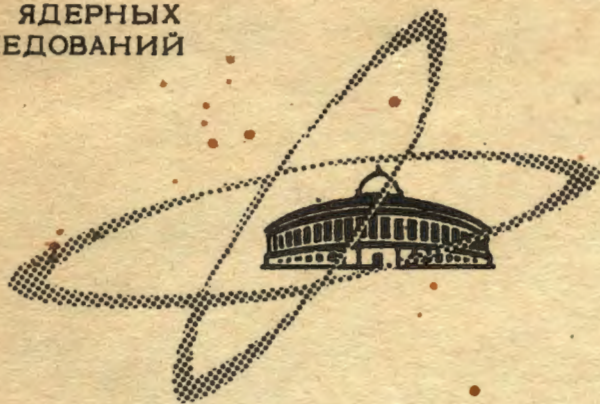


Phys. Lett., 1968, 30/v-68
v27A, n3, p.130-131

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 3794



С.В.Тябликов, Г.Конвент

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

СПИН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
В ФЕРРОМАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

1968

Р4 - 3794

С.В.Тябликов, Г.Конвент

СПИН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
В ФЕРРОМАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

7290/2 чф



I. Введение

Обычно в теории гейзенберговской модели ферромагнетика предполагается, что атомы, находящиеся в узлах решетки, неподвижны. Такое предположение не соответствует реальности, так как атомы участвуют в тепловом движении, в результате чего величины, зависящие от расстояния между атомами меняются. В частности, изменяется энергия обменного взаимодействия, что приводит к взаимодействию спинов с колебаниями решетки. С другой стороны, колебания атомов не являются строго гармоническими. Эффекты ангармонизма проявляются как взаимодействие между нормальными колебаниями и обычно ведут к установлению нелинейных связей между некоторыми величинами. Учет этих двух эффектов, т.е. ангармонизма колебаний решетки и взаимодействия между спиновыми и колебательными возбуждениями в ферромагнитном кристалле приводит к изменению ряда величин (фононный спектр, температура Кюри), характеризующих невзаимодействующие спиновую и фононную системы. Учет и исследование названных выше эффектов является целью этой работы.

2. Гамильтониан системы

Рассмотрим ферромагнитный кристалл, имеющий простую решетку Бравэ. Предположим, что спин-спиновое взаимодействие описывается гамильтонианом Гейзенберга, а силы взаимодействия между атомами кристалла являются парными и центральными. Гамильтониан такой системы можно записать в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_l,$$

$$\mathcal{H}_s = -\mu_B H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} \mathcal{J}(|\bar{R}_{f_1} - \bar{R}_{f_2}|) (S_{f_1}, S_{f_2}), \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_l = \frac{1}{2M} \sum_f (p_f \cdot p_f) + \frac{1}{2} \sum_{f_1, f_2} \Phi(|\bar{R}_{f_1} - \bar{R}_{f_2}|),$$

где \bar{p}_f - импульс атома, M - его масса, \bar{R}_f - положение f -ого атома, которое можно записать в виде:

$$\bar{R}_f = \bar{R}_f^0 + \bar{u}(f) = \bar{r} + \bar{u}(f), \quad (2.2)$$

где $\bar{R}_f^0 = \bar{r}$ обозначает равновесное положение атома, а $\bar{u}(f)$ - малое смещение; $\Phi(|\bar{R}_{f_1} - \bar{R}_{f_2}|)$ - потенциал взаимодействия f_1 и f_2 атомов, μ_B - магнетон Бора, H - внешнее магнитное поле, S_f - спин электрона, принадлежащего f -ому атому, $\mathcal{J}(|\bar{R}_{f_1} - \bar{R}_{f_2}|)$ - обменный интеграл, который для определенности будем считать положительным. Заметим, что индекс

f у оператора \bar{S}_f обозначает только принадлежность спина к атому, находящемуся в узле f , и как таковой не является переменной. Поэтому мы будем учитывать только изменение обменного интеграла за счет смещения атомов $|I|$. В (2.1) и далее (A, B) – скалярное произведение векторов \bar{A} и \bar{B} .

Чтобы явно учесть зависимость гамильтониана системы от смещений атомов, потенциал межуатомных сил $\Phi(|\bar{R}_{p_1} - \bar{R}_{p_2}|)$ и обменный интеграл разложим в ряд Фурье:

$$\Phi(|\bar{R}_{p_1} - \bar{R}_{p_2}|) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \Phi(\nu) e^{i(\nu, R_{p_1} - R_{p_2})} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \Phi(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} e^{i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)}, \quad (2.3)$$

$$J(|\bar{R}_{p_1} - \bar{R}_{p_2}|) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} J(\nu) e^{i(\nu, R_{p_1} - R_{p_2})} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} J(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} e^{i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)}, \quad (2.4)$$

где

$$\zeta_{\nu}(p_1, p_2) = (\nu, u(p_1) - u(p_2)). \quad (2.5)$$

Подставляя тогда (2.3) и (2.4) в (2.1), получаем

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_B,$$

$$\mathcal{H}_L = \frac{1}{2M} \sum_p (P_p, P_p) + \frac{1}{2N} \sum_{p_1, p_2} \sum_{\nu} \Phi(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} e^{i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)}, \quad (2.6)$$

$$\mathcal{H}_B = -\mu_B \sum_p S_p^z - \frac{1}{2N} \sum_{p_1, p_2} \sum_{\nu} J(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} (S_{p_1}, S_{p_2}) e^{i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)}$$

В дальнейшем смещения $\bar{u}(f)$ будем считать малыми и для получения определенного приближения будем разлагать $\exp[i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)]$ в ряд по $\zeta_{\nu}(p_1, p_2)$:

$$e^{i\zeta_{\nu}(p_1, p_2)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \zeta_{\nu}^m(p_1, p_2). \quad (2.7)$$

В частности гамильтониан решетки \mathcal{H}_L можно представить в виде суммы гармонической части $\mathcal{H}_L^{(2)}$ и ангармонического возмущения V' :

$$\mathcal{H}_L = \mathcal{H}_L^{(2)} + V',$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_L^{(2)} &= \frac{1}{2M} \sum_p (P_p, P_p) + \frac{1}{2N} \sum_{p_1, p_2} \sum_{\nu} \Phi(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} \frac{i^2}{2!} \zeta_{\nu}^2(p_1, p_2), \\ V' &= \frac{1}{2N} \sum_{p_1, p_2} \sum_{\nu} \sum_{m=3}^{\infty} \Phi(\nu) e^{i(\nu, p_1 - p_2)} \frac{i^m}{m!} \zeta_{\nu}^m(p_1, p_2). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Обычно в качестве нулевого приближения для гамильтониана \mathcal{H}_L используется гармоническая часть $\mathcal{H}_L^{(0)}$, которая определяет частоты и собственные векторы нормальных колебаний в гармоническом приближении. Однако здесь нам удобнее будет воспользоваться псевдогармоническим приближением^{/2/}, которое учитывает некоторые эффекты ангармонизма колебаний решетки. При этом удобно перейти от смещений к операторам рождения и уничтожения фононов:

$$u^\alpha(\rho) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_j} (2M\tilde{\omega}_j(\bar{\mathbf{k}}))^{1/2} e_j^\alpha(\bar{\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k},\rho)} (a_{-\mathbf{k}_j}^+ + a_{\mathbf{k}_j}),$$

$$P_j^\alpha = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_j} \left(\frac{M\tilde{\omega}_j(\bar{\mathbf{k}})}{2}\right)^{1/2} e_j^\alpha(\bar{\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k},\rho)} (a_{-\mathbf{k}_j}^+ - a_{\mathbf{k}_j}),$$
(2.9)

где частоты $\tilde{\omega}_j(\bar{\mathbf{k}})$ ($j=1,2,3$) и векторы $\bar{e}_j(\bar{\mathbf{k}})$ определяются из уравнения на собственные значения

$$\tilde{\omega}_j^2 e_j^\alpha(\bar{\mathbf{k}}) = \sum_{\rho=1}^3 \tilde{D}_{\alpha\rho}(\bar{\mathbf{k}}) e_j^\rho(\bar{\mathbf{k}}), \quad (\alpha=1,2,3),$$
(2.10)

где $\tilde{D}_{\alpha\rho}(\bar{\mathbf{k}})$ - псевдогармоническая динамическая матрица, вид которой будет определен самоогласованным способом позднее. Собственные векторы $\bar{e}_j(\bar{\mathbf{k}})$ образуют полный ортонормированный базис:

$$\sum_{\alpha} e_j^{\alpha*}(\bar{\mathbf{k}}) e_j^{\alpha}(\bar{\mathbf{k}}) = \delta_{jj'}, \quad e_j^{\alpha*}(\bar{\mathbf{k}}) = e_j^{\alpha}(-\bar{\mathbf{k}}),$$

$$\sum_j e_j^{\alpha*}(\bar{\mathbf{k}}) e_j^{\beta}(\bar{\mathbf{k}}) = \delta_{\alpha\beta}.$$
(2.11)

В дальнейшем удобно в качестве полной системы использовать векторы псевдогармонической системы. Тогда, подставляя (2.9) в (2.6) и учитывая (2.5), гамильтониан спин-фононной системы можно представить в виде:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_j} \tilde{\omega}_j(\mathbf{k}) \left\{ a_{\mathbf{k}_j}^+ a_{\mathbf{k}_j} - \frac{1}{2} (a_{-\mathbf{k}_j} a_{\mathbf{k}_j} + a_{\mathbf{k}_j}^+ a_{-\mathbf{k}_j}^+) + \frac{1}{2} \right\} +$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1, \rho_2} \sum_{\nu} \phi(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} e^{i\mathcal{J}_\nu(\rho_1, \rho_2)} -$$

$$- \mu H \sum_{\rho} S_{\rho}^z - \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1, \rho_2} \sum_{\nu} \mathcal{J}(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} (S_{\rho_1}, S_{\rho_2}) e^{i\mathcal{J}_\nu(\rho_1, \rho_2)},$$
(2.12)

где

$$\mathcal{J}_\nu(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_j} (\nu, C_j(\mathbf{k}; \rho_1, \rho_2)) (a_{-\mathbf{k}_j}^+ + a_{\mathbf{k}_j}),$$
(2.13)

$$C_j^+(k, \rho, \rho_2) = (2M \tilde{\omega}_j(k))^{-1/2} e_j^+(k) (e^{i(k, \rho)} - e^{i(k, \rho_2)}) \quad (2.14)$$

В следующем разделе мы рассмотрим некоторые эффекты ангармонизма колебаний решетки и влияние спин-фононного взаимодействия на характеристики фононной подсистемы. При этом мы предположим, что взаимодействие между спиновой и фононной подсистемами является слабым. Для расчетов будет применен метод двухвременных температурных функций Грина.

3. Фононная подсистема

Рассмотрим однофононные функции Грина:

$$G_1(k_j, t-t') = \langle\langle a_{k_j}(t) | a_{k_j}^+(t') \rangle\rangle = \theta(t-t') \langle [a_{k_j}(t), a_{k_j}^+(t')] \rangle, \quad (3.1)$$

$$G_2(k_j, t-t') = \langle\langle a_{-k_j}^+(t) | a_{k_j}^+(t') \rangle\rangle = \theta(t-t') \langle [a_{-k_j}^+(t), a_{k_j}^+(t')] \rangle.$$

Пользуясь уравнениями движения для операторов a_{k_j} и $a_{-k_j}^+$ в гейзенберговском представлении, получим следующую цепочку уравнений для функций Грина (3.1):

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle a_{k_j} | a_{k_j}^+ \rangle\rangle = i \delta(t-t') + \frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \langle\langle a_{k_j} - a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1 \rho_2} \sum_{\nu} \phi(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} (iN^{-1/2}) (\nu, C_j(-k; \rho_1, \rho_2)) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \langle\langle \xi_{\nu}^m(\rho_1, \rho_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle - \quad (3.2)$$

$$- \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1 \rho_2} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} (iN^{-1/2}) (\nu, C_j(-k; \rho_1, \rho_2)) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \langle\langle (S_{\rho_1}, S_{\rho_2}) \xi_{\nu}^m(\rho_1, \rho_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle,$$

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \rangle\rangle = - \frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \langle\langle a_{-k_j}^+ - a_{k_j} | a_{k_j}^+ \rangle\rangle -$$

$$- \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1 \rho_2} \sum_{\nu} \phi(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} (iN^{-1/2}) (\nu, C_j(-k; \rho_1, \rho_2)) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \langle\langle \xi_{\nu}^m(\rho_1, \rho_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle + \quad (3.3)$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\rho_1 \rho_2} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \rho_1 - \rho_2)} (iN^{-1/2}) (\nu, C_j(-k; \rho_1, \rho_2)) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \langle\langle (S_{\rho_1}, S_{\rho_2}) \xi_{\nu}^m(\rho_1, \rho_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle.$$

Уравнения (3.2) и (3.3) являются точными, но в них однофононные функции Грина зацепляются за

многофононные и спин-фононные. Для получения замкнутой системы уравнений для однофононных функций воспользуемся следующим приближением. В качестве нулевого приближения рассмотрим не взаимодействующие между собой фононную и спиновую подсистемы. Тогда, предполагая спин-фононное взаимодействие слабым, спин-фононную функцию Грина расцепим следующим образом:

$$\ll (S_{p_1}, S_{p_2}) \xi_v^n(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg \rightarrow \langle (S_{p_1}, S_{p_2}) \rangle \ll \xi_v^n(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg \quad (3.4)$$

Корреляционную функцию $\langle (S_{p_1}, S_{p_2}) \rangle$ можно вычислить как средние значения от (S_{p_1}, S_{p_2}) с гамильтонианом \mathcal{H}_s (2.1).

При рассмотрении многофононных функций Грина воспользуемся псевдогармоническим приближением^{/2/}, согласно которому

$$\ll \xi_v^n(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg \rightarrow n \langle \xi_v^{n-1}(p_1, p_2) \rangle \ll \xi_v(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg. \quad (3.5)$$

Примем это расщепление и в настоящей работе. Тогда, учитывая (3.4) и (3.5), получаем:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \ll (S_{p_1}, S_{p_2}) \xi_v^n(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg \rightarrow i \langle (S_{p_1}, S_{p_2}) \rangle \langle e^{i \xi_v(p_1, p_2)} \rangle \ll \xi_v(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg,$$

(3.6)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \ll \xi_v^n(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg \rightarrow i \langle e^{i \xi_v(p_1, p_2)} \rangle \ll \xi_v(p_1, p_2) | a_{k_j}^+ \gg.$$

Величина $\langle e^{i \xi_v(p_1, p_2)} \rangle$ вычисляется также в псевдогармоническом приближении. Учитывая вид $\xi_v(p_1, p_2)$ (2.13), можно показать^{/3/}, что в этом приближении

$$\langle e^{i \xi_v(p_1, p_2)} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \langle \xi_v^2(p_1, p_2) \rangle} = e^{-2U_v(p_1, p_2)} \quad (3.7)$$

Принимая во внимание (3.6), (3.7) и совершая фурье-преобразование по времени, согласно формуле

$$G_{(1,2)}(k_j; t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE(t-t')} G_{(1,2)}(k_j; E),$$

$$G_1(k_j; E) = \ll a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg_E, \quad G_2(k_j; E) = \ll a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \gg,$$

из (3.2) и (3.3) получим следующую замкнутую систему приближенных уравнений для фурье-компонент по времени однофононных функций Грина:

$$E \langle\langle a_{k_j} | a_{k_j}^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\beta} + \frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \langle\langle a_{k_j} - a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \rangle\rangle -$$

$$- \frac{1}{2N} \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\nu} \phi(\nu) e^{i(\nu, \beta_1 - \beta_2)} e^{-2U_\nu(\beta_1, \beta_2)} N^{-1/2} (\nu, C_j(-k; \beta_1, \beta_2)) \langle\langle \xi_\nu(\beta_1, \beta_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle + \quad (3.8)$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \beta_1 - \beta_2)} e^{-2U_\nu(\beta_1, \beta_2)} \langle(S_{\beta_1}, S_{\beta_2})\rangle N^{-1/2} (\nu, C_j(-k; \beta_1, \beta_2)) \langle\langle \xi_\nu(\beta_1, \beta_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle,$$

$$E \langle\langle a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \rangle\rangle = -\frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \langle\langle a_{-k_j}^+ - a_{k_j} | a_{k_j}^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\nu} \phi(\nu) e^{i(\nu, \beta_1 - \beta_2)} e^{-2U_\nu(\beta_1, \beta_2)} N^{-1/2} (\nu, C_j(k; \beta_1, \beta_2)) \langle\langle \xi_\nu(\beta_1, \beta_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle - \quad (3.9)$$

$$- \frac{1}{2N} \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \beta_1 - \beta_2)} e^{-2U_\nu(\beta_1, \beta_2)} \langle(S_{\beta_1}, S_{\beta_2})\rangle N^{-1/2} (\nu, C_j(k; \beta_1, \beta_2)) \langle\langle \xi_\nu(\beta_1, \beta_2) | a_{k_j}^+ \rangle\rangle.$$

В уравнениях (3.8) и (3.9) мы не пишем индекса E при $\langle\langle \dots \rangle\rangle_E$, так как в дальнейшем это сокращение не вызовет никаких недоразумений.

Приведем систему уравнений (3.8), (3.9) к более удобному виду. Прежде всего заметим, что учитывая (2.I3), (2.I4) и используя свойства векторов ортонормированного базиса $\xi_j(k)$ (2.II), можно показать, что

$$2U_\nu(\beta_1, \beta_2) = \frac{1}{2} \langle \xi_\nu^2(\beta_1, \beta_2) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k_j} \frac{|(\nu, e_j(k))|^2}{2M \tilde{\omega}_j(k)} (1 + 2N_{k_j}) [1 - \cos(k, \beta_1 - \beta_2)] =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k_j} \frac{|(\nu, e_j(k))|^2}{2M \tilde{\omega}_j(k)} \operatorname{ctg} \frac{\tilde{\omega}_j(k)}{2\beta} [1 - \cos(k, \beta_1 - \beta_2)] = 2U_\nu(\beta_1 - \beta_2), \quad (3.I0)$$

где

$$N_{k_j} = \langle a_{-k_j}^+ a_{k_j} \rangle = \left(e^{\frac{\tilde{\omega}_j(k)}{\beta}} - 1 \right)^{-1}. \quad (3.II)$$

Приняв во внимание (2.II), (2.I3), (2.I4) и (3.I0) легко убедиться, что имеют место равенства:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2N} \sum_{\beta, \beta_0} \sum_{\nu} \Phi(\nu) e^{i(\nu, \beta - \beta_0)} e^{-2i\nu(\beta - \beta_0)} N^{-1/2} (\nu, C_j(-k; \beta, \beta_0)) \ll \xi_{\nu}(\beta, \beta_0) | a_{k_j}^+ \gg = \\ & = \frac{1}{2N} \sum_{\beta} \sum_{\nu} \sum_{j'} \Phi(\nu) e^{i(\nu, \beta)} e^{-2i\nu(\beta)} \frac{(\nu, e_j(-k))(\nu, e_j(k))}{2M\sqrt{\tilde{\omega}_j(k)\tilde{\omega}_{j'}(k)}} (2 - e^{i(k, \beta)} - e^{-i(k, \beta)}) \ll a_{-k_{j'}}^+ + a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2N} \sum_{\beta, \beta_0} \sum_{\nu} \Psi(\nu) e^{i(\nu, \beta - \beta_0)} e^{-2i\nu(\beta, \beta_0)} \langle (S_{\beta}, S_{\beta_0}) \rangle N^{-1/2} (\nu, C_j(k; \beta, \beta_0)) \ll \xi_{\nu}(\beta, \beta_0) | a_{k_j}^+ \gg = \\ & = \frac{1}{2N} \sum_{\beta} \sum_{\nu} \sum_{j'} \Psi(\nu) e^{i(\nu, \beta)} e^{-2i\nu(\beta)} \langle (S_0, S_{\beta}) \rangle \frac{(\nu, e_j(-k))(\nu, e_j(k))}{2M\sqrt{\tilde{\omega}_j(k)\tilde{\omega}_{j'}(k)}} \times \quad (3.13) \\ & \quad \times (2 - e^{i(k, \beta)} - e^{-i(k, \beta)}) \ll a_{-k_{j'}}^+ + a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg. \end{aligned}$$

Подставляя (3.12) и (3.13) в (3.8) и (3.9), получим:

$$\begin{aligned} E \ll a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg & = \frac{i}{2\pi} + \frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \ll a_{k_j} - a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \gg - \\ & - \frac{1}{2N} \sum_{\nu} \sum_{\beta} \sum_{j'} (\Phi(\nu) - \Psi(\nu) \langle (S_0, S_{\beta}) \rangle) e^{-2i\nu(\beta)} e^{i(\nu, \beta)} \times \\ & \quad \times (2 - e^{i(k, \beta)} - e^{-i(k, \beta)}) \frac{(\nu, e_j(-k))(\nu, e_j(k))}{2M\sqrt{\tilde{\omega}_j(k)\tilde{\omega}_{j'}(k)}} \ll a_{-k_{j'}}^+ + a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg, \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} E \ll a_{-k_j}^+ | a_{k_j}^+ \gg & = -\frac{1}{2} \tilde{\omega}_j(k) \ll a_{-k_j}^+ - a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg + \\ & + \frac{1}{2N} \sum_{\nu} \sum_{\beta} \sum_{j'} (\Phi(\nu) - \Psi(\nu) \langle (S_0, S_{\beta}) \rangle) e^{-2i\nu(\beta)} e^{i(\nu, \beta)} \times \\ & \quad \times (2 - e^{i(k, \beta)} - e^{-i(k, \beta)}) \frac{(\nu, e_j(-k))(\nu, e_j(k))}{2M\sqrt{\tilde{\omega}_j(k)\tilde{\omega}_{j'}(k)}} \ll a_{-k_{j'}}^+ + a_{k_j} | a_{k_j}^+ \gg. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Система уравнений (3.14), (3.15) для однофононных функций Грина является довольно сложной. Причиной усложнения является тот факт, что суммирование по \bar{g} ($g \neq 0$) есть суммирование по всем соседям узла, координаты которого принимаем условно равными нулю. Можно,

однако, получить более простую систему уравнений, делая некоторые предположения о поведении факторов $\mathcal{U}_\nu(\mathbf{q})$ и корреляционной функции $\langle (S_\alpha, S_\beta) \rangle$, а также ограничиваясь рассмотрением кристаллов кубической симметрией.

Для кубического кристалла форма $|\langle \nu, e_j(\mathbf{k}) \rangle|^2$ является квадратичной формой от ν_α , обладающей кубической симметрией, и поэтому

$$|\langle \nu, e_j(\mathbf{k}) \rangle|^2 = \sum_{\alpha, \beta} \nu_\alpha \nu_\beta e_{j\alpha}^\alpha(-\mathbf{k}) e_{j\beta}^\beta(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} (\nu, \nu) = \frac{\nu^2}{3}. \quad (3.16)$$

Таким образом, учитывая определение (3.10), $2\mathcal{U}_\nu(\mathbf{q})$ можно записать в виде

$$2\mathcal{U}_\nu(\mathbf{q}) = 2W_\nu(0) - 2W_\nu(\mathbf{q}), \quad (3.17)$$

$$2W_\nu(\mathbf{q}) = \frac{\nu^2}{3NM} \sum_{\mathbf{k}_j} E_j(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \quad (3.18)$$

$$2W_\nu(0) = \frac{\nu^2}{3NM} \sum_{\mathbf{k}_j} E_j(\mathbf{k}), \quad (3.19)$$

где

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\tilde{\omega}_j(\mathbf{k})} \operatorname{ctgh} \frac{\tilde{\omega}_j(\mathbf{k})}{2\mathcal{J}}. \quad (3.20)$$

$2W_\nu(0)$ является фактором Дебая-Валлера. В дальнейшем будем считать, что $2W_\nu(\mathbf{q})$ является малой величиной по сравнению с $2W_\nu(0)$, т.е. что фактор Дебая-Валлера дает основной вклад в выражение для $2\mathcal{U}_\nu(\mathbf{q})$.

Для обоснования этого предположения и грубых оценок воспользуемся моделью Дебая и примем для простоты, что

$$\tilde{\omega}_j(\mathbf{k}) = ck, \quad (3.21)$$

где c - скорость звука, и перейдем в (3.18), (3.19) от суммирования по первой зоне Бриллюэна к интегрированию по сфере Дебая с радиусом

$$k_m = \left(\frac{c\sqrt{3}}{v} \right)^{1/3}, \quad (3.22)$$

где v - объем элементарной ячейки.

Тогда в случае высоких температур, $\beta \rightarrow \infty$, получим:

$$2W_r(0) \approx \frac{2v^2 \beta v k_m}{Mc^2 (2\pi)^2}, \quad (3.23)$$

$$\frac{W_r(q)}{W_r(0)} \approx \frac{Si(k_m q)}{k_m q} < 1, \quad q = |q| \neq 0, \quad (3.24)$$

где

$$Si x = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt.$$

В случае низких температур, $\beta \rightarrow 0$:

$$W_r(0) \approx \frac{v^2 v k_m}{Mc (2\pi)^2}, \quad (3.25)$$

$$\frac{W_r(q)}{W_r(0)} \approx \left(\frac{Si(\frac{1}{2} k_m q)}{\frac{1}{2} k_m q} \right) < 1. \quad (3.26)$$

Из (3.24) и (3.26) видно, что при достаточно больших q , $2W_r(q)$ будет малой величиной по сравнению с $2W_r(0)$. Заметим, что подобное же предположение делается в теории рассеяния рентгеновских лучей^{/3/}.

Таким образом, будем приближенно считать:

$$e^{-2W_r(q)} \approx e^{-2W_r(0)} [1 + 2W_r(q) + \dots] \quad (3.27)$$

В этом разделе для исследования свойств фононной подсистемы мы ограничимся приближением

$$e^{-2W_r(q)} \approx e^{-2W_r(0)} \quad (3.28)$$

По-видимому, это приближение дает достаточно удовлетворительные результаты для систем с дальнедействующим взаимодействием, когда происходит своего рода усреднение по сфере порядка радиуса действия сил или по числу атомов лежащих в этой сфере. Таково, видимо, положение в металлах. В случае ферродизлектриков для получения более точных оценок следует учитывать корреляционную функцию ближайших соседей $W_r(q)$.

Вводя теперь перенормированную фурье-компоненту потенциала взаимодействия $\tilde{\Phi}(v)$ в виде:

$$\tilde{\Phi}(v) = \phi(v) e^{-2W_v(0)}, \quad (3.29)$$

определим псевдогармоническую динамическую матрицу следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{\alpha\beta}(\bar{k}) &= \frac{1}{2MN} \sum_{v,g} \tilde{\Phi}(v) \gamma_\alpha \gamma_\beta \left\{ e^{i(v,g)} - e^{i(v+k,g)} - e^{i(v-k,g)} \right\} = \\ &= \frac{1}{M} \sum_{\bar{K}_m} \left\{ \tilde{\Phi}(\bar{k} + \bar{K}_m) (k_\alpha + K_{m\alpha}) (k_\beta + K_{m\beta}) - \tilde{\Phi}(\bar{K}_m) K_{m\alpha} K_{m\beta} \right\}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

где суммирование ведется по векторам обратной решетки \bar{K}_m . Как видно, она отличается от гармонической динамической матрицы

$$D_{\alpha\beta}(\bar{k}) = \frac{1}{M} \sum_{\bar{K}_m} \left\{ \phi(\bar{k} + \bar{K}_m) (k_\alpha + K_{m\alpha}) (k_\beta + K_{m\beta}) - \phi(\bar{K}_m) K_{m\alpha} K_{m\beta} \right\} \quad (3.31)$$

наличием множителей $\exp\{-2W_k(0)\}$ при фурье-компонентах потенциала парного взаимодействия. Поэтому в дальнейшем для оценок мы ограничимся следующим приближением для псевдогармонических фононных частот:

$$\tilde{\omega}_j^2(k) \delta_{jj'} = \sum_{\alpha,\rho} e_j^\alpha(-k) \tilde{D}_{\alpha\rho}(k) e_j^\rho(k) \cong \omega_j^2(k) e^{-2W_k(0)} \delta_{jj'}, \quad (3.32)$$

где $\omega_j(k)$ - гармонические частоты.

Псевдогармонические частоты зависят от температуры через фактор Дебая-Валлера.

Принимая во внимание (3.28), (3.30) и (3.32), систему уравнений (3.14), (3.15) можно привести к виду:

$$\begin{aligned} (E - \tilde{\omega}_j(k)) G_1(k_j; E) &= \frac{i}{2\pi} + \\ &+ \frac{1}{2N} \sum_v \sum_g \sum_{j'} \gamma(v) e^{-2W_v(0)} e^{i(v,g)} (2 - e^{i(k,g)} - e^{-i(k,g)}) \langle S_0, S_g \rangle \times \\ &\times \frac{(v, e_j(-k))(v, e_{j'}(k))}{2Mv\tilde{\omega}_j(k)\tilde{\omega}_{j'}(k)} \left\{ G_1(k_j'; E) + G_2(k_j'; E) \right\}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned}
 (E + \tilde{\omega}_j(k)) G_2(k_j; E) = & -\frac{1}{2N} \sum_{\nu} \sum_{\mathcal{J}} \sum_{j'} y(\nu) e^{-2W_{\nu}(0)} e^{i(\nu, \mathcal{J})} \times \\
 & \times (2 - e^{i(k, \mathcal{J})} - e^{-i(k, \mathcal{J})}) \langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle \times \\
 & \times \frac{(\nu, e_j(k)) (\nu, e_{j'}(k))}{2M \sqrt{\tilde{\omega}_j(k) \tilde{\omega}_{j'}(k)}} \{G_1(k_j; E) + G_2(k_j; E)\}.
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Перейдем теперь к некоторым упрощающим предположениям о поведении корреляционной функции $\langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle$. Примем во внимание, что усреднение выполняется с гамильтонианом \mathcal{H}_0 (2.1). Для упрощения дальнейших расчетов предположим, что в уравнениях (3.33) и (3.34) в первом приближении можно заменить корреляционную функцию $\langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle$ на $\langle S_0^z S_{\mathcal{J}}^z \rangle$:

$$\langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle \rightarrow \langle S_0^z S_{\mathcal{J}}^z \rangle = S^2 \sigma^2, \tag{3.35}$$

где S - величина спина, σ - относительная намагниченность.

Для обоснования этого приближения рассмотрим для простоты случай $S = \frac{1}{2}$ и оценим корреляционную функцию $\langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle$ в рамках приближения хаотических фаз. Принимая во внимание тождество:

$$(S_0, S_{\mathcal{J}}) = \frac{1}{2} \{S_0^- S_{\mathcal{J}}^+ + S_0^+ S_{\mathcal{J}}^-\} + S_0^z S_{\mathcal{J}}^z,$$

получаем следующую оценку:

$$\begin{aligned}
 \langle (S_0, S_{\mathcal{J}}) \rangle & \cong \frac{1}{N} \sum_{\mu} \langle S_{\mu}^- S_{\mu}^+ \rangle e^{-i(\mu, \mathcal{J})} + \langle S_0^z \rangle \Delta(\mathcal{J}) + \langle S_{\mathcal{J}}^z \rangle^2 \cong \\
 & \cong \frac{\sigma}{N} \sum_{\mu} \bar{N}_{\mu} e^{-i(\mu, \mathcal{J})} + \langle S_0^z \rangle \Delta(\mathcal{J}) + \langle S_{\mathcal{J}}^z \rangle^2,
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

где \bar{N}_{μ} - среднее число элементарных возбуждений в спиновой подсистеме при температуре T .

Рассмотрим выражение

$$A = \frac{\sigma}{N} \sum_{\mu} \bar{N}_{\mu} e^{-i(\mu, \mathcal{J})} \tag{3.37}$$

При низких температурах (малые β) в системе возбуждаются спиновые волны с малыми μ и существенный вклад в сумму (3.37) дают члены с малыми μ . Поэтому в этой области

$$A \cong \frac{\sigma}{N} \sum_{\mu} \bar{N}_{\mu} = \bar{n} \ll \sigma, \quad (3.38)$$

где \bar{n} - среднее число спиновых отклонений, а σ -величина порядка единицы. При высоких температурах ($\beta \sim \beta_c$ - температура Кюри) \bar{N}_{μ} - медленно меняющаяся функция μ , и можно эту плавную функцию заменить её средним значением \bar{N}_{μ} . Тогда для (3.37) получим:

$$A \cong \frac{\sigma}{N} \sum_{\mu} e^{-i(\mu, q)} \cdot \bar{N}_{\mu} = \sigma \bar{N}_{\mu} \Delta(q) . \quad (3.39)$$

С другой стороны, заметим, что члены с $\Delta(q)$ дадут нулевой вклад в правые стороны уравнений (3.33) и (3.34), так как

$$\Delta(q) (2 - e^{i(k, q)} - e^{-i(k, q)}) \equiv 0. \quad (3.40)$$

Таким образом, из (3.36)- (3.40) следует, что можно в уравнениях (3.33) и (3.34) применить приближение (3.35).

Учтем приближение (3.35) и проведем суммирование по q в (3.33) и (3.34). Тогда пренебрегая процессами переброса и принимая во внимание (3.30), (3.32), получим следующую простую систему уравнений для однофононных функций Грина:

$$\{E - \tilde{\omega}_j(k) [1 + D(k; \sigma)]\} G_1(k_j; E) + \tilde{\omega}_j(k) D(k; \sigma) G_2(k_j; E) = \frac{i}{2\pi}, \quad (3.41)$$

$$\tilde{\omega}_j(k) D(k; \sigma) G_1(k_j; E) - \{E + \tilde{\omega}_j(k) [1 - D(k; \sigma)]\} G_2(k_j; E) = 0, \quad (3.42)$$

где

$$D(k; \sigma) = \frac{1}{2} S^2 \sigma^2 \frac{\tilde{\gamma}(k)}{\Phi(k)} . \quad (3.43)$$

Легко убедиться, что система (3.41), (3.42) имеет следующие решения:

$$G_1(k_j; E) = \frac{i}{2\pi} \frac{E + \tilde{\omega}_j(k) [1 - D(k; \sigma)]}{E^2 - \epsilon_j^2(k)} , \quad (3.44)$$

$$G_2(k_j; E) = \frac{i}{2\pi} \frac{\tilde{\omega}_j(k) D(k; \sigma)}{E^2 - \epsilon_j^2(k)} , \quad (3.45)$$

где

$$\epsilon_j(k) = \tilde{\omega}_j(k) \left\{ 1 - 2 D(k; \sigma) \right\}^{1/2} \quad (3.46)$$

определяет перенормированные за счёт спин-фононного взаимодействия псевдогармонические фононные частоты. Полюса функций Грина будут лежать на вещественной оси, и тем самым фононная подсистема будет устойчивой, если, кроме вещественности $\tilde{\omega}_j(k)$, будет выполнено условие:

$$2 D(k; \sigma) < 1 . \quad (3.47)$$

Применяя стандартные методы теории функций Грина (см., например, /1/), получим следующие выражения для фононных корреляционных функций:

$$\langle a_{k_j}^+ a_{k_j} \rangle = \frac{\tilde{\omega}_j(k) [1 - D(k; \sigma)] - \epsilon_j(k)}{2 \epsilon_j(k)} + \frac{\tilde{\omega}_j(k) [1 - D(k; \sigma)] \tilde{N}_{k_j}}{\epsilon_j(k)} , \quad (3.48)$$

$$\langle a_{k_j}^+ a_{-k_j}^+ \rangle = - \frac{\tilde{\omega}_j(k) D(k; \sigma)}{2 \epsilon_j(k)} (1 + 2 \tilde{N}_{k_j}) ,$$

где

$$\tilde{N}_{kj} = \left(e^{\frac{\epsilon_j(k)}{k_B T}} - 1 \right)^{-1}. \quad (3.49)$$

Заметим, что из наших расчетов следует правильные результаты для ангармонического кристалла. Полагая, например, в (3.46), (3.48) и (3.49) $D=0$ (т.е. $J(k)=0$), получим:

$$\epsilon_j(k) = \tilde{\omega}_j(k), \quad \langle a_{kj}^+ a_{-kj}^+ \rangle = 0,$$

$$\langle a_{kj}^+ a_{kj} \rangle = N_{kj} = \left(e^{\frac{\tilde{\omega}_j(k)}{k_B T}} - 1 \right)^{-1}.$$

Перейдем теперь к краткому обсуждению полученных результатов. Учитывая определение (3.43), запишем выражение для перенормированных фононных энергий $\epsilon_j(k)$ (3.46) в явном виде

$$\epsilon_j(k) = \tilde{\omega}_j(k) \left\{ 1 - S^2 \sigma^2 \frac{\tilde{Y}(k)}{\Phi(k)} \right\}^{1/2}. \quad (3.50)$$

Вычислим скорость звука. Если скорость звука для чисто ангармонического кристалла определить как

$$\tilde{c}_j = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\omega}_j(k), \quad (3.51)$$

то скорость звука при учёте спин-фононного взаимодействия c_j будет выражаться формулой

$$c_j = \tilde{c}_j \left\{ 1 + S^2 \sigma^2 \left| \frac{Y(0)}{\Phi(0)} \right| \right\}^{1/2}. \quad (3.52)$$

где мы учли, что

$$\Phi(0) \equiv \sum_p \Phi(p) < 0,$$

$$Y(0) \equiv \sum_p Y(p) > 0,$$

поскольку статическая энергия связи кристалла отрицательна, а обменный интеграл $Y(p)$ для ферромагнетика положителен. Мы учли также, что в рассматриваемом нами приближении

$$\frac{\tilde{Y}(k)}{\tilde{\Phi}(k)} = \frac{Y(k)}{\Phi(k)}. \quad (3.53)$$

Если для оценок ограничимся приближением ближайших соседей, полагая

$$\begin{aligned} \gamma(k) &= \gamma_z \gamma_k, \quad \gamma > 0, \\ \phi(k) &= \phi_z \gamma_k, \quad \phi < 0, \\ \gamma_k &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i(k, \delta)}, \end{aligned} \quad (3.54)$$

где δ - вектор, соединяющий два ближайших узла, z - число ближайших соседей, γ и ϕ - постоянные величины, то формулы (3.50) и (3.52) примут особенно простой вид:

$$\epsilon_j(k) \cong \tilde{\omega}_j(k) \left\{ 1 + S^2 \sigma^2 \left| \frac{\gamma}{\phi} \right| \right\}^{1/2}, \quad (3.55)$$

$$c_j \cong \tilde{c}_j \left\{ 1 + S^2 \sigma^2 \left| \frac{\gamma}{\phi} \right| \right\}^{1/2}. \quad (3.56)$$

В этом случае перенормировочные коэффициенты, обусловленные спин-фононным взаимодействием, зависят от температуры только за счет σ .

Рассмотрим температурную зависимость поправки к скорости звука.

При низких температурах ($\vartheta \sim 0$) относительная намагниченность σ мало отличается от единицы: $\sigma \cong 1$. В этом случае из (3.56) получим:

$$\frac{c_j}{\tilde{c}_j} \cong \left\{ 1 + S^2 \left| \frac{\gamma}{\phi} \right| \right\}^{1/2}. \quad (3.57)$$

В области высоких температур, когда температура близка к температуре Кюри ($\vartheta \lesssim \vartheta_c$), σ является малой величиной ($\sigma \ll 1$), и из (3.56) получим:

$$\frac{c_j}{\tilde{c}_j} \cong 1 + \frac{1}{2} S^2 \sigma^2 \left| \frac{\gamma}{\phi} \right|. \quad (3.58)$$

В этой области температур для грубых оценок можно воспользоваться приближением молекулярного поля. Тогда, согласно [1]

$$\sigma^2 \cong \mathcal{A} \left(1 - \frac{\vartheta}{\vartheta_c} \right), \quad (3.59)$$

где \mathcal{A} зависит от величины спина, обменного интеграла и геометрии решетки. Из (3.58), (3.59) получаем, что в окрестности ферромагнитной точки Кюри ϑ_c :

$$\frac{c_j}{c_j^0} \cong 1 + \frac{1}{2} s^2 A \left| \frac{\gamma}{\Phi} \right| \left(1 - \frac{J}{J_c} \right), \quad (3.60)$$

т.е. поправка к скорости звука при $J \rightarrow J_c$ линейно стремится к нулю.

Таким образом, из наших расчетов следует, что спин-фононное взаимодействие в ферромагнитном кристалле в рассматриваемом нами приближении приводит к перенормировке фононных частот и изменяет скорость звука. Поправка к скорости звука, обусловленная спин-фононным взаимодействием, достигает своего максимального значения при $J = 0$, а при $J \rightarrow J_c$ линейно стремится к нулю.

В заключение этого раздела обсудим ещё кратко вопрос об устойчивости кристалла по отношению к фононной системе. Эта проблема исследовалась также в работе^{4/} для одномерной решетки.

Согласно (3.32), псевдогармонические фононные частоты $\tilde{\omega}_j(k)$ выражаются через гармонические $\omega_j(k)$ при помощи уравнения:

$$\tilde{\omega}_j(k) = e^{-2W_k(0)} \omega_j(k). \quad (3.61)$$

С другой стороны, фактор Дебая-Валлера, согласно (5.18) и (3.20), имеет вид:

$$2W_k(0) = \frac{k^2}{3NM} \sum_{k',j'} \frac{1}{2\tilde{\omega}_j(k)} \operatorname{cth} \frac{\tilde{\omega}_j(k')}{2J}. \quad (3.62)$$

Следовательно, (3.61) и (3.62) образуют систему самосогласованных уравнений, из которой можно в принципе определить псевдогармонические частоты, если известны гармонические частоты. Таким образом, мы можем определить температурную зависимость псевдогармонических частот. Однако может случиться, что выше некоторой температуры решения этой системы будут комплексными, что будет указывать на потерю устойчивости решетки. Но так как получение решения в аналитическом виде в целом интервале температур не представляется возможным, то следует воспользоваться некоторыми приближениями.

Можно ожидать, что потеря устойчивости решетки происходит в области высоких температур. Поэтому воспользуемся разложением:

$$\operatorname{cth} x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \dots \quad (3.63)$$

и примем, что в нулевом приближении (3.62) можно записать в виде:

$$2W_k(0) \cong \frac{k^2 \vartheta}{3NM} \sum_{k'j'} \frac{1}{\omega_{j'}^2(k)} \cong k^2 \alpha^2(\vartheta). \quad (3.64)$$

Подставляя сюда (3.61), получаем следующее уравнение для определения параметра $\alpha^2(\vartheta)$:

$$\alpha^2(\vartheta) = \frac{\vartheta}{3NM} \sum_{k'j'} \frac{\exp[k^2 \alpha^2(\vartheta)]}{\omega_{j'}^2(k)} \quad (3.65)$$

Для грубых оценок решений уравнения (3.65) воспользуемся моделью Дебая. Принимая для простоты, что $\omega_j = ck$, и переходя от суммирования к интегрированию по сфере Дебая с радиусом $k_m = (6\pi^2/v)^{1/3}$ из (3.65) получим:

$$\alpha^2(\vartheta) = \frac{\vartheta v}{2\pi^2 M c^2} \int_0^{k_m} \exp[k^2 \alpha^2(\vartheta)] dk \quad (3.66)$$

или вводя новые переменные:

$$x = \frac{k}{k_m}, \quad z = k_m \alpha(\vartheta), \quad a = \frac{3\vartheta}{M c^2}, \quad (3.67)$$

$$z^2 = a \int_0^1 e^{z^2 x^2} dx \quad (3.68)$$

Интеграл в элементарных функциях не берется. Основной вклад в этот интеграл дает значения подинтегральной функции при x , близких к единице. Поэтому примем, что приближенно

$$z^2 \cong a e^{z^2}. \quad (3.69)$$

Определим предельное значение $a_{кр}$, при котором уравнение (3.69) имеет ещё вещественное решение. Для этого продифференцируем (3.69) по z и решим полученное уравнение совместно с (3.69). В результате получим:

$$a_{кр} = e^{-1}, \quad z_0 = 1, \quad (3.70)$$

где z_0 - решение уравнения (3.69) при $\alpha = \alpha_{кр}$. При $\alpha > \alpha_{кр}$ уравнение (3.69) имеет только комплексные решения.

Принимая во внимание (3.67) и (3.70), окончательно получим следующую оценку для критической температуры $\vartheta_{кр}$ и критического значения параметра $\alpha(\vartheta_{кр})$:

$$\vartheta_{кр} \approx \frac{Mc^2}{3e}, \quad \alpha(\vartheta_{кр}) \approx \frac{1}{k_m} = \left(\frac{\nu}{6M^2}\right)^{1/3}. \quad (3.71)$$

Таким образом, нам удалось получить грубую оценку температуры, выше которой решетка становится неустойчивой. Подобные же результаты были получены в работе^{4/} для одномерной решетки.

4. Спиновая подсистема

В этом разделе исследуем влияние спин-фононного взаимодействия на свойства спиновой подсистемы. Для расчетов по-прежнему используем метод двухвременных температурных функций Грина.

Рассмотрим функции Грина

$$\langle\langle S_p^+(t) | S_g^-(t') \rangle\rangle = \Theta(t-t') \langle [S_p^+(t), S_g^-(t')] \rangle. \quad (4.1)$$

Пользуясь уравнением движения для оператора S_p^+ в гейзенберговском представлении с гамильтонианом (2.6), получим следующие уравнения для функции (4.1):

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle S_p^+ | S_g^- \rangle\rangle = i \langle 2S_p^z \rangle \Delta(p-g) \delta(t-t') + \mu H \langle\langle S_p^+ | S_g^- \rangle\rangle + \\ + \frac{1}{N} \sum_{p_1} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, p-p_1)} \langle\langle e^{i\sum_{\nu} (p p_1)} (S_p^+ S_{p_1}^z - S_p^z S_{p_1}^+) | S_g^- \rangle\rangle. \quad (4.2)$$

Расцепим спин-фононные функции Грина по нулевому приближению:

$$\langle\langle e^{i\sum_{\nu} (p p_1)} S_p^+ S_{p_1}^z | S_g^- \rangle\rangle \rightarrow \langle e^{i\sum_{\nu} (p p_1)} \rangle \langle\langle S_p^+ S_{p_1}^z | S_g^- \rangle\rangle, \\ \langle\langle e^{i\sum_{\nu} (p p_1)} S_p^z S_{p_1}^+ | S_g^- \rangle\rangle \rightarrow \langle e^{i\sum_{\nu} (p p_1)} \rangle \langle\langle S_p^z S_{p_1}^+ | S_g^- \rangle\rangle, \quad (4.3)$$

где, согласно (3.7) и (3.17).

$$\langle e^{i\xi_v(\rho, \rho_1)} \rangle = e^{-2W_v(0) + 2W_v(\rho - \rho_1)}$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении уравнение для фурье-компонент по времени спинных функций Грина (4.1) примет вид:

$$\begin{aligned} E \ll S_p^+ | S_g^- \gg &= \frac{i}{2\pi} \langle 2S_p^z \rangle \Delta(\rho - g) + \mu H \ll S_p^+ | S_g^- \gg + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\nu} \sum_{\rho_1} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \rho - \rho_1)} e^{-2W_v(0) + 2W_v(\rho - \rho_1)} \ll S_p^+ S_{\rho_1}^z - S_p^z S_{\rho_1}^+ | S_g^- \gg. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Из вида (4.4) следует, что в принятом нами приближении происходит просто перенормировка обменного взаимодействия:

$$\begin{aligned} \gamma(\rho - \rho_1) &\rightarrow \tilde{\gamma}(\rho - \rho_1) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{i(\nu, \rho - \rho_1)} e^{-2W_v(0) + 2W_v(\rho - \rho_1)} = \\ &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\nu} \tilde{\gamma}(\nu) e^{i(\nu, \rho - \rho_1)}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}(\mu) &= \sum_g \tilde{\gamma}(g) e^{i(\nu, g)} = \\ &= \sum_{\nu} \gamma(\nu) e^{-2W_v(0)} \frac{1}{N} \sum_g e^{i(\nu - \mu, g)} e^{2W_v(g)} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Для оценки перенормированной фурье-компоненты обменного интеграла $\tilde{\gamma}(\mu)$ воспользуемся тем же методом, что и при исследовании фоновой подсистемы. Принимая во внимание (3.10) и (3.27) и пренебрегая дополнительно процессами переброса (при преобразованиях делаем замену $\bar{k} \rightarrow -\bar{k}$), получим для $\tilde{\gamma}(\mu)$ следующие выражения:

$$\tilde{\gamma}(\mu) \equiv \gamma(\mu) e^{-2W_{\mu}(0)} + \frac{1}{N} \sum_{k_j} \gamma(\mu - k) \frac{|\mu - k, e_j(k)|^2}{2M\omega_j(k)} \operatorname{ctg} \frac{\omega_j(k)}{2\theta} \quad (4.7)$$

Второй член в (4.7) дает дополнительный разброс компонент фурье обменного интеграла за счет теплового движения атомов. Малого параметра здесь нет, но подобно рассуждениям предыдущего раздела, где исследовано уравнение для $W_v(0)$ можно думать, что это слагаемое численно мало. Поэтому для дальнейших расчетов примем, что

$$\tilde{J}(v) \cong J(v) e^{-2W_v(0)}. \quad (4.8)$$

Тогда уравнение (4.4) будет иметь вид:

$$\begin{aligned} (E - \mu_0 H) \ll S_p^+ | S_g^- \gg &= \frac{i}{2\pi} \langle 2S_p^z \rangle \Delta(p-g) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\nu} \sum_{k_1} \tilde{J}(v) e^{i(v, p-k_1)} &\ll S_p^+ S_{k_1}^z - S_{k_1}^z S_p^+ | S_g^- \gg. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Рассмотрим это уравнение в приближении случайных фаз. После применения стандартных методов и преобразований (см., например /1/) уравнение (4.9) примет вид:

$$\begin{aligned} (E - \mu_0 H - J(0) \langle S^z \rangle) \ll S_p^+ | S_g^- \gg &= \frac{i}{2\pi} \langle 2S_p^z \rangle \Delta(p-g) - \\ - \frac{\langle S_p^z \rangle}{N} \sum_{\nu} \sum_{k_1} \tilde{J}(v) e^{i(v, p-k_1)} &\ll S_{k_1}^+ | S_g^- \gg. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Мы использовали дополнительно тот факт, что

$$W_0(0) = 0, \quad \tilde{J}(0) = J(0).$$

Для решения уравнения (4.10) сделаем преобразование

$$S_p^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mu} S_{\mu}^z e^{i(\mu, p)} \quad (4.11)$$

Подставляя (4.11) в (4.10), после несложных преобразований окончательно получим:

$$\ll S_v^+ | S_v^- \gg = \frac{i \langle 2S^z \rangle}{2\pi} \frac{1}{E - \bar{E}(v)}, \quad (4.12)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{E}(v) &= \mu_0 H + \langle S_p^z \rangle [J(0) - \tilde{J}(v)] = \\ &= \mu_0 H + S \sigma J(0) [1 - \gamma_v e^{-2W_v(0)}], \end{aligned} \quad (4.13)$$

есть перенормированная за счет спин-фононного взаимодействия энергия элементарных возбуждений в спиновой подсистеме, а γ_ν определяется следующим способом:

$$\gamma_\nu = \frac{\gamma(\nu)}{\gamma(0)} \quad (4.14)$$

В случае $S = \frac{1}{2}$, когда $\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \sigma$, (4.12) и (4.13) принимают вид:

$$\langle\langle S_\nu^+ | S_\nu^- \rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi} \frac{1}{E - \tilde{E}(\nu)} \quad (4.15)$$

$$\tilde{E}(\nu) = \mu_B H + \frac{1}{2} \sigma \gamma(0) [1 - \gamma_\nu e^{-2W_\nu(0)}] \quad (4.16)$$

Применяя стандартные методы^{/1/}, из (4.15) получим уравнение для относительной намагниченности:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_\nu \text{cthg} \frac{\tilde{E}(\nu)}{2J} \quad (4.17)$$

Можно ожидать, что перенормировка энергий спиновых возбуждений вызовет сдвиг ферромагнитной температуры Кюри. Для исследования этого вопроса ограничимся случаем, когда внешнее магнитное поле $H = 0$ и примем приближение ближайших соседей, когда $\gamma(0) = zJ$. Тогда, вводя обозначения, получим:

$$\tau = \frac{4J}{zJ} \quad (4.18)$$

$$\tilde{\xi}_\nu = 1 - \gamma_\nu e^{-2W_\nu(0)} \quad (4.19)$$

Уравнение для намагниченности можно переписать в виде:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_\nu \text{cthg} \frac{\sigma \tilde{\xi}_\nu}{c} \quad (4.20)$$

В области высоких температур $\frac{\sigma}{c} \ll 1$, и гиперболический котангенс можно разложить в ряд по $\frac{\sigma}{c} \tilde{\xi}_\nu$. В этом случае уравнение (4.20) в первом приближении примет вид:

$$\sigma^2 \cong \frac{3\tau}{\bar{\epsilon}_1} (1 - \bar{C}_\tau), \quad (4.21)$$

где

$$\bar{C}_1 = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \bar{\epsilon}_{\nu}, \quad \bar{C} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \frac{1}{\bar{\epsilon}_{\nu}} \quad (4.22)$$

Выделим в явном виде зависимость \bar{C} и \bar{C}_1 от температуры. Для этого будем считать, что температура Кюри τ_K для ферромагнетика при учёте спин-фононного взаимодействия ниже критической (при которой решетка теряет устойчивость) и что при $\tau \sim \tau_K$, $2W_{\nu}(0) \ll 1$. Мы ограничимся приближением

$$1 - e^{-2W_{\nu}(0)} \cong 2W_{\nu}(0) \cong \gamma^2 \alpha^2(\vartheta) \quad (4.23)$$

и примем для $\alpha(\vartheta)$ следующую оценку:

$$\alpha^2(\vartheta) \cong \frac{\nu k_m \vartheta}{2\pi^2 M c^2} \cong \frac{3z\gamma}{4M c^2} \cdot \frac{\tau}{k_m^2} \cong x \frac{\tau}{k_m^2} \cong \alpha^2(\tau), \quad (4.24)$$

вытекающую из уравнения (3.66) и справедливую в области высоких температур. Учитывая (4.23), (4.24) и дополнительно разлагая \bar{C} в ряд по $(\gamma\nu/\lambda-\gamma\nu) \cdot 2W_{\nu}$, окончательно получим

$$\begin{aligned} \bar{C}_1 &\cong 1 + x L_1 \tau, \\ \bar{C} &\cong \frac{1}{\tau_c} - x L \tau, \end{aligned} \quad (4.25)$$

где

$$L_1 = \frac{1}{k_m^2 N} \sum_{\nu} \gamma^2 \vartheta_{\nu}, \quad L = \frac{1}{k_m^2 N} \sum_{\nu} \frac{\gamma^2 \vartheta_{\nu}}{(1-\vartheta_{\nu})^2}, \quad (4.26)$$

$$\frac{1}{\tau_c} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \frac{1}{1-\vartheta_{\nu}} \quad (4.27)$$

τ_c - температура Кюри для изотропного ферромагнетика, вычисленная без учёта спин-фононно-

го взаимодействия. При преобразованиях (4.25) мы приняли во внимание, что

$$\frac{1}{N} \sum_{\nu} (1 - \gamma_{\nu}) = 1.$$

Можно ожидать, что

$$L_1 < 0, \quad L > 0,$$

$$|L_1| < 1, \quad L < 1.$$

Численные расчеты, выполненные для случая простой кубической решетки, дают результаты: $L_1 \cong -0,13$, $L = 0,3$. Для остальных типов кубических решеток L_1 и L будут иметь, видимо, такой же порядок величины. С другой стороны, для ферромагнитного кристалла $\chi \cong \frac{3z^2}{4Nc^2} \sim (10^{-1} - 10^{-2})$. Следовательно, $A_1 \cong \chi |L_1| \ll 1$, $A \cong \chi L \ll 1$, что, видимо, указывает на справедливость наших приближений.

Подставляя (4.25) в (4.21), мы получим следующие уравнения для намагниченности, годные в окрестности точки Кюри τ_K :

$$\sigma^2 \cong \frac{3\tau}{1 - A_1\tau} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_c} + A\tau^2 \right). \quad (4.28)$$

Температуру Кюри τ_K для ферромагнетика с учётом спин-фононного взаимодействия определим из условия $\sigma^2 = 0$:

$$1 - \frac{\tau_K}{\tau_c} + A\tau_K^2 = 0. \quad (4.29)$$

Принимая во внимание, что $A \ll 1$ и решая уравнение (4.29) методом итераций, окончательно получим следующий результат:

$$\tau_K \cong \tau_c (1 + A\tau_c^2). \quad (4.30)$$

Следовательно, спин-фононное взаимодействие вызывает смещение точки Кюри в сторону более высоких температур. Заметим, что

$$\left. \frac{d\sigma}{d\tau} \right|_{\tau = \tau_K} = \infty$$

Таким образом, мы показали, что учет спин-фононного взаимодействия для спиновой подсистемы приводит к дополнительной перенормировке спиновых возбуждений и увеличению температуры Кюри.

5. Выводы

В работе мы рассмотрели влияние спин-фононного взаимодействия на поведение разных физических свойств ферромагнитного кристалла. В рассмотренном нами приближении слабой связи между фононной и спиновой подсистемами это взаимодействие приводит к перенормировке фононных частот за счет спонтанной намагниченности и к перенормировке энергий спиновых возбуждений за счет тепловых колебаний атомов. Следствием этого является перенормировка скорости звука, которая исчезает в точке Кюри, и, с другой стороны, сдвиг ферромагнитной температуры Кюри в сторону более высоких температур. Мы учли в некоторой степени ангармонизм колебаний атомов, так как мы пользовались псевдогармоническим приближением в качестве нулевого приближения для фононной подсистемы. Наши численные оценки имели качественный характер и требуют дальнейшего уточнения.

Учет затухания и приближение сильной связи оудут рассмотрены в следующих работах.

В заключение выражаем благодарность Н.М. Плакиде за обсуждения.

Литература:

1. С.В. Тябликов, Методы квантовой теории магнетизма, Наука, Москва, 1965.
2. Н.М. Плакида, Т. Шиклош, Препринт ОИЯИ, Р3449, Дубна, 1967.
Acta Phys. Hung (в печати)
3. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, Мир, Москва, 1965.
4. Н.М. Плакида, Т. Шиклош, Препринт ОИЯИ, Р-3706, Дубна, 1968.
Phys. Letters 26 A, 342 (1968).

Рукопись поступила в издательский отдел
8 апреля 1968 года