ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 8575

Б.В.Мощинский, В.К.Федянин

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ТОЧНЫЕ МЕТОДЫ В ЗОННОЙ ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА

1975

P4 - 8575

Б.В.Мощинский, В.К.Федянин

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ТОЧНЫЕ МЕТОДЫ В ЗОННОЙ ТЕОРИИ МАГНЕТИЗМА

Направлено в ТМФ

Мошинский Б.В., Федянин В.К. P4 - 8575

Асимптотически точные методы в зонной теории магнетизма

Техникой Н.Н.Боголюбова (мл.) рассмотрен модельный гамильтониан, учитывающий наряду с обменным взаимодействием и эффекты кулоновского взаимодействия. На базе аппроксимирующего гамильтониана, термодинамически эквивалентного исходному, получена и обсуждена система нелинейных интегральных уравнений для параметров упорядочения.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1975

Moshinsky B.V., Fedyanin V.K. P4 - 8575

Asymptotically Exact Methods in the Band Theory of Magnetism

The model Hamiltonian, that takes into account the Coulomb interaction effects side by side with the exchange interaction, was considered by the Bogolubov (Jr.) method. On the basis of the approximating Hamiltonian, thermodynamically equivalent to the initial one, there was obtained and discussed the system of nonlinear integral equations for the ordering parameters.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1975

I. Изучение ферромагнетизма переходных d – металлов в рамках зонной теории удобно проводить с помощью модельного гамильтониана Жирардо – Райта [I]:

(I)
$$\mathcal{H}_m = \sum_k E_k N_k + \frac{1}{2V}\sum_{k,p} Q(k,p) N_k N_p + \frac{1}{2V}\sum_{k,p} J(k,p)\, S_k S_p ,$$

где:
$$N_k = \sum_\sigma C^+_{k,\sigma} C_{k,\sigma} , \quad S^z_k = \sum_\sigma \sigma C^+_{k,\sigma} C_{k,\sigma} ,$$

(2)
$$S^+_k = S^x_k + i S^y_k = C^+_{k\uparrow} C_{k\downarrow} , \quad S^-_k = S^x_k - i S^y_k = C^+_{k\downarrow} C_{k\uparrow} .$$

$C^+_{k,\sigma}$, $C_{k\sigma}$ – Ферми-операторы рождения и уничтожения блоховских электронов со спином $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ в одночастичных состояниях, описываемых блоховскими функциями $\psi_k(r)$, которые являются решениями уравнения Шредингера для электрона в поле решетки ионов:

(3)
$$\left[\frac{p^2}{2m} + \sum_f V_f(r)\right]\psi_k(r) = E(k)\,\psi_k(r) .$$

Здесь $V_f(r)$ – потенциал, создаваемый ионом, находящимся в узле f. Операторы (2) удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[N_k, N_q]_- = 0 , \quad [S^z_k, S^z_{k'}]_- = 0 , \quad [N_k, S^z_q] = 0 ,$$

(4)
$$[S^+_k S^z_q] = -S^+_k \delta_{kq} , \quad [S^-_k, S^z_q] = +S^-_k \delta_{kq} , \quad [S^+_k, S^-_q] = 2 S^z_q \delta_{kq} .$$

Соображение, которым руководствовались Жирардо и Райт при выборе модельного гамильтониана (I) для описания ферромагнетизма коллективизированных электронов, следующее: общий однозонный гамильтониан электронов в кристалле с учетом их парного взаимодействия с потенциалом $\phi(r_1 - r_2)$

(5)
$$\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma} E(k)\, C^+_{k\sigma} C_{k,\sigma} + \frac{1}{2V}\sum_{kpq}\sum_{\sigma,s}{}' \langle kp|\phi|p+q, k-q\rangle\, C^+_{k,\sigma} C^+_{p,s} C_{p+q,s} C_{k-q,\sigma}$$

достаточно сложен. Поэтому представляется разумным ограничиться модельным гамильтонианом, который бы включал в себя те члены взаимодействия электронов в $\mathcal{H}$, которые наиболее существенны для описания ферромагнетизма переходных d – металлов. Заметим, что эта идея аналогична идее Бардина, Купера, Шриффера при построении модельного гамильтониана теории сверхпроводимости [2]. Для описания ферромагнетизма переходных d – металлов в рамках зонной теории определяющими ферромагнитное упорядочение членами в H являются члены обменного взаимодействия блоховских электронов, то есть имеющие операторную структуру $S_k^\alpha S_p^\beta$, $\alpha,\beta = x,y,z$; и члены прямого кулоновского отталкивания блоховских электронов, имеющие операторную структуру $n_{k,\sigma} n_{p,s}$ [3]. Оставляя только такие члены взаимодействия в гамильтониане (5), мы и придем к модельной задаче Жирардо – Райта (I).

В данной работе предлагается математически строгое исследование модели (I), основанное на минимаксной технике Н.Н.Боголюбова (мл) [4,5] и теории интегральных уравнений Хаммерштейна [6,7].

2. Мы предположим, что ядра взаимодействий в (I) сепарабельны и имеют вид:

(6) $$Q(k,p) = \lambda(k)\cdot\lambda(p), \quad J(kp) = -\chi(k)\cdot\chi(p).$$

Введем операторы:

(7) $$P = \frac{1}{2V}\sum_k \lambda(k) N_k, \quad L = \frac{1}{2V}\sum \chi(k) S_k.$$

Тогда:

(8) $$\mathcal{H}_m = \sum E(k) N_k + 2VP^2 - 2VL^2.$$

Операторы (7) удовлетворяют условиям:

(9) $$\|L^\alpha\| \le m_1, \ \alpha = x,y,z; \quad \|P\| \le m_2; \quad [PL]_- = 0$$
$$\|[L^z, L^+]\| \le \frac{m_3}{V}; \quad \|[L^z, L^-]\| \le \frac{m_3}{V}; \quad \|[L^+, L^-]\| \le \frac{m_4}{V},$$

где

(10) $$m_1 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int|\chi(k)|\,dk, \quad m_2 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int|\lambda(k)|\,dk,$$
$$m_3 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\chi^2(k)\,dk, \quad m_4 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\lambda^2(k)\,dk.$$

Необходимым условием применения техники мажорационных оценок Н.Н.Боголюбова (мл) [5] является конечность величин m_i, $i=1,\dots,4$, что и будет нами далее предполагаться.

Введем аппроксимирующий гамильтониан:

(11) $$\mathcal{H}_A = \sum E(k) N_k + 2V(2aP^2 - a^2) - 2V(2bL - b^2),$$

где a и b^α ($\alpha = x,y,z$) пока произвольные параметры. Добавим к гамильтонианам $\mathcal{H}_m$ и $\mathcal{H}_A$ члены взаимодействия блоховских электронов с внешним магнитным полем:

(12) $$\mathcal{H}_m = \mathcal{H}_m - h\sum_k S_k^z, \quad \mathcal{H}_A = \mathcal{H}_A - h\sum_k S_k^z.$$

На основании неравенства Н.Н.Боголюбова для плотности свободных энергий [8] можем написать:

(13) $$2\langle (L-b)^2\rangle_{A'} \le [f_V(\mathcal{H}_{A'}) - f_V(\mathcal{H}_m)] \le 2\langle (L-b)^2\rangle_m,$$
$$2\langle (P-a)^2\rangle_{A'} \le [f_V(\mathcal{H}_{A'}) - f_V(\mathcal{H}_A)] \le 2\langle (P-a)^2\rangle_A,$$

где мы ввели "промежуточный" гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{A'} = \sum_k E(k) N_k + 2VP^2 - 2V(bL - b^2).$$

Математическим следствием неравенств (13) является принцип минимакса [5]:

(14) $$|f_V(\mathcal{H}_m) - \min_b \max_a f_V(\mathcal{H}_A)| \le 2\langle (P - \langle P\rangle_A)^2\rangle_A + 2\langle (L - \langle L\rangle_m)^2\rangle_m.$$

Мажорационную оценку для $\langle (P - \langle P\rangle_A)^2\rangle_A$ легко получить на основании теоремы Вика-Блоха-Доминисиса [9] применительно к гамильтониану $\mathcal{H}_A$:

(15) $$\langle (P-\langle P\rangle_A)^2\rangle_A \le \frac{1}{4V^2}\sum'_{k,p}\lambda(k)\lambda(p)\left(\langle N_k N_p\rangle_A - \langle N_k\rangle_A\langle N_p\rangle_A\right) \le \frac{m_4}{V}.$$

Дальнейшее доказательство основывается на методе, предложенном в работе [4].

Введем вспомогательные гамильтонианы:

(16) $$\Gamma_r = \mathcal{H}_r - V\nu L, \quad 0\le \nu_\alpha \le \nu_0, \quad \alpha=x,y,z; \quad r=m,A.$$

Тогда на основании (4),(9),(16):

(17) $$\| [\Gamma_m, L^\alpha] \| \le \nu_0 m_3 + |h|\cdot m_1 .$$

Из формулы операторного дифференцирования:

(18) $$-\frac{\partial^2 f_V(\Gamma_m)}{\partial \nu_\alpha^2} = V\beta\int_0^1 \frac{Sp\{(L_\alpha-\langle L_\alpha\rangle)e^{-\beta x \Gamma_m}(L_\alpha - \langle L_\alpha\rangle)e^{-(1-x)\beta\Gamma_m}\}dx}{Sp\exp(-\beta\Gamma_m)} ,$$

неравенства Гёльдера и (17) следует, что:

(19) $$\langle (L^\alpha - \langle L^\alpha\rangle)^2\rangle \le -\frac{\partial^2 f(\Gamma_m)}{\partial\nu_\alpha^2}\cdot\frac{1}{\beta V} + \left(\frac{\nu_0 m_3+|h|m_1}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\left(-\frac{\partial^2 f_V(\Gamma_m)}{\partial\nu_\alpha^2}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Объединяя (14,15,19), получим:

(20) $$|f_V(\Gamma_m) - \min_b\max_a f_V(\Gamma_A)| \le \frac{2m_4}{V} + \frac{2}{\beta V}\sum_\alpha\left(-\frac{\partial^2 f_V(\Gamma_m)}{\partial\nu_\alpha^2}\right) + 2\left(\frac{\nu_0 m_3+|h|m_1}{V}\right)^{\frac{2}{3}}\sum_\alpha\left(-\frac{\partial^2 f_V(\Gamma_m)}{\partial \nu_\alpha^2}\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Усредняя неравенство (20) по ν с весом $\nu_x\nu_y\nu_z$ в области $[0,\ell]$ ($\ell>0$ произвольно) и используя ограниченность первых производных $\left|\frac{\partial f_V(\Gamma_m)}{\partial\nu_\alpha}\right|\le m_1$, интегральное неравенство Гёльдера и теоремы о среднем, получаем оценку:

(21) $$|f_V(\mathcal{H}_m) - \min_b\max_a f_V(\mathcal{H}_A)| \le \frac{2m_4}{V}+\frac{6m_1}{\beta V} + 6\left(\frac{m_1 m_3}{V}+\frac{|h|\cdot m_1^2}{\ell V}\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Выбирая ℓ из минимума правой части в (21), получим окончательно:

(22) $$|f_V(\mathcal{H}_m) - \min_b\max_a f_V(\mathcal{H}_A)| \le \frac{Const}{V^{2/5}}.$$

Тем самым доказана термодинамическая эквивалентность модельного и аппроксимирующего гамильтониана.

3. Аппроксимирующий гамильтониан (11) может быть записан:

(23) $$\mathcal{H}_A = \sum_{k,\sigma}(T(k)-\sigma\Delta(k))C^+_{k,\sigma}C_{k,\sigma} - \sum_k \left(W(k)C^+_{k\uparrow}C_{k\downarrow}+h.c\right) + 2V(b^2-a^2); \quad T(k)=E(k)+2a\lambda(k)-\mu, \quad W(k)=b^-\chi(k),$$
$$b^-=b^x-ib^y, \quad \Delta(k)=2b^z\chi(k)+h.$$

После канонического преобразования:

(24) $$C_{k,\sigma}=u(k,\sigma)a_{k,\sigma} - v(k,\sigma)a_{k,-\sigma}$$
$$C^+_{k,\sigma}=u^*(k,\sigma)a^+_{k,\sigma} - v^*(k,\sigma)a^+_{k,-\sigma} ,$$

$u(k,\sigma)=(1+\varphi^2)^{-1/2}$, $v(k,\sigma)=\varphi\, u(k,\sigma)$; $\varphi=\sigma\left(\Delta(k)-\sqrt{\Delta^2(k)+|W(k)|^2}\right)$.

Гамильтониан $\mathcal{H}_A$ диагонализуется и приводится к виду:

(25) $$\mathcal{H}_A = \sum_{k,\sigma}\left(T(k)-\sigma\sqrt{\Delta^2(k)+|W(k)|^2}\right)a^+_{k\sigma}a_{k,\sigma}+2V(b^2-a^2)$$

Термодинамический потенциал модельной системы вычисляется точно:

$$f(\Theta,\mu,h,a,b) = -\lim_{V\to\infty} \frac{1}{\beta V} \ln Sp \exp(-\beta H_A) = 2(b^2 - a^2) -$$

(26)

$$- \frac{\Theta}{(2\pi)^3} \int dk \ln\left(1 + e^{-2\beta T(k)} + e^{-2\beta T(k)} ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}\right).$$

Параметры a и b должны быть определены на основании принципа минимакса, что дает:

(27) $$\frac{\partial f}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial b^\alpha} = 0, \quad \alpha = x, y, z.$$

Из (23),(26),(27) для параметров a и b получаем систему нелинейных интегральных уравнений:

$$a = (2\pi)^{-3} \int \lambda(k) \frac{e^{-\beta T(k)} + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}}{ch\beta T(k) + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} dk$$

(28) $$b^z = (2\pi)^{-3} \int \chi(k) \frac{\Delta(k)}{\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} \frac{sh\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}}{ch\beta T(k) + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} dk$$

$$b^- = (2\pi)^{-3} \int \chi(k) \frac{W(k)}{\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} \frac{sh\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}}{ch\beta T(k) + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} dk$$

Уравнения состояния модельной системы имеют вид:

$$S = \frac{1}{V} \sum_k \langle S_k^z \rangle = -\frac{\partial f}{\partial h} = \frac{(2\pi)^{-3}}{2} \int \frac{\Delta(k)\, dk}{\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} \frac{sh\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}}{ch\beta T(k) + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W|^2}}$$

(29)

$$n = \frac{1}{V} \sum_k \langle N_k \rangle = -\frac{\partial f}{\partial \mu} = (2\pi)^{-3} \int \frac{e^{-\beta T(k)} + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}}{ch\beta T(k) + ch\beta\sqrt{\Delta^2(k) + |W(k)|^2}} dk.$$

Уравнения (28) являются интегральными уравнениями типа Хаммерштейна [6] . Исследуем вопрос о существовании точек бифуркации, которые, как известно, связываются точками фазовых превращений в системе [I0] . На основании теорем Хаммерштейна [6,7] первое уравнение (28) при заданном b имеет всегда единственное решение a_0 , которое дает перенормировку зонного

спектра электронов: $E(k) \to E_n(k) = E(k) + 2a_0\lambda(k)$, определяемую прямым кулоновским отталкиванием. Два других уравнения (28) при $h = 0$, помимо тривиального решения $b^\alpha = 0$ и $S = 0$, соответствующего парамагнитному состоянию системы, могут иметь решение $S \neq 0$ (ферромагнитное состояние),если:

(30) $$\rho(k_F)\chi^2(k_F) \geq 1,$$

где $\rho(k_F) = \frac{4\pi k_F^2}{(2\pi)^3 T'_{k_F}}$ – перенормированная плотность электронных состояний на уровне Ферми. Более детальное исследование системы (28) (с привлечением ЭВМ) представило бы значительный интерес в связи с проблемой ферромагнитного упорядочения при наличии кулоновского взаимодействия электронов. Условие (30) есть обобщение условия Стонера возможности спонтанной намагниченности системы коллективизированных электронов [II] .

Отметим в заключение, что решение модельной задачи (I) легко обобщается на более широкий класс сепарабельных взаимодействий вида:

$$Q(k,p) = \sum_{j=1}^{s} g_j \lambda_j^*(k) \lambda_j(p); \quad J(k,p) = \sum_{i=1}^{R} I_i \chi_i^*(k) \chi_i(p)$$

при определенных ограничениях на λ_j, χ_i .

Полученные математически строгие результаты данной работы находятся в согласии с соображениями Жирардо и Райта, основанными на вариационном принципе Н.Н.Боголюбова и термодинамической теории возмущения [I].

Мы признательны Н.Н.Боголюбову (мл) за обсуждение и ценные замечания.

Литература:

I. M.D. Girardeau, D. Wrigt, Physica 38, 464, 1968
2. J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schriffer. Phys. Rev. 108, 1957, 1175
3. C.Herring, "Magnetism" IV, 1965.
4. Н.Н.Боголюбов (мл). Вестник МГУ №I, 1966.
5. Н.Н.Боголюбов (мл). "Метод исследования модельных гамильтонианов". Москва, "Наука", 1974.
6. A. Hammerstein. Acta Math. 54, 117, 1930
7. S. Gartenhaus, G. Stranahan, Phys. Rev. 138, A1347, 1965
8. Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ Р-5II Дубна, 1960.
9. C. Bloch, C. de Dominicis. Nucl. Phys. 7, 459, 1958
IO. M.D. Girardeau, R.M. Mazo, Adv. chem. Phys. 24, 188, 1973
II. E.C. Stoner, Proc. Roy.Soc. A154, 656, 1936

Рукопись поступила в издательский отдел
3I января 1975 года.