Теор. и матем. физика, 1971, т.8, №1, р.119-129

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 5428

Г. Конвент, Н.М. Плакида

ФОНОНЫ В ФЕРРОМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛЕ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 5428

Г. Конвент,* Н.М. Плакида

ФОНОНЫ В ФЕРРОМАГНИТНОМ КРИСТАЛЛЕ

Направлено в журнал "Теоретическая и математическая физика"

* Институт теоретической физики Вроцлавского университета.

В работах[1-4] было рассмотрено спин-фононное взаимодействие в ферромагнитных кристаллах с учётом эффектов ангармонизма колебаний атомной решетки. При определении частоты колебаний решетки ферромагнитного кристалла рассматривалось простейшее приближение самосогласованных фононов, не учитывающее их затухание.

В настоящей работе на основе методики, развитой в работах[5,6], формулируется общий метод определения частоты и затухания колебаний решетки ферромагнитного кристалла при учёте ангармонических членов всех порядков в гамильтониане системы. При этом показано, что как частота фононов, так и их затухание определяются эффективным взаимодействием, существенно зависящим от состояния спиновой подсистемы. Более подробно рассмотрены простейшие процессы неупругого рассеяния самосогласованных фононов, обусловленные эффективным кубическим ангармонизмом. Подобные процессы обычно не учитываются при исследовании затухания фононов в ферромагнетиках (см., например[7-9]), хотя они могут давать существенный вклад при определенных условиях.

В разделе 1 на основе модели Гейзенберга рассмотрен гамильтониан ангармонического ферромагнитного кристалла. В разделе 2 получено общее уравнение для неприводимых функций Грина, описывающих распространение самосогласованных фононов и неупругие процессы их рассеяния. Получено выражение для эффективного фонон-фононного и спин-фононного взаимодействий. В разделе 3 рассмотрены трехфононные неупругие процессы рассеяния самосогласованных фононов и получено выражение для массового оператора в этом приближении.

1. Гамильтониан системы

Рассмотрим для простоты однодоменный ферромагнитный кристалл, состоящий из N одинаковых атомов, равновесные положения которых образуют решетку Браве. Предположим, что взаимодействие атомных спинов можно описать изотропным гамильтонианом Гейзенберга, так что полный гамильтониан решетки может быть представлен в виде[1]

$$\mathcal{H} = H_\ell + H_s . \tag{1}$$

$$H_\ell = -\frac{1}{2M} \sum_\ell \nabla_\ell^2 + U(\vec{R}_1 \dots \vec{R}_N), \tag{1a}$$

$$H_s = -\mu_B H^z \sum_\ell S_\ell^z - \frac{1}{2} \sum_{\ell m}{}' J(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m)\, \vec{S}_\ell \cdot \vec{S}_m , \tag{1б}$$

где $\vec{R}_\ell$ - координаты атомов, имеющих спин $\vec{S}_\ell$ и массу M в узлах решетки ℓ , $U(\vec{R}_1 \dots \vec{R}_N)$ - потенциальная энергия взаимодействия атомов решетки, $J(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m)$ - обменный интеграл. μ_B - магнетон Бора, H - внешнее магнитное поле.

Определим равновесное положение атомов ℓ_a согласно равенству $R_\ell^a = \langle R_\ell^a \rangle + u_\ell^a \equiv \ell_a + u_\ell^a$,где статистическое среднее $<...>$ берется по равновесному состоянию кристалла с гамильтонианом (1). Разложим далее потенциальную энергию кристалла $U(\vec{R}_1 \ldots \vec{R}_N)$ и обменный интеграл $J(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m)$ в бесконечный ряд по тепловым смещениям атомов u^a_ℓ. Введем при этом фурье-разложение для операторов смещений и спинов согласно равенствам

$$u^a_\ell = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{\vec{k}j} e^a_{\vec{k}j} \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{\ell}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}j}}} A_{\vec{k}j}, \tag{2}$$

$$S^a_\ell = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q S^a_q \, e^{i\vec{q}\cdot\vec{\ell}}, \tag{3}$$

где вектора поляризации $\vec{e}_{\vec{k}j}$ и частоты $\omega_{\vec{k}j}$ будут определены далее (см. раздел 2). В результате гамильтониан (1) принимает вид:

$$H_\ell = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k B^+_k B_k + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n}^{\infty} V_n(1\ldots n) A_1 \ldots A_n, \tag{4}$$

$$H_s = -\mu_B H^z \sqrt{N} S_0 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n q q'} J_n(qq'; 1\ldots n) A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}. \tag{5}$$

Здесь $1 = k_1 \equiv (\vec{k}_1, j_1)$ и т.д. и введены операторы $A_{\vec{k}j} = a_{\vec{k}j} + a^+_{-\vec{k}j}$ и $B_{\vec{k}j} = a_{\vec{k}j} - a^+_{-\vec{k}j}$, где $a^+_{\vec{k}j}$ и $a_{\vec{k}j}$ – операторы рождения и уничтожения фононов. Функции взаимодействия (вершины) имеют вид:

$$V_n(1\ldots n)=\frac{\Delta(k_1+\ldots+k_n)}{(2MN)^{n/2}}\sum_{\ell_1\ldots\ell_n} e^{i\vec{k}_1\vec{\ell}_1+\ldots+i\vec{k}_n\vec{\ell}_n}\frac{(\vec{e}_1\cdot\vec{\nabla}_{\ell_1})}{\sqrt{\omega_1}}\cdots\frac{(\vec{e}_n\cdot\vec{\nabla}_{\ell_n})}{\sqrt{\omega_n}}\,U_0(\ell_1\ldots\ell_N), \qquad (6)$$

$$J_n(qq';1\ldots n)=\frac{\Delta(\vec{k}_1+\ldots+\vec{k}_n+\vec{q}+\vec{q}\,')}{2N(2MN)^{n/2}}\sum_{\ell m} e^{i\vec{q}\vec{\ell}+i\vec{q}\,'\vec{m}}\left(e^{i\vec{k}_1\vec{\ell}}-e^{i\vec{k}_1\vec{m}}\right)\ldots\times$$

$$\times\left(e^{i\vec{k}_n\vec{\ell}}-e^{i\vec{k}_n\vec{m}}\right)\frac{(\vec{e}_1\cdot\vec{\nabla}_\ell)}{\sqrt{\omega_1}}\cdots\frac{(\vec{e}_n\cdot\vec{\nabla}_\ell)}{\sqrt{\omega_n}}\,J_0(\vec{\ell}-\vec{m}), \qquad (7)$$

где $\Delta(\vec{q})$ – символ Кронекера для решетки.

2. Неприводимые функции Грина. Самосогласованные фононы

Будем предполагать, что в системе, описываемой гамильтонианом (1), отсутствуют связанные спин-фононные возбуждения и могут существовать достаточно хорошо определенные элементарные возбуждения, обусловленные колебаниями решетки, – фононы. Тогда для определения частот фононов достаточно рассмотреть функцию Грина вида

$$G_{kk'}(t-t')=\langle\langle A_k(t);\ A^+_{k'}(t')\rangle\rangle = \qquad (8)$$

$$=-i\,\theta(t-t')\langle[A_k(t),\ A^+_{k'}(t')]\rangle,$$

где приняты обычные обозначения для запаздывающей двухвременной функции Грина [10]. Учитывая правила коммутации для операторов A_k, B_k, получаем следующее уравненение для функции Грина:

$$i^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{kk'}(t-t') = \delta_{kk'} 2\omega_k \delta(t-t') +$$

$$+ 2\omega_k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\dots n} V_{n+1}(-k1\dots n) \langle\langle A_1 \dots A_n;\ A_{k'}^+(t') \rangle\rangle -$$

$$- 2\omega_k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{qq'1\dots n} J_{n+1}(qq';-k1\dots n) \langle\langle A_1 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}; A_{k'}^+(t') \rangle\rangle . \tag{9}$$

Учитывая предположение о существовании фононов в системе, введем неприводимые функции Грина, что позволит нам просуммировать в уравнении (9) бесконечную последовательность диаграмм самосогласованного поля и определить энергию фононов в приближении самосогласованного фононного поля [6]. Неприводимой (ir) функцией Грина будем называть функцию, которая не может быть приведена путем расцепления по фонон-фононному или спин-фононному взаимодействию к более простым функциям Грина. На диаграммном языке для причинных двухвременных функций Грина неприводимость функции Грина означает, что она не содержит собственно энергетических частей в приближении самосогласованного поля [6]. С учётом симметрии функций Грина в (9) по индексам $1\dots n$ неприводимые функции Грина определяются в виде:

$$\ll A_1(t)\ldots A_n(t);\ A^+_{k'}(t')\gg^{ir} \equiv \ll A_1\ldots A_n|\gg^{ir} =$$

$$= \ll A_1\ldots A_n|\gg - \sum_{m=1}^{n-1} C_n^{n-m} < A_{m+1}\ldots A_n > \ll A_1\ldots A_m|\gg^{ir}, \tag{10}$$

$$\ll A_1\ldots A_n\, \vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'}|\gg^{ir} = \ll A_1\ldots A_n\, \vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'}|\gg -$$

$$- \sum_{m=0}^{n-1} C_n^{n-m} < A_{m+1}\ldots A_n > \ll A_1\ldots A_m\, \vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'}|\gg^{ir} - \tag{11}$$

$$- \sum_{m=1}^{n} C_n^{n-m} < A_{m+1}\ldots A_n\vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'} > \ll A_1\ldots A_m|\gg^{ir},$$

где $C_n^{n-m} = C_n^m = n!/m!(n-m)!$. Эти определения позволяют написать разложение произвольной функции Грина по неприводимым функциям Грина:

$$\ll A_1\ldots A_n|\gg = \sum_{m=1}^{n} C_n^m < A_{m+1}\ldots A_n > \ll A_1\ldots A_m|\gg^{ir} \tag{10a}$$

$$\langle\langle A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | \rangle\rangle = \sum_{m=0}^{n} C_n^m \langle A_{m+1} \ldots A_n \rangle \langle\langle A_1 \ldots A_m \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | \rangle\rangle^{ir} +$$

$$+ \sum_{m=1}^{n} C_n^m \langle A_{m+1} \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} \rangle \langle\langle A_1 \ldots A_m | \rangle\rangle^{ir} . \tag{11a}$$

Используя связь корреляционных функций с функциями Грина, из разложений (10а), (11а) получаем разложение для корреляционных функций /6/:

$$\langle A_1 \ldots A_n \rangle = \sum_{m=1}^{n-1} C_{n-1}^m \langle A_{m+2} \ldots A_n \rangle \{ \langle A_1 \ldots A_{m+1} \rangle^{ir} \} , \tag{12}$$

$$\langle A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} \rangle = \sum_{m=0}^{n} C_n^m \langle A_{m+1} \ldots A_n \rangle \{ \langle A_1 \ldots A_m \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} \rangle^{ir} \} . \tag{13}$$

Подставляя теперь разложения (10а), (11а) в уравнение (9) и переходя к фурье-разложению функций Грина согласно определению

$$G_{kk'}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, e^{-i\omega(t-t')} G_{kk'}(\omega) , \tag{14}$$

получаем уравнение для неприводимых функций Грина:

$$\omega^2 G_{kk'}(\omega) = 2\omega_k \delta_{kk'} + 2\omega_k \sum_{k_1} \tilde{\tilde{\Phi}}_2(-k k_1) G_{k_1 k'}(\omega) +$$

$$+ 2\omega_k \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n} \tilde{\tilde{\Phi}}_{n+1}(-k1\ldots n) \ll A_1 \ldots A_n | \gg_{\omega}^{ir} - \tag{15}$$

$$-2\omega_k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{qq'1\ldots n} \tilde{\tilde{J}}_{n+1}(qq';-k1\ldots n) \ll A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | \gg_{\omega}^{ir} ,$$

где введены функции

$$\tilde{\tilde{\Phi}}_n(1\ldots n) = \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{1'\ldots n'} V_{n+n'}(1\ldots n\, 1'\ldots n') < A_{1'} \ldots A_{n'} > -$$

$$- \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{1}{n'!} \sum_{qq'1'\ldots n'} J_{n+n'}(qq';1\ldots n\, 1'\ldots n') < A_{1'} \ldots A_{n'} \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} > = \tag{16}$$

$$= \frac{\Delta(\vec{k}_1 + \ldots + \vec{k}_n)}{(2MN)^{n/2}} \Big\{ \sum_{\ell_1 \ldots \ell_n} e^{i\vec{k}_1 \vec{\ell}_1 + \ldots + i\vec{k}_n \vec{\ell}_n} \frac{(\vec{e}_1 \cdot \vec{\nabla}_{\ell_1})}{\sqrt{\omega_1}} \ldots \frac{(\vec{e}_n \cdot \vec{\nabla}_{\ell_n})}{\sqrt{\omega_n}} < U(\vec{R}_1 \ldots \vec{R}_N) > -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\ell m} \left(e^{i\vec{k}_1 \vec{\ell}} - e^{i\vec{k}_n \vec{m}}\right) \ldots \left(e^{i\vec{k}_n \vec{\ell}} - e^{i\vec{k}_n \vec{m}}\right) \frac{(\vec{e}_1 \cdot \nabla_\ell)}{\sqrt{\omega_1}} \ldots \frac{(\vec{e}_n \cdot \nabla_\ell)}{\sqrt{\omega_n}} < J(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m) \vec{S}_\ell \cdot \vec{S}_m >,$$

$$\tilde{\tilde{J}}_n(qq';1\ldots n)=\sum_{n'=0}^{\infty}\frac{1}{n'!}\sum_{1'\ldots n'}J_{n+n'}(qq';1\ldots n1'\ldots n')\langle A_{1'}\ldots A_{n'}\rangle=$$

$$=\frac{\Delta(\vec{k}_1+\ldots+\vec{k}_n+\vec{q}+\vec{q}\,')}{2(2MN)^{n/2}N}\sum_{\ell m}e^{i\vec{q}\vec{\ell}+i\vec{q}\,'\vec{m}}\,(e^{i\vec{k}_1\vec{\ell}}-e^{i\vec{k}_1\vec{m}})\ldots(e^{i\vec{k}_n\vec{\ell}}-e^{i\vec{k}_n\vec{m}})\times \tag{17}$$

$$\times\frac{(\vec{e}_1\cdot\nabla\ell)}{\sqrt{\omega_1}}\ldots\frac{(\vec{e}_n\cdot\nabla\ell)}{\sqrt{\omega_n}}\langle J(\vec{R}_\ell-\vec{R}_m)\rangle .$$

Функция $\tilde{\tilde{\Phi}}_n$ описывает эффективное взаимодействие фононов, учитывающее как перенормировку прямого взаимодействия за счёт среднего фононного поля, так и вклад косвенного взаимодействия, обусловленного спин-фононным взаимодействием. Функция $\tilde{\tilde{J}}_n$ описывает ренормированные спин-спиновое $(n=0)$ или спин-фононное $(n\geq 1)$ взаимодействия.

В уравнении (15) мы отдельно выписали член с одночастичной функцией Грина, который определяет частоту колебаний решетки в приближении самосогласованного поля [6]. Действительно, выбирая частоты $\omega_{\vec{k}j}$ и вектора поляризации $\vec{e}_{\vec{k}j}$ согласно уравнению [3]

$$M e^{\alpha}_{\vec{k}j}\,\omega^2_{\vec{k}j} = \frac{1}{N}\sum_{\ell m\beta}\Big\{ e^{-i\vec{k}(\vec{\ell}-\vec{m})}\nabla^{\alpha}_{\ell}\nabla^{\beta}_{m}\langle U(\vec{R}_1\ldots\vec{R}_N)\rangle -$$

$$-(1-e^{-i\vec{k}(\vec{\ell}-\vec{m})})\ \nabla^{\alpha}_{\ell}\,\nabla^{\beta}_{\ell}\langle J(\vec{R}_{\ell}-\vec{R}_m)\vec{S}_{\ell}\cdot\vec{S}_m\rangle\Big\}\ e^{\beta}_{\vec{k}j}\ , \tag{18}$$

получаем для функции $\tilde{\tilde{\Phi}}_2$:

$$2\,\omega_k\,\tilde{\tilde{\Phi}}_2\,(-k\,k_1) = \omega^2_k\,\delta_{k k_1}\,. \tag{19}$$

Теперь уравнение (15) может быть записано в более удобном виде:

$$G_{kk'}(\omega) = G^0_k(\omega)\,\delta_{kk'} +$$

$$+\,G^0_k(\omega)\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{1\ldots n}\tilde{\tilde{\Phi}}_{n+1}(-k1\ldots n)\langle\langle A_1\ldots A_n|\rangle\rangle^{ir}_{\omega} - \tag{20}$$

$$-\,G^0_k(\omega)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{qq'1\ldots n}\tilde{\tilde{J}}_{n+1}(qq';-k1\ldots n)\langle\langle A_1\ldots A_n\,\vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'}|\rangle\rangle^{ir}_{\omega}\ ,$$

где введена функция Грина

$$G_k^0(\omega) = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2}, \qquad (21)$$

которая описывает распространение "самосогласованного" фонона в ферромагнитном кристалле. Самосогласованность вычислений здесь достигается тем, что при определении эффективных взаимодействий (16), (17) корреляционные функции вычисляются по функциям Грина, например, парная корреляционная функция – первый член в разложении (12),(13) – имеет вид:

$$\langle A_k^+ A_{k'} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \,\mathrm{cth}\, \frac{\omega}{2\theta} [-\mathrm{Im}\, G_{kk'}(\omega + i\epsilon)]. \qquad (22)$$

Введение самосогласованных фононов согласно уравнению (18) позволяет учесть сильный ангармонизм колебаний атомов в среднем – в приближении самосогласованного фононного поля, так что предположение о наличии хорошо определенных элементарных возбуждений, сделанное в начале этого раздела, по существу означает, что неупругие процессы рассеяния фононов, определяемые неприводимыми функциями Грина в суммах (20), не должны играть существенной роли. Эффективность последних значительно снижается благодаря перенормировке вершин V_n и J_n в самосогласованном фононном поле, поскольку эта перенормировка, согласно (16), (17), сводится к усреднению затравочных потенциалов по области тепловых смещений атомов, что уменьшает сам потенциал и делает его более "мягким" /11/.

3. Затухание самосогласованных фононов

В этом разделе мы рассмотрим неупругие процессы рассеяния фононов низшего порядка, приводящие к затуханию самосогласованных фононов. Удерживая в точном уравнении (20) только первые члены в суммах, получаем приближенное уравнение для функции Грина (8):

$$G_{kk'}(\omega) = G_k^0(\omega)\,\delta_{kk'} + G_k^0(\omega)\,\frac{1}{2}\sum_{k_1 k_2}\tilde{\tilde{\Phi}}_3(-kk_1k_2) \ll A_{k_1} A_{k_2} \mid \gg_\omega -$$

$$- G_k^0(\omega) \sum_{qq'} \tilde{\tilde{J}}_1(qq';-k) \ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} \mid \gg_\omega \, . \qquad (23)$$

Двухчастичная функция Грина

$$G^{(1)}_{pp',k'}(t-t') = \ll A_p(t)\, A_{p'}(t);\; A^+_{k'}(t') \gg \qquad (24а)$$

и связанные с ней функции

$$G^{(2)}_{pp',k'}(t-t') = \ll B_p(t) A_{p'}(t);\; A^+_{k'}(t') \gg , \qquad (24б)$$

$$G^{(3)}_{pp',k'}(t-t') = \ll B_p(t)\, B_{p'}(t);\; A^+_{k'}(t') \gg , \qquad (24в)$$

описывают все возможные процессы рассеяния с участием трех фононов. Получим систему уравнений для этих функций Грина. Дифференцируя функции (24) по времени t и переходя к фурье-представлению, получаем:

$$\omega G^{(1)}_{pp'k'}(\omega) = \omega_p G^{(2)}_{pp'k'}(\omega) + \omega_{p'} G^{(2)}_{p'pk'}(\omega) , \tag{25а}$$

$$\omega G^{(2)}_{pp'k'}(\omega) = \omega_{p'} G^{(3)}_{pp'k'}(\omega) + 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n} V_{n+1}(-p1\ldots n) \langle\langle A_1 \ldots A_n A_{p'} | \rangle\rangle_\omega -$$

$$-2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{qq'1\ldots n} J_{n+1}(qq'; -p1\ldots n) \langle\langle A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} A_{p'} | \rangle\rangle_\omega , \tag{25б}$$

$$\omega G^{(3)}_{pp'k'}(\omega) = 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n} V_{n+1}(-p1\ldots n) \langle\langle A_1 \ldots A_n B_{p'} | \rangle\rangle_\omega -$$

$$-2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{qq'1\ldots n} J_{n+1}(qq'; -p1\ldots n) \langle\langle A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} B_{p'} | \rangle\rangle_\omega + \tag{25в}$$

$$+2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1\ldots n} V_{n+1}(-p'1\ldots n) \langle\langle B_p A_1 \ldots A_n | \rangle\rangle_\omega -$$

$$-2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{qq'1\ldots n} J_{n+1}(qq'; -p'1\ldots n) \langle\langle B_p A_1 \ldots A_n \vec{S}_q \vec{S}_{q'} | \rangle\rangle_\omega .$$

Для многофононных функций Грина в правых частях уравнений (25) воспользуемся разложением (10а), (11а) по неприводимым функциям Грина. При этом мы сохраним, так же как и в уравнении (23), только низшие члены разложения, например:

$$\ll A_1 \dots A_n A_{p'} \,|\gg \approx n < A_2 \dots A_n > \ll A_1 A_{p'} \,|\gg +$$

$$+ n < A_2 \dots A_n A_{p'} > \ll A_1 |\gg \ , \qquad (26а)$$

$$\ll A_1 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} A_{p'} |\gg \approx < A_1 \dots A_n A_{p'} > \ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} |\gg +$$

$$+ n < A_2 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} > \ll A_1 A_{p'} |\gg + \qquad (26б)$$

$$+ n < A_2 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} A_{p'} > \ll A_1 \ |\gg .$$

Корреляционные функции в (26) также разложим по неприводимым функциям согласно (12), (13), где удержим лишь простейшие неприводимые функции, например:

$$< A_1 \dots A_n A_{p'} > \approx n < A_1 A_{p'} >^{ir} < A_2 \dots A_n > , \qquad (27а)$$

$$< A_1 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} A_{p'} > \approx n < A_1 A_{p'} >^{ir} < A_2 \dots A_n \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}) \ . \qquad (27б)$$

Подставляя принятые разложения в уравнение (24б), получим:

$$\omega\ G^{(2)}_{pp'k'}(\omega)=\omega_{p'}\ G^{(3)}_{pp'k'}(\omega)+\omega_{p}\ G^{(1)}_{pp'k'}(\omega)\ +$$

$$+2<A^{+}_{p'}A_{p'}>\sum_{p_1}\tilde{\tilde{\Phi}}_3(-p,-p',p_1)\,G_{p_1k'}(\omega)-\qquad(25г)$$

$$-2<A^{+}_{p'}A_{p'}>\sum_{qq'}J_2(qq';-p,-p')\langle\langle\vec{S}_q\cdot\vec{S}_{q'}|A^{+}_{k'}\rangle\rangle_{\omega}\ ,$$

где мы учли равенство (19) и определения (16), (17). При подстановке разложений (26), (27) в уравнение (25в) оно принимает вид, подобный (25г), где, однако, в правой части стоят комбинации корреляционных функций типа

$$<A^{+}_{p'}B_{p'}>+<B_{p}A^{+}_{p}>=-1+1=0\,.$$

Последнее равенство следует из правила сумм для фононной функции Грина:

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\omega}{2\omega_k}\,d\omega\,[-\mathrm{Im}\,G_{kk'}(\omega+i\epsilon)]=\delta_{kk'}\ ,$$

которое легко получить непосредственно из уравнений движения для операторов A_k, B_k. В результате последнее уравнение (25в) принимает простой вид:

$$\omega\,G^{(3)}_{pp'k'}(\omega)=\omega_{p}\,G^{(2)}_{p'pk'}(\omega)+\omega_{p'}\,G^{(2)}_{pp'k'}(\omega)\,,\qquad(25д)$$

где использовано равенство (19). Решая теперь полученную приближенную систему уравнений (25а), (25г), (25д), находим выражение для функции Грина (24а):

$$G^{(1)}_{pp'k'}(\omega) = F(p,p',\omega)\, 2 \sum_{k_1} \tilde{\tilde{\Phi}}_{3}(-p,-p',k_1)\, G_{k_1k'}(\omega) -$$

$$-F(p,p',\omega)\, 2 \sum_{qq'} \tilde{\tilde{J}}_{2}(qq';-p,-p') \langle\langle \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | A^{+}_{k'} \rangle\rangle_{\omega} , \tag{28}$$

где

$$F(p,p',\omega) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(N_p+N_{p'})(\omega_p+\omega_{p'})}{\omega^2-(\omega_p+\omega_{p'})^2} - \frac{(N_p-N_{p'})(\omega_p-\omega_{p'})}{\omega^2-(\omega_p-\omega_{p'})^2} \right\} , \tag{29}$$

$$N_p = \langle A^{+}_{p} A_p \rangle .$$

Таким образом, уравнение (23) принимает следующий вид:

$$G_{kk'}(\omega) = G^{0}_{k}(\omega)\,\delta_{kk'} + G^{0}_{k}(\omega) \sum \Pi^{ph}_{kk_1}(\omega)\, G_{kk'}(\omega) -$$

$$
-G_k^0(\omega)\{\sum_{qq'} \tilde{\tilde{J}}_1(qq';-k) \ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | A_{k'}^{+} \gg_\omega +
$$

$$
+\sum_{pp'} \tilde{\tilde{\Phi}}_3(-k,p,p')F(p,p',\omega) \sum_{qq'} \tilde{\tilde{J}}_2(qq';-p,-p') \ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | A_k^{+} \gg_\omega\}, \tag{30}
$$

где мы ввели фононную часть массового оператора

$$
\Pi_{kk_1}^{ph}(\omega) = \sum_{pp'} \tilde{\tilde{\Phi}}_3(-k,p,p')\Phi_3(-p',-p,k_1)F(p,p',\omega), \tag{31}
$$

определяющую затухание и сдвиг частоты самосогласованных фононов (18) за счет неупругих процессов прямого трехфононного рассеяния. Последний член в уравнении (30) описывает неупругое рассеяние фононов с рождением или поглощением магнитных возбуждений, описываемых функцией $\ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | A_k^{+} \gg_\omega$, причём первая сумма (с вершиной $\tilde{\tilde{J}}_1$) описывает прямые процессы перехода одного фонона в магнитные возбуждения, а вторая сумма описывает последовательный переход одного фонона в пару фононов (вершина $\tilde{\tilde{\Phi}}_3$) и затем в магнитные возбуждения (вершина $\tilde{\tilde{J}}_2$). Вычисление спиновой функции требует привлечения определенной модели для описания магнитных возбуждений (см., например,[7,8]) и поэтому будет рассмотрено нами в отдельной работе. Заметим здесь только, что в низшем приближении по спин-фононному взаимодействию эту функцию можно представить в виде[9]:

$$\ll \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | A^+_{k'} \gg_\omega \approx \sum_{q_1 q'_1 k_1} F_4 (\vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}; \vec{S}_{q_1} \cdot \vec{S}_{q'_1}; \omega) \tilde{\tilde{J}}_1 (q_1 q'_1; k_1) G_{k_1 k'}(\omega),$$

где $F_4 (\vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}; \vec{S}_{q_1} \cdot \vec{S}_{q'_1}; \omega)$ – фурье-компонента временной корреляционной функции четырех спинов. В этом приближении уравнение (30) принимает вид уравнения Дайсона:

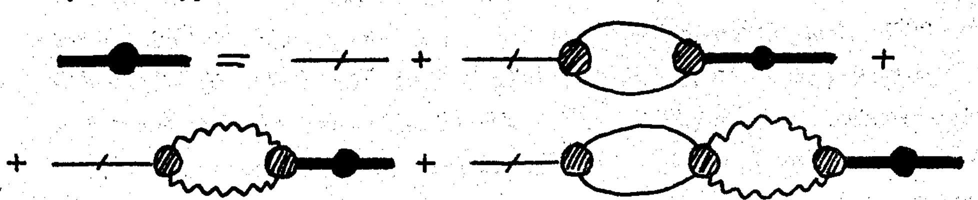
$$G_{kk'}(\omega) = G^0_k(\omega)\delta_{kk'} + G^0_k(\omega) \sum \{ \Pi^{ph}_{kk_1}(\omega) + \Pi^{s-ph}_{kk_1}(\omega) \} G_{k_1 k'}(\omega), \tag{33}$$

где спин-фононная часть массового оператора имеет вид:

$$\Pi^{s-ph}_{kk_1}(\omega) = -\sum_{qq'q_1q'_1}{}' \tilde{\tilde{J}}_1 (q_1 q'_1; k_1) F_4 (\vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'}; \vec{S}_{q_1} \cdot \vec{S}_{q'_1}; \omega) \times \tag{34}$$

$$\times \{ \tilde{\tilde{J}}_1 (qq'; -k) + \sum_{pp'} \tilde{\tilde{\Phi}}_3 (-k, p, p') J_2 (qq'; -p, -p') F(p, p', \omega) \}.$$

Полученное уравнение Дайсона можно графически представить в виде



(35)

где жирная линия соответствует точной функции Грина $G_{kk'}(\omega)$, тонкая линия – функции Грина самосогласованных фононов $G^0_k(\omega)$, волнистая линия схематически представляет распространение магнитных возбуждений $\langle\langle \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{q'} | \rangle\rangle$, заштрихованные кружки обозначают ренормированные вершины $\tilde{\tilde{\Phi}}_3$, $\tilde{\tilde{J}}_1$, $\tilde{\tilde{J}}_2$. Отметим здесь, что при вычислении массового оператора прямых трехфононных процессов (31) в работе /7/ не была учтена перенормировка вершины $\tilde{\tilde{\Phi}}_3$ за счёт косвенного спин-фононного взаимодействия (второй член в (16) при $n=3$), которая может быть существенна вблизи точки Кюри. Последний член (35), обусловленный также эффективным кубическим ангармонизмом, не рассматривался в других работах. Влияние различных процессов в (35) на затухание и сдвиг частоты самосогласованных фононов может быть существенно различным в зависимости от температуры системы. Оценка их, однако, может быть сделана при конкретном выборе модели – вида потенциала $U(\vec{R}_1 \ldots \vec{R}_N)$ и обменного интеграла $J(\vec{R}_\ell - \vec{R}_m)$ – и будет проведена в отдельной работе.

4. Обсуждение

В настоящей работе показано, каким образом можно последовательно определить частоту и затухание фононов в ферромагнитном кристалле с сильным ангармонизмом. Сначала сильный ангармонизм колебаний атомов учитывается в среднем – в приближении самосогласованного фононного поля – путем введения неприводимых функций Грина и частичного суммирования членов при вершинных частях, что приводит к их ренормировке и появлению эффективных взаимодействий $\tilde{\tilde{\Phi}}_n$ (16) и $\tilde{\tilde{J}}_n$ (17). При этом в качестве нулевого приближения возникают самосогласованные фононы (уравнения (18), (21)), рассмотренные ранее в работах /1,3,4/. Остальные члены в точном уравнении (20) описывают затухание и дополнительную перенормировку частоты только за счёт неупругих процессов рассеяния фононов. Относительно просто можно рассмотреть только низшие процессы рассеяния, в которых участвует небольшое число элементарных возбуждений. В разделе 3 такой расчёт при учёте трехфононных процессов рассеяния проведен. Вклад процессов более высокого порядка может быть учтён подобным же образом составлением соответствующей системы уравнений для неприводимых функций Грина более высокого порядка.

Отметим в заключение, что гамильтониан типа (1) может быть использован для описания не только ферромагнитных кристаллов, но и других систем, например сегнетоэлектриков с водородной связью /12/ или кристаллов, где возможен обмен атомов между узлами решетки, как в ^{3}He /13/. В этих системах ангармонизм колебаний атомов весьма велик, так что обычное гармоническое приближение не имеет области применимости, и поэтому развитая здесь теория может быть использована с некоторыми видоизменениями для описания фононного спектра этих систем.

Литература

1. С.В. Тябликов, Г. Конвент. Препринт ОИЯИ, Р4-3794, Дубна, 1968; Phys.Lett., 27A, 130 (1968).
2. Г. Конвент. Препринт ОИЯИ, Р4-4028, Дубна, 1968; Phys.Lett., 28A, 237 (1968).
3. Г. Конвент, Н.М. Плакида. ТМФ, 3, 135 (1970).
4. Н.М. Плакида. Phys.Lett., 32A, 134 (1970).
5. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. Phys.Stat.Sol., 33, 103 (1969).
6. Н.М. Плакида. ТМФ, 5, 148 (1970).
7. E. Pytte. Ann.Phys. (N.Y.), 32, 377 (1965); H.S. Bennett, E. Pytte. Phys.Rev., 155, 533 (1967).
8. R. Silberglitt. Phys.Rev., 188, 786 (1969).

9. G. Meissner. Preprint, München, 1970.
10. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
11. Ph. H. Choquard. The Anharmonic Crystal, Benjamin, New-York, 1967.
12. P.G.De Gennes. Solid State Commun., 1, 137 (1963).
13. L.H. Nosanow, C.M. Varma. Phys.Rev., 187, 660 (1969).

Рукопись поступила в издательский отдел
26 октября 1970 года.