). Последний результат, впервые установленный Дайсоном (1956, а, б), был повторен другими методами, при использовании гамильтониана идеальных спиновых волн, в ряде работ (см., например, Опеховский (1959), Шаницкий (1962), Тахир-Кели и тер Хаар (1962, б), Уортис (1963)). По мнению Хьюсона и тер Хаара (1963, в), различие обязано ошибке, появляющейся при замене точной второй функции Грина от спиновых операторов приближенной, хотя для соответствующей

корреляционной функции ошибка будет порядка θ^3 . [Детально вопрос о причинах различия в результатах для случая $S = 1/2$ исследовался, например, в работе С. В. Тябликова и Е. М. Сорокиной (1967) (в этой связи см. также § 7 гл. II, а также гл. III Дополнения) (Ред.).]

§ 38. Ферромагнитный резонанс ¹⁾

Если на спиновую систему наложить постоянное магнитное поле H и перпендикулярно к нему — переменное радиочастотное поле $h(t)$, то при частоте переменного поля, близкой к частоте свободной прецессии спинов вокруг направления вектора H , резко возрастает передача энергии от поля $h(t)$ к спиновой системе. Рассмотрим подробнее это явление.

Пусть спиновая система состоит из N одинаковых спинов, помещенных в узлах решетки f . Гамильтониан спиновой системы, включая оператор энергии взаимодействия ее с постоянным подмагничивающим полем H , обозначим через \mathcal{H}_0 . Пусть переменное поле $h(t)$ имеет вид

$$h(t) = \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} h_{\Omega}(f). \quad (38.1)$$

Тогда оператор энергии взаимодействия спиновой системы с переменным полем запишется следующим образом:

$$\mathcal{V}(t) = -\mu \sum_{f, \Omega} e^{-i\Omega t} (h_{\Omega}(f), S_f). \quad (38.2)$$

Как правило, в опытах по ферромагнитному резонансу длина волны радиочастотного поля много больше размеров образца и поле можно рассматривать как однородное. В этом случае

$$\mathcal{V}(t) = -\mu \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t} (h_{\Omega}, S), \quad (38.3)$$

где $S^{\alpha} = \sum_f S_f^{\alpha}$ — α -компонента полного спина системы.

Ниже мы ограничимся исследованием только пространственно однородного случая. Кроме того, оператор

¹⁾ См. Кубо и Томита (1954), Кубо (1957), С. В. Тябликов (1960, а, б).

$\mathcal{V}(t)$ будем рассматривать как малое возмущение по сравнению с оператором \mathcal{H}_0 .

Согласно (31.21) (в линейном приближении), приращение среднего значения вектора намагниченности под действием возмущения (38.3), включенного адиабатически, равно

$$\delta \langle \mathcal{M}^a(t) \rangle = \mu \delta \langle S^a(t) \rangle = 2\pi i \mu^2 \sum_{\Omega, \beta} e^{-i\Omega t} \langle \langle S^a | S^\beta \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} h_{\Omega}^{\beta} \quad (38.4)$$

или, при учете (31.25),

$$\delta \langle \mathcal{M}^a(t) \rangle = \sum_{\Omega, \beta} e^{-i\Omega t} \chi_{a\beta}(\Omega) h_{\Omega}^{\beta}, \quad (38.5)$$

комплексная восприимчивость имеет вид

$$\chi_{a\beta}(\Omega) = 2\pi i \mu^2 \langle \langle S^a | S^\beta \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)}. \quad (38.6)$$

Для $\mathcal{V}(t)$ используется также следующая форма записи:

$$\mathcal{V}(t) = -\mu \sum_{\Omega > 0} \{ e^{-i\Omega t} (h_{\Omega}, S) + e^{i\Omega t} (h_{-\Omega}^*, S) \}, \quad (38.7)$$

где по определению $h_{-\Omega}^* = h_{\Omega}^{*a}$. При этом взамен формулы (38.5) имеем:

$$\delta \langle \mathcal{M}^a(t) \rangle = \sum_{(\beta, \Omega > 0)} \{ \chi_{a\beta}(\Omega) h_{\Omega}^{\beta} e^{-i\Omega t} + \chi_{a\beta}(-\Omega) h_{\Omega}^{*\beta} e^{i\Omega t} \}, \quad (38.8)$$

восприимчивость χ по-прежнему определяется выражением (38.6).

Так как χ выражается линейно через функции Грина, то их полюсы Ω_R будут определять поведение χ в области резонанса. Особенности поведения χ определяются явным видом функций Грина. Мы остановимся здесь на некоторых общих свойствах тензора восприимчивости, не связанных со специализацией задачи.

Из соотношений (28.9), (28.12) для функций Грина следует, что в комплексной плоскости

$$\langle \langle S^a | S^\beta \rangle \rangle_E = \langle \langle S^\beta | S^a \rangle \rangle_{-E}$$

и на вещественной оси

$$\langle \langle S^a | S^\beta \rangle \rangle_{\Omega}^{(r)} = - \{ \langle \langle S^a | S^\beta \rangle \rangle_{-\Omega}^{(r)} \}^*.$$

Отсюда для тензора восприимчивости χ (38.6) получаем:

$$\chi_{\alpha\beta}(E) = \chi_{\beta\alpha}(-E) \quad (E - \text{компл.}), \quad (38.9)$$

$$\chi_{\alpha\beta}(\Omega) = \chi_{\alpha\beta}^*(-\Omega) \quad (\Omega - \text{веществ.}). \quad (38.10)$$

Для упрощения формул предположим, что радиочастотное поле лежит в плоскости (x, y) . Введем операторы

$$S^{\pm} = S^x \pm iS^y \quad (38.11)$$

и функции Грина

$$\begin{aligned} G_{11}(\Omega) &= \langle\langle S^+ | S^+ \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)}, & G_{12}(\Omega) &= \langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)}, \\ G_{21}(\Omega) &= \langle\langle S^- | S^+ \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)}, & G_{22}(\Omega) &= \langle\langle S^- | S^- \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)}. \end{aligned} \quad (38.12)$$

В переменных S^{\pm} тензор χ (38.6) запишется следующим образом:

$$\chi(\Omega) = \begin{pmatrix} X(\Omega) + X_a(\Omega) & i[\mathcal{G}(\Omega) + \mathcal{G}_a(\Omega)] & 0 \\ -i[\mathcal{G}(\Omega) - \mathcal{G}_a(\Omega)] & X(\Omega) - X_a(\Omega) & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{st} \end{pmatrix}, \quad (38.13)$$

где

$$\begin{aligned} X &= v(G_{12} + G_{21}), & X_a &= v(G_{11} + G_{22}), \\ \mathcal{G} &= v(G_{12} - G_{21}), & \mathcal{G}_a &= v(-G_{11} + G_{22}), \end{aligned} \quad (38.14)$$

$v = \frac{i}{2} \mu^2$, χ_{st} — статическая восприимчивость.

В формулах (38.12)–(38.14) функции Грина рассматриваются только на вещественной оси. Для этого случая справедливо соотношение (28.12) и поэтому

$$G_{12}(\Omega) = -G_{21}^*(-\Omega), \quad G_{11}(\Omega) = -G_{22}^*(-\Omega).$$

Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} X(\Omega) &= X^*(-\Omega), & X_a(\Omega) &= X_a^*(-\Omega), \\ \mathcal{G}(\Omega) &= -\mathcal{G}^*(-\Omega), & \mathcal{G}_a(\Omega) &= -\mathcal{G}_a^*(-\Omega). \end{aligned} \quad (38.15)$$

Для вещественных и мнимых частей восприимчивости в силу (38.10), (38.15) имеют место соотношения

$$\chi'_{\alpha\beta}(\Omega) = \chi'_{\alpha\beta}(-\Omega), \quad \chi''_{\alpha\beta}(\Omega) = -\chi''_{\alpha\beta}(-\Omega) \quad (38.16)$$

и аналогично соотношения

$$\begin{aligned} X'(\Omega) &= X'(-\Omega), & X''(\Omega) &= -X''(-\Omega), \\ \mathcal{G}'(\Omega) &= -\mathcal{G}'(-\Omega), & \mathcal{G}''(\Omega) &= \mathcal{G}''(-\Omega), \end{aligned} \quad (38.17)$$

для X_a, \mathcal{G}_a имеют место такие же соотношения, как для X, \mathcal{G} .

Если спиновая система такова, что невозмущенные уравнения движения для операторов S^\pm допускают инверсию времени, то, согласно (28.30),

$$G_{11}(\Omega) = G_{22}(\Omega)$$

и, следовательно,

$$X_a(\Omega) = 2\nu G_{11}(\Omega), \quad \mathcal{G}_a(\Omega) = 0. \quad (38.18)$$

Поведение восприимчивости χ при резонансе определяется особенностями функций Грина. Пусть функция Грина имеет полюс в точке $\Omega = \Omega_R$.

Введем матрицу $G(\Omega)$, элементами которой являются функции Грина (38.12), и обратную к ней матрицу $F(\Omega)$ (см. § 28). Используя формулы (28.33)–(28.38) и определение (38.14), легко получить:

$$\begin{aligned} X(\Omega) &= \nu \frac{-F_{12}(\Omega) + F_{12}^*(-\Omega)}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega), \\ X_a(\Omega) &= \nu \frac{F_{11}(\Omega) - F_{11}^*(-\Omega)}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega), \end{aligned} \quad (38.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\Omega) &= \nu \frac{-F_{12}(\Omega) - F_{12}^*(-\Omega)}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega), \\ \mathcal{G}_a(\Omega) &= \nu \frac{F_{11}(\Omega) + F_{11}^*(-\Omega)}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega), \end{aligned} \quad (38.20)$$

где

$$R(\Omega) = \frac{1}{\Omega - \Omega_R + i\varepsilon} - \frac{1}{\Omega + \Omega_R + i\varepsilon}. \quad (38.20a)$$

Из формул (38.19), (38.20) следует, что

$$X^2(\Omega) - X_a^2(\Omega) - \mathcal{G}^2(\Omega) + \mathcal{G}_a^2(\Omega) = \frac{\pi^2 \mu^4}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega) \quad (38.21)$$

или

$$\chi_{xx}(\Omega) \chi_{yy}(\Omega) - \chi_{xy}(\Omega) \chi_{yx}(\Omega) = \frac{\pi^2 \mu^4}{2\Omega_R \Lambda(\Omega)} R(\Omega). \quad (38.22)$$

Приближенные выражения, годные в окрестности полюса, получим заменой Ω на Ω_R в множителях при $R(\Omega)$ в формулах (38.19), (38.20):

$$X(\Omega) \cong C(1 + K_1 K_2) R(\Omega), \quad X_a(\Omega) \cong -C(K_1 + K_2) R(\Omega), \quad (38.23)$$

$$\mathcal{G}(\Omega) \cong C(1 - K_1 K_2) R(\Omega), \quad \mathcal{G}_a(\Omega) \cong -C(K_1 - K_2) R(\Omega),$$

где C, K_1, K_2 — постоянные:

$$C = \nu \frac{F_{12}^*(-\Omega_R)}{2\Omega_R \Lambda(\Omega_R)}, \quad K_1 = -\frac{F_{11}(\Omega_R)}{F_{12}^*(-\Omega_R)}, \quad K_2 = \frac{F_{11}^*(-\Omega_R)}{F_{12}^*(-\Omega_R)}. \quad (38.24)$$

Если уравнения движения для операторов S^\pm (38.11) инвариантны относительно инверсии времени, то кроме (28.12) имеет место условие (28.30) и $F_{11}(\Omega) = -F_{11}^*(-\Omega)$. Отсюда следует, что

$$K_1 = K_2, \quad \mathcal{G}_a(\Omega) = 0. \quad (38.24a)$$

Энергия, поглощенная спиновой системой из радиочастотного поля за единицу времени, численно равна работе, совершенной полем за это же время. Определим последнюю следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(t) &= \sum_a h^a(t) \frac{d}{dt} \delta \langle \mathcal{M}^a(t) \rangle = \\ &= -i \sum_{\substack{a, \beta \\ \Omega, \Omega' > 0}} \Omega' \{ h_\Omega^a e^{-i\Omega t} + h_\Omega^{*a} e^{i\Omega t} \} \times \\ &\quad \times \{ \chi_{a\beta}(\Omega') h_\Omega^\beta e^{-i\Omega' t} - \chi_{a\beta}(-\Omega') h_\Omega^{*\beta} e^{i\Omega' t} \}. \end{aligned}$$

Средняя энергия, поглощаемая системой в единицу времени (или мощность), равна

$$W = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{d}{dt} A(t) dt.$$

Используя (38.10), получаем отсюда следующее выражение:

$$W = -i \sum_{\substack{a, \beta \\ \Omega > 0}} \Omega \{ \chi_{a\beta}^*(\Omega) h_\Omega^a h_\Omega^{*\beta} - \chi_{a\beta}(\Omega) h_\Omega^{*a} h_\Omega^\beta \}. \quad (38.25)$$

В случае линейно поляризованного поля $h_{\Omega}^a = h_{\Omega}^{*a}$ и формула (38.25) принимает вид

$$W = - \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \Omega > 0}} 2\Omega \chi''_{\alpha\beta}(\Omega) h_{\Omega}^{\alpha} h_{\Omega}^{\beta} \quad (\chi''_{\alpha\beta} = \text{Im } \chi_{\alpha\beta}). \quad (38.26)$$

Из (38.26) следует, что поглощение энергии спиновой системой определяется в случае линейно поляризованного поля мнимой частью тензора восприимчивости. В окрестности полюсов функций Грина (38.6) или (38.12) восприимчивость резко возрастает и поглощение имеет «резонансный» характер.

Попытаемся теперь включить в рассмотрение затухание в спиновой системе. Предположим, что в некотором приближении соответствующие функции Грина имеют полюсы в нижней полуплоскости $E = \pm\Omega_R - i\Gamma$ ($\Gamma > 0$). Тогда сингулярную часть $R(\Omega)$ (38.20a) можно формально записать в виде

$$\begin{aligned} R(\Omega) &= \frac{1}{\Omega - \Omega_R + i\Gamma} - \frac{1}{\Omega + \Omega_R + i\Gamma} = \\ &= 2\Omega_R \frac{(\Omega^2 - \Omega_R^2 - \Gamma^2) - 2i\Omega\Gamma}{(\Omega^2 - \Omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}. \end{aligned} \quad (38.27)$$

Величина Γ будет, очевидно, описывать затухание тех спиновых волн, которые возбуждаются при ферромагнитном резонансе.

Подставляя (38.27) в (38.19), (38.20), приходим к результатам классической теории Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица (1935, 6) или Бломбергена (1950) (см. также сборник (1961)). При этом затухание будет определяться мнимой частью полюса функции Грина. Результат подстановки можно представить в виде

$$\chi_{\alpha\beta}(\Omega) = \chi_{\alpha\beta}^0 R(\Omega), \quad (38.28)$$

где $\chi_{\alpha\beta}^0$ — некоторые постоянные, а $R(\Omega)$ — выражение (38.27). Если ввести (38.28), (38.27) в (38.26), то для мощности, поглощаемой системой, получим приближенную формулу

$$W \cong \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \Omega > 0}} \chi_{\alpha\beta}^0 h_{\Omega}^{\alpha} h_{\Omega}^{\beta} \frac{8\Omega^2 \Omega_R \Gamma}{(\Omega^2 - \Omega_R^2 - \Gamma^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}. \quad (38.29)$$

При приближении частоты внешнего поля к собственной частоте системы Ω_R поглощение возрастает и достигает при $\Omega \sim \Omega_R$ максимального значения порядка

$$W_{\max} \sim 2\Omega_R \Gamma^{-1} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \Omega > 0}} \chi_{\alpha\beta}^0 h_{\Omega}^{\alpha} h_{\Omega}^{\beta}. \quad (38.30)$$

Феноменологическое введение затухания как мнимых частей полюсов функций Грина равноценно учету перераспределения энергии в системе между различными степенями свободы. В результате имеет место диссипация энергии, поглощаемой при резонансе. В классической теории ферромагнитного резонанса этот процесс обязан наличию членов трения в уравнениях движения для компонент средней намагниченности. По существу, эти два подхода эквивалентны и, как мы видели, ведут к одинаковым результатам.

§ 39. Резонанс в изотропном ферромагнетике¹⁾

В предыдущем параграфе мы получили общее выражение тензора магнитной восприимчивости χ через функции Грина от спиновых операторов. Явный вид χ определяется конкретной формой спинового гамильтониана. Рассмотрим в этом параграфе простейший случай резонанса в изотропном ферромагнетике.

Постоянное подмагничивающее поле H будем считать направленным по оси z , радиочастотное поле $h(t)$ — расположенным в плоскости (x, y) и линейно поляризованным.

Для неограниченной среды гамильтониан спиновой системы \mathcal{H}_0 возьмем в виде (6.8) или (35.2). Для образца конечных размеров нужно учесть также энергию размагничивания (7.16). В случае образца эллипсоидальной формы тензор размагничивающих факторов диагонален.

Оператор энергии собственно спиновой системы в переменных S_f^{\pm} , S_f^z имеет вид

$$\mathcal{H}_0 = -\mu H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I(f_1 - f_2) S_{f_1}^{+} S_{f_2}^{-} - \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I(f_1 - f_2) S_{f_1}^z S_{f_2}^z. \quad (39.1)$$

¹⁾ См. С. В. Тябликов (1960, а).

Оператор энергии размагничивания для образца эллипсоидальной формы имеет соответственно вид

$$\mathcal{H}_{\text{разм}} = \frac{\mu^2}{8N} (N_x - N_y) \sum_{f_1, f_2} (S_{f_1}^+ S_{f_2}^+ + S_{f_1}^- S_{f_2}^-) + \\ + \frac{\mu^2}{4N} (N_x + N_y) \sum_{f_1, f_2} S_{f_1}^+ S_{f_2}^- + \frac{\mu^2}{2N} N_z \sum_{f_1, f_2} S_{f_1}^z S_{f_2}^z, \quad (39.2)$$

где N_α — размагничивающие факторы.

Функции Грина (38.12), через которые определяется восприимчивость, получим суммированием по индексам f и g из функций $\langle\langle S_f^+ | S_g^- \rangle\rangle$. Составим для этого уравнения движения для операторов S_f^\pm :

$$i \frac{dS_f^+}{dt} = \mu H S_f^+ + \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{N} N_z \right] S_{f'}^z S_f^+ - \\ - \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{2N} (N_x + N_y) \right] S_{f'}^z S_f^- + \\ + \frac{\mu^2}{2N} (N_x - N_y) \sum_{f'} S_{f'}^z S_f^-. \quad (39.3)$$

Далее, в соответствии с результатами § 35 мы должны рассмотреть систему уравнений вида (35.7):

$$E \langle\langle S_f^+ | n \rangle\rangle = I_0(n) \Delta(f - g) + \mu H \langle\langle S_f^+ | n \rangle\rangle + \\ + \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{N} N_z \right] \langle\langle S_{f'}^z S_f^+ | n \rangle\rangle - \\ - \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{2N} (N_x + N_y) \right] \langle\langle S_{f'}^z S_f^- | n \rangle\rangle + \\ + \frac{\mu^2}{2N} (N_x - N_y) \sum_{f'} \langle\langle S_{f'}^z S_f^- | n \rangle\rangle,$$

$$E \langle\langle S_f^- | n \rangle\rangle = -\mu H \langle\langle S_f^- | n \rangle\rangle - \\ - \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{N} N_z \right] \langle\langle S_{f'}^z S_f^- | n \rangle\rangle + \\ + \sum_{f'} \left[I(f - f') - \frac{\mu^2}{2N} (N_x + N_y) \right] \langle\langle S_{f'}^z S_f^+ | n \rangle\rangle - \\ - \frac{\mu^2}{2N} (N_x - N_y) \sum_{f'} \langle\langle S_{f'}^z S_f^+ | n \rangle\rangle, \dots; n = 0, 1, \dots, 2S - 1, \quad (39.4)$$

где для краткости введены обозначения:

$$\langle\langle A | n \rangle\rangle = \langle\langle A | (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle, \quad I_0(n) = \frac{i}{2\pi} \langle\langle A, (S_g^z)^n S_g^- \rangle\rangle. \quad (39.5)$$

Оборвем цепочку уравнений с помощью интерполяционного расщепления вторых функций через первые

$$\begin{aligned} \langle\langle S_f^z S_f^\pm | n \rangle\rangle &\rightarrow S\sigma_S \langle\langle S_f^\pm | n \rangle\rangle, \\ \langle S_f^z \rangle &= S\sigma_S \end{aligned} \quad (39.6)$$

и произведем преобразование Фурье по индексу f :

$$S_f^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_v S_v^\pm e^{\mp i(f, v)}.$$

В результате получим:

$$\begin{aligned} E \langle\langle S_v^+ | n \rangle\rangle &= \frac{e^{i(g, v)}}{\sqrt{N}} I_0(n) + \\ &+ \left\{ \mu H + S\sigma_S [J(0) - \mu^2 N_z] - S\sigma_S \left[J(v) - \frac{\mu^2}{2N} (N_x + N_y) \Delta(v) \right] \right\} \times \\ &\times \langle\langle S_v^+ | n \rangle\rangle + S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x - N_y) \Delta(v) \langle\langle S_v^- | n \rangle\rangle, \\ E \langle\langle S_v^- | n \rangle\rangle &= - \left\{ \mu H + S\sigma_S [J(0) - \mu^2 N_z] - \right. \\ &- S\sigma_S \left[J(v) - \frac{\mu^2}{2N} (N_x + N_y) \Delta(v) \right] \left. \right\} \langle\langle S_v^- | n \rangle\rangle - \\ &- S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x - N_y) \Delta(v) \langle\langle S_v^+ | n \rangle\rangle, \\ n &= 0, 1, \dots, 2S - 1. \end{aligned} \quad (39.7)$$

Уравнения (39.7) решаются раздельно при $v \neq 0$ и $v = 0$.

При $v \neq 0$ имеем:

$$(E - E_S(v)) \langle\langle S_v^+ | n \rangle\rangle = \frac{e^{i(g, v)}}{\sqrt{N}} I_0(n), \quad \langle\langle S_v^- | n \rangle\rangle = 0, \quad (39.8)$$

$$E_S(v) = \mu H + S\sigma_S [J(0) - J(v)] - S\sigma_S \mu^2 N_z. \quad (39.9)$$

Отсюда видим, что при $v \neq 0$ задача свелась к уже решенной задаче § 35. Повторяя дословно рассуждения § 35, получим те же самые формулы для определения намагнитченности, что и раньше. При переходе от сумм

по ν к интегралам последние можно распространить на $\nu = 0$, поскольку соответствующие слагаемые войдут с весом, равным нулю. Единственное отличие состоит в том, что теперь энергия спиновой волны определяется формулой (39.9), а не формулой (35.11). Решение имеет место лишь при достаточно больших полях:

$$H - S\sigma_S\mu N_z \geq 0. \quad (39.10)$$

В противном случае при достаточно малых ν энергия элементарных возбуждений была бы отрицательна, что невозможно.

При $\nu = 0$ имеем:

$$\begin{aligned} & \left\{ E - \left[\mu H + S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x + N_y - 2N_z) \right] \right\} \langle \langle S_0^+ | n \rangle \rangle - \\ & - S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x - N_y) \langle \langle S_0^- | n \rangle \rangle = \frac{I_0(n)}{\sqrt{N}}, \quad (39.11) \\ & - S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x - N_y) \langle \langle S_0^+ | n \rangle \rangle - \\ & - \left\{ E + \left[\mu H + S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x + N_y - 2N_z) \right] \right\} \langle \langle S_0^- | n \rangle \rangle = 0. \end{aligned}$$

Отсюда без труда находим:

$$\begin{aligned} \langle \langle S_0^+ | n \rangle \rangle &= \frac{I_0(n)}{\sqrt{N}} \frac{E + E_0}{E^2 - E_R^2}, \quad \langle \langle S_0^- | n \rangle \rangle = -\frac{I_0(n)}{\sqrt{N}} \frac{E_1}{E^2 - E_R^2}, \\ n &= 0, 1, \dots, 2S-1, \quad (39.12) \end{aligned}$$

где введены обозначения:

$$E_0 = \mu H + S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x + N_y - 2N_z), \quad E_1 = S\sigma_S \frac{\mu^2}{2} (N_x - N_y), \quad (39.13)$$

$$\begin{aligned} E_R^2 &= E_0^2 - E_1^2 = \mu^2 \{ H + S\sigma_S\mu (N_x - N_z) \} \times \\ & \times \{ H + S\sigma_S\mu (N_y - N_z) \}. \quad (39.14) \end{aligned}$$

В случае резонанса восприимчивость выражается через функции (38.12). Определим последние через функции (39.12), полагая $n = 0$ и принимая во внимание, что

$$S^\pm = \sum_i S_i^\pm, \quad S_0^\pm = \frac{S^\pm}{\sqrt{N}}, \quad I_0(0) = \frac{i}{\pi} S\sigma_S.$$

В результате получим:

$$G_{12}(\Omega) = \langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)} = iN \frac{S\sigma_S}{\pi} \frac{\Omega + i\varepsilon + E_0}{(\Omega + i\varepsilon)^2 - E_R^2}, \quad (39.15)$$

$$G_{22}(\Omega) = \langle\langle S^- | S^- \rangle\rangle_{\Omega}^{(r)} = -iN \frac{S\sigma_S}{\pi} \frac{E_1}{(\Omega + i\varepsilon)^2 - E_R^2}, \dots$$

Так как уравнения движения (39.3) инвариантны относительно инверсии времени (28.24), то из (28.30), (28.31) следует, что

$$G_{11}(\Omega) = G_{22}(\Omega). \quad (39.16)$$

Рассмотрим некоторые следствия из полученных результатов.

Резонанс в бесконечной среде. В случае бесконечной среды размагничивающие факторы $N_{\alpha} = 0$ ($\alpha = x, y, z$), следовательно,

$$G_{12}(\Omega) = -G_{21}^*(-\Omega) = iN \frac{S\sigma_S}{\pi} \frac{1}{\Omega - E_R + i\varepsilon}, \quad (39.17)$$

$$G_{11}(\Omega) = G_{22}(\Omega) = 0, \quad E_R = \mu H.$$

Подставляя (39.17) в (38.13), (38.14), получаем следующие формулы для вещественных и мнимых частей компонент тензора восприимчивости:

$$\chi'_{xx}(\Omega) = P \frac{\chi_0}{1 - \left(\frac{\Omega}{E_R}\right)^2},$$

$$\chi''_{xx}(\Omega) = \frac{\pi\chi_0}{2} E_R [\delta(\Omega - E_R) - \delta(\Omega + E_R)],$$

$$\chi'_{yx}(\Omega) = \frac{\pi\chi_0}{2} E_R [\delta(\Omega - E_R) + \delta(\Omega + E_R)],$$

$$\chi''_{yx}(\Omega) = -\frac{\Omega}{E_R} P \frac{\chi_0}{1 - \left(\frac{\Omega}{E_R}\right)^2},$$

$$\chi_{yy}(\Omega) = \chi_{xx}(\Omega), \quad \chi_{xy}(\Omega) = -\chi_{yx}(\Omega), \quad (39.18)$$

где

$$\chi_0 = N \frac{S\sigma_S \mu^2}{E_R} = N \frac{S\sigma_S \mu}{H} = \frac{M_0}{H}, \quad E_R = \mu H, \quad (39.19)$$

P — символ главного значения, M_0 — намагниченность образца при температуре θ .

В рассмотренном случае резонансная частота E_R совпадает с частотой ларморовской прецессии спина вокруг направления постоянного поля H . Так как E_R — энергия спиновой волны с волновым вектором $\nu = 0$ (см. (39.9)), то это означает также, что при резонансе (в линейном приближении) возбуждаются только такие спиновые волны.

Форма линии определяется мнимыми частями компонент X и \mathcal{Y} тензора χ (38.13). В данном случае

$$\begin{aligned} X''(\Omega) &= \chi''_{xx}(\Omega), \quad \mathcal{Y}''(\Omega) = -\chi'_{xy}(\Omega) \\ (X_a(\Omega) &= \mathcal{Y}_a(\Omega) = 0), \end{aligned} \quad (39.20)$$

линия имеет δ -образную форму.

Если в спиновой системе имеется затухание, то, как уже отмечалось, его можно учесть, смещая полюсы функций Грина (38.12) в комплексную плоскость (см. также замечания к формуле (38.27)). В этом случае

$$\begin{aligned} G_{12}(\Omega) &= iN \frac{S\sigma_S}{\pi} \frac{1}{\Omega - E_R + i\Gamma}, \\ G_{21}(\Omega) &= -iN \frac{S\sigma_S}{\pi} \frac{1}{\Omega + E_R + i\Gamma}, \end{aligned} \quad (39.21)$$

где Γ — величина затухания для спиновых волн с $\nu = 0$. При этом вместо формул (39.18) будем иметь:

$$\begin{aligned} \chi'_{xx}(\Omega) &\cong -\chi_0 \frac{E_R^2 (\Omega^2 - E_R^2)}{(\Omega^2 - E_R^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}, \\ \chi''_{xx}(\Omega) &\cong \chi_0 \frac{E_R^2 \cdot 2\Omega\Gamma}{(\Omega^2 - E_R^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}, \\ \chi'_{yx}(\Omega) &\cong \chi_0 \frac{2E_R\Omega^2\Gamma}{(\Omega^2 - E_R^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}, \\ \chi''_{yx}(\Omega) &\cong \chi_0 \frac{E_R\Omega (\Omega^2 - E_R^2)}{(\Omega^2 - E_R^2)^2 + (2\Omega\Gamma)^2}, \end{aligned} \quad (39.22)$$

затухание считается малым ($\Gamma \ll E_R$) и величины более высоких порядков по степеням Γ опущены. Легко видеть, что в этом случае форма линии будет лорентцовской.

Полагая размагничивающие факторы равными нулю, мы пренебрегли влиянием границ. Однако хорошо известно, что для ферромагнетиков резонансные частоты существенно зависят от формы образца. Влиянием граничных эффектов можно пренебречь, если суммарная намагниченность равна нулю (например, для антиферромагнетиков) или если образец имеет сферическую форму. В последнем случае

$$N_x = N_y = N_z$$

и из формул (39.11) легко видеть, что мы получаем те же результаты, что и для бесконечной среды.

Затухание свободной прецессии. Рассмотрим поведение спиновой системы при выключении в момент времени $t = 0$ внешнего радиочастотного поля $h(t)$, которое рассматривается как возмущение. Будем считать, что постоянное подмагничивающее поле H направлено по оси z и что радиочастотное поле поляризовано линейно и направлено по оси x . Для большей простоты условимся считать, что образец имеет сферическую форму.

Изменение составляющих магнитного момента по осям x и y определяется, согласно (31.22), формулами

$$\delta^{(1)} \langle \mathcal{M}^a(t) \rangle = \mu^2 \sum_{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{E - \Omega - i\epsilon} \langle \langle S^a | S^{\beta} \rangle \rangle_E^{(r)} h^{\beta}. \quad (39.23)$$

Примем во внимание, что $h^x = h$, $h^y = h^z = 0$ и что

$$\begin{aligned} \langle \langle S^x | S^x \rangle \rangle &= \frac{1}{4} \{ \langle \langle S^- | S^+ \rangle \rangle + \langle \langle S^+ | S^- \rangle \rangle \}, \\ \langle \langle S^y | S^x \rangle \rangle &= \frac{i}{4} \{ \langle \langle S^- | S^+ \rangle \rangle - \langle \langle S^+ | S^- \rangle \rangle \}. \end{aligned} \quad (39.24)$$

Для функций, входящих в правые части этих формул, используем выражения (39.21). В результате

формулы (39.23) преобразуются к виду:

$$\begin{aligned}\delta^{(1)} \langle \mathcal{M}^x(t) \rangle &= \\ &= iN \frac{S\sigma_s \mu^2 h}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{E - \Omega - i\epsilon} \left\{ \frac{1}{E + E_R + i\Gamma} - \frac{1}{E - E_R + i\Gamma} \right\}, \\ \delta^{(1)} \langle \mathcal{M}^y(t) \rangle &= \\ &= iN \frac{S\sigma_s \mu^2 h}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{e^{-iEt}}{E - \Omega - i\epsilon} \left\{ \frac{-i}{E + E_R + i\Gamma} - \frac{i}{E - E_R + i\Gamma} \right\}.\end{aligned}$$

Нас интересует поведение системы после выключения возмущения, т. е. при $t > 0$. Поэтому в комплексной плоскости E контуры интегрирований следует замкнуть в нижней полуплоскости, где подынтегральные функции имеют простые полюсы в точках $E = \pm E_R - i\Gamma$. Используя теорему о вычетах, получаем:

$$\begin{aligned}\delta^{(1)} \langle \mathcal{M}^x(t) \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} N S \sigma_s \mu^2 h e^{-\Gamma t} \left\{ \frac{e^{iE_R t}}{\Omega + E_R + i\Gamma} - \frac{e^{-iE_R t}}{\Omega - E_R + i\Gamma} \right\}, \\ \delta^{(1)} \langle \mathcal{M}^y(t) \rangle &= \\ &= \frac{i}{2} N S \sigma_s \mu^2 h e^{-\Gamma t} \left\{ \frac{e^{iE_R t}}{\Omega + E_R + i\Gamma} + \frac{e^{-iE_R t}}{\Omega - E_R + i\Gamma} \right\}\end{aligned} \quad (39.25)$$

(формальный параметр ϵ здесь опущен, так как он входит с тем же знаком, как и затухание Γ , имеющее малое, но конечное значение).

Из формул (39.25) видим, что средние значения составляющих магнитного момента по осям x и y осциллируют с частотой $E_R = \mu H$, равной частоте ларморовской прецессии спиновых моментов вокруг направления подмагничивающего поля H . Амплитуда колебаний убывает со временем как $\exp(-\Gamma t)$, где Γ — величина затухания или обратное время жизни спин-волновых состояний с $\nu = 0$.

Образец эллипсоидальной формы. В этом случае восприимчивость определяется общим выражением (38.13). В рассматриваемом здесь приближении функции G_{11} , G_{12} , ... определяются формулами (39.15), при этом

резонансная частота E_R определяется формулой (39.14). Подставим (39.15) в (38.13), (38.14) и отделим вещественные и мнимые части χ , используя соотношение (26.16). В результате получим:

$$\begin{aligned}\chi'_{xx}(\Omega) &= \sqrt{\frac{A_y}{A_x}} P \frac{\chi_0}{1 - \left(\frac{\Omega}{E_R}\right)^2}, \\ \chi''_{xx}(\Omega) &= \frac{\pi\chi_0}{2} E_R \sqrt{\frac{A_y}{A_x}} \{\delta(\Omega - E_R) - \delta(\Omega + E_R)\}, \\ \chi'_{yx}(\Omega) &= \frac{\pi\chi_0}{2} E_R \{\delta(\Omega - E_R) + \delta(\Omega + E_R)\}, \\ \chi''_{yx}(\Omega) &= -\frac{\Omega}{E_R} P \frac{\chi_0}{1 - \left(\frac{\Omega}{E_R}\right)^2},\end{aligned}\quad (39.26)$$

где введены обозначения:

$$\chi_0 = N \frac{S\sigma_S \mu^2}{E_R}, \quad A_\alpha = \mu H + S\sigma_S \mu^2 (N_\alpha - N_z) \quad (\alpha = x, y), \quad (39.27)$$

$$\begin{aligned}E_R &= \sqrt{A_x A_y} = \\ &= \mu \sqrt{[H + S\sigma_S \mu (N_x - N_z)][H + S\sigma_S \mu (N_y - N_z)]}.\end{aligned}\quad (39.28)$$

Формула (39.28) представляет известную формулу Киттеля (1947), (1948) для случая произвольных температур. При этом для σ_S следует, вообще говоря, использовать значения, получающиеся из решения системы уравнений (39.8).

§ 40. Упругое рассеяние нейтронов¹⁾

Изучение дифракционной картины, возникающей при рассеянии медленных нейтронов кристаллами, позволяет исследовать кристаллографическую и магнитную структуру кристаллов, получить ряд сведений о спектре фоонов и спиновых волн, о поведении вещества в окрестности точек фазовых переходов.

Мы изложим элементы теории рассеяния нейтронов кристаллами сильно магнитных веществ с помощью

¹⁾ См., например, Бэкон (1957), (1963), Ю. А. Изюмов (1963, а).

так называемого временного формализма Ван-Хова (1954, а, б), тесно связанного с методом функций Грина.

Пусть на кристалл падает стационарный монохроматический пучок нейтронов. Запишем полный гамильтониан системы в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} = \mathcal{H}_{ss} + \mathcal{H}_1 + \mathcal{V}, \quad (40.1)$$

где \mathcal{H}_{ss} — оператор энергии спиновой системы, записанный с учетом колебаний решетки, $\mathcal{H}_1 = -(2m_n)^{-1}\Delta$ — оператор энергии свободного нейтрона, m_n — масса нейтрона, \mathcal{V} — оператор энергии взаимодействия нейтрона со спиновой системой. Обозначим через \mathcal{E}_v , C_v — собственные значения и собственные функции \mathcal{H}_{ss} и через E_p , ψ_p — собственные значения и собственные функции \mathcal{H}_1 , через p — импульс нейтрона.

Вероятность перехода из состояния (v, p) в состояние (v', p') в борновском приближении равна

$$W_{vp, v'p'} = 2\pi | \langle v'p' | \mathcal{V} | vp \rangle |^2 \delta(\mathcal{E}_v + E_p - \mathcal{E}_{v'} - E_{p'}), \quad (40.2)$$

где

$$\langle v'p' | \mathcal{V} | vp \rangle = (C_{v'}^* \psi_{p'}^*, \mathcal{V} C_v \psi_p). \quad (40.3)$$

Вероятность перехода нейтрона из состояния p в состояние p' получим усреднением выражения (40.2) по начальным состояниям рассеивателя со статистическим оператором

$$\rho_s = Q_s^{-1} \exp\left(-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{ss}\right), \quad Q_s = \text{Sp} \exp\left(-\frac{1}{\theta} \mathcal{H}_{ss}\right) \quad (40.4)$$

и суммированием по всем конечным состояниям v'

$$W_{pp'} = \frac{2\pi}{Q_s} \sum_{vv'} e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\theta}} (vp | \mathcal{V} | v'p') (v'p' | \mathcal{V} | vp) \times \\ \times \delta(\mathcal{E}_v + E_p - \mathcal{E}_{v'} - E_{p'}). \quad (40.5)$$

Введем обозначение:

$$(vp | \mathcal{V} | v'p') = (v | \mathcal{V}_{pp'} | v'), \\ \mathcal{V}_{pp'} = (\psi_p^*, \mathcal{V} \psi_{p'}). \quad (40.6)$$

Подставляя (40.6) в (40.5) и используя представление δ -функции в виде интеграла, получим:

$$\begin{aligned} W_{pp'} &= \frac{1}{Q_S} \sum_{vv'} e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\hbar}} (v | \mathcal{Y}_{pp'} | v') \times \\ &\quad \times (v' | \mathcal{Y}_{p'p} | v) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\mathcal{E}_v + E_p - \mathcal{E}_{v'} - E_{p'})t} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_{p'} - E_p)t} \frac{1}{Q_S} \sum_{vv'} e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\hbar}} \times \\ &\quad \times (v | \mathcal{Y}_{pp'} | v') e^{i\mathcal{E}_v t} (v' | \mathcal{Y}_{p'p} | v) e^{-i\mathcal{E}_v t}. \end{aligned}$$

Сумма под знаком интеграла равна статистическому среднему с оператором (40.4) от произведения операторов $\mathcal{Y}_{p'p}$. Действительно, примем во внимание, что

$$\begin{aligned} e^{i\mathcal{E}_v t} (v' | \mathcal{Y}_{p'p} | v) e^{-i\mathcal{E}_v t} &= \\ &= (C_{v'}^*, e^{i\mathcal{E}_v t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{E}_v t} C_v) = (C_{v'}^*, e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t} C_v) = \\ &= (v' | e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t} | v). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{1}{Q_S} \sum_{vv'} e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\hbar}} (v | \mathcal{Y}_{pp'} | v') (v' | e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t} | v) &= \\ &= \frac{1}{Q_S} \sum_v e^{-\frac{\mathcal{E}_v}{\hbar}} (v | \mathcal{Y}_{pp'} e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t} | v) = \\ &= \text{Sp} \{ \mathcal{Y}_{pp'} e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t} \rho_S \}. \end{aligned}$$

Используя определение (25.3), вероятность рассеяния нейтрона можно записать как интеграл Фурье по времени от корреляционной функции:

$$W_{pp'} = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_{p'} - E_p)t} \langle \mathcal{Y}_{p'p}^+(0) \mathcal{Y}_{p'p}(t) \rangle, \quad (40.7)$$

где $\mathcal{Y}_{p'p}(t)$ — гейзенберговское представление оператора $\mathcal{Y}_{p'p}$ с гамильтонианом \mathcal{H}_{SS} :

$$\mathcal{Y}_{p'p}(t) = e^{i\mathcal{H}_{SS} t} \mathcal{Y}_{p'p} e^{-i\mathcal{H}_{SS} t}, \quad (40.8)$$

угловые скобки обозначают усреднение со статистическим оператором (40.4). Формулы (40.7), (40.8) дают искомое представление для вероятности рассеяния нейтрона.

Используя представление (26.2) для корреляционных функций, выражение (40.7) можно записать еще в одном виде:

$$W_{pp'} = 2\pi I_{\gamma_{p'p} \gamma_{p'p}^*}(\omega), \quad \omega = E_{p'} - E_p, \quad (40.9)$$

где $I_{\gamma_{p'p} \gamma_{p'p}^*}$ — спектральная интенсивность.

Вероятность рассеяния нейтронов в элемент фазового объема $(2\pi)^{-3} dp'^x dp'^y dp'^z$, отнесенная к плотности потока, равна

$$\delta^2 \Sigma_{pp'} = \frac{m_n}{p} W_{pp'} (2\pi)^{-3} dp'^x dp'^y dp'^z = \frac{m_n^2}{(2\pi)^3} \frac{p'}{p} W_{pp'} \delta E_{p'} \delta O,$$

где δO — элемент телесного угла. Отсюда получаем следующее выражение для дифференциального эффективного сечения рассеяния в единицу телесного угла и на единицу энергии рассеянного нейтрона:

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}}{\delta O \delta E_{p'}} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^3} \frac{p'}{p} W_{pp'}. \quad (40.10)$$

Используя формулы (40.7) или (40.9), перепишем (40.10) в следующем виде:

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}}{\delta O \delta E_{p'}} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \frac{p'}{p} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \gamma_{pp'}^+(0) \gamma_{pp'}(t) \rangle = \quad (40.11)$$

$$= \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \frac{p'}{p} I_{\gamma_{p'p} \gamma_{p'p}^*}(\omega) \quad (\omega = E_{p'} - E_p). \quad (40.12)$$

Интегрируя полученные выражения по энергиям рассеянных нейтронов, получим дифференциальное сечение рассеяния в единицу телесного угла:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \int \frac{p'}{p} W_{pp'} dE_{p'} \quad (40.13)$$

или, согласно (40.11), (40.12),

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\pi} \int dE_{p'} \frac{p'}{p} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \mathcal{Y}_{p',p}^+(0) \mathcal{Y}_{p',p}(t) \rangle = \quad (40.14)$$

$$= \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \int dE_{p'} \frac{p'}{p} I_{\mathcal{Y}_{p',p}^+ \mathcal{Y}_{p',p}}(\omega) \quad (\omega = E_{p'} - E_p). \quad (40.15)$$

Формулы для вероятности перехода и дифференциальных сечений *упругого рассеяния* получим выделением в корреляционной функции слагаемого, не зависящего от времени. Обозначим его через

$$\langle \mathcal{Y}_{p',p}^+(0) \mathcal{Y}_{p',p}(t) \rangle_c. \quad (40.16)$$

Подставляя (40.16) в (40.7), (40.11), (40.14), будем иметь:

$$W_{pp'} = 2\pi \langle \mathcal{Y}_{p',p}^+(0) \mathcal{Y}_{p',p}(t) \rangle_c \delta(E_{p'} - E_p), \quad (40.17)$$

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}}{\delta O \delta E_{p'}} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \langle \mathcal{Y}_{p',p}^+(0) \mathcal{Y}_{p',p}(t) \rangle_c \delta(E_{p'} - E_p), \quad (40.18)$$

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \langle \mathcal{Y}_{p',p}^+(0) \mathcal{Y}_{p',p}(t) \rangle_c. \quad (40.19)$$

Если пучок падающих нейтронов не поляризован, то выражения для вероятностей перехода и дифференциальных сечений следует усреднить по всем состояниям спинов нейтронов падающего пучка. Эту операцию усреднения будем обозначать волнистой чертой, например $\widetilde{W}_{pp'}$.

Энергия взаимодействия нейтрона со спиновой системой, \mathcal{Y}^s (40.1), складывается из энергии взаимодействия нейтрона с ядрами атомов кристаллической решетки, $\mathcal{Y}^{(0)}$, и из энергии магнитного взаимодействия нейтрона с электронами незаполненных оболочек, $\mathcal{Y}^{(m)}$. Пусть рассеиватель состоит из N элементарных ячеек, в каждой из которых находится n атомов. Номер ячейки обозначим через f и номер атома в ячейке — через j . Радиус-вектор атома, находящегося в узле (fj) , запишем в виде

$$r_{fj} = r_{fj}^0 + u_{fj} = f + j + u_{fj}, \quad (40.20)$$

где r_{ff}^0 — равновесное значение радиуса-вектора атома, u_{ff} — смещение атома из положения равновесия (радиус-векторы элементарных ячеек и атомов в ячейке для сокращения записи обозначаются теми же буквами, что и номера элементарных ячеек и атомов в ней: $r_f \rightarrow f$, $r_j \rightarrow j$). Матричные элементы операторов $\mathcal{Y}^{(l)}$, $\mathcal{Y}^{(m)}$ по волновым функциям свободных нейтронов имеют вид¹⁾

$$\mathcal{Y}_{p'p}^{(l)} = \sum_{ff} \alpha_f (S_n, I_{ff}) e^{i(q, r_{ff})}, \quad (40.21)$$

$$\mathcal{Y}_{p'p}^{(m)} = -4\pi \frac{\gamma_n r_0}{m_n} \sum_{ff} F_f(q) e^{i(q, r_{ff})} (S_{ff}, S_n - e(e, S_n)), \quad (40.22)$$

где

$$q^\alpha = p^\alpha - p'^\alpha, \quad e^\alpha = \frac{q^\alpha}{q} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (40.23)$$

и где S_n — оператор спина нейтрона, γ_n — магнитный момент нейтрона в ядерных магнетонах ($\gamma_n = -1,93$), S_{ff} — оператор спина электронов незаполненной оболочки атома ff , I_{ff} — оператор спина ядра атома ff , $\alpha_j(S_n, I_{ff})$ — некоторая функция от S_n и I_{ff} , $r_0 = = e^2/mc^2$ — классический радиус электрона, $F_j(q)$ — так называемый магнитный формфактор атома, который характеризует распределение спиновой плотности в атоме. Обычно α_j записывают в виде

$$\alpha_j(S_n, I_{ff}) = a_j + b_j(S_n, I_{ff}), \quad (40.24)$$

где a_j , b_j — константы.

Для неполяризованных нейтронов нет интерференции решеточного (40.21) и магнитного (40.22) рассеяний. Поэтому полное дифференциальное сечение равно сумме дифференциальных сечений от каждого из этих механизмов:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}}{\delta \Omega} = \frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(l)}}{\delta \Omega} + \frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta \Omega}. \quad (40.25)$$

Подчеркнем, что элементарные ячейки кристаллографической и магнитной решеток могут не совпадать. Поэтому в формулах (40.16) — (40.20) и далее следовало

¹⁾ См., например, монографию А. И. Ахнезера и И. Я. Померанчука (1950) и статью Гальперна и Джонсона (1939) или обзор Ю. А. Изюмова (1963, а).

бы различать номера узлов jj кристаллографической и магнитной решеток. Здесь мы не будем этого делать, так как ограничимся случаем рассеяния неполяризованных нейтронов, когда разделяются вклады от рассеяния на кристаллографической решетке (решеточное рассеяние) и магнитной решетке (магнитное рассеяние). В окончательных результатах будем отмечать штрихами величины, относящиеся к магнитной решетке. В экспериментах с нейтронами как решеточное, так и магнитное рассеяния наблюдаются одновременно. Для того чтобы яснее были различия в создаваемой ими дифракционной картине, мы рассмотрим оба механизма рассеяния.

Подставляя (40.21) в (40.19) и выполняя усреднение по спиновым состояниям нейтронов в падающем пучке, получим для *решеточного* рассеяния

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(l)}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_{jj, j'j'} \widetilde{a_j a_{j'}} \langle e^{-i(q, r_{jj}^{(0)})} e^{i(q, r_{j'j'}^{(t)})} \rangle_c. \quad (40.26)$$

Для первого сомножителя под знаком суммы получим при учете (40.24) выражение

$$\widetilde{a_j a_{j'}} = a_j a_{j'} + b_j b_{j'} (S_n, I_{jj}) (S_n, I_{j'j'}).$$

Примем далее во внимание, что S_n^α — матрицы Паули и что $S_n^\alpha S_n^\beta = \text{Sp}(S_n^\alpha S_n^\beta) = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta}$. Следовательно,

$$\widetilde{a_j a_{j'}} = a_j a_{j'} + \frac{1}{4} b_j b_{j'} (I_{jj}, I_{j'j'}).$$

Эффективное сечение рассеяния (40.26) зависит от распределения ориентаций спинов атомных ядер кристалла. Предположим, что ядра не поляризованы, т. е. их спиновые моменты ориентированы хаотически. Тогда (40.26) будет совпадать со средним по всем ориентациям ядерных спинов. В соответствии с этим заменим $\widetilde{a_j a_{j'}}$ на его среднее значение:

$$\begin{aligned} \widetilde{a_j a_{j'}} &\rightarrow a_j a_{j'} + \frac{1}{4} b_j b_{j'} \text{Sp}(I_{jj}, I_{j'j'}) = \\ &= a_j a_{j'} + \frac{1}{4} b_j^2 I_j (I_j + 1) \delta_{jj'} \delta_{j'j'}, \end{aligned} \quad (40.27)$$

где принято во внимание, что $(I_{jj}, I_{jj}) = I_j(I_j + 1)$.

Подставляя (40.27) в (40.26), получим:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp}^{(I)}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_{f, f'} \left\{ a_f a_{f'} e^{i(q, f' - f)} e^{i(q, f' - f)} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} b_f^2 I_f (I_f + 1) \delta_{ff'} \delta_{ff'} \right\} \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} e^{i(q, u_{ff'}^{(t)})} \rangle_c. \quad (40.28)$$

Не зависящее от времени слагаемое (...) в корреляционной функции от смещений атомов выберем следующим образом:

$$\langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} e^{i(q, u_{ff'}^{(t)})} \rangle_c \cong \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} \rangle \langle e^{i(q, u_{ff'}^{(t)})} \rangle. \quad (40.29)$$

Так как среднее значение функции от смещения атома не должно зависеть от номера ячейки, то можем записать:

$$e^{-W_j(q)} = \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(t)})} \rangle = \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} \rangle. \quad (40.30)$$

Величина $W_j(q)$ носит название теплового фактора Дебая — Валлера.

Заметим, что такое выделение не зависящего от времени слагаемого соответствует принципу ослабления корреляции Н. Н. Боголюбова (1961). Рассмотрим сумму

$$\sum_{ff'} e^{-i(q, f)} e^{i(q, f')} \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} e^{i(q, u_{ff'}^{(t)})} \rangle.$$

Основной вклад в нее дадут слагаемые, относящиеся к достаточно удаленным друг от друга точкам f и f' . Но на больших расстояниях корреляцию в смещении частиц можно считать малой и приближенно будем иметь:

$$\sum_{ff'} e^{-i(q, f)} \langle e^{-i(q, u_{ff}^{(0)})} \rangle e^{i(q, f')} \langle e^{i(q, u_{ff'}^{(t)})} \rangle.$$

Отсюда следует возможность использования расщепления (40.29).

Подставляя (40.29), (40.30) в (40.28), преобразуем сумму по узлам решетки:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp}^{(I)}}{\delta O} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_{f, f'} a_f a_{f'} e^{i(q, f' - f) + i(q, f' - f)} e^{-W_j(q) - W_{j'}(q)} + \\ + \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_f \frac{b_f^2}{4} I_f (I_f + 1) e^{-2W_j(q)} = \\ = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \left| \sum_f e^{-i(q, f)} \right|^2 \left| \sum_f a_f e^{-i(q, f)} e^{-W_j(q)} \right|^2 + \\ + N \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_f \frac{b_f^2}{4} I_f (I_f + 1) e^{-2W_j(q)}.$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned}
 e^{-2W(q)} &= \sum_j e^{-2W_j(q)}, \\
 \Phi_0^{(l)} &= 2\pi \frac{m_n^2}{v} \left| \sum_j a_j e^{-i(q, l)} e^{-W_j(q)} \right|^2 e^{2W(q)}, \\
 \Phi_1^{(l)} &= \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \sum_j \frac{b_j^2}{4} I_j(I_j + 1) e^{-2W_j(q)} e^{2W(q)}.
 \end{aligned} \quad (40.31)$$

В частности, если на элементарную ячейку приходится только один атом, то

$$\Phi_0^{(l)} = 2\pi \frac{m_n^2 a^2}{v}, \quad \Phi_1^{(l)} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \frac{b^2}{4} I(I + 1). \quad (40.32)$$

Сумма по элементарным ячейкам равна (см. (П2.19))

$$\left| \sum_j e^{-i(l, q)} \right|^2 = N \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_k \delta(q - 2\pi g_k), \quad (40.33)$$

где g_k — векторы обратной решетки, N — число элементарных ячеек, v — объем элементарной ячейки.

Используя формулы (40.31), (40.33), запишем в окончательном виде выражение для дифференциального эффективного сечения решеточного рассеяния:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(l)}}{\delta O} = N \left\{ \Phi_0 \sum_k \delta(q - 2\pi g_k) + \Phi_1^{(l)} \right\} e^{-2W(q)}, \quad (40.34)$$

здесь N — число элементарных ячеек кристаллографической решетки, g_k — векторы обратной решетки.

Первое слагаемое в (40.34) описывает когерентное рассеяние нейтронов. Оно дает резкие максимумы при углах рассеяния, определяемых из условий

$$\begin{aligned}
 q^\alpha &= p^\alpha - p'^\alpha = 2\pi g_\alpha^1 \quad (\alpha = 1, 2, 3), \\
 |p| &= |p'|.
 \end{aligned} \quad (40.35)$$

Легко видеть, что это есть не что иное, как условие Брегга — Вульфа для дифракционных максимумов (см. ПЗ). Второе слагаемое в фигурной скобке (40.34) описывает некогерентное рассеяние нейтронов.

Общая дифракционная картина несколько искажается слабой угловой зависимостью факторов Дебая — Валлера.

Рассмотрим теперь *магнитное рассеяние* медленных нейтронов. Для того чтобы получить выражение для дифференциального эффективного сечения в этом случае, подставим (40.22) в (40.19) и произведем усреднение по всем ориентациям спинов нейтронов в падающем пучке:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O} = 4r_0^2 \gamma_n^2 \sum_{ij, i'j'} F_I(q) F_{I'}(q) \langle e^{-i(q, r_{ij}^{(0)})} e^{i(q, r_{i'j'}^{(t)})} \times \\ \times (S_{ij}^{(0)}, S_n - e(e, S_n)) (S_{i'j'}^{(t)}, S_n - e(e, S_n)) \rangle_c. \quad (40.36)$$

Так как $\overline{S_n^\alpha S_n^\beta} = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta}$, то среднее по ориентациям спинов падающего пучка в (40.36) равно

$$\frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) S_{ij}^\alpha(0) S_{i'j'}^\beta(t). \quad (40.37)$$

Подставляя (40.37) в (40.36), получим:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O} = r_0^2 \gamma_n^2 \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij, i'j'} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) F_I(q) F_{I'}(q) \times \\ \times \langle e^{-i(q, r_{ij}^{(0)})} e^{i(q, r_{i'j'}^{(t)})} S_{ij}^\alpha(0) S_{i'j'}^\beta(t) \rangle_c. \quad (40.38)$$

Пренебрежем спин-фононным взаимодействием в рассеивателе. Тогда спиновые и фононные переменные в гамильтониане \mathcal{H}_{SS} (40.1) разделяются и статистическое среднее в (40.38) распадается на произведение средних:

$$\langle e^{-i(q, r_{ij}^{(0)})} e^{i(q, r_{i'j'}^{(t)})} \rangle_c \langle S_{ij}^\alpha(0) S_{i'j'}^\beta(t) \rangle_c.$$

В результате формула (40.38) преобразуется к виду

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O} = r_0^2 \gamma_n^2 \sum_{ij, i'j'} F_I(q) F_{I'}(q) \langle e^{-i(q, r_{ij}^{(0)})} e^{i(q, r_{i'j'}^{(t)})} \rangle_c \times \\ \times \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) \langle S_{ij}^\alpha(0) S_{i'j'}^\beta(t) \rangle_c. \quad (40.39)$$

Не зависящее от времени слагаемое в корреляционной функции от координат атомов определяется так же, как в случае решеточного рассеяния (см. (40.29)):

$$\langle e^{-i(q, r_{ff}(0))} e^{i(q, r_{f'f'}(t))} \rangle_c \cong e^{i(q, f' - f)} e^{i(q, f' - f)} e^{-W_f(q) - W_{f'}(q)}, \quad (40.40)$$

где f, j и $W_j(q)$ вводятся согласно (40.20), (40.30). Соответствующее слагаемое в корреляционной функции от спиновых операторов возьмем в виде

$$\langle S_{ff}^a(0) S_{f'f'}^b(t) \rangle_c \cong \langle S_{ff}^a(0) \rangle \langle S_{f'f'}^b(0) \rangle. \quad (40.41)$$

Как и выше (см. замечание после формулы (40.30)), легко убедиться, что выбор не зависящей от времени части в виде (40.41) можно оправдать с помощью принципа ослабления корреляции. В самом деле, при использовании выражения (40.40) основной вклад в (40.39) будут давать слагаемые, для которых $|f - f'| \rightarrow \infty$. Так как корреляция между спинами должна исчезать при удалении их друг от друга, то под знаком суммы можно использовать выражение (40.41).

Примем во внимание, что величина спина в узле (ff) зависит только от индекса j . Произведем преобразование спиновых операторов (5.8), выбрав за направление новой оси квантования γ направление вектора средней намагниченности. Тогда

$$\langle S_{ff}^a \rangle = \gamma_f^a \langle S_{ff}'^z \rangle = \gamma_f^a S_j \sigma_{S_j}, \quad \langle S_{ff}'^x \rangle = \langle S_{ff}'^y \rangle = 0, \quad (40.42)$$

где σ_{S_j} — относительная намагниченность атома сорта j , S_{ff}^a ($a = x, y, z$) — новые спиновые переменные.

Подставляя (40.40) — (40.42) в (40.39) и принимая во внимание (40.33), получим, наконец,

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Sigma_{pp'}^m}{\delta O} = & r_0^2 \gamma_n^2 N' \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_k \delta(q - 2\pi g'_k) \times \\ & \times \sum_{ff'} [(\gamma_f, \gamma_{f'}) - (e, \gamma_f)(e, \gamma_{f'})] \times \\ & \times S_f S_{f'} \sigma_{S_f} \sigma_{S_{f'}} F_f(q) F_{f'}(q) e^{i(q, f' - f)} e^{-W_f(q) - W_{f'}(q)}, \quad (40.43) \end{aligned}$$

где N' — число элементарных ячеек магнитной решетки, g'_k — радиусы-векторы узлов обратной магнитной решетки.

Введем обозначение

$$\Phi^{(m)} = (2\pi)^3 \frac{r_0^2 \gamma_n^2}{v} \sum_{I, I'} [(v_I, v_{I'}) - (e, v_I)(e, v_{I'})] \times \\ \times S_I S_{I'} \sigma_{S_I} \sigma_{S_{I'}} F_I(q) F_{I'}(q) e^{i(q, I' - I)} e^{-W_I(q) - W_{I'}(q)} e^{2W(q)}, \quad (40.44)$$

где $W(q)$ определяется по формуле (40.30).

В частных случаях формула (40.44) может быть упрощена. В случае ферромагнитного упорядочения $\gamma_I^\alpha = \gamma^\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) и поэтому (40.44) принимает вид

$$\Phi^{(m)} = (2\pi)^3 \frac{r_0^2 \gamma_n^2}{v} [1 - (e, \gamma)^2] \times \\ \times \left| \sum_I S_I \sigma_{S_I} F_I(q) e^{-i(q, I)} e^{-W_I(q)} \right|^2 e^{2W(q)} = \Phi_f^{(m)} [1 - (e, \gamma)^2]. \quad (40.45)$$

В случае антиферромагнитного упорядочения в системе, состоящей из двух эквивалентных подрешеток, и при антипараллельном расположении спинов (см. рис. 2, а) $j = 1, 2$, $\gamma_1^\alpha = -\gamma_2^\alpha = \gamma^\alpha$ ($\alpha = 1, 2, 3$) и формула (40.44) запишется следующим образом:

$$\Phi^{(m)} = 2 \frac{(2\pi)^3}{v} r_0^2 \gamma_n^2 [1 - (e, \gamma)^2] [1 - \cos(q, j_1 - j_2)] \times \\ \times [S \sigma_S F(q)]^2 = \Phi_a^{(m)} [1 - (e, \gamma)^2] [1 - \cos(q, j_1 - j_2)], \quad (40.46)$$

где j_1, j_2 — радиусы-векторы атомов в элементарной магнитной ячейке.

В обозначениях (40.44) дифференциальное эффективное сечение упругого магнитного рассеяния запишем в виде

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O} = N' \Phi^{(m)} \sum_k \delta(q - 2\pi g'_k) e^{-2W(q)}. \quad (40.47)$$

В частных случаях коллинеарного упорядочения спинов, например ферромагнитного, полезно для наглядности

выделить множитель $s(e, \gamma)$:

$$\frac{\delta \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O} = N' \Phi_f^{(m)} [1 - (e, \gamma)^2] \sum_k \delta(q - 2\pi g'_k). \quad (40.48)$$

Здесь N' — число элементарных ячеек магнитной решетки, g'_k — вектор обратной магнитной решетки.

Дифракционные максимумы в этом случае наблюдаются под углами, которые определяются из условий:

$$p^\alpha - p'^\alpha = 2\pi g'_k{}^\alpha, \quad |p| = |p'| \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (40.49)$$

Векторы g_k и g'_k в формулах (40.35) и (40.48), вообще говоря, различны. Следовательно, магнитное рассеяние ведет к появлению дополнительных дифракционных максимумов. Интенсивность последних меняется с температурой примерно как квадрат средней намагниченности (см. (40.44)). При температурах $\vartheta > \vartheta_c$ намагниченность обращается в нуль и эти максимумы исчезают. Интенсивность дифракционных максимумов зависит от углов через формфакторы, тепловые факторы и, в значительной мере, через множитель, зависящий от ориентации вектора рассеяния q относительно направляющих косинусов γ_j векторов намагниченностей магнитных подрешеток.

В заключение отметим, что тепловой фактор Дебая — Валлера (40.30) также может быть рассчитан с помощью функций Грина. С методами расчета можно ознакомиться по упоминавшимся выше оригинальным работам.

§ 41. Неупругое рассеяние нейтронов ¹⁾

В этом параграфе мы рассмотрим неупругое магнитное рассеяние нейтронов. Используя общую формулу (40.11) для дифференциального эффективного сечения и несколько иной метод расчета корреляционной функции в выражении для эффективного сечения, мы одновременно получим выражения как для неупругого рассеяния нейтронов, так и для упругого. Частичное повто-

¹⁾ См. также обзор Ю. А. Изюмова (1963, а) и книгу Ю. А. Изюмова и Р. П. Озерова (1966).

рение результатов представляется целесообразным по методическим соображениям.

Пусть падающий пучок нейтронов не поляризован. Тогда, согласно (40.11), будем иметь:

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}}{\delta O \delta E_{p'}} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^2} \frac{p'}{p} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \tilde{\gamma}_{p'p}^+(0) \tilde{\gamma}_{p'p}(t) \rangle \quad (41.1)$$

$$(\omega = E_{p'} - E_p)$$

(обозначения те же, что и в предыдущем параграфе).

Подставим в (41.1) выражения для матричных элементов магнитного взаимодействия (40.22) и произведем усреднение по всем ориентациям спинов падающих нейтронов (см. 40.37)). В результате получим:

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O \delta E_{p'}} = r_0^2 \gamma_n^2 \frac{p'}{p} \sum_{\alpha\beta} \sum_{f, f'} (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) F_f(q) F_{f'}(q) \times$$

$$\times \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle e^{-i(q, r_{fj}(0))} e^{i(q, r_{f'j'}(t))} S_{fj}^\alpha(0) S_{f'j'}^\beta(t) \rangle. \quad (41.2)$$

Пренебрежем спин-фононными взаимодействиями. Тогда

$$\langle e^{-i(q, r_{fj}(0))} e^{i(q, r_{f'j'}(t))} S_{fj}^\alpha(0) S_{f'j'}^\beta(t) \rangle =$$

$$= \langle e^{-i(q, r_{fj}(0))} e^{i(q, r_{f'j'}(t))} \rangle \langle S_{fj}^\alpha(0) S_{f'j'}^\beta(t) \rangle. \quad (41.3)$$

Первую корреляционную функцию в (41.3) вычислим в низшем приближении, используя расщепление вида (40.29). Принимая во внимание формулы (40.20), (40.30), видим, что

$$\langle e^{-i(q, r_{fj}(0))} e^{i(q, r_{f'j'}(t))} \rangle \cong e^{i(q, f'-f)} e^{i(q, f'-f)} e^{-W_f(q) - W_{f'}(q)}. \quad (41.4)$$

Во второй корреляционной функции (41.3) перейдем от операторов S_{fj}^α ($\alpha = 1, 2, 3$) к операторам S_{fj}^{\pm} , S_{fj}^z по формулам (5.8). Ограничимся здесь случаем систем, с параллельным (ферромагнитным) расположением спинов:

$$\gamma_{fj}^\alpha = \gamma^\alpha, \quad A_{fj}^\alpha = A^\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (41.5)$$

Тогда нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \langle S_{ij}^{\alpha}(0) S_{i'j'}^{\beta}(t) \rangle = \\ = [1 - (e, \gamma)^2] \langle S_{ij}^z(0) S_{i'j'}^z(t) \rangle + \\ + \left[\frac{1}{2} - |(e, A)|^2 \right] \langle S_{ij}^{+}(0) S_{i'j'}^{-}(t) + S_{ij}^{-}(0) S_{i'j'}^{+}(t) \rangle + \dots \end{aligned} \quad (41.6)$$

В правой части формулы (41.6) для новых операторов использованы те же обозначения, что и для старых в левой; это не может вызвать путаницы, поскольку старые операторы более использоваться не будут.

В формуле (41.6) не выписаны слагаемые, содержащие корреляционные функции вида $\langle S_{ij}^{+}(0) S_{i'j'}^{+}(t) \rangle$, $\langle S_{ij}^{+}(0) S_{i'j'}^z(t) \rangle$ и т. д. Можно показать, что для ферромагнетиков они дают малый вклад по сравнению с оставленными в (41.6) функциями (см., например, решения уравнений для функции Грина в § 39). Далее примем во внимание, что в силу условий (5.9) для векторов γ и A ¹⁾,

$$\frac{1}{2} - |(e, A)|^2 = \frac{1}{4} [1 + (e, \gamma)^2]. \quad (41.7)$$

В результате (41.6) приближенно запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \langle S_{ij}^{\alpha}(0) S_{i'j'}^{\beta}(t) \rangle \cong \\ \cong [1 - (e, \gamma)^2] \langle S_{ij}^z(0) S_{i'j'}^z(t) \rangle + \\ + \frac{1}{4} [1 + (e, \gamma)^2] \langle S_{ij}^{+}(0) S_{i'j'}^{-}(t) + S_{ij}^{-}(0) S_{i'j'}^{+}(t) \rangle. \end{aligned} \quad (41.8)$$

¹⁾ Для доказательства рассмотрим два векторных тождества, которые следуют из формул (5.9):

$$[A^* \times A] = -\frac{i}{2} \gamma, \quad i[A^* \times [e \times A]] = [A^* \times [e \times [\gamma \times A]]] \quad (e^2 = 1).$$

Раскрывая второе тождество, получаем при учете (5.9) и первого тождества

$$\frac{1}{2} e - A(A^*, e) = A^*(A, e) + \frac{1}{2} \gamma(\gamma, e).$$

Умножая это равенство скалярно на вектор e , приходим к формуле (41.7).

Заметим, что вектор γ , определяющий направление оси квантования, выбирается так, чтобы он совпадал по направлению с вектором намагниченности. При этом условии

$$\langle S_{ij}^z \rangle = S_j \sigma_{S_j}, \quad \langle S_{ij}^{\pm} \rangle = 0, \quad (41.9)$$

σ_{S_j} — относительная намагниченность j -го узла элементарной магнитной ячейки.

Подставляя в (41.2) выражения (41.3), (41.8), получим для эффективного сечения магнитного рассеяния следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O \delta E_{p'}} &= r_0^2 \gamma_n^2 \frac{p'}{p} \sum_{ij, i'j'} F_j(q) F_{j'}(q) e^{i(q, r-r')} e^{i(q, r'-l)} \times \\ &\times e^{-W_j(q) - W_{j'}(q)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\{ [1 - (e, \gamma)^2] \langle S_{ij}^z(0) S_{j'j'}^z(t) \rangle + \right. \\ &\left. + \frac{1}{4} [1 + (e, \gamma)^2] \langle S_{ij}^+(0) S_{j'j'}^-(t) + S_{ij}^-(0) S_{j'j'}^+(t) \rangle \right\} \\ &(\omega = E_{p'} - E_p), \end{aligned} \quad (41.10)$$

где e — единичный вектор рассеяния (40.23), γ — единичный вектор, параллельный вектору намагниченности. Определяя далее корреляционные функции, например, через функции Грина, мы получим явное выражение для дифференциального эффективного сечения.

Представим приближенно корреляционную функцию от z -компонент спиновых операторов в виде произведения средних и примем во внимание (41.9):

$$\langle S_{ij}^z(0) S_{j'j'}^z(t) \rangle \cong \langle S_{ij}^z(0) \rangle \langle S_{j'j'}^z(0) \rangle = S_j S_{j'} \sigma_{S_j} \sigma_{S_{j'}}. \quad (41.11)$$

Произведем преобразование Фурье спиновых операторов:

$$S_{ij}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\mathbf{v}} e^{\pm i(\mathbf{f}, \mathbf{v})} S_{\mathbf{v}j}^{\pm}, \quad (41.12)$$

где N' — число элементарных ячеек магнитной решетки. В силу трансляционной инвариантности функции вида

$\langle S_{ij}^+(0) S_{i'j'}^-(t) \rangle$ зависят только от разностей f и f' . Следовательно,

$$\langle S_{ij}^+(0) S_{i'j'}^-(t) \rangle = \frac{1}{N'} \sum_{\nu} e^{i(t-f', \nu)} \langle S_{\nu j}^+(0) S_{\nu j'}^-(t) \rangle. \quad (41.13)$$

Подставляя (41.11), (41.13) в (41.10) и принимая во внимание (40.33) и (П2.17), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O \delta E_{p'}} &= N' \frac{(2\pi)^3}{v} r_0^2 \gamma_n^2 \left| \sum_I S_I \sigma_{S_I} F_I(q) e^{-i(q, I)} e^{-W_I(q)} \right|^2 \times \\ &\times [1 - (e, \nu)^2] \sum_k \delta(q - 2\pi g'_k) \delta(E_{p'} - E_p) + \\ &+ N' \frac{(2\pi)^3}{4v} r_0^2 \gamma_n^2 \frac{p'}{p} \sum_{II'} F_I(q) F_{I'}(q) e^{i(q, I' - I)} e^{-W_I(q) - W_{I'}(q)} \times \\ &\times [1 + (e, \nu)^2] \frac{1}{N'} \sum_{\nu} \left\{ \sum_k \delta(q - \nu - 2\pi g'_k) \times \right. \\ &\times \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_{\nu j}^+(0) S_{\nu j'}^-(t) \rangle + \sum_k \delta(q + \nu - 2\pi g'_k) \times \\ &\times \left. \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_{\nu j}^-(0) S_{\nu j'}^+(t) \rangle \right\} \quad (\omega = E_{p'} - E_p). \end{aligned}$$

Чтобы придать этой формуле более обозримый вид, введем обозначения:

$$\Phi^{(m)}(q) = \frac{(2\pi)^3}{v} r_0^2 \gamma_n^2 \left| \sum_I S_I \sigma_{S_I} F_I(q) e^{-i(q, I)} e^{-W_I(q)} \right|^2 e^{2W(q)}, \quad (41.14)$$

$$\Psi_{II'}^{(m)}(q) = \frac{(2\pi)^3}{4v} r_0^2 \gamma_n^2 F_I(q) F_{I'}(q) e^{i(q, I' - I)} e^{-W_I(q) - W_{I'}(q)} e^{2W(q)}, \quad (41.15)$$

$$I_{S_{\nu j}^+ S_{\nu j'}^-}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_{\nu j}^-(0) S_{\nu j'}^+(t) \rangle; \quad (41.16)$$

средний тепловой фактор $W(q)$ (40.31) введен ради большей наглядности формул. В обозначениях (41.14) — (41.16)

выражение для дифференциального эффективного сечения принимает вид

$$\frac{\delta^2 \Sigma_{pp'}^{(m)}}{\delta O \delta E_{p'}} = N' \varphi^{(m)}(q) e^{-2W(q)} [1 - (e, \gamma)^2] \sum_k \delta(q - 2\pi g'_k) \times \\ \times \delta(E_{p'} - E_p) + \frac{p'}{p} N' e^{-2W(q)} [1 + (e, \gamma)^2] \sum_{ll'} \psi_{ll'}^{(m)}(q) \times \\ \times \frac{1}{N'} \sum_v \left\{ I_{S_{vj'} S_{vj}}^-(\omega) \sum_k \delta(q - v - 2\pi g'_k) + \right. \\ \left. + I_{S_{vj'} S_{vj}}^+(\omega) \sum_k \delta(q + v - 2\pi g'_k) \right\} \quad (41.17) \\ (\omega = E_{p'} - E_p, \quad q = p - p').$$

Первое слагаемое в (41.17) описывает упругое рассеяние нейтронов на спиновой системе (см. § 40). Оно дает резкие максимумы интенсивности для углов рассеяния, удовлетворяющих условию отражения Брегга — Вульфа (40.49). Второе слагаемое описывает неупругое рассеяние нейтронов, сопровождающееся испусканием или поглощением одной спиновой волны. Интенсивности максимумов упругого и неупругого рассеяния зависят от углов через формфакторы, тепловые факторы Дебая — Валлера и множители $[1 \pm (e, \gamma)^2]$.

Заметим, что $I_{S_{vj'} S_{vj}}^{\pm}$ (41.16) есть не что иное, как, согласно (26.2), спектральная интенсивность для корреляционной функции

$$\langle S_{vj}^-(t') S_{vj'}^+(t) \rangle$$

или, согласно (26.13), для функции Грина

$$\langle \langle S_{vj'}^+(t) | S_{vj}^-(t') \rangle \rangle.$$

В низшем приближении, при пренебрежении затуханием, спектральные функции (41.16) имеют δ -образный характер:

$$I(\omega) \sim \delta(\omega \pm E_r(v)), \quad (41.18)$$

где $E_r(v)$ — энергия спиновой волны, r — номер ветви спектра спиновых волн. Учитывая, что сумма по v в (41.17) снимается δ -функцией по импульсам, видим,

что в распределении рассеянных нейтронов по энергиям должны иметься δ -образные максимумы, положение которых определяется из уравнений

$$E_{p'} - E_p \pm E_r(p - p' - 2\pi g'_k) = 0.$$

Так как энергия спиновой волны является периодической функцией волнового вектора с периодом равным вектору обратной решетки, то эти уравнения переписутся в виде

$$\Phi^\pm(p, p') = E_{p'} - E_p \pm E_r(p - p') = 0. \quad (41.19)$$

Уравнение $\Phi^-(p, p') = 0$ определяет условия, при которых возможно рассеяние нейтрона с поглощением спиновой волны, а уравнение $\Phi^+(p, p') = 0$ — с порождением спиновой волны.

Если учесть конечность времени жизни спиновых волн, полагая, например,

$$I(\omega) \sim \frac{\Gamma_r(\nu)}{[\omega - E_r(\nu)]^2 + \Gamma_r^2(\nu)} \quad (\omega = E_{p'} - E_p), \quad (41.20)$$

то распределение нейтронов по энергиям в максимумах интенсивности будет описываться кривой Лорентца с полушириной $\Gamma_r(\nu)$ вида

$$\frac{\Gamma_r(\nu)}{[E_{p'} - E_p - E_r(p - p')]^2 + \Gamma_r^2(\nu)}. \quad (41.21)$$

Пренебрегая затуханием спиновых волн, рассмотрим рассеяние с поглощением спиновой волны. Согласно (41.19), оно возможно, если p' удовлетворяет уравнению $\Phi^-(p, p') = 0$. Заметим, что $E_r(\nu) \geq 0$ и что при некотором ν достигает максимального значения E_r^{\max} . Легко видеть, что

$$\Phi^-(p, p') \begin{cases} > 0 & \text{при } p'^2 = p^2 + 2m_n E_r^{\max}, \\ < 0 & \text{при } p'^2 = p^2. \end{cases}$$

Следовательно, всегда можно найти такое p' , лежащее в интервале значений

$$p^2 \leq p'^2 \leq p^2 + 2m_n E_r^{\max}, \quad (41.22)$$

что уравнение $\varphi^-(p, p') = 0$ удовлетворится для любого угла рассеяния.

Рассеяние с порождением спиновой волны возможно, если удовлетворяется уравнение $\varphi^+(p, p') = 0$. Если $p^2 > 2m_n E_r^{\max}$, то всегда можно подобрать такое p' , лежащее в интервале значений

$$p^2 - 2m_n E_r^{\max} \leq p'^2 \leq p^2, \quad (41.23)$$

что уравнение $\varphi^+(p, p') = 0$ удовлетворится при любом угле рассеяния. При $p^2 < 2m_n E_r^{\max}$, вообще говоря, невозможно рассеяние нейтронов на произвольный угол с порождением спиновой волны. При достаточно малых p рассеяние с порождением спиновой волны вообще невозможно.

По положению максимумов неупругого магнитного рассеяния возможно определение вида спектра спиновых волн. Действительно, так как величина p задана, а p' измеряется по положению максимума интенсивности, то энергия спиновой волны $E_r(\nu)$ ($\nu \doteq p - p'$) может быть определена по уравнению (41.19).

§ 42. Некоторые дальнейшие применения метода функций Грина

Применения метода функций Грина не исчерпываются немногими элементарными примерами, рассмотренными выше. Отметим еще некоторые приложения метода к другим задачам теории магнетизма.

Модель Изинга. Гамильтониан ферромагнетика в модели Изинга записывается в виде

$$\mathcal{H} = -\mu H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} I(f_1 - f_2) S_{f_1}^z S_{f_2}^z, \quad (42.1)$$

где S_f^z — z -компонента оператора спина в узле f . Для него Доман и тер Хаар (1962) в случае спина $S = 1/2$ вывели следующее уравнение:

$$\langle S_f^z \rangle = \frac{1}{2} - \left\langle \frac{2S_f^z}{\exp \left\{ \frac{1}{\Phi} \left[\mu H + \sum_{f'} I(f - f') S_{f'}^z \right] \right\} - 1} \right\rangle. \quad (42.2)$$

Если в правой части заменить среднее значение функции от S_i^z на ту же самую функцию от средних значений, $\langle S_i^z \rangle$, то получится уравнение молекулярного поля. Тахир-Кели и др. (1963) рассмотрели также случай произвольного спина. В связи с этим Келлен (1963, а) замечает, что эти результаты нельзя считать решением задачи Изинга

[С. В. Тябликов и В. К. Федянин (1967) построили алгебраическую систему (вообще говоря, незамкнутую) для высших корреляционных функций модели Изинга и нашли ее решение в одномерном случае (см. также обзор В. К. Федянина в сборнике (1973) (Ред.)].

Антиферромагнетики. Пу Фу-чо (1960, а, б) исследовал основное состояние и зависимость намагниченности от температуры и поля для изотропного антиферромагнетика для спина $S = 1/2$. Червонко (1963), Хьюсон и тер Хаар (1963, а) рассмотрели несколько различными путями статистические характеристики изотропного антиферромагнетика в случае произвольного спина. Лайнс (1964, б) детально рассмотрел случай $S \geq 1/2$. Во всех этих работах использовались расщепления такого же вида, как в §§ 29 и 32. Это позволило получить результаты, пригодные в широком интервале температур. Намагниченности подрешеток оказываются строго меньше их суммарных магнитных моментов даже при нуле температуры. Причиной этого является наличие нулевых колебаний в спиновой системе. Лайнс (1964, а) использовал метод функций Грина для расчета температур Кюри и Нееля в слоистых системах. Этим же методом Пу Фу-чо (1961) получил общие формулы для резонанса в одноосных антиферромагнетиках. [Дальнейшее развитие метода функций Грина применительно к анизотропным двухподрешеточным антиферромагнетикам типа «легкая ось» и «легкая плоскость» описано в гл. IV Дополнения (Ред.)].

Ферромагнетики. Попытки распространения результатов приближенного решения уравнений для функций Грина в случае спина $S = 1/2$ на случай произвольного спина S были предприняты также Ю. А. Изюмовым и Е. Н. Яковлевым (1960) и Кавасаки и Мори (1961); подробное обсуждение результатов этих работ см.

у Тахир-Кели и тер Хаара (1962, а). Келлен (1963, б) и Тахир-Кели (1963) построили приближенные уравнения для намагниченности в случае произвольного S с помощью расщепления уравнений для функций Грина, предложенного в работе Келлена (см. также § 35). Сопоставление результатов первого приближения для разных случаев проведено в работе Хьюсона и тер Хаара (1963, б). Используя это же приближение, Тахир-Кели и Келлен (1964) вычислили корреляционную функцию для z -компонент спиновых операторов. Тахир-Кели и Джаррет (1964) рассчитали температуру Кюри для кубических решеток при учете вторых соседей. Н. А. Потапков (1963, а) исследовал анизотропию одноосных ферромагнетиков при учете спин-орбитального взаимодействия; им также изучено влияние магнитной анизотропии на ширину линии ферромагнитного резонанса в одноосных кристаллах (Н. А. Потапков (1962, а, б), (1963, б), (1970)); [см. также обзор в сборнике (1973) (Ред.)]. Гаубенрейзер (1963), Хаас (1963) и позднее Леони и Натоли (1971) рассмотрели ферромагнетики при учете спин-спинового (дипольного) взаимодействия. [В работах Н. А. Потапкова (1970), Л. М. Носковой (1972), Девлина (1971) и Танаки и Кондо (1972) найдены энергии элементарных возбуждений и термодинамические величины при точном учете одноионной анизотропии (для $S \geq 1$) (Ред.)].

Введение затухания как мнимой части полюса функции Грина позволило Мэн Сянь-чженю (1963) обобщить известные результаты классической теории угловой зависимости ширины линии ферромагнитного резонанса (Г. В. Скроцкий и Л. В. Курбатов (1958)) и установить ряд общих соотношений. Мэн Сянь-чжень и Пу Фу-чо (1961), Мэн Сянь-чжень (1961), используя метод функций Грина, распространили на произвольные температуры результаты Клогстона и др. (1956) и Келлена и Питтели (1960) по зависимости ширины линии от примесей. Поведение резонансной кривой вблизи точки Кюри пытался рассмотреть методом функций Грина Морковский (1963).

Подробное рассмотрение теории магнитного резонанса провели Томита и Танака (1963), используя

оригинальный способ расщепления цепочек уравнений, основанный на работе Кубо (1962).

Хаас и Джаррет (1964) [а позднее Ю. Г. Рудой в сборнике (1973) (Ред.)] провели сравнение существующих в теории ферромагнетизма методов на модели гейзенберговского изотропного ферромагнетика. [Дальнейшее развитие метода функций Грина применительно к анизотропным ферромагнетикам типа «легкая ось» и «легкая плоскость» описано в гл. II и III Дополнения (Ред.).]

Ферримангнетики со сложной структурой. В работах Ю. А. Изюмова (1963, 6) и В. Г. Барьяхтара и Л. А. Шишкина (1964) исследованы свойства ферримангнетиков, состоящих из двух подрешеток, в том числе рассмотрены винтовые структуры [наиболее детальная (для произвольных значений внутри- и междоузельных обменных интегралов, спинов подрешеток и внешнего магнитного поля) квантовая теория двухподрешеточных ферритов построена в работе Д. А. Яблонского (1972) (Ред.).]

Миллс и др. (1964) рассмотрели трехподрешеточную модель изотропного ферримангнетика и рассчитали намагниченности подрешеток; [Эбина (1967) учел кубическую анизотропию (Ред.).]

А. Г. Хачатурян (1963) и (1974) исследовал интерполяционные решения для магнетиков, подобные рассматривавшимся в § 32, не накладывая заранее условия независимости среднего отклонения спина в узле от номера узла решетки. Привлечение теоретико-групповых методов позволило получить различные типы структур, допускаемых симметрией решетки, и исследовать их устойчивость при разных температурах.

Модель с $s-d$ -обменом. Влияние взаимодействия электронов проводимости с электронами незаполненных оболочек на свойства переходных металлов в рамках $s-d$ -обменной модели (см. § 5) рассматривалось методом функций Грина С. В. Вонсовским и Ю. А. Изюмовым (1960), Н. А. Потапковым и С. В. Тябликовым (1960), Тахир-Кели и тер Хааром (1963). Детальное обсуждение различных приложений см. в обзоре С. В. Вонсовского и Ю. А. Изюмова (1962, 6) и монографии С. В. Вонсовского (1971).

Рассеяние нейтронов в магнетиках. В. Н. Кашеев и М. А. Кривоглаз (1961) исследовали с помощью функций Грина влияние спин-спинового и спин-фононного взаимодействия в ферромагнетиках на энергетическое распределение рассеянных нейтронов. В. Н. Кашеев (1962, а, б, в)— в антиферромагнетиках и ферримангнетиках. В. Г. Барьяхтар и С. В. Малеев (1963), С. В. Малеев и др. (1962) рассматривали рассеяние нейтронов на ферромагнетиках со структурой спирали при учете неупругого магнитного рассеяния и В. Н. Кашеев (1964, а, б)— при учете спин-фононного взаимодействия [(см. также гл. V Дополнения). Наиболее полно этот круг вопросов рассмотрен в книге Ю. А. Изюмова и Р. П. Озерова (1966) (*Ред.*)].

ПРИЛОЖЕНИЕ ¹⁾

П1. Прямая и обратная решетки

Рассмотрим простейшую решетку. Введем тройку базисных векторов a_1, a_2, a_3 , которые соединяют какой-либо узел решетки с тремя другими, и построим на них параллелепипед. Остальные узлы решетки могут быть получены параллельным переносом этого параллелепипеда по направлениям базисных векторов на величины, кратные длинам его ребер. Параллелепипед наименьшего объема, повторением которого может быть построена решетка, называют примитивной ячейкой. На каждую примитивную ячейку приходится по одному узлу решетки. Выбор основной ячейки кристалла не однозначен, так как имеется множество троек некомпланарных векторов, на которых могут быть построены ячейки одинакового объема. Обычно их выбирают так, чтобы периоды трансляций были наименьшими. Такие ячейки будем называть элементарными.

Выберем какой-либо узел простейшей решетки за начало координат. Тогда радиусы-векторы узлов решетки запишутся в виде

$$R_l = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3, \quad (\text{П1.1})$$

где l_1, l_2, l_3 — целые числа. Очевидно, что векторы a_r ($r = 1, 2, 3$) имеют размерность длины.

В простейших решетках все узлы заняты атомами одного сорта. Сложную решетку в общем случае можно представить как совокупность нескольких простейших решеток, вставленных одна в другую. Узлы каждой из них могут быть заняты атомами того или иного сорта.

¹⁾ См. Борн и Хуан Кунь (1958), Бриллюэн и Пароди (1959).

Следовательно, в элементарной ячейке будет находиться столько атомов, сколько имеется простейших решеток, составляющих сложную решетку. Эти атомы образуют базис решетки.

Выберем одну из простейших решеток за основную и условимся нумеровать ее ячейки по радиусам-векторам ее узлов R_i ; число атомов в элементарной ячейке обозначим через n . Тогда радиус-вектор любого узла решетки запишется следующим образом:

$$R_{ij} = R_i + R_j \quad (j = 1, 2, \dots, n), \quad (\text{П1.2})$$

где R_i — радиус-вектор узла основной решетки (или элементарной ячейки), R_j — радиус-вектор атома в элементарной ячейке относительно R_i . Очевидно, что индекс j является также номером простейшей решетки. Объем элементарной ячейки равен смешанному произведению базисных векторов:

$$v_a = (a_1, [a_2 \times a_3]). \quad (\text{П1.3})$$

Если в узлах решетки находятся атомы с отличными от нуля магнитными моментами, то мы будем говорить о магнитной решетке. Понятия элементарной ячейки и базиса (для сложных решеток) переносятся на магнитные решетки очевидным образом.

Элементарная ячейка магнитной решетки может не совпадать, вообще говоря, с элементарной ячейкой кристаллической решетки, так как в магнитной решетке узлы считаются идентичными, если в каждом из них спины совпадают по величине и направлению.

Рассмотрим в качестве примера антиферромагнетик, у которого магнитно-активные атомы одинаковы и расположены в узлах простой кубической решетки на расстоянии a друг от друга. Пусть спины соседних узлов ориентированы антипараллельно [см. рис. 7, а (стр. 150)]. Спины (+) и спины (—) каждые по отдельности образуют гранецентрированные кубические решетки с периодом, равным $2a$. В целом антиферромагнетик представляется совокупностью двух гранецентрированных решеток, вставленных одна в другую (структура типа NaCl). Примером решетки, у которой

магнитная и кристаллографическая элементарные ячейки совпадают, может служить решетка антиферромагнетика со структурой, изображенной на рис. 8, а (см. стр. 150).

Введем теперь так называемую обратную решетку. Для этого возьмем в качестве базисных тройку векторов:

$$\begin{aligned} b^{(1)} &= v_a^{-1} [a_2 \times a_3], \\ b^{(2)} &= v_a^{-1} [a_3 \times a_1], \\ b^{(3)} &= v_a^{-1} [a_1 \times a_2]. \end{aligned} \quad (\text{П } 1.4)$$

Векторы $b^{(r)}$ ($r = 1, 2, 3$) также не компланарны, и на них можно построить решетку. Последняя называется обратной решеткой, в отличие от прямой решетки, построенной на векторах a_r ($r = 1, 2, 3$). Термин «обратная» связан с тем, что векторы $b^{(r)}$ имеют размерность обратной длины (в частности, если векторы a_r взаимно ортогональны, то длина вектора $b^{(r)}$ равна обратной длине вектора a_r).

Радиусы-векторы узлов обратной решетки запишутся в виде

$$g_k = k_1 b^{(1)} + k_2 b^{(2)} + k_3 b^{(3)}, \quad (\text{П } 1.5)$$

где k_1, k_2, k_3 — целые числа.

Базисные векторы прямой и обратной решеток удовлетворяют соотношениям

$$(a_r, b^{(r')}) = \delta_{r,r'} \quad (r, r' = 1, 2, 3). \quad (\text{П } 1.6)$$

Объем элементарной ячейки обратной решетки равен обратной величине объема прямой решетки:

$$v_b = (b^{(1)}, [b^{(2)} \times b^{(3)}]) = \frac{1}{(a_1, [a_2 \times a_3])} = \frac{1}{v_a}. \quad (\text{П } 1.7)$$

Радиус-вектор каждого узла обратной решетки g_k перпендикулярен к семейству параллельных плоскостей, проходящих через узлы прямой решетки. Далее будем называть такие плоскости кристаллическими. Векторное уравнение плоскости, перпендикулярной к g_k , имеет

вид

$$\frac{1}{|g_k|}(g_k, R_l) = c, \quad (\text{П } 1.8)$$

где c — расстояние от начала координат до этой плоскости. Подставляя в (П1.8) выражения (П1.1), (П1.5), получим

$$\frac{1}{|g_k|}(k_1 l_1 + k_2 l_2 + k_3 l_3) = c.$$

Так как k_r, l_r ($r = 1, 2, 3$) — целые числа, то числитель левой части этого выражения будет целым числом; его наименьшее изменение равно единице. Следовательно, расстояние между соседними кристаллическими плоскостями, перпендикулярными к g_k , будет равно

$$\delta = |g_k|^{-1}. \quad (\text{П } 1.9)$$

Произвольный вектор R для прямой решетки всегда можно записать в виде:

$$R = \xi_1 a_1 + \xi_2 a_2 + \xi_3 a_3. \quad (\text{П } 1.10)$$

Умножая это равенство скалярно на $b^{(r)}$ и принимая во внимание (П1.6), получаем:

$$\xi_r = (R, b^{(r)}) \quad (r = 1, 2, 3). \quad (\text{П } 1.11)$$

Следовательно, разложение произвольного вектора по базисным имеет вид

$$R = (R, b^{(1)}) a_1 + (R, b^{(2)}) a_2 + (R, b^{(3)}) a_3. \quad (\text{П } 1.12)$$

Рассмотрим разложение в ряд Фурье функции $F(R)$, периодичной с периодом решетки. По определению

$$F(R) = F(R + R_l), \quad (\text{П } 1.13)$$

где R_l — произвольный вектор вида (П1.1). Функцию $F(R)$ можно рассматривать как функцию трех переменных ξ_1, ξ_2, ξ_3 (П1.11) и разложить в формальный ряд

Фурье по каждой из них

$$\begin{aligned} F(R) &= F(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \\ &= \sum_{k_1, k_2, k_3} \tilde{F}(k_1, k_2, k_3) e^{2\pi i (k_1 \xi_1 + k_2 \xi_2 + k_3 \xi_3)}, \quad (\text{П 1.14}) \end{aligned}$$

где k_1, k_2, k_3 — целые числа и где

$$\tilde{F}(k_1, k_2, k_3) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 F(\xi_1, \xi_2, \xi_3) e^{-2\pi i (k_1 \xi_1 + k_2 \xi_2 + k_3 \xi_3)} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3. \quad (\text{П 1.15})$$

Выражения в показателях экспонент перепишем при учете (П1.11) в виде

$$\begin{aligned} k_1 \xi_1 + k_2 \xi_2 + k_3 \xi_3 &= k_1(R, b^{(1)}) + k_2(R, b^{(2)}) + k_3(R, b^{(3)}) = \\ &= (R, g_k), \end{aligned}$$

где g_k — вектор обратной решетки (П1.5). В результате формулы (П1.14), (П1.15) можно записать следующим образом:

$$F(R) = \sum_{g_k} \tilde{F}(g_k) e^{2\pi i (R, g_k)}, \quad (\text{П 1.16})$$

где

$$\tilde{F}(g_k) = \frac{1}{v_a} \int_{(v_a)} F(R) e^{-2\pi i (R, g_k)} dR; \quad (\text{П 1.17})$$

интеграл в (П1.17) берется по объему элементарной ячейки. Множитель v_a^{-1} перед интегралом обязан своим появлением якобиану преобразования от переменных ξ_r к переменным R^α ($\alpha = 1, 2, 3$). Действительно, в декартовых координатах формулы (П1.11) имеют вид

$$\xi_r = R^x b^{(r)x} + R^y b^{(r)y} + R^z b^{(r)z} \quad (r = 1, 2, 3).$$

Отсюда

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\partial(R^x, R^y, R^z)} &= \begin{vmatrix} b^{(1)x} & b^{(1)y} & b^{(1)z} \\ b^{(2)x} & b^{(2)y} & b^{(2)z} \\ b^{(3)x} & b^{(3)y} & b^{(3)z} \end{vmatrix} = \\ &= (b^{(1)}, [b^{(2)} \times b^{(3)}]) = v_a^{-1}. \end{aligned}$$

П2. Волновые векторы и зоны

Типичной задачей в теории кристаллических решеток является определение собственных значений уравнений вида

$$E\varphi(R_{lj}) = \sum_{l'j'} I_{jj'}(R_l - R_{l'}) \varphi(R_{l'j'}), \quad (\text{П } 2.1)$$

l — номер ячейки, j — номер узла в ячейке, $I_{jj'}(R_l - R_{l'})$ — некоторая функция координат пары узлов; предполагается, что она допускает преобразование Фурье. Таковы, например, задачи определения спектра нормальных колебаний в кристаллической решетке или спектра спиновых волн в системе спинов.

Рассмотрим простейшую решетку. В этом случае уравнение (П2.1) упрощается:

$$E\varphi(R_l) = \sum_{l'} I(R_l - R_{l'}) \varphi(R_{l'}). \quad (\text{П } 2.2)$$

Пусть мы имеем решетку конечных размеров. Число узлов в ней обозначим через N , а занимаемый ею объем — через V . К уравнению (П2.2) нужно еще добавить граничные условия. От последних зависит вид спектра нормальных колебаний. Однако если образец достаточно велик, то распределение нормальных колебаний по частотам практически перестает зависеть от формы образца и вида граничных условий (Ледерман (1944), Пайерлс (1954)). Поэтому возьмем образец в форме параллелепипеда, построенного на тройке векторов $N_r a_r$ ($r = 1, 2, 3$), причем $N_1 N_2 N_3 = N$, $N v_a = V$; а истинные граничные условия заменим периодическими граничными условиями Борна (Борн и Гепперт-Майер (1938)), состоящими в том, что искомая величина принимает одинаковые значения в соответственных точках противоположных граней параллелепипеда¹⁾. Периоди-

¹⁾ В кристалле конечных размеров, кроме объемных колебаний, существуют еще так называемые поверхностные колебания. Замена истинных граничных условий на периодические, не затрагивая заметным образом объемных колебаний, существенно меняет картину поверхностных колебаний и, в частности, может привести к исчезновению их. При расчетах объемных характеристик это обстоятельство не имеет большого значения, так как статистический вес поверхностных колебаний мал по сравнению со статистическим весом объемных колебаний.

ческие граничные условия можно также интерпретировать как условия периодичности решения с периодами, равными $N_1 a_1$, $N_2 a_2$, $N_3 a_3$:

$$\varphi(R_l) = \varphi(R_l + R_N), \quad (\text{П} 2.3)$$

где R_l — радиус-вектор узла, R_N — векторы, на которых построен объем V . В связи со сказанным объем V называют также основной областью периодичности.

Будем искать решение уравнения (П2.2) в виде

$$\varphi(R_l) = \sum_{\mathbf{v}} \tilde{\varphi}(\mathbf{v}) e^{i(\mathbf{v}, R_l)}, \quad (\text{П} 2.4)$$

где \mathbf{v} — так называемый волновой вектор. Из определения следует, что волновые векторы задаются в пространстве обратной решетки. Подставляя (П2.4) в (П2.2), получим:

$$E \tilde{\varphi}(\mathbf{v}) = E(\mathbf{v}) \tilde{\varphi}(\mathbf{v}), \quad (\text{П} 2.5)$$

$$E(\mathbf{v}) = \sum_l I(R_l) e^{-i(\mathbf{v}, R_l)}.$$

Собственное значение $E(\mathbf{v})$ (П2.5) уравнения (П2.2) является периодической функцией волнового вектора с периодом, равным периоду обратной решетки, умноженному на 2π :

$$E(\mathbf{v} + 2\pi \mathbf{g}_k) = E(\mathbf{v}), \quad (\text{П} 2.6)$$

где \mathbf{g}_k — вектор обратной решетки (П1.5).

Действительно, подставим в обе части этого равенства выражения для $E(\mathbf{v})$ (П2.5), \mathbf{g}_k (П1.5) и R_l (П1.1). Принимая во внимание (П1.6), получим:

$$\begin{aligned} (\mathbf{v} + 2\pi \mathbf{g}_k, R_l) &= (\mathbf{v}, R_l) + 2\pi(k_1 l_1 + k_2 l_2 + k_3 l_3) = \\ &= (\mathbf{v}, R_l) + 2\pi m, \end{aligned}$$

где m — целое число. Отсюда следует равенство (П2.6):

$$\begin{aligned} \sum_l I(R_l) e^{-i(\mathbf{v} + 2\pi \mathbf{g}_k, R_l)} &= \sum_l I(R_l) e^{-i(\mathbf{v}, R_l) - 2\pi i m} = \\ &= \sum_l I(R_l) e^{-i(\mathbf{v}, R_l)}. \end{aligned}$$

В силу отмеченной периодичности область изменения волновых векторов разбивается на подобласти, в каждой из которых между $E(\nu)$ и ν имеется взаимно однозначная связь. За первую подобласть можно выбрать, например, первую элементарную ячейку обратной решетки.

Выбор элементарной ячейки обратной решетки в качестве основной подобласти значений волнового вектора не является единственно возможным. При исследовании конкретных задач часто оказывается более удобным выбрать за основную подобласть первую зону Бриллюэна, которая имеет бóльшую симметрию, чем элементарная ячейка обратной решетки, а по объему равна ей. Остальные подобласти изменения $E(\nu)$ определяются как зоны Бриллюэна высших порядков.

Зоны Бриллюэна строятся следующим образом. Соединим начало координат обратной решетки O_b отрезками прямых с остальными узлами обратной решетки. Проведем через середины отрезков перпендикулярно к ним плоскости. Многогранник наименьшего объема с центром в O_b будет первой зоной Бриллюэна. Равенство его объема объему элементарной ячейки обратной решетки следует из того, что точки ν равномерно заполняют пространство обратной решетки (см. ниже) и что любая внешняя точка может быть получена из внутренней точки многогранника смещением последней на вектор обратной решетки.

Говоря иначе, к первой зоне принадлежат все точки ν , в которые можно перейти непрерывным путем из точки O_b , не пересекая при этом ни одной из указанных плоскостей. Ко второй зоне принадлежат все точки ν , в которые можно попасть из O_b , пересекая только одну из этих плоскостей; к третьей — пересекая две разные плоскости и т. д.

Определим теперь допустимые значения векторов ν в первой подобласти. Граничным условиям (П2.3) удовлетворим, потребовав, чтобы им удовлетворяло каждое частное решение уравнения (П2.2):

$$\varphi(R_l) = \varphi(R_l + R_N),$$

$$\varphi(R_l) = \text{const } e^{i(\nu \cdot R_l)}.$$

Отсюда видим, что векторы \mathbf{v} должны удовлетворять условиям:

$$(\mathbf{v}, \mathbf{R}_N) = 2\pi n, \quad (\text{П 2.7})$$

где n — целое число, \mathbf{R}_N — один из векторов, на которых построена основная область периодичности.

Примем во внимание, что, аналогично (П 1.12), вектор \mathbf{v} можно разложить по базисным векторам обратной решетки:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= v_1 \mathbf{b}^{(1)} + v_2 \mathbf{b}^{(2)} + v_3 \mathbf{b}^{(3)}, \\ v_r &= (\mathbf{v}, \mathbf{a}_r) \quad (r = 1, 2, 3), \end{aligned} \quad (\text{П 2.8})$$

и что вектор \mathbf{R}_N в (П 2.3) можно взять в одном из следующих видов:

$$N_1 \mathbf{a}_1, N_2 \mathbf{a}_2, N_3 \mathbf{a}_3. \quad (\text{П 2.9})$$

Подставляя (П 2.8), (П 2.9) в (П 2.7), получаем, наконец,

$$v_r = \frac{2\pi}{N_r} n_r \quad (r = 1, 2, 3) \quad (\text{П 2.10})$$

и далее

$$\mathbf{v} = 2\pi \left(\frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}^{(1)} + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}^{(2)} + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}^{(3)} \right), \quad (\text{П 2.11})$$

где n_r — целые числа, принимающие значения:

$$n_r = 0, 1, 2, \dots, N_r - 1 \quad (r = 1, 2, 3). \quad (\text{П 2.12})$$

Таким образом, волновые векторы представляются в виде линейных комбинаций базисных векторов обратной решетки. Число различных волновых векторов \mathbf{v} равно $N = N_1 N_2 N_3$; все они равномерно заполняют первую элементарную ячейку обратной решетки.

При расчетах часто встречается необходимость вычисления сумм вида

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} F(\mathbf{v}), \quad (\text{П 2.13})$$

где $F(\mathbf{v})$ — некоторая функция от \mathbf{v} ; суммирование ведется по всем векторам \mathbf{v} , лежащим в элементарной ячейке обратной решетки (в первой зоне). В задачах статистической механики число атомов N в объеме, занятом кристаллической решеткой, порядка числа Аво-

гадро. Поэтому \mathbf{v} заполняют первую зону почти непрерывно (расстояние между двумя соседними точками будет порядка $2\pi|b^{(r)}|/N_r$) и сумму по \mathbf{v} (П2.13) можно заменить интегралом.

Разобьем элементарную ячейку обратной решетки на объемы $\Delta v(\mathbf{v})$, построенные около точек \mathbf{v} на тройках векторов

$$\Delta \mathbf{v}_r = \frac{2\pi}{N_r} b^{(r)} \Delta n_r \quad (r = 1, 2, 3).$$

Обозначим через $\Delta n(\mathbf{v})$ число точек \mathbf{v} , лежащих в объеме $\Delta v(\mathbf{v})$. Так как

$$\begin{aligned} \Delta v(\mathbf{v}) &= \frac{(2\pi)^3}{N_1 N_2 N_3} (b^{(1)}, [b^{(2)} \times b^{(3)}]) \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{N v_a} \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{(2\pi)^3}{N v_a} \Delta n(\mathbf{v}), \end{aligned}$$

то

$$\Delta n(\mathbf{v}) = \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{N v_a}{(2\pi)^3} \Delta v(\mathbf{v}).$$

Заменим сумму по \mathbf{v} в (П2.13) суммой по всем $\Delta v(\mathbf{v})$, считая $F(\mathbf{v})$ постоянной в пределах каждого элементарного объема $\Delta v(\mathbf{v})$. Тогда

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\Delta v(\mathbf{v})} F(\mathbf{v}) \Delta n(\mathbf{v}) = \frac{v_a}{(2\pi)^3} \sum_{\Delta v(\mathbf{v})} F(\mathbf{v}) \Delta v(\mathbf{v}).$$

Последнее выражение есть не что иное, как интегральная сумма, и потому в пределе

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} F(\mathbf{v}) \rightarrow \frac{v_a}{(2\pi)^3} \int_{(v_b)} F(\mathbf{v}) d\mathbf{v}(\mathbf{v}), \quad (\text{П2.14})$$

где интеграл берется по объему элементарной ячейки обратной решетки (или первой зоны).

В приложениях также приходится иметь дело с суммами по элементарным ячейкам прямой решетки вида:

$$\Phi(\mathbf{v}) = \frac{1}{N} \sum_l e^{i(\mathbf{v} \cdot \mathbf{R}_l)}, \quad (\text{П2.15})$$

где \mathbf{v} — волновой вектор (П2.11), \mathbf{R}_l — радиус-вектор узлов прямой решетки (П1.1).

Если $\nu = 2\pi g_k$, где g_k — один из векторов обратной решетки, то

$$(\nu, R_l) = 2\pi (g_k, R_l) = 2\pi \sum_{r=1}^3 k_r l_r = 2\pi m,$$

где m — целое число, и сумма (П2.15) равна единице. Если $\nu \neq 2\pi g_k$, то

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_l e^{i(\nu, R_l)} &= \prod_{r=1}^3 \frac{1}{N_r} \sum_{l_r=0}^{N_r-1} e^{2\pi i \frac{n_r l_r}{N_r}} = \\ &= \prod_{r=1}^3 \frac{1}{N_r} \frac{1 - e^{2\pi i l_r}}{1 - e^{2\pi i \frac{l_r}{N_r}}} = 0. \end{aligned}$$

Объединяя оба эти случая, можем записать для квазинепрерывного индекса ν :

$$\frac{1}{N} \sum_l e^{i(\nu, R_l)} = \sum_k \Delta(\nu - 2\pi g_k), \quad (\text{П2.16})$$

где $\Delta(x) = 1$, если $x = 0$, и $\Delta(x) = 0$, если $x \neq 0$.

Установим теперь вид суммы (П2.15) в предельном случае, когда индекс ν меняется непрерывно. Обозначим ее через $\bar{\varphi}(\nu)$.

Пусть $F(\nu)$ — некоторая гладкая функция. Тогда согласно (П2.16)

$$\sum_{\nu} F(\nu) \varphi(\nu) = \sum_k F(2\pi g_k).$$

Переходя к непрерывному распределению значений ν , заменим в левой части этого равенства $\varphi(\nu)$ на $\bar{\varphi}(\nu)$, а сумму по ν — интегралом (см. (П2.13) и (П2.14)):

$$N \frac{v_a}{(2\pi)^3} \int_{(v_b)} F(\nu) \bar{\varphi}(\nu) d\nu = \sum_k F(2\pi g_k).$$

Отсюда следует, что функцию $\bar{\varphi}(\nu)$ можно записать в виде

$$\frac{1}{N} \sum_l e^{i(\nu, R_l)} = \frac{(2\pi)^3}{N v_a} \sum_k \delta(\nu - 2\pi g_k), \quad (\text{П2.17})$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

Иначе говоря, при переходе от дискретного распределения волновых векторов к непрерывному следует заменять дельта-символ Кронекера на дельта-функцию Дирака:

$$\Delta(\nu) \rightarrow \frac{(2\pi)^3}{Nv_a} \delta(\nu) = \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\nu). \quad (\text{П } 2.18)$$

При вычислении кратных сумм по решетке всегда можно пользоваться формулой (П2.16), тогда как применение формулы (П2.17) требует известной осторожности, поскольку ее не всегда можно использовать для каждой суммы по отдельности. Например,

$$\begin{aligned} \left| \sum_l e^{i(\nu, R_l)} \right|^2 &= \sum_{l, l'} e^{i(\nu, R_l - R_{l'})} = N \sum_{l''} e^{i(\nu, R_{l''})} = \\ &= N \frac{(2\pi)^3}{v_a} \sum_k \delta(\nu - 2\pi g_k). \end{aligned} \quad (\text{П } 2.19)$$

П3. Условия отражения Брегга — Вульфа

Волна отражается от кристаллической решетки, если имеется система кристаллических плоскостей, удовлетворяющих условию Брегга — Вульфа:

$$2\delta \cos \varphi = n\lambda, \quad (\text{П } 3.1)$$

где δ — расстояние между соседними плоскостями, φ — угол падения, λ — длина волны, n — целое число. Дадим выражению (П3.1) другой вид.

Условие (П3.1) удовлетворяется, если волновые векторы падающей (ν) и рассеянной (ν') волн удовлетворяют условиям

$$\nu' = \nu + 2\pi g_k, \quad |\nu'| = |\nu| \quad (\text{П } 3.2)$$

(g_k — вектор обратной решетки). Действительно, из (П3.2) следует, что

$$2\pi g_k^2 = 2(\nu', g_k) = -2(\nu, g_k).$$

Обозначая через φ угол между векторами g_k и ν' (или g_k и ν), можем записать:

$$2|\nu'| \cos \varphi = 2\pi g_k. \quad (\text{П } 3.3)$$

Примем во внимание, что вектор g_h всегда нормален к семейству параллельных плоскостей, проходящих через узлы прямой решетки, и что расстояние между двумя соседними плоскостями равно

$$\delta = \frac{1}{|g_k|}$$

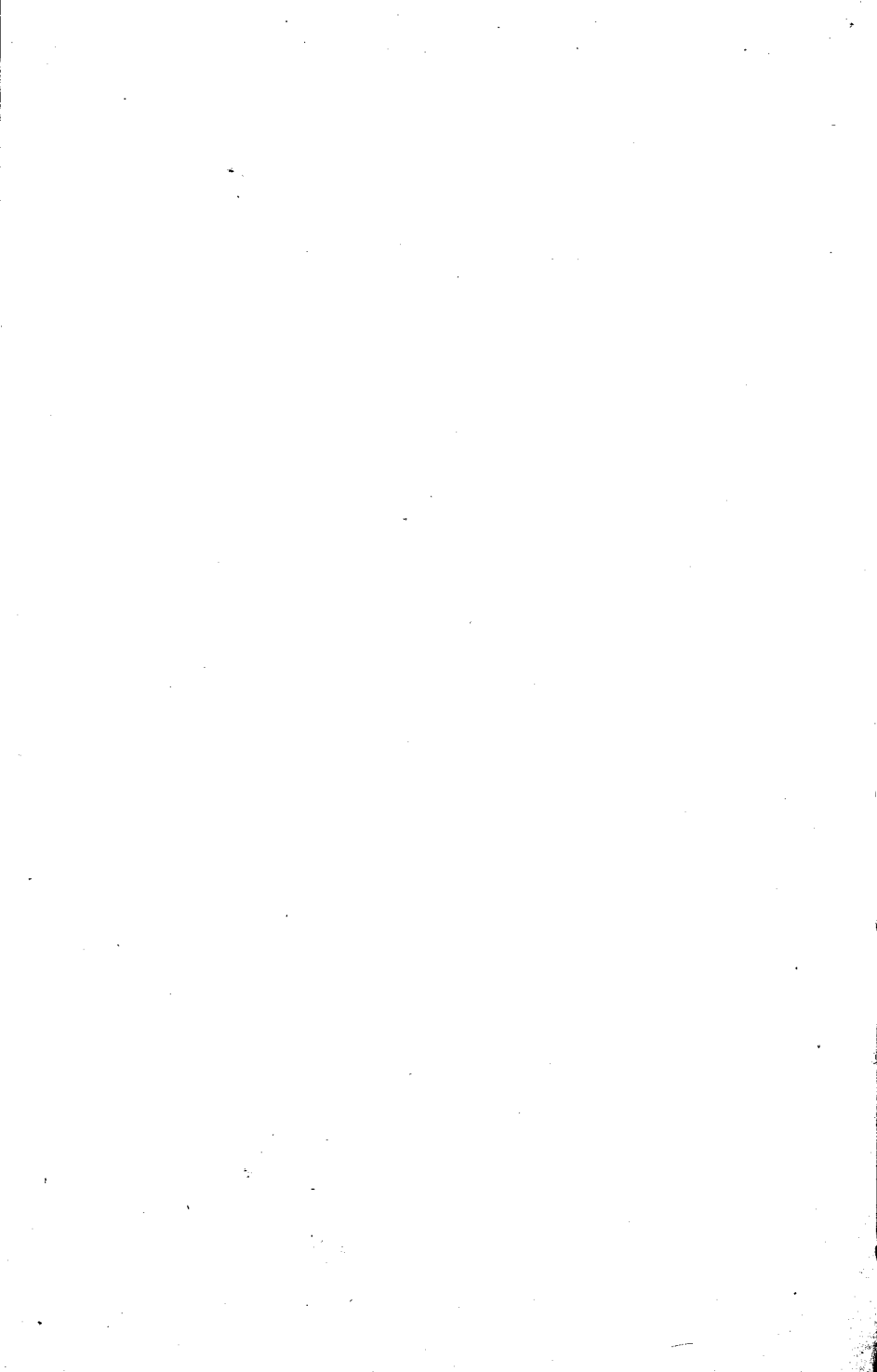
(см. замечание относительно формулы (П1.8)). Так как длина волны связана с волновым вектором соотношением

$$\lambda = 2\pi\nu^{-1},$$

то легко видеть, что равенство (П3.3) сводится к условию Брегга — Вульфа (П3.1).

ДОПОЛНЕНИЕ

ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА ФУНКЦИЙ ГРИНА
К ТЕОРИИ АНИЗОТРОПНЫХ
ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ
ФЕРРО- И АНТИФЕРРОМАГНЕТИКОВ



ВВЕДЕНИЕ

В настоящем Дополнении рассмотрены некоторые вопросы, связанные с дальнейшим развитием и применением в квантовой теории магнетизма метода двухвременных запаздывающих и опережающих температурных функций Грина (гл. VII основного текста).

Наиболее подробно освещены вопросы, связанные с развитием теории ферро- и антиферромагнетизма на основе анизотропной модели Гейзенберга со спином $1/2$, формулировка которой дана в гл. II основного текста. При этом учитывается лишь анизотропия обменного происхождения и наличие продольного внешнего магнитного поля (параллельного оси легкого намагничивания или лежащего в плоскости легкого намагничивания); случаи одноионной анизотропии и поперечного магнитного поля имеют определенную специфику, однако в принципе соответствующие обобщения могут быть получены в рамках аналогичного подхода.

Кристаллическая решетка считается всюду однородной и не содержащей примесей; предполагается выполнение периодических граничных условий, так что влияние поверхности кристалла не учитывается. Принимается также, что распределение спиновой плотности в основном состоянии однородно в пределах данного образца (однодоменное приближение); исключение составляет лишь случай антиферромагнетика (гл. IV), где спиновая плотность является осциллирующей.

В главах I—IV рассматриваются свойства спиновой подсистемы кристалла без учета ее взаимодействия с какими-либо другими подсистемами (решеткой, электронами проводимости и т. п.); в гл. V проведен учет эффектов магнон-фононного взаимодействия.

Как и в основном тексте, все численные расчеты проведены в приближении ближайших соседей (и, как

правило, простой кубической решетки). Ограничение значением спина $1/2$ не является принципиальным, однако изложение в этом случае наименее громоздко, а все трудности, присущие теории магнетизма, проявляются наиболее отчетливо. Основное внимание уделяется анализу роли динамического и кинематического взаимодействий при построении ренормированного спектра магнонов и уравнения для намагниченности. При этом получено обобщение и уточнение ряда результатов, сформулированных в гл. V и VIII основного текста.

Дополнение состоит из введения, пяти глав, примечаний и списка литературы; изложение в нем основано прежде всего на работах Ю. А. Церковникова [63] и Ю. Г. Рудого и Ю. А. Церковникова [71—73], (гл. I—III), В. И. Лымаря и Ю. Г. Рудого [201], (гл. IV), а также Н. М. Плакиды и Г. Конвента [248—252], (гл. V).

В главе I обсуждаются свойства симметрии обобщенного гейзенберговского гамильтониана по отношению к унитарным преобразованиям специального вида. Здесь же получены уравнения движения для операторов Паули и далее на основе теоремы Голдстоуна — Боголюбова установлены некоторые соотношения между свойствами спектра магнонов и наличием интегралов движения для ряда частных моделей. Введены также корреляционные функции и матричная функция Грина, для которой в частном случае модели «легкая ось» получено формально точное решение [63], выражающееся через высшие корреляционные функции.

В главе II рассмотрены различные варианты вычисления ренормированного спектра магнонов в рамках обобщенного приближения Хартри — Фока (без учета затухания), которое является систематическим способом получения всех известных теорий первого порядка, и дан краткий обзор ряда других возможных подходов. Кроме того, указан простой способ компенсации кинематического вклада для модели «легкая ось» в духе теории Ортенбургер [144] при частичном выходе за рамки теории первого порядка.

В § 1 главы III построена последовательная теория второго порядка, учитывающая сдвиг и затухание спек-

тра при низких температурах. На основе самосогласованного учета динамики и кинематики операторов Паули в § 2 гл. III получено обобщение теории Тябликова (гл. VIII), не содержащее кинематического члена в намагниченности при низких температурах и сохраняющее хорошие интерполяционные свойства во всем интервале температур.

В § 3 главы III на основе формально точного решения для одночастичной функции Грина в рамках приближения двухчастичной T -матрицы рассеяния (без учета связанных состояний, что допустимо в области малых импульсов) построено обобщение теории Дайсона [105] на анизотропный случай. При этом неунитарное преобразование Дайсона — Малеева от спиновых к бозе-операторам становится излишним. В § 4 гл. III рассматриваются некоторые аспекты теории Дайсона, связанные с внешней «неэрмитовостью» эффективного бозонного гамильтониана, а также различием в уравнениях движения для операторов рождения и уничтожения идеальных спиновых волн и несамосопряженностью интегрального уравнения для T -матрицы. Обсуждается также применение других квазибозонных представлений в теории магнетизма.

В главе IV обобщенное приближение Хартри — Фока, сформулированное в § 1 гл. II для двухкомпонентной матричной функции Грина, перенесено на случай четырехкомпонентной функции, описывающей поперечную восприимчивость двухподрешеточного анизотропного гейзенберговского антиферромагнетика. Рассмотрение ограничено случаем антиферромагнитной фазы; указан регулярный способ получения ряда известных теорий первого порядка и найдена температурная зависимость первого критического поля (фазовой границы) для модели «легкая ось» вблизи нуля температур и точки Нееля.

В главе V развита методика неприводимых функций Грина, позволяющая самосогласованным образом учесть эффекты спин-фононного взаимодействия в ангармоническом ферромагнитном кристалле.

В примечаниях проведены некоторые доказательства и поясняются технические детали громоздких расчетов; литература включает основные работы в области теории

магнетизма, в основном начиная с 1965 года. Принцип нумерации формул такой же, как и в основном тексте, то же относится и к основным обозначениям; ссылки на литературу к Дополнению даются цифрами в квадратных скобках. Что же касается ссылок на основной текст, то в сомнительных случаях это будет особо оговариваться.

ГЛАВА I

ГАМИЛЬТОНИАН, УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И ФУНКЦИИ ГРИНА

§ 1. Гамильтониан и свойства симметрии

Рассмотрим обобщенную модель Гейзенберга (см. §§ 6, 7), которая характеризуется диагональным видом тензора обменного взаимодействия и анизотропией по всем трем кристаллографическим осям координат,

$$\begin{aligned} I_{f-g}^{\alpha\beta} &= \delta_{\alpha\beta} I_{f-g}^{\alpha} \quad (\alpha, \beta = x, y, z), \\ I_{f-g}^z &\equiv I_{f-g}, \quad I_{f-g}^x = \xi I_{f-g}, \quad I_{f-g}^y = \eta I_{f-g}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где ξ, η — безразмерные параметры анизотропии ($|\xi|, |\eta| \leq 1$), знак обменного интеграла I_{f-g} определяет ферро- или антиферромагнитный характер магнитного упорядочения (соответственно, $I_{f-g} > 0$ или $I_{f-g} < 0$). Ниже рассматриваются свойства спиновой системы, находящейся в продольном постоянном внешнем магнитном поле $H = (0, 0, H)$; гамильтониан такой системы с учетом зеемановской энергии имеет вид ¹⁾

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(I, \xi, \eta) &= -\mu H \sum_i S_i^z - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{f, g} I_{f-g} \{ \xi S_f^x S_g^x + \eta S_f^y S_g^y + S_f^z S_g^z \}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

¹⁾ Симметричный вещественный тензор 2-го ранга $I_{f-g}^{\alpha\beta} = I_{f-g}^{\beta\alpha}$ всегда может быть приведен к главным осям, так что запись обменной части гамильтониана в виде (1.2) является достаточно общей; по поводу условия (1.2а) см. ниже.

причем без ограничения общности будем считать

$$-1 \leq \xi, \eta \leq 1; \quad (1.2a)$$

величина и знак обменного интеграла произвольны, $\mu > 0$ — магнитный момент атома в узле f (обычно $\mu = g\mu_B$, где $g \approx 2$ — фактор Ланде электрона, μ_B — магнетон Бора).

В дальнейшем для простоты будем считать, что обменное взаимодействие отлично от нуля только для узлов — ближайших соседей, число которых равно z (см. (15.18) и примечание 1). Будем считать далее, что кристаллическую решетку с полным числом узлов N можно разбить на две вставленные одна в другую эквивалентные «зеркальные» подрешетки F и G , узлы которых являются ближайшими соседями¹⁾, и пренебрежем обменом внутри подрешеток (т. е. между вторыми соседями) (см. § 16).

Тогда гамильтониан (1.2) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(I, \xi, \eta) = & -\mu H \left(\sum_{f \in F} S_f^z + \sum_{g \in G} S_g^z \right) - \\ & - \sum_{f \in F, g \in G} I_{f-g} \{ \xi S_f^x S_g^x + \eta S_f^y S_g^y + S_f^z S_g^z \}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Такая запись особенно удобна для описания антиферромагнитного обмена, когда разбиение на подрешетки физически обусловлено различной преимущественной ориентацией магнитного момента в каждой из них.

Ограничение случаем продольного поля в гамильтониане (1.2) или (1.3) с условием (1.2a) не является принципиальным; оно вызвано лишь соображениями простоты, а именно тем, что при любой величине H в случае ферромагнитного обмена магнитный момент в основном состоянии имеет тенденцию к ориентации вдоль «легкой оси» z (или антипараллельно ей в одной из подрешеток в случае антиферромагнитного обмена и достаточно малых значений H ; см. § 16). При этом динами-

¹⁾ К этому классу относятся, например, простая кубическая (ПК) и объемноцентрированная кубическая (ОЦК) решетки, но не относится гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка.

ческой переменной, характеризующей дальний магнитный порядок в спиновой системе ниже точки фазового перехода, всегда является оператор

$$S^z = \frac{1}{N} \sum_i S_i^z \left(\text{или, соответственно, } S_F^z = \frac{2}{N} \sum_{i \in F} S_i^z \right), \quad (1.4)$$

(причем, очевидно, $S^z = S_F^z + S_G^z$), а параметром упорядочения — его среднее значение при $H = 0$, $\sigma = \langle S^z \rangle$ (или $\sigma_F = \langle S_F^z \rangle$), равное удельной спонтанной намагниченности в расчете на один узел решетки (или подрешетки); см. примечание 2.

В соответствии с общепринятой терминологией (см., например, монографии [1—4]), будем называть наиболее общий случай — $1 \leq \xi, \eta < 1$ (рис. 1) моделью типа «легкая ось» z (ЛО); в симметричном случае $\xi = \eta$, кроме того, имеет место изотропия в базисной плоскости xy (в частном случае $\xi = \eta = 0$ реализуется модель Изинга (И)). Случай $\eta = 1$, $\xi \neq 1$ (или $\xi = 1$, $\eta \neq 1$) назовем моделью типа «легкая плоскость» yz или xz (ЛП) (соответственно, «трудной осью» является при этом x или y); в частности, при $\xi = 0$ (или $\eta = 0$) имеем поперечную модель (П). Наконец, при $\xi = \eta = 1$ реализуется изотропная модель Гейзенберга (Г). Очевидно, в последних двух случаях — легкой плоскости и изотропной модели — основное состояние системы является вырожденным по направлениям магнитного момента в базисной плоскости или во всем пространстве, так что параметр σ (или σ_F) следует определять только в смысле квазисредних (см. § 11), например, в пределе $H \rightarrow +0$.

Заметим далее, что основное состояние гамильтониана $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$ (при любом знаке I и произвольном H) является одновременно собственным состоянием оператора упорядочения S^z только в случае симметричной модели «легкая ось» ($-1 \leq \xi (= \eta) \leq 1$, так как лишь

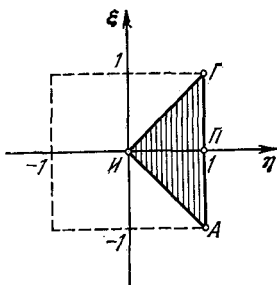


Рис. 1. Классификация частных моделей Гейзенберговского типа.

при этом условии эти операторы коммутируют¹⁾,

$$[\mathcal{H}(I, \xi, \xi), S^z] = 0, \quad (|\xi| \leq 1, H \neq 0); \quad (1.5)$$

в частности, при $\xi = \eta = 0$ (модель Изинга)

$$[\mathcal{H}(I, 0, 0), S_f^z] = 0 \text{ для любого } f (H \neq 0). \quad (1.5a)$$

Аналогично, для антисимметричной модели $\xi = -\eta$ при любом знаке I и произвольном H гамильтониан коммутирует с разностью операторов упорядочения для подрешеток F и G ,

$$[\mathcal{H}(I, \xi, -\xi), S_F^z - S_G^z] = 0 \quad (|\xi| \leq 1, H \neq 0). \quad (1.5b)$$

Заметим, однако, что сами операторы S_F^z (или S_G^z) коммутируют с $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$ только при $\xi = \eta = 0$.

Свойства симметрии гамильтониана. Выясним далее свойства симметрии гамильтониана $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$ из (1.2), (1.3) с условием (1.2a) по отношению к некоторым унитарным преобразованиям подобия (не меняющим, как известно, спектра его собственных значений, а тем самым и всех статистико-механических свойств модели)²⁾. Точнее, нас будут интересовать те преобразования, которые равносильны изменению одного или нескольких из параметров, входящих в $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$.

Заметим прежде всего, что унитарное преобразование

$$U_\alpha(\{\varphi_f\}) = \exp\left\{-i \sum_f \varphi_f S_f^\alpha\right\}, \quad (1.6)$$

$$(\alpha = x, y, z; 0 \leq \varphi_f \leq 2\pi, \quad f = 1, \dots, N),$$

где

$$(S_f^\alpha)^\dagger = S_f^\alpha, \quad U_\alpha^{-1}(\{\varphi_f\}) = U_\alpha^\dagger(\{\varphi_f\}), \quad U_\alpha(\{0\}) = 1, \quad (1.6a)$$

переводит каждый вектор S_f в вектор $S'_f = A_\alpha(\varphi_f) S_f$,

¹⁾ Ряд свойств низшего собственного значения $\mathcal{H}(I, \xi, \xi)$ при $I > 0$ в состоянии с фиксированным собственным значением S^z рассмотрен в работе Янга и Янга [28]; что касается случаев $\xi \neq \eta$ или $I < 0$, то здесь проблема основного состояния значительно сложнее; см., например, Андерсон [29], а также работу [30].

²⁾ Эрмитов оператор $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$, определенный в спиновом гильбертовом пространстве конечной размерности $(2S + 1)$, является ограниченным, так что его спектр целиком лежит на конечном отрезке вещественной оси; см., например, [32].

где $A_\alpha(\varphi_f)$ — ортогональная матрица локального поворота в узле f вокруг оси α на угол φ_f , например:

$$S_f' = A_x(\varphi_f) S_f, \quad A_x(\varphi_f) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_f & \sin \varphi_f \\ 0 & -\sin \varphi_f & \cos \varphi_f \end{pmatrix}, \quad (1.66)$$

$$A_x^{-1}(\varphi_f) = A_x(-\varphi_f), \quad \text{Det } A_x(\varphi_f) = 1;$$

аналогично выглядят матрицы $A_y(\varphi_f)$, $A_z(\varphi_f)$.

1. Применяя преобразование вида (1.6) с выбором $\varphi_f = \pi/2$ для всех f и полагая $\alpha = x, y, z$, нетрудно показать, что запись обменной части гамильтониана (1.2) при условии (1.1) с ограничением (1.2а) действительно является наиболее общей (с точностью до унитарной эквивалентности). Пусть, например, $|\eta| > 1$; полагая тогда $\alpha = x$, $\varphi_f = \pi/2$ в (1.6), имеем в силу (1.66) $S_f^y \rightarrow S_f^z$, $S_f^z \rightarrow -S_f^y$, так что

$$U_x\left(\frac{\pi}{2}\right) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) U_x^+\left(\frac{\pi}{2}\right) = \mathcal{H}\left(\eta I, \frac{\xi}{\eta}, \frac{1}{\eta}\right) \quad (H=0). \quad (1.7)$$

Аналогично, при $|\xi| > 1$ положим $\alpha = y$ и вновь $\varphi_f = \pi/2$; тогда, учитывая, что $S_f^z \rightarrow S_f^x$, $S_f^x \rightarrow -S_f^z$, получим

$$U_y\left(\frac{\pi}{2}\right) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) U_y^+\left(\frac{\pi}{2}\right) = \mathcal{H}\left(\xi I, \frac{1}{\xi}, \frac{\eta}{\xi}\right) \quad (H=0). \quad (1.8)$$

Легко видеть, что в обоих случаях преобразованный гамильтониан принадлежит к классу (1.1) при $H=0$ с условием (1.2); физический смысл преобразований (1.7), (1.8) состоит в том, чтобы в отсутствие внешнего поля направить ось квантования магнитного момента вдоль оси координат с максимальной (по модулю) компонентой обменного интеграла (см. примечание 2). Заметим, что при $\eta = 1$ (или $\xi = 1$) в силу (1.7) оператор $\mathcal{H}(I, \xi, 1)$ коммутирует с оператором $U_x(\pi/2)$, а следовательно и с соответствующим генератором поворота $S^x = (1/N) \sum_f S_f^x$; (в силу (1.8) то же имеет место для

$\mathcal{H}(I, 1, \eta)$, $U_y(\pi/2)$ и $S_y = (1/N) \sum_f S_f^y$ соответственно):

$$[\mathcal{H}(I, \xi, 1), S^x] = [\mathcal{H}(I, 1, \eta), S^y] = [\mathcal{H}(I, 1, 1) S^{x,y}] = 0, \quad (1.9)$$

откуда с учетом (1.5) при $\xi = 1$ имеем

$$[\mathcal{H}(I, 1, 1), S] = 0, \quad S = (S^x, S^y, S^z). \quad (1.9a)$$

Полагая $\alpha = z$ и $\varphi_f \equiv \pi/2$ в (1.6), имеем согласно (1.6б) $S_f^x \rightarrow S_f^y$, $S_f^y \rightarrow -S_f^x$, что соответствует калибровочному преобразованию операторов S_f^\pm (см. § 5 основного текста)

$$S_f^\pm \rightarrow \mp i S_f^\pm = e^{\mp i \frac{\pi}{2}} S_f^\pm, \quad S_f^\pm \equiv S_f^x \pm i S_f^y. \quad (1.10)$$

В этом случае можно считать поле отличным от нуля; тогда имеем

$$U_z(\pi/2) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) U_z^\dagger(\pi/2) = \mathcal{H}(I, \eta, \xi) \quad (H \neq 0). \quad (1.11)$$

Этот результат означает полную симметрию спектра относительно замены $\xi \rightleftharpoons \eta$ (в том числе и при наличии магнитного поля) при любом знаке I , что позволяет ограничиться в дальнейшем, например, областью значений $\xi \leq \eta$. В силу (1.11) очевидно, что при $\xi = \eta$ гамильтониан $\mathcal{H}(I, \xi, \xi)$ коммутирует с $U_z(\pi/2)$ и соответствующим генератором этого преобразования S^z , так что мы вновь приходим к (1.5).

2. Другая группа свойств симметрии гамильтониана (1.2) связана с возможностью его записи в виде (1.3) и предполагает выбор $\varphi_f = \pi$ для $f \in F$, $\varphi_g = 0$ для $g \in G$ (или наоборот) при всех $\alpha = x, y, z$ в (1.6); это соответствует операции вращения (1.6б), затрагивающей лишь векторы S_f в одной из подрешеток. Полагая, например, $\alpha = z$, $\varphi_f = \pi$, $\varphi_g = 0$, имеем

$$S_f^{x,y} \rightarrow -S_f^{x,y} \quad (f \in F), \quad \text{так что при } H \neq 0$$

$$U_z^F(\pi) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) (U_z^F(\pi))^\dagger = \mathcal{H}(I, -\xi, -\eta) \quad (H \neq 0); \quad (1.12)$$

в частности, при $\xi = \eta = 0$ гамильтониан $\mathcal{H}(I, 0, 0)$ коммутирует с S_z^F (в действительности имеет место еще более сильное свойство (1.5a)).

Аналогично, полагая $\alpha = x, y$, $\varphi_f = \pi$, $\varphi_g = 0$, но ограничиваясь случаем $H = 0$, легко найти, что

$$U_x^F(\pi) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) (U_x^F(\pi))^\dagger = \mathcal{H}(-I, -\xi, \eta) \quad (H = 0), \quad (1.13)$$

$$U_y^F(\pi) \mathcal{H}(I, \xi, \eta) (U_y^F(\pi))^\dagger = \mathcal{H}(-I, \xi, -\eta) \quad (H = 0), \quad (1.14)$$

или, опуская аргумент y оператора $U_{x,y}^F(\pi)$,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(-I, \xi, \eta) &= U_x^F \mathcal{H}(I, -\xi, \eta) (U_x^F)^\dagger = \\ &= U_y^F \mathcal{H}(I, \xi, -\eta) (U_y^F)^\dagger \quad (H=0). \quad (1.15)\end{aligned}$$

Из последнего соотношения непосредственно следует хорошо известный факт (см. § 15, 17, а также [1—4, 31] и гл. IV Дополнения) удвоения набора собственных значений (и, соответственно, энергий возбуждений) у двух-подрешеточного антиферромагнетика по сравнению с простым ферромагнетиком. Кроме того, в (1.15) фактически указан способ построения спектра оператора $\mathcal{H}(-I, \xi, \eta)$, если известен спектр оператора $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$ в нулевом внешнем поле¹⁾; учитывая (1.11), легко видеть, что оба набора совпадают (вырождаются) в симметричном случае $\xi = \eta$ (см. ниже гл. IV).

Важно отметить, что инвариантность спектра при унитарных преобразованиях специального вида $U_\alpha^F(\pi)$ следует понимать с точностью до возможного изменения порядка «нумерации» собственных значений гамильтониана \mathcal{H} (и энергий возбуждений), которая ведется обычно с помощью соответствующего квантового числа (например, квазиимпульса k в трансляционно-инвариантной решетке). Как будет видно из дальнейшего, энергии возбуждений $E(k)$ для семейства унитарно-эквивалентных гамильтонианов в (1.12) — (1.15) действительно являются периодическими функциями k , антифазными по отношению друг к другу (рис. 2). Точнее, унитарные преобразования $U_\alpha^F(\pi)$ соответствуют сдвигу зависимости $E(k)$ на граничный импульс первой зоны Бриллюэна, тогда как период $E(k)$ равен удвоенному значению граничного импульса (см. ниже гл. IV).

3. Учитывая свойства симметрии (1.7), (1.8), (1.11), а также (1.12), будем в дальнейшем рассматривать при любом знаке I лишь заштрихованную область на

¹⁾ Подчеркнем, что при $H \neq 0$ указанная унитарная эквивалентность не имеет места, точнее, она справедлива лишь при наличии искусственно введенного «подрешеточного» поля (staggered field) $H_f = -H(f \in F)$, $H_g = H(g \in G)$, $H > 0$; см. § 15. Вообще, при $I < 0$ зависимость спектра от поля существенно сложнее, чем при $I > 0$; она приводит, в частности, к наличию критических значений поля, при которых происходят фазовые переходы 1-го и 2-го рода.

диаграмме параметров (ξ, η) (рис. 1). Граничные точки I, Γ, Π, A , соответствуют (при $I > 0$) частным моделям: Изинга, Гейзенберга (изотропный случай), поперечной и антиферромагнитной (изотропный случай); соответственно, линии $I-\Gamma$, $I-A$, $\Gamma-\Pi-A$ описывают (при $I > 0$) однопараметрические семейства моделей типа «легкая ось» (ферро- и антиферромагнитного типа) и «легкая плоскость» (при $I < 0$ в названиях моделей

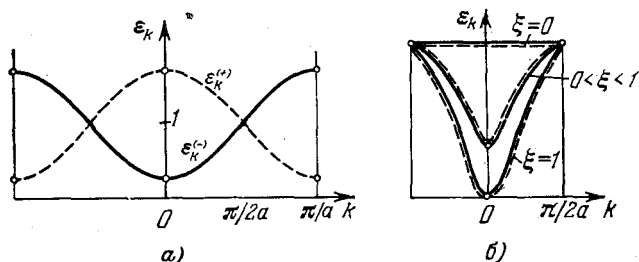


Рис. 2. Спектр спиновых волн ϵ_k антиферромагнетика типа Гейзенберга: а) общий случай ($0 < \xi < \eta < 1$); б) модель «легкая ось» ($\eta = \xi$) при различных значениях параметра анизотропии ξ .

происходит замена ферромагнитный \rightleftharpoons антиферромагнитный). В ряде случаев большой физический интерес представляют именно эти частные модели (см., например, [1—4]).

Для дальнейшего рассмотрения удобно использовать операторы спиновых отклонений $S_i^{\pm} = S_i^x \pm iS_i^y$ (их свойства и перестановочные соотношения см. в § 5 основного текста). Тогда гамильтониан (1.2) при $I > 0$ и любом H можно записать в виде

$$\mathcal{H}(I, \xi, \eta) = -\mu H \sum_i S_i^z - \frac{1}{2} \sum_{fg} I_{f-g} \left\{ \frac{1}{2} (\xi + \eta) S_f^- S_g^+ + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} (\xi - \eta) (S_f^+ S_g^+ + S_f^- S_g^-) + S_f^z S_g^z \right\}, \\ (|\xi|, |\eta| \leq 1, I_{f-g} \geq 0). \quad (1.16)$$

Согласно формулам (5.5), (5.6) основного текста операторы S_i^{\pm} обладают свойствами, аналогичными свойствам операторов вторичного квантования обычной

бозе- или ферми-статистики (см. § 3 осн. текста); в (1.16) очевидно наличие при всех ξ, η (кроме линии $ЛО$ при $\xi = \eta$) «аномальных» членов, недиагональных в S^z -представлении, что полностью согласуется со свойством (1.5) (заметим, что эти члены неинвариантны относительно калибровочного преобразования (1.10): одновременно требуется замена $\xi \rightleftharpoons \eta$ в соответствии с (1.11)). Наличие аномальных членов приводит, как будет показано ниже, к ряду специфических явлений, в том числе к квантовому сокращению спина (связанному с несохранением S^z) и понижению энергии основного состояния за счет нулевых колебаний поперечных компонент спина (см. §§ 13, 14 осн. текста, а также гл. II Дополнения).

Что касается случая $I < 0$, то переход к операторам спиновых отклонений в гамильтониане (1.3) следует производить с помощью общего преобразования Тябликова (§ 5, формулы (5.5)–(5.8) осн. текста). Оно описывает переход от системы координат кристалла xyz к собственному представлению, в котором направление оси квантования спина в каждой подрешетке выбирается согласно требованию $\langle S_F^\pm \rangle = \langle S_G^\pm \rangle = 0$ и соответствует обычно минимуму свободной энергии системы (или энергии основного состояния при очень низких температурах), (см. примечание 2). В частности, для рассматриваемого нами случая продольного магнитного поля H это означает, что гамильтониан (1.3) следует предварительно подвергнуть комбинированному унитарному преобразованию типа (1.6),

$$U_\alpha(H) = U_\alpha^F[\varphi^F(H)] U_\alpha^G[\varphi^G(H)], \quad [U_\alpha^F, U_\beta^G] = 0, \quad (1.17)$$

где $\alpha = x, y$, соответственно, при $\eta \geq \xi$, $\varphi_{f,g} \equiv \varphi^{F,G}$ для всех $f \in F, g \in G$. Согласно исследованиям основного состояния (см. § 16, а также [31] и [34]), фазовая диаграмма на плоскости (H, Θ) определяется в этом случае условиями

- (I) $\varphi^F(H) = 0, \quad \varphi^G(H) = \pi \quad (0 \leq H \leq H_c(\Theta)),$
- (II) $\frac{\pi}{2} \geq \varphi^F(H) = -\varphi^G(H) \geq 0 \quad (H_c(\Theta) \leq H \leq H_n(\Theta)), \quad (1.18)$
- (III) $\varphi^F(H) = \varphi^G(H) = 0 \quad (H_n(\Theta) \leq H).$

Здесь $H_c(\Theta)$, $H_n(\Theta)$ — зависящие от температуры значения первого и второго критических полей, соответствующие переходу 1-го рода из антиферромагнитной (I) во флоп-фазу (II) с «опрокинутыми» подрешетками и далее переходу 2-го рода («схлопыванию») в парамагнитную фазу (III), причем в изотропном случае $\xi = \eta = 1$ критическое поле $H_c(\Theta) \equiv 0$ (см., например, экспериментальные работы [35]). Фазовые переходы $(I) \rightarrow (II) \rightarrow (III)$, отсутствующие при $I > 0$, физически обусловлены конкуренцией ориентирующего влияния магнитного поля с антиферромагнитным обменом и анизотропией. Более подробное рассмотрение антиферромагнитной фазы (I) будет проведено в гл. IV.

Переход к операторам Паули в импульсном представлении. Учитывая трансляционную инвариантность гамильтониана (1.16) удобно перейти в нем к фурье-образам операторов S_f^\pm в импульсном представлении

$$S_f^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k S_k^\pm e^{\mp i(f, k)}, \quad S_f^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k S_k^z e^{-i(f, k)},$$

$$I_f = \sum_k I(k) e^{i(f, k)}; \quad (1.19)$$

тогда (не указывая далее явно аргументов у \mathcal{H}) имеем

$$\mathcal{H} = -\mu H \sqrt{N} S_0^z - \frac{1}{2} \sum_k I(k) \left\{ \frac{1}{2} (\xi + \eta) S_k^- S_k^+ + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{4} (\xi - \eta) (S_k^+ S_{-k}^+ + S_k^- S_{-k}^-) + S_k^z S_{-k}^z \right\}$$

$$(-\eta \leq \xi \leq \eta, \quad 0 \leq \eta \leq 1). \quad (1.20)$$

Здесь

$$I(k) = I(0) \gamma_k, \quad I(0) = Iz, \quad I_0 = \sum_k I(k) = 0,$$

$$\gamma_k = \frac{1}{z} \sum_{\delta \neq 0} e^{i(k, \delta)}, \quad |\gamma_k| \leq 1, \quad \sum_k \gamma_k = 0, \quad (1.21)$$

причем

$$\gamma_{k \pm k_0} = -\gamma_k, \quad \gamma_{k \pm 2k_0} = \gamma_k, \quad \gamma_0 = -\gamma_{\pm k_0} = 1, \quad (1.21a)$$

где $k_0 = (\pi/a) (1, 1, 1)$ — граничный импульс первой зоны Бриллюэна; в решетках с центром инверсии имеем, кроме того, (см. § 15)

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \gamma_k^* = \gamma_{-k} = \frac{1}{z} \sum_{\delta \neq 0} \cos(k, \delta), \\ \gamma_k &\simeq 1 - \frac{1}{2z} \sum_{\delta} (k, \delta)^2 \quad (k \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (1.216)$$

В дальнейшем мы ограничимся частным случаем спина $S = 1/2$; это ограничение не является принципиальным для применяемых методов и может быть без особого труда снято (см., например, § 35). Однако, как показывают теория и эксперимент (см., например, [7, 8]) большинство интересных физических результатов слабо зависит от S ; кроме того, особенности спиновой кинематики наиболее ярко проявляются именно при $S = 1/2$ и полностью исчезают в квазиклассическом (квазибозевском) пределе $S \rightarrow \infty$ (см., например, хорошо известное разложение Огучи [36], а также работы [37—39]). При $S = 1/2$ удобно воспользоваться представлением спиновых операторов через операторы Паули (см. формулы (5.13) — (5.15) основного текста),

$$S_k^+ \equiv b_k, \quad S_k^- \equiv b_k^+, \quad S_k^z = \frac{\sqrt{N}}{2} \delta_{k0} - \rho_k; \quad (1.22)$$

здесь оператор ρ_k является аналогом коллективного оператора плотности, играющего важную роль в теории ферми- и бозе-систем (см., например, [40—43]): он представляет собой фурье-образ оператора числа спиновых отклонений n_f в узле f ,

$$\rho_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f n_f e^{-i(k, f)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q b_q^+ b_{q+k}, \quad \rho_k^+ = \rho_{-k}; \quad (1.23)$$

в частности, оператор ρ_0 вполне аналогичен оператору полного числа частиц в обычной статистике (см. § 8).

Операторы Паули (1.22) удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям в импульсном

представлении (ср. с (5.13) осн. текста в узельном представлении):

$$\begin{aligned} [b_k, b_{k'}^+] &= \frac{2S_{k-k'}^z}{\sqrt{N}} = \delta_{kk'} - \frac{2\varepsilon}{\sqrt{N}} \rho_{k-k'}, & [b_k, b_{k'}] &= 0, \\ [b_k, \rho_{k'}] &= \frac{b_{k+k'}^+}{\sqrt{N}}, & [b_k^+, \rho_{k'}] &= -\frac{b_{k-k'}^+}{\sqrt{N}}, & [\rho_k, \rho_{k'}] &= 0, \end{aligned} \quad (1.24)$$

где формальный (не малый) параметр $\varepsilon (=1)$ введен в правую часть (1.24) для явного выделения «кинематических» эффектов, связанных с отклонением операторов b_k и b_k^+ от чисто бозевских. Кроме того, для этих операторов должно выполняться дополнительное «квазифермиевское» условие (5.13), связанное с ограниченной размерностью спинового пространства и требующее (при $S = 1/2$) обращения в нуль свертки

$$b_f^2 = (b_f^+)^2 = 0 \text{ или } \sum_p b_{-p} b_{p+q} = 0 \quad (f, q - \text{любые}); \quad (1.25)$$

соответственно, оператор n_f обладает проекционным свойством

$$n_f^2 = n_f, \quad (S_f^z)^2 = \frac{1}{4}, \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \rho_{-p} \rho_{p+q} = \rho_q \quad (f, q - \text{любые}). \quad (1.25a)$$

Окончательно гамильтониан Гейзенберга ферромагнитной спиновой системы (1.20) в операторах Паули имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = E^0 + \sum_k \left\{ A(k) b_k^+ b_k + \frac{1}{2} C(k) (b_k^+ b_{-k}^+ + b_{-k} b_k) \right\} - \\ - \frac{1}{2} \sum_k I(k) \rho_k \rho_{-k}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

где

$$\begin{aligned} E^0 &= -\frac{1}{2} N \mu H - \frac{1}{8} N I(0), \quad -\eta \leq \xi \leq \eta, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \\ A(k) &= A^*(k) = A(-k) = \mu H + \frac{I(0)}{2} \left(1 - \frac{\xi + \eta}{2} \gamma_k \right), \\ C(k) &= C^*(k) = C(-k) = -\frac{I(0)}{4} (\xi - \eta) \gamma_k \end{aligned} \quad (1.26a)$$

(* обозначает комплексное сопряжение).

Заметим еще раз (см. (1.16)), что лишь при $\xi = \eta$ коэффициент $C(k)$ при аномальных членах обращается в нуль, так что E^0 является энергией основного состояния, а $A(k)$ — энергиями идеального газа блоховских магнов (ср. с (15.5) — (15.7)). В общем случае $\xi \neq \eta$ гамильтониан вида (1.26) описывает, например, магнитные свойства некоторых редкоземельных металлов [44, 45]; он применяется также в квазиспиновой формулировке проблемы сверхтекучести неидеального решеточного бозе-газа [46, 47] и модели БКШ в теории сверхпроводимости [48] (см. также работы [49, 50] и монографии [14, 51]).

§ 2. Уравнения движения и интегралы движения

Одночастичная динамика спиновой системы определяется уравнением движения для оператора b_k , которое на основе гамильтониана (1.26) можно записать в виде ($\hbar = 1$):

$$i\dot{b}_k = [b_k, \mathcal{H}] = A(k)b_k + C(k)b_{-k}^+ + J_k. \quad (1.27)$$

Здесь оператор взаимодействия J_k имеет более высокий порядок по операторам b_k, b_k^+ ; его удобно представить в виде суммы эрмитовой и антиэрмитовой частей

$$J_k = \frac{1}{2}(J_k + J_{-k}^+) + \frac{1}{2}(J_k - J_{-k}^+), \quad (1.28)$$

где

$$J_k \pm J_{-k}^+ = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q V_{kq}(x_{\pm}) \rho_q(b_{k-q} \pm b_{-k+q}^+), \quad (1.28a)$$

$$(x_+ = \xi, x_- = \eta),$$

а несимметричный потенциал $V_{kq}(x)$ имеет вид

$$V_{kq}(x) = I(0)(\gamma_q - \varepsilon x \gamma_{q-k}), \quad V_{kq}(x) \neq V_{qk}(x). \quad (1.28б)$$

Величину ε в (1.28б) мы будем везде в дальнейшем (если специально не оговорено, что $\varepsilon = 0$, например, в бозевском приближении) полагать равной единице; ее присутствие указывает лишь на роль кинематического взаимодействия при построении уравнения движения

(1.27)¹⁾. Именно за счет того, что $\varepsilon \neq 0$, потенциал $V_{kq}(x)$ зависит не только от импульса передачи q (как, например, фурье-образ парного потенциала взаимодействия в случае неидеального бозе- или ферми-газа), но и от внешнего импульса k , являясь при этом несимметричным по k и q .

В частном случае модели Изинга $\xi = \eta = 0$ кинематическое взаимодействие вообще не дает вклада в (1.27) — (1.28б) и $V_{kq}(0) = I(0)\gamma_q$ при всех k . При $\xi = \eta \neq 0$ имеем $V_{kq}(\xi) = V_{kq}(\eta)$, и (1.27) принимает вид

$$i\dot{b}_k = A(k)b_k + J_k, \quad J_k = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q V_{kq}(\xi) \rho_q b_{k-q} \quad (\eta = \xi). \quad (1.29)$$

Заметим, наконец, что операторы $J_k \pm J_{-k}^+$ обращаются в нуль при $k=0$ если, соответственно, $\xi=1$ или $\eta=1$, так как $V_{0q}(1)=0$ при любом q .

Аналогично, для коллективного оператора ρ_k имеем

$$i\dot{\rho}_k = [\rho_k, \mathcal{H}] = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_q W_{kq}^{(+)} b_{-q}^+ b_{-q+k} + \\ + \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_q W_{kq}^{(-)} (b_{-q}^+ b_{q-k}^+ - b_q b_{-q+k}), \quad (1.30)$$

где

$$W_{kq}^{(\pm)} = \pm \left(\frac{\xi \pm \eta}{2} \right) V_{kq}(\pm 1) = \\ = \pm I(0) \left(\frac{\xi \pm \eta}{2} \right) (\gamma_q \mp \gamma_{q-k}); \quad (1.30a)$$

очевидно, в отличие от (1.28б), кинематическое взаимодействие не дает вклада в потенциалы $W_{kq}^{(\pm)}$.

В частном случае модели Изинга $\xi = \eta = 0$

$$i\dot{\rho}_k = 0 \quad (k - \text{любое}), \quad W_{kq}^{(\pm)} \equiv 0, \quad (1.31)$$

так что все операторы ρ_k являются интегралами движения (ср. с (1.5а)); в общем случае ЛО ферромагнитного типа $\xi = \eta$ (включая изотропный случай) это свойство

¹⁾ Регулярная теория возмущений по параметру ε развивалась в работе С. В. Тябликова [52] (см. § 37).

сохраняет силу лишь для оператора ρ_0

$$i\dot{\rho}_0 = 0, \quad W_{0q}^{(+)} = 0, \quad W_{kq}^{(-)} \equiv 0 \quad (\xi = \eta \neq 0), \quad (1.31a)$$

что, очевидно, соответствует (1.5) с учетом (1.22). Наконец, в случае ЛО антиферромагнитного типа ($\xi = -\eta$) имеем

$$i\dot{\rho}_k = 0, \quad W_{kq}^{(+)} \equiv 0, \quad W_{k_0q}^{(-)} = 0 \quad (\xi = -\eta \neq 0), \quad (1.31b)$$

что с учетом (1.15) непосредственно соответствует (1.56).

С другой стороны, из уравнений (1.27)–(1.28б) с учетом замечания после формулы (1.29) следует, что производная

$$i \frac{d}{dt} (b_k \pm b_{-k}^\pm) = (A(k) \mp C(k)) (b_k \mp b_{-k}^\pm) + (J_k \mp J_{-k}^\pm) \quad (1.32)$$

обращается в нуль при $k = 0$ и $H = 0$, если $\eta = 1$ (или $\xi = 1$); здесь учтено также, что

$$A(k) \pm C(k) = \mu H + \frac{V_{k0}(x_\pm)}{2}, \quad V_{0q}(1) = 0 \quad (x_+ = \xi, x_- = \eta). \quad (1.32a)$$

Иначе говоря, одна из поперечных компонент оператора полного спина $S_{k=0}^x = (1/2)(b_0 + b_0^+)$ или $S_{k=0}^y = (1/2i)(b_0 - b_0^+)$ является в отсутствие внешнего продольного поля H интегралом движения для модели типа «легкая плоскость»:

$$\dot{S}_0^{x,y} = \pm \mu H S_0^{y,x} \quad \text{при } \eta = 1 \text{ или } \xi = 1, \quad (1.32b)$$

что при $H = 0$ согласуется с формулой (1.9); отметим, что $S_0^{x,y}$ остается интегралом движения и при наличии ненулевого поперечного поля вдоль оси x или y . В частном случае изотропной модели $\xi = \eta = 1$ сохраняются обе компоненты S_0^x и S_0^y , а с учетом (1.31a) и все три, так что мы вновь приходим к соотношению (1.9a)¹⁾.

Согласно Голдстоуну [53] и Н. Н. Боголюбову [54] (см. также § 11 основного текста, работы [49, 50, 55] и обзоры [56, 57]), элементарные возбуждения, соответ-

¹⁾ Таким образом, линиями интегралов движения являются лишь границы области, заштрихованной на диаграмме (ξ, η) (см. рис. 1).

ствующие интегралам движения, не содержат щели в энергетическом спектре, и это свойство должно сохраняться во всех приближенных вычислениях спектра. Ниже нас будут интересовать квазичастицы — поперечные, или одночастичные спиновые волны (магноны), описываемые линейными комбинациями операторов b_k и b_k^+ . Одночастичный спектр E_k действительно является бесщелевым в случаях ЛП и Г, причем при малых k в случае ЛП имеем $E_k \sim k$, а в случае Г из-за более высокой степени вырождения $E_k \sim k^2$. В обоих случаях E_k является энергией «голдстоуновской моды», наличие которой обусловлено инвариантностью гамильтониана системы относительно преобразований, принадлежащих одно- или двухпараметрической группе непрерывных вращений вокруг осей x или y , и соответствующим этой инвариантности вырождением основного состояния¹⁾.

§ 3. Корреляционные функции

Термодинамика спиновой системы и перенормировка спектра E_k определяется различными корреляционными функциями (см. §§ 8, 26 осн. текста), в том числе одночастичными средними нормального (\bar{n}_k) и аномального (\bar{m}_k) типов. Принимая во внимание свойства коэффициентов (1.26а), входящих в гамильтониан (1.26), а также трансляционную инвариантность системы и следующий из нее закон сохранения квазиимпульса, имеем

$$\begin{aligned} \langle b_k^+ b_{k'} \rangle &= \langle b_k^+ b_k \rangle = \delta_{k,0} \bar{n}_k, & \bar{n}_k &= \bar{n}_k^* = \bar{n}_{-k} = \langle b_k^+ b_k \rangle, \\ \langle b_k^+ b_{k'}^+ \rangle &= \langle b_k^+ b_k \rangle = \delta_{k,-k} \bar{m}_k, & \bar{m}_k &= \bar{m}_k^* = \bar{m}_{-k} = \langle b_k^+ b_{-k}^+ \rangle. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Здесь и далее усреднение производится по каноническому ансамблю Гиббса со статистическим оператором $\rho = e^{-\mathcal{H}/\theta}$ и гамильтонианом \mathcal{H} (1.26) (см. (8.4)),

$$\langle A \rangle = Q^{-1} \text{Sp } A \rho, \quad Q = e^{-F/\theta} = \text{Sp } \rho, \quad (1.34)$$

¹⁾ Мы не затрагиваем здесь вопроса о «продольных», или коллективных спиновых волнах, описываемых оператором ρ_k ; ясно лишь, что в случае ЛО (и, в частности, изотропной модели) этот спектр также не будет иметь щели (даже при $H \neq 0$) в соответствии с формулами (1.5) или (1.31а), отражающими инвариантность гамильтониана системы относительно однопараметрической группы вращений вокруг легкой оси z (см. в этой связи работы [33]).

F — свободная энергия системы, $\Theta = k_B T$ — температура в энергетических единицах, A — произвольный оператор.

Как отмечалось ранее, большой интерес представляет корреляционная функция $\sigma = \langle S^z \rangle$ (параметр дальнего порядка, или удельная намагниченность).

Усредняя оператор S_k^z в представлении (1.22) с учетом (1.23) и (1.33), легко выразить σ через нормальные одночастичные средние,

$$\sigma = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\langle S_0^z \rangle}{\sqrt{N}} = \frac{1}{2} - \frac{\langle \rho_0 \rangle}{\sqrt{N}}, \quad \langle \rho_k \rangle = \delta_{k0} \langle \rho_0 \rangle = \delta_{k0} \sqrt{N} \bar{n}, \quad (1.35)$$

так что

$$\sigma = \frac{1}{2} - \bar{n}, \quad \bar{n} = \frac{1}{N} \sum_p \bar{n}_p = \langle n_f \rangle = \langle b_f^+ b_f \rangle, \quad (1.35a)$$

где \bar{n} — среднее число спиновых отклонений в одном узле. Выражения для других корреляционных функций в одном узле (\bar{m} и \bar{z}) можно получить, усредняя дополнительные условия (1.25a), (1.25б):

$$\bar{m} = \langle b_f^+ b_f^+ \rangle = 0, \quad \bar{z} = \langle n_f n_f \rangle = \langle n_f \rangle = \bar{n}. \quad (1.36)$$

Аналогично, представляют интерес и корреляционные функции v , μ , ζ поперечных и продольных компонент спинов, находящихся в различных узлах — ближайших соседях. Эти функции (усредненные по первой координационной сфере) характеризуют ближний порядок и даются соотношениями

$$\begin{aligned} v &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle b_f^+ b_{f+\delta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \bar{n}_k, \\ \mu &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle b_f^+ b_{f+\delta}^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \bar{m}_k, \\ \bar{\zeta} &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle S_f^z S_{f+\delta}^z \rangle = \frac{1}{4} - \bar{n} + \zeta, \\ \zeta &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle n_f n_{f+\delta} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \chi_k, \end{aligned} \quad (1.37)$$

где

$$\langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = \delta_{k, -k} \chi_k, \quad \chi_k = \chi_k^* = \chi_{-k} = \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle, \quad \frac{1}{N} \sum_k \chi_k = \bar{n} \quad (1.37a)$$

(последнее соотношение получено усреднением (1.256)); в частности, v , ξ и μ могут наряду с σ входить в перенормировку одночастичного спектра E_k .

Функция χ_k тесно связана с продольной восприимчивостью χ^{zz} , характеризующей флуктуации параметра дальнего порядка ¹⁾ $\langle S_0^z \rangle$,

$$\chi^{zz} = \frac{\partial \sigma}{\partial H} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{1}{\Theta} \{ \langle (S_0^z)^2 \rangle - \langle S_0^z \rangle^2 \} = \tilde{\chi}_0 / \Theta, \quad (1.38)$$

$$\tilde{\chi}_k = \langle \delta \rho_k \delta \rho_{-k} \rangle = \chi_k - \delta_{k0} \langle \rho_0 \rangle^2, \quad \delta \rho_k = \rho_k - \langle \rho_k \rangle.$$

Функция χ_k (или $\tilde{\chi}_k$) является независимой от \bar{n}_k и \bar{m}_k корреляционной функцией более высокого порядка; некоторые вопросы, связанные с ее вычислением, обсуждаются в работах [126, 100, 101, 33, 11, 194—200]. Заметим, однако, что спектральные представления для двухвременных равновесных корреляционных функций, установленные в § 26а, позволяют получить простое соотношение, связывающее коллективную функцию ξ с одночастичными функциями v и μ (в частном случае $\xi = \eta = 1$ это соотношение получено в § 34; см. также работы [58]; общая методика получения правил сумм описана, например, в § 16.4 монографии [59]).

Именно, умножая уравнение движения (1.27) слева на b_k^+ , затем усредняя и суммируя по всем k , получаем

$$\sum_k \langle b_k^+ i \dot{b}_k \rangle = \sum_k A(k) \bar{n}_k + \sum_k C(k) \bar{m}_k + \sum_k \langle b_k^+ J_k \rangle, \quad (1.39)$$

¹⁾ В случае, если оператор упорядочения не коммутирует с гамильтонианом $[S_0^z, \mathcal{H}] \neq 0$, для χ^{zz} имеем более сложное выражение (см., например, [65]):

$$\chi^{zz} = \int_0^{1/\Theta} d\lambda \tilde{\chi}_0(\lambda), \quad \tilde{\chi}_k(\lambda) = \langle \delta \rho_k(\lambda) \delta \rho_{-k}(\lambda) \rangle,$$

$$\delta \rho_k(\lambda) = e^{\lambda \mathcal{H}} \delta \rho_k e^{-\lambda \mathcal{H}}.$$

где для любых значений ξ, η

$$\sum_k \langle b_k^+ J_k \rangle = -NI(0)\xi; \quad (1.39a)$$

при получении последнего соотношения использовалось лишь дополнительное условие (1.35a) и свойство

$\sum_q \gamma_q = 0$. С другой стороны, согласно § 26 имеем

$$\langle b_k^+ b_k(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \Phi_k^{11}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad n(\omega) = (e^{\omega/\theta} - 1)^{-1}, \quad (1.40)$$

где спектральная плотность $\Phi_k^{11}(\omega)$ отличается от спектральной интенсивности (§ 26) весовым множителем $n(\omega)$. В частности, при $t=0$ нулевой момент спектральной плотности $\Phi_k^{11}(\omega)$ дает

$$\bar{n}_k = \langle b_k^+ b_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \Phi_k^{11}(\omega), \quad (1.40a)$$

а с учетом свойства периодичности $\langle b_k^+ b_k(t) \rangle = \langle b_k(t) b_k^+(i/\theta) \rangle$ и формулы (1.42) при $\varepsilon = 1$ имеем при $t=0$ следующее правило сумм (см. формулы (26.5) — (26.8)):

$$\langle [b_k, b_k^+] \rangle = 2\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Phi_k^{11}(\omega). \quad (1.40b)$$

Дифференцируя выражение (1.40) по времени, полагая затем $t=0$ и суммируя по k , получаем для левой части (1.39) правило сумм (см. § 34)

$$\sum_k \langle b_k^+ i\dot{b}_k \rangle = \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \omega \Phi_k^{11}(\omega), \quad (1.40b)$$

в которое входит лишь первый момент спектральной плотности $\Phi_k^{11}(\omega)$ (последняя предполагается известной). Вычислив далее с помощью (1.36), (1.36a) величину ξ ,

нетрудно найти и среднюю энергию системы в терминах $\Phi_k^{11}(\omega)$ и $\Phi_k^{12}(\omega)$,

$$\langle \mathcal{H} \rangle = E^0 + \sum_k A(k) \bar{n}_k + \sum_k C(k) \bar{m}_k - \frac{1}{2} NI(0) \zeta; \quad (1.41)$$

ниже в гл. II будет дана более удобная форма записи соотношений (1.39) и (1.41).

Заметим в заключение, что усреднение основного перестановочного соотношения (1.24) показывает, что в среднем операторы Паули всегда являются квазибозевскими (см., однако, квазифермиевское дополнительное условие (1.25a)):

$$\langle [b_k, b_{k'}^+] \rangle = \delta_{kk'} (1 - 2\epsilon \bar{n}) = \begin{cases} \delta_{kk'} & (\epsilon = 0), \\ 2\sigma \delta_{kk'} & (\epsilon = 1), \end{cases} \quad (1.42)$$

причем правильный учет кинематики приводит к появлению множителя 2σ . Именно это обстоятельство делает удобным использование в дальнейшем коммутаторных функций Грина.

§ 4. Двухвременные функции Грина

Ренормированный спектр магнонов и корреляционные функции могут быть наиболее просто и эффективно найдены с использованием аппарата двухвременных температурных функций Грина (см. гл. VII основного текста, особенно § 26, а также [59]). Наличие в гамильтониане (1.26) аномальных членов (и, соответственно, вид уравнения движения (1.27)) указывает на целесообразность введения матричной функции Грина, аналогичной применявшейся ранее в теории сверхпроводимости [60] и сверхтекучести [61] (см. также работы [62]).

Ниже в изложении этого раздела мы будем следовать работе Ю. А. Церковникова [63].

Введем двухкомпонентные операторы

$$B_k = \begin{pmatrix} b_k \\ b_{-k}^+ \end{pmatrix}, B_{-k}^+ = (b_{-k}^+, b_k), J_k = \begin{pmatrix} J_k \\ -J_{-k}^+ \end{pmatrix}, J_{-k}^+ = (J_{-k}^+, -J_k), \quad (1.43)$$

для которых в силу (1.27) имеет место уравнение движения

$$i \frac{dB_k}{dt} = \omega_k B_k + J_k, \quad \omega_k = \begin{pmatrix} A(k) & C(k) \\ -C(k) & -A(k) \end{pmatrix}; \quad (1.44)$$

в этом уравнении явно разделяется «свободная эволюция» оператора B_k , представленная матрицей ω_k , и эффекты взаимодействия, представленные оператором J_k .

Введем далее двухвременную (для определенности, запаздывающую коммутаторную) функцию Грина, построенную на «одночастичных» операторах B_k , B_k^+ поперечных компонент спина

$$\begin{aligned} G_k(t) &\equiv \langle\langle B_k(t), B_k^+ \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle[B_k(t), B_k^+] \rangle = \\ &= \begin{pmatrix} \langle\langle b_k(t), b_k^+ \rangle\rangle & \langle\langle b_k(t), b_{-k} \rangle\rangle \\ \langle\langle b_{-k}^+(t), b_k^+ \rangle\rangle & \langle\langle b_{-k}^+(t), b_{-k} \rangle\rangle \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (1.45)$$

здесь $B_k(t) = e^{i\mathcal{H}t} B_k e^{-i\mathcal{H}t}$ — оператор в гейзенберговском представлении, усреднение понимается в смысле (1.34) (по сравнению с (25.7) нами изменена нормировка функции Грина на $-i$; см. Д. Н. Зубарев [59]).

Согласно теории линейной реакции (см. § 31) временной фурье-образ $G_k(E)$ ($\text{Im } E > 0$) функции Грина, вычисленной по равновесному ансамблю

$$G_k(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_k(t) e^{iEt}, \quad G_k(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_k(E) e^{-iEt}, \quad (1.46)$$

определяет поперечные компоненты тензора комплексной динамической восприимчивости спиновой системы (так называемый *изолированный адмиттанс*; см. [59, § 15, 16])

$$\chi^{\alpha\beta}(k, \omega) = \langle\langle S_k^\alpha, S_{-k}^\beta \rangle\rangle_{E=\omega+i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow +0, \quad (\alpha, \beta = x, y). \quad (1.47)$$

Следует заметить, что статический длинноволновой предел $\chi^{\alpha\beta}(k, \omega)$ при $\omega \rightarrow 0$, $k \rightarrow 0$, вообще говоря, не совпадает с *изотермическим* адмиттансом, или термодинамической восприимчивостью системы

$$\chi^{\alpha\beta} = \partial M^\alpha / \partial H^\beta = -\partial^2 F / \partial H^\alpha \partial H^\beta.$$

Детальное обсуждение этого вопроса см., например, в работах [64, 65] и особенно [66]; он тесно связан с проблемой эргодичности, принципом ослабления корреляций на больших временах, а также доопределением коммутаторной функции Грина при нулевой энергии $E = 0$ [67—70].

Что касается спектра магнонов E_k (вообще говоря, комплексного), то он определяется особенностями выражения (1.47) (например, типа простых полюсов) и располагается в нижней полуплоскости E вблизи вещественной оси или непосредственно на ней (подробнее см. §§ 26, 38); при этом мнимая часть полюса описывает затухание элементарных возбуждений.

Далее, зная $G_k(E)$, можно найти и соответствующие двухвременные корреляционные функции согласно спектральной теореме (26.15), которая для матричного случая принимает вид

$$\begin{aligned} \langle B_k^+ B_k(t) \rangle &= \begin{pmatrix} \langle b_k^+ b_k(t) \rangle & \langle b_{-k} b_k(t) \rangle \\ \langle b_k^+ b_{-k}^+(t) \rangle & \langle b_{-k} b_{-k}^+(t) \rangle \end{pmatrix} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \Phi_k(\omega) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (1.48)$$

где матрица $\Phi_k(\omega)$ дается выражением

$$\begin{aligned} \Phi_k(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_k(\omega + i\varepsilon) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\varepsilon|t|} e^{i\omega t} \langle [B_k(t), B_k^+] \rangle. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Таким образом, знание функции Грина обеспечивает информацию как о динамических, так и статистических свойствах системы.

Для нахождения функции Грина $G_k(t)$ запишем для нее уравнение движения на основе (1.44),

$$i \frac{dG_k(t)}{dt} = \delta(t) \langle [B_k, B_k^+] \rangle + \omega_k G_k(t) + \langle \langle J_k(t), B_k^+ \rangle \rangle, \quad (1.50)$$

которое «зацепляет» функцию G_k с высшей матричной функцией Грина $\langle \langle J_k(t), B_k^+ \rangle \rangle$ и т. д. (см. § 25).

Согласно [63] уравнение (1.50) удобно представить в эквивалентном виде

$$i\dot{\mathbf{G}}_k(t) = \delta(t) \langle [\mathbf{B}_k, \mathbf{B}_k^+] \rangle + \{\omega_k + \mathbf{R}_k(t)\} \mathbf{G}_k(t), \quad (1.51)$$

где

$$\mathbf{R}_k(t - \tau) = \langle [\mathbf{J}_k(t), \mathbf{B}_k^+(\tau)] \rangle \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+(\tau)] \rangle^{-1}, \quad (1.52)$$

$$\langle [\mathbf{B}_k, \mathbf{B}_k^+] \rangle = \langle [b_k, b_k^+] \rangle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \langle [b_k, b_k^+] \rangle = 1 - 2\varepsilon\bar{n}. \quad (1.53)$$

Преобразуем высшую корреляционную функцию $\mathbf{R}_k(t - \tau)$ к виду, в котором выделена не зависящая от времени добавка хартри-фоковского типа. Для этого мы используем еще раз уравнение движения (сопряженное к (1.44)) и продифференцируем $\mathbf{R}_k(t - \tau)$ по «второму» времени τ ; имеем тогда

$$\mathbf{R}_k(t) = \mathbf{R}_k(0) - \int_0^t d\tau \frac{d}{d\tau} \mathbf{R}_k(t - \tau), \quad (1.52a)$$

после чего уравнение (1.52) принимает вид

$$i\dot{\mathbf{G}}_k(t) = \delta(t) \langle [\mathbf{B}_k, \mathbf{B}_k^+] \rangle + \{\Omega_k - i\Gamma_k(t)\} \mathbf{G}_k(t), \quad (1.54)$$

где

$$\Omega_k = \omega_k + \mathbf{R}_k(0) = \omega_k + \langle [\mathbf{J}_k, \mathbf{B}_k^+] \rangle \langle [\mathbf{B}_k, \mathbf{B}_k^+] \rangle^{-1}, \quad (1.55)$$

$$-i\Gamma_k(t) = -i \int_0^t d\tau \langle [\mathbf{J}_k(t), \mathbf{J}_k^+(\tau)] \rangle_c \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+(\tau)] \rangle^{-1}, \quad (1.56)$$

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{J}_k(t), \mathbf{J}_k^+(\tau)] \rangle_c &= \langle [\mathbf{J}_k(t), \mathbf{J}_k^+(\tau)] \rangle - \\ &- \langle [\mathbf{J}_k(t), \mathbf{B}_k^+(\tau)] \rangle \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+(\tau)] \rangle^{-1} \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{J}_k^+(\tau)] \rangle. \end{aligned} \quad (1.56a)$$

При получении (1.54) использовалась следующая формула дифференцирования обратной матрицы:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+] \rangle^{-1} &= \\ &= - \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+] \rangle^{-1} \frac{d}{dt} \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+] \rangle \langle [\mathbf{B}_k(t), \mathbf{B}_k^+] \rangle^{-1}; \end{aligned}$$

обратим внимание на то, что в интегральный член $-i\Gamma_k(t)$ не вошла матрица свободной эволюции ω_k .

Величину Ω_k , имеющую первый порядок по взаимодействию и не зависящую от времени t , естественно называть динамической матрицей в обобщенном приближении Хартри — Фока (ОПХФ); она определяет ренормировку свободной динамической матрицы ω_k . Величина $-i\Gamma_k(t)$ имеет второй порядок по взаимодействию J_k и явно зависит от времени t ; только в пределе $t \rightarrow \infty$ матрица $-i\Gamma_k(t)$ определяет комплексную добавку к матрице Ω_k и дает сдвиг ренормированной энергии и затухание элементарных возбуждений. Этот предельный случай эквивалентен обычному полюсному приближению для массового оператора (см. §§ 29, 30) (индекс «с» в (1.56) указывает в этом случае на связанный характер соответствующих собственно-энергетических диаграмм), однако в ряде случаев учет зависимости при всех временах t является существенным (см., например, ниже, гл. III, §§ 2, 3, а также примечание 3).

Матричное уравнение (1.51), или (1.54), представляет собой систему двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка с зависящими от времени коэффициентами; такая система эквивалентна одному линейному дифференциальному уравнению второго порядка. В том частном случае, когда матрицы ω_k , Ω_k и $-i\Gamma_k(t)$ принимают диагональный вид (в нашей модели это возможно лишь в случае ЛО при $\xi = \eta$), матричное уравнение (1.51) (или (1.54)) вырождается в одно линейное дифференциальное уравнение первого порядка с переменным коэффициентом

$$i\dot{G}_k(t) = \delta(t) \langle [b_k, b_k^+] \rangle + \{A(k) + R_k(t)\} G_k(t), \quad (1.57)$$

где

$$R_k(t) = \langle [J_k(t), b_k^+] \rangle \langle [b_k(t), b_k^+] \rangle^{-1}. \quad (1.57a)$$

Для этого уравнения можно записать формально точное решение, удобное при проведении различных аппроксимаций (см. [63, 71] и особенно [72])

$$G_k(t) = -i\theta(t) \langle [b_k, b_k^+] \rangle \exp[-iE_k(t)t]. \quad (1.58)$$

Здесь

$$E_k(t) = A(k) + \frac{1}{i} \int_0^t d\tau R_k(t - \tau), \quad (1.59)$$

или, после интегрирования по частям,

$$E_k(t) = \Omega_k - \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \tau \frac{d}{d\tau} R_k(t - \tau), \quad (1.59a)$$

где

$$\Omega_k = A(k) + R_k(0) = A(k) + \langle [J_k, b_k^+] \rangle \langle [b_k, b_k^+] \rangle^{-1}, \quad (1.59б)$$

$$\begin{aligned} & -i \frac{d}{d\tau} R_k(t - \tau) = \\ & = \frac{\langle [J_k(t), J_k^+(\tau)] \rangle}{\langle [b_k(t), b_k^+(\tau)] \rangle} - \frac{\langle [J_k(t), b_k^+(\tau)] \rangle \langle [b_k(t), J_k^+(\tau)] \rangle}{\langle [b_k(t), b_k^+(\tau)] \rangle^2}. \end{aligned} \quad (1.59в)$$

Спектральная плотность в случае «легкая ось» может быть найдена с помощью формально точного решения для функции Грина (1.58) по следующей формуле (ср. с (1.49)):

$$\begin{aligned} \Phi_k(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_k(\omega + i\varepsilon) = \\ &= \frac{\sigma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\varepsilon|t|} e^{i(\omega - E_k(t))t}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Заметим, что и здесь $E_k(t)$ имеет смысл комплексной энергии магнона лишь в пределе $t \rightarrow \infty$; ниже в гл. III будет показано, что именно учет зависимости $E_k(t)$ при всех t дает существенный вклад в термодинамические величины, позволяющий учесть кинематические свойства операторов Паули.

Укажем в заключение, что все сказанное в этом разделе (кроме, разумеется соотношений (1.57) — (1.60), относящихся к формально точному решению) переносится без изменений и на случай многокомпонентных операторов B_k ($n > 2$) вида (1.43), если для них имеет место уравнение движения вида (1.44); в частности, в гл. IV будет рассмотрен случай антиферромагнетика, для которого $n = 4$.

ГЛАВА II

ОБОБЩЕННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ — ФОКА (ОПХФ) ИЛИ ТЕОРИИ ПЕРВОГО ПОРЯДКА ДЛЯ ФЕРРОМАГНЕТИКА

§ 1. Общая формулировка

Сложность построения последовательной квантовой теории магнетизма на основе одночастичной функции Грина G_k из (1.45) состоит в том, что оператор взаимодействия J_k в уравнении движения (1.44) (а следовательно, и высшая корреляционная функция $R_k(t - \tau)$ в (1.51)) ни в каком смысле не являются малыми по сравнению с оператором $\omega_k B_k$ (соответственно, с матрицей ω_k), исключая, может быть, лишь область температур, близких к нулю. В частности, для описания фазового перехода и термодинамики вблизи точки Кюри Θ_c методы стандартной теории возмущений по малости взаимодействия (см. §§ 29, 30, 37) теряют применимость (точнее, обладают очень плохой сходимостью). В этой области температур необходим самосогласованный учет эффектов динамического и кинематического взаимодействия (о терминологии см., например, § 14), позволяющий получить также интерполяционное описание и в более широком интервале температур и полей. Такой учет может быть достигнут, например, с помощью расщепления Тябликова [83] (§ 32) для второй функции Грина $\langle\langle \rho_q b_{k-q}, b_k^+ \rangle\rangle \simeq \delta_{q0} \langle \rho_0 \rangle \langle\langle b_k, b_k^+ \rangle\rangle$. В дальнейшем (см., например, работы [84—98] и обзоры [99—104]) предпринимался ряд попыток уточнить это расщепление, не рассматривая функций Грина более высокого порядка, однако физические критерии интерполяционного обрыва

цепочки уравнений оставались при этом не вполне ясными (см. примечание 4).

В указанных работах (где рассматривался, как правило, изотропный случай $\xi = \eta = 1$) были построены так называемые теории первого порядка, которые дают температурно ренормированный спектр магнонов E_k (без учета затухания) и уравнение для намагниченности σ , претендующее на описание всей области температур (включая Θ_c). Ниже будет показано, что все эти теории (и соответствующие обобщения на случай произвольных ξ, η с ограничением (1.2a)) эквивалентны обобщенному приближению Хартри—Фока (ОПХФ) для функции Грина $G_k(t) = \langle\langle B_k(t), B_k^+ \rangle\rangle$. Это приближение можно получить, полностью отбрасывая зависящий от времени t интегральный член $-i\Gamma_k(t)$ в уравнении движения (1.54) (или соответствующий интегральный член в выражении (1.59a) для $E_k(t)$ в формально точном решении для случая ЛО). При этом получаем

$$i\dot{G}_k(t) = \delta(t) \langle [B_k, B_k^+] \rangle + \Omega_k G_k(t) \quad (\text{ОПХФ}), \quad (2.1)$$

и различные теории первого порядка соответствуют, как будет показано ниже (см. работы [71, 73]), различным способам учета спиновой динамики и кинематики при вычислении двойного коммутатора Ω_k из (1.55) (см. примечание 5),

$$\Omega_k = \omega_k + R_k(0) = \langle [B_k, \mathcal{H}], B_k^+ \rangle \langle [B_k, B_k^+] \rangle^{-1}. \quad (2.2)$$

Используя свойства $\langle A^+ \rangle = \langle A \rangle^*$, $[A, B]^+ = -[A^+, B^+]$ (где A, B — произвольные операторы) и учитывая вещественность средних значений, нетрудно убедиться в том, что матрица $R_k(0)$, а следовательно, и матрица Ω_k имеют лишь два независимых элемента,

$$\begin{aligned} \Omega_k^{11} &= (\Omega_k^{11})^* = -\Omega_k^{22} = A(k) + R_k^{11}(0), \\ \Omega_k^{12} &= (\Omega_k^{12})^* = -\Omega_k^{21} = C(k) + R_k^{12}(0); \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$R_k^{11}(0) = \frac{\langle [J_k, b_k^+] \rangle}{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}, \quad R_k^{12}(0) = \frac{\langle [J_k^+, b_k^+] \rangle}{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}; \quad (2.3a)$$

в случае «легкая ось» недиагональный элемент $\Omega_k^{12} \equiv 0$, так как $C(k) = 0$ и $R_k^{12}(0) = 0$.

Это приближение эквивалентно линеаризации точного оператора J_k из (1.43):

$$J_k \rightarrow R_k(0) B_k, \quad R_k(0) = \langle [J_k, B_k^+] \rangle \langle [B_k, B_k^+] \rangle^{-1}, \quad (2.4)$$

так что уравнение движения (1.44) для B_k принимает вид

$$i\dot{B}_k = \Omega_k B_k, \quad B_k(t) = B_k e^{-i\Omega_k t}. \quad (2.4a)$$

Нетрудно видеть, что линеаризация (2.4) аннулирует интегральный член (1.56) (отброшенный при построении ОПХФ), так что это приближение является в известном смысле самосогласованным. Поскольку, однако, взаимодействие J_k не мало, в ряде случаев отбрасывание интегрального члена по сравнению с Ω_k не оправдано¹⁾; наличие этого члена позволяет в принципе оценить точность ОПХФ.

Система (2.1) двух линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами легко интегрируется, и ее решение имеет вид

$$\begin{aligned} G_k(t) &= -i\theta(t) \exp(-i\Omega_k t) \langle [B_k, B_k^+] \rangle = \\ &= -i\theta(t) U_k \exp(-iE_k t) U_k^{-1} \langle [B_k, B_k^+] \rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь U_k — матрица, составленная из столбцов — собственных векторов Ω_k , $E_k = U_k^{-1} \Omega_k U_k$ — диагональная матрица, компоненты которой $\pm E_k$ являются корнями секулярного уравнения (характеристического для матрицы Ω_k)

$$\text{Det}(\Omega_k - E \cdot 1) = 0, \quad (2.6)$$

где 1 — единичная матрица. В частности, для функций $G_k^{11}(t)$ и $G_k^{21}(t)$ имеем

$$\langle \langle b_k(t), b_k^+ \rangle \rangle = -i\theta(t) \langle [b_k, b_k^+] \rangle (u_k^2 e^{-iE_k t} - v_k^2 e^{iE_k t}), \quad (2.7)$$

$$\langle \langle b_k^+(t), b_k^+ \rangle \rangle = -i\theta(t) \langle [b_k, b_k^+] \rangle u_k v_k (e^{-iE_k t} - e^{iE_k t}), \quad (2.8)$$

¹⁾ Их вклады могут оказаться одного порядка величины, как это имеет место, например, в случае неидеального бозе-газа [118] (см. также ниже § 7 настоящей главы).

где введены обозначения

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Omega_k^{11}}{E_k} \right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\Omega_k^{11}}{E_k} \right), \quad u_k v_k = -\frac{\Omega_k^{12}}{2E_k}, \quad (2.9)$$

причем величины u_k и v_k , очевидно, удовлетворяют условиям¹⁾

$$u_k^2 - v_k^2 = 1, \quad u_k^2 + v_k^2 = \frac{\Omega_k^{11}}{E_k},$$

$$(u_k + v_k)^2 = (u_k - v_k)^{-2} = \frac{\Omega_k^{11} - \Omega_k^{12}}{E_k}. \quad (2.9a)$$

Остальные элементы матрицы $G_k(t)$ легко могут быть получены, если учесть, что¹⁾

$$\langle [b_{-k}^+(t), b_k] \rangle = -\langle [b_k(-t), b_{-k}^+] \rangle,$$

$$\langle [b_k(t), b_{-k}] \rangle = \langle [b_{-k}^+(t), b_k^+] \rangle.$$

Корни $\pm E_k$ дисперсионного уравнения (2.6) в ОПХФ определяют вещественные полюсы фурье-образа $G_k(E)$, а следовательно, и ренормированный спектр поперечных магнонов (без затухания). Учитывая свойство (2.3), имеем

$$E_k = V(\Omega_k^{11})^2 - (\Omega_k^{12})^2 = V(\Omega_k^{11} - \Omega_k^{12})(\Omega_k^{11} + \Omega_k^{12}), \quad (2.10)$$

где согласно (2.3)

$$\Omega_k^{11} \pm \Omega_k^{12} = (A(k) \pm C(k)) + \langle [J_k \pm J_{-k}^+, b_k^+] \rangle \langle [b_k, b_{-k}^+] \rangle^{-1}. \quad (2.10a)$$

Отсюда с учетом выражений (1.28a), (1.32) сразу следует отсутствие в ОПХФ щели в спектре E_k при $H = 0$, $k = 0$ и $\xi = 1$ (при $\eta = 1$), как и должно быть

¹⁾ В частном случае $R_k(0) = 0$, $\Omega_k^{11} = A(k)$, $\Omega_k^{12} = C(k)$ эти величины в точности совпадают с параметрами $u-v$ -преобразования Н. Н. Боголюбова [119] (см. также § 13), причем условие (2.9a) обеспечивает каноничность преобразования в смысле средних значений (подробнее см. § 1 гл. III).

в соответствии с соображениями симметрии (см. замечание в конце раздела 1.2). В случае «легкая ось» $\eta = \xi$,

$$\Omega_k^{12} \equiv 0, \text{ так что } E_k = \Omega_k^{11} = A(k) + \langle [J_k, b_k^+] \rangle \langle [b_k, b_k^+] \rangle^{-1}$$

и $u_k \equiv 1, v_k \equiv 0$, соответственно.

Далее, используя выражения (2.7), (2.8), находим согласно (1.49) компоненты матрицы спектральной плотности; они оказываются имеющими вид двух симметричных дельтаобразных пиков на вещественной оси,

$$\Phi_k^{11}(\omega) = \langle [b_k, b_k^+] \rangle \{u_k^2 \delta(\omega - E_k) - v_k^2 \delta(\omega + E_k)\}, \quad (2.11)$$

$$\Phi_k^{12}(\omega) = \langle [b_k, b_k^+] \rangle u_k v_k \{\delta(\omega - E_k) - \delta(\omega + E_k)\}. \quad (2.12)$$

С помощью спектральной теоремы (1.48) получаем для нормальной и аномальной корреляционных функций соответственно:

$$\begin{aligned} \bar{n}_k &= \langle [b_k, b_k^+] \rangle \{(u_k^2 + v_k^2)n(E_k) + v_k^2\} = \\ &= \frac{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}{2} \left(\frac{\Omega_k^{11}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta} - 1 \right), \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \bar{m}_k &= \langle [b_k, b_k^+] \rangle u_k v_k (2n(E_k) + 1) = \\ &= - \frac{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}{2} \frac{\Omega_k^{12}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Здесь учтено, что $n(-\omega) = -(1 + n(\omega))$, $n(\omega) = (e^{\omega/\Theta} - 1)^{-1}$.

Заметим далее, что явный вид уравнения (1.35) для намагниченности σ в ОПХФ зависит, как видно из (2.14), от степени учета кинематических свойств операторов Паули при вычислении среднего коммутатора $\langle [b_k, b_k^+] \rangle$ (см. (1.42)¹⁾). Именно, ограничиваясь чисто бозевским приближением $\varepsilon = 0$, $\langle [b_k, b_k^+] \rangle = 1$ (что может иметь смысл лишь вблизи $\Theta = 0$), получаем обобщенное уравнение Ф. Блоха (см. (15.9), (15.10)):

$$\sigma = \frac{1}{2} - P - \psi, \quad P = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Omega_k^{11}}{E_k} n(E_k), \quad (2.15)$$

¹⁾ Разумеется, величины Ω_k^{11} , Ω_k^{12} и E_k должны при этом вычисляться в тех же предположениях.

где величина

$$\psi = \frac{1}{N} \sum_k v_k^2 = \frac{1}{2N} \sum_k \frac{\Omega_k^{11} - E_k}{E_k}, \quad \psi \geq 0, \quad (2.15a)$$

описывает квантовое сокращение спина, т. е. отклонение намагниченности от насыщения в основном состоянии при $\Theta = 0$, аналогичное явлению размытия конденсата в неидеальном бозе-газе [119].

Используя точное значение коммутатора $\langle [b_k, b_k^+] \rangle = 2\sigma$ при $\varepsilon = 1$, получаем обобщенное уравнение Тябликова (см. (33.19), (33.20))

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + 2P + 2\psi}, \quad (2.16)$$

или

$$\frac{1}{2\sigma} = Q, \quad Q = 1 + 2(P + \psi) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Omega_k^{11}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta}. \quad (2.16a)$$

Уравнение (2.16) удобнее для изучения σ в области малых Θ , а (2.16a) — высоких Θ (включая $\Theta \geq \Theta_c$). Заметим, что вид уравнений для σ остается тем же и в более высоких приближениях, чем ОПХФ, однако величина P дается тогда выражениями более сложными, чем (2.15) (см., например, ниже § 7 гл. II, а также гл. III). Величина P (или Q) является функционалом от спектра E_k , причем для описания фазового перехода необходимо, чтобы выполнялось физическое требование антисимметрии σ по отношению к внешнему полю H ,

$$\sigma(-H) = -\sigma(H). \quad (2.17)$$

Аналогично, для корреляционных функций ν и μ из (1.37) имеем соответственно (учитывая, что $\sum_k \gamma_k = 0$)

$$\nu = \frac{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}{2N} \sum_k \frac{\gamma_k \Omega_k^{11}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta}, \quad (2.18)$$

$$\mu = -\frac{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}{2N} \sum_k \frac{\gamma_k \Omega_k^{12}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta}; \quad (2.19)$$

из (2.14) видно также, что кинематическое условие (1.36) для \tilde{m} в ОПХФ не выполняется.

Вычисляя правую часть (1.406) с использованием (2.11), получаем

$$\sum_k \langle b_k^+ i b_k \rangle = \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k n(E_k) - \\ - \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k v_k^2; \quad (2.20)$$

с другой стороны, согласно (2.13), (2.14),

$$\sum_k (A(k) \bar{n}_k + C(k) \bar{m}_k) = \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k n(E_k) - \\ - \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k v_k^2 - \sum_k (R_k^{11}(0) \bar{n}_k + R_k^{12}(0) \bar{m}_k), \quad (2.21)$$

откуда с учетом (1.39), (1.39a) имеем для корреляционной функции ζ из (1.37) в ОПХФ

$$\zeta = - \frac{1}{NI(0)} \sum_k (R_k^{11}(0) \bar{n}_k + R_k^{12}(0) \bar{m}_k) \quad (2.22)$$

(матричные элементы $R_k^{11}(0)$ и $R_k^{12}(0)$ определены равенством (2.3a)).

С помощью (2.21) и (2.22) общее выражение для средней энергии (1.41) может быть записано в ОПХФ в более удобном виде:

$$\langle \mathcal{H} \rangle = E^0 - \Delta E^0 + \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k n(E_k) + \frac{1}{2} NI(0) \zeta, \quad (2.23)$$

где величина

$$\Delta E^0 = \langle [b_k, b_k^+] \rangle \sum_k E_k v_k^2 = \\ = \frac{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}{2} \sum_k (\Omega_k^{11} - E_k) \geq 0 \quad (2.23a)$$

описывает понижение энергии основного состояния по сравнению с E^0 (ср. с формулами (13.7), (13.8)). Заметим, что величина ΔE^0 тесно связана с величиной ψ . Именно, энергия E^0 отвечает состоянию с полностью упорядоченными магнитными моментами, достигающими значения насыщения, равного $1/2$. Однако такое состояние при $\xi \neq \eta$ не является собственным состоянием гамильтониана (в этом случае S_0^z не коммутирует с \mathcal{H}

и существует $\psi \neq 0$); соответственно, энергия основного состояния отличается от E^0 . Заметим, что в случае «легкая ось» ($\xi = \eta$) «аномальные» величины ψ и ΔE^0 одновременно обращаются в нуль.

Рассмотрим далее, следуя [71, 73], некоторые из возможных вариантов вычисления матричных элементов Ω_k^{11} и Ω_k^{12} в ОПХФ, различающиеся характером учета динамического взаимодействия в уравнениях движения (1.27) (или (1.44)) и кинематического взаимодействия в перестановочных соотношениях (1.24).

§ 2. Спин-волновое (бозевское) приближение

Простейшее возможное приближение в рамках ОПХФ состоит в полном пренебрежении эффектами динамического и кинематического взаимодействия магнов. Именно, динамика системы определяется тем, что

$$J_k \rightarrow J_k^B = 0, \quad \mathbf{R}_k(0) = 0, \quad \mathbf{\Omega}_k = \mathbf{\omega}_k, \quad (2.24)$$

а кинематика является чисто бозевской.¹⁾ (что соответствует $\varepsilon = 0$ в (1.24) и (1.42))

$$[b_k, b_{k'}^+] \rightarrow [b_k, b_{k'}^+]^B = \delta_{ik'}, \quad [b_k, \rho_{k'}]^B = b_{k+k'}/\sqrt{N}. \quad (2.25)$$

Приближения (2.24) и (2.25), по существу, сводятся к замене оператора ρ_k в уравнении движения (1.27), (1.28) и точном коммутаторе (1.24) с-числом — его средним значением в основном состоянии при $\Theta = 0$,

$$\rho_k \rightarrow \rho_k^B \equiv \langle 0 | \rho_k | 0 \rangle = \sqrt{N} \delta_{k0} \psi \simeq 0, \quad (2.26)$$

так что

$$[b_k, b_{k'}^+]^B = \langle 0 | [b_k, b_{k'}^+] | 0 \rangle \simeq \delta_{ik'}. \quad (2.26a)$$

Таким образом, становится очевидно, что спин-волновое приближение носит ярко выраженный низкотемпературный характер.

¹⁾ Заметим, что точный коммутатор $[b_k, \rho_{k'}]$ равен $b_{k+k'}/\sqrt{N}$ — $-(2/N) \sum_q \rho_{k-q} b_{q+k'}$ и совпадает со своим бозевским аналогом лишь в силу дополнительного условия (1.25) $\sum_q \rho_{k-q} b_{q+k'} \equiv 0$.

Спектр магнонов. Спектр магнонов (2.10) в этом приближении имеет вид

$$E_k^B = \sqrt{A^2(k) - C^2(k)} = \\ = \left[\left(g\mu_B H + \frac{1}{2} V_{k0}(\xi) \right) \left(g\mu_B H + \frac{1}{2} V_{k0}(\eta) \right) \right]^{1/2}; \quad (2.27)$$

учитывая, что $V_{00}(x) = (I(0)/2)(1 - x)$, находим отсюда выражение для частоты однородного ферромагнитного резонанса (спин-волновой моды с $k = 0$) (см. примечание 6)

$$E_0^B(h) = \hbar\omega_0 = \frac{I(0)}{2} [\varepsilon_0^2 + (2 - \xi - \eta)h + h^2]^{1/2}, \quad (2.28)$$

где введены обозначения для безразмерного спектра магнонов ε_h и приведенной энергии внешнего поля h ,

$$E_k^B = (I(0)/2) \varepsilon_k, \quad g\mu_B H = (I(0)/2) h. \quad (2.28a)$$

Величина

$$\varepsilon_0 = \sqrt{(1 - \xi)(1 - \eta)} \quad (0 \leq \eta \leq 1, -\eta \leq \xi \leq \eta) \quad (2.29)$$

определяет энергию активации, или щель в спектре магнонов при $k = 0$, $H = 0$, и обращается в нуль только в том случае, если хотя бы один из параметров η или ξ равен единице (т. е. только вдоль линии $\Gamma - \Pi - A$ на рис. 1); максимального значения, равного единице, ε_0 достигает для модели Изинга ($\xi = \eta = 0$).

Очевидно, что $E_0^B(h)$ является монотонно возрастающей функцией поля, причем в зависимости от значений параметров ξ , η возможен различный характер поведения при малых полях $h \rightarrow 0$.

В общем случае ($\varepsilon_0 \neq 0$)

$$\varepsilon_0(h) \simeq \varepsilon_0 + \frac{2 - \xi - \eta}{2\varepsilon_0} h \quad (h \rightarrow 0, \varepsilon_0 \equiv \varepsilon_0(0) \neq 0), \quad (2.30)$$

а для бесщелевых случаев ЛП и Г с $\varepsilon_0 = 0$ имеем соответственно

$$\varepsilon_0(h) \simeq \sqrt{1 - \xi} \sqrt{h} \quad (h \rightarrow 0, \eta = 1, \xi \neq 1), \quad (2.30a)$$

$$\varepsilon_0(h) = h \quad \text{для всех } h \quad (\eta = \xi = 1), \quad (2.30b)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля ($h=0$) удобно представить спектр (2.27) в виде (см. также Т. Огучи [120]):

$$\begin{aligned} e_k &= \sqrt{(1 - \xi \gamma_k)(1 - \eta \gamma_k)} = \\ &= [e_0^2 + (\xi + \eta - 2\xi\eta)(1 - \gamma_k) + \xi\eta(1 - \gamma_k)^2]^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Это выражение, очевидно, имеет смысл при всех k и любых ξ, η , удовлетворяющих условию (1.2а), причем в силу свойств (1.21а) при любых ξ, η имеем

$$\begin{aligned} e_0 &= \sqrt{(1 - \xi)(1 - \eta)}, \quad e_{k_0/2} = 1, \\ e_{k_0} &= \sqrt{(1 + \xi)(1 + \eta)}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

При ξ или $\eta > 1$ спектр e_k обнаруживает неустойчивость вблизи $k=0$, при ξ или $\eta < -1$ — вблизи границы

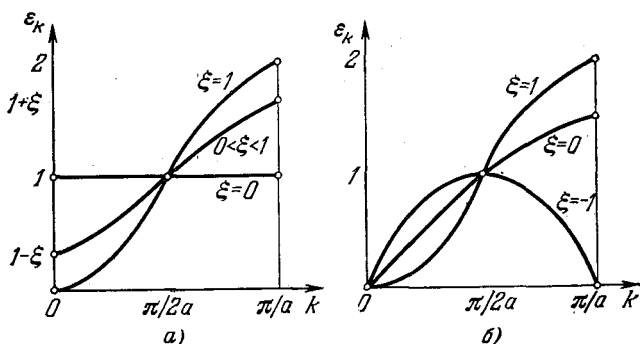


Рис. 3. Спектр спиновых волн e_k ферромагнетика Гейзенберга: а) модель «легкая ось» ($\eta = \epsilon$); б) модель «легкая плоскость» ($\eta = 1$) при различных значениях параметра анизотропии ξ .

зоны Бриллюэна $k = k_0$, что свидетельствует о необходимости иного выбора оси квантования магнитного момента (см. формулы (1.7) и (1.8)). Заметим, что сдвигу спектра (1.31) на граничный импульс k_0 , при котором γ_k меняет знак, соответствует одновременная замена знаков обоих параметров $(\xi, \eta) \rightarrow (-\xi, -\eta)$ (см. формулу (1.12)); инвариантным относительно такого сдвига будет лишь спектр семейства моделей антиферромагнитного типа $I - A$ с $\xi = -\eta$.

Рассмотрим выражение (2.31) в некоторых частных случаях (рис. 3). Вдоль линии $I - \Gamma$ (модель ЛО)

имеем (см. рис. 3а)

$$\varepsilon_k = 1 - \xi \gamma_k, \quad \varepsilon_0 = 1 - \xi \quad (\xi = \eta). \quad (2.33)$$

В предельном случае модели Изинга (*И*) спектр вообще теряет зависимость от k и содержит лишь максимально возможную щель

$$\varepsilon_k \equiv \varepsilon_0 = 1 \quad (\xi = \eta = 0); \quad (2.33a)$$

в другом предельном случае — изотропной модели Гейзенберга (*Г*) — спектр, впервые найденный Ф. Блохом [121], является «мягким» (бесщелевым)

$$\varepsilon_k = 1 - \gamma_k, \quad \varepsilon_0 = 0 \quad (\xi = \eta = 1). \quad (2.33b)$$

Вдоль линии *И* — *А* (модель «легкая ось» антиферромагнитного типа) имеем

$$\varepsilon_k = \sqrt{1 - \xi^2 \gamma_k^2}, \quad \varepsilon_0 = \sqrt{1 - \xi^2} \quad (\xi = -\eta), \quad (2.34)$$

причем в предельном случае модели Андерсона (*А*) спектр также является бесщелевым,

$$\varepsilon_k = \sqrt{1 - \gamma_k^2}, \quad \varepsilon_0 = 0 \quad (\xi = -\eta = 1), \quad (2.34a)$$

что было впервые установлено Хультенем [122] (см. также Андерсон [29] и § 17 осн. текста). Вдоль всей линии *Г* — *П* — *А* (модель «легкая плоскость») спектр является бесщелевым; он был получен впервые Мацубарой и Мацудой [46] (см. также Семура и Хубер [123]) и по виду сходен со спектром Н. Н. Боголюбова для неидеального бозе-газа [119] (см. рис. 3, б)

$$\varepsilon_k = [(1 - \xi)(1 - \gamma_k) + \xi(1 - \gamma_k)^2]^{1/2}, \quad \varepsilon_0 = 0 \quad (\eta = 1); \quad (2.35)$$

в частном случае поперечной модели (*П*) Либа, Шульца и Маттиса [124] имеем

$$\varepsilon_k = \sqrt{1 - \gamma_k}, \quad \varepsilon_0 = 0 \quad (\eta = 1, \xi = 0). \quad (2.35a)$$

Наконец, вдоль линии *И* — *П* имеем

$$\varepsilon_k = [(1 - \eta) + \eta(1 - \gamma_k)]^{1/2} \quad (\xi = 0). \quad (2.36)$$

Для изучения спектра в наиболее интересной области малых импульсов (ka) $\ll 1$ используем разложение (1.216) (например, для случая $z = 6$ простой кубиче-

ской решетки $\gamma_k \simeq 1 - (1/6)(ka)^2$. Полагая в дальнейшем для удобства постоянную решетки $a = 1$ и ограничиваясь низшим приближением по степеням k , имеем в наиболее общем случае

$$\epsilon_k \approx \epsilon_0 + \frac{\xi + \eta - 2\xi\eta}{2\epsilon_0} (1 - \gamma_k) \approx \epsilon_0 + \frac{\xi + \eta - 2\xi\eta}{12\epsilon_0} k^2 \quad (2.37)$$

$$(\epsilon_0 \neq 0),$$

или, если $\xi + \eta = 2\xi\eta$,

$$\epsilon_k \simeq \epsilon_0 + \frac{\xi\eta}{2\epsilon_0} (1 - \gamma_k)^2 \approx \epsilon_0 + \frac{\xi\eta}{72\epsilon_0} k^4 \quad (\epsilon_0 \neq 0). \quad (2.37a)$$

В случае бесщелевых спектров ($\epsilon_0 = 0$) имеем линейный («фононный») закон дисперсии для модели «легкая плоскость»

$$\epsilon_k \simeq \sqrt{1 - \xi} \sqrt{1 - \gamma_k} \simeq (1/\sqrt{6}) \sqrt{1 - \xi} k \quad (2.38)$$

$$(\epsilon_0 = 0, \eta = 1, -1 \leq \xi < 1)$$

и квадратичный — только для изотропной модели Гейзенберга

$$\epsilon_k = 1 - \gamma_k \simeq (1/6) k^2 \quad (\epsilon_0 = 0, \eta = \xi = 1), \quad (2.38a)$$

что находится в соответствии с гидродинамической теорией спиновых волн Хальперина и Хоэнберга [125].

Термодинамика. При низких температурах, где только и применимо спин-волновое приближение, представляют интерес величины ψ и ΔE^0 из (2.15a) и (2.23a), а также величина

$$P^B = \frac{1}{N} \sum_k \frac{A(k)}{E_k^B} n(E_k^B) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\alpha_k}{\epsilon_k} n(\epsilon_k), \quad (2.39)$$

$$\alpha_k \equiv \frac{A(k)}{I(0)/2} = h + 1 - \frac{\xi + \eta}{2} \gamma_k,$$

определяющая согласно (2.16) температурную зависимость намагниченности σ .

1. Очевидно, что при $\Theta \rightarrow 0$ функция $n(E_k^B)$, а вместе с ней и P^B , стремятся к нулю, так что намагниченность

в основном состоянии отклоняется от насыщения на величину

$$\Delta\sigma^B \equiv \frac{1}{2} - \sigma^B = \psi_0, \quad \psi_0 = \frac{1}{2N} \sum_k \left(\frac{\alpha_k}{\varepsilon_k} - 1 \right) = \\ = \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{h+1 - \frac{\xi+\eta}{2} \gamma_k}{V(1-\xi\gamma_k)(1-\eta\gamma_k)} - 1 \right\}. \quad (2.40)$$

Общая тенденция в поведении ψ_0 — ее возрастание при увеличении «относительной» анизотропии (т. е. различия между ξ и η); так, вдоль линии ЛО

$$\psi_0 \equiv 0 \quad (\xi = \eta, \alpha_k = \varepsilon_k \text{ при всех } h), \quad (2.41)$$

в случае ЛП при $h=0$

$$\psi_0 = \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{1 - \frac{1+\xi}{2} \gamma_k}{V(1-\xi\gamma_k)(1-\gamma_k)} - 1 \right\} \quad (\eta=1, \xi \neq 1), \quad (2.42)$$

причем для поперечной модели согласно [123]

$$\psi_0 = \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{1 - \gamma_k/2}{V1 - \gamma_k} - 1 \right\} \approx 0,022 \quad (\eta=1, \xi=0), \quad (2.42a)$$

тогда как для модели Андерсона [29]

$$\psi_0 = \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ \frac{1}{V1 - \gamma_k^2} - 1 \right\} \approx 0,078 \quad (\eta=1, \xi=-1) \quad (2.42b)$$

(интерполяционные оценки величины ψ_0 для других значений ξ см. в работе Семуры и Хубера [123]).

Соответственно, для ΔE^0 имеем

$$\Delta E^0 = \frac{1}{2} \sum_k (A(k) - E_k^B) \equiv \frac{NI(0)}{4} \Delta e^0, \quad \Delta e^0 = \frac{1}{N} \sum_k (\alpha_k - \varepsilon_k), \quad (2.43)$$

так что вновь, как и для ψ_0 , на линии «легкая ось»

$$\Delta e^0 \equiv 0 \quad (\xi = \eta, \alpha_k = \varepsilon_k \text{ при всех } h), \quad (2.44)$$

а на линии «легкая плоскость» при $h=0$ величина

$$\Delta e^0 = \frac{1}{N} \sum_k \{1 - \sqrt{(1 - \xi \gamma_k)(1 - \gamma_k)}\} \quad (\eta = 1, \xi \neq 1) \quad (2.45)$$

монотонно возрастает от нуля в случае изотропной модели до значения

$$\Delta e^0 = \frac{1}{N} \sum_k \{1 - \sqrt{1 - \gamma_k}\} \approx 0,027 \quad (\eta = 1, \xi = 0) \quad (2.45a)$$

для поперечной модели [123] и далее до значения

$$\Delta e^0 = \frac{1}{N} \sum_k \{1 - \sqrt{1 - \gamma_k^2}\} \approx 0,097 \quad (\eta = 1, \xi = -1) \quad (2.45b)$$

в модели Андерсона [29] (интерполяционные оценки величины Δe^0 для других значений ξ см. в работе Семуры и Хубера [123]).

2. Основной вклад в сумму (2.39), определяющую температурную зависимость спонтанной намагниченности, вносит область малых импульсов. Вводя обозначения (при $h=0$)

$$\Delta \alpha_k = \alpha_k - \alpha_0 = \frac{\xi + \eta}{2} (1 - \gamma_k), \quad \Delta \varepsilon_k = \varepsilon_k - \varepsilon_0,$$

так что величины $\Delta \alpha_k$, $\Delta \varepsilon_k$ стремятся к нулю при $k \rightarrow 0$, разложим отношение α_k/ε_k , входящее в P^B , до низшего порядка по k . Тогда в наиболее общем случае

$$\varepsilon_0 = \sqrt{(1 - \xi)(1 - \eta)} \neq 0, \quad \alpha_0 = 1 - (\xi + \eta)/2 \neq 0$$

имеем

$$P^B \simeq \frac{\alpha_0}{\varepsilon_0} \frac{1}{N} \sum_k n(E_k^B) + \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \frac{\Delta \alpha_k}{\varepsilon_0} - \frac{\alpha_0 \Delta \varepsilon_k}{\varepsilon_0^2} \right\} n(E_k^B); \quad (2.46)$$

при этом всегда $\Delta \alpha_k \sim k^2$, тогда как $\Delta \varepsilon_k \sim k^2$ или k^4 согласно (2.37) или (2.37a).

Для случая бесщелевых спектров ($\varepsilon_0 = 0$), учитывая (2.38) и (2.38a), для модели «легкая плоскость» имеем

$$P^B \simeq \frac{\sqrt{1 - \xi}}{2N} \sum_k \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_k}} n(E_k^B) \quad (2.47)$$

$$(\eta = 1, \xi \neq 1, \varepsilon_0 = 0, \alpha_0 = (1 - \xi)/2)$$

и для изотропной модели Гейзенберга

$$P^B = \frac{1}{N} \sum_k n(E_k^B) \quad (2.47a)$$

$$(\eta = \xi = 1, \alpha_k = \varepsilon_k = 1 - \gamma_k, \alpha_0 = \varepsilon_0 = 0).$$

Далее удобно ввести приведенную температуру $\theta = 2\Theta/I(0)$ и представить фактор $n(E_k^B)$ в виде

$$n(E_k^B) = \frac{1}{\exp(E_k^B/\theta) - 1} = \frac{1}{e^{\varepsilon_k/\theta} - 1} = \frac{e^{-\varepsilon_0/\theta}}{e^{\Delta\varepsilon_k/\theta} - e^{-\varepsilon_0/\theta}}. \quad (2.48)$$

В области температур, низких по сравнению с характерной температурой щели, число слабовозбужденных магнонов с импульсом k равно

$$n(E_k^B) \simeq e^{-\varepsilon_0/\theta} e^{-\Delta\varepsilon_k/\theta} \quad (\theta \ll \varepsilon_0), \quad (2.48a)$$

так что величина P^B в (2.46) дает в этой области лишь экспоненциально малые температурные поправки.

В области температур, высоких по сравнению с характерной температурой щели, магноны возбуждены сильно:

$$n(E_k^B) \simeq (e^{\Delta\varepsilon_k/\theta} - 1)^{-1} \quad (\varepsilon_0 \ll \theta \ll \theta_c), \quad (2.48b)$$

однако общие пределы применимости спин-волнового приближения $\theta \ll \theta_c$, где $\theta_c \simeq 1$ — температура Кюри, приводят к ограничению $\varepsilon_0 \ll 1$, т. е. представление (2.48b) возможно лишь для моделей со значениями η , достаточно близкими к единице (в частности, для модели Изинга $\eta = \xi = 0$, $\varepsilon_0 = 1$, $\theta_c \simeq 1/2$, и всегда осуществляется ситуация (2.48a), $P^B = (e^{\varepsilon_0/\theta} - 1)^{-1} \simeq e^{-\varepsilon_0/\theta}$, $\Delta\varepsilon_k \equiv 0$).

Для бесщелевых спектров ($\varepsilon_0 = 0$) при всех значениях θ имеет место выражение вида (2.48b) ($\Delta\varepsilon_k \equiv \varepsilon_k$). При вычислении сумм вида (2.39) в области низких температур обычно используется переход к интегрированию по всем значениям k в сферических координатах (подробно см. приложение П2). Согласно (П2.14) (см. так-

же (15.11) — (15.14)) для простой кубической решетки имеем

$$\frac{1}{N} \sum_k \rightarrow \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\Omega_k \int_0^{k_0} k^2 dk \simeq \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty k^2 dk, \quad (2.49)$$

где использована изотропия спектра $\int d\Omega_k = 4\pi$, $v = a^3 = 1$ и наличие «режущего» фактора $n(E_k^B)$ (замена k_0 на ∞). Проведение указанного суммирования, например, в (2.46), в наиболее интересной области температур, близких к нулю, согласно (2.48а) приведет к появлению степенных температурных множителей, мало заметных на фоне экспоненциальных поправок.

Наибольший интерес представляет поэтому случай бесщелевых спектров (2.38) и (2.38а), которые приводят к степенным поправкам вплоть до нуля температур; при вычислении используются следующие значения определенных интегралов:

$$\int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1} dx}{e^x - 1} = \Gamma(\sigma) \zeta(\sigma), \quad \int_0^\infty x^{\sigma-1} e^{-ax} dx = \Gamma(\sigma) a^{-\sigma}, \quad (2.50)$$

где $\Gamma(\sigma)$ и $\zeta(\sigma) = \sum_{n=1}^\infty n^{-\sigma}$ — гамма-функция и дзета-функция Римана соответственно.

Производя замену переменной $\epsilon_k/\theta = x$, нетрудно найти, что для случая «легкая плоскость»

$$P^B \approx \frac{1}{\sqrt{1-\xi}} \frac{6^{-3/2} \zeta(2)}{2\pi^2} \theta^2 \quad (\eta = 1, \xi \neq 1); \quad (2.51)$$

поправка к P^B за счет учета, например, вклада $\Delta\alpha_k$ имеет вид

$$\Delta P^B \simeq \frac{1+\xi}{\sqrt{1-\xi}} \frac{1}{N} \sum_k \sqrt{1-\gamma_k} n(E_k^B) \sim \frac{1+\xi}{(1-\xi)^{5/2}} \theta^4, \quad (2.51a)$$

так как при замене переменной каждая степень k в силу линейности спектра дает множитель θ ; таким образом, поправка $\Delta P^B \sim (P^B)^2$, и она полностью исчезает в случае модели Андерсона ($\xi = -1$).

Для изотропной модели Гейзенберга ($\xi = 1$) разложение вида (2.51), (2.51а) по целым степеням θ

становится непригодным и полностью перестраивается в разложение по полужелым степеням θ (Ф. Блох [121], Дайсон [105]). Главный член имеет вид

$$P^B \simeq \frac{1}{8} \left(\frac{6}{\pi} \right)^{3/2} \zeta(3/2) \theta^{3/2} \quad (\eta = \xi = 1); \quad (2.52)$$

учет дальнейших членов в разложении $\epsilon_k = 1 - \gamma_k$ по четным степеням k приводит к появлению поправок к P^B , пропорциональных $\theta^{5/2}$ и $\theta^{7/2}$, так как при замене переменной каждая степень k в силу квадратичности спектра дает множитель $\theta^{1/2}$ (см. также (15.16), (15.19)).

Аналогично можно определить и зависящую от температуры часть средней энергии (2.23) в спин-волновом приближении. Поскольку для него $R_k(0) = 0$, то согласно (2.22) продольная корреляционная функция также обращается в нуль,

$$R_k^{11}(0) = R_k^{12}(0) = 0, \quad \zeta = 0. \quad (2.53)$$

Тогда из формулы (2.23) видно, что средняя энергия спиновой системы в спин-волновом приближении совпадает по форме с энергией идеального бозе-газа магнов, обладающих законом дисперсии (2.27); таким образом, спин-волновое приближение в ОПХФ полностью эквивалентно процедуре диагонализации гамильтониана в ПВК (см. гл. IV основного текста, особенно формулы (13.7), (13.8), (13.19)).

Точнее, без учета энергии основного состояния имеем

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle &= \sum_k E_k^B n(E_k^B) = \\ &= \frac{I(0)}{2} \begin{cases} \sqrt{1-\xi} \sum_k \sqrt{1-\gamma_k} n(E_k^B) \sim \sqrt{1-\xi} \theta^4 \quad (\eta=1, \xi \neq 1), \\ \sum_k (1-\gamma_k) n(E_k^B) \sim \theta^{5/2} \quad (\eta=\xi=1) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.54)$$

для моделей типа ЛП и изотропной соответственно; вклад в теплоемкость для этих моделей пропорционален θ^3 и $\theta^{3/2}$. Наконец, для аномальной корреляционной функции (2.19), с учетом $\Omega_k^{12} = C(k)$, находим

$$\mu = -\frac{1}{2N} \sum_k \gamma_k \frac{c_k}{\epsilon_k} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_k}{2\theta}, \quad c_k \equiv \frac{C(k)}{I(0)/2} = -\frac{1}{2} (\xi - \eta) \gamma_k. \quad (2.55)$$

Более подробный анализ низкотемпературной термодинамики спиновой системы (включая ее теплоемкость и восприимчивость) в спин-волновом приближении можно найти, например, в работах [1—3].

§ 3. Низкотемпературная (хартри-фоковская) ренормировка

Частичное улучшение спин-волнового приближения (2.24) может быть достигнуто, если при вычислении матричных элементов $R_k^{11}(0)$ и $R_k^{12}(0)$ в (2.3а) не отбрасывать операторы J_k , J_{-k}^+ , но использовать при вычислении коммутаторов низкотемпературную (бозевскую) кинематику (2.25). Тогда имеем

$$\begin{aligned} R_k^{11}(0) \pm R_k^{12}(0) &= \langle [J_k \pm J_{-k}^+, b_k^+]^B \rangle \langle [b_k, b_k^+]^B \rangle^{-1} = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q V_{kq}(x_{\pm}) \left\{ \delta_{q_0} \langle \rho_{q_0} \rangle + \frac{\langle b_{k-q}^+ b_{k-q} \rangle \pm \langle b_{-k+q}^+ b_{k-q}^+ \rangle}{\sqrt{N}} \right\} \\ &\quad (x_+ = \xi, x_- = \eta). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Нетрудно убедиться, что тот же результат может быть получен иначе: для этого следует не вычислять приближенно коммутаторы в (2.3а) с точным J_h из (1.28), но предварительно линеаризовать оператор J_h , а затем вычислить коммутаторы точно. Указанную линеаризацию следует провести путем всевозможных (нормальных и аномальных) спариваний в духе бозевской теоремы К. Блоха — Вика — Доминисиса (см. § 10 основного текста). Эта процедура применялась, например, Мори и Кавасаки [126] и эквивалентна обычному приближению Хартри — Фока, или первому борновскому приближению в теории рассеяния (с учетом вкладов как прямых, так и обменных диаграмм теории возмущений). Можно сказать, что спиновая система моделируется слабо неидеальным бозе-газом магнонов с законом дисперсии (2.27). В результате получаем линеаризованный оператор J_h в виде

$$\begin{aligned} J_k \approx & -\frac{1}{2N} \sum_p \{A_{kp}^{(+)} n_p + B_{kp}^{(+)} m_p\} b_k - \\ & -\frac{1}{2N} \sum_p \{A_{kp}^{(-)} n_p + B_{kp}^{(-)} m_p\} b_{-k}^+, \end{aligned} \quad (2.57)$$

где

$$\begin{aligned} A_{kp}^{(\pm)} &= V_{k0}(\xi) + V_{k, k+p}(\xi) \pm V_{k0}(\eta) \pm V_{k, k+p}(\eta), \\ B_{kp}^{(\pm)} &= V_{k, k+p}(\xi) \mp V_{k, k+p}(\eta). \end{aligned} \quad (2.57a)$$

В частном случае симметричной модели ЛО ($\xi = \eta$) это выражение упрощается: $A_{kp}^{(-)} = B_{kp}^{(+)} = 0$, $m_p = 0$, так что

$$J_k \approx -\frac{1}{N} \sum_p V_{k0p}(\xi) n_p b_k, \quad E_k = A(k) - \frac{1}{N} \sum_p V_{k0p}(\xi) n_p, \quad (2.58)$$

где потенциал $V_{kqp}(\xi)$ имеет вид

$$\begin{aligned} V_{kqp}(\xi) &\equiv V_{kq}(\xi) + V_{k, k-p-q}(\xi) = \\ &= I(0) \{ \gamma_q + \gamma_{k-p-q} - \xi(\gamma_{q-k} + \gamma_{p+q}) \}; \end{aligned} \quad (2.59)$$

в изотропном случае $\xi = 1$ потенциал $V_{kqp}(1)$ в точности совпадает с эффективным потенциалом взаимодействия, который ввел Дайсон [105] в модели идеальных спиновых волн (подробнее см. § 4 гл. III). Выражение (2.58) соответствует проведению прямого и обменного нормальных спариваний в операторе (1.29) и было впервые получено М. Блох [127].

Используя (2.56), находим

$$\begin{aligned} \Omega_k^{11} \pm \Omega_k^{12} &= (A(k) \pm C(k)) - \\ &- \frac{1}{N} \sum_p \{ [V_{k0}(x_{\pm}) + V_{k, k+p}(x_{\pm})] n_p \pm V_{k, k+p}(x_{\pm}) m_p \}; \end{aligned} \quad (2.60)$$

упрощение полученной формулы возможно с помощью теоремы М. Блох [127] — Келлена [86], справедливой для кубических решеток с центром инверсии,

$$\frac{1}{N} \sum_p \gamma_{k+p} f(p) = \gamma_k \frac{1}{N} \sum_p \gamma_p f(p), \quad f(-p) = f(p). \quad (2.61)$$

Окончательно получаем

$$\Omega_k^{11} \pm \Omega_k^{12} = (A(k) \pm C(k)) - V_{k0}(x_{\pm}) n - V_{kk}(x_{\pm}) (v \pm \mu), \quad (2.60a)$$

и далее, учитывая, что $V_{kk}(x) = V_{k0}(x) - I(0)(1+x)(1-\gamma_k)$, $A(k) \pm C(k) = g\mu_B H + V_{k0}(x_{\pm})/2$, имеем для ренормиро-

ванного спектра E_k выражение

$$E_k^2 = (E_k^B)^2 \{1 - 4(n + \nu) + 4[(n + \nu)^2 - \mu^2]\} + \\ + I(0)(1 - \gamma_k) \{(A(k) - C(k))(1 - 2(n + \nu - \mu))(1 + \xi)(\nu + \mu) + \\ + (A(k) + C(k))(1 - 2(n + \nu + \mu))(1 + \eta)(\nu - \mu)\} + \\ + I^2(0)(1 - \gamma_k)^2(1 + \xi)(1 + \eta)(\nu^2 - \mu^2); \quad (2.62)$$

располагая члены в порядке возрастания степени k , можно найти температурную ренормировку каждого из коэффициентов — она определяется корреляционными функциями поперечных спиновых компонент ν и μ , описывающими ближний магнитный порядок.

Вычисление этих функций (во всяком случае, при низких температурах) можно производить в духе теории возмущений, используя в качестве n и μ их неренормированные (спин-волновые) выражения (2.39) и (2.55). Из рассмотрения в § 2 гл. II ясно, что в общем случае при $\eta \neq 1$, $\epsilon_0 \neq 0$ соответствующие поправки будут экспоненциально малы при $\theta \rightarrow 0$. Рассмотрим поэтому только семейство бесщелевых моделей типа «легкая плоскость» ($\eta = 1$, $\epsilon_0 = 0$, $-1 \leq \xi \leq 1$); тогда, ограничиваясь низшим порядком по k , имеем

$$\epsilon_k^2 \simeq (e_k^B)^2 \{1 - 4(n + \mu)\}, \\ \epsilon_k^B \simeq \sqrt{1 - \xi} \sqrt{1 - \gamma_k} \quad (|\xi| \neq 1). \quad (2.63)$$

В предельных случаях моделей Андерсона (A) и Гейзенберга (Γ) из (2.62) получаются следующие выражения, справедливые при всех k :

$$\epsilon_k^2 = (e_k^B)^2 \{1 - 4(n + \mu) + 4[(n + \mu)^2 - \nu^2]\}, \\ \epsilon_k^B = \sqrt{1 - \gamma_k^2} \quad (\xi = -1), \quad (2.64)$$

$$\epsilon_k = e_k^B \{1 - 2(n - \nu)\}, \quad \epsilon_k^B = 1 - \gamma_k \quad (\xi = 1) \quad (2.65)$$

(если пренебречь при малых θ квадратичными членами в ренормирующем факторе (2.64), то полученное выражение совпадает по виду с (2.63)).

Таким образом, в общем случае $\eta = 1$, $\xi \neq 1$ ренормированный спектр может быть записан в виде

$$\epsilon_k = e_k^B \{1 - \varphi - r(\theta)\}, \quad \varphi = \frac{2}{N} \sum_k \nu_k (\nu_k + \gamma_k \mu_k) \geq 0 \quad (2.66)$$

(где φ — не зависящая от температуры малая величина), а согласно (2.54)

$$r(\theta) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{A(k) - \gamma_k C(k)}{E_k^B} n(E_k^B) \simeq \simeq \frac{2}{1-\xi} \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k^B n(\epsilon_k^B) \sim \frac{1}{\sqrt{1-\xi}} \theta^4, \quad (2.66a)$$

что совпадает при $\xi = -1$ с результатом Тани [128] для изотропного антиферромагнетика, изоморфного модели Андерсона (см. также Семура и Хубер [123]). В изотропном случае $\eta = \xi = 1$ величина $\varphi \equiv 0$, тогда как вновь согласно (2.54)

$$r(\theta) = \frac{2}{N} \sum_k (1 - \gamma_k) n(E_k^B) = \frac{2}{N} \sum_k \epsilon_k^B n(\epsilon_k^B) \sim \theta^{5/2}; \quad (2.67)$$

этот результат был впервые получен М. Блох [127].

Таким образом, во всех случаях температурная часть ренормирующего фактора при малых θ пропорциональна удвоенной средней энергии спиновой системы (в расчете на узел), в полном соответствии с известным выводом Кеффера и Лоудона [129], основанном на феноменологическом подходе.

Низшие поправки в разложении спонтанной намагниченности по степеням θ за счет учета динамического взаимодействия и перенормировки спектра дают члены, пропорциональные θ^6 для модели ЛП и, в соответствии с результатами Дайсона [105], пропорциональные θ^4 для изотропной модели (в последнем случае эта поправка особенно заметна на фоне разложения по полуцелым степеням θ). Однако полное пренебрежение кинематическим взаимодействием приводит к тому, что решение уравнения для σ во всей области температур обнаруживает неоднозначность и разрывное поведение (см. [127, 130]); таким образом, фазовый переход в рамках хартри-фоковского приближения не может быть описан.

§ 4. Приближение Тябликова (приближение случайных фаз)

Самосогласованный учет динамического и кинематического взаимодействия в рамках ОПХФ, позволяющий описать фазовый переход, может быть достигнут на ос-

нове приближения типа случайных фаз, впервые предложенного С. В. Тябликовым [83] (см. § 32). Физический смысл этого приближения состоит в пренебрежении флуктуациями параметра дальнего порядка σ ; формально оно сводится к замене оператора ρ_k с-числом (его температурным средним значением) одновременно в операторе J_k из (1.28) и точном коммутаторе (1.24) (ср. с (2.26))

$$\rho_k \rightarrow \rho_k^T \equiv \langle \rho_k \rangle = \sqrt{N} \delta_{k0} \bar{n}. \quad (2.68)$$

Динамика системы определяется заменой ¹⁾ оператора J_k из (1.28) линеаризованным оператором J_k^T ,

$$J_k \rightarrow J_k^T = -\frac{1}{2} (A_k^{(+)} b_k + A_k^{(-)} b_{-k}^+) \bar{n}, \quad (2.69)$$

$$A_k^{(\pm)} = V_{k0}(\xi) \pm V_{k0}(\eta);$$

в отличие от приближения Хартри — Фока (2.57), приближение Тябликова (2.69) соответствует отбрасыванию аномального спаривания и проведению лишь одного (прямого, или «внутреннего») из двух возможных нормальных спариваний (в случае «легкой оси» $\eta = \xi$, $A_k^{(-)} = 0$, $A_k^{(+)} = 2V_{k0}(\xi)$).

Кинематика системы является квазибозевской (хотя $\varepsilon = 1$ в (1.24) и (1.42)),

$$[b_k, b_{k'}^+]^T = 2\sigma \delta_{kk'}, \quad [b_k, \rho_{k'}]^T = 2\sigma b_{k+k'} / \sqrt{N}, \quad (2.70)$$

так как

$$[b_k, b_{k'}^+]^T \equiv \langle [b_k, b_{k'}^+] \rangle = 2\sigma \delta_{kk'}, \quad (2.70a)$$

соответственно. в отличие от низкотемпературных приближений Ф. Блоха и Хартри — Фока ²⁾ все корреляционные функции приобретают множитель 2σ .

¹⁾ Аналогичная идея использовалась независимо Браутом и Энглертом [131], а также Гинзбургом и Файном [132]; расщепление Тябликова в цепочке для антикоммутаторных функций Грина предложено недавно в [137].

²⁾ В отличие от приближения Ф. Блоха (2.25), второй коммутатор в (2.70) также модифицируется по сравнению с точным значением; этим фактически нарушается дополнительное кинематическое условие (1.25), однако в целом приближение оказывается самосогласованным.

Для матричных элементов $R_k(0)$ и Ω_k имеем

$$\begin{aligned} R_k^{11}(0) \pm R_k^{12}(0) &= -\bar{n}V_{k0}(x_{\pm}), \\ \Omega_k^{11} \pm \Omega_k^{12} &= g\mu_B H + \sigma V_{k0}(x_{\pm}), \end{aligned} \quad (2.71)$$

где $x_+ = \xi$, $x_- = \eta$, $\bar{n} = (1/N) \sum_k \bar{n}_k = 2\sigma P$; тогда для спектра получаем выражение

$$E_k^T = [(g\mu_B H + \sigma V_{k0}(\xi))(g\mu_B H + \sigma V_{k0}(\eta))]^{1/2}, \quad (2.72)$$

которое отличается от спин-волнового (2.27) заменой приближенного значения намагниченности в основном состоянии ($\sigma_0 \simeq 1/2$) его истинным средним значением. Характер поведения E_k^T как функции внешнего поля при $k=0$ остается тем же, что и в (2.30), (2.30 а, б); при $H=0$ имеем

$$E_k^T = 2\sigma E_k^B = \sigma I(0)[(1 - \xi\gamma_k)(1 - \eta\gamma_k)]^{1/2}, \quad (2.73)$$

так что тябликовская магنونная мода является «мягкой» (обращается в нуль в точке фазового перехода $\theta = \theta_c$, $\sigma = 0$) в соответствии с общей теорией [145].

Уравнение для намагниченности имеет вид обобщенного уравнения Тябликова (2.17) или (2.17а) (сравни с (33.1))

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{g\mu_B H + (\sigma/2)(V_{k0}(\xi) + V_{k0}(\eta))}{E_k^T} \operatorname{cth} \frac{E_k^T}{2\theta} \quad (2.74)$$

и очевидным образом удовлетворяет критерию (2.17). В частном случае модели ЛО уравнение (2.74) упрощается:

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \operatorname{cth} \frac{g\mu_B H + \sigma V_{k0}(\xi)}{2\theta} \quad (\eta = \xi), \quad (2.75)$$

причем в случае модели Изинга это уравнение совпадает с уравнением Вейсса в приближении молекулярного поля (см. (21.11))

$$\sigma = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{h + 2\sigma}{2\theta} \quad (\eta = \xi = 0), \quad (2.75a)$$

а в случае изотропной модели Гейзенберга ($\eta = \xi = 1$) — с уравнением (32.19), впервые полученным и исследованным в работах С. В. Тябликова [83] (случай $0 < \xi < 1$)

рассматривался в работах [133, 134]). Для модели ЛП уравнение вида (2.74) было получено Крюгером и Хубером [135], а в наиболее общем случае — Т. Огучи [120].

При $H = 0$ уравнение для спонтанной намагниченности приобретает вид ¹⁾

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\alpha_k}{\varepsilon_k} \operatorname{cth} \frac{\sigma \varepsilon_k}{2\theta} \quad (2.76)$$

или

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + 2P + 2\psi}. \quad (2.76a)$$

В области низких температур $\theta \rightarrow 0$, $P \rightarrow 0$, и величина квантового сокращения спина уменьшается по сравнению со своим спин-волновым значением

$$\Delta\sigma^T = \frac{1}{2} - \sigma_0 = \psi_0(1 + 2\psi_0)^{-1}, \quad \Delta\sigma^T < \Delta\sigma^B; \quad (2.77)$$

кроме того, в низкотемпературном разложении начинают появляться «кинематические» члены, пропорциональные $(P^B)^2$ (см., например, (33.3))

$$\sigma^T \simeq \sigma^B - 2(P^B + \psi)^2 + \dots, \quad \sigma^B \equiv \frac{1}{2} - P^B - \psi; \quad (2.78)$$

это свойство, как нетрудно видеть из (2.16a), является общим для всех теорий первого порядка, основанных на правильном учете кинематики операторов Паули. Вклад кинематических членов в низшем порядке по θ пропорционален θ^4 и θ^3 для моделей ЛП и изотропной соответственно, тогда как динамические поправки в σ начинаются в этих случаях с θ^6 и θ^4 (см. § 3 гл. II); аналогичный вклад дает также учет динамической ренормировки спектра (2.73) не на среднюю энергию, как это имеет место в приближении Хартри — Фока, а на среднюю намагниченность. Заметим, что в случае ЛП учет кинематики приводит лишь к изменению коэффициентов в разложении σ по четным степеням θ , тогда как в изотропном случае на фоне разложения по полужелым степеням θ возникает хорошо известный «недайсоновский»

¹⁾ Поведение σ при $H \neq 0$ вблизи критической температуры в изотропном случае подробно изучалось в работе [136].

член θ^3 (по этому поводу см. §§ 36, 37, а также работы [83—97]); ниже в § 7 гл. II будет указан простой способ компенсации этого члена в духе теории Ортенбургера [144], а более строгая теория построена в § 2 гл. III.

Уравнение (2.76), как нетрудно видеть, описывает фазовый переход 2-го рода — обращение в нуль спонтанной намагниченности при температуре Кюри θ_c . Именно, учитывая, что при $\theta \rightarrow \theta_c$ значение $\sigma \rightarrow 0$, причем $\operatorname{cth} x \approx (1/x) + (x/3) + \dots$ при $x \rightarrow 0$, находим, что при $\theta \leq \theta_c$

$$\sigma \sim \sqrt{\theta_c - \theta} \quad (\theta_c \geq \theta, H = 0) \quad (2.79)$$

(ср. с (33.17)), так что критический индекс для намагниченности равен $1/2$, что также является общим свойством всех теорий первого порядка¹⁾ (см., например, [99—104]). Значение θ_c определяется суммой

$$\frac{1}{2\theta_c} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\alpha_k}{e_k^2} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - (\xi + \eta) \gamma_k/2}{(1 - \xi \gamma_k)(1 - \eta \gamma_k)}. \quad (2.80)$$

Для семейства моделей типа «легкая ось» $\alpha_k = e_k = 1 - \xi \gamma_k$, так что

$$\frac{1}{2\theta_c} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e_k} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 - \xi \gamma_k} = F_\xi(-1) \quad (\eta = \xi), \quad (2.81)$$

где $F_\xi(-1)$ — обобщенный интеграл Ватсона [141, 134]; в частности, для моделей Изинга и Гейзенберга получаем хорошо известные результаты²⁾ (см. (21.18) и (33.18))

$$\theta_c = \frac{1}{2} \quad (\eta = \xi = 0), \quad \theta_c = \frac{1}{2F_1(-1)} \quad (\eta = \xi = 1). \quad (2.81a)$$

¹⁾ Эксперименты по рассеянию нейтронов (см., например, [143]) дают для этой величины меньшее значение, близкое к $1/3$.

²⁾ Значения $F_1(-1)$ для трех типов кубических решеток приведены в (33.20); в пределе «бесконечной плотности» $z \rightarrow \infty$, $I \rightarrow 0$, $I(0) = Iz = \text{const}$ величина $\gamma_k = (1/z) \sum_{\delta} \exp(ik\delta)$ стремится к $\delta_{k,0}$,

так что $F_\xi(-1) \rightarrow 1$ при любом ξ , и точка Кюри повышается до вейсовского значения (см. в связи с этим работы [5—10] и примечание 1). В общем случае $F_\xi(-1) < 1$ (см. [134]).

Для семейства моделей типа «легкая плоскость» имеем

$$\frac{1}{2\theta_C} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - (1 + \xi) \gamma_k/2}{(1 - \xi \gamma_k)(1 - \gamma_k)} \quad (\eta = 1, \xi \neq 1); \quad (2.82)$$

в частности, для поперечной модели

$$\frac{1}{2\theta_C} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1 - \gamma_k/2}{1 - \gamma_k} = \frac{1}{2} (F_1(-1) + 1) \quad (\eta = 1, \xi = 0), \quad (2.82a)$$

что превышает значение θ_C для изотропной модели и согласуется с результатами высокотемпературного разложения [142].

Для семейства моделей ЛО антиферромагнитного типа имеем (в силу свойств симметрии функции γ_k):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\theta_C} &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 - \xi^2 \gamma_k^2} = \frac{1}{2N} \sum_k \left(\frac{1}{1 - \xi \gamma_k} + \frac{1}{1 + \xi \gamma_k} \right) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 - \xi \gamma_k}. \end{aligned} \quad (2.83)$$

В частности, точка Нееля изотропного антиферромагнетика (А) совпадает с точкой Кюри изотропного ферромагнетика (Г). Общая тенденция состоит в убывании θ_C по мере роста абсолютной величины каждого из параметров ξ и η (см. также [120]).

Таким образом, если отвлечься от трудности с кинематическим членом, уравнение для намагниченности в приближении Тябликова обладает хорошими интерполяционными свойствами во всем интервале температур (включая точку фазового перехода и парамагнитную область); оно также удовлетворительно описывает эксперимент (см. § 36).

Заметим в заключение, что согласно (2.22) и (2.71) продольная корреляционная функция дается выражением

$$\xi = \bar{n}^2 - \frac{1}{2} \bar{n} [(\xi + \eta) \nu - (\xi - \eta) \mu], \quad (2.84)$$

причем первое слагаемое соответствует полному отсутствию корреляции между z -компонентами спинов, так как

$$\text{при этом } \xi = \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \langle \rho_k \rangle \langle \rho_k \rangle = \bar{n}^2;$$

корреляционные функции ν и μ , характеризующие ближний порядок поперечных компонент спинов, определяются уравнениями (2.13), (2.14) и (2.71) и не входят в ренормировку спектра магнонов в приближении Тяблицова.

§ 5. «Точная» ренормировка в ОПХФ

Наиболее последовательный способ нахождения матричных элементов $R_k^{11}(0)$ и $R_k^{12}(0)$ в рамках ОПХФ состоит, на первый взгляд, в точном вычислении двойных коммутаторов в (2.3а) без использования какого-либо специального представления для S_k^z и без линейаризации оператора J_k . В результате такого вычисления получим (ср., например, с (2.56)):

$$\begin{aligned} R_k^{11}(0) \pm R_k^{12}(0) &= \frac{\langle [J_k \pm J_{-k}^+, b_k^+] \rangle}{\langle [b_k, b_k^+] \rangle} = \\ &= -\frac{1}{2\sigma \sqrt{N}} \sum_q V_{kq}(x_{\pm}) \{ \delta_{q0} \langle \rho_q \rangle - \frac{2}{\sqrt{N}} \langle \rho_q \rho_{-q} \rangle + \\ &+ \frac{\langle b_{k-q}^+ b_{k-q} \rangle \pm \langle b_{-k+q}^+ b_{k-q}^+ \rangle}{\sqrt{N}} \}, \quad x_+ = \xi, \quad x_- = \eta, \quad (2.85) \end{aligned}$$

откуда, применяя формулу (2.61), имеем

$$R_k^{11}(0) \pm R_k^{12}(0) = -\frac{1}{2\sigma} \{ V_{k0}(x_{\pm}) (\bar{n} - 2\xi) + V_{kk}(x_{\pm}) (\nu \pm \mu) \}. \quad (2.85a)$$

Очевидно, приближение (2.85а) для одночастичной функции Грина не является замкнутым, так как требует знания продольной корреляционной функции ξ . Однако, используя соотношение (2.22) вместе с (2.85а) и оставаясь в рамках ОПХФ, можно найти

$$\xi = \frac{\bar{n}^2 - \frac{1}{2} [(\xi + \eta) \nu - (\xi - \eta) \mu] \bar{n} - \frac{(\xi - \eta)}{2} (\mu \bar{n} + \nu \bar{m}) + \left[\nu^2 + \mu^2 - \frac{\xi + \eta}{2} (\nu \bar{n} + \mu \bar{m}) \right]}{1 - [(\xi + \eta) \nu - (\xi - \eta) \mu]}. \quad (2.86)$$

В общем случае исследование полученного приближения весьма громоздко, и мы ограничимся лишь част-

ным случаем симметричной модели «легкая ось» ($\xi = \eta$, $\mu = \bar{m} = 0$),

$$\xi = (\bar{n}^2 + v^2 - 2\xi v \bar{n})(1 - 2\xi v)^{-1} \quad (\eta = \xi). \quad (2.86a)$$

Тогда, вводя корреляционную функцию $\tilde{\xi} = (1/4) - \bar{n} + \xi$ (см. (1.37)), имеем

$$\begin{aligned} E_k = \Omega_k^{11} &= A(k) + R_k^{11}(0) = g\mu_B H + \\ &+ [2\tilde{\xi} V_{k0}(\xi) - v V_{kk}(\xi)](1/2\sigma) = \\ &= g\mu_B H + I(0) \left\{ \left[\frac{\sigma}{1 - 2\xi v} + \frac{v^2}{\sigma} \frac{1 - \xi^2}{1 - 2\xi v} \right] - \right. \\ &\quad \left. - v_k \left[\frac{\sigma}{1 - 2\xi v} + \frac{v}{2\sigma} \frac{1 - \xi^2}{1 - 2\xi v} \right] \right\}. \quad (2.87) \end{aligned}$$

Здесь величины σ и v определяются уравнениями

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \text{cth} \frac{E_k}{2\Theta}, \quad \frac{v}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k v_k \text{cth} \frac{E_k}{2\Theta}, \quad (2.88)$$

причем, как нетрудно видеть, система уравнений (2.87)–(2.88) не имеет решения вблизи критической точки Θ_c , в которой $\sigma(\Theta_c) = 0$, $v(\Theta_c) \neq 0$. Действительно, для существования конечного значения θ_c спектр в теориях первого порядка при $H = 0$ должен иметь вид

$$E_k = 2\sigma E_k^B R(\theta), \quad \theta_c = R(\theta_c)/2F_\xi(-1) \quad (\eta = \xi), \quad (2.89)$$

причем не зависящий от k фактор $R(\theta)$ (в который может входить, например, v) должен быть ограниченным и отличным от нуля при $\theta = \theta_c$ (в частности, для приближения Тябликова имеем $R^T \equiv 1$). Ренормировку спектра (2.87) наряду с ограниченными слагаемыми вида $(1 - 2\xi v)^{-1}$ определяют слагаемые, пропорциональные v^2/σ и v/σ и очевидным образом расходящиеся в критической точке; кроме того, (2.87) нельзя представить в форме (2.89).

Таким образом, даже в частном случае ЛО «точная» ренормировка оказывается непригодной для описания фазового перехода; лишь в предельном случае изотропной модели $\xi = 1$ расходящиеся слагаемые аннулируются, и спектр принимает вид (2.89), где, учитывая,

что $V_{hk}(1) = -V_{h0}(1)$, имеем

$$R(\theta) = (2\bar{\xi} + \nu)/2\sigma^2 = (1 - 2\nu)^{-1}, \quad 0 < \nu < 1/2 \quad (\xi = \eta = 1); \quad (2.90)$$

этот результат был впервые получен Мубай и Ланге [92] с использованием обобщенного двухпараметрического расщепления типа Хартри — Фока, а позднее другими методами также в работах [93, 94, 97, 117] (см. примечание 5).

Фактор $R(\theta)$ в (2.90) имеет вид суммы сходящейся геометрической прогрессии со знаменателем $2\nu < 1$; ее первый член формально соответствует пренебрежению влиянием ближнего порядка и дает результат Тябликова $R^T \equiv 1$; учет следующего члена приводит к результату Келлена $R^C = 1 + 2\nu$ (см. § 35 и ниже § 6 гл. II). Фактор (2.90) можно рассматривать как разложение спектра по степеням параметра упорядочения в духе теории фазовых переходов Ландау или теории подобия¹⁾ [146, 147].

Анализ системы уравнений для σ и ν вида (2.88) с ренормированным спектром (2.89), (2.90), проведенный в [92, 93], показывает, что они не содержат существенно новых свойств по сравнению, например, с приближениями Тябликова [83] и Келлена [86]; в частности, не устраняется трудность с членом θ^3 и не меняются критические индексы. С другой стороны, легко видеть, что

$$\begin{aligned} \nu(\theta_c) &= [F_1(-1) - 1]/2 F_1(-1), \\ R(\theta_c) &= F_1(-1), \quad \theta_c = \frac{1}{2} \quad (\xi = 1), \end{aligned} \quad (2.91)$$

так что точка Кюри поднимается до изинговского значения (2.81a), соответствующего приближению молекулярного поля для изотропной модели Гейзенберга.

В теории Мубай и Ланге [92] имеются и другие трудности, например, возникновение «антиферромагнитного»

¹⁾ Лайнс [95] предложил методику расщепления, приводящую к различной ренормировке длинных и коротких спиновых волн

$$E_k = E_{k_r k}^B(\theta), \quad r_k(\theta) = \sigma(k < k_c), \quad r_k(\theta) = \sqrt{\langle S_0 S_\delta \rangle} (k > k_c),$$

$k_c = 2\pi/l(\theta)$, $l(\theta)$ — длина когерентности, или эффективный размер области ближнего порядка; теория [95] хорошо описывает нейтронные эксперименты на ферромагнетиках низкой размерности.

ближнего порядка у продольных компонент спина вблизи критической точки:

$$\nu + 2\tilde{\xi} = 2\sigma^2(1 - 2\nu)^{-1}, \quad \sigma(\theta_c) = 0, \quad 0 < \nu(\theta_c) < 1/2,$$

так что $\tilde{\xi}(\theta_c) < 0$ (см. дискуссию в работах Кенана [93] и Мубай [92]). В [92] рассматривается также возможность описания особого фазового перехода в двумерной решетке, при котором, в соответствии со строгим результатом Мермина и Вагнера [148], дальний порядок отсутствует во всем интервале температур, однако начальная восприимчивость $\chi_0(\theta)$ имеет особенность вида $(\theta - \theta_c)^{-1}$ (в соответствии с предположением Стенли и Каплана [149] (см. также [8]), сделанным на основе анализа высокотемпературных разложений).

Указанные трудности свидетельствуют, по-видимому, о наличии рассогласования между точной кинематикой и приближенной динамикой при построении аппроксимации (2.85); необходимо учитывать при этом вклад интегрального члена $-i\Gamma_h(t)$. Представило бы интерес также использование в (2.85) продольной корреляционной функции, найденной независимо (без использования (2.22)).

§ 6. Некоторые другие приближения

1. Т. Огучи и Гонма [84] предприняли попытку улучшить приближение Тябликова (2.71), считая оператор J_h точным, но вычисляя коммутаторы в (2.3а) с помощью тябликовской (квазибозевской) кинематики (2.70а). При этом для матричных элементов Ω_k^{11} и Ω_k^{12} получаются в точности те же выражения, что и в низкотемпературном хартри-фоковском приближении (2.60), с той лишь разницей, что все корреляционные функции \bar{n}_k и \bar{m}_k приобретают дополнительный множитель 2σ . Ограничиваясь частным случаем изотропной модели, нетрудно получить спектр в виде (2.89) с множителем нормировки

$$R(\theta) = 1 + \nu/\sigma; \quad (2.92)$$

величины ν и σ определяются уравнениями (2.88).

Легко видеть, что $R(\theta)$ расходится в критической точке при $\theta = \theta_c$, приводя тем самым к бесконечному

значению θ_c ; критерий (2.17) не удовлетворяется, а член θ^3 при низких температурах остается (подробнее см. [84, 99]). Таким образом, «симметризация» расщепления Тябликова путем учета «обменных» спариваний не ведет к его улучшению.

2. Кэллен [86] предложил внести в динамическое уравнение движения для S_k^z дополнительную информацию о спиновой кинематике, используя для этого линейную комбинацию двух представлений для S_k^z через b_k и b_k^+ с одним неопределенным параметром a (см. § 35),

$$S_k^z(a) = \frac{a\sqrt{N}\delta_{k0}}{2} + \frac{1-a}{2\sqrt{N}} \sum_q b_{k+q} b_q^+ - \frac{1+a}{2\sqrt{N}} \sum_q b_q^+ b_{q+k}, \quad (2.93)$$

и затем проводя в операторе J_k всевозможные спаривания по квазибозевской теореме Вика (с дополнительным множителем 2σ) или, что эквивалентно, вычисляя коммутаторы (2.30а) с помощью тябликовской кинематики (2.70а) (см. также [71]).

Учитывая, что $\langle [b_k, b_k^+]_+ \rangle = 1 - 2(\bar{n} - \bar{n}_k)$, так что $(1/N) \sum_k \langle [b_k, b_k^+]_+ \rangle = 1$, получаем, например, в случае ЛО ($\eta = \xi$) линеаризованный оператор J_k^C

$$J_k \rightarrow J_k^C = J_k^T - a\nu V_{kk}(\xi) b_k, \quad E_k^C = E_k^T - a\nu V_{kk}(\xi) \quad (\eta = \xi), \quad (2.94)$$

где J_k^T и E_k^T даются выражениями (2.69) и (2.72). Для изотропной модели $\eta = \xi = 1$ спектр принимает вид (2.89) с ренормирующим множителем

$$R_a^C(\theta) = 1 + a\nu/\sigma, \quad (2.95)$$

причем при $a = 0$ это выражение сводится к приближению Тябликова, а при $a = 1$ — к приближению Т. Огучи — Гонма. Из общих физических соображений (см. [86] и § 35) следует, что зависящий от температуры параметр a должен быть выбран так, чтобы $a \rightarrow 1$ при $\theta \rightarrow 0$ и $a \rightarrow 0$ при $\theta \rightarrow \theta_c$. Таким поведением обладает, например, относительная намагниченность $(\sigma/S) = 2\sigma$, которую использовал Кэллен [86] в качестве параметра a ,

$$R^C(\theta) = 1 + 2\nu. \quad (2.95a)$$

Проведенная процедура восстанавливает в (2.95а) по сравнению с (2.92) требуемую симметрию (2.17) и устраняет расходимость $R(\theta)$ в критической точке $\theta = \theta_c$. Для определения θ_c имеем систему

$$\theta_c = \frac{R^c(\theta_c)}{2F_1(-1)}, \quad R^c(\theta_c)[R^c(\theta_c) - 1] = 2\theta_c[F_1(-1) - 1], \quad (2.96)$$

откуда

$$R^c(\theta_c) = 1 + \frac{F_1(-1) - 1}{F_1(-1)}, \quad \theta_c^c = \theta_c^T + \frac{F_1(-1) - 1}{2F_1^2(-1)}, \quad (2.96a)$$

т. е. точка Кюри повышается по сравнению с теорией Тябликова (2.81а) (при $S > 1/2$ различие становится незначительным); низкотемпературные и критические свойства обеих теорий в основном сходны¹⁾.

Приближение Келлена (2.95) обладает известным произволом по отношению к выбору параметра a . Так, Копланд и Герш [87] показали, что лучшее согласие для термодинамических величин достигается при выборе $a = (\sigma/S)^x$ (x — нечетное целое число для обеспечения критерия (2.17)); в частности, при $x = 3$ имеем $R(\theta_c) = 1$ и $\theta_c = \theta_c^T$.

Свендсену [88] удалось, комбинируя параметры расщепления, добиться исключения кинематического члена θ^3 и согласовать θ_c и χ_0 с высокотемпературными разложениями. Кацура и Хоригучи [91] модифицировали теорию Кэллена, производя «гибридизацию» при расщеплении коммутаторных и антикоммутаторных функций Грина, однако существенного улучшения не получили. Вообще, в строгой теории выбор параметра a , по-видимому, не должен влиять на конечные результаты; исследование вопроса о критериях выбора a (например, с помощью вариационного принципа для свободной энергии) пока не проводилось.

3. Дембинский [89] и независимо Мурджани и Танака [90] (см. также [104]) предложили для изотропного случая способ расщепления, комбинирующий приближе-

¹⁾ Подробный сравнительный анализ теорий Тябликова и Келлена, а также ряда других см. в [99--101].

ния Тябликова [83] и Келлена [86]; в узельном представлении он имеет вид

$$\langle\langle S_f^z b_f, b_g^+ \rangle\rangle \rightarrow \sigma \langle\langle b_f, b_g^+ \rangle\rangle - a(1 - \delta_{fg}) \langle b_f^+ b_f \rangle \langle\langle b_f, b_g^+ \rangle\rangle. \quad (2.97)$$

Расщепление (2.97) основано на соображениях Хьюсона и тер Хаара [150], указавших на необходимость учета (по крайней мере приближенного) дополнительного кинематического свойства (см. § 37) $2 \langle b_g^+ S_f^z b_f \rangle = \langle b_g^+ b_f \rangle$ при $f = g$, вытекающего из (1.25). Соответственно, уравнение движения для G_h в случае ЛО примет вид

$$\left(i \frac{d}{dt} - E_k^C(a) \right) G_k(t) = 2\sigma \delta(t) + a v V_{kk}(\xi) \frac{1}{N} \sum_q G_q(t), \quad (2.97a)$$

где $E_k^C(a)$ дается формулой (2.94). В [89, 90] рассматривался лишь изотропный случай ($\xi = 1$, $V_{hk} = -V_{h0}$) при $a = 2\sigma$; уравнение (2.97a) решалось методом итераций (в качестве нулевого использовалось приближение Кэллена). При этом оказалось, что явно зависящий от t интегральный член в (2.97a) приводит к существенным поправкам во всех корреляционных функциях; в частности, при малых θ они полностью компенсируют член θ^3 , значение θ_C понижается до значения θ_C^T , а критические индексы не меняются.

Заметим, что в фурье-представлении уравнение (2.97a) может быть решено точно, однако фурье-образ $G_h(E)$ вместо простого полюса приобретает сложную аналитическую структуру, что фактически указывает на выход расщепления (2.97) за рамки теории первого порядка (см. ниже § 7 гл. II).

4. Морита с сотрудниками [96] разработали схему расщепления для функций Грина, используя запись уравнений движения с помощью оператора Кубо — Цванцига \mathcal{H}^\times , известного в теории необратимых процессов [15]. Соответствующий формализм получил название «тетрадного», так как оператор \mathcal{H}^\times представляется матрицей с четырьмя индексами, действующей в линейном пространстве, векторами которого являются обычные операторы — матрицы с двумя индексами. В рамках

тетрадной формулировки авторам [96] удалось в низшем «проекционном» приближении воспроизвести результаты ряда теорий первого порядка [83, 84, 86]. Однако метод их получения представляется достаточно сложным, особенно имея в виду его обобщения на более высокие приближения для функций Грина.

Другой метод, развитый Шимицу [97], основан на разложении по ортогональным операторам Фано [152] и также использует представление функций Грина в виде векторов некоторого линейного пространства. Выражение для одночастичной функции Грина представляется в виде цепной дроби, однако спектр магнонов даже в низшем приближении выражается весьма громоздко. Автору [97] также удалось воспроизвести результаты теорий [83, 84, 91, 92], однако общим дефектом методов [95, 97], применявшихся только к изотропному случаю, является, по-видимому, трудность оценки степени точности приближения и некоторое усложнение выкладок (заметим, что выражение для спектра в обоих случаях имеет вид, близкий к (2.2)).

А. Р. Кессель и М. П. Желифонов [79] и позднее Холи и Эрдеш [98] предложили переформулировать построение цепочки уравнений для функций Грина, вводя своеобразный ортонормированный базис в алгебре спиновых операторов, а именно, множество единичных операторов $\{e_f^{mn}\}$ (f — узел решетки, $m, n = -S, \dots, S$, где S — спиновое квантовое число), подчиняющихся простому закону матричного умножения

$$e_f^{mn} e_f^{rs} = e_f^{ms} \delta_{nr}. \quad (2.98)$$

Тогда, например, при $S = 1/2$ имеются три независимых оператора e_f^{12} , e_f^{21} и e_f^{11} (или e_f^{22}), причем

$$S_f^+ = e_f^{21}, \quad S_f^- = e_f^{12}, \quad 2S_f^z = e_f^{22} - e_f^{11}, \quad 1 = e_f^{22} + e_f^{11}. \quad (2.99)$$

Пользуясь свойством (2.98), можно свести уравнение для спиновой функции Грина $\langle\langle e_k^{mn}, e_{-k}^{rs} \rangle\rangle$ к интегральному уравнению для функции Грина более высокого порядка $\langle\langle e_{k-q}^{mn} e_q^{kl}, e_{-k} \rangle\rangle$ и далее — к интегральным уравнениям для соответствующих спектральных интенсивностей.

Например, для $S = 1/2$ и изотропной модели эти уравнения имеют следующий вид [79]:

$$\sum_q (\omega + \omega_{pq}) \Phi_{A_0 B}(\omega) = 0, \quad A_1 = e_{\nu-q}^{12} e_q^{21}, \quad (2.100)$$

$$\sum_q (\omega - \omega_0 + \omega_{pp} - 2\omega_{pq}) \Phi_{A_1 B}(\omega) = 0, \quad A_1 = e_i^{22} e_{j-q}^{11},$$

где $\omega_{pq} = I(q) - I(p - q)$; однако функции Грина восстанавливаются по этим уравнениям неоднозначно.

Более подробный обзор существующих работ по расцеплениям первого порядка можно найти в [99—104].

§ 7. Исключение кинематического члена в модели «легкая ось»

Как уже отмечалось в § 4 гл. II (см. также §§ 33, 37), во всех теориях первого порядка существует трудность, связанная с наличием «кинематического» члена $2(PV)^2$ в низкотемпературном разложении намагнитченности¹⁾; наиболее ярко это проявляется в случае изотропной модели Гейзенберга ($\xi = \eta = 1$), где $(PV)^2 \sim \theta^3$. Указанный член не согласуется с результатами теории Дайсона [105], построенной на бозе-операторах идеальных спин-волн; при построении теории на основе паули-операторов он возникает именно за счет отличия паулиевского коммутатора (1.24) от чисто бозевского. Покажем теперь, что это «аномальное» свойство в свою очередь позволяет компенсировать кинематический член при частичном выходе за рамки теории первого порядка (в духе подхода Ортенбургер [144]).

Рассмотрим выражение (1.59) для величины $E_h(t)$, определяющей формально точное решение для функции Грина $G_h(t)$ в общем случае ЛО ($\xi = \eta$), и выделим в нем наряду со спектром E_h хартри-фоковского типа (2.68) (или (2.66), (2.67)) добавочные члены, явно зависящие от времени t и целиком обязанные небозевской части коммутатора (1.24). Имея в виду лишь область низких температур, вычислим вклад интегрального члена

¹⁾ Эта трудность преодолена лишь в работах [89, 90], однако сделанные в них приближения с учетом кинематических свойств фактически выходят за рамки ОПХФ.

в духе теории возмущений, считая, что одночастичная динамика системы определяется линеаризованными выражениями вида (2.4а) (в случае «легкая ось» $\Omega_k = E_k$). При этом получим

$$[J_k(t), b_k^+(\tau)] = -\frac{1}{N} \sum_{qp} V_{kq} e^{-it(E_{k-q} + E_{p+q} - E_p) + iE_k \tau} [b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}, b_k^+]; \quad (2.101)$$

далее, учитывая, что

$$\frac{1}{t} \int_0^t d\tau e^{-i\omega(t-\tau)} = \frac{1 - e^{-i\omega t}}{i\omega t}, \quad (2.102)$$

находим окончательно

$$E_k(t) = A(k) - \frac{1}{N} \sum_{qp} V_{kq} \frac{1 - e^{-iE_{kqp}t}}{iE_{kqp}t} \frac{\langle [b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}, b_k^+] \rangle}{\langle [b_k, b_k^+] \rangle}, \quad (2.103)$$

где

$$E_{kqp} \equiv E_{k-q} + E_{p+q} - E_p - E_k. \quad (2.103a)$$

Вычисляя входящий в (2.103) средний коммутатор точно, имеем

$$\langle [b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}, b_k^+] \rangle \langle [b_k, b_k^+] \rangle^{-1} = n_p (\delta_{q0} + \delta_{-q, p-k}) - (\epsilon/\sigma \sqrt{N}) \{ \langle b_p^+ b_{p+q} \rho_{-q} \rangle + \langle b_p^+ \rho_{p+q-k} b_{k-q} \rangle \}. \quad (2.104)$$

Приведем далее все операторы в правой части формулы (2.104) к нормальному порядку $\langle b_p^+ b_{p+q} \rho_{-q} \rangle = \langle b_p^+ \rho_{-q} b_{p+q} \rangle + \langle b_p^+ b_p \rangle / \sqrt{N}$, и после этого отбросим высшие корреляционные функции вида $\langle b^+ \rho b \rangle$ (в низшем приближении в духе бозевской теоремы Вика они квадратичны по числам заполнения и малы при $\theta \rightarrow 0$). Учитывая единственное слагаемое, линейное по числам заполнения, и полагая $\sigma \simeq 1/2$, получаем

$$E_k(t) \simeq E_k + \frac{2\epsilon}{N^2} \sum_{qp} V_{kq} n_p \frac{1 - e^{-iE_{kqp}t}}{iE_{kqp}t}; \quad (2.105)$$

здесь E_k дается формулой (2.58), однако

$$n_p \equiv \langle b_p^+ b_p \rangle / 2\sigma \neq n(E_p).$$

Важно заметить, что при вычислении среднего коммутатора в (2.103) в чисто бозевском ($\epsilon = 0$) приближении (2.25) или квазибозевском ($\epsilon = 1$) приближении (2.70), мы пришли бы к хартри-фоковскому выражению $E_k(t) \simeq E_k$, характерному для обычной статистики (в обоих случаях возникающие δ -функции обращают в нуль входящую в (2.103) величину E_{kqp} , а при любом t имеем $\lim_{\omega \rightarrow 0} (i\omega t)^{-1} (1 - e^{-i\omega t}) = 1$).

Таким образом, в выражении (2.105) при $\epsilon = 1$ учтена только *чисто кинематическая* часть интегрального члена (в низшем порядке по температуре), которая в соответствующих теориях первого порядка отбрасывается полностью; ее роль, как показано ниже (см. также [144]), как раз и состоит в компенсации члена θ^3 при малых θ .

Вычислим спектральную плотность $\Phi_k(\omega)$ по формуле (1.60), еще раз используя малость температур при упрощении фактора $\exp(-iE_k(t)t)$:

$$e^{-iE_k(t)t} \simeq e^{-iE_k t} \left\{ 1 - \frac{2}{N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kq} n_p}{E_{kqp}} (1 - e^{-iE_{kqp} t}) \right\}. \quad (2.106)$$

Подставляя (2.106) в (1.60) и далее в (1.40a), получаем для чисел заполнения интегральное уравнение

$$n_k = n(E_k) - \frac{2}{N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kq} n_p}{E_{kqp}} \{ n(E_k) - n(E_{k-q} + E_{p+q} - E_p) \}; \quad (2.107)$$

ограничиваясь первой итерацией, находим для величины $P = (1/N) \sum_k n_k$ следующее выражение:

$$P = P_0 - \frac{2}{N^3} \sum_{kqp} \frac{V_{kq} n_p}{E_{kqp}} \{ n(E_k) - n(E_{k-q} + E_{p+q} - E_p) \}, \quad (2.107a)$$

где $P_0 = (1/N) \sum_k n(E_k)$. Воспользуемся далее теоремой сложения

$$n(\alpha + \beta - \gamma) = n(\alpha) n(\beta) (1 + n(\gamma)) \times \\ \times [n(\gamma) (1 + n(\alpha) + n(\beta)) - n(\alpha) n(\beta)]^{-1}, \quad (2.108)$$

и вновь пренебрежем членами высшего порядка малости при $H \neq 0$ (низкие температуры, малая плотность); тогда

$$P = P_0 - \frac{2}{N^3} \sum_{kqp} \frac{V_{kq}}{E_{kqp}} \{n(E_k)n(E_p) - n(E_{k-q})n(E_{p+q})\}. \quad (2.1076)$$

Ограничимся далее наиболее интересным случаем изотропной модели; для нее спектр E_k при $H = 0$ является бесщелевым, так что основной вклад в сумму (2.1076) при малых θ дают члены с $n(E_k)$ в области малых импульсов $k \approx 0$. Интересуясь лишь низшими поправками по температуре, заменим $E_k \rightarrow E_k^B = A(k)$, $P_0 \rightarrow P_0^B$, а также положим $k = p = 0$ и $q = -p = k$ в множителе V_{kq}/E_{kqp} соответственно в первом и втором слагаемых подынтегрального выражения (2.1076). Тогда, учитывая, что $V_{0q}/E_{0q}^B = 0$, $V_{kk}/E_{kk}^B, -k = 1$, имеем

$$P \simeq P_0^B + 2(P_0^B)^2; \quad P_0^B = \frac{1}{N} \sum_k n(E_k^B) \sim \theta^{3/2} \quad (\xi = \eta = 1). \quad (2.109)$$

Принимая во внимание малость P , получим приближенно

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{2} \frac{1}{1 + 2P} = \\ &= \frac{1}{2} - P_0^B + 2(P_0^B)^2 - 2(P_0^B)^2 + O(P_0^B)^3 + \dots; \end{aligned} \quad (2.110)$$

сравнение с (2.78) показывает, что налицо точная компенсация недайсоновского члена θ^3 при $\theta \rightarrow 0$. Очевидно, что характер сделанных приближений таков, что уравнение для σ вида (2.16) с P из (2.109) теряет применимость в критической области температур. Более последовательное описание модели ЛО будет построено ниже, в § 2 гл. III, где наряду с кинематическим будет учтен и динамический вклад интегрального члена. При этом для компенсации члена θ^3 не возникает необходимости отбрасывать квадраты чисел заполнения,

ГЛАВА III

ТЕОРИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА И АНАЛИЗ ФОРМАЛЬНО ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИ «ЛЕГКАЯ ОСЬ»

§ 1. Спектр и затухание магнонов при низких температурах

Обобщенное приближение Хартри — Фока для одночастичной функции Грина, рассмотренное в гл. II, не учитывает затухания магнонов, вызванного их взаимодействием. Формально это соответствует отбрасыванию интегрального члена $-i\Gamma_h(t)$ в корреляционной функции $R_h(t)$ из (1.52a); остающаяся часть $R_h(0)$ дает лишь ренормировку вещественной части спектра E_h как при низких, так и при высоких температурах.

В настоящем разделе будет проведен приближенный учет вклада интегрального члена $-i\Gamma_h(t)$ (см. [63, 73]); как показано в [63], в пределе больших времен $t \rightarrow \infty$ его действительная и мнимая части определяют соответственно сдвиг и затухание спектра. Вычисление $-i\Gamma_h(t)$ естественно вести в духе теории возмущений во втором порядке по «взаимодействию» J_h [73]; при этом динамика операторов b_h, b_h^+ определяется линеаризованными хартри-фовскими выражениями (2.4a), а кинематика является квазибозевской (2.70). Соответствующие вклады сильно упрощаются, если перейти с помощью $u-v$ -преобразования Н. Н. Боголюбова [119] (см. также § 13) от операторов B_h, B_h^+ к операторам $\mathcal{B}_h, \mathcal{B}_h^+$, составленных аналогично (1.43) из операторов рождения и уничтожения истинных квазичастиц (магнонов) β_h, β_h^+ .

Именно, положим

$$B_k = U_k \mathcal{B}_k, \quad \mathcal{B}_k = \begin{pmatrix} \beta_k \\ \beta_{-k}^+ \end{pmatrix} = U_k^{-1} B_k, \quad (3.1)$$

$$U_k = U_k^* = U_{-k} = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ v_k & u_k \end{pmatrix};$$

это преобразование, вообще говоря, не является каноническим для паули-операторов (в отличие от бозе-операторов [119]), однако дополнительное условие

$$\text{Det } U_k = u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (3.2)$$

обеспечивает совпадение средних значений коммутаторов

$$\begin{aligned} \langle [\beta_k, \beta_{k'}^+] \rangle &= \langle [b_k, b_{k'}^+] \rangle = 2\sigma \delta_{kk'}, \\ \langle [\beta_k, \beta_{k'}] \rangle &= \langle [b_k, b_{k'}] \rangle = 0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

так что в среднем операторы \mathcal{B}_k являются, как и B_k , квазибозевскими,

$$\langle [\mathcal{B}_k, \mathcal{B}_{k'}^+] \rangle = \langle [B_k, B_{k'}^+] \rangle = \delta_{kk'} 2\sigma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Определим преобразование U_k следующим образом. Введем матричную функцию Грина $\mathcal{G}_k(t)$, построенную на операторах квазичастиц $\mathcal{B}_k, \mathcal{B}_k^+$ аналогично (1.45),

$$\mathcal{G}_k(t) = \langle \langle \mathcal{B}_k(t), \mathcal{B}_k^+ \rangle \rangle = U_k^{-1} G_k(t) U_k^{-1}; \quad (3.5)$$

производя соответствующее преобразование в уравнении движения (1.54), получим

$$i\dot{\mathcal{G}}_k(t) = \delta(t) \langle [\mathcal{B}_k, \mathcal{B}_k^+] \rangle + (\Pi_k - i\Lambda_k(t)) \mathcal{G}_k(t), \quad (3.6)$$

где

$$\Pi_k = U_k^{-1} \Omega_k U_k, \quad \Lambda_k(t) = U_k^{-1} \Gamma_k(t) U_k. \quad (3.7)$$

Потребуем теперь, чтобы матрица Π_k , соответствующая обобщенному приближению Хартри — Фока для $\mathcal{G}_k(t)$, имела диагональный вид

$$\Pi_k^{11} = -\Pi_k^{22} = E_k, \quad \Pi_k^{12} = -\Pi_k^{21} = 0; \quad (3.8)$$

таким путем мы приходим к системе уравнений

$$\begin{cases} (u_k^2 + v_k^2) \Omega_k^{11} + 2u_k v_k \Omega_k^{12} = E_k, \\ 2u_k v_k \Omega_k^{11} + (u_k^2 + v_k^2) \Omega_k^{12} = 0, \end{cases} \quad (3.9)$$

решение которой при условии (3.2) в точности дается выражениями (2.9) (при этом в случае «легкая ось» $u_k = 1$, $v_k = 0$, так что $U_k \equiv 1$).

Далее, нетрудно видеть, что выражение для $-i\Lambda_k(t)$ по виду совпадает с $-i\Gamma_k(t)$ из (1.56), если в последнем произвести замену B_k на $\mathcal{B}_k = U_k^{-1} B_k$ и J_k на $\mathcal{J}_k = U_k^{-1} J_k$, причем

$$\mathcal{J}_k \equiv \begin{pmatrix} j_k \\ -j_{-k}^+ \end{pmatrix} = U_k^{-1} J_k, \quad (3.10)$$

$$j_k = u_k J_k + v_k J_{-k}^+ = (u_k + v_k) \sum_{n=1}^4 j_k^{(n)},$$

где

$$\begin{aligned} j_k^{(1)} &= -\frac{1}{2N} \sum_{qp} \{ v_{kq}^{(+)} (u_p u_{p+q} \beta_p^+ \beta_{p+q} \beta_{p-q} + v_p v_{p+q} \beta_{p+q} \beta_p^+ \beta_{p-q}) - \\ &\quad - v_{kq}^{(-)} u_p v_{p+q} \beta_{p+q} \beta_{-p} \beta_{-k+q}^+ \}, \\ j_k^{(2)} &= \frac{1}{2N} \sum_{qp} \{ v_{kq}^{(-)} (u_p u_{p+q} \beta_p^+ \beta_{p+q} \beta_{-k+q}^+ + v_p v_{p+q} \beta_{p+q} \beta_p^+ \beta_{-k+q}^+) - \\ &\quad - v_{kq}^{(+)} u_p v_{p+q} \beta_p^+ \beta_{-p-q}^+ \beta_{k-q} \}, \\ j_k^{(3)} &= -\frac{1}{2N} \sum_{qp} v_{kq}^{(+)} u_p v_{p+q} \beta_{p+q} \beta_{-p} \beta_{k-q}, \\ j_k^{(4)} &= \frac{1}{2N} \sum_{pq} v_{kq}^{(-)} u_p v_{p+q} \beta_p^+ \beta_{-p-q}^+ \beta_{-k+q}^+; \end{aligned} \quad (3.11)$$

в частном случае модели ЛО с $\eta = \xi$ имеем $v_{kq}^{(-)} \equiv 0$, $v_{kq}^{(+)} = 2V_{kq}(\xi)$, так что $j_k = j_k^{(1)} = J_k$. В общем случае $\eta \neq \xi$ потенциалы взаимодействия квазичастиц $v_{kq}^{(\pm)}$ удобно представить в виде

$$v_{kq}^{(\pm)} = I(0) \sqrt{\eta - \xi} \{ \Psi_{kq}^{(1)} (u_{k-q} - v_{k-q}) \pm \sqrt{\eta - \xi} \Psi_{kq}^{(2)} (u_{k-q} + v_{k-q}) \}, \quad (3.12)$$

где величины $\Psi_{kq}^{(1, 2)}$ даются выражениями

$$\Psi_{kq}^{(1)} = \frac{V_{kq}(\eta)(u_k - v_k)^2}{I(0)\sqrt{\eta - \xi}} = \frac{\Omega_k^{11} + \Omega_k^{12}}{E_k\sqrt{\eta - \xi}}(\gamma_q - \eta\gamma_{q-k}),$$

$$\Psi_{kq}^{(2)} = \frac{V_{kq}(\xi)}{I(0)(\eta - \xi)} = \frac{\gamma_q - \xi\gamma_{q-k}}{\eta - \xi}, \quad (3.13)$$

причем при $H=0$ в спин-волновом и тябликовском приближениях $(\Omega_k^{11} + \Omega_k^{12})/E_k = (A(k) + C(k))/E_k^B = (1 - \xi\gamma_k)/e_k$, так что для бесщелевой модели ЛП ($\eta=1$, $\xi \neq 1$) величины $\Psi_{kq}^{(1, 2)}$ имеют конечные пределы при $k \rightarrow 0$; в частности, для ПК-решетки

$$\Psi_{kq}^{(1)} \simeq \frac{\gamma_q - \gamma_{q-k}}{\sqrt{1 - \gamma_k}} \simeq -\frac{\sqrt{6}}{3} \frac{(k, q)}{k},$$

$$\Psi_{kq}^{(2)} \simeq \gamma_q \simeq 1 - \frac{q^2}{6} \quad (k \rightarrow 0). \quad (3.13a)$$

Вычислим теперь вклад интегрального члена $-i\Lambda_k(t)$, используя во втором порядке приближенную динамику и кинематику для операторов β_k , β_k^+ :

$$\beta_k(t) \simeq \beta_k \exp(-iE_k t), \quad [\beta_k, \beta_{k'}^+] \simeq 2\sigma\delta_{kk'}. \quad (3.14)$$

Соответствующие матричные элементы имеют вид

$$\Lambda_k^{11}(t) = (\Lambda_k^{22}(t))^* = \frac{1}{2\sigma} \int_0^t d\tau e^{iE_k(t-\tau)} \langle [j_k(t), j_k^+(\tau)] \rangle_c,$$

$$\Lambda_k^{12}(t) = (\Lambda_k^{21}(t))^* = \frac{1}{2\sigma} \int_0^t d\tau e^{-iE_k(t-\tau)} \langle [j_k(t), j_{-k}(\tau)] \rangle_c. \quad (3.15)$$

Вычисляя коммутаторы в указанном приближении (пример такого вычисления см. в примечании 7) и учитывая, что

$$\int_0^t d\tau e^{i\omega(t-\tau)} = \frac{1 - e^{i\omega t}}{(-i\omega)} \rightarrow iP \frac{1}{\omega} + \pi\delta(\omega) \quad (t \rightarrow \infty), \quad (3.16)$$

получаем в пределе больших времен

$$\Lambda_k^{11}(t) \rightarrow \Lambda_k^{11} = E_k(i\chi_k^{(1)} + \lambda_k^{(1)}),$$

$$\Lambda_k^{12}(t) \rightarrow \Lambda_k^{12} = E_k(i\chi_k^{(2)} + \lambda_k^{(2)}). \quad (3.17)$$

Тогда уравнение (3.6) для $\mathcal{G}_k(t)$ принимает вид, сходный с (2.1)

$$i\dot{\mathcal{G}}_k(t) = \delta(t) \langle [\mathcal{B}_k, \mathcal{B}_k^+] \rangle + \Sigma_k \mathcal{G}_k(t), \quad (3.18)$$

где Σ_k — матрица с комплексными элементами:

$$\begin{aligned} \Sigma_k^{11} &= -(\Sigma_k^{22})^* = E_k(1 + \kappa_k^{(1)} - i\lambda_k^{(1)}), \\ \Sigma_k^{12} &= -(\Sigma_k^{21})^* = E_k(\kappa_k^{(2)} - i\lambda_k^{(2)}). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Полюсы $\mathcal{G}_k(E)$ и ренормированный спектр магнонов \mathcal{E}_k определяются дисперсионным уравнением вида (2.6), в котором вещественную матрицу Ω_k следует заменить комплексной Σ_k ; имеем тогда

$$\mathcal{E}_k = \pm E_k \sqrt{(1 + \kappa_k^{(+)})(1 + \kappa_k^{(-)}) - (\lambda_k^{(2)})^2} - iE_k \lambda_k^{(1)}. \quad (3.20)$$

Здесь величины $\kappa_k^{(\pm)} = \kappa_k^{(1)} \pm \kappa_k^{(2)}$ и $\lambda_k^{(2)}$ определяют ренормировку и сдвиг вещественной части спектра, а $\lambda_k^{(1)}$ — его мнимую часть (или относительное затухание); при этом величина затухания $\Gamma_k \equiv E_k \lambda_k^{(1)} \geq 0$ при всех k , так что фурье-образ $\mathcal{G}_k(E)$ запаздывающей функции Грина имеет полюсы лишь в нижней полуплоскости E и аналитичен в верхней, как и должно быть в соответствии с общей теорией (см. § 26 п. б, а также § 29). Очевидно также, что для бесчелевых моделей типа ЛП и Г все поправки к «затравочному» спектру E_k (вещественные и мнимые) стремятся к нулю вместе с E_k при $k \rightarrow 0$; этот результат находится в соответствии с общим принципом Адлера [165] (см., например, в этой связи [162, 221])¹⁾.

¹⁾ Согласно этому принципу матричные элементы для процессов рассеяния с участием бесчелевых (голдстоуновских) частиц должны обращаться в нуль при учете законов сохранения энергии и импульса, если импульс одной из гольдстоуновских частиц стремится к нулю.

Выражения для величин $\kappa_k^{(1,2)}$ и $\lambda_k^{(1,2)}$ имеют такой вид:

$$\begin{aligned} \kappa_k^{(1)} = & \frac{\eta - \xi}{1 - \xi \gamma_k} \frac{(2\sigma)^2}{2N^2} \times \\ & \times P \sum_{pq} \left\{ \left[\frac{(A_{kqp}^{(1)} + \sqrt{\eta - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2}{\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}} - \frac{(A_{kqp}^{(1)} - \sqrt{\eta - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}} \right] N_{kqp} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{3} \left[\frac{(B_{kqp}^{(1)} + \sqrt{\eta - \xi} B_{kqp}^{(2)})^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}} - \frac{(B_{kqp}^{(1)} - \sqrt{\eta - \xi} B_{kqp}^{(2)})^2}{\varepsilon_k + \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}} \right] M_{kqp} \right\}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \kappa_k^{(2)} = & \frac{\eta - \xi}{1 - \xi \gamma_k} \frac{(2\sigma)^2}{2N^2} P \sum_{pq} \left\{ [(A_{kqp}^{(1)})^2 - (\eta - \xi)(A_{kqp}^{(2)})^2] \times \right. \\ & \times \left[\frac{1}{-\varepsilon_k - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}} - \frac{1}{-\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}} \right] N_{kqp} - \\ & - \frac{1}{3} [(B_{kqp}^{(1)})^2 - (\eta - \xi)(B_{kqp}^{(2)})^2] \times \\ & \times \left[\frac{1}{-\varepsilon_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}} - \frac{1}{-\varepsilon_k + \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}} \right] M_{kqp} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \lambda_k^{(1)} = & \pi \frac{\eta - \xi}{1 - \xi \gamma_k} \frac{(2\sigma)^2}{2N^2} \sum_{pq} \left\{ [(A_{kqp}^{(1)} + \sqrt{\eta - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2 \times \right. \\ & \times \delta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}) - \\ & - (A_{kqp}^{(1)} - \sqrt{\eta - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q})] N_{kqp} + \\ & \left. + \frac{1}{3} (B_{kqp}^{(1)} + \sqrt{\eta - \xi} B_{kqp}^{(2)})^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}) M_{kqp} \right\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} \lambda_k^{(2)} = & \pi \frac{\eta - \xi}{1 - \xi \gamma_k} \frac{(2\sigma)^2}{2N^2} \sum_{pq} \left\{ [(A_{kqp}^{(1)})^2 - (\eta - \xi)(A_{kqp}^{(2)})^2] \times \right. \\ & \times [\delta(-\varepsilon_k - \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}) - \\ & - \delta(-\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q})] N_{kqp} + \\ & + \frac{1}{3} [(B_{kqp}^{(1)})^2 - (\eta - \xi)(B_{kqp}^{(2)})^2] \times \\ & \times \delta(-\varepsilon_k + \varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q}) M_{kqp} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Здесь

$$\begin{aligned} N_{kqp} &= n_p(1 + n_{p+q})(1 + n_{k-q}) - (1 + n_p)n_{p+q}n_{k-q}, \\ M_{kqp} &= (1 + n_p)(1 + n_{p+q})(1 + n_{k-q}) - n_p n_{p+q} n_{k-q}; \\ n_p &= (e^{E_p/\theta} - 1)^{-1}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} A_{kqp}^{(1,2)} &= \Psi_{kq}^{(1,2)}(u_{k-q} \mp v_{k-q})(u_p u_{p+q} + v_p v_{p+q}) + \\ &\quad + \Psi_{k, k-p-q}^{(1,2)}(u_{p+q} \mp v_{p+q})(u_p u_{k-q} + v_p v_{k-q}) \mp \\ &\quad \mp \Psi_{k, k+p}^{(1,2)}(u_p \mp v_p)(u_{p+q} v_{k-q} + v_{p+q} u_{k-q}), \\ B_{kqp}^{(1,2)} &= \Psi_{kq}^{(1,2)}(u_{k-q} \mp v_{k-q})(u_p v_{p+q} + v_p u_{p+q}) + \\ &\quad + \Psi_{k, k-p-q}^{(1,2)}(u_{p+q} \mp v_{p+q})(u_p v_{k-q} + v_p u_{k-q}) \pm \\ &\quad \pm \Psi_{k, k+p}^{(1,2)}(u_p \mp v_p)(u_{p+q} v_{k-q} + v_{p+q} u_{k-q}). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Общее исследование полученных выражений при произвольных значениях ξ , η во всей области температур (включая $\theta = 0$ и $\theta = \theta_c$) даже в случае малых k весьма затруднительно; мы ограничимся лишь важными частными случаями.

Модель «легкая ось» (ЛО). Производя предельный переход $\eta \rightarrow \xi$ в выражениях (3.21)–(3.26), получим для модели ЛО

$$\kappa_k^{(+)} = \kappa_k^{(-)} = \kappa_k = -\frac{(2\sigma)^2}{2N^2} P \sum_{pq} \frac{A_{kqp}^2(\xi)}{\epsilon_{kqp}} N_{kqp}, \quad (3.27)$$

$$\lambda_k^{(2)} \equiv 0, \quad \lambda_k^{(1)} = \lambda_k = \pi \frac{(2\sigma)^2}{2N^2} \sum_{pq} A_{kqp}^2(\xi) \delta(\epsilon_{kqp}) N_{kqp}, \quad (3.28)$$

где $A_{kqp}(\xi) = V_{kqp}(\xi)/I(0) \sqrt{1 - \gamma_k}$, $\epsilon_{kqp} = 2E_{kqp}/I(0)$; $V_{kqp}(\xi)$ — симметризованный потенциал Дайсона [105] (см. (2.59)) а величина E_{kqp} дается формулой (2.103а).

Для частного случая изотропной модели Гейзенберга ($\eta = \xi = 1$) выражения вида (3.27), (3.28) были впервые получены Мори и Кавасаки [126] на основе уравнений движения для спиновых операторов, а также методом функций Грина в работах С. В. Тябликова и

Е. М. Сорокиной [153] (для спина $1/2$) и Балкара [154] (для произвольного спина), усовершенствовавшего методику расщеплений Маршалла и Мэррея [155] (см. также работу Кука и Герша [156]). Харрис [157] и позднее Уонг [158] получили те же результаты с помощью диаграммной техники для квазибозонного гамильтониана Дайсона [105]. Метод функций Грина в модели Дайсона также приводит во втором порядке теории возмущений к массовому оператору с действительной и мнимой частями (3.27) и (3.28), но в линейном приближении по плотности магнонов $N_{kqp} \simeq n_p$ (Тахир-Кели и тер Хаар [159], С. В. Тябликов и Е. Н. Яковлев [160]).

При низких температурах, когда $\theta \rightarrow 0$, $N_{kqp} \simeq n_p$ и $\epsilon_k \simeq \epsilon_k^B$, относительный сдвиг спектра κ_k в пределе $k \rightarrow 0$ дает лишь экспоненциально малые поправки по θ при $\xi \neq 1$; при $\xi = 1$ спектр становится бесщелевым, и κ_k приводит к степенным поправкам. Полагая

$$\sqrt{1 - \gamma_k} \simeq k / \sqrt{6}, \quad A_{kqp}(1) \approx (k, p)/3, \\ \epsilon_{kqp} \simeq -(p + q, q)/3,$$

имеем

$$\text{Re } \mathcal{E}_k \simeq E_k^B(1 + \kappa), \quad \kappa = -a\Gamma(5/2)\zeta(5/2)(\theta/\theta_C)^{5/2}, \quad (3.29)$$

где $a > 0$ — множитель порядка единицы, что по существу совпадает с ренормировкой, полученной в низко-температурном приближении Хартри—Фока ¹⁾ (см. (2.67)).

Что касается относительного затухания λ_k , то при $\xi = 1$ для слабовозбужденных магнонов с $\epsilon_k \gg \theta$ имеем ²⁾, считая $N_{kqp} \simeq n_p$,

$$\lambda_k \approx \frac{\pi}{2N^2} \sum_{qp} A_{kqp}^2(1) \delta(\epsilon_{kqp}) n_p \sim k\theta^{5/2}, \quad \Gamma_k = E_k \lambda_k \sim k^3 \theta^{5/2}. \quad (3.30)$$

¹⁾ Выбор самосогласованного (тябликовского) спектра $\epsilon_k = \epsilon_k^T$ в правых частях (3.27) и (3.28) дает те же результаты при малых θ , но приводит к расходимости $1/\sigma$ для κ_k и λ_k вблизи θ_C , см. ниже § 2 гл. III.

²⁾ Дополнительная степень k в λ_k по сравнению с κ_k из (3.29) обязана тому, что $\delta(\epsilon_{kqp}) \sim \delta[(k - p - q, q)] \rightarrow 0$ при $k \rightarrow 0$, тогда как ϵ_{kqp} стремится к конечному пределу.

Для сильновозбужденных магнонов с $\epsilon_k \ll \theta$ общее выражение (3.28) может быть преобразовано с использованием свойства

$$n_{k-q} n_{p+q} = (1 + n_{k-q} + n_{p+q}) n(\epsilon_{k-q} + \epsilon_{p+q});$$

при наличии в подынтегральном выражении δ -функций вида $\delta(\epsilon_{k-q} + \epsilon_{p+q} - \epsilon_p \pm \epsilon_{k-q})$, получаем

$$\begin{aligned} n_p - n(\epsilon_{p+q} + \epsilon_{k-q}) &= n_p - n(\epsilon_p \pm \epsilon_k) = \\ &= n_p [1 + n(\epsilon_p \pm \epsilon_k)] [1 + n(\pm \epsilon_k)]^{-1}. \end{aligned}$$

Учитывая, что $n_k \gg 1$ при $\epsilon_k \ll \theta$, так что $1 + n(\pm \epsilon_k) \simeq \pm n(\epsilon_k) \simeq \pm (\theta/\epsilon_k)$, имеем окончательно

$$\begin{aligned} \lambda_k \simeq \frac{\epsilon_k}{\theta} \frac{\pi}{N^2} \sum_{pq} \frac{(k, p)^2}{k^2} \delta[(k - p - q, q)] n_p (1 + 2n_{p+q}) \times \\ \times (1 + n(\epsilon_p + \epsilon_k)). \quad (3.31) \end{aligned}$$

Вычисления, проведенные Харрисом [157], показывают, что при $H = 0$, $\epsilon_k \sim k^2$ величина λ_k имеет вид

$$\lambda_k \sim k^2 \theta^2 [A + B \ln(\epsilon_k/\theta) + C \ln^2(\epsilon_k/\theta)] \quad (\epsilon_k \ll \theta), \quad (3.32)$$

(A, B, C — численные множители порядка единицы¹⁾); таким образом, в соответствии с общим результатом [145] затухание

$$\Gamma_k = E_k \lambda_k \sim k^4 \theta^2 [A + B \ln(\epsilon_k/\theta) + C \ln^2(\epsilon_k/\theta)] \quad (\epsilon_k \ll \theta) \quad (3.32a)$$

пропорционально квадрату невозмущенного спектра E_k , так что при малых k магноны являются «хорошо определенными» элементарными возбуждениями (голдстоуновскими модами).

Наличие в затухании логарифмических членов (первые найденных в работе В. Н. Кашеева и М. А. Кривоглаза [161], см. также [11]) было поставлено под сомнение в гидродинамической теории спиновых волн Халь-

¹⁾ Работы [153], а также [156] приводят к правильному результату (3.30) в пределе $\epsilon_k \gg \theta$, однако в обратном пределе $\epsilon_k \ll \theta$ они не обладают достаточной точностью и дают $\lambda_k \sim \theta^3$.

перина и Хоэнберга [125], опирающейся на разложение по степеням градиента спиновой плотности. В дальнейшем Уонг [158] устранил логарифмическую сингулярность в затухании, введя внешнее магнитное поле H , снимающее пространственное вырождение системы и расходимость n_k при $k = 0$. При этом λ_k согласно [158] приобретает вид

$$\lambda_k \approx k^2 \theta^2 F(k^2, R), \quad R = h/\varepsilon_k \approx h/k^2, \quad (3.33)$$

где $F(k^2, R)$ — весьма сложная функция, определяющая часть фазового пространства, доступную для рассеянных магнонов. В частности, при $H = 0$ величина $R = 0$ при любом $k \neq 0$, причем

$$F(k^2, 0) = A + B \ln(\varepsilon_k/\theta) + C \ln^2(\varepsilon_k/\theta)$$

в точном соответствии с результатом Харриса [157]. Однако при $H \neq 0$, $k \rightarrow 0$ отношение $R \rightarrow \infty$, причем

$$F(k^2, R) \simeq A' + B' [1 - \ln(h/\theta)]^2 + (1/R)[C' + \ln(h/\theta)] \quad (3.33a)$$

(A' , B' , C' — численные множители порядка единицы); таким образом, при любом сколь угодно малом H функция $F(k^2, R)$ остается конечной в пределе $k \rightarrow 0$. Важно заметить, что при наложении внешнего поля характер импульсной и температурной зависимости λ_k не изменяется (с точностью до логарифмических членов), так как H не входит в динамические величины V_{kqp} и ε_{kqp} , определяющие матричные элементы четырехмагнонного рассеяния. Кроме того, согласно [158] при увеличении h вблизи $k = 0$ затухание λ_k также возрастает, однако с увеличением k положение меняется.

Модель «легкая плоскость» (ЛП). Интересуясь лишь низшими по степеням k поправками к бесщелевому спектру при $\eta = 1$, $\xi \neq 1$, заметим, что в пределе $k \rightarrow 0$ величины $\kappa_k^{(\pm)}$ имеют конечные значения $\kappa^{(\pm)}$, тогда как $\lambda_k^{(2)}$ обращается в нуль из-за наличия в подынтегральном выражении (3.24) дельта-функций. Пренебрежем поэтому величиной $(\lambda_k^{(2)})^2$ по сравнению с $(1 + \kappa_k^{(+)}) (1 + \kappa_k^{(-)})$ в ренормирующем факторе (3.20); для предельных

значений $\kappa^{(\pm)}$ получим выражения

$$\kappa^{(-)} \approx 2 \frac{(2\sigma)^2}{N^2} P \sum_{pq} \left\{ \frac{(A_{kqp}^{(1)})^2 N_{kqp}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_q} - \frac{1}{3} \frac{(B_{kqp}^{(1)})^2 M_{kqp}}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_q} \right\}, \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \kappa^{(+)} \approx & 2(1 - \xi) \frac{(2\sigma)^2}{N^2} \times \\ & \times P \sum_{pq} \left\{ \frac{(A_{kqp}^{(2)})^2 N_{kqp}}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_q} - \frac{1}{3} \frac{(B_{kqp}^{(2)})^2 M_{kqp}}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_q} \right\}, \end{aligned}$$

где под $A_{kqp}^{(1,2)}$, $B_{kqp}^{(1,2)}$ понимаются их предельные значения в смысле (3.13). Величина $\lambda_k^{(1)}$ также стремится к нулю при $k \rightarrow 0$, так что и в случае ЛП магныны являются «хорошо определенными» элементарными возбуждениями.

Имея в виду лишь случай низких температур $\theta \ll \theta_c$, положим всюду $\sigma \approx 1/2$, $\varepsilon_k \simeq \varepsilon_k^B$; для слабо возбужденных магнынов ($\varepsilon_k \gg \theta$) можно упростить выражения (3.21) — (3.24), считая $N_{kqp} \approx n_p$, $M_{kqp} \approx 1$. Для сильно возбужденных магнынов ($\varepsilon_k \ll \theta$, $\sqrt{1 - \xi} k \ll \theta/\theta_c \ll 1$) выражение (3.23) удобно преобразовать, используя наличие дельта-функций и свойства бозевских функций расщепления

$$\begin{aligned} \lambda_k^{(1)} \simeq & \frac{E_k^B}{\theta} \frac{\pi}{2N^2} \sum_{pq} \{ (A_{kqp}^{(1)} + \sqrt{1 - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2 \times \\ & \times \delta(\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}) + \\ & + (A_{kqp}^{(1)} - \sqrt{1 - \xi} A_{kqp}^{(2)})^2 \delta(-\varepsilon_k + \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}) \} N_{kqp} + \\ & + \frac{\pi}{6N^2} \sum_{pq} (B_{kqp}^{(1)} + \sqrt{1 - \xi} B_{kqp}^{(2)})^2 \times \\ & \times \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_{k-q}) M_{kqp}, \quad (3.35) \end{aligned}$$

где

$$N_{kqp} = n_p (1 + n_{p+q} + n_{k-q}) (1 + n(\varepsilon_{p+q} + \varepsilon_{k-q})).$$

Вновь, как и для случая ЛО, затухание Γ_k определяется квадратом невозмущенного спектра E_k (в соответствии с работой [145]).

1. Низкие температуры и слабая анизотропия ($\theta \ll \theta_c$, $1 - \xi \ll 1$). Оценим в этом случае $\kappa^{(\pm)}$ и $\lambda_k^{(1)}/E_k$ в изотропном пределе, полагая, в духе теории возмущений по малости анизотропии, $\xi = 1$ в правых частях (3.34) и (3.35). При этом $u_p = 1$, $v_p = 0$, $e_p = 1 - \gamma_p$, так что в линейном приближении по плотности аналогично (3.29) имеем

$$\kappa^{(+)} \simeq 0, \quad \kappa^{(-)} = \frac{2}{N^2} \sum_{pq} \frac{A_{kqp}^2 (1) n_p}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_q} \sim \left(\frac{\theta}{\theta_c} \right)^{5/2}. \quad (3.36)$$

Выражение для $\lambda_k^{(1)}$ в наиболее интересном случае сильно возбужденных магновов в изотропном пределе имеет вид ($e_k = 1 - \gamma_k$, $E_k = (I(0)/2) \sqrt{1 - \xi} \sqrt{1 - \gamma_k}$):

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_k^{(1)}}{E_k} \simeq \frac{\pi}{\Theta N^2} \sum_{pq} \frac{(k, p)^2}{k^2} n_p (1 + 2n_{p+q}) \times \\ \times \{ (1 + n(\varepsilon_p + e_k)) \delta[(k - p - q, q)] + \\ + (1 + n(\varepsilon_p - e_k)) \delta[(k - p - q, q) - k^2] \}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Полученное выражение по виду очень близко к (3.31), которое оценивалось в [157]; на этот раз импульсная зависимость Γ_k определяется квадратом спектра, линейного по k при $\xi \neq 1$, так что с точностью до логарифмических членов при $H = 0$ имеем

$$\Gamma_k = E_k \lambda_k^{(1)} \sim E_k^2 \theta^2 \sim (1 - \xi) k^2 \theta^2, \quad (3.38)$$

что согласуется с результатами гидродинамической теории спиновых волн [125] (см. также [123]).

2. Нулевая температура, произвольная анизотропия ($\theta = 0$, $-1 \leq \xi \leq 1$). В этом случае $N_{kqp} = \mathcal{N}_{kqp} = 0$, $M_{kqp} = 1$, и формулы (3.21) — (3.24) принимают вид

$$\begin{aligned} \kappa^{(-)} &= - \frac{2}{3N^2} P \sum_{pq} \frac{(B_{kqp}^{(1)})^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_q}, \\ \kappa^{(+)} &= - \frac{2(1 - \xi)}{3N^2} P \sum_{pq} \frac{(B_{kqp}^{(2)})^2}{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+q} + \varepsilon_q}, \\ \lambda_k^{(1)} &\simeq \frac{\pi}{6N^2} \sum_{pq} (B_{kqp}^{(1)} + \sqrt{1 - \xi} B_{kqp}^{(2)})^2 \times \\ &\quad \times \delta(e_k - \varepsilon_p - \varepsilon_{p+q} - e_{k-q}). \end{aligned} \quad (3.39)$$

В изотропном пределе $\xi = 1$, $B_{kqp}^{(1,2)} = 0$, и «аномальные» сдвиг и затухание отсутствуют; поэтому вблизи $\xi = 1$ можно рассматривать величины $\kappa^{(\pm)}$ как малые. Вычисление $\lambda_k^{(1)}$ при $k \rightarrow 0$ можно провести, аппроксимируя $B_{kqp}^{(1,2)}$ их предельными значениями при малых k , q и p (малость q и p при $k \rightarrow 0$ обеспечивается наличием δ -функций в (3.39)). Используя значение $\epsilon_k = \sqrt{1 - \xi} \times \sqrt{1 - \gamma_k}$, а также приближенные выражения

$$u_k^2 \approx v_k^2 \approx -u_k v_k \approx \frac{\sqrt{1 - \xi}}{4 \sqrt{1 - \gamma_k}},$$

$$(u_k + v_k)^2 = (u_k - v_k)^{-2} \approx \frac{\sqrt{1 - \gamma_k}}{\sqrt{1 - \xi}},$$

получаем

$$\lambda_k^{(1)} \simeq (1 - \xi) k^4, \quad \Gamma_k \sim (1 - \xi)^{3/2} k^5, \quad (3.40)$$

что совпадает с известным результатом С. Т. Белева [61] для неидеального бозе-газа при нуле температуры; видно, что в изотропном пределе $\xi = 1$ аномальное затухание, как и должно быть, обращается в нуль (см. также [162]).

§ 2. Обобщенная теория Тябликова для модели «легкая ось»

Как показано в § 1 гл. III, вычисление вклада интегрального члена во втором порядке по J_k в пределе $t \rightarrow \infty$ приводит лишь к учету сдвига и затухания спектра, однако в целом не улучшает термодинамические свойства теории. Оказывается, однако, что существование формально точного решения (1.58) для $G_k(t)$ в частном случае модели ЛО позволяет учесть вклад интегрального члена при всех значениях t (см. [63, 72]) и приводит не только к уточнению спектра, но и к улучшению термодинамических свойств теории Тябликова (см. § 32, а также § 4 гл. II).

Рассмотрим выражение (1.59а) для $E_k(t)$ и произведем в интегральном члене самосогласованный учет динамики и кинематики операторов Паули. Для этого вычислим приближенно коммутаторы в (1.59в), аппрок-

симируя, как и в § 1 гл. III, временную зависимость операторов $b_k(t)$ (которые считаются здесь квазибозевскими) линейризованными выражениями

$$b_k(t) \simeq b_k \exp(-iE_k t), \quad [b_k, b_k^+] \simeq 2\sigma \delta_{kk^*}; \quad (3.41)$$

здесь E_k — ренормированные энергии магнонов в ОПХФ (мы будем в дальнейшем иметь в виду приближение Келлена E_k^C из (2.94). Для оператора $J_k(t - \tau)$ имеем приближенное выражение

$$J_k(t - \tau) \simeq \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{qp} V_{kq}(\xi) \exp[-i(E_{k-q} + E_{p+q} - E_p) \times \\ \times (t - \tau)] \{ (1 - a) b_{p+q} b_p^+ - (1 + a) b_p^+ b_{p+q} \} b_{k-q}; \quad (3.42)$$

тогда для $-i(d/d\tau) R_k(t - \tau)$ получаем

$$-i \frac{d}{d\tau} R_k(t - \tau) \simeq \frac{a^2}{N^2} \sum_{qp\bar{q}\bar{p}} V_{kq}(\xi) V_{k\bar{q}}(\xi) e^{-iE_{kqp}(t-\tau)} \times \\ \times \langle [b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}, b_{k-\bar{q}}^+ b_{\bar{p}+\bar{q}}^+ b_{\bar{p}}] \rangle_c \langle [b_k, b_k^+] \rangle^{-1}, \quad (3.43)$$

где E_{kqp} дается формулой (2.103а), а индекс «с» указывает на связный характер систем спариваний (диаграмм), возникающих при вычислении (3.43) по квазибозевской теореме К. Блоха — Вика.

В принятом приближении находим

$$\langle [b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}, b_{k-\bar{q}}^+ b_{\bar{p}+\bar{q}}^+ b_{\bar{p}}] \rangle_c \simeq (2\sigma)^3 \delta_{p\bar{p}} (\delta_{q\bar{q}} + \delta_{k-q, \bar{p}+\bar{q}}) N_{kqp}, \quad (3.44)$$

где N_{kqp} совпадает по виду с формулой (3.25), однако $n_p \equiv \langle b_p^+ b_p \rangle / 2\sigma \neq n(E_p)$. Учитывая далее, что

$$-\frac{i}{t} \int_0^t d\tau \tau e^{-i\omega(t-\tau)} = \\ = -\frac{1}{\omega} - i \frac{1 - e^{-i\omega t}}{\omega^2 t} = -\frac{1}{\omega} \left(1 - \frac{\sin \omega t}{\omega t} \right) - i \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2 t}, \quad (3.45)$$

находим окончательно

$$E_k(t) = E_k^C - \frac{2\sigma^2 a^2}{N^2} \sum_{qp} V_{kqp}^2(\xi) \left\{ \frac{1}{E_{kqp}} + i \frac{1 - e^{-iE_{kqp}t}}{E_{kqp}^2 t} \right\} N_{kqp}, \quad (3.46)$$

где налицо явная зависимость от t добавочного к E_k^C слагаемого; здесь $V_{kqp}(\xi)$ — симметризованный дайсоновский потенциал (2.59) (при этом величины V_{kqp} , E_{kqp} и N_{kqp} инвариантны относительно замены индексов $q \rightarrow -q + k - p$).

Важно отметить, что линеаризованные выражения для J_k вида (2.4), применявшиеся при построении ОПХФ, точно аннулировали интегральный член (1.59а); оценка временной корреляционной функции $R_k(t - \tau)$, входящей в интегральный член (1.59), с помощью выражения вида (2.101), приводила к появлению зависящего от t слагаемого в $E_k(t)$ лишь при использовании *точной* кинематики (тябликовская кинематика аннулирует это слагаемое; см. замечание после формулы (2.105)). В данном случае использование тябликовской кинематики для оценки временной корреляционной функции более высокого порядка $-i(d/d\tau)R_k(t - \tau)$ оказывается уже достаточным для получения временных членов в $E_k(t)$ (применение точных перестановочных соотношений (1.24) приводит к рассогласованию точной кинематики и приближенной динамики).

Согласно [63] обычное приближение массового оператора, в котором можно выделить энергию \mathcal{E}_k и затухание Γ_k элементарных возбуждений, соответствует переходу к пределу $t \rightarrow \infty$ в общем выражении для $E_k(t)$,

$$E_k(t) \rightarrow \mathcal{E}_k - i\Gamma_k, \quad \Gamma_k > 0 \quad (t \rightarrow \infty). \quad (3.47)$$

Учитывая, что при $t \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{\omega} \left(1 - \frac{\sin \omega t}{\omega t} \right) \rightarrow P \frac{1}{\omega}, \quad i \frac{1 - \cos \omega t}{\omega^2 t} \rightarrow i\pi \delta(\omega), \quad (3.48)$$

где P — символ главного значения, получаем из (3.46) для вещественной и мнимой частей спектра соответственно

$$\mathcal{E}_k = E_k^C - \frac{(2\sigma)^2 a^2}{2N^2} P \sum_{pq} \frac{V_{kqp}^2(\xi)}{E_{kqp}} N_{kqp}, \quad (3.49)$$

$$\Gamma_k = \pi \frac{(2\sigma)^2 a^2}{2N^2} \sum_{pq} V_{kqp}^2(\xi) \delta(E_{kqp}) N_{kqp}; \quad (3.50)$$

эти выражения отличаются от (3.27), (3.28), найденных в § 1 гл. III для модели ЛО, только множителем a^2 .

Однако для построения правильной термодинамики следует использовать в спектральной теореме (1.60) не эти асимптотические формулы, а выражение (3.46), справедливое при всех t . Несмотря на то, что в выражении (3.46) нет явного малого параметра, добавочного к E_k^C слагаемое будет рассматриваться далее как возмущение (обоснование этого приближения будет дано ниже). В соответствии с этим имеем¹⁾

$$e^{-iE_k(t)t} \simeq e^{-i\tilde{\mathcal{E}}_k t} - \frac{(2\sigma)^2 a^2}{2N^2} \sum_{qp} \left(\frac{V_{kqp}(\xi)}{E_{kqp}} \right)^2 N_{kqp} \{ e^{-iE_k t} - e^{-i(E_{kqp} + E_k)t} \}; \quad (3.51)$$

подставляя (3.51) в (1.60), получаем следующее интегральное уравнение для чисел заполнения:

$$n_k = n(\mathcal{E}_k) - \frac{\sigma^2 a^2}{N^2} \sum_{qp} \left(\frac{V_{kqp}(\xi)}{E_{kqp}} \right)^2 N_{kqp} \left\{ \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta} - \operatorname{cth} \frac{E_{k-q} + E_{p+q} - E_p}{2\Theta} \right\}; \quad (3.52)$$

соответственно, для величины $Q = 1 + 2P$, где $P = (1/N) \sum_k n_k$, а также для намагниченности σ имеем

$$(2\sigma)^{-1} = Q, \quad Q = Q_0 - \frac{2\sigma^2 a^2}{N^2} \times \\ \times \sum_{kqp} \left(\frac{V_{kqp}(\xi)}{E_{kqp}} \right)^2 N_{kqp} \left\{ \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta} - \operatorname{cth} \frac{E_{k-q} + E_{p+q} - E_p}{2\Theta} \right\}, \quad (3.53)$$

где $Q_0 = (1/N) \sum_k \operatorname{cth}(\mathcal{E}_k/2\Theta)$. Решая уравнение (3.52) методом итераций, ограничимся первым приближением:

$$n_k \simeq n(\mathcal{E}_k) - \frac{\sigma^2 a^2}{N^2} \sum_{qp} \left(\frac{V_{kqp}(\xi)}{E_{kqp}} \right)^2 N_{kqp}^0 \left\{ \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta} - \operatorname{cth} \frac{E_{k-q} + E_{p+q} - E_p}{2\Theta} \right\}; \quad (3.54)$$

¹⁾ Не зависящую от t часть $E_k(t)$ следует целиком оставить в показателе экспоненты во избежание появления секулярных членов. Величина $\tilde{\mathcal{E}}_k$ отличается от \mathcal{E}_k лишь отсутствием символа P перед двойной суммой; далее, однако, это отличие несущественно, так что всюду $\tilde{\mathcal{E}}_k = \mathcal{E}_k$.

здесь под N_{kqp}^0 понимается температурный фактор вида (3.25), где $n_p = n_p^0 = n(\mathcal{E}_p)$, причем согласно (2.108)

$$N_{kqp}^0 = n_{k-q}^0 n_{p+q}^0 (1 + n_p^0) [n(\mathcal{E}_{k-q} + \mathcal{E}_{p+q} - \mathcal{E}_p)]^{-1}. \quad (3.55)$$

Рассмотрим далее лишь частный случай модели ЛО с $\xi = 1$ — изотропную модель с бесщелевым спектром. Тогда можно считать, что основной вклад (при $H = 0$ и любых Θ) в суммы, содержащие N_{kqp}^0 , дают слагаемые с $q = -p = k$ (ср. с (2.107)). Тогда, учитывая, что

$$V_{k, k, -k}(1) = 2V_{k0}(1), \quad E_{k, k, -k}^C = -2\sigma V_{k0}(1) R_a^C$$

и

$$V_{kqp}^2 / E_{kqp} \simeq -(2/\sigma R_a^C) V_{k0},$$

а также то, что

$$n(\mathcal{E}_{k-q} + \mathcal{E}_{p+q} - \mathcal{E}_p) \simeq n(-\mathcal{E}_p) = -(1 + n_p^0),$$

имеем $(-1/N^2) \sum_{qp} N_{kqp}^0 \approx P_0^2 = (Q_0 - 1)^2 / 4$,

$$\mathcal{E}_k = g\mu_B H + \sigma V_{k0} R, \quad R = R_a^C [1 - (2a/R_a^C) P_0^2]; \quad (3.56)$$

соответственно, в том же приближении $(V_{kqp}/E_{kqp})^2 \simeq (\sigma R_a^C)^{-2}$; так что, считая в членах второго порядка $Q^C \simeq Q_0$, имеем

$$Q = Q_0 \left[1 + \left(\frac{2a}{R_a^C} \right)^2 P_0^2 \right], \quad P = P_0 \left\{ 1 + 2P_0 (1 + 2P_0) \left(\frac{a}{R_a^C} \right)^2 \right\}. \quad (3.57)$$

При низких температурах, когда $\theta \rightarrow 0$ величина $P = (1/N) \sum_p n_p^0 \sim \theta^{1/2}$, и спектр \mathcal{E}_h отличается от блоховского на член $\sim \theta^3$; с другой стороны, $P \simeq P_0 + 2P_0^2$, так что в низкотемпературном разложении для σ происходит компенсация «кинематического» члена θ^3 , — точно так, как это имеет место в (2.110). Для исключения расходимостей вблизи θ_c , возникающих при использовании ренормированного спектра E_h , как в ОПХФ, так и в членах второго порядка, служит, как уже отмечалось в § 6 гл. II, параметр Келлена (его введение является обычным в

теории магнетизма, см. [86—88]). Если ограничиться областью малых температур, можно с самого начала воспользоваться в интегральном члене второго порядка не келленовским спектром E_k^C , а его предельным значением при $\theta \rightarrow 0$,

$$E_k^C \rightarrow \lim_{\theta \rightarrow 0} E_k^C = g\mu_B H + \frac{H}{|H|} \frac{V_{k0}}{2} \quad (3.58)$$

(от блоховского спектра E_k^B спектр (3.58) отличается наличием знакового множителя $\operatorname{sgn} H = H/|H|$, обеспечивающим правильные свойства симметрии спектра).

Приближение (3.51) можно оправдать тем, что зависящая от t часть $E_h(t)$ из (3.46) при низких температурах мала ввиду малости N_{hqp} , а при $\theta \rightarrow \theta_c$ она также может быть сделана малой за счет выбора в качестве a достаточно высокой нечетной степени 2σ (см. [87, 88]).

В пределе $\theta \rightarrow \theta_c$ формулы (3.56) и (3.57) перейдут соответственно в

$$E_k^T = g\mu_B H + \sigma V_{k0} R^T, \quad (R_a^C, R \rightarrow R^T = 1) \quad (3.59)$$

и

$$\frac{1}{2\sigma} = Q = Q^T [1 + (aQ^T)^2]. \quad (3.60)$$

Уравнение для намагниченности (3.53) (из которого следуют (3.57) и (3.60)) будем называть обобщенным уравнением Тябликова. Очевидно, что добавочные к тябликовским члены в \mathcal{E}_h и Q малы на границах температурного интервала от нуля до точки Кюри. При малых θ эти добавки приводят к аннулированию недайсоновского члена θ^3 , а в критической области не влияют на характер фазового перехода (т. е. не меняют θ_c и критические индексы для σ по сравнению с теорией Тябликова (§ 32; см. также § 4 гл. II). Кроме того, в точке фазового перехода «мягкая» мода с комплексной энергией $\mathcal{E}_h - i\Gamma_h$ обращается в нуль (в соответствии с общей теорией, развитой в [145]). Затухание Γ_h при низких температурах дается формулами (3.30) и (3.32а), а при $\theta \rightarrow \theta_c$ величина $\Gamma_h \rightarrow 0$ при всех k .

Подчеркиваем, что принципиально важную роль для термодинамики играет добавка к Q^T , целиком обязанная временным членам в формально точном решении (1.59); отсутствие такого решения для матричного

уравнения (1.54) затрудняет построение правильной термодинамики в общем случае $\xi \neq \eta$. Таким образом, можно считать спектр $\mathcal{E}_k - i\Gamma_k$ и уравнение для σ вида (3.53) обобщением теории Тябликова для изотропной модели Гейзенберга.

§ 3. Обобщенная теория Дайсона (приближение матрицы рассеяния)

Рассмотрим еще один вариант построения теории, выходящей за рамки ОПХФ, на основе формально точного решения (1.58) для модели «легкая ось»; при этом для интегрального члена в (1.59) будет построена более точная оценка, чем полученная в § 7 гл. II.

Представим выражение (1.59) для $E_k(t)$ с $R_k(t - \tau)$ из (1.57а) в следующем виде:

$$E_k(t) = E_k^B - \frac{1}{N} \sum_{qp} V_{kq} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau R_{kqp}(t - \tau) \quad (3.61)$$

(здесь учтено, что согласно (2.27) для случая ЛО $E_k^B = A(k)$),

$$R_{kqp}(t - \tau) = \frac{\langle [j_{kqp}(t), b_k^+(\tau)] \rangle}{\langle [b_k(t), b_k^+(\tau)] \rangle}, \quad (3.62)$$

$$j_{kqp}(t) \equiv b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}(t);$$

аргумент t в $j_{kqp}(t)$ относится к каждому из трех операторов.

При вычислении чисто «кинематического» вклада интегрального члена в § 4 гл. II для $j_{kqp}(t)$ использовалась простейшая (хартри-фоковская) аппроксимация

$$j_{kqp}(t) \simeq j_{kqp} \exp \{-it(E_{p+q} + E_{k-q} - E_p)\}. \quad (3.63)$$

В этом разделе для оператора $j_{kqp}(t)$ (а следовательно, и для временной корреляционной функции $R_{kqp}(t)$) будет построено и решено уравнение движения в низкотемпературном приближении T -матрицы рассеяния (см. [63, 72]). В этом приближении окажется возможным точно воспроизвести теорию Дайсона [105] для изотропного ферромагнетика ($\xi = \eta = 1$) и получить

ее обобщение на анизотропный случай модели ЛО с $\eta = \xi \neq 1$. При этом не возникает необходимости в проведении неунитарного преобразования Дайсона [105]—Малеева [106], которое приводит, как известно, к неэрмитовому бозонному гамильтониану (подробнее см. § 5 осн. текста и ниже § 4 гл. III).

Точное уравнение движения для оператора $j_{kqp}(t)$ имеет вид ¹⁾ (спаривания проводятся в нем позднее):

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} j_{kqp}(t) = & (E_{p+q}^B + E_{k-q}^B - E_p^B) j_{kqp}(t) + \\
 & + \frac{1}{N} \sum_{\bar{p}\bar{q}} V_{\bar{p}\bar{q}} \overbrace{b_{p-\bar{q}}^+ b_{\bar{p}+\bar{q}}^+} b_{\bar{p}} b_{p+q} b_{k-q}(t) - \\
 & - \frac{1}{N} \sum_{\bar{p}\bar{q}} V_{p+q, \bar{q}} \overbrace{b_{\bar{p}}^+ b_{\bar{p}+\bar{q}}^+} b_{p+q-\bar{q}} b_{k-q}(t) - \\
 & - \frac{1}{N} \sum_{\bar{p}\bar{q}} V_{k-q, \bar{q}} \overbrace{b_{\bar{p}}^+ b_{p+q} b_{\bar{p}}^+} b_{\bar{p}+\bar{q}} b_{k-q-\bar{q}}(t). \quad (3.64)
 \end{aligned}$$

Приводя операторы в последнем слагаемом правой части к нормальному порядку, имеем

$$\begin{aligned}
 - \frac{1}{N} \sum_{\bar{p}\bar{q}} V_{k-q, \bar{q}} b_{\bar{p}}^+ b_{p+q} b_{\bar{p}}^+ b_{\bar{p}+\bar{q}} b_{k-q-\bar{q}}(t) = \\
 = - \frac{1}{N} \sum_{\bar{p}\bar{q}} V_{k-q, \bar{q}} \overbrace{b_{\bar{p}}^+ b_{\bar{p}}^+ b_{p+q}} b_{\bar{p}+\bar{q}} b_{k-q-\bar{q}}(t) - \\
 - \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} V_{k-q, \bar{q}} b_{\bar{p}}^+ b_{p+q-\bar{q}} b_{k-q-\bar{q}} - \\
 - \frac{2\varepsilon}{N^2} \sum_{\bar{p}\bar{q}r} V_{k-q, \bar{q}} \overbrace{b_{\bar{p}}^+ b_r^+ b_{r+p+q-\bar{p}}} b_{\bar{p}+\bar{q}} b_{k-q-\bar{q}}(t). \quad (3.65)
 \end{aligned}$$

Главный член T -матричного приближения для уравнения движения (3.64) (второе слагаемое в правой

¹⁾ Здесь, как и ранее, мы не используем уравнения движения для оператора ρ_k , ограничиваясь лишь динамикой одночастичных операторов b_k, b_k^+ (другой подход см. в работах Кнаппа и тер Хаара [191], а также [192, 193]). Уравнения движения такого типа и связь метода функций Грина с диаграммной техникой рассматривались в работе Леони и Натולי [163].

части (3.65)) соответствует точному решению задачи рассеяния для двух магновов при нуле температуры; при этом все остальные операторы в (3.64), имеющие более высокий порядок, чем j_{kqp} , отбрасываются. Выбор такого приближения соответствует учету полного ряда борновской теории возмущений, т. е. суммированию лестничных диаграмм всех порядков; он обусловлен короткодействующим характером обменного взаимодействия и малой плотностью магновов при низких температурах ($\bar{n} = (1/N) \sum_k \bar{n}_k \ll 1$ при $\theta \ll \theta_c$). Дополнительные

поправки к решению при нуле температуры, линейные по числам заполнения магновов, можно получить, проводя в двух операторах более высокого порядка по одному спариванию T -матричного типа (указанному в (3.64) и (3.65) дугами сверху). Кроме того, следует учесть спаривания, указанные прямыми скобками сверху и снизу и приводящие к хартри-фоковской ренормировке одночастичного спектра¹⁾ (см. § 4 гл. II).

Таким образом, мы получаем приближенное линейное интегро-дифференциальное уравнение для оператора $j_{kqp}(t)$:

$$i \frac{d}{dt} j_{kqp}(t) = (E_{p+q} + E_{k-q} - E_p) j_{kqp}(t) - \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} \{ V_{k-q, \bar{q}-q} (2\sigma + n_{p+q}) + V_{p+q, -\bar{q}+q} n_{k-q} \} j_{k\bar{q}p}(t); \quad (3.66)$$

энергии E_i соответствуют первому борновскому приближению и определяются выражением (2.58). Перейдем далее в (3.66) к лапласовскому образу $j_{kqp}(E)$, $\text{Im } E > 0$

¹⁾ Спаривание, указанное волнистой линией, дает «кинематическую» добавку к T -матричному члену, пропорциональную $(-2\sigma n)$; другие возможные спаривания существенны при учете экранировки дальнегодействующего потенциала (см., например, [63]). Отсутствие спариваний T -матричного типа во втором слагаемом правой части (3.64), по существу, означает, что приближение T -матрицы определяется приближенной динамикой пары операторов рождения или уничтожения $b_{p+q} b_{k-q}(t)$ или, что то же, уравнением Шрёдингера для волновой функции пары магновов (Дайсон [105], Уортис [164], а также [165], [166]; хорошее изложение этих работ, включая вопрос о связанных состояниях, см. в [2, гл. 5]).

оператора $\tilde{j}_{kqp}(t) = j_{kqp}(t) \exp(iE_k t)$, использование которого удобнее по соображениям симметрии:

$$\begin{aligned}\tilde{j}_{kqp}(E) &= -i \int_0^{\infty} dt e^{iEt} \tilde{j}_{kqp}(t), \\ \tilde{j}_{kqp}(t) &= -\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt} \tilde{j}_{kqp}(E); \end{aligned} \quad (3.67)$$

тогда левая часть его перейдет в $E \tilde{j}_{kqp}(E) - \tilde{j}_{kqp}$, где $\tilde{j}_{kqp} \equiv \tilde{j}_{kqp}(t=0) = b_p^+ b_{p+q} b_{k-q}$, так что окончательно получаем

$$(E - E_{kqp}) \tilde{j}_{kqp}(E) = \tilde{j}_{kqp} - \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} \{V_{k-q, \bar{q}-q} (2\sigma + n_{p+q}) + V_{p+q, -\bar{q}+q} n_{k-q}\} \tilde{j}_{k\bar{q}p}(E); \quad (3.68)$$

величина E_{kqp} дается выражением (2.103а).

Заметим, что если бы гамильтониан (1.26) был построен на ферми- или бозе-операторах, потенциал взаимодействия V_{kq} следовало бы заменить фурье-образом $v(q)$ (см. замечание после формулы (1.286)), и ядро уравнения (3.68) имело бы обычный вид $v(q - \bar{q})(1 + n_{p+q} + n_{k-q})$. Для паули-операторов наличие в потенциале V_{kq} при $\varepsilon \neq 0$ кинематического члена, зависящего от k , приводит к тому, что приближенное уравнение (3.68) не обнаруживает явной симметрии относительно замены $q \rightarrow -q + k - p$, свойственной оператору j_{kqp} и точному уравнению (3.64) для него. Можно показать, однако (см. примечание 8), что уравнение (3.68) имеет только симметричные решения, и поэтому его ядро допускает симметризацию. В результате имеем

$$\begin{aligned}(E - E_{kqp}) \tilde{j}_{kqp}(E) &= \tilde{j}_{kqp} - \\ &- \frac{I(0)}{2N} \lambda_{kqp} \sum_{\bar{q}} Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) \tilde{j}_{k\bar{q}p}(E), \end{aligned} \quad (3.69)$$

где $\lambda_{kqp} = 2\sigma + n_{k-q} + n_{p+q}$, а Q — ядро, имеющее вид $Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) =$

$$= \gamma_{q-\bar{q}} + \gamma_{q+\bar{q}-k+p} - \varepsilon \xi (\gamma_{k-\bar{q}} + \gamma_{\bar{q}+p}) \quad (3.69a)$$

и четное относительно одновременной смены знака всех аргументов. Очевидно также наличие у ядра Q симметрии относительно замены $q \rightarrow -q + k - p$ (то же для \bar{q}),

$$Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) = Q(-q - \bar{q} + k - p, k - \bar{q}, \bar{q} + p) = \\ = Q(q + \bar{q} - k + p, \bar{q} + p, k - \bar{q}), \quad (3.70)$$

однако симметрия ядра относительно перестановки $q \rightleftharpoons \bar{q}$ отсутствует,

$$Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) \neq Q(\bar{q} - q, k - q, q + p), \quad (3.71)$$

так что интегральное уравнение (3.69) не является самосопряженным.

В общем случае ядро $Q(x, y, z)$ имеет вид

$$Q(x, y, z) = \gamma_x + \gamma_{x-y+z} - \varepsilon \xi (\gamma_y + \gamma_z); \quad (3.72)$$

иногда удобнее перейти в нем от переменных (x, y, z) к более симметричной записи в переменных (R, r, \bar{r})

$$Q_R(r, \bar{r}) = \gamma_{r-\bar{r}} + \gamma_{r+\bar{r}} - \varepsilon \xi (\gamma_{R-\bar{r}} + \gamma_{R+\bar{r}}), \quad (3.73)$$

где

$$R = (y + z)/2, \quad \bar{r} = -(y - z)/2, \quad r = x + \bar{r} = x - (y - z)/2.$$

Тогда для любых q, \bar{q} имеем

$$Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) \equiv Q_R(\rho + q, \rho + \bar{q}), \\ R = \frac{k + p}{2}, \quad \rho = \frac{k - p}{2}; \quad (3.74)$$

импульсы k и p равны при этом соответственно $R \mp \rho$. В переменных (R, r, \bar{r}) свойства симметрии (3.70) и (3.71) принимают особенно простой вид:

$$Q_R(r, \bar{r}) = Q_R(-r, \bar{r}) = Q_R(r, -\bar{r}), \quad (3.75)$$

$$Q_R(r, \bar{r}) \neq Q_R(\bar{r}, r). \quad (3.76)$$

Вообще, следует заметить, что явная зависимость Q от аргументов y и z целиком обязана «кинематическому» члену в потенциале V_{kq} ; при $\varepsilon = 0$ ядро Q становится функцией одной переменной, четной при $x \rightarrow -x$ (или $q \rightleftharpoons \bar{q}$), $Q(x) = Q(-x) = Q(q - \bar{q})$ (то же имеет место и для модели Изинга с $\xi = \eta = 0$). Соответственно, $Q_R(r, \bar{r})$ при $\varepsilon = 0$ теряет зависимость от R и стано-

вится симметричной функцией разностного аргумента $Q(r, \bar{r}) = Q(\bar{r}, r) = Q(r - \bar{r})$, что существенно упрощает задачу.

В переменных (R, r, \bar{r}) при $\bar{q} = 0$ уравнение (3.69) принимает вид

$$\begin{aligned} (E - \Omega_R(r, \rho)) \tilde{j}_R(r, \rho; E) = \\ = \tilde{j}_R(r, \rho) - \frac{I(0)}{2N} \lambda_R(r) \sum_{\bar{r}} Q_R(r, \bar{r}) \tilde{j}_R(\bar{r}, \rho; E); \quad (3.77) \\ \tilde{j}_R(r, \rho) \equiv b_{R+\rho}^+ b_{R-r} b_{R+r}. \end{aligned}$$

Здесь величина

$$\Omega_R(r, \rho) = E_{R-r} + E_{R+r} - E_{R-\rho} - E_{R+\rho} \quad (3.78)$$

является обозначением величины E_{kqp} из (2.103а) в новых переменных и обладает простыми свойствами:

$$\Omega_R(r, \rho) = \Omega_R(-r, \rho) = \Omega_R(r, -\rho) \quad (3.78a)$$

и

$$\Omega_R(\rho, r) = -\Omega_R(r, \rho), \quad \Omega_R(\rho, \rho) = 0. \quad (3.78b)$$

Введем далее T -матрицу рассеяния, определив ее соотношением (см., например, [63, 167], а также [168])

$$\sum_{\bar{r}} Q_R(r, \bar{r}) \tilde{j}_R(\bar{r}, \rho; E) = \sum_{\bar{r}} T_R(r, \bar{r}; E) \frac{\tilde{j}_R(\bar{r}, \rho)}{E - \Omega_R(\bar{r}, \rho)}; \quad (3.79)$$

тогда для T -матрицы нетрудно получить интегральное уравнение следующего вида:

$$T_R(r, \bar{r}; E) = Q_R(r, \bar{r}) - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}'} Q_R(r, \bar{r}') \frac{\lambda_R(\bar{r}') T_R(\bar{r}', \bar{r}; E)}{E - \Omega_R(\bar{r}', \rho)}, \quad (3.80)$$

причем величина $T_R(r, \bar{r}; E)$ обладает свойствами симметрии (3.75) и (3.76).

Уравнение, сопряженное к (3.80), имеет вид

$$T_R^D(r, \bar{r}; E) = Q_R(\bar{r}, r) - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}'} Q_R(\bar{r}', r) \frac{\lambda_R(\bar{r}') T_R^D(\bar{r}', \bar{r}; E)}{E - \Omega_R(\bar{r}', \rho)}; \quad (3.81)$$

виду несимметрии ядра (3.76) оно не совпадает с (3.80) и определяет другую (сопряженную) T -матрицу, которую естественно назвать T -матрицей Дайсона (см. ниже); последняя также удовлетворяет свойствам симметрии (3.75) и (3.76).

Выразим теперь основную величину теории $E_k(t)$ из (3.61) через T -матрицу в переменных (R, r, ρ) . Проводя симметризацию правой части (3.61) по $q \rightarrow -q+k-p$, считая $b_k(t) \simeq b_k \exp(-iE_k t)$ и используя (3.67) вместе с (3.79), имеем (полагая везде в дальнейшем для простоты $\lambda_R(r) \equiv 1$)

$$\begin{aligned} E_k(t) &= E_k^B - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E \frac{1}{2N} \sum_{qp} V_{kqp} \frac{\langle [\tilde{J}_{kqp}(E), b_k^+] \rangle}{\langle [b_k, b_k^+] \rangle} = \\ &= E_{R-\rho}^B - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E \frac{I(0)}{2N} \sum_{r,\rho} \frac{T_R(\rho, r; E)}{E - \Omega_R(r, \rho)} \frac{\langle [\tilde{J}_R(r, \rho), b_{R-\rho}^+] \rangle}{\langle [b_{R-\rho}, b_{R-\rho}^+] \rangle}, \end{aligned} \quad (3.82)$$

где

$$\delta_t(E) = \frac{i}{2\pi t} \int_0^t d\tau \frac{e^{-iE(t-\tau)}}{E} = \frac{1}{2\pi} \frac{1 - e^{-iEt}}{E^2 t}, \quad (3.83)$$

$$\text{Im } E > 0.$$

При получении (3.82) использовался также тот факт, что потенциал Дайсона в новых переменных имеет вид

$$\begin{aligned} V_{kqp}/I(0) &= Q(q, k-q, q+p) = Q_R(\rho, r), \\ Q_R(\rho, r) &= \gamma_{\rho-r} + \gamma_{\rho+r} - e\xi(\gamma_{R-r} + \gamma_{R+r}); \end{aligned} \quad (3.84)$$

заметим, что в силу (3.76) $Q_R(r, \rho) \neq Q_R(\rho, r)$ где

$$Q_R(r, \rho) = Q(q, k, p) = \gamma_{r-\rho} + \gamma_{r+\rho} - e\xi(\gamma_{R-\rho} + \gamma_{R+\rho}), \quad (3.85)$$

причем различие обусловлено кинематическими слагаемыми.

Вычисляя приближенно коммутатор

$$\frac{\langle [\tilde{J}_R(r, \rho), b_{R-\rho}^+] \rangle}{\langle [b_{R-\rho}, b_{R-\rho}^+] \rangle} \simeq \left(\delta_{r\rho} + \delta_{r,-\rho} - \frac{2e}{N} \right) n_{R+\rho} \quad (3.86)$$

в линейном приближении по числам заполнения (см. (2.104)) и учитывая (3.82), получаем далее

$$E_{R-\rho}(t) = E_{R-\rho}^B - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) \frac{I(0)}{N} \sum_{\rho} T_R(\rho, \rho; E) n_{R+\rho} - \\ - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E \frac{\varepsilon I(0)}{N^2} \sum_{r, \rho} \frac{T_R(\rho, r; E)}{E - \Omega_R(\rho, r)} n_{R+\rho}. \quad (3.87)$$

Ниже будет показано, что кинематическое (пропорциональное ε) слагаемое в (3.87) аннулирует член θ^3 в σ точно так же, как это имело место в § 7 гл. II, если ограничиться нулевым приближением для $T_R(\rho, r; E) \simeq Q_R(\rho, r)$. Кроме того, это слагаемое не дает вклада в спектр магнонов¹⁾ в пределе $t \rightarrow \infty$. Основной вклад в $E_{R-\rho}(t)$ дает T -матрица, определяемая уравнением (3.80) при совпадающих значениях аргументов $r = \bar{r} = \rho$ (см. в этой связи также [167]).

Наличие температурного фактора $n_{R+\rho}$ позволяет в низшем приближении по θ ограничиться значениями $T_R(\rho, \rho)$ при малых $R + \rho \rightarrow 0$; кроме того, в длинноволновой области спектра нас будут интересовать лишь низшие члены по $R - \rho \rightarrow 0$. Таким образом, будем искать решение уравнения (3.80) при $r = \bar{r} = \rho$; из (3.85) очевидно, что для T -матрицы с совпадающими аргументами отсутствует замкнутое уравнение. Однако, полагая $\bar{r} = \rho$ при произвольном r , получаем для $T_R(r, \rho)$ замкнутое интегральное уравнение

$$T_R(r, \rho, E) = Q_R(r, \rho) - \frac{I(0)}{2N} \sum_r Q_R(r, \bar{r}) \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R(\bar{r}, \rho; E)}{E - \Omega_R(\bar{r}, \rho)}. \quad (3.88)$$

Решение этого уравнения в пределе $R \pm \rho \rightarrow 0$ достаточно сложно (см., например, работу Кука и Герша [156]), так как согласно (3.85) неоднородная часть $Q_R(r, \rho)$ при $r \neq \rho$ не является при этом малой в изо-

¹⁾ Нетрудно также убедиться в том, что учет кинематического члена в коммутаторе (2.104) (или (3.86)) обеспечивает выполнение кинематического условия $\sum_q R_{kqp}(t) = 0$, которое следует из (1.25).

тропном случае $\eta = \xi = 1$. В то же время неоднородная часть $Q_R(\rho, r)$ сопряженного (дайсоновского) уравнения (3.81), которое при $\bar{r} = \rho$ имеет вид

$$T_R^D(r, \rho; E) = Q_R(\rho, r) - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} Q_R(\bar{r}, r) \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R^D(\bar{r}, r; E)}{E - \Omega_R(\bar{r}, \rho)}, \quad (3.89)$$

стремится к нулю при $\xi = \eta = 1$ и любом r , если $R \pm \rho \rightarrow 0$; это свойство делает предпочтительным использование уравнения (3.89) при нахождении $E_{R-\rho}(t)$.

Основанием для перехода от матрицы T к матрице T^D в (3.87) является существование следующего важного соотношения:

$$T_R(r, r; E) \equiv T_R^D(r, r; E) \quad (R, r, E \text{ — произвольные}). \quad (3.90)$$

(доказательство см. в примечании 9; физический смысл (3.90) и его связь с теорией Дайсона обсуждается в § 4 гл. III).

Используя свойство (3.90), а также уравнение (3.89), можно привести $E_{R-\rho}(t)$ из (3.82) к более удобному виду, в котором выделен явно вклад первого борновского приближения,

$$\begin{aligned} E_{R-\rho}(t) = & E_{R-\rho} + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) \frac{I^2(0)}{2N^2} \sum_{r, \rho} \frac{Q_R(r, \rho) T_R^D(r, \rho; E)}{E - \Omega_R(r, \rho)} n_{R+\rho} - \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E \frac{eI(0)}{N^2} \sum_{r, \rho} \frac{T_R(\rho, r; E) n_{R+\rho}}{E - \Omega_R(r, \rho)}, \quad (3.91) \end{aligned}$$

где величина

$$E_{R-\rho} = E_{R-\rho}^B - \frac{I(0)}{N} \sum_{\rho} Q_R(\rho, \rho) n_{R+\rho} \quad (3.92)$$

совпадает с хартри-фоковским спектром (2.58) и при

выводе (3.92) учтено, что $\int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) \equiv 1$ при всех t ,

Далее удобно вернуться вновь к переменным (k, q, p) , в которых обобщенное уравнение (3.88) для T -матрицы Дайсона имеет вид

$$T_{kqp}^D(E) = Q(q, k - q, q + p) - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{q}} \frac{Q(q - \bar{q}, k - \bar{q}, \bar{q} + p) T_{k\bar{q}p}^D(E)}{E - E_{k\bar{q}p}}; \quad (3.93)$$

его решение, следуя Дайсону [105], удобно искать в форме

$$T_{kqp}^D(E) = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{iq\delta} A_{kp}(\delta; E). \quad (3.94)$$

Введем, следуя [105], решеточную функцию Грина

$$\begin{aligned} G_{kp}(\delta; E) &= \frac{I(0)}{N} \sum_q \frac{e^{iq\delta}}{E_{kqp} - E} = \\ &= \frac{2}{N\xi} \sum_q \frac{e^{iq\delta}}{\gamma_k + \gamma_p - \gamma_{k-q} - \gamma_{q+p} - \varepsilon}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

где введено обозначение $\varepsilon \equiv 2E/I(0)$, и $\xi \neq 0$ (при $\xi = 0$ $G_{kp}(\delta; E) = -(I(0)/\varepsilon) \Delta(\delta) = 0$ при $\delta \neq 0$). Некоторые свойства предельного значения функции Грина $G(\delta) \equiv G_{00}(\delta; +i0)$ описаны в примечании 10 (см. также [105] и [2, гл. 8]); в частности, она является четной,

$$G(\delta) = G(-\delta) = \frac{1}{N\xi} \sum_q \frac{e^{iq\delta}}{\gamma_0 - \gamma_q - i0}, \quad (3.96)$$

и удовлетворяет разностному уравнению

$$(1/z) \sum_{\delta'} \{G(\delta') - G(\delta + \delta')\} = \Delta(\delta'), \quad (3.97)$$

где $\Delta(r)$ — символ Кронекера векторного аргумента.

С помощью функции $G(\delta; E)$ алгебраическая система линейных уравнений порядка $z \times z$ для «амплитуд» T -матрицы $A_{kp}(\delta; E)$ принимает вид

$$\begin{aligned} A_{kp}(\delta; E) &= \{(1 - e^{-ik\delta})(1 - e^{ip\delta}) + (1 - \xi)(e^{-ik\delta} + e^{ip\delta})\} + \\ &+ \frac{1}{2z\xi} \sum_{\delta'} \{[G_{kp}(-\delta + \delta'; E) + e^{i(p-k, \delta)} G_{kp}(\delta + \delta'; E)] - \\ &- \xi(e^{-ik\delta} + e^{ip\delta}) G_{kp}(\delta'; E)\} A_{kp}(\delta'; E). \end{aligned} \quad (3.98)$$

Решение этой системы зависит от значения параметра анизотропии ξ и симметрии кристаллической решетки. В дальнейшем мы ограничимся нахождением только частных решений неоднородного интегрального уравнения (3.93) или системы (3.98), отвлекаясь от возможных нетривиальных решений соответствующих однородных уравнений. Это означает пренебрежение вкладом связанных состояний пар магнонов и вполне оправдано при малых импульсах (см. [105], а также [164, 166], где доказано отсутствие низколежащих связанных состояний). Заметим, что в силу (3.94) и (3.98) матрица $T_{kqp}^D(E)$ удовлетворяет правилу сумм

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_q T_{kqp}^D(E) &= \frac{1}{z} A_{kp}(0; E) = \\ &= \frac{2}{z} (1 - \xi) \left[1 + \frac{1}{\xi z} \sum_{\delta} G_{kp}(\delta; E) A_{kp}(\delta; E) \right]. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Спектр и затухание магнонов. Как уже неоднократно отмечалось, спектр и затухание магнонов даются вещественной и мнимой частями $E_k(t)$ в пределе $t \rightarrow \infty$ (см. [63]). В этом пределе величина $\delta_t(E)$ из (3.83) сходится к обобщенной функции $\delta(E)$ ($\text{Im } E > 0$), причем кинематическое слагаемое в правой части (3.91) не дает вклада ввиду свойства $E \delta(E) \equiv 0$ (однако, оно играет существенную роль в термодинамике). Вводя обозначения $T_{kqp}^D(E = +i0) \equiv T_{kqp}^D$, $A_{kp}(\delta; E = +i0) \equiv A_{kp}(\delta)$, получаем

$$E_k(t) \rightarrow E_k^D - i\Gamma_k^D \quad \text{при } t \rightarrow \infty, \quad (3.100)$$

где

$$E_k^D = E_k - \text{Re} \frac{I^2(0)}{2N^2} \sum_{qp} \frac{Q(q, k, p) T_{kqp}^D}{E_{kqp} - i0} n_p, \quad (3.101)$$

$$\Gamma_k^D = \text{Im} \frac{I^2(0)}{2N^2} \sum_{qp} \frac{Q(q, k, p) T_{kqp}^D}{E_{kqp} - i0} n_p. \quad (3.102)$$

Замечая, что

$$\frac{(I(0)/2) Q(q, k, p)}{E_{kqp} - i0} = -1 + \frac{(I(0)/2) Q(q, k - q, q + p)}{E_{kqp} - i0},$$

и учитывая правило сумм (3.99), имеем окончательно

$$E_k^D = E_k + \operatorname{Re} \frac{I(0)}{zN} \sum_p A_{kp}(0) n_p - \\ - \operatorname{Re} \frac{I(0)}{2N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kqp} T_{kqp}^D}{E_{kqp} - i0} n_p, \quad (3.101a)$$

$$\Gamma_k^D = -\operatorname{Im} \frac{I(0)}{zN} \sum_p A_{kp}(0) n_p + \\ + \operatorname{Im} \frac{I(0)}{2N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kqp} T_{kqp}^D}{E_{kqp} - i0} n_p; \quad (3.102a)$$

в частности, подставляя в низшем приближении $T_{kqp}^D \simeq V_{kqp}/I(0)$, получаем величины E_k и Γ_k в виде (3.27) и (3.28), найденном ранее в теории второго порядка при $N_{kqp} \approx n_p$.

1. *Изотропный случай* $\xi = 1$. В этом случае полностью воспроизводится теория Дайсона [105]. Действительно, полагая $\xi = 1$ в (3.101a), имеем $A_{kp}(0) = 0$; с учетом (3.94) и (3.95) выражение (3.101a) можно записать тогда в виде

$$E_k^D = E_k - \\ - \operatorname{Re} \frac{I(0)}{z^2 N} \sum_{\delta\delta'p} n_p G_{kp}(\delta + \delta')(1 - e^{-ik\delta})(1 - e^{ip\delta}) A_{kp}(\delta') \approx \\ \approx E_k - \operatorname{Re} \frac{I(0)}{z^2 N} \sum_{\delta\delta'p} n_p G_{kp}(\delta + \delta')(k, \delta)(p, \delta) A_{kp}(\delta'). \quad (3.103)$$

Интересуясь лишь квадратичными по k слагаемыми в спектре E_k^D и учитывая только низшие температурные поправки, достаточно найти $A_{kp}(\delta')$ с точностью до билинейных по k и p членов. Именно такой порядок величины имеет неоднородная часть в уравнении (3.98), поэтому в ядре этого уравнения можно положить $k = p = 0$. Тогда уравнение (3.98) принимает вид

$$A_{kp}(\delta) \simeq (k, \delta)(p, \delta) + \frac{1}{2z} \sum_{\delta'} \{G(-\delta + \delta') + G(\delta + \delta') - \\ - 2G(\delta')\} A_{kp}(\delta'), \quad (3.104)$$

в точности совпадающий с уравнением (77) работы Дайсона [105].

Решение этого уравнения для трех типов кубических решеток и произвольного спина было получено Дайсоном [105] в форме разложения по ортогональным сферическим функциям 2-го порядка, принадлежащим к неприводимому представлению группы симметрии решетки. В частности, для $S = 1/2$ и простой кубической решетки имеем, применяя формулы примечания 10, п. 1:

$$A_{kp}(\delta) = (k, \delta)(p, \delta)(1 - \Gamma)^{-1} + (a^2/3)(k, p)(\Gamma/1 - \Gamma), \quad (3.105)$$

где $\Gamma = G(1, 0, 0) - G(1, 1, 0) \simeq 0, 2$, $G(\delta_1, \delta_2, \delta_3) = G(\delta)$, $\delta = a(\delta_1, \delta_2, \delta_3)$, a — период решетки. Подставляя (3.105) в (3.104) и используя свойства решеточных функций Грина (примечание 10, п. 2), получаем окончательно дайсоновский спектр [105]:

$$E_k^D = E_k^B + \frac{I(0)}{12} k^2 \left\{ 1 - \frac{Q_{1/2}^D}{3N} \sum_p p^2 n_p \right\}, \quad (3.106)$$

где

$$Q_{1/2}^D = 1 + \frac{4}{3} \frac{\Gamma}{1 - \Gamma} + \frac{2}{3} G(1, 0, 0) \quad (3.107)$$

(в общем случае $Q_S^D = 1 + 4\Gamma/3(2S - \Gamma) + G(1, 0, 0)/3S$, и Q_S^D при $S \rightarrow \infty$ стремится к борновскому пределу, равному единице (см. соответствующий результат в § 3 гл. II, формула (2.58)).

2. *Анизотропный случай* $\xi < 1$. Не решая обобщенного уравнения Дайсона (3.98) полностью, ограничимся определением низшей температурной поправки к щели в спектре E_k^D , полагая $k = p = 0$ в (3.101a); в хартри-фоковском приближении имеем

$$E_0 = E_0^B - \frac{1}{N} \sum_p V_{000} n_p = g\mu_B H + (I(0)/2)(1 - \xi)(1 - 4n). \quad (3.108)$$

Тогда уравнение (3.98) принимает вид ($A(\delta) \equiv A_{00}(\delta)$):

$$A(\delta) = 2(1 - \xi) + \frac{1}{z} \sum_{\delta'} [(1/\xi) G(\delta + \delta') - G(\delta')] A(\delta'), \quad (3.109)$$

откуда

$$A(\delta) \equiv A = 2(1 - \xi) \{1 - [(1/\xi) - 1] G(1, 0, 0)\}^{-1}, \quad (3.110)$$

так что

$$E_0^D = g\mu_B H + \\ + (I(0)/2)(1 - \xi) \{1 - 4n [1 - ((1/\xi) - 1) G(1, 0, 0)]^{-1}\}. \quad (3.111)$$

Очевидно, наличие особенности у E_0^D при $\xi_{кр}^{-1} = 1 + (1/G(1, 0, 0))$ (для простой кубической решетки $G(1, 0, 0) \simeq 0,52$, $\xi_{кр} \simeq 0,32$). Этот результат полностью согласуется с полученным в работе Дугласса [110] методом резольвентной теории возмущений и указывает на то, что применимость теории Дайсона ограничена моделями с не слишком большой анизотропией.

Термодинамика. Для построения низкотемпературной термодинамики, построенной на спиновых операторах, но согласующейся при $\xi = 1$ с теорией Дайсона [105], т. е. не содержащей члена θ^3 в уравнении для σ вида (2.10) при $\theta \rightarrow 0$, достаточно ограничиться нулевым приближением для $T_{kqp}^D \simeq V_{kqp}/I(0)$ в кинематическом члене (3.91) при $\varepsilon = 1$,

$$E_k(t) \simeq E_k^D - \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E \frac{1}{N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kqp} n_p}{E - E_{kqp}}. \quad (3.112)$$

Тогда, учитывая, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \delta_t(E) E (E - E_{kqp})^{-1} = \frac{1 - e^{-iE_{kqp}t}}{iE_{kqp}t},$$

имеем

$$E_k(t) = E_k^D + \frac{2}{N^2} \sum_{qp} \frac{V_{kqp} n_p}{E_{kqp}} \frac{1 - e^{-iE_{kqp}t}}{it}, \quad (3.113)$$

и исключение члена θ^3 идет далее точно так же, как в § 7 гл. II (формулы (2.105) — (2.110)); см. также Кук и Герш [156]. В результате для σ получается в точности дайсоновское разложение, в котором динамические поправки начинаются с θ^4 (соответственно, с $\theta^{5/2}$ в спектре E_k^D) и пропорциональны фактору Q^D .

Заметим в заключение, что в принципе теорию, аналогичную теории Дайсона, можно построить и для более общей модели с $\xi \neq \eta$. Однако сложный вид оператора j_k (3.10) после $u-v$ -преобразования сильно затрудняет подобное построение. Кроме того, отсутствие формально точного решения не дает возможности просто учесть временные члены и компенсировать кинематические вклады.

В заключение укажем, что впервые теорию Дайсона методом функций Грина для спиновых операторов построили Морита и Танака¹⁾ [169] (см. также Уортис [171]); способ исключения члена θ^3 в σ был одновременно и независимо предложен Ортенбургер [144] (см. § 7 гл. II). Кук и Герш [156] также получили результат Дайсона, решая непосредственно интегральное уравнение (3.88) на основе теории Фредгольма; доказанная выше теорема (3.90) позволяет, однако, получить этот результат значительно проще. Позднее теории [144, 169] были уточнены в работах Маршалла и Мюррея [155] и Балкара [154]. Уоллес [172] получил результат Дайсона в рамках весьма громоздкого метода ренормализации спиновых операторных уравнений движения. Зильберглитт и Харрис [166] на основе диаграммной теории возмущений для T -матрицы в модели Дайсона изучили влияние квазисвязанных двухмагнонных состояний на одночастичный дайсоновский спектр при больших k (впервые наличие таких состояний было установлено в работах [164]). Имеются также успешные попытки воспроизвести теорию Дайсона в рамках приближения T -матрицы для других квазибозонных представлений, известных в теории магнетизма (Кук и Хан [108], Дэвис [109], Дугласс [110], подробнее см. ниже § 4 гл. III).

§ 4. Метод уравнений движения в теории Дайсона и другие квазибозонные представления

1. Теория изотропного гейзенберговского ферромагнетика, построенная Дайсоном [105] в 1956 году и воспроизведенная позднее различными методами рядом

¹⁾ В дальнейшем эти авторы [170] показали, что процессы рассеяния с участием n магнонов дают при малых θ вклад в σ , пропорциональный $\theta^{(5n/2)-1}$.

авторов (в спинных операторах [169, 171, 172, 154—156, 13, 72]; см. также § 3 гл. III; в бозевских операторах — [173, 157, 166, 108—110]) является до настоящего времени наиболее строгой (своего рода «эталонной») теорией в области низких температур.

Основная идея теории Дайсона состоит в том, чтобы сохранить точные уравнения движения (1.27)—(1.28), но «перенести» кинематическое взаимодействие, связанное с небозевостью перестановочных соотношений (1.24) для паули-операторов (или, что то же, с неортогональностью волновых функций идеальных спинных волн по Дайсону) непосредственно в гамильтониан в качестве добавки к динамическому взаимодействию. Упрощение перестановочных соотношений достигается, таким образом, ценой усложнения эффективного бозонного гамильтониана, в частности, отказом от его эрмитовости (соответствующее преобразование Дайсона — Малеева (5.23) от спинных к бозе-операторам является неунитарным). Это обстоятельство, однако, отнюдь не лишает теорию физического смысла при правильном выборе области определения гамильтониана в пространстве состояний и введении метрики в нем (см., например, [105, 107, 174, 175]. Указанные ограничения наиболее трудно поддаются учету при построении теории Дайсона и, по существу, лимитируют область ее применимости низкими температурами¹⁾.

Вообще для спинных операторов существуют различные алгебраические реализации через ферми- или бозе-операторы²⁾ (см., например, [176], а также [177]), которые обладают более простыми коммутационными соотношениями.

¹⁾ Дополнительное «квазифермиевское» условие (1.25) (кинематическое взаимодействие, по терминологии Дайсона) не имеет соответствующего динамического эквивалента в его теории и учитывается лишь статистически, давая экспоненциально малый вклад в сумму состояний при $\theta \rightarrow 0$. Увеличение спинного квантового числа S улучшает применимость теории Дайсона, так как в квазиклассическом пределе $S \rightarrow \infty$ области определения гамильтонианов спинной системы и идеальных спинных волн совпадают.

²⁾ Это утверждение следует из теории групп Ли (см., например, [177]) и связано с тем, что спинные операторы являются инфинитезимальными генераторами простой группы Ли $SU(2)$.

Так, если α_f, α_f^+ — эрмитово-сопряженные бозе-операторы, то возможно, в частности, представление Гольштейна — Примакова [36] (см. (5.16) — (5.18) и (5.26) осн. текста). Недостатком этого представления является нелинейный характер оператора $\varphi(n_f) = (1 - n_f/2S)^{1/2}$ (лишь при малых $n_f/2S$ можно ограничиться, согласно Т. Огучи [36], первыми членами бесконечного ряда (5.21), (5.22) осн. текста).

Представление Дайсона [105] — Малеева [106] (см. (5.23) осн. текста) также использует эрмитово-сопряженные друг другу операторы α_f, α_f^+ , определенные на дайсоновском пространстве идеальных спиновых волн, причем для самосогласованности требуется выполнение условия $\alpha_f^+ v_f \alpha_f = 0$ (f — произвольный узел), которое является отражением дополнительного условия (1.25). Преобразование (5.23) определяет закон соответствия, по которому для любого оператора $A^{\text{спин}}$, составленного из спиновых операторов (в частности, для гамильтониана) может быть построен его «дайсон-образ» A^D , составленный из операторов α_f, α_f^+ и $v_f = \alpha_f^+ \alpha_f$; то же имеет место и для коммутаторов и, следовательно, для квантовых уравнений движения. Важно заметить, что обратное соответствие, вообще говоря, не имеет места, т. е. не всякий дайсоновский оператор (например¹⁾, α_f) имеет свой «спин-образ», что означает вырожденность преобразования (5.23).

Дайсон-образы операторов S_f^\pm уже не являются эрмитово-сопряженными, однако они все же остаются сопряженными в более широком смысле:

$$(A^D)^* = \hat{F}^{-1} (A^D)^\dagger \hat{F}, \quad (3.114)$$

где † означает эрмитовское сопряжение, а * — сопряжение, учитывающее введение метрики специального вида²⁾ в пространстве идеальных бозонов Дайсона.

¹⁾ Особая роль оператора уничтожения идеальной спиновой волны в теории Дайсона обсуждалась, например, в [107].

²⁾ Хорошее изложение общих вопросов, связанных с модификацией метрики в пространстве состояний (на примере индефинитной метрики в квантовой теории поля) дано в книге Надя [179]; см. также [2, гл. 8] и [175].

Метрический оператор F имеет вид

$$\hat{F} = \prod_f \prod_{r=0}^{v_f} \left\{ 1 - \frac{v_f - r}{2S} \right\}, \quad \hat{F}^* = \hat{F}^+ = \hat{F}; \quad (3.115)$$

он «отсекает» высшие (нефизические) состояния из бозонного пространства, для которых $r \geq 2S + 1$ (см. § 5 осн. текста). Очевидно, что для случая бозе-статистики $\hat{F} \equiv 1$, и операции $+$ и $*$ совпадают.

Наряду с представлениями Гольштейна — Примакова и Дайсона — Малеева можно рассматривать и более общее представление [130] (см. также [108]):

$$\begin{aligned} S_f^+ &\rightarrow \sqrt{2S} a_f^+ \varphi_{1-x}(n_f), & S_f^- &\rightarrow \sqrt{2S} \varphi_x(n_f) a_f, \\ S_f^z &\rightarrow S - n_f, & n_f &= a_f^+ a_f, \\ \varphi_x(n_f) &= (1 - n_f/2S)^x, & 0 &\leq x \leq 1; \end{aligned} \quad (3.116)$$

при $x = 0$ или 1 оно переходит в (5.23) (или сопряженное ему), а при $x = 1/2$ — в (5.16) (см. осн. текст). Кроме того, возможны и другие представления, например, с помощью спаренных бозонов Швингера (см. общую схему в [176] и обобщение на произвольное S в [181]) или с помощью двух наборов бозе-операторов, учитывающих соответственно динамику и кинематику спиновой системы (аналогично частицам и шпурионам в квантовой теории поля; см. работы Лиу и Чоу [112]); наконец, возможно также представление с помощью двух наборов ферми-операторов (см. Маттис [176], а также [189, 190]). Не всегда, однако, выполнение перестановочных соотношений при конкретной алгебраической реализации гарантирует корректность получаемых физических результатов; очень важную роль здесь играет учет дополнительных условий типа правил сумм, а также определение пространства состояний и скалярного произведения в нем (см. по этому поводу дискуссию в работах [112]).

2. Рассмотрим подробнее некоторые аспекты теории Дайсона для $S = 1/2$, основанной на преобразовании операторов в импульсном пространстве

$$b_k^+ \rightarrow a_k^+, \quad b_k \rightarrow a_k - \frac{e}{\sqrt{N}} \sum_q v_{k-q} a_q, \quad \rho_k \rightarrow v_k, \quad (3.117)$$

где

$$[\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = \delta_{kk'}, \quad [\alpha_k, v_{k'}] = \frac{\alpha_{k+k'}}{\sqrt{N}},$$

$$v_k = v_{-k}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \alpha_q^+ \alpha_{q+k},$$

а дополнительное условие имеет вид

$$\sum_{qp} \alpha_q^+ v_{q+k-p} \alpha_p = 0 \quad \text{при любом } k. \quad (3.118)$$

Гамильтониан (1.26) в терминах операторов α_k , α_k^+ и v_k имеет весьма громоздкий вид и содержит формы второго, четвертого и шестого порядков:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^D = E^0 + \sum_k \left\{ A(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \frac{1}{2} C(k) (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_{-k} \alpha_k) \right\} - \\ - \frac{1}{2} \sum_k I(k) v_k v_{-k} + \varepsilon \frac{\xi + \eta}{4\sqrt{N}} \sum_{kq} I(k) \alpha_k^+ v_{k-q} \alpha_q + \\ + \varepsilon \frac{\xi - \eta}{4\sqrt{N}} \sum_{kq} I(k) \alpha_{-k} v_{k-q} \alpha_q + \\ + \frac{\varepsilon^2}{2N} \sum_{kpq} C(k) v_{k-q} \alpha_q v_{-k-p} \alpha_p; \quad (3.119) \end{aligned}$$

определения величин E^0 , $A(k)$ и $C(k)$ даны в (1.26а), кинематические члены, содержащие $\varepsilon (=1)$, указаны явно; учтено также дополнительное условие (3.118). Ограничимся в дальнейшем лишь случаем модели «легкая ось» с $\eta = \xi$, $C(k) = 0$; тогда гамильтониан (3.119) принимает вид (ср. с (14.24) — (14.27)):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^D = E^0 + \sum_k E_k^B \alpha_k^+ \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_k I(k) v_k v_{-k} + \\ + \frac{\varepsilon \xi}{2\sqrt{N}} \sum_{kq} I(k) \alpha_k^+ v_{k-q} \alpha_q; \quad (3.120) \end{aligned}$$

соответственно, для эрмитово-сопряженного оператора имеем

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}^D)^+ = E^0 + \sum_k E_k^B \alpha_k^+ \alpha_k - \frac{1}{2} \sum_k I(k) v_k v_{-k} + \\ + \frac{\varepsilon \xi}{2\sqrt{N}} \sum_{kq} I(q) \alpha_k^+ v_{k-q} \alpha_q, \quad (3.120a) \end{aligned}$$

так что дайсон-образ \mathcal{H}^D спинowego гамильтониана не является эрмитовым,

$$\mathcal{H}^D - (\mathcal{H}^D)^+ = \frac{\varepsilon \xi I(0)}{2\sqrt{N}} \sum_{kq} (\gamma_k - \gamma_q) \alpha_k^+ \gamma_{k-q} \alpha_q \neq 0, \quad (3.1206)$$

однако является самосопряженным в смысле операции (3.114),

$$(\mathcal{H}^D)^* = \hat{F}^{-1} (\mathcal{H}^D)^+ \hat{F} = \mathcal{H}^D, \quad (3.121)$$

так что его среднее значение вещественно (хотя собственные значения могут быть отрицательными и даже комплексными).

Как показано Миллсом и Кенаном [175], именно условие (3.121) обеспечивает оператору \mathcal{H}^D роль инфинитезимального генератора временной эволюции системы, так как соответствующий оператор эволюции $\exp(it\mathcal{H}^D)$ сохраняет в этом случае норму в дайсоновском пространстве. Очевидно, что обычное требование эрмитовости \mathcal{H} и, соответственно, унитарности $\exp(it\mathcal{H})$ является частным случаем (3.121), если метрический оператор является единичным, $F = 1$.

Нетрудно видеть, что гамильтониан \mathcal{H}^D может быть записан в канонической (дайсоновской) форме симметризованного четырехбозонного взаимодействия (см. [105], формула (48)):

$$\mathcal{H}^D = E^0 + \sum_k E_k^B \alpha_k^+ \alpha_k - \frac{1}{4N} \sum_{kqp} V_{kqp}(\xi) \alpha_{p+q}^+ \alpha_{k-q}^+ \alpha_k \alpha_p, \quad (3.122a)$$

где дайсоновский потенциал $V_{kqp}(\xi) = Q(q, q+p, k-q)$ дается формулой (3.69a) (см. также (2.59)) и учитывает как динамическое (продольное и поперечное), так и кинематическое взаимодействие (при $\xi=1$, $\varepsilon=1$, $V_{kqp}(1) \equiv \Gamma_{kp}^q$ в формулах (22), (27) работы [105]).

Соответственно, для оператора $(\mathcal{H}^D)^+$ имеем

$$(\mathcal{H}^D)^+ = E^0 + \sum_k E_k^B \alpha_k^+ \alpha_k - \frac{1}{4N} \sum_{kqp} V_{k-q, -q, p+q}(\xi) \alpha_{p+q}^+ \alpha_{k-q}^+ \alpha_k \alpha_p, \quad (3.1226)$$

где сдвинутый потенциал $V_{k-q, -q, p+q} = Q(q, k, p)$ отличается от V_{kqp} (см. § 3 гл. III) именно из-за наличия кинематических членов (при $\varepsilon = 0$ имело бы место $V_{kqp} = V_q = V_{-q}$, и условие эрмитовости \mathcal{H} было бы выполнено; см. также замечание после формулы (3.76)).

В результате для эрмитово-сопряженных операторов α_k, α_k^+ получаем совершенно различные уравнения движения:

$$i\dot{\alpha}_k = [\alpha_k, \mathcal{H}^D] = E_k^B \alpha_k - \frac{I(0)}{2N} \sum_{qp} \{ \gamma_{k-p} + \gamma_{k-q} - \\ - e\xi (\gamma_{k-p-q} + \gamma_k) \} \alpha_{p+q-k}^+ \alpha_q \alpha_p, \quad (3.123)$$

$$-i\dot{\alpha}_k^+ = [\alpha_k^+, \mathcal{H}^D] = E_k^B \alpha_k^+ - \\ - \frac{I(0)}{N} \sum_{qp} (\gamma_q - e\xi \gamma_{k-q}) \alpha_{k-q}^+ \alpha_{p+q}^+ \alpha_p = \\ = E_k^B \alpha_k^+ - \frac{1}{N} \sum_q V_{kq}(\xi) \alpha_{k-q}^+ \gamma_{-q}, \quad (3.124)$$

которые не переходят друг в друга при операции $^+$, что отличается от обычной ситуации для ферми- и бозе-систем. Коллективный оператор γ_k удовлетворяет уравнению движения

$$i\dot{\gamma}_k = [\gamma_k, \mathcal{H}^D] = \\ = \frac{\xi I(0)}{2\sqrt{N}} \sum_q (\gamma_q - \gamma_{k-q}) \alpha_{-q}^+ \left\{ \alpha_{-q+k} - \frac{\varepsilon}{\sqrt{N}} \sum_p \gamma_{-q+k-p} \alpha_p \right\}, \quad (3.125)$$

объединяя (3.125) с (3.123), нетрудно получить следующее уравнение:

$$\left(i \frac{d}{dt} - E_k^B \right) \left(\alpha_k - \frac{\varepsilon}{\sqrt{N}} \sum_p \gamma_{k-p} \alpha_p \right) = \\ = - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q V_{kq}(\xi) \gamma_q \left(\alpha_{k-q} - \frac{\varepsilon}{\sqrt{N}} \sum_p \gamma_{k-q-p} \alpha_p \right). \quad (3.126)$$

Разумеется, с тем же основанием можно было бы использовать для получения уравнений движения оператор $(\mathcal{H}^D)^+$; поскольку, однако, ни один из операторов

$\alpha_k, \alpha_k^+, v_k$ не коммутирует с $\mathcal{H}^D - (\mathcal{H}^D)^\dagger$ из (3.2306), эти уравнения движения не совпадают с (3.123) — (3.125). Точнее, учитывая, что $[A, (\mathcal{H}^D)^\dagger] = -[A^\dagger, \mathcal{H}^D]^\dagger$, имеем

$$-(i\dot{A}^+)^\dagger \neq i\dot{A} \quad (A = \alpha_k, \alpha_k^+, v_k); \quad (3.127)$$

это означает, что в теории Дайсона операции эрмитового сопряжения и дифференцирования по времени, вообще говоря, не коммутируют.

Легко видеть, что в соответствии с преобразованием Дайсона — Малеева (3.117) уравнения движения (3.126), (3.124) и (3.125) являются «дайсон-образами» соответствующих спинных уравнений движения: уравнения (1.27) для b_k (и сопряженного к нему), а также (1.30) для ρ_k . Весьма существенно, что уравнение (3.123) для «особого» оператора α_k в теории Дайсона не имеет спинного прообраза; оказывается, что именно оно играет наиболее важную роль в этой теории (во всяком случае, для нахождения одночастичного спектра).

Можно ввести далее, аналогично § 4 гл. I, одномагнетонную функцию Грина $G_k^D(t - \tau) = \langle \langle \alpha_k(t), \alpha_k^+(\tau) \rangle \rangle$ и найти уравнения движения для нее, дифференцируя по первому или второму аргументу; в обоих случаях легко получить для $G_k^D(t - \tau)$ формально точное решение вида (1.59) с $\langle [\alpha_k, \alpha_k^+] \rangle = 1$. Повторяя далее рассуждения, приведенные в § 3 гл. III, нетрудно показать, что использование уравнения (3.124) для α_k^+ приводит к уравнению для T -матрицы (3.88), а использование уравнения (3.123) для α_k , не имеющего спинного аналога, — к уравнению для сопряженной T^D -матрицы (3.89). Последнее уравнение, как показано в § 3 гл. III, значительно удобнее для решения при малых k и низких θ и строго совпадает с теорией Дайсона [105], хотя, как следует из работы Кука и Герша [156], уравнение (3.88) приводит в точности к тем же результатам. Доказанное нами свойство (3.90) подтверждает, что физическая эквивалентность двух T -матриц не является случайной: выбор того или иного уравнения движения является вопросом технического удобства и в правильной теории не может влиять на конечные физические результаты.

Что касается кинематических членов в $E_k^D(t)$, то они отсутствуют ввиду того, что их нет теперь в бозевских коммутаторах вида $[j_{kqp}^D, \alpha_k^+]$ (ср. с (3.86)). С другой стороны, наличие этих членов теперь не требуется, так как уравнение для σ^D имеет, в соответствии с блоховским, вид (1.16), $\sigma^D = (1/2) - \nu$, $\nu \equiv \langle v_0 \rangle / \sqrt{N} = (1/N) \sum_p \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle$, так что член θ^3 вообще не появляется (это уравнение, однако, не применимо в области фазового перехода вблизи θ_c). Заметим теперь, что при проведении аппроксимаций в области низких температур в духе теоремы К. Блоха — Вика, величину $\langle b_k^+ b_k \rangle = 2\sigma n(E_k)$ можно заменять величиной

$$\begin{aligned} \langle \alpha_k^+ \left(\alpha_k - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q v_{k-q} \alpha_q \right) \rangle &\approx \langle \alpha_k^+ \alpha_k \rangle - \\ &- \langle \alpha_k^+ \frac{1}{N} \sum_{qp} \overline{\alpha_p^+ \alpha_{p+k-q}} \alpha_q \rangle = 2\sigma^D n(E_k), \quad (3.128) \\ \sigma^D &= \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_p \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle, \quad n(E_k) = (e^{E_k/\theta} - 1)^{-1}. \end{aligned}$$

3. В последние годы результаты теории Дайсона [105] были вновь получены рядом авторов с помощью различных методов, например, в рамках термодинамической (мацубаровской) теории возмущений с использованием диаграммной техники (Шаницкий [173]), а также на основе метода двухвременных функций Грина [178]. Диаграммный подход в приближении T -матрицы для гамильтониана Дайсона был развит Ахиезером, Барьяхтаром и Пелетминским [2], а также Зильберлиттом и Харрисом и др. [166] с учетом связанных состояний, а для спинового гамильтониана с применением техники Вакса — Ларкина — Пикина [11] — Изюмовым и др. [13].

Особое внимание уделялось доказательству эквивалентности «симметричного» квазибозонного представления Гольштейна — Примакова [36] и «несимметричного» — Дайсона — Малеева [105, 107] (см. (3.116)). В борновском приближении (линейном по $1/S$) это впервые удалось Т. Огучи [36] (см. также [37], [127] и [117]), а во втором порядке теории возмущений

(с точностью до $1/S^2$) — С. В. Тябликову и Е. Н. Яковлеву [160]. Кук и Хан [108] показали это во всех порядках теории возмущений по $1/S$, построив приближение T -матрицы; в отличие от [36], они использовали разложение спиновых операторов в ряд по нормальным произведениям¹⁾ a_i, a_i^+ , а не по степеням $n_i = a_i^+ a_i$. При этом гамильтониан сохранял эрмитовость, причем разложение обрывалось на члене $(2S+1)$ -го порядка, а для исключения вклада нефизических состояний при $S = 1/2$ к нему добавлялось взаимодействие типа «твердых шаров» $V = v_0 \sum_i (b_i^+)^2 b_i^2 (v_0 \rightarrow \infty)$. Этот прием, впервые предложенный Ван Кранендонком и Моритой [180], использовался также в ряде других работ [11, 13, 108, 109]. Работа Дэвиса [109] наиболее близко примыкает к [108], в ней дана явная оценка вклада отброшенных «несобственных» частей бозонных образов спиновых операторов. На основе уравнения Липпмана — Швингера для двухчастичной T -матрицы (в пределе низких температур и плотностей) показано, что наличие конечного v_0 ведет, помимо существования связанных состояний ниже спин-волнового континуума, к появлению изолированного полюса, дающего экспоненциально малый вклад в термодинамику. Кроме того, показано, что у T -матрицы имеются отличные от нуля члены вне массовой поверхности; их наличие обязано кинематике, и хотя вклад их не мал, они точно компенсируются в выражении для спектра магнонов и поперечной восприимчивости (ср. с исключением кинематического члена в § 3 гл. III, формула (3.87)).

Дуглас [110], следуя тем же идеям, по существу доказал (хотя и с меньшей степенью точности) те же результаты, что и в [109]; в [110] рассмотрен случай $S = 1/2$, но с анизотропным взаимодействием ($\xi = \eta \neq 1$), причем использовано представление когерентных состояний Глаубера (см., например, в [184]), хорошо применимое для любых квазибозевских систем.

¹⁾ Аналогичная идея была высказана значительно ранее В. М. Аграновичем и Тошичем (см. [182], гл. 10) и получила дальнейшее развитие с помощью введения квазипаулиевских операторов в [183].

Тот факт, что дайсоновские магноны с энергиями E_k^D действительно хорошо описывают спиновую систему при низких температурах и малых импульсах, подтверждается результатом К. Хеппа [185]. Опираясь на теорию рассеяния в формулировке Хаага — Рюэля, Хепп показал, что гамильтониан изотропной модели Гейзенберга асимптотически при $t \rightarrow \infty$ диагонален на фоковских подпространствах магнонов, вложенных в гильбертово пространство состояний квантовой спиновой системы.

С наиболее общей точки зрения гейзенберговский ферромагнетик рассматривается также, как нетривиальный пример разрешимой модели алгебраической квантовой теории поля, обладающей нарушенной симметрией по отношению к группе вращений (см. работы [186, 187]). С помощью аппарата C^* -алгебры локальных наблюдаемых (см., например, [188]) в этих работах доказан, в частности, ряд теорем существования и устойчивости термодинамических состояний (в том числе основного) для бесконечной спиновой системы.

ГЛАВА IV

ОБОБЩЕННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ — ФОКА ДЛЯ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА (АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ ФАЗА)

§ 1. Гамильтониан и уравнения движения. Корреляционные функции и функции Грина

Гамильтониан двухподрешеточного антиферромагнетика в антиферромагнитной фазе ($0 \leq H \leq H_c(0)$) можно выразить через операторы спинных отклонений (при $S = 1/2$ — операторы Паули), если подвергнуть (1.3) с $I_{f-g} \leq 0$, $-\eta \leq \xi \leq \eta$, $0 \leq \eta \leq 1$ унитарному преобразованию (1.17) с $\alpha = x$, $\varphi^F(H) = 0$, $\varphi^G(H) = \pi$ согласно (1.18). Указанная процедура эквивалентна проведению в (1.3) замены (см. (5.13) — (5.15) основного текста)

$$\begin{aligned} S_f^+ &= a_f, \quad S_f^- = a_f^+, \quad S_f^z = \frac{1}{2} - \rho_f, \quad \rho_f = a_f^+ a_f \quad (f \in F), \\ S_g^+ &= b_g^+, \quad S_g^- = b_g, \quad S_g^z = -\frac{1}{2} + \tau_g, \quad \tau_g = b_g^+ b_g \quad (g \in G). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Учитывая трансляционную инвариантность в пределах каждой подрешетки (с числом узлов $N/2$), удобно перейти в импульсное представление:

$$\begin{aligned} a_k &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_f a_f e^{i(f, k)}, \quad b_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_g b_g e^{i(g, k)}, \\ \rho_k &= \rho_{-k}^+ = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_f \rho_f e^{-i(f, k)} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q a_q^+ a_{q+k}, \quad (4.2) \\ \tau_k &= \tau_{-k}^+ = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_g \tau_g e^{-i(g, k)} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q b_q^+ b_{q+k}; \end{aligned}$$

операторы $\{a_k, a_k^+, \rho_k\}$ (соответственно, $\{b_k, b_k^+, \tau_k\}$) удовлетворяют перестановочным соотношениям вида (1.24) и дополнительным условиям (1.25); при этом все операторы из разных групп попарно коммутируют между собой,

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'} - \frac{e2\sqrt{2}}{\sqrt{N}} \rho_{k-k'}, \quad (4.2a)$$

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k, b_{k'}] = [a_k, b_{k'}^+] = 0.$$

Гамильтониан антиферромагнитной фазы в операторах (4.2) имеет вид (ср. с (1.26), (1.26a))

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & E^0 + A^{(+)} \sum_k a_k^+ a_k + A^{(-)} \sum_k b_k^+ b_k + \sum_k I(k) \rho_k \tau_{-k} + \\ & + \sum_k C(k) (a_k^+ b_{-k}^+ + b_{-k} a_k) + \sum_k D(k) (a_k b_k^+ + b_k a_k^+), \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$\begin{aligned} E^0 = & -N |I(0)|/8, \quad A^{(\pm)} = \pm g\mu_B H + A, \quad A = |I(0)|/2, \\ C(k) = & C^*(k) = C(-k) = (|I(0)|/4)(\xi + \eta) \gamma_k, \quad (4.3a) \\ D(k) = & D^*(k) = D(-k) = (|I(0)|/4)(\xi - \eta) \gamma_k. \end{aligned}$$

Заметим, что, в отличие от (1.25), аномальные члены в (4.3) присутствуют при любых значениях ξ, η ; соответственно, E^0 не является энергией основного состояния, и \mathcal{H} не коммутирует отдельно ни с ρ_0 , ни с τ_0 (лишь при $\eta = \pm \xi$ интегралом движения является $\rho_0 \mp \tau_0$; ср. с (1.5) (1.56)). Очевидно, что ввиду эквивалентности подрешеток F и G гамильтониан (4.3) (а следовательно, и все корреляционные функции) инвариантен относительно замены

$$a_k \rightleftharpoons b_k, \quad \rho_k \rightleftharpoons \tau_k, \quad H \rightarrow -H. \quad (4.4)$$

Уравнение движения для оператора a_k имеет вид

$$i\dot{a}_k = A^{(+)} a_k + C(k) b_{-k}^+ + D(k) b_k + J_k, \quad (4.5)$$

где

$$J_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q I(q) \tau_q a_{k-q} - \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q V_{kq}^{(-)} \rho_q b_{k-q} - \\ - \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q V_{kq}^{(+)} \rho_q b_{-k+q}, \quad (4.6)$$

$$V_{kq}^{(\pm)} = V_{qk}^{(\pm)} = (\varepsilon | I(0) | 2) (\xi \pm \eta) \gamma_{k-q}$$

(величина $\varepsilon (=1)$, как и ранее, измеряет отклонение оператора a_k от бозевости; потенциал $V_{kq}^{(\pm)}$, как и в (1.286), зависит не только от импульса передачи q , но и от внешнего импульса k). Только в частном случае модели Изинга $\xi = \eta = 0$ уравнение (4.5) принимает вид

$$i\dot{a}_k = A^{(+)} a_k + J_k, \quad J_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q I(q) \tau_q a_{k-q} \quad (4.5a)$$

(ср. с (1.29)). Уравнение движения для b_k получается из (4.5) с помощью замены (4.4); при этом оператор J_k переходит в I_k :

$$I_k = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q I(q) \rho_q b_{k-q} - \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q V_{kq}^{(-)} \tau_q a_{k-q} - \\ - \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q V_{kq}^{(+)} \tau_q a_{-k+q}. \quad (4.7)$$

Полезно заметить, что

$$i \frac{d}{dt} (a_k \pm a_{-k}^+ \pm b_k + b_{-k}^+) = g\mu_B H (a_k \mp a_{-k}^+ \mp b_k + b_{-k}^+) + \\ + (A - C(k) \pm D(k)) (a_k \mp a_{-k}^+ \pm b_k - b_{-k}^+) + \\ + (J_k \mp J_{-k}^+ \pm I_k - I_{-k}^+), \quad (4.8)$$

причем величина

$$A - C(k) \pm D(k) = (|I(0)|/2) (1 - x_{\mp} \gamma_k) \quad (x_+ = \xi, x_- = \eta) \quad (4.8a)$$

обращается в нуль при $k=0$ и при η или ξ , равном единице. Если учесть также, что аналогичное свойство имеет место и для величины

$$I(q) + V_{0,-q}^{(+)} \pm V_{0q}^{(-)} = I(0) \gamma_q (1 - x_{\mp}),$$

которая при $k = 0$ определяет третье слагаемое в правой части (4.8), то нетрудно установить наличие при $H = 0$ в антиферромагнетике типа «легкая плоскость» интегралов движения — поперечных компонент полного спина (ср. с (1.326))

$$\begin{aligned} \dot{S}^{x,y} &= \pm g\mu_B HS^{y,x} \quad \text{при } x_{\mp} = 1; \\ S^z &= S_F^z + S_G^z \quad (\alpha = x, y) \end{aligned} \quad (4.9)$$

(для изотропной модели (Γ) с $\eta = \xi = 1$ при $H = 0$ сохраняются обе компоненты).

Некоторые выводы о поведении спектра магнонов в области малых k можно сделать тогда на основе теоремы Голдстоуна — Н. Н. Боголюбова (см. конец § 2 гл. I). Существенное отличие от случая $I > 0$ состоит, однако, в том, что при $I < 0$ возникает уже не одна, а две ветви спектра E_k^{\pm} магнонов (см. замечание после формулы (1.15)). Оказывается, что в случае ЛП бесщелевой является лишь одна ветвь, а в случае Γ с более высокой степенью вырождения — обе¹⁾; при этом в обоих случаях энергия соответствующей «голдстоуновской моды» является *линейной* по k (в отличие от модели Γ в ферромагнетике, где $E_k \sim k^2$).

Аналогично, для коллективного оператора ρ_k имеем

$$\begin{aligned} i\dot{\rho}_k &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q C(q) (b_{-q}^+ a_{q-k}^+ - b_{-q} a_{q+k}) + \\ &+ \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_q D(q) (b_q a_{q-k}^+ - b_q^+ a_{q+k}); \end{aligned} \quad (4.10)$$

соответственно, правая часть $i\dot{\tau}_k$ получится проведением замены (4.4) в (4.10). В результате для оператора $\rho_k - \tau_k$ получим уравнение вида (4.10), в котором величины $C(q)$ и $D(q)$ заменены, соответственно, $W_{kq}^{(\pm)}$, определенными в (1.30а).

¹⁾ Согласно (1.15) модель Γ с $I < 0$ унитарно эквивалентна модели A при $I > 0$, причем в обоих случаях обе ветви полностью совпадают, $E_k^+ = E_k^- = E_k$, и не имеют щели (см. также анализ спектра антиферромагнетика на основе неравенства Н. Н. Боголюбова о $\ll 1/k^2 \gg$ в работе [33]).

Таким образом, при $k = 0$ оператор $\rho_0 - \tau_0$ (а с ним и $S^z = S_F^z + S_G^z$ — оператор z -компоненты полного спина) является интегралом движения при $\xi = \eta$ (ср. с (1.31a)); в частном случае $\xi = \eta = 0$ это имеет место для всех k . Аналогично, оператор $\rho_0 + \tau_0$ (а вместе с ним и оператор $S_F^z - S_G^z$) является интегралом движения при $\xi = -\eta$ (ср. с (1.31б)).

Далее, по аналогии с (1.33), введем одночастичные корреляционные функции нормального и аномального типов для операторов из одной или различных подрешеток:

$$\bar{n}_k^a = \langle a_k^+ a_k \rangle, \quad \bar{n}_k^b = \langle b_k^+ b_k \rangle, \quad \langle b_k^+ b_k \rangle_H = \langle a_k^+ a_k \rangle_{-H}, \quad (4.11)$$

$$\bar{m}_k = \bar{m}_k^* = \bar{m}_{-k} = \langle a_k^+ b_{-k} \rangle, \quad \bar{q}_k = \bar{q}_k^* = \bar{q}_{-k} = \langle a_k^+ b_k \rangle \quad (4.11a)$$

и продольную корреляционную функцию

$$\chi_k = \chi_k^* = \chi_{-k} = \langle \rho_k \tau_{-k} \rangle. \quad (4.11б)$$

Индекс « $\pm H$ » означает усреднение в смысле (1.34) с внешним магнитным полем, направленным вдоль оси квантования спина a - или b -подрешетки; очевидно, что $\bar{n}_k^a = \bar{n}_k^b$ при $H = 0$, а функции \bar{m}_k , \bar{q}_k и χ_k не зависят от знака H .

В отличие от (1.35a), параметром дальнего порядка является теперь удельная намагниченность подрешетки $\sigma^{a,b}$, которая дается выражением

$$\sigma^{a,b} = \langle S_{F,G}^z \rangle = \pm \frac{1}{2} \mp \bar{n}^{a,b}, \quad \bar{n}^{a,b} = \frac{2}{N} \sum_k \bar{n}_k^{a,b}; \quad (4.12)$$

в то же время полная удельная намагниченность решетки является антисимметричной функцией внешнего поля

$$M = \langle S_F^z \rangle + \langle S_G^z \rangle = \bar{n}^b - \bar{n}^a; \quad M(-H) = -M(H), \quad M(0) = 0 \quad (4.12a)$$

и обращается в нуль при $H = 0$ (последнее свойство является типичным именно для антиферромагнетиков, см. § 1 основного текста).

Соответственно, корреляционные функции поперечных и продольных компонент спинов в узлах — ближайших

соседях (принадлежащих различным подрешеткам) имеют вид (ср. с (1.37)):

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle a_f^+ b_{f+\delta}^+ \rangle = \frac{2}{N} \sum_k \gamma_k \bar{m}_k, \\ \kappa &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle a_f^+ b_{f+\delta} \rangle = \frac{2}{N} \sum_k \gamma_k \bar{q}_k, \\ \xi &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle \rho_f \tau_{f+\delta} \rangle = \frac{2}{N} \sum_k \gamma_k \chi_k, \\ \tilde{\xi} &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \langle S_f^z S_{f+\delta}^z \rangle = -\frac{1}{4} + \frac{1}{2} (\bar{n}^a + \bar{n}^b) - \xi.\end{aligned}\tag{4.13}$$

По аналогии с формулами (1.39) — (1.41), нетрудно получить также, что

$$\begin{aligned}\sum_k \langle a_k^+ i \dot{a}_k \rangle &= A^{(+)} \sum_k \bar{n}_k^a + \sum_k C(k) \bar{m}_k + \\ &+ \sum_k D(k) \bar{q}_k + \sum_k \langle a_k^+ J_k \rangle,\end{aligned}\tag{4.14}$$

причем

$$\sum_k \langle a_k^+ J_k \rangle = -(N | I(0) | / 2) \xi,\tag{4.14a}$$

что дает возможность вычислить ξ , зная лишь одно-частичные спектральные плотности; кроме того,

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H} \rangle &= E^0 + (N/2) (A^{(+)} \bar{n}^a + A^{(-)} \bar{n}^b) - (N | I(0) | / 2) \xi + \\ &+ 2 \sum_k (C(k) \bar{m}_k + D(k) \bar{q}_k),\end{aligned}\tag{4.15}$$

Наконец, для средних коммутаторов имеем

$$\langle [a_k, a_k^+] \rangle = \delta_{kk'} (1 - 2\epsilon \bar{n}^a), \quad \langle [b_k, b_k^+] \rangle = \delta_{kk'} (1 - 2\epsilon \bar{n}^b).\tag{4.16}$$

Для нахождения ренормированного спектра и корреляционных функций (в полной аналогии с § 4 гл. I) удобно ввести матричную функцию Грина $\mathbf{G}_k(t) = \langle \langle B_k(t), B_k^+ \rangle \rangle$, где B_k — четырехкомпонентный оператор, построенный на $a_k, a_{-k}^+, b_k, b_{-k}^+$ и удовлетворяющий

уравнению движения вида (1.44), где

$$B_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_{-k}^+ \\ a_{-k}^+ \\ b_k \end{pmatrix}, \quad J_k = \begin{pmatrix} J_k \\ -J_{-k}^+ \\ -J_{-k}^+ \\ I_k \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

$$\omega_k = \begin{pmatrix} A^{(+)} & C(k) & 0 & D(k) \\ -C(k) & -A^{(-)} & -D(k) & 0 \\ 0 & -D(k) & -A^{(+)} & -C(k) \\ D(k) & 0 & C(k) & A^{(-)} \end{pmatrix}.$$

§ 2. Общая формулировка ОПХФ

Все дальнейшие построения § 4 гл. I (формулы (1.46)–(1.56)) без труда обобщаются на четырехкомпонентный случай; ограничиваясь далее лишь обобщенным приближением Хартри—Фока (см. § 4 гл. II), рассмотрим уравнение вида (2.1), в котором матрица Ω_k , определенная в (2.2), имеет не два, как для ферромагнетика, а в общем случае четыре независимых элемента (вещественных и не зависящих от направления k):

$$\begin{aligned} \Omega^{11}(H) &= -\Omega^{22}(-H) = -\Omega^{33}(H) = \\ &= \Omega^{44}(-H) = A^{(+)} + R^{11}, \\ \Omega_k^{12}(H) &= -\Omega_k^{21}(-H) = -\Omega_k^{34}(H) = \\ &= \Omega_k^{43}(-H) = C(k) + R_k^{12}, \quad (4.18) \\ \Omega^{13}(H) &= -\Omega^{31}(H) = -\Omega^{24}(-H) = \Omega^{42}(-H) = R^{13}, \\ \Omega_k^{14}(H) &= -\Omega_k^{32}(H) = -\Omega_k^{23}(-H) = \\ &= \Omega_k^{41}(-H) = D(k) + R_k^{14}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R^{11} &= \langle [J_k, a_k^+] \rangle \langle [a_k, a_k^+] \rangle^{-1}, \\ R_k^{12} &= \langle [J_k, b_{-k}^+] \rangle \langle [b_k^+, b_k] \rangle^{-1}, \\ R^{13} &= \langle [J_k, a_{-k}] \rangle \langle [a_k^+, a_k] \rangle^{-1}, \\ R_k^{14} &= \langle [J_k, b_k^+] \rangle \langle [b_k, b_k^+] \rangle^{-1} \end{aligned} \quad (4.18a)$$

(ср. с формулами (2.3а), (2.4)); при получении (4.18) использовалось свойство симметрии (4.4).

Решая систему вида (2.1) четырех линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами, получаем решение для $G_k(t)$ в виде (2.5), где U_k — матрица, составленная из столбцов — собственных векторов Ω_k из (4.18), $E_k = U_k^{-1} \Omega_k U_k$ — диагональная матрица, четыре компоненты которой $\pm E_k^{\pm}$ являются вещественными корнями биквадратного секулярного уравнения вида (2.6). В частности, для функций $G_k^{11}(t)$, $G_k^{21}(t)$, $G_k^{31}(t)$ и $G_k^{41}(t)$ имеем

$$G_k^{11}(t) = \langle\langle a_k(t), a_k^+ \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle[a_k, a_k^+] \rangle \left\{ (u_k^{11})^2 e^{-iE_k^+ t} - (v_k^{11})^2 e^{iE_k^+ t} + (u_k^{12})^2 e^{-iE_k^- t} - (v_k^{12})^2 e^{iE_k^- t} \right\}, \quad (4.19)$$

$$G_k^{21}(t) = \langle\langle b_k^+(t), a_k^+ \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle[a_k, a_k^+] \rangle \left\{ u_k^{11} v_k^{21} e^{-iE_k^+ t} - v_k^{11} u_k^{21} e^{iE_k^+ t} + v_k^{22} u_k^{12} e^{-iE_k^- t} - u_k^{22} v_k^{12} e^{iE_k^- t} \right\}, \quad (4.20)$$

$$G_k^{31}(t) = \langle\langle a_k^+(t), a_k^+ \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle[a_k, a_k^+] \rangle \times \left\{ u_k^{11} v_k^{11} (e^{-iE_k^+ t} - e^{iE_k^+ t}) + u_k^{12} v_k^{12} (e^{-iE_k^- t} - e^{iE_k^- t}) \right\}, \quad (4.21)$$

$$G_k^{41}(t) = \langle\langle b_k(t), a_k^+ \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle[a_k, a_k^+] \rangle \left\{ u_k^{11} u_k^{21} e^{-iE_k^+ t} - v_k^{11} v_k^{21} e^{iE_k^+ t} + u_k^{22} u_k^{12} e^{-iE_k^- t} - v_k^{22} v_k^{12} e^{iE_k^- t} \right\}; \quad (4.22)$$

остальные элементы матрицы $G_k(t)$ легко могут быть получены из (4.19) — (4.22) с учетом свойства симметрии (4.4). Величины u_k^{ij} , v_k^{ij} ($i, j = 1, 2$) в общем случае весьма сложно выражаются через элементы матрицы Ω_k ; имеют место, однако, следующие условия ортонормировки (см. § 13), обеспечивающие выполнение соотношений (4.2а):

$$\begin{aligned} (u_k^{i1})^2 + (u_k^{i2})^2 - (v_k^{i1})^2 - (v_k^{i2})^2 &= 1 \quad (i = 1, 2), \\ u_k^{11} u_k^{21} + u_k^{12} u_k^{22} - v_k^{11} v_k^{21} - v_k^{12} v_k^{22} &= 0, \\ u_k^{11} v_k^{21} + u_k^{12} v_k^{22} - u_k^{21} v_k^{11} - u_k^{22} v_k^{12} &= 0. \end{aligned} \quad (4.23)$$

В частном случае $R_k = 0$, $\Omega_k = \omega_k$ эти величины в точности совпадают с параметрами обобщенного $u-v$.

преобразования Н. Н. Боголюбова — С. В. Тябликова (13.6) (см: также [1, 2, 201]:

$$\begin{aligned} a_k &= u_k^{11} \alpha_k + v_k^{11} \alpha_{-k}^+ + u_k^{12} \beta_k + v_k^{12} \beta_{-k}^+, \\ b_k &= u_k^{21} \alpha_k + v_k^{21} \alpha_{-k}^+ + u_k^{22} \beta_k + v_k^{22} \beta_{-k}^+, \end{aligned} \quad (4.24)$$

где α_k, β_k — операторы уничтожения квазичастиц (магнонов) двух типов с энергиями E_k^+ и E_k^- соответственно,

$$\alpha_k(t) = \alpha_k \exp(-iE_k^+ t), \quad \beta_k(t) = \beta_k \exp(-iE_k^- t), \quad (4.25)$$

причем условия (4.23) обеспечивают «каноничность» преобразования (4.24) в смысле сохранения средних коммутаторов (4.2а) (ср. также § 1 гл. III).

Ренормированные энергии E_k^\pm двух ветвей магнонного спектра зависят от поля H и даются в ОПХФ выражением:

$$\begin{aligned} (E_k^\pm)^2 &= \frac{1}{2} T_k^{(1)} - S_k^{(1)} \pm \frac{1}{2} [(T_k^{(2)})^2 + 4(S_k^{(1)})^2 - 4S_k^{(2)} T_k^{(1)} + \\ &+ 8S_k^{(2)} [\Omega^{11}(H) \Omega^{11}(-H) + \Omega^{13}(H) \Omega^{13}(-H)] + \\ &+ 4[(\Omega_k^{12}(H))^2 - (\Omega_k^{14}(H))^2][(\Omega_k^{12}(-H))^2 - (\Omega_k^{14}(-H))^2] + \\ &+ 8[\Omega^{11}(H) \Omega^{13}(-H) + \Omega^{11}(-H) \Omega^{13}(H)] \times \\ &\times [\Omega_k^{12}(H) \Omega_k^{14}(-H) + \Omega_k^{12}(-H) \Omega_k^{14}(H)]^{1/2}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

где

$$\begin{aligned} T_k^{(1,2)} &= [(\Omega^{11}(-H))^2 - (\Omega^{13}(H))^2] \pm \\ &\pm [(\Omega^{11}(-H))^2 - (\Omega^{13}(-H))^2], \end{aligned} \quad (4.26a)$$

$$S_k^{(1,2)} = \Omega_k^{12}(H) \Omega_k^{12}(-H) \mp \Omega_k^{14}(H) \Omega_k^{14}(-H).$$

В отсутствие поля, $H=0$, спектр (4.26) заметно упрощается:

$$(E_k^\pm)^2 = (\Omega^{11} + \Omega_k^{12} \mp \Omega^{13} \mp \Omega_k^{14})(\Omega^{11} - \Omega_k^{12} \pm \Omega^{13} \mp \Omega_k^{14}), \quad (4.27)$$

и в соответствии с уравнениями движения (4.8), (4.9) отсюда следует отсутствие в ОПХФ щели в одной из ветвей при $k=0$ для модели ЛП (при $x_\pm = 1$ имеем $E_0^\pm = 0$).

При наличии поля, $H \neq 0$, упрощение достигается в важном частном случае модели ЛО ($\eta = \xi$), для которой $D(k) = 0$, $\Omega^{13} = 0$, $\Omega_z^{14} = 0$; при этом матрицы ω_k и Ω_k становятся блочно-диагональными, и в решении (4.19) — (4.22) для $G_k(t)$ следует положить $u_k^{12} = u_k^{21} = v_k^{11} = v_k^{22} = 0$, так что $G_k^{31}(t) = G_k^{41}(t) = 0$,

$$(u_k^{11})^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Omega^{(+)}(H)}{E_k} \right), \quad (v_k^{12})^2 = \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\Omega^{(+)}(H)}{E_k} \right), \quad (4.28)$$

$$u_k^{11} v_k^{12} = - \frac{[\Omega_k^{12}(H) \Omega_k^{12}(-H)]^{1/2}}{2E_k},$$

и спектр принимает вид

$$E_k^{\pm} = \pm \Omega^{(-)}(H) + E_k, \quad (4.29)$$

$$E_k = [(\Omega^{(+)}(H))^2 - \Omega_k^{12}(H) \Omega_k^{12}(-H)]^{1/2};$$

здесь введены обозначения $\Omega^{(\pm)}(H) = (1/2)(\Omega^{11}(H) \pm \pm \Omega^{11}(-H))$, так что $\Omega^{(\pm)}(-H) = \pm \Omega^{(\pm)}(H)$, и при замене $H \rightarrow -H$ ветви переходят друг в друга, $E_k^{\pm} \leftrightarrow E_k^{\mp}$, а E_k , u_k^{11} , v_k^{12} не меняются. При $H = 0$ имеем $\Omega^{(-)}(0) = 0$, $\Omega^{(+)}(0) = \Omega^{11}$, и спектр (4.29) становится двукратно вырожденным:

$$E_k^+ = E_k^- = E_k = V(\Omega^{11} - \Omega_k^{12})(\Omega^{11} + \Omega_k^{12}) \quad (\eta = \xi, H = 0); \quad (4.30)$$

в случае модели Г ($\eta = \xi = 1$) очевидно отсутствие в нем щели.

Таким образом, в случае ЛО поле снимает вырождение и «раздвигает» ветви спектра; аналогичная зависимость от H имеет место и в общем случае для невырожденного спектра E_k^{\pm} . Характерной чертой антиферромагнетика является существование первого критического поля $H_c(\theta)$, определяющего верхнюю границу существования антиферромагнитной фазы (см. (1.18)). Условием, определяющим $H_c(\theta)$, является обращение в нуль энергии активации нижней ветви спектра (E_k^- при $\eta \geq \xi$) при $k = 0$ (см. в связи с этим [145, 204])

$$E_{k=0}^-(H = H_c(\theta)) = 0; \quad (4.31)$$

при $0 \leq H \leq H_c(\theta)$ величины $E_0^\pm(H)$ являются двумя частотами однородного антиферромагнитного резонанса. Учитывая (4.27), легко видеть, что, в частности, для бесщелевой модели ЛП $H_c(\theta) \equiv 0$, т. е. антиферромагнитная фаза неустойчива¹⁾ относительно фазового перехода 1-го рода в спин-флоп фазу и имеет смысл лишь при $H = 0$; для модели ЛО уравнение для критического поля имеет вид

$$\Omega^{(-)}[H_c(\theta)] = E_0[H_c(\theta)]. \quad (4.32)$$

Зная явный вид функций Грина $G_k(t)$, нетрудно получить далее, пользуясь формулой (1.49), спектральную плотность $\Phi_k(\omega)$ и рассчитать затем корреляционные функции $\bar{n}_k^{a,b}$, \bar{m}_k , \bar{q}_k и ζ , входящие в Ω_k и определяющие ренормировку спектра. В дальнейшем будут детально рассмотрены следующие частные случаи: модель ЛП с $H = 0$ в спин-волновом и тьябликовском приближениях, для которых $\Omega^{13} = 0$, и модель ЛО с $H \leq H_c(\theta)$.

Соответственно, имеем для первого случая $u_k^{11} = -u_k^{21} = u_k^{(+)}$, $u_k^{22} = u_k^{12} = u_k^{(-)}$, $v_k^{11} = -v_k^{21} = v_k^{(+)}$, $v_k^{22} = v_k^{12} = v_k^{(-)}$, где

$$(u_k^\pm)^2 = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Omega^{11} \mp \Omega_k^{14}}{E_k^\pm} \right), \quad (v_k^\pm)^2 = \frac{1}{4} \left(-1 + \frac{\Omega^{11} \mp \Omega_k^{14}}{E_k^\pm} \right), \quad (4.33)$$

а E_k^\pm дается формулой (4.27) с $\Omega^{13} = 0$.

Корреляционные функции (4.11) имеют следующий вид:

$$\bar{n}_k^a = \langle [a_k, a_k^+] \rangle \{ [(u_k^{(+)})^2 + (v_k^{(+)})^2] n(E_k^+) + [(u_k^{(-)})^2 + (v_k^{(-)})^2] n(E_k^-) + (v_k^{(+)} + v_k^{(-)})^2 \}, \quad (4.34)$$

$$\bar{m}_k = \langle [a_k, a_k^+] \rangle \{ -(u_k^{(+)} v_k^{(+)}) (2n(E_k^+) + 1) + u_k^{(-)} v_k^{(-)} (2n(E_k^-) + 1) \}, \quad (4.35)$$

$$\bar{q}_k = \langle [a_k, a_k^+] \rangle \{ -[(u_k^{(+)})^2 + (v_k^{(+)})^2] n(E_k^+) + [(u_k^{(-)})^2 + (v_k^{(-)})^2] n(E_k^-) - (v_k^{(-)} + v_k^{(+)})^2 \}. \quad (4.36)$$

¹⁾ Стабилизация основного состояния в модели ЛП достигается введением анизотропии в легкой плоскости ($\eta \neq 1$) либо учетом поля Дзялошинского, приводящего к слабому ферромагнетизму (см. [1, 31]).

Для второго случая имеем $u_k^{11} \equiv u_k$, $v_k^{12} \equiv v_k$, $\bar{q}_k = 0$, так что

$$\bar{n}_k^a = \langle [a_k, a_k^+] \rangle \{ u_k^2 n(E_k^+) + v_k^2 n(E_k^-) + v_k^2 \}, \quad (4.37)$$

$$\bar{m}_k = \langle [a_k, a_k^+] \rangle [\Omega_k^{12}(-H)/\Omega_k^{12}(H)]^{1/2} u_k v_k (n(E_k^+) + n(E_k^-) + 1); \quad (4.38)$$

нетрудно убедиться, что в изотропном пределе полагая $\xi = 1$ в (4.33) — (4.36), так что $\Omega_k^{14} = 0$, и полагая формально $u_k^{(+)} = u_k^{(-)} = u_k/\sqrt{2}$, $v_k^{(+)} = -v_k^{(-)} = v_k/\sqrt{2}$, приходим в точности к тому же результату, что и полагая $\xi = 1$, $H = 0$ в (4.37) — (4.38).

Как и в случае ферромагнетика, уравнение для намагниченности $\sigma^{a,b}$ имеет вид (2.15) или (2.16), в зависимости от степени учета кинематики операторов Паули (с очевидным обобщением величин P , Q и ψ на случай наличия двух ветвей спектра, см. также § 16). Для продольной корреляционной функции ξ имеем, учитывая (4.14), (4.14a) при $H = 0$

$$\xi = -\frac{2}{N|I(0)|} \left\{ \frac{N}{2} R^{11} \bar{n} + \sum_k R_k^{12} \bar{m}_k + \sum_k R_k^{14} \bar{q}_k \right\} \quad (4.39)$$

(ср. с (2.22)), наконец, выражение для средней энергии может быть записано в виде (ср. с (2.23), (2.23a))

$$\langle \mathcal{H} \rangle = E^0 - \Delta E^0 + \langle [a_k, a_k^+] \rangle \sum_k \{ E_k^+ n(E_k^+) + E_k^- n(E_k^-) \} + \frac{N}{2} |I(0)| \xi, \quad (4.40)$$

где

$$\Delta E^0 = 2 \langle [a_k, a_k^+] \rangle \sum_k \{ (v_k^{(+)})^2 E_k^+ + (v_k^{(-)})^2 E_k^- \}. \quad (4.40a)$$

Рассмотрим далее, как и в гл. II, некоторые возможные вычисления матричных элементов Ω_k в ОПХФ.

§ 3. Спин-волновое приближение

1. Повторяя в точности все рассуждения, проведенные в § 2 гл. II, имеем в этом приближении $\rho_k = \tau_k = 0$, так что

$$J_k^B = I_k^B = 0, \quad R_k = 0, \quad \Omega_k = \omega_k; \quad (4.41)$$

тогда спектр магнонов (4.26) принимает вид

$$(E_k^\pm)^B = \left\{ \frac{(A^{(+)})^2 + (A^{(-)})^2}{2} - C^2(k) + D^2(k) \pm \right. \\ \left. \pm \frac{1}{2} [(A^{(+)} - A^{(-)})^2 ((A^{(+)} + A^{(-)})^2 - 4C^2(k)) + \right. \\ \left. + 4D^2(k)(A^{(+)} + A^{(-)})^2]^{1/2} \right\}, \quad (4.42)$$

или, используя обозначения (2.28а),

$$\epsilon_k^\pm(h) = \{h^2 + (1 - \xi\eta\gamma_k^2) \pm \\ \pm \sqrt{h^2[4 - (\xi + \eta)^2\gamma_k^2 + (\xi - \eta)^2\gamma_k^2]}\}^{1/2} \quad (4.43)$$

(см. также [201]), что дает в частном случае ЛО ($\eta = \xi$)

$$\epsilon_k^\pm(h) = \epsilon_k \pm h, \quad \epsilon_k = \sqrt{1 - \xi^2\gamma_k^2} \quad (\eta = \xi). \quad (4.44)$$

Полагая $k=0$, получаем две частоты АФМР, различным образом зависящие от h (ср. с (2.28)):

$$\epsilon_0^\pm(h) = \{h^2 + (1 - \xi\eta) \pm \sqrt{h^2[4 - (\xi + \eta)^2] + (\xi - \eta)^2}\}^{1/2}, \quad (4.45)$$

или, соответственно, при $\eta = \xi$

$$\epsilon_0^\pm(h) = \epsilon_0 \pm h, \quad \epsilon_0 = \sqrt{1 - \xi^2} \quad (\eta = \xi, h=0). \quad (4.45a)$$

При $h=0$ энергия активации, или щель в спектре магнонов, имеет вид

$$\epsilon_0^\pm = \sqrt{(1 \mp \xi)(1 \pm \eta)}, \quad \epsilon_0^+ \geq \epsilon_0^- \quad (\eta \geq \xi, h=0), \quad (4.46)$$

причем для ЛП ($\eta = 1, |\xi| \leq 1$) $\epsilon_0^+ = \sqrt{2}\sqrt{1 - \xi}$, $\epsilon_0^- = 0$;

тогда как для ЛО ($\eta = \xi$) $\epsilon_0^+ = \epsilon_0^- = \epsilon_0 = \sqrt{1 - \xi^2}$; при малых $h \rightarrow 0$ в общем случае $\xi \neq \eta$ имеем

$$\epsilon_0^\pm(h) \simeq \epsilon_0^\pm + h^2 f_\pm, \quad \epsilon_0^\pm f_\pm = \frac{1}{2} \pm (\eta - \xi)^{-1} \sqrt{1 - (\xi + \eta)^2/4}, \quad (4.47)$$

тогда как при $\eta = \xi$ имеет место линейный закон (4.45а).

Очевидно, что при возрастании h ветвь $\epsilon_0^-(h)$ является падающей, причем уравнение (4.31) имеет два корня, и для критического поля при нуле температуры находим

$$\epsilon_0^-(h_c) = 0, \quad h_c^{(1,2)} = \sqrt{1 - x_{(1,2)}^2} \quad (x_1 = \eta, x_2 = \xi); \quad (4.48)$$

при $\eta \neq \xi$ неустойчивость определяется наименьшим из значений $h_c^{(1,2)}$, т. е. она наступает, соответственно, при $h = h_c^{(1)} = \sqrt{1 - \eta^2}$ при $\eta > \xi$ и $h = h_c^{(2)} = \sqrt{1 - \xi^2}$ при $\eta < \xi$ (в частности, $h_c^{(1)} = 0$ для ЛП с $\eta = 1$). Для модели ЛО с $\eta = \xi$ величина $h_c^{(1)} = h_c^{(2)} = h_c = \varepsilon_0 = \sqrt{1 - \xi^2}$; в частности, для изотропной модели $h_c = \varepsilon_0 = 0$, тогда как для модели Изинга $h_c = \varepsilon_0 = 1$. Вблизи критического поля ($h \rightarrow h_c - 0$) зависимость $\varepsilon_0^-(h)$ при произвольных $\eta > \xi$ имеет вид

$$\varepsilon_0^-(h) \simeq \sqrt{h_c} \sqrt{h_c - h} (\eta^2 - \xi^2)^{1/2} [h_c^2 + (1 - \xi\eta)]^{-1/2}, \quad (4.49)$$

$$h_c = \sqrt{1 - \eta^2};$$

при $\eta = \xi$ для всех $h \leq h_c$ согласно (4.45а) имеет место линейная зависимость $\varepsilon_0^-(h) = h_c - h$.

В отсутствие внешнего магнитного поля ($H = 0$) спектр (4.43) принимает вид

$$\varepsilon_k^\pm = \sqrt{(1 \mp \xi \gamma_k)(1 \pm \eta \gamma_k)} =$$

$$= [(\varepsilon_0^\pm)^2 + (\pm \xi \mp \eta + 2\xi\eta)(1 - \gamma_k) - \xi\eta(1 - \gamma_k)^2]^{1/2}; \quad (4.50)$$

нетрудно видеть, что две ветви ε_k^\pm спектра антиферромагнетика (4.50) получаются из одной ветви ε_k спектра ферромагнетика (2.31) заменой $\eta \rightarrow -\eta$ или $\xi \rightarrow -\xi$, в полном соответствии с общим результатом (1.15); при выполнении условия (1.2а) спектр (4.50) является устойчивым при всех k . Заметим, что при сдвиге $k \rightarrow k \pm k_0$, когда $\gamma_k \rightarrow -\gamma_k$, две ветви спектра (4.50) переходят друг в друга, $\varepsilon_k^\pm \leftrightarrow \varepsilon_k^\mp$ (см. также § 16)¹⁾.

Таким образом, унитарное преобразование (1.15) «отображает» линию $\Pi - \Gamma$ на рис. 1 (см. стр. 345) для $I < 0$ на линию $\Pi - A$ для $I > 0$ (при этом точка Π неподвижна, а Γ переходит в A). Поэтому для антиферромагнетика типа ЛО двукратно вырожденный спектр $\varepsilon_k^+ = \varepsilon_k^- = \varepsilon_k$ имеет вид (2.34), тогда как при $\eta = -\xi$ —

¹⁾ Следует заметить, что в связи с увеличением периода подрешетки в антиферромагнетике граничный импульс первой зоны Бриллюэна уменьшается по сравнению с k_0 , например, для ОЦК-решетки и разбиения на две ПК-подрешетки — в два раза.

соответственно вид (2.33). Для модели ЛП с $\eta = 1$ (включая Г с $\eta = \xi = 1$) нижняя (акустическая) ветвь является бесщелевой,

$$\epsilon_k^- = [(1 + \xi)(1 - \gamma_k) - \xi(1 - \gamma_k)^2]^{1/2}, \quad \epsilon_0^- = 0 \quad (\eta = 1), \quad (4.51)$$

тогда как верхняя (оптическая) ветвь содержит щель,

$$\begin{aligned} \epsilon_k^+ &= [(\epsilon_J^+)^2 + (3\xi - 1)(1 - \gamma_k) - \xi(1 - \gamma_k)^2]^{1/2}, \\ \epsilon_J^+ &= \sqrt{2} \sqrt{1 - \xi}; \end{aligned} \quad (4.51a)$$

нетрудно рассмотреть и другие частные случаи поведения ϵ_k^\pm .

Для бесщелевых моделей типа ЛП (включая Г) нижняя ветвь спектра при $h = h_c = 0$ и малых k обладает линейным («фононным») законом дисперсии (ср. с (2.38))

$$\begin{aligned} \epsilon_k^- &\simeq \sqrt{1 + \xi} \sqrt{1 - \gamma_k} \approx (1/\sqrt{6}) \sqrt{1 + \xi} k \\ &(\eta = 1, \quad -1 < \xi \leq 1); \end{aligned} \quad (4.52)$$

при $\eta \neq 1$ щель в ϵ_k^- может быть компенсирована полем (что невозможно в ферромагнетике), так что при $h = h_c \neq 0$ и малых k имеем в общем случае $\eta > \xi$ линейный закон

$$\begin{aligned} \epsilon_k^- &\simeq \eta \sqrt{1 - \gamma_k} (\eta^2 - \xi^2)^{1/2} [h_c^2 + (1 - \xi\eta)]^{-1/2} \\ &(h = h_c = \sqrt{1 - \eta^2}, \quad k \rightarrow 0), \end{aligned} \quad (4.53)$$

и лишь в частном случае $\eta = \xi$ получаем из (4.44) квадратичный закон (ср. с (2.37))

$$\begin{aligned} \epsilon_k^- &= \epsilon_k - h_c = \epsilon_k - \epsilon_0 \simeq (1 - \gamma_k) \xi^2 (1 - \xi^2)^{-1/2} \\ &(h = h_c = \sqrt{1 - \xi^2}, \quad \xi \neq 1); \end{aligned} \quad (4.54)$$

наконец, при $\eta = \xi = 1$ мы вновь приходим к (4.52).

2. Низкотемпературная термодинамика для антиферромагнетиков типа ЛП и ЛО развита в ряде работ (см. [1, 2], а также § 17). Очевидно, что при $\eta \neq 1$ обе ветви спектра дают экспоненциально малые поправки при $\theta \ll \epsilon_0^\pm, h_c$; в обратном пределе $\epsilon_0^\pm, h_c \ll \theta \ll \theta_N$ соответствующие вклады будут приводить к полуцелым

степеням θ . Для бесщелевых моделей типа ЛП и Г с $\eta = 1$ и $h_c = 0$ вклад низшего порядка по θ от акустической ветви в P^B и σ будет порядка $(\theta/\theta_N)^2$ ($\theta_N \approx 1$ — температура Нееля разрушения дальнего магнитного порядка). Остальные термодинамические величины также разлагаются по целым степеням θ и полностью совпадают с результатами для ферромагнитных моделей ЛП и А (см. § 2 гл. II). Тот же характер по θ носит и разложение при $\eta \neq 1$ вблизи фазовой границы, где спектр согласно (4.53) при $\eta \neq \xi$ линейно зависит от k .

В случае модели ЛО при малых θ и h на фоне экспоненциальных имеются также полущелые степенные поправки, а вблизи фазовой границы $h \simeq h_c$ или при $h_c \ll \theta \ll \theta_N$ остаются лишь последние (это связано с тем, что при $\eta = \xi$ и $h = h_c$ спектр согласно (4.54) квадратичен по k).

§ 4. Низкотемпературная ренормировка

Улучшение спин-волнового приближения с учетом низших температурных поправок может быть достигнуто так же, как в случае ферромагнетика (см. § 3 гл. II) с помощью линеаризации операторов J_k и I_k (аналогичный подход использовался, например, в работах [128], [202—205]):

$$J_k \simeq -[-I(0)\bar{n}^b + V^{(+)}\mu + V^{(-)}\kappa]a_k - [V^{(+)}\kappa + V^{(-)}\mu]a_{-k}^+ - \\ - [V_{k0}^{(-)}\bar{n}^a - I(k)\kappa]b_k - [V_{k0}^{(+)}\bar{n}^a - I(k)\mu]b_{-k}^+; \quad (4.55)$$

здесь применена теорема Келлена (2.61) и введены обозначения $V_k^{(\pm)} \equiv V_{kk}^{(\pm)}$, функции μ и κ определены в (4.13). Тогда легко могут быть вычислены матричные элементы Ω_k из (4.18), так что спектр при $H = 0$ принимает вид (ср. с (2.62))

$$(E_k^\pm)^2 = (E_k^\pm)_B^2 \{1 - 4(n \mp \kappa) + 4[(n \mp \kappa)^2 - \mu^2]\} \mp \\ \mp (I^2(0)/2)(1 - \gamma_k) \{ (1 \pm \xi)(1 - 2\bar{n} \mp 2\mu \pm 2\kappa)(\mu + \kappa)(1 \pm \eta\gamma_k) - \\ - (1 \mp \eta)(1 - 2\bar{n} \pm 2\mu \pm 2\kappa)(\mu - \kappa)(1 \mp \xi\gamma_k) \} - \\ - I^2(0)(1 - \gamma_k)^2(1 \mp \eta)(1 \pm \xi)(\mu^2 - \kappa^2). \quad (4.56)$$

Как и в § 3 гл. II, для вычисления низших поправок по температуре можно использовать в качестве функций \bar{n} , μ и κ их неренормированные спин-волновые значения. Наибольший интерес представляет ренормировка нижней ветви E_k^- для бесщелевых моделей типа ЛП (ренормировка щели для верхней ветви E_k^+ всегда пропорциональна $(1 - 2(n - \kappa))$). Для этого случая, пренебрегая квадратичными членами в (4.56), имеем

$$\epsilon_k^- \simeq (\epsilon_k^-)^B \{1 - 2(n + \mu)\}, \quad (\epsilon_k^-)^B \simeq \sqrt{1 + \xi} \sqrt{1 - \gamma_k} \quad (\eta = 1, -1 < \xi \leq 1). \quad (4.57)$$

Таким образом, в общем случае $\eta = 1$, $\xi \neq -1$ ренормированный спектр может быть записан в виде (2.66), где, учитывая явный вид n и μ (4.37) и (4.38) и отбрасывая экспоненциально малый вклад от ветви E_k^+ , имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_k^- &= (\epsilon_k^-)^B \{1 - \varphi - r(\theta)\}, \\ \varphi &= \frac{4}{N} \sum_k [(v_k^{(+)})^2 + (v_k^{(-)})^2] \geq 0, \\ r(\theta) &\sim (1 + \xi)^{-1} (\theta/\theta_N)^4 \end{aligned} \quad (4.58)$$

(ср. с (2.66a)), что совпадает при $\xi = 1$ с результатом Тани [128] и вновь подтверждает унитарную эквивалентность моделей A с $I > 0$ и Γ с $I < 0$.

Для частного случая модели ЛО ($\eta = \xi$) величина $\kappa \equiv 0$, так что в этом случае для вырожденного спектра E_h имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_k^+ &= \epsilon_k^- = \epsilon_k = \\ &= [(1 - 2n)\xi - 2\mu] \left\{ \left[\frac{1 - 2n - 2\xi\mu}{\xi(1 - 2n) - 2\mu} \right]^2 - \gamma_k^2 \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

и в изотропном случае $\xi = \eta = 1$ мы вновь приходим к выражению (4.57), впервые полученному Т. Огучи [36].

Кроме ренормировки спектра, большой интерес для антиферромагнетика представляет температурная зависимость критического поля $h_c(\theta)$; ограничиваясь моделью ЛО, получим согласно (4.32) уравнение

$$h_c(\theta) + (n^+ - n^h) = e_0 \quad (h = h_c, \theta \rightarrow 0), \quad (4.60)$$

где n^a и n^b определяются, в духе теории возмущений, своими спин-волновыми значениями (4.37), (4.38), а ε_k согласно (4.29) имеет вид

$$\varepsilon_k = \{[1 - (n^a + n^b) - 2\xi\mu]^2 - \xi^2\gamma_k^2[1 - 2(n^a + \mu/\xi)][1 - 2(n^b + \mu/\xi)]\}^{1/2}. \quad (4.61)$$

Здесь использовано то, что

$$\Omega^{11}(\pm h) = A^{(\pm)} + I(0)n^{b,a} - V^{(+)}\mu = \\ = (|I(0)|/2)[\pm h + 1 - 2(n^{b,a} + \xi\mu)],$$

$$\Omega_k^{12}(\pm h) = C(k) - V_{k0}^{(+)}n^{a,b} + I(k)\mu = \\ = (|I(0)|/2)\xi\gamma_k[1 - 2(n^{a,b} + \mu/\xi)],$$

так что

$$\Omega^{(+)}(h) = (|I(0)|/2)[1 - (n^b + n^a) - 2\xi\mu],$$

$$\Omega^{(-)}(h) = (|I(0)|/2)[h - (n^b - n^a)].$$

Нетрудно показать, что в низшем порядке по температуре θ

$$\varepsilon_0 \approx \varepsilon_0^B[1 - (n^a + n^b)], \quad \varepsilon_0^B = h_c(0) = \sqrt{1 - \xi^2}; \quad (4.61a)$$

тогда уравнение (4.60) принимает вид

$$h_c(\theta) = h_c(0)\{1 - (n^a + n^b) + (1/h_c(0))(n^b - n^a)\}. \quad (4.60a)$$

Заметим, что

$$n^b - n^a = (2/N) \sum_k [n(E_k^-) - n(E_k^+)],$$

$$n^b + n^a = (2/N) \sum_k (1/\varepsilon_k)[n(E_k^-) + n(E_k^+)] + (1/N) \sum_k v_k^2,$$

и пренебрежём вкладом оптической ветви ε_k^+ при малых θ . Заметим, далее, что $\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon_k$, где $\varepsilon_0 = h_c(0)$ и согласно (4.54) $\Delta\varepsilon_k = \varepsilon_k^-(h = h_c) \simeq (1 - \gamma_k)\xi^2 h_c^{-1}(0)$; учтем, что основной вклад в суммы вносит область малых k ,

$$\frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{\varepsilon_k} n(\varepsilon_k^-) \Big|_{h=h_c(0)} \simeq \\ \simeq \frac{1}{h_c(0)} \frac{2}{N} \sum_k n(\Delta\varepsilon_k) - \frac{\xi^2}{h_c^3(0)} \sum_k (1 - \gamma_k) n(\Delta\varepsilon_k),$$

окончательно получим (обозначив $\Delta h_c = \psi_0 = (1/N) \sum_k v_k^2 > 0$):

$$h_c(\theta) - h_c(0) \simeq -\Delta h_c + (1/\xi)^3 \sqrt{h_c(0)} (\theta/\theta_N)^{5/2}, \quad (4.62)$$

что свидетельствует о возрастании с температурой критического поля перехода во флоп-фазу и полностью согласуется с результатами работ [34, 204, 206]. Попытки применить полученное решение для описания области высоких температур и фазового перехода [203, 205], так же как и в случае ферромагнетика (см. § 3 гл. II), не дали успешного результата.

§ 5. Приближение Тябликова

Структура операторов J_k и I_k позволяет построить для $G_k(t)$ приближение Тябликова (приближение случайных фаз) в полной аналогии с § 4 гл. II. Именно, полагая

$$\rho_k \simeq \langle \rho_k \rangle = \sqrt{N/2} \delta_{k0} \bar{n}^a, \quad \tau_k \simeq \langle \tau_k \rangle = \sqrt{N/2} \delta_{k0} \bar{n}^b,$$

имеем

$$J_k \rightarrow J_k^T = I(0) \bar{n}^b a_k - (A_k^{(-)} b_k + A_k^{(+)} b_k^+) \bar{n}^a, \quad A_k^{(\pm)} \equiv V_{k0}^{(\pm)}; \quad (4.63)$$

для получения I_k^T следует заменить в (4.63) $a \rightleftharpoons b$, $\bar{n}^a \rightleftharpoons \bar{n}^b$.

Тогда для матричных элементов Ω_k^{ij} имеем

$$\begin{aligned} \Omega^{11}(\pm H) &= \pm g \mu_B H + |I(0)| \sigma^b, a, \\ \Omega_k^{ii}(\pm H) &= 2\sigma^a, b \omega_k^{1i} \quad (i=2, 3, 4), \end{aligned} \quad (4.64)$$

и вид спектра (4.26) в общем случае $\xi \neq \eta$, $H \neq 0$ весьма сложен. При $H=0$, однако, положение упрощается:

$$\begin{aligned} (E_k^\pm)^T &= 2\sigma(E_k^\pm)^B = \sigma |I(0)| e_k^\pm = \\ &= \sigma |I(0)| \sqrt{(1 \mp \xi \gamma_k)(1 \pm \eta \gamma_k)}; \end{aligned} \quad (4.65)$$

для случая ЛО ($\eta = \xi$) при наличии поля $h \neq 0$ имеем

$$(e_k^\pm)^T = \pm h \mp (\sigma^a - \sigma^b) + \sqrt{(\sigma^a + \sigma^b)^2 - 4\sigma^a \sigma^b \xi^2 \gamma_k^2} \quad (4.66)$$

(для двух частот АФМР $(e_0^\pm)^T$ этот результат был впервые получен Пу Фу-чо [207], так что к явной полевой зависимости добавляется «наведенная» полем полная намагниченность M из (4.12а).

При $H \neq 0$ намагниченности подрешеток σ^a, b определяются системой двух нелинейных трансцендентных уравнений сложного вида; при $H = 0$ для спонтанной намагниченности $\sigma^a = \sigma^b = \sigma$ нетрудно получить обобщенное уравнение Тябликова

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\sigma} &= Q = 1 + 2P + 2\psi = \\ &= \frac{2}{N} \sum_k \left\{ \frac{\Omega^{11} - \Omega_k^{14}}{2E_k^+} \operatorname{cth} \frac{E_k^+}{2\Theta} + \frac{\Omega^{11} + \Omega_k^{14}}{2E_k^-} \operatorname{cth} \frac{E_k^-}{2\Theta} \right\}, \\ P &= \frac{2}{N} \sum_k \{ [(u_k^{(+)})^2 + (v_k^{(+)})^2] n(E_k^+) + \\ &+ [(u_k^{(-)})^2 + (v_k^{(-)})^2] n(E_k^-) \}, \quad \psi = \frac{2}{N} \sum_k [(v_k^{(+)})^2 + (v_k^{(-)})^2], \end{aligned} \quad (4.67)$$

а в частном случае модели ЛО

$$\frac{1}{2\sigma} = \frac{2}{N} \sum_k \frac{\Omega^{11}}{E_k} \operatorname{cth} \frac{E_k}{2\Theta}. \quad (4.68)$$

Эти уравнения обладают всеми свойствами, характерными для ферромагнитного случая (§ 4 гл. II); в частности, критический индекс для намагниченности равен $1/2$, а критическая температура Нееля определяется выражением

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Theta_N} &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{|I(0)|} \left\{ \frac{A - D(k)}{(e_k^+)^2} + \frac{A + D(k)}{(e_k^-)^2} \right\} = \\ &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{1 - (\xi - \eta) \gamma_k/2}{(1 - \xi \gamma_k)(1 + \eta \gamma_k)} + \frac{1 + (\xi - \eta) \gamma_k/2}{(1 + \xi \gamma_k)(1 - \eta \gamma_k)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

так что, например, при $\xi = \eta$ точка Нееля совпадает с точкой Кюри изотропного ферромагнетика (термодинамика этого частного случая в приближении Тябликова подробно рассмотрена в работе [208]).

Ввиду того, что приближение Тябликова описывает весь интервал температур, представляет интерес рассмотреть поведение фазовой границы $h_c(\theta)$ в критической области $\theta \leq \theta_N$, учитывая, что $h_c(\theta_N) = 0$. Для этого заметим (ограничиваясь случаем ЛО), что при $H \neq 0$

$$M = (\sigma^a - \sigma^b) = - \frac{1}{Q_a Q_b N} \sum_k \left\{ \operatorname{cth} \frac{E_k^+}{2\Theta} - \operatorname{cth} \frac{E_k^-}{2\Theta} \right\}, \quad (4.70)$$

где

$$\frac{1}{2\sigma^{a,b}} = Q_{a,b} = \pm \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \operatorname{cth} \frac{E_k^+}{2\theta} - \operatorname{cth} \frac{E_k^-}{2\theta} \right\} + \\ + \frac{1}{N} \sum_k \frac{\Omega^{(+)}(H)}{E_k} \left(\operatorname{cth} \frac{E_k^+}{2\theta} + \operatorname{cth} \frac{E_k^-}{2\theta} \right). \quad (4.71)$$

В области очень малых полей $h \rightarrow h_c(\theta_N) = 0$, где только и существует антиферромагнитная фаза при $\theta \leq \theta_N$, имеем

$$M \simeq h\chi_0(\theta), \quad \chi_0^{-1}(\theta) = 1 + 2\theta Q^2/R, \\ R = (2/N) \sum_k [\operatorname{cth}^2(E_k/2\theta) - 1]; \quad (4.72)$$

при $\theta = \theta_N$ имеем $Q = 1/2\sigma$, $R \sim 1/\sigma^2$, так что $2Q^2/R \simeq 2\theta_N/\theta^2 \rightarrow 2/\theta$ при $\theta \rightarrow \theta_N$ и $\chi_0(\theta)$ имеет конечное значение.

Акустическая ветвь E_k^- при $h \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \theta_N$ ведет себя как

$$\varepsilon_k^- \simeq -h(1 - \chi_0(\theta)) + \sigma\varepsilon_k, \quad \sigma \sim \sqrt{\theta_N - \theta}, \quad \varepsilon_0 = h_c(0); \quad (4.73)$$

условие устойчивости спектра $\varepsilon_k^- \geq 0$ при $k \rightarrow 0$ приводит к следующей связи h_c с θ вдоль фазовой границы:

$$h_c(\theta) \simeq h_c(0) \sqrt{\theta_N - \theta} (1 - \chi_0(\theta))^{-1} \quad (\chi_0(\theta) < 1), \quad (4.74)$$

что согласуется с результатами Андерсона и Келлена [34] и данными эксперимента [31, 35].

§ 6. Некоторые другие приближения

1. Аналогично случаю ферромагнетика, рассмотренному в § 5 гл. V, можно вычислить двойные коммутаторы в (4.18) точно. В результате получим

$$\Omega^{11}(H) = g\mu_B H - (1/2\sigma^a) \{2I(0)\tilde{\xi} + V^{(+)}\mu + V^{(-)}\kappa\}, \\ \Omega_k^{12}(H) = (1/2\sigma^b) \{2V_{k0}^{(+)}\tilde{\xi} - I(k)\mu\}, \\ \Omega^{13}(H) = -(1/2\sigma^a) \{V^{(-)}\mu + V^{(+)}\kappa\}, \\ \Omega_k^{14}(H) = (1/2\sigma^b) \{2V_{k0}^{(-)}\tilde{\xi} - I(k)\kappa\}. \quad (4.75)$$

Однако при вычислении спектра даже в случае *ЛО* вновь обнаруживаются те же трудности с расходимостями, что и в § 5 гл. II (см. замечание после формулы (2.89)). Лишь в частном случае изотропной модели ренормировка спектра при $H=0$ имеет вид $R(\theta) = 2\sigma(1+2\mu)^{-1}$ (ср. с (2.90)), что совпадает с результатами А. Огучи [209], полученными на основе теории Савады [116] (см. также [210]).

В теории антиферромагнетизма рассматривались также и другие приближения, физический смысл которых обсуждался в § 6 гл. II — приближения Т. Огучи — Гонма [84], Келлена [34] (см. также [212]), Гоша [211], Дембинского [213].

Для всех этих приближений (кроме [213]), остающихся в рамках ОПХФ, характерно наличие кинематического члена в разложении для намагниченности и критический индекс $1/2$ для σ , совпадающий с теорией молекулярного поля.

2. Ряд результатов, касающихся спектра и термодинамики антиферромагнетиков (преимущественно с учетом одноионной анизотропии типа $\sum_f (S_f^z)^2$), был получен методом разложений «высокой плотности» в работах [213, 214]; вариационный подход к расчету свободной энергии и фазовых границ развивался в работах [215, 216].

Низкотемпературные свойства анизотропных антиферромагнетиков, в том числе спектр и термодинамика во флоп-фазе, рассматривались в работах [204, 217, 206] в квазибозевском представлении Гольштейна — Примакова — Огучи; в том же представлении имеются расчеты спектра и затухания в рамках теории второго порядка [128, 218—220]. Существует также попытка [222] перенести в теорию антиферромагнетизма метод Дайсона; роль кинематических эффектов детально обсуждалась в [223].

ГЛАВА V

СПИН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В АНГАРМОНИЧЕСКОМ ФЕРРОМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛЕ

§ 1. Спин-фононное взаимодействие в модели Гейзенберга

Одним из физически интересных обобщений модели Гейзенберга является учет теплового движения атомов решетки, обладающих магнитными моментами, который приводит к взаимодействию спинов с колебаниями решетки или фононами (см. § 7 осн. текста). В наиболее простом виде спин-фононное взаимодействие можно рассмотреть, если предположить, что обменный интеграл зависит от относительных смещений атомов, так что гамильтониан модели Гейзенберга можно записать в виде

$$H_s = -h \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{fg} I(R_f - R_g)(S_f, S_g), \quad (5.1)$$

где S_f — оператор спина в узле решетки f , $h = \mu H^z$ — зеемановская энергия магнитного момента μ во внешнем магнитном поле H^z , $I(R_f - R_g)$ — обменный интеграл, зависящий от мгновенных значений координат атомов R_f и R_g . (Для простоты будем рассматривать изотропный случай: $\xi = \eta = 1$ в (1.2), так как учет анизотропии не представляет труда). Вводя смещение атомов u_f из равновесных положений $f = \langle R_f \rangle$, определяющих кристаллическую решетку согласно равенству

$$R_f = f + u_f, \quad (5.2)$$

обменный интеграл представим в виде разложения по относительным смещениям атомов $u_{fg} = u_f - u_g$

$$I(R_f - R_g) = I(f - g) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (u_{fg}, \nabla_{fg})^n I(f - g), \quad (5.3)$$

где $\nabla_{fg}^a = \partial/\partial(f - g)_a$. Обычно учитывают лишь первый, линейный по смещению u_{fg} член в этом разложении, и гамильтониан спин-фононного взаимодействия записывают в виде (см. [225], [2])

$$H_{s-ph}^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{fg} \nabla_{fg}^a I(f - g) u_{fg}^a (S_f, S_g). \quad (5.4)$$

Переходя к операторам рождения b_{qj}^+ и уничтожения b_{qj} фононов с энергией ω_{qj} (q — квазиимпульс, j — номер соответствующей ветви фононного спектра) согласно равенству

$$u_f^a = \frac{1}{V^{2MN}} \sum_{qj} \frac{e_{qj}^a}{V^{\omega_{qj}}} e^{i(q, f)} (b_{qj} + b_{-qj}^+), \quad (5.5)$$

где e_{qj} — вектор поляризации, M — масса атомов, N — их число в объеме V , записываем гамильтониан взаимодействия в виде (ср. с (7.29))

$$H_{s-ph}^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{fg} \sum_{qj} A_{qj}(f - g) (b_{qj} + b_{-qj}^+) (S_f, S_g), \quad (5.4a)$$

$$A_{qj}(f - g) = \frac{1}{V^{2MN\omega_{qj}}} (e^{i(q, f)} - e^{i(q, g)}) (e_{qj}, \nabla_{fg}) I(f - g). \quad (5.4b)$$

В большинстве работ, посвященных теории спин-фононного взаимодействия ([161], [226]—[236]), для изучения взаимного влияния спиновой и фононной систем друг на друга был использован гамильтониан взаимодействия в виде (5.4) (или (5.4a)). При этом колебания решетки рассматривались в гармоническом приближении. В этом случае, считая спин-фононное взаимодействие слабым, удастся относительно просто рассчитать перенормировку энергии магнонов и их затухание во втором порядке по взаимодействию (5.4) с помощью уравнений движения для функций Грина, переходя в об-

ласти низких температур к представлению спиновых волн, а вблизи температуры Кюри используя приближенные случайных фаз ([161], [226]—[230]), или применяя более сложную диаграммную технику для спиновых операторов [236]. Вычисление перенормировки частот фононов и их затухания в области низких температур также легко проводится, но вблизи температуры Кюри приводит к определенным трудностям, возникающим при вычислении спиновых корреляционных функций [231]—[235]. Учет спин-фононного взаимодействия в последнем случае приводит к ряду интересных особенностей в поведении скорости звука и его затухания вблизи T_c , наблюдаемых экспериментально (см., например, [237]). Весьма интересным оказывается также исследование связанных магнитоакустических колебаний, обусловленных спин-фононным взаимодействием [2], [225], [238].

Одной из наиболее трудных проблем, возникающих при учете спин-фононного взаимодействия, является вопрос о влиянии сжимаемости решетки на магнитный фазовый переход: при определенных условиях переход второго рода для жесткой решетки может превратиться в фазовый переход первого рода [239]—[246]. Предложенное в работах [239] преобразование позволяет исключить линейный по смещениям атомов член в гамильтониане взаимодействия (5.4), заменив его прямым взаимодействием четырех спинов. Однако учет следующих членов в разложении (5.3), а также ангармонических членов при описании колебаний решетки [245], значительно затрудняет решение этой проблемы. В то же время ангармонические эффекты вблизи фазового перехода могут быть значительны.

Принимая во внимание, что простая модель спин-фононного взаимодействия, в которой учитываются лишь низшие члены в разложении (5.3) по теории возмущений и используется гармоническое приближение для описания колебаний решетки, может быть оправдана лишь в области низких температур и вдали от точек фазового перехода, Тябликовым и Конвентом [247] было предложено обобщение теории спин-фононного взаимодействия для ангармонических кристаллов, в которой последовательно учитывалось взаимное влияние коле-

баний решетки и спиновых возбуждений на основе самосогласованной теории без предположения о малости смещений атомов. В дальнейших работах [248]—[252] этот метод был использован для исследования спектра элементарных возбуждений в ферромагнитном ангармоническом кристалле. В настоящем разделе мы рассмотрим развитую в этих работах теорию спин-фононного взаимодействия. Близкие методы были предложены в работах [253], [254], [244].

При рассмотрении колебаний решетки ангармонического кристалла гамильтониан решетки удобно записать в общем виде [74]:

$$H_l = \sum_f \frac{P_f^2}{2M} + U(R_f), \quad (5.6)$$

где P_f и R_f — сопряженные импульс и координата атома в узле решетки, которая для простоты считается состоящей из атомов одного сорта с массой M . Предполагается, что потенциальная энергия решетки $U(R_f)$ (как и обменный интеграл $I(R_f - R_g)$ в (5.1)) зависит в адиабатическом приближении лишь от мгновенных значений координат атомов R_f .

Чтобы определить равновесные положения атомов в (5.2), которые в ангармоническом кристалле зависят от температуры, необходимо рассмотреть уравнение состояния для кристалла. Введем для этого внешнее силовое поле с помощью гамильтониана

$$H_l = - \sum_f (F_f, R_f), \quad (5.7)$$

где F_f — заданная внешняя сила, действующая на атом в узле f . Учитывая тогда, что в положении равновесия средняя сила, действующая на атом, равна нулю, получим уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P_f^z(t) \rangle = - \langle [iP_f^z, \mathcal{H}] \rangle = F_f^z - \left\langle \frac{\partial}{\partial R_f^z} (H_l + H_s) \right\rangle = 0, \quad (5.8)$$

где $P_f^z(t) = e^{i\mathcal{H}t} P_f^z e^{-i\mathcal{H}t}$ — оператор импульса в представлении Гейзенберга с полным гамильтонианом системы

$$\mathcal{H} = H_l + H_s + H_i \quad (5.9)$$

и среднее $\langle \dots \rangle$ вычисляется по равновесному состоянию кристалла с гамильтонианом (5.9):

$$\langle A \rangle = \text{Sp} \left\{ e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}} A \right\} / \text{Sp} e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}. \quad (5.10)$$

В случае однородной деформации кристалла условие (5.8) можно записать в более удобной форме, рассматривая работу внешних сил при бесконечно малом смещении равновесных положений атомов $\delta f^{\alpha} = \sum_{\beta} u_{\alpha\beta} f^{\beta}$:

$$-\delta \langle H_1 \rangle = \sum_f F_f \cdot \delta f = \sum_{\alpha\beta f} F_f^{\alpha} u_{\alpha\beta} f^{\beta} = V \sum_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta},$$

где $\sigma_{\alpha\beta}$ — тензор напряжений и $u_{\alpha\beta}$ — соответствующий ему тензор деформаций. Учитывая (5.8), получаем следующее уравнение для напряжений [248]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_f F_f^{\alpha} f^{\beta} = \frac{1}{V} \sum_f f^{\beta} \left\langle \frac{\partial}{\partial R_f^{\alpha}} (U + H_s) \right\rangle, \quad (5.11)$$

или для изотропного внешнего давления:

$$P = -\frac{1}{3} \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha\alpha} = -\frac{1}{3V} \sum_{f\alpha} f^{\alpha} \left\langle \frac{\partial}{\partial R_f^{\alpha}} (U + H_s) \right\rangle = P_l + P_s, \quad (5.12)$$

где давление P_l обусловлено решеткой

$$P_l = -\frac{1}{3V} \sum_{f\alpha} f^{\alpha} \frac{\partial}{\partial f^{\alpha}} \langle U(R_f) \rangle, \quad (5.12a)$$

а давление P_s — спиновой частью энергии системы, зависящей от координат атомов:

$$P_s = \frac{1}{6V} \sum_{fg} (f - g)_{\alpha} \langle (S_f, S_g) \frac{\partial}{\partial R_f^{\alpha}} I(R_f - R_g) \rangle. \quad (5.12b)$$

Уравнение (5.12) определяет равновесные параметры решетки в зависимости от температуры, внешнего давления и намагниченности (или магнитного поля); при этом магнитный член (5.12b) дает существенный вклад лишь в области температур ниже точки Кюри.

Представим теперь потенциальную энергию кристалла в (5.6) в виде разложения по смещениям атомов u_f

согласно (5.2), как и обменный интеграл в (5.3):

$$U(R_f) = U(f_i) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_f (u_f, \nabla_f) \right)^n U(f_i). \quad (5.13)$$

В результате гамильтониан ангармонического кристалла со спин-спиновым взаимодействием (5.1) запишем в общем виде:

$$H = H_l + H_s = \sum_f \frac{P_f^2}{2M} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \Phi_1 \dots n u_1 \dots u_n - \\ - h \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{fg} \sum_{1 \dots n} I_{f-g}^{1 \dots n} u_1 \dots u_n (S_f, S_g), \quad (5.14)$$

где для краткости введены обозначения $u_1 = u_{f_1}^{\alpha_1}$, и т. д. и введены функции:

$$\Phi_1 \dots n = \nabla_1 \dots \nabla_n U(f_i) = \frac{\partial}{\partial f_1^{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial f_n^{\alpha_n}} U(f_i), \quad (5.15a)$$

$$I_{f-g}^{1 \dots n} = \nabla_1 \dots \nabla_n I(f-g) = \\ = \prod_{i=1}^n (\delta_{if} - \delta_{ig}) \nabla_{if}^{\alpha_1} \dots \nabla_{ig}^{\alpha_n} I(f-g). \quad (5.15b)$$

Операторы P_f^{α} , u_f^{α} , S_f^{α} подчиняются обычным коммутационным соотношениям:

$$[u_f^{\alpha}, P_g^{\beta}] = i\delta_{fg}\delta_{\alpha\beta}, \quad [u_f^{\alpha}, u_g^{\beta}] = [P_f^{\alpha}, P_g^{\beta}] = 0, \quad (5.16) \\ [S_f^x, S_g^y] = i\delta_{fg}S_f^z,$$

и т. д., которые могут быть использованы для составления уравнений движения для соответствующих функций Грина.

§ 2. Самосогласованные элементарные возбуждения в ферромагнитном ангармоническом кристалле

Рассмотрим сначала элементарные возбуждения — фононы и магноны — в приближении самосогласованного фононного поля [249], которое наиболее просто удастся построить на основе вариационного принципа

Боголюбова (§ 20) и которое имеет простой физический смысл.

Предположим, что в системе, описываемой гамильтонианом (5.14), отсутствуют связанные спин-фононные возбуждения [2], так что она может быть описана пробным гамильтонианом невзаимодействующих фононной и спиновой подсистем:

$$H_0 = \tilde{H}_l + \tilde{H}_s = \sum_f \frac{P_f^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{fg\alpha\beta} \tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta} u_f^\alpha u_g^\beta - \\ - h \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{fg} \tilde{I}_{f-g} (S_f, S_g), \quad (5.17)$$

где эффективная динамическая матрица $\tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta}$ и обменный интеграл \tilde{I}_{f-g} играют роль вариационных параметров. Пробная свободная энергия при этом имеет такой вид:

$$F_l = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \quad (5.18)$$

$$F_0 = -\theta \ln \text{Sp} \{ \exp(-H_0/\theta) \} = F_{0l} + F_{0s}, \quad (5.19)$$

$$F_{0l} = -\theta \ln \text{Sp} \{ \exp(-\tilde{H}_l/\theta) \} = \theta \sum_{qf} \ln 2 \text{sh } \omega_{qf}/2\theta, \quad (5.19a)$$

$$F_{0s} = -\theta \ln \text{Sp} \{ \exp(-\tilde{H}_s/\theta) \}, \quad (5.19b)$$

где свободную энергию фононной подсистемы мы записали в обычном виде, вводя частоты пробных фононов ω_{qj} и вектора поляризации e_{qj} согласно уравнению [255]:

$$e_{qj}^a \omega_{qj}^2 = \frac{1}{MN} \sum_{fg\beta} e_{qf}^\beta \tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta} e^{-i(q, f-g)}. \quad (5.20)$$

Свободная энергия спиновой подсистемы (5.19b) может быть вычислена одним из приближенных методов, например, в приближении молекулярного поля (§ 21). Вычисление средних $\langle \dots \rangle_0$ в (5.18) с нулевым гамильтонианом (5.17) проводится независимо для фононной и спиновой подсистем:

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = \langle U(R_f) \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{fg\alpha\beta} \tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta} \langle u_f^\alpha u_g^\beta \rangle_0 - \\ - \frac{1}{2} \sum_{fg} \langle \langle I(R_f - R_g) \rangle_0 - \tilde{I}_{f-g} \rangle \langle (S_f, S_g) \rangle_0, \quad (5.21)$$

где средние по фоновым переменным в гармоническом приближении легко вычисляются обычным образом (см., например, [255]):

$$\langle U(R_f) \rangle_0 = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle u_i u_j \rangle \nabla_i \nabla_j \right\} U(f) \equiv \tilde{U}(f), \quad (5.22a)$$

$$\langle I(R_f - R_g) \rangle_0 = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \langle u_{fg}^\alpha u_{fg}^\beta \rangle \nabla_{fg}^\alpha \nabla_{fg}^\beta \right\} I(f - g). \quad (5.22b)$$

Парная корреляционная функция смещений в пробном гармоническом приближении имеет стандартный вид [255]:

$$\langle u_f^\alpha u_g^\beta \rangle = \frac{1}{MN} \sum_{qj} \frac{e_{qj}^\alpha e_{qj}^\beta}{2\omega_{qj}} e^{i(q, f-g)} \coth \frac{\omega_{qj}}{2\theta}. \quad (5.23)$$

Определим теперь вариационные параметры из условия стационарности свободной энергии (5.18) к вариации по $\tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta}$ и \tilde{I}_{f-g} или, эквивалентно, к вариации по корреляционным функциям $\langle u_i u_j \rangle_0$, $\langle (S_f, S_g) \rangle_0$:

$$\frac{\delta F_1}{\delta \langle u_f^\alpha u_g^\beta \rangle_0} = 0, \quad \tilde{\Phi}_{f-g}^{\alpha\beta} = \nabla_f^\alpha \nabla_g^\beta \left\{ \tilde{U}(f) - \frac{1}{2} \sum_{lm} \tilde{I}_{l-m} \langle (S_l, S_m) \rangle_0 \right\}, \quad (5.24a)$$

$$\frac{\delta F_1}{\delta \langle (S_f, S_g) \rangle_0} = 0, \quad \tilde{I}_{f-g} = \langle I(R_f - R_g) \rangle_0. \quad (5.24b)$$

Таким образом, в приближении среднего фононного поля мы приходим к самосогласованной системе уравнений для определения частот пробных фононов согласно (5.20):

$$e_{qj}^\alpha \omega_{qj}^2 = \frac{1}{MN} \sum_{\beta fg} e_{qj}^\beta e^{-i(q, f-g)} \left\{ \nabla_f^\alpha \nabla_g^\beta \tilde{U}(f) - \sum_m (\delta_{fg} - \delta_{mg}) \langle (S_f, S_m) \rangle \nabla_{fm}^\alpha \nabla_{fm}^\beta \tilde{I}_{f-m} \right\}, \quad (5.25)$$

эффективного спин-спинового взаимодействия (5.24b) и корреляционных функций смещений атомов (5.23) и спинов:

$$\langle (S_f, S_g) \rangle_0 = \text{Sp} \left\{ e^{-\frac{\tilde{H}_s}{\theta}} (S_f, S_g) \right\} / \text{Sp} \left\{ e^{-\frac{\tilde{H}_s}{\theta}} \right\}. \quad (5.26)$$

Верхняя оценка для свободной энергии реальной системы с гамильтонианом (5.14) определяется согласно вариационному принципу Боголюбова выражением (5.18): $F \leq F_1$. Внутренняя энергия системы имеет вид

$$E = \langle H \rangle_0 = \sum_{ql} \frac{\omega_{ql}}{4} \operatorname{cth} \frac{\omega_{ql}}{2\theta} + \tilde{U}(f_i) - \\ - hN \langle S_f^z \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{fg} \tilde{I}_{f-g} \langle (S_f, S_g) \rangle_0. \quad (5.27)$$

Уравнение состояния в приближении среднего фононного поля согласно (5.12) имеет вид

$$P = -\frac{1}{3V} \sum_{fa} f^a \nabla_f^a \tilde{U}(f_i) + \frac{1}{6V} N \sum_{fa} f^a \langle (S_f, S_0) \rangle \nabla_f^a \tilde{I}_f. \quad (5.28)$$

Отметим, что хотя пробный гамильтониан (5.17) и соответствующие свободная (5.18) и внутренняя (5.27) энергии имеют аддитивный вид по фононным и спиновым переменным, эффективные параметры взаимодействия $\tilde{\Phi}_{f-g}^{ab}$ (5.24a) и \tilde{I}_{f-g} (5.24б) учитывают влияние одной подсистемы на другую. Например, частоты фононов (5.25) зависят от состояния спиновой подсистемы и вблизи точки Кюри T_c имеют особенность, обусловленную особенностью корреляционной функции спинов:

$$\left(\frac{\partial}{\partial T} \omega_{ql}^2 \right)_{T \rightarrow T_c} \sim \left(\frac{\partial}{\partial T} \langle (S_f, S_g) \rangle \right)_{T \rightarrow T_c}. \quad (5.29)$$

В свою очередь спектр магнитных возбуждений и намагниченность спиновой подсистемы, определяемые эффективным обменным интегралом (5.22б), получают дополнительную температурную зависимость за счет корреляционной функции смещений (5.23) и теплового расширения решетки в случае постоянного давления. Коэффициент теплового расширения решетки также зависит от состояний спиновой подсистемы; в частности, при $T \rightarrow T_c$ имеет согласно (5.28) особенность вида

$$\alpha_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -\frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V / \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \right]_{T \rightarrow T_c} \sim \\ \sim \left(\frac{\partial}{\partial T} \langle (S_f, S_g) \rangle \right)_{T \rightarrow T_c}. \quad (5.30)$$

Следовательно, приближение среднего фононного поля (5.17) позволяет относительно просто рассмотреть самосогласованным образом магнитные, механические и тепловые свойства ферромагнитного кристалла. Однако, это приближение не учитывает затухание магнонов и фононов и не позволяет провести оценку точности вычислений. Более последовательным оказывается подход, основанный на методе функций Грина.

§ 3. Спиновые возбуждения в ангармоническом ферромагнитном кристалле

Рассмотрим спиновые возбуждения в системе с гамильтонианом (5.14), следуя работе [252]. Введем аналогично (1.45), (1.46) функцию Грина для операторов спиновых отклонений $S_f^\pm = S_f^x \pm iS_f^y$:

$$\begin{aligned} G_{ff'}(t-t') &= \langle\langle S_f^+(t); S_{f'}^-(t') \rangle\rangle = \\ &= -i\theta(t-t') \langle[S_f^+(t), S_{f'}^-(t')]\rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} G_{ff'}(\omega). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Пользуясь уравнением движения для спинового оператора в представлении Гейзенберга $S_f^\pm(t) = e^{iHt} S_f^\pm e^{-iHt}$ с гамильтонианом (5.14), получим обычным образом уравнение для функции Грина (5.31):

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - h\right) G_{ff'}(t-t') &= 2 \langle S_f^z \rangle \delta_{ff'} \delta(t-t') + \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_g \sum_{1 \dots n} I_{f-g}^{1 \dots n} \langle\langle u_1 \dots u_n (S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+); S_{f'}^-(t') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Учтем далее перенормировку обменного взаимодействия в среднем фононном поле, вводя неприводимые по фононным операторам функции Грина, предложенные в теории ангармонических кристаллов [74]:

$$\begin{aligned} \langle\langle \{u_1 \dots u_n\}^{\text{ir}} S_f^+ S_g^z; S_{f'}^-(t') \rangle\rangle &= \langle\langle u_1 \dots u_n S_f^+ S_g^z; S_{f'}^-(t') \rangle\rangle - \\ &- \sum_{m=0}^{n-1} C_n^m \langle u_{m+1} \dots u_n \rangle \langle\langle \{u_1 \dots u_m\}^{\text{ir}} S_f^+ S_g^z; S_{f'}^-(t') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Как следует из этого определения, неприводимые функции Грина не могут быть сведены к функциям Грина более низкого порядка по числу фононных операторов, спариванием фононных операторов, и следовательно, не содержат диаграмм среднего фононного поля. В определении (5.33) учтена симметрия функции Грина к перестановке коммутирующих между собой операторов $\{u_1 \dots u_n\}$ и введен комбинаторный множитель $C_n^m = n!/m!(n-m)!$. Подставляя разложение для спин-фононной функции Грина из (5.33) в (5.32) и выполняя суммирование по n для каждой неприводимой функции Грина m -го порядка, уравнение для фурье-компоненты функции Грина запишем в виде

$$(\omega - h) G_{ff'}(\omega) = 2 \langle S_f^z \rangle \delta_{ff'} + \sum_g \tilde{I}_{f-g} \langle \langle (S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+) | S_{f'}^- \rangle \rangle_\omega + \\ + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{g \\ 1 \dots n}} \tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} \langle \langle \{u_1 \dots u_n\}^{ir} (S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+) | S_{f'}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (5.34)$$

Ренормированное в среднем фононном поле взаимодействие $\tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n}$ определяется выражением:

$$\tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1' \dots n'} I_{f-g}^{1 \dots n \ 1' \dots n'} \langle u_{1'} \dots u_{n'} \rangle = \\ = \nabla_1 \dots \nabla_n \langle I(R_f - R_g) \rangle \approx \nabla_1 \dots \nabla_n \tilde{I}_{f-g}. \quad (5.35)$$

Первый член с взаимодействием в правой части (5.34) описывает прямое спин-спиновое взаимодействие в среднем фононном поле, а второй член с $n \geq 1$ определяет неупругие процессы спин-фононного рассеяния. Удобно ввести энергию спиновых возбуждений в приближении среднего спинового поля, как это было предложено в [256], с помощью неприводимой по спиновым операторам функции Грина:

$$\langle \langle (S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+)^{ir}; S_{f'}^- \rangle \rangle = \langle \langle (S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+); S_{f'}^- \rangle \rangle - \\ - A_{fg} \langle \langle S_f^+; S_{f'}^- \rangle \rangle - A_{gf} \langle \langle S_g^+; S_{f'}^- \rangle \rangle, \quad (5.36)$$

где коэффициенты A_{fg} выбираются из условия обращения в нуль неоднородного члена в уравнении для неприводимой функции Грина:

$$\langle \{[S_f^+ S_g^z - S_g^+ S_f^z]^{ir}, S_{f'}^- \} \rangle = 0. \quad (5.36a)$$

Из этого условия, учитывая определение (5.36) для коэффициентов при $f \neq g$, получаем

$$A_{fg} = A_{gf} = \frac{1}{2 \langle S_f^z \rangle} (2 \langle S_f^z S_g^z \rangle + \langle S_f^- S_g^+ \rangle). \quad (5.37)$$

Эти коэффициенты определяют функцию Грина первого порядка в приближении среднего поля (обобщенное приближение Хартри — Фока, см. § 5 гл. II), которую удобно принять в качестве нулевой:

$$(\omega - h) G_{ff'}^0(\omega) = 2 \langle S_f^z \rangle \delta_{ff'} + \sum_g \tilde{I}_{f-g} A_{fg} \{G_{ff'}^0(\omega) - G_{gf'}^0(\omega)\}. \quad (5.38)$$

Решение уравнения может быть записано с помощью фурье-преобразования в виде

$$G_{ff'}^0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k e^{i(k, f-f')} \frac{2\sigma}{\omega - E_k}. \quad (5.39)$$

Энергия спиновых возбуждений в среднем поле имеет вид (ср. с (2.87)):

$$\begin{aligned} E_k &= h + \frac{1}{N} \sum_{fg} \tilde{I}_{f-g} A_{fg} (1 - e^{i(k, f-g)}) = \\ &= h + \sigma V_{k0} + \frac{1}{N} \sum_q V_{kq} \left(n_q + \frac{1}{\sigma} K_q^{zz} \right), \end{aligned} \quad (5.40)$$

где мы воспользовались фурье-разложением по векторам обратной решетки для ренормированного обменного интеграла (5.35) и корреляционных функций в (5.37):

$$\tilde{I}_{f-g} = \langle I(R_f - R_g) \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \tilde{I}_q e^{i(q, f-g)}, \quad (5.41)$$

$$K_{fg}^{-+} = \langle S_f^- S_g^+ \rangle = \frac{2\sigma}{N} \sum_q n_q e^{i(q, f-g)}, \quad (5.42a)$$

$$K_{fg}^{zz} = \langle (S_f^z - \langle S_f^z \rangle)(S_g^z - \langle S_g^z \rangle) \rangle = \frac{1}{N} \sum_q K_q^{zz} e^{i(q, f-g)}, \quad (5.42b)$$

и ввели $\sigma = \langle S_f^z \rangle$ и $\tilde{V}_{kq} = \tilde{I}_q - \tilde{I}_{q-k}$. Выражение (5.40) (без учета перенормировки в среднем фоновом поле) было получено расщеплением функций Грина в первом порядке [92], [93] и др. (см. [71], а также обсуждение в § 5 гл. II); подобные же результаты получаются в диаграммной технике для спиновых операторов в первом порядке по взаимодействию [11], [21]. Первый член в (5.40) соответствует приближению случайных фаз (расщепление Тябликова [83]), второй и третий члены учитывают, соответственно, перенормировку энергии возбуждений за счет упругого рассеяния на спиновых волнах ($\sim n_q$) и на флуктуациях z -компоненты спина ($\sim K_q^{zz}$).

Учитывая теперь определение для нулевой функции Грина (5.38), уравнение (5.34) запишем в виде

$$G_{ff'}(\omega) = G_{ff'}^0(\omega) + \\ + \sum_l G_{fl}^0(\omega) \frac{1}{2\sigma} \left\{ \sum_g \tilde{I}_{l-g} \langle \langle (S_l^+ S_g^z - S_g^z S_l^+)^{ir} | S_f^- \rangle \rangle_\omega + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{g \\ 1 \dots n}} \tilde{I}_{l-g}^{1 \dots n} \langle \langle (u_1 \dots u_n)^{ir} (S_l^+ S_g^z - S_l^z S_g^+) | S_f^- \rangle \rangle_\omega \right\}. \quad (5.43)$$

Для определения неприводимых функций Грина в правой части вида $\langle \langle A(t); S_f^-(t') \rangle \rangle$, описывающих как эффекты спин-спинового ($A = (S_l^+ S_g^z - S_l^z S_g^+)^{ir}$), так и неупругого спин-фононного ($A = [(u_1 \dots u_n)^{ir} (S_l^+ S_g^z - S_l^z S_g^+)]$ $n \geq 1$) взаимодействий, продифференцируем функцию Грина по второму времени [71], [75]:

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t'} - h \right) \langle \langle A(t); S_f^-(t') \rangle \rangle = \langle [A, S_f^-] \rangle \delta(t - t') + \\ + \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{\substack{g' \\ 1' \dots n'}} I_{f'-g'}^{1' \dots n'} \langle \langle A(t); u_{1'} \dots u_{n'} (S_{f'}^- S_{g'}^z - S_{f'}^z S_{g'}^-) \rangle \rangle. \quad (5.44)$$

Вводя неприводимые по фоновым операторам, относящимся к моменту времени t' , функции Грина аналогично (5.33), и по спиновым операторам для $n' = 0$

аналогично (5.36), получаем уравнение для фурье-компоненты функции Грина (5.44) в виде

$$\begin{aligned} \langle\langle A | S_{f'}^- \rangle\rangle_{\omega} = & \sum_{l'} G_{fl'}^0(\omega) \frac{1}{2\sigma} \left\{ \sum_{g'} \tilde{I}_{l'-g'} \langle\langle A | \{S_{l'}^- S_{g'}^z - S_{l'}^z S_{g'}^- \}^{lr} \rangle\rangle_{\omega} + \right. \\ & \left. + \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{l', g' \dots n'} \tilde{I}_{l'-g'}^{l' \dots n'} \langle\langle A | \{u_{l'} \dots u_{n'}\}^{lr} (S_{l'}^- S_{g'}^z - S_{l'}^z S_{g'}^-) \rangle\rangle_{\omega} \right\}, \end{aligned} \quad (5.44a)$$

где мы учли, что согласно определениям неприводимых функций неоднородный член в (5.44) $\langle\langle A, S_{f'}^- \rangle\rangle = 0$. Подставляя (5.44a) в (5.43), получим уравнение для спиновой функции Грина в виде

$$G_{ff'}(\omega) = G_{ff'}^0(\omega) + \sum_{ll'} G_{fl}^0(\omega) P_{ll'}(\omega) G_{l'f'}^0(\omega), \quad (5.45)$$

где введен оператор:

$$\begin{aligned} (2\sigma)^2 P_{ff'}(\omega) = & \sum_{gg'} \left\{ \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{1}{n! n'!} \sum_{1 \dots n} \sum_{1' \dots n'} \tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} \tilde{I}_{f'-g'}^{1' \dots n'} \times \right. \\ & \times \langle\langle \{u_1 \dots u_n\}^{lr} B_{fg} | \{u_{1'} \dots u_{n'}\}^{lr} B_{f'g'}^+ \rangle\rangle_{\omega} + \\ & + \tilde{I}_{f-g} \tilde{I}_{f'-g'} \langle\langle B_{fg}^{lr} | B_{f'g'}^{+lr} \rangle\rangle_{\omega} + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} \tilde{I}_{f'-g'} \langle\langle \{u_1 \dots u_n\}^{lr} B_{fg} | B_{f'g'}^{+lr} \rangle\rangle_{\omega} + \\ & \left. + \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1' \dots n'} \tilde{I}_{f-g} \tilde{I}_{f'-g'}^{1' \dots n'} \langle\langle B_{fg}^{lr} | B_{f'g'}^+ \{u_{1'} \dots u_{n'}\}^{lr} \rangle\rangle_{\omega} \right\}. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Для сокращения записи здесь введен оператор $B_{fg} = S_f^+ S_g^z - S_f^z S_g^+$ и соответствующий ему B_{fg}^{lr} согласно (5.36). Массовый оператор спиновой функции Грина $M_{ff'}(\omega)$ (см. § 29, 30), определяемый уравнением Дайсона,

$$G_{ff'}(\omega) = G_{ff'}^0(\omega) + \sum_{ll'} G_{fl}^0(\omega) M_{ll'}(\omega) G_{l'f'}^0(\omega), \quad (5.47)$$

связан с оператором $P_{ff'}(\omega)$ уравнением

$$P_{ff'}(\omega) = M_{ff'}(\omega) + \sum_{ll'} M_{fl}(\omega) G_{ll'}^0(\omega) P_{l'l'}(\omega), \quad (5.48)$$

т. е. представляет собственную (p) часть оператора $P_{ff'}^{(p)}(\omega)$, не содержащую частей, соединенных одной линией $G_{ll'}^0(\omega)$. Переходя к фурье-разложению по векторам обратной решетки аналогично (5.39), решение уравнения Дайсона (5.47) запишем в виде

$$G_{ff'}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k e^{i(k, f-f')} \frac{2\sigma}{\omega - E_k - 2\sigma M_k(\omega)}, \quad (5.49)$$

где массовый оператор определяется из соотношений (5.46), (5.48) в таком виде:

$$\begin{aligned} 2\sigma M_k(\omega) = & \frac{1}{2\sigma N} \sum_{ff'gg'} e^{-i(k, f-f')} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} \left(e^{\frac{\omega'}{\theta}} - 1 \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega' t} \times \\ & \times \left\{ \sum_{n, n'=1}^{\infty} \frac{1}{n! n'!} \sum_{\substack{1 \dots n \\ 1' \dots n'}} \tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} \tilde{I}_{f'-g'}^{1' \dots n'} \times \right. \\ & \times \langle B_{f'g'}^+(t) \{u_1(t) \dots u_n(t)\}^{ir} | B_{fg} \{u_1 \dots u_n\}^{ir} \rangle^{(p)} + \\ & + \tilde{I}_{f-g} \tilde{I}_{f'-g'} \langle B_{f'g'}^{+ir}(t) | B_{fg}^{ir} \rangle^{(p)} + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1 \dots n} \tilde{I}_{f-g}^{1 \dots n} \tilde{I}_{f'-g'} \langle B_{f'g'}^{+ir}(t) | \{u_1 \dots u_n\}^{ir} B_{fg} \rangle^{(p)} + \\ & \left. + \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1' \dots n'} \tilde{I}_{f-g} \tilde{I}_{f'-g'}^{1' \dots n'} \langle B_{f'g'}^+(t) \{u_1(t) \dots u_{n'}(t)\}^{ir} | B_{fg}^{ir} \rangle^{(p)} \right\}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

При записи этого выражения мы воспользовались спектральным представлением для многочастичных функций Грина в (5.46), представив их через соответствующие двухвременные корреляционные функции.

Таким образом, мы получили точное представление для спиновой функции Грина (5.49), с точным же

представлением ее массового оператора в виде (5.50). Это представление оказывается весьма эффективным для получения различных приближенных решений для функции Грина (как и точное временное представление (1.58), (1.59)), так как позволяет строить теорию возмущений непосредственно для массового оператора — преимущества этого метода хорошо известны [167].

Рассмотрим далее приближенное выражение для массового оператора во втором порядке по спин-фононному взаимодействию. Учитывая, что в (5.50) второй порядок спин-фононного взаимодействия входит в явном виде, временные корреляционные функции оценим в нулевом порядке, т. е. при вычислении их будем производить независимое усреднение спиновых и фононных операторов. При этом последние два члена в (5.50) обращаются в нуль, а первый член принимает вид

$$\begin{aligned} \langle B_{fg'}^+(t) \{u_{1'}(t) \dots u_{n'}(t)\}^{ir} | B_{fg} \{u_1 \dots u_n\}^{ir} \rangle &\approx \\ \approx \langle \{u_{1'}(t) \dots u_{n'}(t)\}^{ir} | \{u_1 \dots u_n\}^{ir} \rangle \langle B_{fg'}^+(t) B_{fg} \rangle &\approx \\ \approx n! \delta_{nn'} \prod_{i=1}^n \langle u_{i'}(t) u_i \rangle \langle B_{fg'}^+(t) B_{fg} \rangle, & \quad (5.51) \end{aligned}$$

где в последнем равенстве мы воспользовались приближенным выражением для неприводимой корреляционной функции от операторов смещений (напомним, что одновременные спаривания фононных операторов учтены при введении неприводимых функций Грина — они приводят к перенормировке спин-фононного взаимодействия согласно (5.35)). Таким образом, во втором порядке по спин-фононному взаимодействию массовый оператор разбивается на сумму двух членов:

$$\begin{aligned} M_k(\omega) &= M_k^{s-s}(\omega) + M_k^{s-ph}(\omega) = \\ &= \frac{1}{(2\sigma)^2 N} \sum_{ff'gg'} e^{-i(k, f-f')} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega' t} \times \\ &\times \{ \tilde{I}_{f-g} \tilde{I}_{f'-g'} \langle B_{fg'}^{+ir}(t) B_{fg}^{ir} \rangle^{(p)} + \langle B_{fg'}^+(t) | B_{fg} \rangle^{(p)} \times \\ &\times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_{\alpha\beta} \langle u_{f'g'}^{\alpha}(t) u_{fg}^{\beta} \rangle \nabla_{f'g'}^{\alpha} \nabla_{fg}^{\beta} \right)^n \tilde{I}_{f'-g'} \tilde{I}_{f-g} \}, \quad (5.52) \end{aligned}$$

где первый член $M_k^{s-s}(\omega)$ описывает неупругие процессы спин-спинового рассеяния в среднем фононном поле, а второй член $M_k^{s-ph}(\omega)$ учитывает неупругое рассеяние спиновых возбуждений на колебаниях решетки — фононах. В обычной теории учитывается лишь первый член $n = 1$, соответствующий однофононному рассеянию (см., например, [236]).

Покажем, что полученное общее выражение для массового оператора (5.52) в предельных случаях приводит к известным результатам. Рассмотрим прежде всего первый член, $M_k^{s-s}(\omega)$, полагая для простоты $S = 1/2$. Подставляя тогда $S_f^z = 1/2 - S_f^- S_f^+$ в выражение для неприводимой части спинного оператора B_{fg}^{ir} , определенного в (5.36), получим

$$\langle B_{fg'}^{+ir}(t) | B_{fg}^{ir} \rangle \approx \langle (S_{g'}^-(t) S_g^+(t) S_f^-(t) - S_f^-(t) S_f^+(t) S_{g'}^-(t))^{ir} | \{S_f^+ S_g^- S_g^+ - S_g^+ S_f^- S_f^+\}^{ir} \rangle, \quad (5.53)$$

где индекс (ir) означает, что спаривание одновременных операторов не должны учитываться. Проводя все возможные спаривания разновременных операторов в (5.53), как например,

$$\langle S_{g'}^-(t) S_g^+(t) S_f^-(t) | S_f^+ S_g^- S_g^+ \rangle \approx \langle S_{g'}^+(t) S_g^- \rangle \times \\ \times \langle \langle S_{g'}^-(t) S_f^+ \rangle \langle S_f^-(t) S_g^+ \rangle + \langle S_{g'}^-(t) S_g^+ \rangle \langle S_f^-(t) S_f^+ \rangle \rangle, \quad (5.53a)$$

что соответствует учету всех четырехспиновых процессов рассеяния, получим замкнутое выражение для массового оператора через временные корреляционные функции вида $\langle S_f^-(t) S_f^+ \rangle$. Последние можно вычислить по исходной функции Грина (5.49), пользуясь спектральной теоремой:

$$\langle S_f^-(t) S_f^+ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} n(\omega) e^{i\omega t} [-\text{Im } G_{ff'}(\omega + i\epsilon)] \approx \\ \approx \frac{2\sigma}{N} \sum_q e^{i(q, f-f')} n_q e^{i\lambda_q t}, \quad (5.54)$$

где мы воспользовались полюсным приближением для функции Грина (5.49):

$$g_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega - E_k - 2\sigma M_k^{s-s}(\omega)} \equiv \\ \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_k(\omega)}{[\omega - E_k - \Delta_k(\omega)]^2 + \Gamma_k^2(\omega)} \approx \delta(\omega - \Omega_k) \quad (5.55)$$

и ввели $n_k = n(\Omega_k) = (e^{\Omega_k/\theta} - 1)^{-1}$. Представление (5.54) позволяет легко провести интеграцию по времени и затем по частоте ω' в (5.52) и получить следующее выражение для спиновой части массового оператора:

$$2\sigma M_k^{s-s}(\omega) = \frac{2\sigma^2}{N} \sum_{pq} \frac{(\tilde{V}_{kq} + \tilde{V}_{k, k-q-p})^2}{\Omega_{p+q} + \Omega_{k-q} - \Omega_p - \omega} \times \\ \times [n_p(1 + n_{k-q} + n_{p+q}) - n_{k-q}n_{p+q}]. \quad (5.56)$$

Это выражение совпадает с известными результатами для четырехмагнного рассеяния во втором порядке [11], [21], [72] с точностью до перенормировки обменного интеграла (5.35). Обсуждение перенормировки спектра и затухания, определяемых массовым оператором (5.56), содержится в §§ 1 и 2 гл. III.

Функция Грина (5.49) в случае спина $S = 1/2$ может быть использована для определения намагниченности согласно формуле

$$\frac{1}{2\sigma} = 1 + \frac{2}{N} \sum_k n_k, \quad n_k = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) g_k(\omega). \quad (5.57)$$

При этом для получения правильных результатов в случае низких температур, не содержащих нефизического члена T^3 , необходимо последовательно учитывать члены второго порядка в спектральной интенсивности $g_k(\omega)$, т. е. конечную ширину $\Gamma_k(\omega)$ распределения, определяемую мнимой частью массового оператора (5.56). Для этого вместо полюсного приближения в виде одной δ -функции необходимо использовать более сложное представление:

$$g_k(\omega) \approx (1 - \alpha_k) \delta(\omega - \Omega_k) + \frac{\Gamma_k(\omega)}{(\omega - \Omega_k)^2}, \quad (5.55a)$$

где весовой множитель α_k определяется из условия нормировки распределения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_k(\omega) d\omega = 1, \quad \alpha_k = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_k(\omega)}{(\omega - \Omega_k)^2} d\omega. \quad (5.55б)$$

Подставляя разложение (5.55а) в (5.57), приходим к уравнению для n_k , совпадающему с (3.52), решение которого, как обсуждалось в § 2 гл. III, приводит к правильному выражению для намагниченности, не содержащему члена T^3 .

При обсуждении неупругого спин-фононного рассеяния (второй член $M_k^{s-ph}(\omega)$ в (5.52)) воспользуемся простейшим приближением для спиновой двухвременной корреляционной функции:

$$\begin{aligned} \langle B_{f'g}^+(t) B_{ig} \rangle \approx \langle S^z \rangle^2 \{ & K_{f'f}^{-+}(t) + K_{g'g}^{-+}(t) - K_{f'g}^{-+}(t) - K_{g'f}^{-+}(t) \} + \\ & + \{ K_{g'g}^{zz}(t) K_{f'f}^{-+}(t) + K_{f'f}^{zz}(t) K_{g'g}^{-+}(t) - \\ & - K_{g'f}^{zz}(t) K_{f'g}^{-+}(t) - K_{f'g}^{zz}(t) K_{g'f}^{-+}(t) \}, \end{aligned} \quad (5.58)$$

где были проведены все возможные спаривания спиновых операторов. При этом первый член ($\sim \langle S^z \rangle^2$) учитывает рассеяние спиновых возбуждений в среднем поле z -компоненты спина на фононах, а второй член ($\sim K_{ij}^{zz}(t)$) учитывает флуктуации z -компоненты спинов при этом рассеянии. Сохраним для простоты только однофононный вклад ($n=1$ в (5.52)), для описания которого воспользуемся полюсным приближением для фононной функции Грина:

$$\begin{aligned} \langle u_{f'}^{\beta}(t) u_f^{\alpha} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) e^{i\omega t} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle u_f^{\alpha} | u_{f'}^{\beta} \rangle \rangle_{\omega + i\epsilon} \right] \approx \\ &\approx \frac{1}{MN} \sum_{ql} \frac{e_{ql}^{\alpha} e_{ql}^{\beta}}{2\omega_{ql}} e^{i(q, f-f')} (N_{ql} e^{i\omega_{ql} t} + (1 + N_{ql}) e^{-i\omega_{ql} t}), \end{aligned} \quad (5.59)$$

где $N_{ql} = (e^{\omega_{ql}/\theta} - 1)^{-1}$ и остальные обозначения приведены в (5.5). После интегрирования по времени в (5.52) в полюсном приближении (5.54) для спиновых функций

$K_{ff}^{-+}(t)$ и статическом приближении для функций $K_{ff}^{zz}(t) \approx K_{ff}^{zz}(t=0)$, получаем следующее выражение для спин-фононного вклада в массовый оператор:

$$2\sigma M_k^{s-ph}(\omega) = \sum_{qf} |A_f(k, q)|^2 \left(\frac{1 + N_{qf} + n_{k-q}}{\omega - \Omega_{k-q} - \omega_{qf}} + \frac{N_{qf} - n_{k-q}}{\omega - \Omega_{k-q} + \omega_{qf}} \right) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{qq'f} |B_f(k, q', q)|^2 K_{q'-q}^{zz} \times \\ \times \left(\frac{1 + N_{qf} + n_{k-q'}}{\omega - \Omega_{k-q'} - \omega_{qf}} + \frac{N_{qf} - n_{k-q'}}{\omega - \Omega_{k-q'} + \omega_{qf}} \right), \quad (5.60)$$

где введены функции:

$$A_f(k, q) = \frac{i\sigma}{\sqrt{2MN\omega_{qf}}} \{ (q, e_{qf})(\tilde{I}_q - \tilde{I}_{k-q}) + \\ + (k, e_{qf})(\tilde{I}_{k-q} - \tilde{I}_k) \}, \quad (5.60a)$$

$$B_f(k, q', q) = \frac{i}{\sqrt{2MN\omega_{qf}}} \{ (q' - q, e_{qf})\tilde{I}_{q'-q} - (q', e_{qf})\tilde{I}_{q'} + \\ + (q' - k, e_{qf})\tilde{I}_{q'-k} - (q' - q - k, e_{qf})\tilde{I}_{q'-q-k} \}. \quad (5.60b)$$

Полученное выражение совпадает с результатами работы [236], основанной на весьма сложной диаграммной технике, если в ней учесть все члены с функцией K_{ff}^{zz} , приведенные во втором слагаемом в (5.58). Отметим, что полученное нами общее представление (5.52) позволяет легко провести оценку и многофононных вкладов ($n \geq 2$), которые могут быть существенны в области высоких температур.

В случае сильного ангармонизма (вблизи точек фазового перехода, в области высоких температур или в квантовых кристаллах) помимо учета перенормировок в самосогласованном фононном поле, рассмотренных на основе вариационного подхода в § 2 гл. III, необходимо учесть также дополнительную перенормировку и затухание фононов, обусловленных неупругими процессами рассеяния. Для этого необходимо получить самосогласованную систему уравнений для однофононной функции Грина $\langle u_i(t); u_{i'}(t') \rangle$ на основе метода неприводимых функций Грина, развитого в теории сильно ангар-

монических кристаллов [74]. При этом мы приходим к связанной системе уравнений для спиновой и фононной функций Грина, решение которой определяет самосогласованные элементарные возбуждения и их затухание в ангармоническом ферромагнитном кристалле. Обсуждение этих уравнений для фононной функции Грина содержится в работах [250].

§ 4. Обсуждение результатов

Существенной особенностью рассмотренной теории спин-фононного взаимодействия является самосогласованный учет взаимного влияния спиновой подсистемы на фононный спектр и обратного действия колебаний решетки на спектр спиновых возбуждений и намагниченность. В наиболее простой форме этот учет проводится в приближении среднего фононного поля с помощью вариационного метода Боголюбова (§ 2 гл. V), более же последовательное рассмотрение основано на методе функций Грина. Самосогласованность вычислений в методе функций Грина достигается вычислением корреляционных функций, определяющих массовый оператор, по полным функциям Грина, что приводит к самосогласованной нелинейной системе уравнений, не содержащей «нулевых» функций Грина свободных возбуждений, которые плохо описывают систему с сильным взаимодействием (см. [74]). В этом отношении самосогласованный метод эквивалентен построению теории возмущений в диаграммной технике по скелетным диаграммам, содержащим только полные функции Грина [167]. При этом нетрудно сопоставить каждому конкретному расщеплению в массовом операторе (5.51), (5.53), (5.58) определенный класс диаграмм в диаграммной технике и тем самым оценить принятое приближение [257].

Другой особенностью развитой теории является учет всех членов в разложении по тепловым смещениям как потенциальной энергии кристалла, так и обменного взаимодействия в гамильтониане (5.14), что позволяет последовательно рассмотреть спин-фононное взаимодействие в сильно ангармонических кристаллах. Примерами таких систем является твердый He^3 , в котором

обмен ядер в узлах решетки описывается гамильтонианом Гейзенберга [258], [259] или квазиспиновая модель де Жена [260] сегнетоэлектриков с водородными связями, спин-фононное взаимодействие в которой играет принципиальную роль [261], [12]. Амплитуда колебаний атомов в этих системах весьма велика, и простое гармоническое приближение неприменимо.

Укажем также, что учет сжимаемости ферромагнетика, которое, как было отмечено в § 1 гл. V, играет существенную роль при определении типа магнитного фазового перехода [239]—[245], наиболее просто проводится при помощи уравнения состояния (5.12), например, в приближении среднего фононного поля (5.28). Такой расчет для модели Изинга проведен в работе [244]. Это же уравнение состояния может быть использовано для вычисления температурной зависимости спектра магнитных возбуждений и намагниченности для ферромагнетика при постоянном давлении [262].

ПРИМЕЧАНИЯ

Примечание 1. Как правило, число узлов в первой координатной сфере $z \simeq 10$ (например, $z = 6, 8, 12$ для ПК, ОЦК и ГЦК решеток). Однако в ряде случаев представляет интерес формальный предельный переход $z \rightarrow \infty$, $I \rightarrow 0$, $I(0) = I_z = \text{const}$ (так называемое «приближение постоянного дальнего действия» [5] или «бесконечномерной решетки» [6—8]). Это приближение, как показано в [5—8] (см. также [9—10]) в точности соответствует приближению молекулярного поля Вейсса для модели Изинга (см. § 21); иными словами, в этом приближении модель Гейзенберга $\mathcal{H}(I, \xi, \eta)$ термодинамически полностью эквивалентна модели Изинга $\mathcal{H}(I, 0, 0)$, т. е. взаимодействие поперечных компонент спина не дает вклада в свободную энергию (формально это проявляется в том, что $\gamma_k \rightarrow \delta_{k,0}$ при $z \rightarrow \infty$ в (1.21), так что гамилтониан (1.26) вырождается в чисто изинговский, а спектр (2.10) и все корреляционные функции (2.13)—(2.14) теряют импульсную зависимость).

В последние годы в работах [11] (см. также монографии [12, 13]) интенсивно развивался метод разложений «высокой плотности» (впервые предложенный Браутом [14]), в котором строится регулярная теория возмущений по формальному малому параметру $1/z$ и соответствующая диаграммная техника. Этот подход привел, в частности, к уточнению области применимости феноменологической теории Ландау фазовых переходов 2-го рода. Другие варианты диаграммной техники [6, 9] позволили установить связь с вариационным принципом Н. Н. Боголюбова для свободной энергии (§ 20; см. в этой связи также [15]), а также просуммировать обширные классы ренормированных «наиболее разветвленных» решеточных диаграмм [16, 17], в особенности с использованием понятия «наиболее вероятной статистической конфигурации».

Идея «большого z » в сочетании с техникой асимптотических разложений и методом перевала успешно использовалась также и в других подходах: функционального интегрирования [19—22] и уравнений движения [23].

Примечание 2. При наличии поперечного магнитного поля зеемановская энергия имеет вид $-g\mu_B H \sum_i S_i^x$, и в этом случае ось z

уже не является осью квантования спина, так что рассмотрение усложняется. Кроме параметра упорядочения $\langle S^z \rangle$ из § 3 гл. I появляется параметр «недиагонального дальнего порядка» $\langle S^x, y \rangle$ (или $\langle S^\pm \rangle$) (см. в этой связи [24], где аналогичный параметр

вводится для неидеального бозе-газа). Для его исключения требуется перейти в «собственное представление» с помощью преобразования Тябликова (5.8) и найти соответствующий угол поворота из условия $\langle S^{\pm} \rangle = 0$, соответствующего минимуму свободной энергии (см., например, [25, 26]). Аналогично, можно потребовать определенных аналитических свойств функции Грина, например, обращения в нуль полюса при нулевой частоте (см. [27], а также [67—70]). Заметим, что преобразования (1.7) или (1.8) над гамилтонианом (1.2) в случае $H \neq 0$ и $|\eta| > 1$ (или $|\xi| > 1$) приводят именно к классу моделей с поперечным полем, так как зеемановская часть не коммутирует с $U_{\alpha}(\varphi)$ ($\alpha = x, y$; $\varphi = \pi/2$). Только в частном случае $\xi = \eta = 1$, $I > 0$ любое внешнее поле можно считать продольным; напротив, при $\xi = \eta = 1$, $I < 0$ любое внешнее поле является поперечным (см. § 16).

Примечание 3. Предлагаемая процедура [63] фактически эквивалентна составлению цепочки гриновских функций с последующим ее обрывом (расщеплением); точнее, уравнение (1.54) или (1.58) содержит ее в свернутом виде, так как процесс выделения связанных (кумулянтных) одновременных корреляционных функций возрастающего порядка можно продолжать неограниченно путем последовательного дифференцирования (аналогично (1.52a)). В ряде случаев, однако, указанная форма оказывается более удобной для проведения аппроксимаций (см. [63, 71—73]), по сравнению, например, с обычной теорией возмущений для массового оператора (см. §§ 29, 30, а также [74, 75]).

Заметим, что в некоторых специальных случаях обрыв цепочки для одночастичной функции Грина происходит автоматически на конечном шаге: например, для идеального газа ($J_k \equiv 0$) — уже на первом шаге, для модели Изинга с конечным радиусом взаимодействия — на $(z + 1)$ -ом шаге [76—79]. В последнем случае, однако, система не является замкнутой, так как в разрывные члены (одновременные коммутаторы) входят корреляционные функции высших порядков, для определения которых строится еще одна цепочка и т. д. Для полного замыкания требуются какие-либо дополнительные условия, например, асимптотическое условие ослабления корреляций (подробнее см. [76, 77], где построено точное решение для одномерного случая); плодотворный «метод разностных уравнений», позволяющий учесть влияние граничных условий на термодинамические свойства, развит в [79].

В последнее время интенсивно исследовалась также важная в методическом отношении модельная гейзенберговская система «двух спинов» [80—82], содержащая конечный набор операторов и допускающая поэтому точное решение; детальное сравнение его с различными приближениями расщепления дано в [82] (в частности, расщепление Тябликова дает очень малое отклонение от точного решения для одночастичных средних).

Примечание 4. Вопрос о сравнительной ценности тех или иных процедур расщепления (в отсутствие какого-либо универсального малого параметра) вообще является основным и самым сложным в практическом использовании метода функций Грина. Априорные

критерии здесь, как правило, отсутствуют, и для ответа на него следует проанализировать всю совокупность термодинамических следствий теории (см., например, §§ 32—36, а также [99—105]). Ясно, однако, что при любых расщеплениях по возможности не должны нарушаться (по крайней мере, в среднем) дополнительные условия и спиновые правила сумм, а также ряд физических требований (отсутствие щели в спектре для вырожденного случая, антисимметрия по отношению к знаку поля H , конечность значения θ_c , изотропия спиновых корреляционных функций $\langle S_k^\alpha S_{-k}^\alpha \rangle$ ($\alpha = x, y, z$) выше θ_c и т. п.).

Иногда роль малого параметра может играть средняя плотность спиновых волн \bar{n} (фактически это предполагает малость температур $\theta/\theta_c \ll 1$), обратный радиус взаимодействия $1/z$ (см. примечание 1), обратное спиновое квантовое число $1/S$ (соответствующий квазиклассический предел позволяет заменить спиновые операторы бозевскими; этот подход был предложен в работах Гольштейна — Примакова и Огучи [35] и позже Дайсона [105] и Малеева [106], в последнее время активно развивался в работах [37—39, 108—112], подробнее см. гл. III). Наконец, в ряде случаев могут помочь эвристические соображения, например, замена некоторого оператора его средним значением (т. е. пренебрежение флуктуациями соответствующей физической величины), редукция многочастичных корреляционных функций к одночастичным «по теореме Вика» (справедливой, строго говоря, лишь для идеального газа квазичастиц) и т. п. Оправдание этих приемов следует искать лишь во внутренней непротиворечивости теории и, разумеется, в удовлетворительном описании ею экспериментальных данных.

Примечание 5. Приближенные выражения подобного вида при вычислении спектра элементарных возбуждений (в скалярном случае) предлагались ранее Л. Рот [113], О. К. Калашниковым и Е. С. Фрадковым [78] в методе спектральных интенсивностей, Н. М. Плакидой [74] на основе уравнения Дайсона для неприводимых функций Грина, а также в [92, 93]. Эти выражения получаются при линеаризации операторных уравнений движения с точным учетом низших моментов спектральной интенсивности [94]; сходные идеи развивались также в работах Уоллеса [115, 172].

К. Савада [116] развил вариационную теорию для свободной энергии, в которой вариационным параметром является энергетический спектр некоторого эффективного гамильтониана свободных «одетых» квазичастиц. В [116] подтверждено предположение Юнга [114] о том, что наилучшее «одевание» может быть получено именно с помощью формул Рот; применительно к изотропной модели Гейзенберга теория Савады развивалась в работах А. Огучи [117].

Примечание 6. Разумеется, для получения точных резонансных частот и энергии низших возбужденных состояний (стоячих или «уокеровских» мод, см., например [1—4], [138]) в реальном ферромагнитном образце следует учесть граничные условия, зависящие от формы этого образца, и соответствующую энергию размагничивания, связанную с конечностью его размеров (см., например, формулу (7.16) и § 39, а также работы [139]). Более последовательным

является непосредственный учет магнитостатического диполь-дипольного взаимодействия (см. формулы (7.14), (7.15)), приводящий к анизотропии спектра магнонов и размытию его в полосу (см., например, [36, 138—140]). Результаты, полученные для бесконечного образца (или периодических граничных условий) могут быть справедливы, например, для образца сферической формы ($N_x = N_y = N_z$).

Примечание 7. Заметим прежде всего, что вклад в средний коммутатор $\langle [j_k(t), j_k^+(\tau)] \rangle_c$, определяющий согласно (3.15) матричный элемент $\Lambda_k^{11}(t)$, дают лишь «диагональные» члены

$$\langle [j_k(t), j_k^+] \rangle_c = \sum_{n=1}^4 L_k^{nn}(t), \quad L_k^{nm}(t) = \langle [j_k^{(n)}(t), (j_k^{(m)})^+] \rangle_c;$$

соответственно,

$$\langle [j_k(t), j_{-k}] \rangle_c = \tilde{L}_k^{12}(t) - \tilde{L}_k^{12}(-t) + \tilde{L}_k^{34}(t) - \tilde{L}_k^{34}(-t),$$

где $\tilde{L}_k^{mn}(t) = \langle [j_k^{(n)}(t), j_{-k}^{(m)}] \rangle_c$. Вычислим, например, $L_k^{33}(t)$, используя временную зависимость (3.14) и бозевскую теорему Вика при раскрытии средних:

$$L_k^{33}(t) = \frac{1}{4N^2} \sum_{pq\bar{p}\bar{q}} v_{kq}^{(+)} v_{k\bar{q}}^{(+)} v_p u_{p+q} v_{\bar{p}} u_{\bar{p}+\bar{q}} \times \\ \times \exp\{-it(E_p + E_{p+q} + E_{k-q})\} \langle [\beta_{-p} \beta_{p+q} \beta_{k-q}, \beta_{k-\bar{q}}^+ \beta_{\bar{p}+\bar{q}}^+ \beta_{-\bar{p}}^+] \rangle_c.$$

Согласно спектральным представлениям для равновесных корреляционных функций (26.5) и (26.6) для любых A и B имеем $\langle BA \rangle = \langle AB(i/\theta) \rangle$, откуда

$$\langle [\beta_{-p} \beta_{p+q} \beta_{k-q}, \beta_{k-\bar{q}}^+ \beta_{\bar{p}+\bar{q}}^+ \beta_{-\bar{p}}^+] \rangle_c = \\ = (1 - e^{-(E_{k-\bar{q}} + E_{\bar{p}+\bar{q}} + E_{\bar{p}})/\theta}) \langle \beta_{-p} \beta_{p+q} \beta_{k-q} \beta_{k-\bar{q}}^+ \beta_{\bar{p}+\bar{q}}^+ \beta_{-\bar{p}}^+ \rangle_c = \\ = (1 - e^{-(E_{k-\bar{q}} + E_{\bar{p}+\bar{q}} + E_{\bar{p}})/\theta}) \{ \delta_{p\bar{p}} (\delta_{q\bar{q}} + \delta_{\bar{q}, k-p-q}) + \\ + \delta_{\bar{p}, -p-\bar{q}} (\delta_{q\bar{q}} + \delta_{\bar{q}, k-p-q}) + \delta_{\bar{q}, k+p} (\delta_{-\bar{p}, p+q} + \delta_{\bar{p}, p+q-\bar{q}}) \} \times \\ \times (1 + n_p)(1 + n_{p+q})(1 + n_{k-q})(2\sigma)^3,$$

Тогда

$$L_k^{33}(t) = \frac{(2\sigma)^3}{4N^2} \sum_{pq} v_{kq}^{(+)} v_p u_{p+q} \{ v_{kq}^{(+)} (u_p v_{p+q} + v_p u_{p+q}) + \\ + v_{k, k-p-q}^{(+)} (u_p v_{k-q} + v_p u_{k-q}) + v_{k, k+p}^{(+)} (u_{p+q} v_{k-q} + v_{p+q} u_{k-q}) \} \times \\ \times e^{-it(E_p + E_{p+q} + E_{k-q})} M_{kqp},$$

где M_{kqr} — температурный фактор, определенный в (3.25) (учтено также, что $e^{-E/\Theta} (1 + n(E)) = -n(E)$ и $n(E) = (e^{E/\Theta} - 1)^{-1}$). Полученное выражение допускает симметризацию относительно замен индексов суммирования: 1) $q \rightarrow -q + k - p$, 2) $q \rightarrow k + p$, $p \rightarrow -k + q$ и 3) $p \rightarrow -p - q$. Проводя замены 1) и 2), имеем

$$L_k^{33}(t) = \frac{1}{3} \frac{(2\sigma)^3}{4N^2} \sum_{pq} \{v_{kq}^{(+)} v_p u_{p+q} + v_{k, k-p-q}^{(+)} v_p u_{k-q} + v_{k, k+p}^{(+)} v_{k-q} u_{p+q}\} \times \\ \times \{v_{kq}^{(+)} (u_p v_{p+q} + v_p u_{p+q}) + v_{k, k-p-q}^{(+)} (u_p v_{k-q} + v_p u_{k-q}) + v_{k, k+p}^{(+)} (u_{p+q} v_{k-q} + v_{p+q} u_{k-q})\} \exp[-it(E_p + E_{p+q} + E_{k-q})] M_{kqr};$$

проводя далее замену 3), получаем окончательно:

$$L_k^{33}(t) = \frac{1}{2} \frac{1}{3} \frac{(2\sigma)^3}{4N^2} \sum_{pq} \exp[-it(E_p + E_{p+q} + E_{k-q})] M_{kqr} \times \\ \times \{v_{kq}^{(+)} (u_p v_{p+q} + v_p u_{p+q}) + v_{k, k-p-q}^{(+)} (u_p v_{k-q} + v_p u_{k-q}) + v_{k, k+p}^{(+)} (u_{p+q} v_{k-q} + v_{p+q} u_{k-q})\}^2$$

Вычисляя аналогично и другие элементы L_k^{mn} и \tilde{L}_k^{mn} , приходим к выражениям (3.21)–(3.26).

Примечание 8. Покажем, что приближенное уравнение (3.68), как и точное уравнение (3.64), имеет лишь решения, симметричные относительно замены $q \rightarrow -q + k - p$.

Введем для удобства сокращенные обозначения

$$j = j^s + j^a, \quad K = K^s + K^a, \quad I = I^s \quad (I^a \equiv 0), \quad (1)$$

где $j \equiv j_{kqr}(E)$ — искомая функция, удовлетворяющая уравнению (3.68),

$$K = (-2\sigma/N) \{V_{k-q, \bar{q}-q} (1 + n_{p+q}) + V_{p+q, -\bar{q}+q} n_{k-q}\} -$$

ядро этого уравнения, а $I \equiv j_{kqr}(t=0)$ — неоднородный член; $s(a)$ означает (анти) симметризацию относительно замены $q \rightarrow -q + k - p$ (соответственно, $\bar{s}(\bar{a})$ — то же относительно замены $\bar{q} \rightarrow -\bar{q} + k - p$).

Тогда уравнение (3.68) может быть записано в символической форме:

$$j^s + j^a = I + \sum (K^s j^{\bar{s}} + K^a j^{\bar{a}} + K^s j^{\bar{a}} + K^a j^{\bar{s}}). \quad (2)$$

Легко показать, что в силу свойств ядра одно из «перекрестных» слагаемых равно нулю:

$$\sum K^a j^{\bar{s}} = 0. \quad (3)$$

Именно,

$$\begin{aligned} \sum K^a j^{\bar{s}} = & \frac{\sigma I(0)}{2N} \sum_{\bar{q}} \{ (\gamma_{\bar{q}-q} - \gamma_{\bar{q}+q-k+p}) + \\ & + n_{p+q} [(\gamma_{\bar{q}-q} - \gamma_{\bar{q}+q-k+p}) - \xi(\gamma_{\bar{q}-k} - \gamma_{\bar{q}+p})] - \\ & - n_{k-q} [(\gamma_{\bar{q}-q} - \gamma_{\bar{q}+q-k+p}) - \xi(\gamma_{\bar{q}+p} - \gamma_{\bar{q}-k})] \} \times \\ & \times (j_{k\bar{q}p}(E) + j_{k, -\bar{q}+k-p, p}(E)). \end{aligned}$$

Заменяя индекс суммирования $\bar{q} \rightarrow -\bar{q} + k - p$ в подчеркнутых слагаемых, убеждаемся в справедливости равенства (3). Тогда уравнение (2) принимает вид

$$j^{\bar{s}} + j^a = I + \sum (K^s j^{\bar{s}} + K^a j^{\bar{a}} + K^s j^{\bar{a}}) \quad (4)$$

и естественно распадается на два уравнения

$$j^{\bar{s}} = \{I + \sum K^s j^{\bar{a}}\} + \sum K^s j^{\bar{s}} \quad (5)$$

и

$$j^a = \sum K^a j^{\bar{a}}. \quad (6)$$

Однородное уравнение (6) не имеет отличных от нуля решений (если не учитывать связанных состояний, что оправдано при малых k и p); таким образом,

$$j^a = 0, \quad \sum K^s j^{\bar{a}} = 0, \quad (7)$$

и для функции $j^{\bar{s}} = j$ получаем уравнение с симметризованным ядром

$$j^{\bar{s}} = I + \sum K^s j^{\bar{s}}, \quad (8)$$

в точности совпадающее с уравнением (3.69).

Примечание 9. Докажем равенство (3.90):

$$T_R(r, \bar{r}; E) = T_R^D(r, r; E) \quad (9)$$

(при произвольных R, r, E), используемое для построения спектра магнов и термодинамики в теории Дайсона в § 3.3.

Рассмотрим два сопряженных интегральных уравнения (для краткости опустим аргумент E у T -матрицы):

$$T_R(r, r') = Q_R(r, r') - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} Q_R(r, \bar{r}) \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R(\bar{r}, r')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')}, \quad (10)$$

$$T_R^D(r, r') = Q_R(r', r) - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} Q_R(\bar{r}, r) \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R^D(\bar{r}, r')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')}, \quad (11)$$

где $Q_R(r, r') \neq Q_R(r', r)$ — несимметричное ядро (3.73), $\Omega_R(r, r')$ дается выражением (3.78), а температурный фактор $\lambda_R(r) = = 1 + n_{R+r} + n_{R-r}$.

Умножим уравнение (10) слева на

$$(I(0)/2N) \lambda_R(r) T_R(r, r'') (E - \Omega_R(r, r'))^{-1}$$

и просуммируем по r ; применяя уравнения (10) и (11), имеем тогда

$$\begin{aligned} \frac{I(0)}{2N} \sum_r \lambda_R(r) \frac{T_R^D(r, r'') T_R(r, r')}{E - \Omega_R(r, r'')} &= \frac{I(0)}{2N} \sum_r \lambda_R(r) \frac{Q_R(r, r') T_R^D(r, r'')}{E - \Omega_R(r, r'')} - \\ &- \left(\frac{I(0)}{2N} \right)^2 \sum_{r, \bar{r}} \frac{\lambda_R(r) T_R^D(r, r'')}{E - \Omega_R(r, r'')} Q_R(r, \bar{r}) \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R(\bar{r}, r')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')} = \\ &= \{Q_R(r'', r') - T_R^D(r', r'')\} - \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) \frac{T_R(\bar{r}, r')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')} \times \\ &\times \frac{I(0)}{2N} \sum_r \frac{\lambda_R(r) T_R^D(r, r'') Q_R(r, \bar{r})}{E - \Omega_R(r, r'')} = Q_R(r', r'') - T_R^D(r', r'') - \\ &- \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \frac{\lambda_R(\bar{r}) T_R(\bar{r}, r')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')} \{Q_R(r'', \bar{r}) - T_R^D(\bar{r}, r'')\} = \\ &= Q_R(r'', r') - T_R^D(r', r'') - Q_R(r'', r') + T_R(r'', r') + \\ &+ \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) \frac{T_R(\bar{r}, r') T_R^D(\bar{r}, r'')}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')}, \end{aligned}$$

откуда, полагая $r'' = r$ и заменяя индекс суммирования в левой части $r \rightarrow \bar{r}$, получаем соотношение

$$\begin{aligned} T_R(r, r'; E) - T_R^D(r', r; E) &= \\ &= \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) T_R^D(\bar{r}, r; E) T_R(\bar{r}, r'; E) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{E - \Omega_R(\bar{r}, r)} - \frac{1}{E - \Omega_R(\bar{r}, r')} \right\}, \quad (12) \end{aligned}$$

в частности, при $r' = r$ отсюда следует искомое равенство (3.90). Умножая обе части (12) на $\delta[\Omega_R(r, r')]$, получаем еще одно полезное соотношение:

$$[T_R(r, r'; E) - T_R^D(r', r; E)] \delta[\Omega_R(r, r')] = 0, \quad (13)$$

так как $\Omega_R(\bar{r}, r) - \Omega_R(\bar{r}, r') = \Omega_R(r', r) = -\Omega_R(r, r')$.

Аналогично, можно получить при $E = +i0$ следующее соотношение для $T_R(r, r') \equiv T_R(r, r'; +i0)$:

$$T_R(r, r') - T_R^{D*}(r', r) = \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) T_R^{D*}(\bar{r}, r) T_R(\bar{r}, r') \times \\ \times \left\{ \frac{1}{i0 - \Omega_R(\bar{r}, r)} - \frac{1}{-i0 - \Omega_R(\bar{r}, r')} \right\},$$

из которого с учетом (9) и (13) следует аналог оптической теоремы для T -матрицы; (см. также Харрис [157]);

$$T_R(r, r) - T_R^{D*}(r, r) = T_R^D(r, r) - T_R^{D*}(r, r) = 2i \operatorname{Im} T_R^D(r, r) = \\ = -2i\pi \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) T_R^{D*}(\bar{r}, r) T_R(\bar{r}, r) \delta[\Omega_R(\bar{r}, r)] = \\ = -2i\pi \frac{I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) T_R^{D*}(\bar{r}, r) T_R^D(r, \bar{r}) \delta[\Omega_R(\bar{r}, r)].$$

Для обычных самосопряженных уравнений (в отсутствие кинематических членов) T -матрица обладает свойством симметрии $T(r, \bar{r}) = T(\bar{r}, r)$, так что для нее имеет место обычная оптическая теорема

$$\operatorname{Im} T(r, r) = -\frac{\pi I(0)}{2N} \sum_{\bar{r}} \lambda_R(\bar{r}) |T(\bar{r}, r)|^2 \delta[\Omega_R(\bar{r}, r)] \leq 0$$

(см., например, [168], гл. 7).

Примечание 10. 1. Укажем некоторые свойства решеточных функций Грина

$$G(r) \equiv G(x, y, z) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{i(k, r)}}{\gamma_0 - \gamma_k - i0}, \quad G(-r) = G(r), \quad (14)$$

используемые при построении теории Дайсона; здесь $r = a(x, y, z)$ — радиус-вектор, соединяющий произвольный фиксированный узел с его соседями (не обязательно ближайшими), a — постоянная решетки (полагаемая для простоты равной единице).

Пусть $r = (0, 0, 0)$; тогда

$$G(0) \equiv G(0, 0, 0) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\gamma_0 - \gamma_k - i0} = F_1(-1), \quad (15)$$

где $F_1(-1)$ — интеграл Ватсона (для ПК-решетки $F_1(-1) \simeq 1.52$). При произвольном r получаем следующее разностное соотношение

(δ — вектор, соединяющий пару узлов — ближайших соседей, число которых z):

$$\begin{aligned} \frac{1}{z} \sum_{\delta} [G(\delta + r) - G(r)] &= \frac{1}{zN} \sum_{k, \delta} \frac{e^{i(k, \delta + r)} - e^{i(k, r)}}{\gamma_0 - \gamma_k - i0} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_k e^{i(k, r)} \frac{\gamma_0 - \gamma_k}{\gamma_0 - \gamma_k - i0} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i(k, r)} = \Delta(r). \end{aligned} \quad (16)$$

Полагая $r=0$, имеем, в частности, $(1/z) \sum_{\delta} [G(\delta) - G(0)] = 1$; для ПК-решетки в силу симметрии все шесть значений $G(\delta)$ равны друг другу,

$$G(1, 0, 0) = G(0, 1, 0) = G(0, 0, 1) \quad (17)$$

(то же с заменой $\delta \rightarrow -\delta$), так что

$$G(0, 0, 0) - G(1, 0, 0) = 1, \quad G(1, 0, 0) = F_1(-1) - 1 \approx 0,52. \quad (18)$$

Полагая $r=\delta'$ и учитывая, что в силу симметрии

$$G(1, 1, 0) = G(1, 0, 1) = G(1, -1, 0) = G(1, 0, -1), \quad (19)$$

получаем вследствие (16) и (17)

$$6G(1, 0, 0) - 4G(1, 1, 0) - [G(2, 0, 0) + G(0, 0, 0)] = 0,$$

откуда

$$G(2, 0, 0) = 5G(1, 0, 0) - 4G(1, 1, 0) - 1. \quad (20)$$

Особенно большой интерес представляют решеточные функции Грина в связи со свойствами собственных функций $\Psi_{kp}^{(i)}(\delta)$, принадлежащих данному неприводимому представлению группы симметрии решетки (Дайсон [105]). Последние удовлетворяют уравнению

$$\frac{1}{z} \sum_{\bar{\delta}} \Psi_{kp}^{(i)}(\bar{\delta}) G(\delta + \bar{\delta}) = \Gamma^{(i)} \Psi_{kp}^{(i)}(\delta), \quad (21)$$

где $\Gamma^{(i)}$ — собственные значения, выражающиеся через $G(\delta)$ и зависящие от типа решетки. Для кубических решеток, согласно [105], $i=1, 2$, причем в низшем (билинейном) приближении по k и p

$$\begin{aligned} \Psi_{kp}^{(1)}(\delta) &= (k, \delta)(p, \delta) - \sum_{n=1}^3 k_n p_n \delta_n^2, \\ \Psi_{kp}^{(2)}(\delta) &= \sum_{n=1}^3 k_n p_n \delta_n^2 - \frac{1}{3} (k, p) \delta^2, \end{aligned} \quad (22)$$

так что

$$\Psi_{kp}^{(l)}(-\delta) = \Psi_{kp}^{(l)}(\delta), \quad \Psi_{0p}^{(l)}(\delta) = \Psi_{k0}^{(l)}(\delta) = \Psi_{kp}^{(l)}(0) = 0. \quad (23)$$

Для случая ПК-решетки

$$\Psi_{kp}^{(1)}(\delta) \equiv 0, \quad \Psi_{kp}^{(2)}(\delta) = (k, \delta)(p, \delta) - \frac{1}{3}(k, p)\delta^2, \quad (24)$$

причем $\sum_{\delta} \Psi_{kp}^{(2)}(\delta) = 0$. Полагая, в (21), например, $\delta = (1, 0, 0)$ и используя свойства (23), (18)–(20), нетрудно найти, что

$$\Gamma^{(2)} \equiv \Gamma = G(1, 0, 0) - G(1, 1, 0);$$

согласно вычислениям Дайсона [105], $\Gamma \approx 0,2$ для ПК-решетки,

$$\Gamma = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx dy dz Q^{-1} \cos x (1 - \cos y),$$

$$Q = 1 - \frac{1}{3}(\cos x + \cos y + \cos z).$$

2. Решение уравнения (3.98) для $A_{kp}(\delta)$ ищется согласно [105] (см. также в [2], гл. 8) в виде разложения по собственным функциям $\Psi_{kp}^{(1, 2)}(\delta)$

$$A_{kp}(\delta) = A^{(1)}\Psi_{kp}^{(1)}(\delta) + A^{(2)}\Psi_{kp}^{(2)}(\delta) + A'(k, p)\delta^2; \quad A_{kp}(0) = 0; \quad (26)$$

в билинейном приближении по k и p $A_{kp}(\delta)$ определяется уравнением (3.104); заменяя $\delta' \rightarrow -\delta'$ в первом слагаемом, имеем

$$A_{kp}(\delta) = (k, \delta)(p, \delta) + \frac{1}{z} \sum_{\delta'} \{G(\delta + \delta') - G(\delta')\} A_{kp}(\delta'). \quad (27)$$

Для случая ПК-решетки $A^{(1)} \equiv 0$ в силу (24); тогда, подставляя (26) в (27) и суммируя по δ , находим $A' = 1/3$; используя затем свойства (16) и (21), находим $A^{(2)} = (1 - \Gamma^{(2)})^{-1}$, так что

$$A_{kp}(\delta) = \frac{(k, \delta)(p, \delta)}{1 - \Gamma} - \frac{a^2}{3}(k, p) \frac{\Gamma}{1 - \Gamma}. \quad (28)$$

Подставим (28) в (3.103) и используем симметрию ПК-решетки:

$$\frac{1}{z} \sum_{\delta'} G(\delta + \delta') (\delta')^2 = a^2 G(1, 0, 0),$$

а также

$$\begin{aligned}\sum_p n_p (p_x a)^2 &= \sum_p n_p (p_y a)^2 = \sum_p n_p (p_z a)^2 = \frac{1}{3} \sum_p n_p (pa)^2, \\ \sum_{p\delta} n_p (p, \delta)^2 (k, \delta)^2 &= \frac{2}{3} (ka)^2 \sum_p n_p (pa)^2, \\ \sum_{p\delta} n_p (p, \delta) (k, \delta) (k, p) \frac{a^2}{3} &= \frac{2}{9} (ka)^2 \sum_p n_p (pa)^2;\end{aligned}\tag{29}$$

применяя далее еще раз уравнение (21), получаем окончательный вид дайсоновского спектра (3.106).

ЛИТЕРАТУРА *)

- Абрагамс (1954) (E. Abrahams), Phys. Rev. **98**, 387 [§ 1].
 Абрагамс (1963) (S. C. Abrahams), J. Phys. Chem. Solids **24**, 589 [§ 1].
 Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. (1962), Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М. [§ 25].
 Акулов Н. С. (1939), Ферромагнетизм, Гостехиздат, М. — Л. [§§ 1, 2, 19].
 Александер (1962) (S. Alexander), Phys. Rev. **127**, 420 [§ 7].
 Алексеев А. И., (1961), Применение методов квантовой теории поля в статистической физике, УФН **73**, 41 [§ 25].
 Альтшулер С. А., Козырев Б. М. (1961), Электронный парамагнитный резонанс, Физматгиз, М. [§ 7].
 Аматауни А. Ц. (1956), ФММ **3**, 411 [§ 19].
 Аматауни А. Ц. (1957), ФММ **4**, 17 [§ 19].
 Аматауни А. Ц. (1958), ФММ **6**, 395 [§ 19].
 Андерсон (1950a) (P. W. Anderson), Phys. Rev. **79**, 350 [§ 1].
 Андерсон (1950b) (P. W. Anderson), Phys. Rev. **79**, 705 [§ 16, 19].
 Андерсон (1952) (P. W. Anderson), Phys. Rev. **84**, 694 [§ 19].
 Андерсон (1959) (P. W. Anderson), Phys. Rev. **115**, 2 [§ 1].
 Араи (1962) (T. Arai), Phys. Rev. **126**, 471 [§§ 6, 7].
 Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Каганов М. И. (1960a), Спиновые волны в ферромагнетиках и антиферромагнетиках, I, УФН **71**, 533 [§ 19].
 Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Каганов М. И. (1960b), Спиновые волны в ферромагнетиках и антиферромагнетиках, II, УФН **72**, 3 [§ 19].
 Ахиезер А. И., Померанчук И. Я. (1950), Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат [§ 40].
 Барьяхтар В. Г., Малеев С. В. (1963), ФТТ **5**, 1175 [§ 42].
 Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. (1960), ЖЭТФ **39**, 651 [§ 1].
 Барьяхтар В. Г., Савченко М. А., Шишкин Л. А. (1964), ФТТ **6**, 1435 [§ 19].
 Барьяхтар В. Г., Шишкин Л. А. (1964), ФММ **17**, 664 [§ 42].
 Барьяхтар В. Г., Стефановский Е. П. (1969), ФТТ **11**, 1946 [§ 10].

*) В квадратных скобках указаны номера параграфов, в которых упоминаются соответствующие работы.

- Бейкер (1965) (G. A. Baker), *Adv. in Theor. Phys.*, vol. 1, A. P., N. Y. [§ 24].
- Бейкер, Гаммель (1961) (G. A. Baker, J. L. Gammel), *J. Math. Anal. and Applications* 2, 21 [§ 24].
- Бейкер, Гаммель, Уилс (1961) (G. A. Baker, J. L. Gammel, J. G. Wills), *J. Math. Anal. and Applications* 2, 405 [§ 24].
- Бейкер, Рашбрук, Джилберт (1964) (G. A. Baker, G. S. Rushbrooke, H. E. Gilbert), *Phys. Rev.* 135, A 1272 164, 800 (1967) [§ 24].
- Беккер, Плишке (1970) (E. Becker, M. Plischke), *Phys. Rev.* B1, 314 [§ 1].
- Белов К. П. (1951), Упругие, тепловые и электрические явления в ферромагнитных металлах, Гостехиздат, М. — Л. [§§ 1, 2].
- Белов К. П. (1959), Магнитные превращения, Физматгиз, М. [§§ 1, 2].
- Белов К. П. (1972), Ферриты в сильных магнитных полях, «Наука», М.
- Белов К. П., Зайцева М. А. (1958), Новые магнитные материалы — ферриты-гранаты, *УФН* 66, 141 [§ 19].
- Белов К. П., Левитин Р. З., Никитин С. А. (1964), Ферро- и антиферромагнетизм редкоземельных металлов, *УФН* 82, 449 [§ 1].
- Белов К. П., Белянчикова М. А., Левитин Р. З., Никитин С. А. (1965), Редкоземельные ферромагнетики и антиферромагнетики, «Наука».
- Белов Н. В., Неронова Н. Н., Смирнова Т. С. (1956), *Тр. Ин-та кристаллографии АН СССР* 2, 33 [§ 7].
- Бердышев А. А., Вонсовский С. В. (1954), *Изв. АН СССР, серия физич.* 18, 328 [§ 1].
- Берто (1960) (F. Bertaut), *C. R. Acad. Sci. Paris* 251, 1733 [§ 7].
- Берто (1961a) (F. Bertaut), *J. Phys. Chem. Solids* 21, 256 [§ 7].
- Берто (1961b) (F. Bertaut), *J. Phys. Chem. Solids* 21, 295 [§ 7].
- Бете и Солпитер, 1960 (H. Bethe a. E. Salpiter), *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, М. [§ 7].
- Бломберген (1950) (N. Blombergen), *Phys. Rev.* 78, 572 [§ 38].
- Блох (1929) (F. Bloch), *Zs. für Phys.* 57, 545 [§ 1].
- Блох (1930) (F. Bloch), *Zs. für Phys.* 61, 206 [§§ 12, 15, 33].
- Блох (1932) (F. Bloch), *Zs. für Phys.* 74, 293 [§§ 12, 15, 33].
- Блох, де Доминисис (1958) (C. Bloch, C. de Dominicis), *Nucl. Phys.* 7, 459 [§§ 10, 24].
- Блох, Джентиль (1931) (F. Bloch, G. Gentile), *Zs. für Phys.* 70, 395 [§ 7].
- Блохинцев Д. И. (1963), Основы квантовой механики, «Высшая школа», М. [§§ 3, 4].
- Боголюбов Н. Н. (1946), Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, М. [§ 25].
- Боголюбов Н. Н. (1947), *Изв. АН СССР, серия физич.* 9, 77 [§ 10].
- Боголюбов Н. Н. (1949), Лекції з квантової статистики, «Радянська школа», Київ, [§§ 1, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 12, 13].
- Боголюбов Н. Н. (1956), Частное сообщение [§ 20].
- Боголюбов Н. Н. (1958), *ЖЭТФ* 34, 58 [§ 10].

- Боголюбов Н. Н. (1961), Квазисредние в задачах статистической механики, ротапринт ОИЯИ, Д-781, Дубна [§§ 11, 26, 28, 40].
- Боголюбов Н. Н., Гуров К. П. (1947), ЖЭТФ 17, 614 [§ 9].
- Боголюбов Н. Н., Парасюк О. С. (1956), ДАН СССР 109, 717 [§ 26].
- Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В. (1958), Новый метод в теории сверхпроводимости, Изд-во АН СССР, М. [§ 10].
- Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. (1949а), ЖЭТФ 19, 251 [§§ 4, 6, 7].
- Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. (1949б), Вестник МГУ, № 3, 35 [§ 6].
- Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. (1949в), ЖЭТФ 19, 256 [§§ 12, 13, 17].
- Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. (1957), Изв. АН СССР, серия физич. 21, 849 [§ 12].
- Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. (1959), ДАН СССР 126, 53 [§§ 26, 32].
- Бозорт (1956) (R. Buzorth), Ферромагнетизм, ИЛ, М. [§ 1].
- Болстерли (1960) (M. Bolsterli), Phys. Rev. Lett. 4, 82 [§ 26].
- Бом, Пайнс (1951) (D. Bohm, D. Pines), Phys. Rev. 82, 625 [§ 1].
- Бом, Пайнс (1953) (D. Bohm, D. Pines), Phys. Rev. 92, 609 [§ 1].
- Бонч-Бруевич В. Л. (1956), ЖЭТФ 31, 522 [§ 26].
- Бонч-Бруевич В. Л. (1959), ДАН СССР 129, 529 [§§ 25, 31].
- Бонч-Бруевич В. Л. (1962), ДАН СССР 147, 1049 [§ 30].
- Бонч-Бруевич В. Л., Коган Ш. М. (1960), Ann. of Phys. 9, 125 [§ 26].
- Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. (1961), Метод функций Грина в статистической механике, Физматгиз, М. [§ 25].
- Борн, Гепперт-Майер (1938) (M. Born, M. Goepfert-Mayer), Теория твердого тела, ГОНТИ, М. — Л. [П1].
- Борн, Грин (1947) (M. Born, H. S. Green), Proc. Roy. Soc. A191, 168 [§ 9].
- Борн, Хуан Кунь (1958) (M. Born, Kun Huang), Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, М. [П1].
- Боровик-Романов А. С. (1962), Антиферромагнетизм, сб. «Итоги науки», физико-математические науки, вып. 4, Изд-во АН СССР, М. [§§ 1, 16, 19, 23].
- Браун (1956) (H. A. Brown), Phys. Rev. 104, 624 [§ 24].
- Браун, Латтинджер (1955) (H. A. Brown, J. M. Luttinger), Phys. Rev. 100, 685 [§§ 24, 35].
- Бриллюэн, Пароди (1959) (L. Brillouin, M. Parodi), Распространение волн в периодических структурах, ИЛ, М. [П1].
- Брокхауз, Ватанабе (1962) (B. N. Brockhouse, H. Watanabe), Sump. on inelastic scatt. of neutrons in solids a. liquids, Chalk River, Ontario, Sept. 10—14 [§ 36].
- Бросс (1964а) (H. Bross), Phys. Stat. Sol. 4, 645 [§ 37].
- Бросс (1964б) (H. Bross), Phys. Stat. Sol. 4, 661 [§ 37].
- Брукс, Эгами (1973) (M. S. S. Brooks, T. Egami), J. Phys. C6, 513 [§ 19].

- Браут, Хакен (1960) (R. Brout, H. Haken), *Bull. Amer. Phys. Soc.* 5, 148 [§ 32].
- Бэйм, Сесслер (1963) (G. Baym, A. M. Sessler), *Phys. Rev.* 131, 2345 [§ 34].
- Бэкон (1957) (G. E. Bacon), *Дифракция нейтронов*, ИЛ [§ 40].
- Бэкон (1963) (G. E. Bacon), *Дифракция нейтронов*, УФН 81, вып. 2, 335 [§ 40].
- Ван ден Хандель, Гюисман, Поулис (1952) (J. Van den Handel, H. M. Gijsman, H. J. Poulis), *Physica* 18, 862 [§ 19].
- Ван Кранендонк, Ван Флек (1958) (J. Van Kranendonk, J. H. Van Vleck), *Rev. Mod. Phys.* 30, 1 [§§ 15, 19].
- Ван Флек (1937) (J. H. Van Vleck), *Phys. Rev.* 52, 1178 [§ 7].
- Ван Флек (1941) (J. H. Van Vleck), *J. Chem. Phys.* 9, 85 [§§ 16, 23].
- Ван Флек (1947) (J. H. Van Vleck), *Ann. Inst Henri Poincare* 10, 57 [§ 7].
- Ван Флек (1951) (J. H. Van Vleck), *J. de Phys. et Radium* 12, 262 [§§ 1, 16, 23].
- Ван-Хов (1954a) (L. Van Hove), *Phys. Rev.* 95, 249 [§ 40].
- Ван-Хов (1954b) (L. Van Hove), *Phys. Rev.* 95, 1374 [§ 40].
- Ван-Хов (1955) (L. Van Hove), *Physica* 21, 901 [§ 24].
- Ван-Хов (1956) (L. Van Hove), *Physica* 22, 343 [§ 24].
- Вейсс (1907) (P. Weiss), *J. de Phys. et Radium* 6, 661 [§ 1].
- Виллейн (1959) (T. Villain), *J. Phys. Chem. Solids* 11, 303 [§ 1, 7].
- Власов К. Б., Ишмухаметов Б. Х. (1954), *ЖЭТФ* 27, 75 [§ 23].
- Войтович, Джозеф (1964) (P. Wojtowicz, R. I. Joseph), *Phys. Rev.* 135, A1314 [§ 24].
- Вольфарт (1949) (E. P. Wohlfarth), *Nature* 163, 57 [§ 6].
- Вонсовский С. В. (1940a) *J. of Phys. (СССР)* 3, 83 [§ 7].
- Вонсовский С. В. (1940b) *ЖЭТФ* 10, 762 [§ 19].
- Вонсовский С. В. (1946), *ЖЭТФ* 16, 981 [§ 1].
- Вонсовский С. В. (1952) Современное учение о магнетизме, Гостехиздат, М. — Л. [§§ 1, 2].
- Вонсовский С. В. (1971) Магнетизм, «Наука» [§ 1].
- Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А. (1960), *ФММ* 10, 321 [§ 1, 42].
- Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А. (1962a), *Электронная теория переходных металлов*, I, УФН 77, 379 [§ 1].
- Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А. (1962b), *Электронная теория переходных металлов*, II, УФН 78, 1 [§§ 1, 42].
- Вонсовский С. В., Кобелев Л. Я. (1961), *ФММ* 11, 820 [§ 1].
- Вонсовский С. В., Сеидов Ю. М. (1954), *Изв. АН СССР, серия физич.* 18, 319 [§ 19].
- Вонсовский С. В., Сеидов Ю. М. (1956), *ДАН СССР* 107, 37, [§ 1].
- Вонсовский С. В., Туров Е. А. (1953), *ЖЭТФ* 24, 419 [§§ 1, 7].
- Вонсовский С. В., Шур Я. С. (1948), *Ферромагнетизм*, Гостехиздат, М. — Л. [§§ 1, 2, 21].
- Гайтлер, Лондон (1927) (W. Heitler, F. London), *Zs. für Phys.* 44, 455 [§ 6].

- Гальперн, Джонсон (1939) (O. Halpern, M. H. Johnson), Phys. Rev. 55, 898 [§ 40].
- Гаммель, Маршалл, Морган (1963), (J. Gammel, W. Marshall, L. Morgan), Proc. Roy. Soc. A275, 257 [§ 24].
- Гаубенрейзер (1963) (W. Haubenreiser), Phys. Lett. 6, 43 [§ 42].
- Гебер (1954) (G. Heber), Zs. für Naturforsch. 9a, 91 [§ 32].
- Гейзенберг (1928) (W. Heisenberg), Zs. für Phys. 49, 619 [§ 1, 6].
- Гейзенберг (1930) (W. Heisenberg), Metallwirtschaft 9, 843 [§ 7].
- Гиббс (1946) (J. W. Gibbs), Основные принципы статистической механики, Гостехиздат, М. — Л. [§ 9].
- Гинзбург В. Л., Файн В. М. (1960), ЖЭТФ 39, 1323 [§ 32].
- Голдстоун (1957) (J. Goldstone), Proc. Roy. Soc. A239, 267 [§ 24].
- Гольштейн, Примаков (1940), (T. Holstein, H. Primakoff), Phys. Rev. 58, 1098 [§§ 5, 7].
- Гортер (1955) (E. W. Gorter), Намагниченность насыщения и кристаллохимия ферромагнитных окислов, УФН 57, вып. 2 и 3, [§ 1].
- Горьков Л. П. (1958), ЖЭТФ 34, 735 [§ 26].
- Госсард, Жаккарино, Ремейка (1961) (A. C. Gossard, V. Jaccarino, J. P. Remeika), Phys. Rev. Lett. 7, 122 [§ 15].
- Гугенгольц (1957a) (N. M. Hugenholtz), Physica 23, 481 [§ 24].
- Гугенгольц (1957b) (N. M. Hugenholtz), Physica 23, 533 [§ 24].
- Гудинаф (1960) (J. B. Goodenough), Phys. Rev. 120, 67 [§ 6].
- Гудингс, Саутерн (1971) (D. A. Goodings, B. W. Southern), Can. J. Phys. 49, 1137.
- Гуревич А. Г. (1960), Ферриты на сверхвысоких частотах, Физматгиз, М. [§§ 1, 2, 19].
- Гуревич А. Г. (1974), Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках, «Наука», [§§ 1, 2, 19].
- Гуров К. П. (1946), Кандидатская диссертация, физфак МГУ, М. [§ 9].
- Гуров К. П. (1947), Вестник МГУ, № 1, 135 [§ 9].
- Гусев А. А. (1955), ЖЭТФ 29, 181 [§ 19].
- Гусев А. А. (1959), Кристаллогр. 4, 695 [§§ 22, 23].
- Гусев А. А. (1960), Кристаллогр. 5, 420 [§ 23].
- Гусев А. А. и Пахомов А. С. (1961), Изв. АН СССР, серия физич., № 11, 1327 [§ 19, 23].
- Гусев А. А., Пахомов А. С. (1961), Кристаллогр. 8, 63 [§ 23].
- Гусев А. А., Пахомов А. С. (1964), ФММ 18, 156 [§ 19].
- Дайсон (1956a) (F. J. Dyson), Phys. Rev. 102, 1217 [§§ 5, 14, 15, 24, 37].
- Дайсон (1956b) (F. J. Dyson), Phys. Rev. 102, 1230 [§§ 5, 14, 15, 37].
- Девис (1962) (H. L. Davis), J. Phys. Chem. Solids 23, 1348 [§ 16].
- Девлин (1971) (J. F. Devlin), Phys. Rev. B4, 136 [§ 42].
- Дембинский (1964) (S. T. Dembinski), Physica 30, 1217 [§ 5].
- Дзялошинский И. Е. (1957), ЖЭТФ 32, 1547 [§ 7].
- Дзялошинский И. Е. (1958) (J. Phys. Chem. Solids 4, 241 [§ 7].

- Дзялошинский И. Е. (1964a), ЖЭТФ **46**, 1420 [§ 1].
Дзялошинский И. Е. (1964b), ЖЭТФ **47**, 336 [§ 1].
Дзялошинский И. Е. (1964в), ЖЭТФ **47**, 992 [§ 1].
Диммок, Уилер (1962) (J. O. Dimmock, R. G. Wheeler), Phys. Rev. **127**, 391 [§ 7].
Дирак (1922) (P. A. M. Dirac), Proc. Roy. Soc. **A123**, 714 [§ 6].
Дирак (1960) (P. A. M. Dirac), Принципы квантовой механики, Физматгиз, М. [§§ 6, 26].
Доман, тер Хаар (1962) (B. G. S. Doman, D. ter Haar), Phys. Lett. **2**, 15 [§ 42].
Домб, Сайкс (1962) (C. Domb, M. F. Sykes), Phys. Rev. **128**, 168 [§ 24].
Загури, Резенде (1971) (N. Zagury, S. Rezende), Phys. Rev. **B4**, 201 [§ 1].
Займан (1952a) (J. M. Ziman), Proc. Phys. Soc. **65**, 540 [§ 19].
Займан (1952b) (J. M. Ziman), Proc. Phys. Soc. **65**, 548 [§ 19].
Зак (1964) (J. Zak), Phys. Rev. **134**, 1602, 1607 [§ 7].
Зинер (1951) (C. Zener), Phys. Rev. **81**, 440 [§ 6].
Зубарев Д. Н. (1960), Двухвременные функции Грина в статистической физике, УФН **71**, 71 [§§ 25, 31].
Зубарев Д. Н. (1961a), ДАН СССР **140**, 92 [§ 31].
Зубарев Д. Н. (1961b), Частное сообщение [§ 34].
Зубарев Д. Н. (1971), Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», М. [§ 31].
Изюмов Ю. А. (1959), ДАН СССР **125**, 1227 [§§ 5, 14].
Изюмов Ю. А. (1963a), Теория рассеяния медленных нейтронов в магнитных кристаллах, УФН **80**, 41 [§§ 36, 40—42].
Изюмов Ю. А. (1963b), ФТТ **5**, 717 [§ 42].
Изюмов Ю. А., Озеров Р. П. (1966), Магнитная нейтронография, «Наука», М. [§ 42].
Изюмов Ю. А., Яковлев Е. Н. (1960), ФММ **9**, 667 [§ 42].
Инденбом В. Л. (1960), Кристаллогр. **5**, 513 [§ 7].
Иосида (1957) (K. Yosida), Phys. Rev. **106**, 893 [§ 1].
Иосида, Мива (1961a) (K. Yosida, H. Miwa), J. Appl. Phys. **32**, 8S [§ 1].
Иосида, Мива (1961b) (K. Yosida, H. Miwa), Progr. Theor. Phys. **26**, 693 [§ 1].
Иошимори (1959) (A. Yoshimori), J. Phys. Soc. Japan. **14**, 807 [§§ 1, 7].
Ирхин Ю. П., Туров Е. А. (1957), ФММ **4**, 9 [§ 1].
Кавасаки, Мори (1961) (K. Kawasaki, H. Mori), Progr. Theor. Phys. **25**, 1045 [§ 42].
Каплан (1958) (T. A. Kaplan), Phys. Rev. **109**, 782 [§ 19].
Каплан (1959) (T. A. Kaplan), Phys. Rev. **116**, 888 [§ 7].
Каплан (1960) (T. A. Kaplan), Phys. Rev. **119**, 1460 [§ 15].
Каплан (1961) (T. A. Kaplan), Phys. Rev. **124**, 329 [§§ 1, 18, 19].
Каплан, Лайонс (1960) (T. A. Kaplan, D. H. Lyons), Phys. Rev. **120**, 1580 [§ 7].
Каплан, Лайонс (1963) (T. A. Kaplan, D. H. Lyons), Phys. Rev. **129**, 2073 [§ 1].
Касуя (1956) (T. Kasuya), Progr. Theor. Phys. **16**, 45 [§ 1].
Касуя (1958) (T. Kasuya), Progr. Theor. Phys. **20**, 980 [§ 1].

- Кашеев В. Н. (1962a), ФТТ 4, 759 [§ 42].
Кашеев В. Н. (1962b), ФТТ 4, 1432 [§ 42].
Кашеев В. Н. (1962в), ФТТ 5, 909 [§ 42].
Кашеев В. Н. (1964a), Acta Phys. Polon. 25, 337 [§ 42].
Кашеев В. Н. (1964b), Acta Phys. Polon. 25, 349 [§ 42].
Кашеев В. Н., Кривоглаз М. А. (1961), ФТТ 3, 1541 [§ 42].
Квасников И. А. (1957), ДАН СССР 113, 544 [§ 23].
Келлен (1963a), (H. B. Callen), Phys. Lett. 4, 161 [§ 42].
Келлен (1963b) (H. B. Callen), Phys. Rev. 130, 890 [§§ 35, 42].
Келлен, Вельтон (1951) (H. B. Callen, T. A. Welton), Phys. Rev. 83, 34 [§§ 26, 31].
Келлен, Келлен (1966) (H. B. Callen, E. Callen), J. Phys. Chem. Sol. 27, 1271 [§ 19].
Келлен, Питтели (1960) (H. B. Callen, E. Pitteli), Phys. Rev. 119, 1523 [§ 42].
Кеффер, Огучи (1959) (F. Keffer, T. Oguchi), Phys. Rev. 115, 1428 [§ 1].
Киттель (1947) (Ch. Kittel), Phys. Rev. 71, 270 [§ 39].
Киттель (1948) (Ch. Kittel), Phys. Rev. 73, 155 [§ 39].
Клейн, Прейндж (1958) (A. Klein, R. Prange), Phys. Rev. 112, 994 [§ 29].
Клогстон, Сул, Андерсон, Уокер (1956) (A. M. Clogston, H. Suhl, P. W. Anderson, L. R. Walker), J. Phys. Chem. Solids 1, 129 [§ 42].
Коган Ш. М. (1959), ДАН СССР 126, 546 [§ 26].
Кондон, Шортли (1949) (E. U. Condon, R. Shortley), Теория атомных спектров, ИЛ, М. [§ 1].
Кондорский Е. И., Пахомов А. С. (1953), ДАН СССР 93, 431 [§ 19].
Кондорский Е. И., Пахомов А. С., Шиклош Т. (1956), ДАН СССР 109, 931 [§ 19].
Крекнелл (1969) (A. P. Cracknell), Rep. Progr. Phys. 32, 633.
Крамерс (1934) (H. A. Kramers), Physica 1, 182 [§ 1].
Кубо (1953) (R. Kubo), Rev. Mod. Phys. 25, 344 [§ 9].
Кубо (1957) (R. Kubo), J. Phys. Soc. Japan 12, 570 [§§ 28, 31, 38].
Кубо (1962) (R. Kubo), J. Phys. Soc. Japan. 17, 1100 [§ 42].
Кубо, Иокота, Накадзима (1957) (R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima), J. Phys. Soc. Japan. 12, 1203 [§ 31].
Кубо, Томита (1954) (R. Kubo, K. Tomita), J. Phys. Soc. Japan. 9, 888 [§§ 31, 38].
Кук, Эдмондс, Финн, Вольф (1959) (A. H. Cooke, D. T. Edmonds, C. B. P. Finn, W. P. Wolf), Proc. Phys. Soc. 74 (6), 791 [§ 1].
Купер, Эллиотт (1963) (B. R. Cooper, R. J. Elliott), Phys. Rev. 131, 1043 [§ 19].
Купер, Эллиотт, Неттел, Сул (1962) (B. R. Cooper, R. J. Elliott, S. J. Nettel, H. Suhl), Phys. Rev. 127, 57 [§§ 18, 19].
Кюнел (1969) (A. Kühnel), J. Phys. C2, 704, 711 [§ 10].
Лаврентьев М. А. и Шабат Б. В. (1958), Методы теории функций комплексного переменного, Гостехиздат, М. [§ 27].
Лайнс (1963) (M. E. Lines), Proc. Roy. Soc. A271, 105 [§ 19].
Лайнс (1964a) (M. E. Lines), Phys. Rev. 133, A841 [§ 42].

- Лайнс (19646) (M. E. Lines), Phys. Rev. **135**, A1337 [§ 42].
Лайонс (1963) (D. H. Lyons), Phys. Rev. **132**, 122 [§ 19].
Ландау Л. Д. (1927) Zs. für Phys. **45**, 430 [§ 8].
Ландау Л. Д. (1933), Sow. Phys. **4**, 675 [§ 16].
Ландау Л. Д. (1958), ЖЭГФ **34**, 262 [§ 26].
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1935a), Sow Phys. **8**, 153 [§ 1].
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1935b), Sow. Phys. **8**, 175 [§ 38].
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1959), Электродинамика сплошных сред, Физматгиз, М. [§§ 1, 2, 21, 24].
Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1963), Квантовая механика, часть I, Физматгиз, М. — Л. [§§ 1, 3, 4].
Латтинджер (1951) (J. M. Luttinger), Phys. Rev. **81**, 1015 [§ 16].
Латтинджер (1961a) (J. M. Luttinger), Лекции, читанные на физфаке МГУ в 1961 г. [§ 10].
Латтинджер (1961b) (J. M. Luttinger), Phys. Rev. **121**, 942 [§ 30].
Латтинджер, Уорд (1960) (J. M. Luttinger, J. C. Ward), Phys. Rev. **118**, 1417 [§ 20].
Лёвдин (1962) (P. O. Löwdin), Rev. Mod. Phys. **34**, 80 [§ 6].
Ледерман (1944) (W. Ledermann), Proc. Roy. Soc. **A182**, 362 [П 2].
Леони, Натולי (1971) (F. Leoni, C. R. Natoli), Phys. Rev. **B4**, 2243 [§ 42].
Леман (1954) (H. Lehman), Nuovo Cimento. **11**, 342 [§ 26].
Ли (1950) (Li Yin-Yuan), Phys. Rev. **80**, 457 [§ 16].
Лоусон, Бриент (1973) (J. O. Lawson, S. J. Brient), Nuovo Cimento. **15B**, 18, 25 **17B**, 196 [§ 36].
Лэкс (1955) (M. Lax), Phys. Rev. **97**, 629 [§ 33].
Мадсен, Танака (1969) (E. Madsen, T. Tanaka), Phys. Rev. **184**, 527 [§ 31].
Макколлум (мл.), Колловей (1962) (D. C. McCollum (Jr.) a. J. Callaway), Phys. Rev. Lett. **9**, 376 [§ 15].
Максимов Л. А., Куземский А. Л. (1971), ФММ **31**, 5 [§ 19] [§ 7].
Малеев С. В. (1957), ЖЭТФ **33**, 1010 [§ 5].
Малеев С. В. (1961), ЖЭТФ **41**, 1675 [§ 30].
Малеев С. В., Барьяхтар В. Г., Сурис Р. А. (1962), ФТТ **4**, 3461, [§ 42].
Мартин, Швингер (1958) (P. C. Martin, J. Schwinger), Bull. Amer. Phys. Soc. **3**, 202 [§ 26].
Маршалл (1955a) (W. Marshall), Proc. Roy. Soc. **A232**, 48 [§ 19].
Маршалл (1955b) (W. Marshall), Proc. Roy. Soc. **A232**, 69 [§ 19].
Мацубара (1954) (T. Matsubara), J. of the Faculty of Sci., Hokkaido Univ., Japan., Ser. **11**, **4**, 292 [§ 1].
Мацубара (1955) (T. Matsubara), Progr. Theor. Phys. **14**, 351 [§ 25].
Мейер, Гаррис (1962) (H. Meyer, A. B. Harris), J. App. Phys. **31**, 49S [§ 19].
Мива (1963) (H. Miwa), Progr. Theor. Phys. **29**, 477 [§ 19].
Миллс, Кенан, Милфорд (1964) (R. E. Mills, R. P. Kenan, F. J. Milford), Phys. Letters **12**, 173 [§ 42].
Миллс, Кенан (1966) (R. E. Mills, R. P. Kenan), Ann. Phys. **37**, 104 [§ 55].

- Митчелл (1957) (A. H. Mitchell), Phys. Rev. **105**, 1439 [§ 1].
 Мори (1956) (H. Mori), J. Phys. Soc. Japan **11**, 1029 [§ 31].
 Мориа (1960) (T. Moriya), Phys. Rev. **120**, 91 [§ 7].
 Морковский (1963) (J. Morkowski), Acta Phys. Pol. **23**, 469 [§ 42].
 Морозов В. Г. (1972), ТМФ **10**, 424 [§ 1].
 Мотт (1935) (N. F. Mott), Proc. Phys. Soc. **47**, 571 [§ 1].
 Мэн Сянь-чжень (1961), Изв. АН СССР, серия физич., № 11, 1353 [§ 42].
 Мэн Сянь-чжень (1963), ФТТ **5**, 1988 [§ 42].
 Мэн Сянь-чжень, Пу Фу-чо (1961), Acta Phys. Sinica, **17**, 214 [§ 42].
 Нагамия (1962) (T. Nagamiya), J. App. Phys. **33**, 1029 [§ 19].
 Нагамия, Иосида, Кубо (1955), T. Nagamiya, K. Yosida, R. Kubo), Antiferromagnetism, Adv. in Phys. **4**, № 13 [§§ 1, 16].
 Нагамия, Нагато, Китано (1962a) (T. Nagamiya, K. Nagato, Y. Kitano), Progr. Theor. Phys. **27**, 1253 [§ 1, 19].
 Нагамия, Нагато, Китано (1962b) (T. Nagamiya, K. Nagato, Y. Kitano), J. Phys. Soc. Jap. **17**, Suppl. B1. **10** [§§ 1, 19].
 Найш В. Е. (1963), Изв. АН СССР, серия физич. **27**, 1496 [§ 1].
 Накамура (1952) (T. Nakamura), Progr. Theor.; Phys. **7**, 539 [§ 19].
 Неель (1932) (L. Néel), Ann. de Phys. **17**, 61 [§§ 1, 16, 23].
 Неель (1936) (L. Néel), Ann. de Phys. **5**, 232 [§§ 1, 16, 23].
 Неель (1948) (L. Néel), Ann. de Phys. **3**, 137 [§§ 1, 16, 23].
 Нейман (1927a) (J. von Neumann), Göttingen Nachr. № 3, 245 [§ 8].
 Нейман (1927b) (J. von Neumann), Göttingen Nachr., № 3, 273 [§ 8].
 Нейман (1932) (J. von Neumann), Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Berlin, J. Springer [§ 8]. (пер. Нейман, Математические основы квантовой механики, «Наука», 1964).
 Носкова Л. М. (1972) ФММ **33**, 698 [§ 42].
 Огучи (1957) (T. Oguchi), Progr. Theor. Phys. **17**, 659 [§ 7].
 Огучи (1960) (T. Oguchi), Phys. Rev. **117**, 117 [§ 14].
 Огучи (1961) (T. Oguchi), Progr. Theor. Phys. **25**, 721 [§ 5].
 Огучи (1963) (T. Oguchi), J. Appl. Phys. **34**, 1153 [§ 5].
 Опеховский (1937) (W. Opechowski), Physica **4**, 181 [§ 24].
 Опеховский (1959) (W. Opechowski), Physica **25**, 476 [§ 37].
 Пайерлс (1938) (R. E. Peierls), Phys. Rev. **54**, 918 [§ 20].
 Пайерлс (1954) (R. E. Peierls), Proc. Nat. Inst. Sci. of India **20**, 121 [П 2].
 Пайк (1964) (E. R. Pike), Proc. Phys. Soc. **84**, 83 [§ 26].
 Пайнс (1953) (D. Pines), Phys. Rev. **92**, 626 [§ 1].
 Пайнс, Бом (1952) (D. Pines, D. Bohm), Phys. Rev. **85**, 338 [§ 1].
 Пал (1954) (L. Pal), Acta Phys. Hung. **3**, 287 [§ 19].
 Пауэлл (1930) (F. C. Powell), Proc. Roy. Soc. A **130**, 176 [§ 7].
 Пахомов А. С., Смольков Н. А. (1962), Ферриты, в сб. «Итоги науки», физико-матем. науки, вып. 4, Изд-во АН СССР, М. [§§ 1, 19, 23].
 Пахомов А. С., Гербутов В. А. (1971) ФТТ **13**, 10 [§ 19].

- Пахомов А. С. (1971), Магнитные и кристаллохимические исследования ферритов (под ред. К. П. Белова и Ю. Д. Третьякова), Изд-во МГУ [§§ 19, 23].
- Петровский А. Б. (1967), ФММ 24, 595 [§ 1].
- Потапков Н. А. (1957), ДАН СССР 117, 965 [§ 19].
- Потапков Н. А. (1958), ДАН СССР 118, 269 [§ 19].
- Потапков Н. А. (1962a), ДАН СССР 144, 297 [§§ 7, 42].
- Потапков Н. А. (1962b), ФТТ 4, 1803, [§ 42].
- Потапков Н. А. (1963a), ДАН СССР 151, 543 [§ 42].
- Потапков Н. А. (1963b), Изв. АН СССР, серия физич. 28, 495 [§ 42].
- Потапков Н. А. (1970), ТМФ 4, 76 [§ 42].
- Потапков Н. А. (1971), ТМФ 8, 381 [§ 42].
- Потапков Н. А., Рудой Ю. Г. (1971), Phys. Lett. 27A, 432 [§ 19].
- Потапков Н. А., Тябликов С. В. (1960), ФТТ 2, 2733 [§§ 1, 42].
- Потене (1952) (R. Pauthenet), Ann. de Phys. 7, 710 [§ 36].
- Поттер (1934) (H. N. Potter), Proc. Roy. Soc. A146, 362 [§ 36].
- Правецки (1961) (E. Praveccki), ФММ 12, 296 [§ 5].
- Правецки (1963) (E. Praveccki), Phys. Lett. 6, 147 [§§ 35, 37].
- Привороцкий И. А. (1971) ЖЭТФ 60, 1525 [§ 1].
- Пузей И. М. (1957), Изв. АН СССР, серия физич. 21, 1088 [§ 19].
- Пузей И. М. (1963), Изв. АН СССР, серия физич. 27, 1469 [§ 19].
- Пу Фу-чо (1960a), ДАН СССР 130, 1244 [§ 42].
- Пу Фу-чо (1960b), ДАН СССР 131, 546 [§ 42].
- Пу Фу-чо (1961), ФТТ 3, 476 [§ 42].
- Рашбрук, Вуд (1958) (G. S. Rushbrooke, P. J. Wood), Mol. Phys. 1, 257 [§ 24].
- Роде В. Е., Ведяев А. В. (1963), ЖЭТФ 45, 415 [§ 1].
- Розинг Б. Л. (1892), ЖРФХО (часть физич.) 24, 105 [§ 1].
- Розинг Б. Л. (1896), ЖРФХО (часть физич.) 28, 59 [§ 1].
- Розинг Б. Л. (1910), ЖРФХО (часть физич.) 42, 71 [§ 1].
- Рудой Ю. Г. (1963a), ФТТ 5, 534 [§ 19].
- Рудой Ю. Г. (1963b), Высокотемпературные разложения в теории ферромагнетизма, ротапринт МИАН СССР [§ 24].
- Рудой Ю. Г. (1970), ТМФ 2, 129 [§ 21].
- Рыжик И. М., Градштейн И. С. (1951), Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Гостехиздат, М. — Л., [§ 33].
- Савченко М. А., Барьяхтар В. Г. (1963), ФТТ 5, 2747 [§ 19].
- Саенц (1962) (A. W. Saenz), Phys. Rev. 125, 1940 [§ 15].
- Самуэльсен, Зильберглитт, Ширани, Ремейка (1971), (E. J. Samuelsen, R. Silbergliitt, G. Shirane, J. P. Remeika), Phys. Rev. B3, 157 [§ 15].
- Сборник (1951), Физика ферромагнитных областей, под ред. С. В. Вонсовского, ИЛ, М. [§ 1].
- Сборник (1952), Ферромагнитный резонанс, под ред. С. В. Вонсовского, ИЛ, М. [§ 1, 23].
- Сборник (1956), Антиферромагнетизм, под ред. С. В. Вонсовского, ИЛ, М. [§§ 1, 16, 23].
- Сборник (1959), Магнитная структура ферромагнетиков, под ред. С. В. Вонсовского, ИЛ, М. [§ 1].

- Сборник (1961), Ферромагнитный резонанс, под ред. С. В. Вонсовского, Современные проблемы физики, Физматгиз, М. §§ 1, 2, 19, 23, 38].
- Сборник (1963), Теория ферромагнетизма металлов и сплавов, под ред. С. В. Вонсовского, ИЛ, М. [§ 1].
- Сборник (1973), Статистическая физика и квантовая теория поля, под ред. Н. Н. Боголюбова, «Наука» §§ 1, 42].
- Сеидов Ю. М. (1973), Докт. дисс. ИФМ АН СССР, Свердловск [§ 7].
- Скотт (1962) (G. G. Scott), *Rev. Mod. Phys.* **34**, 102 [§ 1].
- Скороцкий Г. В., Курбатов Л. В. (1958), *ЖЭТФ* **35**, 216 [§ 42].
- Слэтер (1936) (J. C. Slater), *Phys. Rev.* **49**, 537, 931 [§ 1].
- Слэтер (1953) (J. C. Slater), *Rev. Mod. Phys.* **25**, 199 [§ 6].
- Смарт (1952) (J. S. Smart), *Phys. Rev.* **86**, 968 [§ 16].
- Смарт (1953) (J. S. Smart), *Phys. Rev.* **90**, 55 [§ 16].
- Смит, Вейн (1962) (J. Smit, H. P. J. Wijn), Ферриты, ИЛ, М. §§ 1, 19, 23].
- Стинчкомб, Горвитц, Энглерт, Браут (1963) (R. B. Stinchcombe, G. Horwitz, F. Englert, R. Brout), *Phys. Rev.* **130**, 155 [§ 24].
- Стонер (1936) (E. C. Stoner), *Proc. Roy. Soc.* **A154**, 656 [§ 1].
- Стонер (1938) (E. C. Stoner), *Proc. Roy. Soc.* **A165**, 372 [§ 1].
- Стонер (1939) (E. C. Stoner), *Proc. Roy. Soc.* **A169**, 339 [§ 1].
- Стонер (1948) (E. C. Stoner), *Repts. Progr. Phys.* (London) **11**, 43 [§ 1].
- Стюарт, Маршалл (1960) (R. Stuart, W. Marshall), *Phys. Rev.* **120**, 353 [§ 6].
- Сул (1956) (H. Suhl), *J. Phys. Rev.* **101**, 1437 [§ 1].
- Сул (1957) (H. Suhl), *J. Phys. Chem. Sol.* **1**, 209 [§ 1].
- Танака, Кондо (1972), (M. Tanaka, Y. Kondo), *Progr. Theor. Phys.* **48**, 1815 [§ 42].
- Тавгер Б. А., Зайцев В. М. (1956), *ЖЭТФ* **30**, 564 [§ 7].
- Тахир-Кели (1963) (R. A. Tahir-Kheli), *Phys. Rev.* **132**, 689 [§ 42].
- Тахир-Кели, Джаррет (1964) (R. A. Tahir-Kheli, H. S. Jarrett), *Phys. Rev.* **135**, A1096 [§ 42].
- Тахир-Кели, Доман, тер Хаар (1963) (R. A. Tahir-Kheli, B. Doman, D. ter Haar), *Phys. Lett.* **4**, 5 [§ 42].
- Тахир-Кели, Келлен (1964) (R. A. Tahir-Kheli, H. B. Callen), *Phys. Rev.* **135**, A679 [§ 42].
- Тахир-Кели, тер Хаар (1962a) (R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar), *Phys. Rev.* **127**, 88 [§§ 35, 42].
- Тахир-Кели, тер Хаар (1962b) (R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar), *Phys. Rev.* **127**, 95 [§ 37].
- Тахир-Кели, тер Хаар (1963) (R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar), *Phys. Rev.* **130**, 108 [§ 1, 42].
- Тер Хаар, Лайнс (1962) (D. ter Haar, M. E. Lines), *Phil. Trans.* **A255**, 1 [§ 19].
- Тер Хаар и Перри (1962) (D. ter Haar, W. E. Parry), *Phys. Lett.* **1**, 145 [§ 26].
- Тессман (1952) (J. R. Tessman), *Phys. Rev.* **88**, 1132 [§ 19].
- Томита, Танака (1963a) (K. Tomita, M. Tanaka), *Progr. Theor. Phys.* **29**, 528 [§ 42].

Томи́та, Та́нака (19636) (К. Tomita, M. Tanaka), Progr. Theor. Phys. 29, 651 [§ 42].

Томпсон (1963) (E. D. Thompson), Ann. Phys. 22, 309 [§ 1].

Томпсон (1965) (E. D. Thompson), Adv. Phys. 14, 213 [§ 1].

Туров Е. А. (1953), ЖЭТФ 25, 352 [§ 1].

Туров Е. А. (1954), ДАН СССР 98, 945 [§ 1].

Туров Е. А. (1955а), Изв. АН СССР, серия физич. 19, 462 [§ 1].

Туров Е. А. (1955б), Изв. АН СССР, серия физич. 19, 474 [§ 1].

Туров Е. А. (1957), ФММ 4, 183 [§ 1].

Туров Е. А. (1958), ФММ 6, 203 [§ 1].

Туров Е. А. (1963), Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов, Изд-во АН СССР, М. [§§ 1, 2, 7].

Туров Е. А., Вонсовский С. В. (1953), ЖЭТФ 24, 501 [§ 1].

Туров Е. А., Ирхин Ю. П. (1958), Изв. АН СССР, серия физич. 22, 1168 [§§ 17, 19].

Туров Е. А., Шавров В. Г. (1958), Тр. Ин-та физики металлов, вып. 20, 101, Свердловск [§ 1].

Туров Е. А., Фарзтдинов М. М. (1970), ФММ 29, 458 [§ 1].

Тябликов С. В. (1947), Канд. диссертация, физфак МГУ [§ 13].

Тябликов С. В. (1950), ЖЭТФ 20, 661 [§ 19].

Тябликов С. В. (1956а), ФММ 2, 193 [§§ 16, 17].

Тябликов С. В. (1956б), ФММ 3, 3 [§ 19].

Тябликов С. В. (1959а), ФММ 8, 152 [§ 19].

Тябликов С. В. (1959б), УМЖ 11, 287 [§§ 32, 33].

Тябликов С. В. (1960а), ФТТ 2, 361 [§§ 38, 39].

Тябликов С. В. (1960б), ФТТ 2, 2009 [§ 38].

Тябликов С. В. (1963а), ДАН СССР 149, 573 [§ 37].

Тябликов С. В. (1963б), ФММ 15, 641 [§ 37].

Тябликов С. В. (1963в), ФММ 15, 801 [§ 37].

Тябликов С. В. (1963г), ФММ 16, 321 [§ 35].

Тябликов С. В. (1964), ФММ 17, 283 [§ 37].

Тябликов С. В., Аматауни А. Ц. (1956), ДАН СССР 108, 69 [§ 19].

Тябликов С. В., Бонч-Бруевич В. Л. (1962), Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина, рота-принт МИАН СССР, Т-7 [§ 29].

Тябликов С. В., Гусев А. А. (1956), ФММ 2, 385 [§ 19].

Тябликов С. В., Москаленко В. А. (1964), ДАН СССР 158, 839 [§ 10].

Тябликов С. В., Пу Фу-чо (1961), ФТТ 3, 142 [§§ 25, 31].

Тябликов С. В., Шиклош Т. (1959), Acta Phys. Hung. 10, 259 [§ 19].

Тябликов С. В., Сорокина Е. М., ФММ 24, 200 (1967).

Тябликов С. В., Яковлев Е. Н. (1962), ДАН СССР 144, 303 [§ 37].

Тябликов С. В., Яковлев Е. Н. (1963), ФТТ 5, 137 [§ 37].

Тябликов С. В., Федянин В. К. (1971), ФММ 23, № 2 [§ 42].

Уоллес (1962) (D. C. Wallace), Phys. Rev. 128, 1614 [§ 15].

Уортис (1963) (M. Wortis), D. P. thesis, Harvard university, Cambridge, Massachusetts [§§ 34, 37].

Флэкс (1972) (L. Flax), Phys. Rev. B5, 977 [§ 33].

Фок В. А. (1930), Zs. für Phys. 61, 126 [§§ 12, 20].

- Фок В. А. (1932), *Zs. für Phys.* **75**, 622 [§ 3].
- Фок В. А. (1957), Работы по квантовой теории поля, изд. ЛГУ [§ 3].
- Френкель Я. И. (1928), *Zs. für Phys.* **49**, 31 [§§ 1, 6].
- Фримен, Ватсон (1961) (A. J. Freeman, R. E. Watson), *Phys. Rev.* **124**, 1439 [§ 6].
- Фримен, Несбит, Ватсон (1962) (A. J. Freeman, R. K. Nesbet, R. E. Watson), *Phys. Rev.* **125**, 1978 [§ 6].
- Фукучи (1961a) (M. Fukuchi), *Progr. Theor. Phys.* **25**, 939 [§ 1].
- Фукучи (1961b) (M. Fukuchi), *Progr. Theor. Phys.* **25**, 956 [§ 1].
- Хаас (1963) (C. W. Haas), *Phys. Rev.* **132**, 228 [§ 42].
- Хаас, Джаррет (1964) (C. W. Haas, H. S. Jarret), *Phys. Rev.* **135**, A1089 [§ 42].
- Хазерли, Хиракава, Лауде, Маллет, Стрингфеллоу (1963) (M. Hatherly, K. Hirakawa, R. D. Lowde, J. F. Mallet, M. W. Stringfellow), Тезисы докладов на симп. по ферромагн. и сегнетоэлектр., Ленинград, май 30 — июнь 5 1963 г., Изд-во АН СССР [§ 36].
- Хачатурян А. Г. (1963), *ФТТ* **5**, 2178 [§ 42].
- Хачатурян А. Г. (1974), Теория фазовых превращений и структура твердых растворов, «Наука», 1974.
- Херпин (1962) (A. Herpin), *J. Phys. et Radium* **23**, 453 [§ 1].
- Херринг, Киттель (1951) (C. Herring, Ch. Kittel), *Phys. Rev.* **81**, 869 [§ 1].
- Херринг (1952a) (C. Herring), *Phys. Rev.* **85**, 1003 [§ 1].
- Херринг (1952b) (C. Herring), *Phys. Rev.* **87**, 60 [§ 1].
- Хилл (1960) (T. L. Hill), Статистическая механика, ИЛ, М. [§ 8].
- Хультен (1936) (L. Hulthén), *Proc. Roy. Acad. Sci. Amsterdam* **39**, 190 [§§ 12, 16, 17].
- Хусими (1940) (K. Husimi), *Proc. Phys. Math. Soc. Japan* **22**, 264 [§ 9].
- Хьюсон, тер Хаар (1963a) (A. C. Hewson, D. ter Haar), препринт № 121/63, Clarendon Lab., Oxford [§§ 35, 42].
- Хьюсон, тер Хаар (1963b) (A. C. Hewson, D. ter Haar), препринт, Clarendon Lab., Oxford [§ 42].
- Хьюсон, тер Хаар (1963в) (A. C. Hewson, D. ter Haar), *Phys. Lett.* **6**, 136 [§ 37].
- Церковников Ю. А. (1962), *ДАН СССР* **143**, 832 [§ 29].
- Чарап, Бойд (1964) (S. H. Charap, E. L. Boyd), *Phys. Rev.* **133**, A811 [§ 15].
- Челен (1952) (G. H. Källen), *Helv. Phys. Acta* **25**, 417 [§ 26].
- Чен, Джозеф (H. H. Chen, R. K. Joseph) (1972), *J. Math. Phys.* **13**, 725 [§ 24].
- Червонко Е. (1963), ротапринт ОИЯИ, Р-1215, Дубна [§ 42].
- Шаницкий (1962) (J. Szaniecki), *Acta Phys. Polon.* **21**, 481 [§ 37].
- Шафрот (1954) (M. R. Schafroth), *Proc. Phys. Soc.* **A67**, 33 [§ 32].
- Шиклош (1957) (T. Siklos), *Acta Phys. Hung.* **7**, 141 [§ 19].
- Шимицу (1952) (M. Shimizu), *Progr. Theor. Phys.* **8**, 416 [§ 1].
- Шимицу (1960) (M. Shimizu), *J. Phys. Soc. Japan* **15**, 376 [§ 1].
- Шлёман, Грин, Милано (1960) (E. Schlömann, J. J. Green, U. Milano), *J. Appl. Phys.* **31**, 3865 [§ 1].
- Эбина (1967) (Y. Ebina), *Phys. Rev.* **153**, 561 [§ 42].

- Эллиотт (1961) (J. Elliott), Phys. Rev. 124, 346 [§ 1].
 Эллиотт (1962) (J. Elliott), J. Phys. Soc. Japan 17, Suppl. B1, 1 [§ 1].
 Энглерт (1960) (F. Englert), Phys. Rev. Lett. 5, 102 [§ 32].
 Яблонский Д. А. (1972), ФТТ 14, 2849 [§ 42].
 Яковлев Е. Н. (1957), ДАН СССР 115, 699 [§ 19].
 Яковлев Е. Н. (1958), ФММ 6, 976 [§ 19].
 Ямашита (1954) (J. Yamashita), J. Phys. Soc. Japan. 9, 339 [§ 1].
 Яфет, Киттель (1952) (Y. Yafet, Ch. Kittel), Phys. Rev. 87, 290 [§§ 19, 23].

ЛИТЕРАТУРА К ДОПОЛНЕНИЮ

1. Е. А. Туров, Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов, Изд-во АН СССР, М., 1963.
2. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, Спиновые волны, «Наука», М., 1967.
3. F. Keffer, Spin Waves, in Handbuch der Physik, Bd. 18/2, ed. by S. Flügge, Springer, Berlin, 1966.
4. С. В. Вонсовский, Магнетизм, «Наука», М., 1971.
5. C. Kittel, H. Shore, Phys. Rev. 138, A1165 (1965); J. F. Cooke, Phys. Rev. 141, 390 (1966).
6. C. Bloch, J. Langer, J. Math. Phys. 6, 554 (1965); К. Блох, в сб. «Проблема многих тел и физика плазмы», «Наука», М., 1967.
7. М. Фишер, Природа критического состояния, «Мир», М., 1968.
8. Г. Стенли, Фазовые переходы и критические явления, «Мир», М., 1973.
9. Ю. Г. Рудой, ДАН СССР, 174, 316 (1967); ТМФ, 2, 129 (1970).
10. Th. Nijmeijer, Physica 48, 467 (1970); G. Scharf, Phys. Lett. 38A, 123 (1972); J. Silver, J. Frankel, B. W. Ninnham, J. Math. Phys. 13, 468 (1972).
11. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ 51, 361 (1966); 53, 281, 1089 (1967).
12. В. Г. Вакс, Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, «Наука», М., 1974.
13. Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-Оглы, Ю. Н. Скрыбин, Полевые методы в теории ферромагнетизма, «Наука», М., 1974.
14. R. Brout, Phys. Rev. 118, 1009 (1960); 122, 469 (1961); Р. Браут, Фазовые переходы, «Мир», М., 1967.
15. J. M. Luttinger, J. C. Ward, Phys. Rev. 118, 1417 (1960).
16. G. Horwitz, H. B. Callen, Phys. Rev. 124, 1757 (1962); F. Englert, Phys. Rev. 129, 567 (1963); R. B. Stinchcombe, G. Horwitz, F. Englert, R. Brout, Phys. Rev. 130, 155 (1963).
17. В. Я. Кривнов, О. А. Ольхов, Б. Н. Провоторов, М. Е. Сарычев, Phys. Lett. 29A, 144, 196 (1969); ТМФ 2, 244 (1970).
18. О. А. Ольхов, Б. Н. Провоторов, А. И. Рез, ТМФ 13, 266 (1972).

19. A. J. Siegert, *Physica* **26**, Suppl., 30 (1960); Brandeis Univ. Summer Lect., vol. 3, 1962; W. A. Benjamin, N. Y., 1963; M. Kac, E. Helfand, *J. Math. Phys.* **4**, 1078 (1963); *Phys. Rev.*, **160**, 437, 1963; E. Helfand, in «The equilibrium theory of classical Fluids», W. A. Benjamin, N. Y. 1964; *Ann. Rev. Phys. Chem.* **14**, 117 (1963); C. J. Thompson, *J. Phys. Chem. Sol.* **26**, 1977 (1965).
20. Л. Я. Кобелев, в сб. «Проблема многих тел и физика плазмы», «Наука», М., 1967; *ФММ* **24**, 395, 401 (1967); *ДАН СССР* **180**, 576 (1968).
21. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрыбин, *ТМФ* **5**, 111 (1970); Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-Оглы, *ФММ* **30**, 225, (1970).
22. Устойчивость и фазовые переходы (лекции Ф. Дайсона, Э. Монролла, М. Каца и М. Фишера) М., «Мир», 1973.
23. И. В. Стасюк, *ФММ* **31**, 699 (1971); Ю. А. Церковников, *ТМФ* **11**, 385 (1972).
24. C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962); *J. Math. Phys.* **4**, 418 (1963); S. P. Heims, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 50 (1964).
25. С. В. Тябликов, Т. Шиклош, *Acta Phys. Hung.* **10**, 259 (1959); **12**, 35 (1960); Г. Конвент, Т. Шиклош, *Acta Phys. Pol.* **35**, 381 (1969); Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, *ТМФ* **25**, 312 (1975).
26. И. В. Стасюк, Р. Р. Левицкий, *УФЖ*, **14**, 1100 (1969); Д. А. Яблонский, *ФТТ* **14**, 2849 (1972).
27. A. Pawlikowski, *Acta Phys. Pol.* **27**, 3 (1965); В. Рыбарска, *ФТТ* **7**, 1436 (1965).
28. C. N. Yang, C. P. Yang, *Phys. Rev.* **147**, 303 (1966).
29. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **83**, 1260 (1951); **86**, 694 (1952) (перевод см. сб. «Антиферромагнетизм», ИЛ, М., 1956).
30. H. L. Davis, *Phys. Rev.* **120**, 789 (1960); H. Falk, *Phys. Rev.* **133**, A1382 (1964); D. L. Bullock, *Phys. Rev.* **137**, A1877 (1965).
31. А. С. Боровик-Романов, Антиферромагнетизм, в сб. «Итоги науки», вып. 4, Изд-во АН СССР, 1962.
32. Л. А. Люстерник, В. И. Соболев, Элементы функционального анализа, «Наука», М., 1965.
33. В. Г. Барьяхтар, В. А. Попов, *ФТТ* **10**, 773 (1968); В. Н. Кашеев, *Изв. АН ЛаССР, сер. физ.-тех. наук* **1**, 26 (1969).
34. F. B. Anderson, H. B. Callen, *Phys. Rev.* **136**, A1068 (1964).
35. V. A. Schmidt, S. A. Friedberg, *J. Appl. Phys.* **38**, 5319 (1967); J. H. Schelleng, S. A. Friedberg, *Phys. Rev.* **185**, 728 (1969); Y. Shapira, *Phys. Rev.* **187**, 734 (1969).
36. T. Holstein, H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940); T. Oguchi, *Phys. Rev.* **117**, 117 (1960); *Progr. Theor. Phys.* **25**, 721 (1961); *J. Appl. Phys.* **34**, 1153 (1963).
37. P. D. Loly, *Ann. Phys.* **56**, 40 (1970); *Phys. Rev.* **B1**, 320 (1970); P. D. Loly, S. Doniach, *Phys. Rev.* **144**, 319 (1966).
38. E. Helfand, *Phys. Rev.* **183**, 562 (1969); K. Millard H. S. Leff, *J. Math. Phys.* **12**, 1000 (1971).

39. Y. T. Chang, G. C. Summerfield, Phys. Rev. **B4**, 4023 (1971); M. E. Harrigan, G. L. Jones, Phys. Rev. **B7**, 4897 (1973).
40. Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ **25**, 548 (1953); ДАН СССР **95**, 757 (1954); Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, ЖЭТФ **28**, 129 (1955); Ю. А. Церковников, ДАН СССР **159**, 1023 (1964).
41. Д. Бом, Общая теория коллективных переменных, «Мир», М., 1964.
42. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, Теория квантовых жидкостей, «Мир», М., 1967.
43. И. Р. Юхновский, Метод смещений и коллективных переменных, Препринт ИТФ АН УССР, Киев, 1971.
44. J. Als-Nielsen, O. W. Dietrich, W. Marshall, P. A. Lindgard, Solid State Comm. **5**, 607 (1967).
45. M. S. S. Brooks, Phys. Rev. **B1**, 2257 (1970); D. A. Goodings, B. W. Southern, Can. J. Phys. **49**, 1137 (1971).
46. T. Matsubara, H. Matsuda, Progr. Theor. Phys. **16**, 569 (1956); **17**, 19 (1957).
47. R. T. Whitlock, P. R. Zilsel, Phys. Rev., **131**, 2409 (1963); P. R. Zilsel, Phys. Rev. Lett. **15**, 476 (1965); D. D. Betts, M. H. Lee, Phys. Rev. Lett. **20**, 1507 (1968).
48. P. W. Anderson, Phys. Rev. **112**, 900 (1958) (перевод см. в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, М., 1960).
49. H. Stern, Phys. Rev. **147**, 94 (1966) (перевод см. в дополнении к книге Н. Гугенгольца, Квантовая теория систем многих тел, ИЛ, М., 1967).
50. H. Wagner, Z. Phys. **195**, 273 (1966).
51. Н. Н. Боголюбов (мл.), Метод исследования модельных гамильтонианов, «Наука», М., 1974.
52. С. В. Тябликов, ДАН СССР **149**, 573 (1963); ФММ **15**, 641, 801 (1963).
53. J. Goldstone, Nuovo Cimento, **19**, 154 (1961).
54. Н. Н. Боголюбов, Квазисредние в задачах статистической механики, Препринт ОИЯИ, Д-781 (1961) Дубна. (см. также «Избр. труды», т. 3, «Наукова думка», Киев, 1971, и сб. «Статистическая физика и квантовая теория поля», «Наука», 1973).
55. R. V. Lange, Phys. Rev. **146**, 301 (1966); **156**, 630 (1967); J. A. Swieca, Comm. Math. Phys. **4**, 1 (1967); T. Schneider, P. E. Meijer, Physica **67**, 521 (1973).
56. А. А. Гриб, Е. В. Дамаскинский, В. М. Максимов, УФН **102**, 587 (1970). Б. И. Садовников, В. К. Федянин, ТМФ, **16**, 368 (1973).
57. H. Reeh, Fortschr. der Physik **16**, 687 (1968); D. Ruelle, Ann. Phys. **69**, 364 (1972).
58. R. L. Mills, Phys. Res. Lett. **18**, 1189 (1967); J. F. Cooke, Phys. Rev. Lett. **24**, 394 (1970); E. Praveczi, Phys. Stat. Sol. **45**, K61 (1971).
59. Д. Н. Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», М., 1971 (см. также УФН **71**, 71 (1960)).
60. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958); Y. Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).

61. С. Т. Беляев, ЖЭТФ **34**, 417, 433 (1958); Ю. А. Церковников, ДАН СССР **143**, 832 (1962).
62. B. Johansson, *Physica* **32**, 2164 (1966); B. Johansson R. Mattuck, *Adv. Phys.* **17**, 509 (1968); R. Mattuck A. Theumann, *Adv. Phys.* **20**, 721 (1971).
63. Ю. А. Церковников, ТМФ **7**, 250 (1971).
64. W. Brenig, *Z. Phys.* **206**, 212 (1967); R. M. Wilcox, *Phys. Rev.*, **174**, 624 (1968).
65. H. Falk, *Phys. Rev.* **165**, 602 (1968); H. Falk, L. W. Bruch, *Phys. Rev.* **180**, 442 (1969).
66. M. Suzuki, *Physica* **51**, 277 (1971); В. П. Калашников, Препринт ОИЯИ, Р4-7005, Дубна, 1974.
67. K. W. H. Stevens, G. A. Toombs, *Proc. Phys. Soc.* **85**, 1307 (1965); J. F. Fernandez, H. A. Gersch, *Proc. Phys. Soc.* **91**, 505 (1967).
68. H. B. Callen, R. H. Swendsen, R. A. Tahir-Kheli, *Phys. Lett.* **25A**, 505 (1967).
69. G. L. Lucas, G. Horwitz, *J. Phys.* **A2**, 503 (1969); P. C. Kwok, T. D. Schultz, *J. Phys.* **C2**, 1196 (1969).
70. J. G. Ramos, A. A. Gomes, *Nuovo Cimento*, **3A**, 441 (1971); P. E. Bloomfield, N. Nafari, *Phys. Rev.* **A5**, 806 (1972).
71. Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, ТМФ **14**, 102 (1973).
72. Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, ТМФ **15**, 388 (1973).
73. Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, ТМФ **19**, 252 (1974).
74. Н. М. Плакида, ТМФ **5**, 147 (1970); **12**, 135 (1972); см. также обзор в книге «Статистическая физика и квантовая теория поля», «Наука», 1973.
75. M. W. C. Dharmawardana, C. Mavroyannis, *Phys. Rev.* **B1**, 1166 (1970); M. Ichiyanaagi, *J. Phys. Soc. Jap.* **32**, 604 (1972).
76. B. G. S. Doman, D. ter Haar, *Phys. Lett.* **2**, 15 (1962); **4**, 5 (1963); R. L. Bell, *Phys. Rev.* **143**, 215 (1966); T. Oguchi, I. Ono, *Progr. Theor. Phys.* **35**, 998 (1966); R. A. Tahir-Kheli, *Progr. Theor. Phys.* **40**, 1312 (1968); K. C. Lee, R. Barrie, *Can. J. Phys.* **47**, 769 (1969).
77. С. В. Тябликов, В. К. Федянин, ФММ **23**, 193, 999 (1967). **26**, 589 (1968). С. И. Кубарев, О. А. Пономарев, ФММ **25**, 977 (1968); В. К. Федянин, обзор в сб. «Статистическая физика и квантовая теория поля», «Наука», 1973.
78. О. К. Калашников, Е. С. Фрадкин, ЖЭТФ **55**, 607, 1845 (1968); S. Trimper, *Phys. Stat. Sol. (b)* **54**, K87 (1972).
79. А. Р. Кессель, ФТТ **5**, 1055 (1963); М. П. Желифонов, А. Р. Кессель, ФТТ **11**, 965 (1965); М. П. Желифонов, ТМФ **8**, 401 (1971).
80. T. Morita, T. Tanaka, *Phys. Rev.* **137**, A648 (1965); **138**, A1395 (1965).
81. J. D. Patterson, W. H. Southwell, *Amer. J. Phys.* **36**, 343 (1968); G. Lucas, *Amer. J. Phys.* **36**, 942 (1968); L. K. Kuiper, J. J. Adels, *Amer. J. Phys.* **39**, 253 (1971).
82. J. G. Ramos, A. A. Gomes, *Nuovo Cimento*, **3A**, 441 (1971); I. P. Fittipaldi, M. D. Coutinho, J. G. Ramos, *Nuovo Cimento*, **11B**, 23 (1972).

83. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, ДАН СССР, **126**, 53 (1959); С. В. Тябликов, УМЖ **11**, 287 (1959).
84. T. Oguchi, A. Honma, J. Appl. Phys. **34**, 1153 (1963).
85. R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **132**, 689 (1963); Phys. Lett. **11**, 275 (1964).
86. H. B. Callen, Phys. Rev. **130**, 890 (1963).
87. J. A. Copeland, H. A. Gersch, Phys. Rev. **143**, 236 (1965).
88. R. H. Swendsen, Phys. Rev. **B5**, 116 (1972).
89. S. T. Dembinski, Can. J. Phys. **46**, 1021, 1502 (1968).
90. K. Moorjani, T. Tanaka, Phys. Lett. **28A**, 645; **29A**, 188 (1969).
91. S. Katsura, T. Horiguchi, J. Phys. Soc. Japan. **25**, 60 (1968); **26S**, 112 (1969); Phys. Lett. **28A**, 342 (1968).
92. V. Mubayi, R. V. Lange, Phys. Rev. **178**, 882 (1969); V. Mubayi, Progr. Theor. Phys. **46**, 1940 (1971).
93. R. P. Kepan, Phys. Rev. **B1**, 3205 (1970).
94. R. A. Tahir-Kheli, H. S. Jarrett, Phys. Rev. **180**, 544 (1969); R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. **B1**, 3163 (1970).
95. M. E. Lines, Phys. Rev. **B3**, 1749 (1971); Inter. J. Mag. **2**, 347 (1971).
96. T. Morita, T. Horiguchi, S. Katsura, J. Phys. Soc. Japan. **29**, 84 (1970).
97. T. Shimizu, J. Phys. Soc. Japan. **28**, 811, 827 (1970); **30**, 1282 (1971).
98. S. B. Haley, P. Erdős, Phys. Rev. **B5**, 1106 (1972).
99. C. W. Haas, H. S. Jarrett, Phys. Rev. **135**, A1089 (1964).
100. В. Н. Кашеев, Термодинамика ферромагнетика вблизи точки Кюри, «Зинатне», Рига, 1966.
101. S. H. Liu, Phys. Rev. **139**, A1522 (1965); S. H. Liu, D. B. Siano, Phys. Rev. **164**, 697 (1967).
102. Ю. Г. Рудой, обзор в книге «Статистическая физика и квантовая теория поля», «Наука», 1973.
103. F. Leoni, Riv. del Nuovo Cimento, **3**, 21 (1973).
104. M. D. Coutinho Filho, I. P. Fittipaldi, Phys. Rev. **B7**, 4941 (1973); J. G. Ramos, A. A. Gomes, Can. J. Phys. **49**, 932 (1971); V. Balakrishnan, Phys. Rev. **B11**, 256 (1975).
105. F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956) (перевод см. в сб. «Проблемы соврем. физики», **2**, 101 (1958)).
106. С. В. Малеев, ЖЭТФ **33**, 1010 (1957).
107. L. M. Roth, J. Appl. Phys. **38**, 1063 (1967). E. Praveczi, Phys. Stat. Sol. **5**, 481 (1964); **28**, K105 (1968) **35**, 63 (1969).
108. J. F. Cooke, H. Hahn, Phys. Rev. **184**, 509 (1969); **B1**, 1243 (1970); J. F. Cooke, Phys. Rev. **B2**, 220 (1970).
109. J. I. Davis, Ann. Phys. (N. Y.) **58**, 529 (1970).
110. K. H. Douglass, Ann. Phys. (N. Y.) **62**, 383 (1971); **64**, 398 (1971).
111. M. W. C. Dharmawardana, Can. J. Phys. **49**, 432 (1971).
112. C. J. Liu, Y. Chow, J. Math. Phys. **12**, 2144 (1971); C. J. Liu, J. Math. Phys. **13**, 248 (1972); S. L. Trubatch, J. Math. Phys. **13**, 1869 (1972).
113. L. Roth, Phys. Rev. Lett. **20**, 1431 (1968); Phys. Rev. **184**, 451 (1969).

114. R. H. Young, *Phys. Rev.* **184**, 601 (1969).
115. D. C. Wallace, *Phys. Rev.* **152**, 247, 261 (1966).
116. K. Sawada, *Progr. Theor. Phys.* **43**, 1199 (1970).
117. A. Oguchi, *Progr. Theor. Phys.* **44**, 1548 (1970); **46**, 63 (1971).
118. Ю. А. Церковников, *ДАН СССР* **143**, 832 (1962).
119. Н. Н. Боголюбов, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **11**, 67 (1947) (см. также Н. Н. Боголюбов, *Избр. труды*, т. 2, «Наукова думка», Киев, 1971).
120. T. Oguchi, *J. Phys. Soc. Japan.* **30**, 988 (1971).
121. F. Bloch, *Z. Phys.* **61**, 206 (1930).
122. L. Hulthén, *Proc. Roy. Soc. Acad. Sci. Amsterdam* **39**, 19 (1936).
123. J. S. Semura, D. L. Huber, *J. Appl. Phys.* **42**, 1415 (1971); *Phys. Rev.* **B7**, 2154 (1973).
124. E. H. Lieb, T. D. Schultz, D. C. Mattis, *Ann. Phys. (N. Y.)* **16**, 407 (1961).
125. B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **188**, 898 (1969).
126. H. Mori, K. Kawasaki, *Progr. Theor. Phys.* **27**, 529 (1962).
127. M. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 286 (1962); *J. Appl. Phys.* **34**, 1151 (1963).
128. K. Tani, *Progr. Theor. Phys.* **31**, 335 (1964).
129. F. Keffer, R. Loudon, *J. Appl. Phys.* **32S**, 2 (1962) (перевод см. в сб. «Проблемы современной физики» ИЛ, 1956).
130. J. F. Cooke, *Phys. Rev.* **B2**, 220 (1970); P. D. Loly, *J. Phys.* **C1**, 1365 (1971).
131. R. Brout, F. Englert, *Bull. Amer. Phys. Soc.* **5**, 118 (1960); F. Englert, *Phys. Rev. Lett.* **5**, 102 (1960).
132. В. Л. Гинзбург, В. М. Файн, *ЖЭТФ* **39**, 1323 (1960).
133. С. В. Тябликов, Т. Шиклош, *Acta Phys. Hung.* **12**, 35 (1960); Г. Конвент, Т. Шиклош, *Препринт ОИЯИ Р4-3671* (1968); *Acta Phys. Pol.* **35**, 381 (1969).
134. N. W. Dalton, D. W. Wood, *Proc. Phys. Soc.* **A90**, 459 (1967); L. Flax, J. Raich, *Phys. Rev.* **185**, 797 (1969).
135. D. A. Krueger, D. L. Huber, *Phys. Rev.* **B1**, 3152 (1970).
136. L. Flax, *Phys. Rev.* **B5**, 977 (1972).
137. J. O. Lawson, S. J. Brient, *Phys. Lett.* **40A**, 197 (1972); *Nuovo Cimento* **15B**, 18, 25 (1973).
138. L. Walker, *Phys. Rev.* **105**, 310 (1957); *Magnetism* (ed. by H. Suhl, T. Rado), **1**, 299 Acad. Press, N. Y., 1963; M. Sparks, *Ferromagnetic relaxation theory*, McGraw Hill, N. Y., 1964.
139. Н. А. Потапов, *ФТТ* **4**, 1803 (1962); *Изв. АН СССР, сер. физ.* **28**, 495 (1964).
140. E. Schlömann, *Phys. Rev.* **121**, 1312 (1961); В. И. Лымарь, Ю. Г. Рудой, *ТМФ* **11**, 102 (1972).
141. G. N. Watson, *Quart. J. Math.* **10**, 266 (1939).
142. D. D. Betts, C. J. Elliott, M. H. Lee, *Can. J. Phys.* **48**, 1566 (1970).
143. P. Heller, *Rep. Progr. Phys.* **30**, 731 (1967).
144. I. Ortenburger, *Phys. Rev.* **136**, A1374 (1963).
145. T. Schneider, G. Srinivasan, C. P. Enz, *Phys. Rev.* **A5**, 1528 (1972); T. Schneider, P. E. Meijer, *Physica* **67**, 521 (1973).

146. V. Mubayi, *Lett. Nuovo Cimento* **3**, 824 (1970).
147. T. Kuramoto, *Progr. Theor. Phys.* **41**, 845 (1969).
148. N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
149. H. Stanley, T. A. Kaplan, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 913 (1966); *J. Appl. Phys.* **48**, 975 (1967).
150. A. C. Hewson, D. ter Haar, *Phys. Lett.* **6**, 136 (1963); *Physica* **30**, 890 (1964).
151. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan.* **12**, 570 (1960); R. Zwanzig, *J. Chem. Phys.* **33**, 1338 (1960).
152. U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957); R. Zwanzig, *Physica* **30**, 1109 (1964).
153. С. В. Тябликов, Е. М. Сорокина, *ФММ* **24**, 200 (1967).
154. E. Balcar, *J. Phys.* **C2**, 1174 (1969).
155. W. Marshall, G. Murray, *J. Appl. Phys.* **39**, 380 (1968); *J. Phys.* **C2**, 539 (1969).
156. J. F. Cooke, H. A. Gersch, *Phys. Rev.* **153**, 641 (1967).
157. A. B. Harris, *Phys. Rev.* **175**, 674 (1968).
158. J. S. Wang, *Phys. Rev.* **B6**, 1908 (1972).
159. R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar, *Phys. Rev.* **127**, 95 (1962).
160. С. В. Тябликов, Е. Н. Яковлев, *ФТТ* **5**, 137 (1963).
161. В. Н. Кашеев, М. А. Кривоглаз, *ФТТ* **3**, 1541 (1961).
162. В. Г. Баряхтар, В. П. Краснов, В. Л. Соболев, *ФТТ* **15**, 3039 (1973).
163. F. Leoni, C. R. Natoli, *J. Phys.* **C3**, 1462 (1970).
164. M. Wortis, *Phys. Rev.* **132**, 85 (1963); N. Fukuda, M. Wortis, *J. Phys. Chem. Sol.* **24**, 1675 (1963); J. Hanus, *Phys. Rev. Lett.* **11**, 336 (1963).
165. S. L. Adler, *Phys. Rev.* **137B**, 1022; **139B**, 1638 (1965); Д. В. Волков, *ЭЧАЯ* **4**, 3 (1973).
166. R. Silbergliitt, A. B. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 30 (1967); *Phys. Rev.* **174**, 640 (1968); A. W. Saenz, W. W. Zachary, *J. Math. Phys.* **14**, 1837 (1973), S. T. Chin-Tsao, *Phys. Rev.* **B4**, 3098 (1971).
167. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, 1962; Л. Каданов, Г. Бейм, *Квантовая статистическая механика*, «Мир», М., 1964.
168. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, «Мир», М., 1969.
169. T. Morita, T. Tanaka, *Phys. Rev.* **137**, A648; A1395 (1965); **138**, A1403 (1965).
170. T. Morita, T. Tanaka, *Phys. Rev.* **138**, A1088 (1965); *J. Math. Phys.* **6**, 1152 (1965).
171. M. Wortis, *Phys. Rev.* **138**, 1126 (1965).
172. D. C. Wallace, *Phys. Rev.* **153**, 547 (1967).
173. J. Szaniecki, *Phys. Stat. Sol.* **2**, 1354, 1364 (1962); *Acta Phys. Pol.* **A38**, 33 (1970); *Rev. Roum. Phys.* **18**, 711 (1973).
174. S. Szczeniowski, J. Morkowski, J. Szaniecki, *Phys. Stat. Sol.* **3**, 537 (1963); S. T. Dembinski, *Physica* **30**, 1217 (1964).
175. R. E. Mills, R. P. Kenan, *Ann. Phys. (N. Y.)* **37**, 104 (1966).

176. Д. Маттис, Теория магнетизма, гл. 3, «Мир», М., 1967; Quantum Angular Momentum, ed. by L. C. Biedenharn, Acad. Press, 1965. P. A. Lindgård a. O. Danielsen, J. Phys. C7, 1523 (1974).
177. М. Хамермеш, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, «Мир», М., 1966, гл. 8, 9; Д. П. Желобенко, Лекции по теории групп Ли, ОИЯИ, Дубна, 1965; С. Р. Енз, Helv. Phys. Acta 39, 463 (1966).
178. J. Lam, C. Mavrouannis, Physica 71, 325 (1974).
179. К. Надь, Пространства состояний с индефинитной метрикой в квантовой теории поля, «Мир», 1969.
180. J. Van Kranendonk, Physica 21, 81, 749, 925 (1955); T. Morita, Progr. Theor. Phys. 20, 614, 728 (1958); N. I. Greenberg, J. Math. Phys. 4, 405 (1963).
181. В. В. Михайлов, Phys. Lett. 34A, 343 (1971); УФЖ. 17, 975 (1972); ТМФ 15, 367 (1973), 18, 342 (1974).
182. В. М. Агранович, Теория экситонов, «Наука», М., 1968.
183. R. B. Zakula, D. I. Lalovic, Phys. Stat. Sol. 40, 235 (1970); R. Djordjevic, S. D. Stojanovic, R. B. Zakula, J. Low Temp. Phys. 6, 287 (1972); Л. М. Носкова, ФММ 35, 254 (1973).
184. Когерентные состояния в квантовой теории (сб. статей), «Мир», М., 1972.
185. К. Нерп, Phys. Rev. B5, 95 (1972).
186. D. W. Robinson, Comm. Math. Phys. 6, 151 (1967); R. F. Streater, Comm. Math. Phys. 6, 233 (1967); D. A. Dubin, Nuovo Cimento, B53, 182 (1968); J. Ginibre, C. Gruber, Comm. Math. Phys. 11, 198 (1969).
187. A. K. Benson, Phys. Rev. B7, 4158 (1973); A. K. Benson, D. M. Hatch, Phys. Rev. B8, 4410 (1973).
188. N. M. Hugenholtz, in «Fundamental problems in statistical mechanics», ed. by E. G. D. Cohen, Amsterdam, NHPC, 1968; E. J. Verboven, in «The many-body problem» ed. by A. Cruz, T. W. Preist, N. Y., Plenum Press, 1969; Д. Рюэль, Статистическая механика, «Мир», М., 1971.
189. A. A. Abrikosov, Physics 2, 5 (1965); C. P. Enz, B. Giovannini, Helv. Phys. Acta 39, 224 (1966); H. J. Spencer, Phys. Rev. 167, 430, 434 (1968); S. E. Barnes, J. Phys. C5, L178 (1972); R. Oppermann, Z. Phys. 259, 285 (1973); A. Kühnel, Phys. Stat. Sol. (b) 55, 559; 60, 625 (1973).
190. Y. L. Wang, S. Shtrikman, H. Callen, J. Appl. Phys. 37, 1451 (1966); Phys. Rev. 148, 433 (1966); R. P. Kenan, Phys. Rev. 159, 430 (1967); R. B. Stinchcombe, J. Phys. C3, 2266 (1970).
191. R. H. Кнапп, D. ter Haar, J. Stat. Phys. 1, 149 (1969) (перевод см. в сб. «Проблемы теоретической физики», «Наука», М., 1969).
192. S. A. Scales, H. A. Gersch, Phys. Rev. Lett, 28, 917 (1972); J. Stat. Phys. 7, 95 (1973).
193. K. Fujii, S. Kadowaki, I. Mannari, Progr. Theor. Phys. 50, 1474, 1501 (1973); A. Bunde, W. Biem, Z. Phys., 268, 103 (1974).

194. K. Kawasaki, *Progr. Theor. Phys.* **38**, 1052 (1967).
195. Н. А. Потанков, Н. В. Шелков, *Phys. Stat. Sol. (b)* **43**, 35 (1971).
196. H. S. Bennett, *Ann. Phys.* **39**, 127 (1966); R. A. Tahir-Kheli, *Phys. Rev.* **159**, 439 (1967); **165**, 756 (1968).
197. H. S. Bennett, P. C. Martin, *Phys. Rev.* **138**, A608 (1965); H. S. Bennett, *Phys. Rev.* **174**, 629 (1968); K. Tomita, H. Tomita, *Progr. Theor. Phys.* **45**, 1407 (1971).
198. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *ЖЭТФ* **64**, 1445 (1973); Флуктуационная теория фазовых переходов, «Наука», М., 1975.
199. J. Hubbard, *J. Appl. Phys.* **42**, 1390 (1971); *J. Phys. C* **4**, 53 (1971).
200. R. Brout, *Phys. Lett.* **24A**, 117 (1967); J. L. Beeby, J. Hubbard, *Phys. Lett.* **26A**, 376 (1968); J. Ranninger, C. R. Natoli, *Phys. Lett.* **32A**, 11 (1970); A. B. Harris, *Phys. Rev.* **B3**, 3065 (1971); T. L. Reinecke, *Phys. Rev.* **B10**, 200 (1974).
201. В. И. Лымарь, Ю. Г. Рудой, *ТМФ* **21**, 86 (1974).
202. A. Pekalski, W. J. Zietek, *Acta Phys. Pol.* **A39**, 327; **A40**, 189 (1971).
203. T. Nakamura, M. Bloch, *Phys. Rev.* **132**, 2528 (1963).
204. S. H. Liu, *Phys. Rev.* **142**, 267 (1966); C. C. Sung, *Phys. Rev.* **148**, 299 (1966).
205. J. Feder, E. Pytte, *Phys. Rev.* **168**, 640 (1968).
206. O. Nagai, *Phys. Rev.* **180**, 557 (1969); *J. Appl. Phys.* **40**, 1116 (1969); O. Nagai, T. Tanaka, *Phys. Rev.* **188**, 821 (1969).
207. В. Г. Барьяхтар, Е. В. Зарочинцев, В. А. Попов, *ФТТ* **11**, 2344 (1969).
208. Пу Фу-чо, *ФТТ* **3**, 476 (1961).
209. K. H. Lee, S. H. Liu, *Phys. Rev.* **159**, 390 (1967).
210. A. Oguchi, *Progr. Theor. Phys.* **48**, 372 (1972).
211. D. K. Ghosh, *Phys. Rev.* **B8**, 392 (1973).
212. L. Flax, J. C. Raich, *Phys. Rev.* **B2**, 1338 (1970); E. G. Wintucky, L. Flax, *Phys. Lett.* **A35**, 40 (1971).
213. S. T. Dembinski, *Can. J. Phys.* **46**, 1435, 1502 (1968).
214. Э. М. Пикалев, М. А. Савченко, И. Шойом, *ЖЭТФ* **55**, 1404 (1968); И. Шойом, *ЖЭТФ* **55**, 2355 (1968); М. А. Савченко, В. В. Тарасенко, *ФТТ* **9**, 3284 (1967); Б. П. Топерверг, *ФТТ* **14**, 1087 (1972).
215. A. B. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 602 (1968); M. G. Cottam, R. B. Stinchcombe, *J. Phys. C* **3**, 2283, 2305, 2326 (1970); D. C. Herbert, *J. Phys. C* **2**, 1606, 1614 (1969); **C3**, 891 (1970).
216. H. Falk, *Phys. Rev.* **133**, A1382 (1964).
217. В. Г. Морозов, *Phys. Stat. Sol.* **50**, 479 (1972).
218. В. Г. Барьяхтар, Е. В. Зарочинцев, В. А. Попов, *ФММ* **25**, 3 (1968).
219. A. B. Harris, D. Kumar, B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **B3**, 961 (1971).
220. В. А. Колганов, *ЖЭТФ* **63**, 345 (1972); *ФТТ* **15**, 1556 (1973).
221. В. Г. Барьяхтар, В. Л. Соболев, А. Г. Квирикадзе, *ЖЭТФ* **65**, 790 (1973); *ФТТ* **15**, 2651 (1973).

222. C. R. Natoli, J. Ranninger, J. Phys. C6, 323, 386 (1973).
223. J. Szaniecki, Physica 45, 520 (1970); E. A. G. Armourt, Physica 53, 304 (1971).
224. R. P. Кепан, Phys. Rev. 159, 430 (1967); D. C. Herbert, J. Math. Phys. 10, 2255 (1970).
225. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, М. И. Каганов, УФН 71, 533 (1960); УФН 72, 3 (1960).
226. Ю. А. Изюмов, ФММ 12, 20 (1961).
227. R. J. Elliott, H. Stern, Proc. Conf. Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, IAEA, Vienna, 1961.
228. J. Szaniecki, Acta Phys. Pol. 22, 2, 9, 21 (1962).
229. Е. Н. Яковлев, ФТТ 4, 594 (1962).
230. E. Pytte, Ann. Phys. (N. Y.) 32, 377 (1965).
231. H. S. Bennet, E. Pytte, Phys. Rev. 155, 553 (1967); E. Pytte, H. S. Bennet, Phys. Rev. 164, 712 (1967); H. S. Bennet, Phys. Rev. 185, 802 (1969).
232. R. Silbergliitt, Phys. Rev. 188, 786 (1969); J. Appl. Phys. 40, 1114 (1969).
233. K. Tani, H. Mori, Prog. Theor. Phys. 39, 876 (1968); K. Tani, H. Tanaka, J. Phys. (C): Sol. State Phys. 2, L90 (1970).
234. В. Г. Каменский, ЖЭТФ 59, 2244 (1970).
235. V. N. Kashcheev, Phys. Stat. Sol. 43, 51 (1971); Phys. Stat. Sol. 45, 57 (1971); В. Н. Кашеев, ФТТ 13, 3400 (1971).
236. М. П. Кашенко, Н. Ф. Балахонов, Л. В. Курбатов, ФММ 33, 18 (1972).
237. B. Lüthi, T. J. Moran, R. J. Pollina, J. Phys. Chem. Solids 31, 1741 (1970).
238. М. А. Иванов, В. Ф. Лось, ФТТ 11, 1901 (1969).
239. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, ЖЭТФ 49, 975 (1965); А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ 56, 1664 (1969).
240. N. Matsudaira, Phys. Lett. 26A, 610 (1968); J. Phys. Soc. Japan. 25, 1225 (1968).
241. В. Л. Покровский, ФТТ 10, 3594 (1968).
242. H. Wagner, J. Swift, Z. Phys. 239, 182 (1970).
243. H. C. Bolton, B. S. Lee, J. Phys. (C): Sol. State Phys. 3, 1433 (1970); B. S. Lee, H. C. Bolton, J. Phys. (C): Solid State Phys. 4, 1178 (1971).
244. В. А. Загребнов, В. К. Федянин, ТМФ 10, 127 (1972).
245. H. Horner, Z. Phys. 251, 202 (1972).
246. V. N. Kashcheev, Acta Phys. Pol. A43, 433 (1973); Phys. Stat. Sol. (b) 57, K121 (1973).
247. С. В. Тябликов, Г. Конвент, Препринт ОИЯИ Р4-3794, Дубна, 1968; Phys. Lett. 27A, 130 (1968); Г. Конвент, Препринт ОИЯИ Р4-4028, Дубна, 1968; Phys. Lett. 28A, 237 (1968).
248. Г. Конвент, Н. М. Плакида, ТМФ 3, 135 (1970).
249. N. M. Plakida, Phys. Lett. 32A, 134 (1970).
250. Г. Конвент, Н. М. Плакида, ТМФ 8, 119 (1971); Phys. Lett. 37A, 173 (1971).
251. H. Konwent, Preprint N247, Instytut Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Wrocławskiego, Wrocław, 1972.
252. Г. Конвент, Н. М. Плакида, Ф. Вукайлович, ТМФ 19, 115 (1974).

- 253. G. Meissner, Z. Phys. **237**, 272 (1970).
 - 254. N. Воссара, Phys. Stat. Sol. **43**, K11 (1971).
 - 255. Г. Лейбфрид, Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов, Физматгиз, М., 1963.
 - 256. N. M. Plakida, Phys. Lett. **A43**, 481 (1973).
 - 257. Ф. Вуйкалович, Сообщение ОИЯИ Р4-7291, Дубна, 1973.
 - 258. S. B. Trickey, W. P. Kirk, E. D. Adams, Rev. Mod. Phys. **44**, 668 (1972).
 - 259. G. Meissner, Proc. of the 12-th International Conf. on Low Temp. Phys., Kyoto, Japan, 1970, p. 143.
 - 260. P. G. de Gennes, Sol. St. Comm. **1**, 132, 1963; В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **49**, 975 (1965); R. Blinc, J. Phys. Chem. Sol. **13**, 204 (1960).
 - 261. J. Villain, S. Stamenković, Phys. Stat. Sol. **15**, 585 (1966); К. Kobayashi, J. Phys. Soc. Japan. **24**, 497 (1968); И. В. Стасюк, Р. Р. Левицкий, УФЖ **15**, 458 (1970); УФЖ **19**, № 2 (1974); Phys. Stat. Sol. **39**, K35 (1970).
 - 262. F. R. Vukajlovič, J. P. Vlahov, Phys. Lett. **44A**, 231 (1973).
-

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие к второму изданию	6
Предисловие к первому изданию	8
Основные обозначения	11
Глава I. Введение	13
§ 1. Общие сведения и определения	13
§ 2. Элементы феноменологической теории	36
Глава II. Спиновые гамильтонианы	41
§ 3. Вторичное квантование	41
§ 4. Операторная форма теории возмущений	56
§ 5. Формулы преобразований для спиновых операторов	61
§ 6. Гейзенберговская модель	67
§ 7. Обобщения гейзенберговской модели	73
Глава III. Элементы статистической механики	84
§ 8. Статистический оператор и термодинамические функции	84
§ 9. Статистические операторы комплексов частиц	93
§ 10. Статистическая теорема Вика — Блоха — Доминисиса	98
§ 11. Вырождение состояний и квазисредние	105
Глава IV. Метод приближенного вторичного квантования	111
§ 12. Квазиклассический метод и приближенное вторичное квантование	111
§ 13. Диагонализация квадратичных форм	119
§ 14. Об условиях применимости метода ПВК	127
Глава V. Приложения метода приближенного вторичного квантования	135
§ 15. Изотропный ферромагнетик	135
§ 16. Основное состояние антиферромагнетика	146
§ 17. Элементарные возбуждения в антиферромагнетике	152
§ 18. Спиновые волны в спиральных структурах	163
§ 19. Ферромагнитный резонанс и другие приложения метода ПВК	176
Глава VI. Метод молекулярного поля и теория возмущений	188
§ 20. Минимальный принцип для свободной энергии	188
§ 21. Изотропный ферромагнетик	196
§ 22. Ферримагнетики	201

§ 23. Приложения метода молекулярного поля	207
§ 24. Теория возмущений для высоких температур	208
Глава VII. Метод функций Грина	216
§ 25. Временные корреляционные функции и функции Грина	216
§ 26. Спектральные представления	221
§ 27. Дисперсионные соотношения	230
§ 28. Общие свойства функций Грина	232
§ 29. Теория возмущений для функций Грина	239
§ 30. Некоторые свойства массового оператора	246
§ 31. Реакция системы на внешнее воздействие	248
Глава VIII. Приложения метода функций Грина	257
§ 32. Спиновые волны при конечных температурах	257
§ 33. Намагниченность при конечных температурах	262
§ 34. Средняя энергия ферромагнетика	269
§ 35. Изотропный ферромагнетик, случай $S \geq 1/2$	271
§ 36. Численное интегрирование уравнения для намагниченности	281
§ 37. Низкотемпературные разложения	284
§ 38. Ферромагнитный резонанс	286
§ 39. Резонанс в изотропном ферромагнетике	292
§ 40. Упругое рассеяние нейтронов	300
§ 41. Неупругое рассеяние нейтронов	312
§ 42. Некоторые дальнейшие применения метода функций Грина	319
Приложение	324
П. 1. Прямая и обратная решетки	324
П. 2. Волновые векторы и зоны	329
П. 3. Условия отражения Брегга — Вульфа	335

Дополнение

Приложения метода функций Грина к теории анизотропных гейзенберговских ферро- и антиферромагнетиков

Введение	339
Глава I. Гамильтониан, уравнения движения и функции Грина	343
§ 1. Гамильтониан и свойства симметрии	343
§ 2. Уравнения движения и интегралы движения	355
§ 3. Корреляционные функции	358
§ 4. Двухвременные функции Грина	362
Глава II. Обобщенное приближение Хартри — Фока (ОПХФ), или теории первого порядка для ферромагнетика	368
§ 1. Общая формулировка	368
§ 2. Спин-волновое (бозевское) приближение	375
§ 3. Низкотемпературная (хартри-фоковская) ренормировка	385
§ 4. Приближение Тябликова (приближение случайных фаз)	388
§ 5. «Точная» ренормировка в ОПХФ	394
§ 6. Некоторые другие приближения	397
§ 7. Исключение кинематического члена в модели «легкая ось»	402

Глава III. Теории второго порядка и анализ формально точного решения для модели «легкая ось»	406
§ 1. Спектр и затухание магнонов при низких температурах	406
§ 2. Обобщенная теория Тябликова для модели «легкая ось»	418
§ 3. Обобщенная теория Дайсона (приближение матрицы рассеяния)	424
§ 4. Метод уравнений движения в теории Дайсона и другие квазибозонные представления	438
Глава IV. Обобщенное приближение Хартри — Фока для антиферромагнетика (антиферромагнитная фаза)	449
§ 1. Гамильтониан и уравнения движения. Корреляционные функции и функции Грина	449
§ 2. Общая формулировка ОПХФ	455
§ 3. Спин-волновое приближение	460
§ 4. Низкотемпературная ренормировка	464
§ 5. Приближение Тябликова	467
§ 6. Некоторые другие приближения	469
Глава V. Спин-фононное взаимодействие в ангармоническом ферромагнитном кристалле	471
§ 1. Спин-фононное взаимодействие в модели Гейзенберга	471
§ 2. Самосогласованные элементарные возбуждения в ферромагнитном ангармоническом кристалле	476
§ 3. Спиновые возбуждения в ангармоническом ферромагнитном кристалле	480
§ 4. Обсуждение результатов	491
Примечания	493
Литература	504
Литература к дополнению	517