ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 5999

Г. Конвент, Н.М. Плакида

К ТЕОРИИ СПИН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1971

P4 - 5999

Г. Конвент,* Н.М. Плакида

К ТЕОРИИ СПИН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Направлено в ***Physics Letters***

* Институт теоретической физики Вроцлавского университета, Вроцлав, ПНР.

В недавних работах [1-3] была развита самосогласованная теория спин-фононного взаимодействия в ангармонических кристаллах на основе метода двухвременных функций Грина. Подобный же подход, основанный на вариационной процедуре в методе функций Грина, где в массовом операторе фононной функции Грина было учтено влияние четырех-спиновых корреляций, предложен в [4]. В настоящей работе приведен явный учет этих корреляций, а также спин-фононных корреляций высших порядков на основе метода дифференцирования функций Грина по двум временам, примененного в [5] при вычислении свободной энергии ангармонического кристалла.

Рассмотрим магнитный ангармонический кристалл, гамильтониан которого представим в виде [1-3]:

$$H = -\frac{1}{2M}\sum_{\ell}\vec{\nabla}_{\ell}^{2} + U(\ldots\vec{R}_{\ell}\ldots) - \frac{1}{2}\sum_{\ell m} J(\vec{R}_{\ell}-\vec{R}_{m})\vec{S}_{\ell}\cdot\vec{S}_{m}\ , \qquad (1)$$

где $\vec{R}_{\ell}$ – координата атома со спином $\vec{S}_{\ell}$ и массой M в узле решетки $\vec{x}_{\ell} = \langle\vec{R}_{\ell}\rangle$, усреднение $\langle\ldots\rangle$ проводится по равновесному состоянию кристалла с гамильтонианом (1). Представляя потенциальную энергию кристалла $U(\ldots\vec{R}_{\ell}\ldots)$ и обменную энергию $J(\vec{R}_{\ell}-\vec{R}_{m})$ в виде бесконечного ряда по тепловым смещениям атомов $\vec{u}_{\ell}=\vec{R}_{\ell}-\vec{x}_{\ell}$, получим уравнение для фурье-компоненты запаздывающей функции Грина $G_{ll'}(t-t')=\langle\langle u_l(t); u_{l'}(t')\rangle\rangle, (i=\ell, a)$ [2,3] в виде:

$$G_{ll'}(\omega)=G^0_{ll'}(\omega)+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{j1\ldots n}G^0_{lj}(\omega)\tilde{\tilde{\Phi}}_{j1\ldots n}\langle\langle u_1\ldots u_n\,|\,u_{l'}\rangle\rangle^{ir}_{\omega}-$$

$$-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{j\ell m}\sum_{1\ldots n}G^0_{lj}(\omega)\langle\langle u_1\ldots u_n\vec{S}_\ell\cdot\vec{S}_m\,|u_{l'}\rangle\rangle^{ir}_{\omega}\nabla_j\nabla_1\ldots\nabla_n\frac{1}{2}\langle J(\vec{R}_\ell-\vec{R}_m)\rangle,$$

где мы ввели неприводимые (ir) функции Грина, которые не могут быть упрощены спариванием операторов, относящихся к одному моменту времени [3], и ввели эффективное фонон-фононное взаимодействие:

$$\tilde{\tilde{\Phi}}_{1\ldots n}=\nabla_1\ldots\nabla_n\,[\langle U(\ldots\vec{R}_\ell\ldots)\rangle-\frac{1}{2}\sum_{\ell m}\langle J(\vec{R}_\ell-\vec{R}_m)\vec{S}_\ell\cdot\vec{S}_m\rangle]. \qquad (3)$$

Нулевая функция Грина определяется уравнением

$$\sum_j(M\omega^2\delta_{lj}-\tilde{\tilde{\Phi}}_{lj})G^0_{jl'}(\omega)=\delta_{ll'}, \qquad (4)$$

и описывает распространение самосогласованных фононов [2,3].

Для учета затухания фононов рассмотрим далее уравнение для неприводимых функций Грина $\langle\langle A(t); u_{l'}(t')\rangle\rangle^{ir}$ в правой части (2), дифференцируя их по времени t'. В результате уравнение (2) можно записать в матричном виде $G=G^0+G^0PG^0$, где матрица $P_{ll'}(\omega)$ равна сумме четырех произведений, составленных из функций Грина $\langle\langle A\,|\,B\rangle\rangle^{ir}_{\omega}$ ($A, B=\{u_1\ldots u_n$ или $u_1\ldots u_n\vec{S}_\ell\cdot\vec{S}_m$) и двух соответствующих вершин фонон-фононного или спин-фононного взаимодействия (отметим, что $\langle[A, u_{l'}]\rangle^{ir}=0$). Определяя массовый оператор Π функции Грина согласно уравнению $G=G^0+G^0\Pi G$, получаем

$$\Pi_{ll'}(\omega+i\epsilon)=\{P[1+G^0P]^{-1}\}_{ll'}=$$

$$\approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'+i\epsilon}\left(e^{\frac{\omega'}{\theta}}-1\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}\, e^{-i\omega' t}\left\{\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\sum_{ll'}<u_l(t)u_{l'}>\nabla_l\nabla_{l'}\right)^n\times\right.$$

$$\times \tilde{\tilde{\Phi}}_i(\ldots \vec{x}_l \ldots)\tilde{\tilde{\Phi}}_{i'}(\ldots \vec{x}_{l'}\ldots) + \tag{5}$$

$$+\exp\left(\sum_{ll'}<u_l(t)u_{l'}>\nabla_l\nabla_{l'}\right)\frac{1}{4}\sum_{\ell m \ell' m'} <\vec{S}_\ell(t)\cdot\vec{S}_m(t)\vec{S}_{\ell'}\cdot\vec{S}_{m'}>\times$$

$$\left.\times \nabla_i <J(\vec{R}_\ell-\vec{R}_m)>\nabla_{i'}<J(\vec{R}_{\ell'}-\vec{R}_{m'})>\right\},$$

где приближенное выражение получено во втором порядке по спин-фононному и полному фонон-фононному взаимодействию (3). При этом было использовано спектральное представление запаздывающих функций Грина $\langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega$ через временные корреляционные функции. Полученное выражение для массового оператора (5) учитывает вклад всех процессов неупругого фонон-фононного рассеяния (первый член в фигурных скобках), а также процессов неупругого рассеяния фононов на спиновых возбуждениях (член с временной корреляционной функцией четырех спинов) с дополнительным возбуждением фононов ($\exp(\ldots)$ во втором члене) (ср. с /4/). Временные корреляционные функции смещений в (5) вычисляются по полной функции Грина $G_{ll'}(\omega)$, а временные корреляционные функции спинов могут быть определены в некотором приближении по соответствующей спиновой функции Грина, уравнения для которой подобным же методом будут рассмотрены в отдельной работе.

Отметим, что развитый метод непосредственно обобщается на случай систем с произвольным спин-спиновым взаимодействием.

Литература

1. С.В. Тябликов, Г. Конвент. Phys.Letters, <u>27A</u>,130 (1968).
2. Г. Конвент, Н.М. Плакида, ТМФ, <u>3</u>, 135 (1970).
3. Г. Конвент, Н.М. Плакида. ТМФ <u>8</u>, 119 (1971).
4. G. Meissner. Z. Physik, <u>237</u>, 272 (1970).
5. Н.М. Плакида. Препринт ОИЯИ Р4-5948, Дубна, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел

12 августа 1971 года.