имеют вид (в шредингеровском представлении)

$$\hat{m}_x(\mathbf{r}) = (\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kr}} + \hat{a}^+_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{kr}}),$$

$$\hat{m}_y(\mathbf{r}) = i(\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{kr}} - \hat{a}^+_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{kr}}).$$

С помощью этих операторов вычисляем корреляционную функцию

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \langle \hat{m}_i(\mathbf{r}_1)\hat{m}_k(\mathbf{r}_2) + \hat{m}_k(\mathbf{r}_2)\hat{m}_i(\mathbf{r}_1)\rangle, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

(индексы i, k пробегают значения x, y). Учтя, что отличные от нуля диагональные матричные элементы имеют только произведения $\langle \hat{a}^+_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = n_{\mathbf{k}}$, $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}} \rangle = n_{\mathbf{k}} + 1$ (где $n_{\mathbf{k}}$ — числа заполнения состояний магнонов), находим

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} \int 2\beta M \left(n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\right) e^{i\mathbf{kr}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Подынтегральное выражение прямо дает фурье-компоненту корреляционной функции. Постоянный член в ней можно опустить: ему соответствует δ-функционное слагаемое в $\varphi_{ik}(\mathbf{r})$, между тем, как все рассмотрение относится лишь к расстояниям $r \gg a$. Таким образом,

$$\varphi_{ik}(\mathbf{k}) = 2\beta M n_{\mathbf{k}} \delta_{ik} = 2\beta M \left[e^{\varepsilon(\mathbf{k})/T} - 1\right]^{-1} \delta_{ik}.$$

В классическом пределе, при $\varepsilon \ll T$, находим

$$\varphi_{ik}(\mathbf{k}) = \delta_{ik} T / 2\alpha k^2.$$

В кубическом ферромагнетике $\alpha = \text{const}$, и тогда

$$\varphi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} T / 8\pi\alpha r, \quad r \gg (\beta M\alpha/T)^{1/2}.$$

§ 72. Спиновый гамильтониан

Для получения закона дисперсии магнонов во всем интервале изменения квазиимпульса (а не только в длинноволновом пределе) необходимо, разумеется, использовать более детальные представления о микроскопической структуре ферромагнетика.

Рассмотрим диэлектрик, состоящий из атомов с равным нулю орбитальным моментом, но отличным от нуля спином S. Если не интересоваться высоко возбужденными состояниями, связанными с возбуждением электронных оболочек атомов, можно усреднить гамильтониан системы по орбитальным переменным электронов атомов в основном состоянии (и при закрепленных в узлах решетки атомных ядрах). В результате мы получим спиновый гамильтониан системы, содержащий лишь операторы полных спинов атомов[1]).

Если учитывать только обменное взаимодействие, зависящее лишь от относительных ориентаций спинов, то операторы векторов спинов атомов могут входить в гамильтониан лишь в виде

[1]) Такая процедура аналогична тому, как строятся гамильтонианы отдельных атомов, описывающие тонкую структуру их уровней — ср. III § 72.

скалярных комбинаций. Существенный методический интерес представляет исследование системы, описываемой простейшим гамильтонианом такого рода:

$$\hat{H}_{об} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathfrak{m}\neq\mathfrak{n}} J_{\mathfrak{nm}}\hat{S}_{\mathfrak{n}}\hat{S}_{\mathfrak{m}}, \quad J_{\mathfrak{nm}} = J(\mathbf{r}_{\mathfrak{n}} - \mathbf{r}_{\mathfrak{m}}), \qquad (72,1)$$

где суммирование происходит по всем атомам; «векторные» (с целочисленными компонентами) индексы $\mathfrak{m}$ и $\mathfrak{n}$ нумеруют узлы решетки; $\mathbf{r}_{\mathfrak{n}}$ — их радиус-векторы. Числа $J_{\mathfrak{nm}}$ называют *обменными интегралами* (ср. III § 62, задачи)[1]). При независимом суммировании по $\mathfrak{m}$ и $\mathfrak{n}$ каждая пара атомов встречается в сумме (72,1) дважды, причем, конечно, $J_{\mathfrak{nm}} = J_{\mathfrak{mn}}$.

В (72,1) все магнитные атомы в решетке предполагаются одинаковыми (по одному в каждой элементарной ячейке). Основное же предположение, лежащее в основе такого гамильтониана, состоит в достаточной взаимной удаленности атомов в решетке. Обменный интеграл определяется «перекрытием» волновых функций двух атомов и очень быстро (экспоненциально) убывает с увеличением расстояния между ними. Для системы взаимно удаленных атомов можно поэтому считать взаимодействие парным, в связи с чем в (72,1) отсутствуют члены с произведениями операторов спина более чем двух атомов. С этой же точностью можно считать, что обменное взаимодействие между двумя атомами осуществляется каждый раз всего одной парой электронов — по одному из каждого атома. Тогда оператор взаимодействия будет составлен билинейно по операторам спинов электронов, а после усреднения по состояниям атомов — билинейно по атомным спинам (*C. Herring*, 1966)[2]).

Система, описываемая гамильтонианом (72,1), ферромагнитна, если обменные интегралы $J_{\mathfrak{mn}} > 0$. Определим энергию основного состояния такой системы. Допустим при этом наличие также и внешнего магнитного поля $\mathfrak{H}$, добавив к (72,1) оператор

$$\hat{V} = -2\beta\mathfrak{H}\sum_{\mathfrak{m}}\hat{S}_{\mathfrak{m}z} \qquad (72,2)$$

(ось z — в направлении поля). Оператор $\sum\hat{S}_{\mathfrak{m}z}$ проекции полного спина системы коммутативен как с $\hat{H}_{об}$, так и с $\hat{V}$; состояния системы можно поэтому классифицировать по собственным значениям этой величины.

---

[1]) Описание обменного взаимодействия спиновым гамильтонианом было введено *Дираком* (*P. A. M. Dirac*, 1929). Гамильтониан (72,1) введен *ван Флеком* (*J. H. van Vleck*, 1931); его обычно называют гейзенберговским, поскольку он соответствует модели ферромагнетика, впервые рассмотренной *Гейзенбергом*.

[2]) В таких условиях суммирование в (72,1) должно производиться, конечно, лишь по парам соседних атомов. Этим, однако, запись формул никак не упрощается, и потому мы не будем учитывать это условие явным образом.

В ферромагнитном случае основному состоянию отвечает наибольшее возможное значение проекции суммарного спина, равное NS, где N — число атомов в системе (это не связано, конечно, с наличием внешнего поля, которое лишь выделяет избранное направление оси). Пусть χ_0 — нормированная спиновая волновая функция основного состояния.

Максимальное значение NS проекции полного спина может достигаться, лишь если и проекция спина каждого атома имеет свое максимальное значение S. Поэтому χ_0 есть в то же время и собственная функция каждого из операторов $\hat{S}_{\mathbf{n}z}$:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}z}\chi_0 = S\chi_0. \tag{72,3}$$

Введем необходимые для дальнейшего операторы $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$, удовлетворяющие правилам коммутации

$$\hat{S}_+\hat{S}_- - \hat{S}_-\hat{S}_+ = 2\hat{S}_z, \quad \hat{S}_z\hat{S}_\pm - \hat{S}_\pm\hat{S}_z = \pm\hat{S}_\pm \tag{72,4}$$

(см. III (26,12)). Их матричные элементы:

$$\langle S_z|S_+|S_z-1\rangle = \langle S_z-1|S_-|S_z\rangle = \sqrt{(S+S_z)(S-S_z+1)} \tag{72,5}$$

(см. III (27,12)); оператор $\hat{S}_+$ увеличивает, а $\hat{S}_-$ — уменьшает на единицу значение проекции S_z. Далее, пишем

$$\hat{S}_{\mathbf{m}}\hat{S}_{\mathbf{n}} = \hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}z} + \frac{1}{2}(\hat{S}_{\mathbf{m}+}\hat{S}_{\mathbf{n}-} + \hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}+})$$

и затем

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}}(\hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}z} + \hat{S}_{\mathbf{m}-}\hat{S}_{\mathbf{n}+}) - 2\beta\mathfrak{H}\sum_{\mathbf{m}}\hat{S}_{\mathbf{m}z}, \tag{72,6}$$

где использована симметрия $J_{\mathbf{mn}} = J_{\mathbf{nm}}$ и коммутативность операторов, относящихся к разным атомам.

Поскольку операторы $\hat{S}_{\mathbf{n}+}$ имеют матричные элементы лишь для переходов с увеличением чисел S_z, то для состояния с наибольшими значениями этих чисел

$$\hat{S}_{\mathbf{n}+}\chi_0 = 0 \tag{72,7}$$

(что видно также и из явных выражений матричных элементов (72,5)). Поэтому при воздействии гамильтониана (72,6) на волновую функцию χ_0 получается

$$\hat{H}\chi_0 = \left\{-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{m}\neq\mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}}S^2 - 2\beta\mathfrak{H}NS\right\}\chi_0.$$

Выражение в скобках и есть энергия E_0 основного состояния. Заменив суммирование по $\mathbf{m}$ и $\mathbf{n}$ суммированием по $\mathbf{m}$ и по

$\mathbf{q}=\mathbf{n}-\mathbf{m}$, запишем окончательно E_0 в виде

$$E_0=-\frac{1}{2}NS^2\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}}-2\beta SN\mathfrak{H}. \tag{72,8}$$

Полный магнитный момент системы в этом состоянии есть $2\beta SN$.

Следующее, в порядке уменьшения проекции полного спина, состояние системы отвечает значению $NS-1$ указанной проекции; оно соответствует возбуждению одного магнона с магнитным моментом -2β. Таким значением проекции полного спина обладает состояние с волновой функцией

$$(2S)^{-1/2}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0, \tag{72,9}$$

в котором воздействием оператора $\hat{S}_{\mathbf{n}-}$ уменьшена на 1 проекция спина одного из атомов[1]). Эта функция, однако, не является собственной функцией гамильтониана системы; в ней не учтена еще трансляционная симметрия решетки. Собственная функция гамильтониана должна быть построена как линейная комбинация функций (72,9) со всеми номерами $\mathbf{n}$. Те же рассуждения, которые привели нас в § 55 к функциям Блоха для электрона в периодическом поле, показывают, что для правильного учета трансляционной симметрии эта линейная комбинация должна иметь вид

$$\chi_{\mathbf{k}}=(2NS)^{-1/2}\sum_{\mathbf{n}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{n}}}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0 \tag{72,10}$$

(множитель $N^{-1/2}$—нормировочный). Постоянный вектор $\mathbf{k}$ есть не что иное, как квазиимпульс магнона.

Энергия $\varepsilon(\mathbf{k})$ магнона есть разность $E_{\mathbf{k}}-E_0$ между энергиями возбужденного и основного состояний системы. Поэтому

$$(\hat{H}-E_0)\chi_{\mathbf{k}}=\varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}}.$$

Подставив в левую сторону этого равенства выражение (72,10) и заменив затем $E_0\chi_0$ на $\hat{H}\chi_0$, получим

$$\varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}}=(2NS)^{-1/2}\sum_{\mathbf{n}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_{\mathbf{n}}}(\hat{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-}-\hat{S}_{\mathbf{n}-}\hat{H})\chi_0. \tag{72,11}$$

Стоящий здесь коммутатор легко вычислить, записав $\hat{H}$ в виде (72,6) и использовав правила коммутации (72,4). Снова учтя

---

[1]) Нормировку функции (72,9) легко проверить, заметив, что

$$(\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0)^*(\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0)=\chi_0^*\hat{S}_{\mathbf{n}-}^{+}\hat{S}_{\mathbf{n}-}\chi_0\equiv\langle S|S_{\mathbf{n}+}S_{\mathbf{n}-}|S\rangle=$$
$$=\langle S|S_{\mathbf{n}+}|S-1\rangle\langle S-1|S_{\mathbf{n}-}|S\rangle=2S.$$

симметрию коэффициентов $J_{\mathbf{mn}}$, найдем

$$\hat{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-}-\hat{S}_{\mathbf{n}-}\hat{H}=\sum_{\mathbf{m}}{}' J_{\mathbf{mn}}(\hat{S}_{\mathbf{m}z}\hat{S}_{\mathbf{n}-}-\hat{S}_{\mathbf{n}z}\hat{S}_{\mathbf{m}-})+2\beta\mathfrak{H}\hat{S}_{\mathbf{n}-}. \quad (72,12)$$

Наконец, подставив это выражение в (72,11), вспомнив (72,3) и перейдя к суммированию по $\mathbf{q}=\mathbf{n}-\mathbf{m}$, получим

$$\varepsilon(\mathbf{k})\chi_{\mathbf{k}}=\left\{S\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}}\left(1-e^{i\mathbf{kr_q}}\right)+2\beta\mathfrak{H}\right\}\chi_{\mathbf{k}}.$$

Выражение в фигурных скобках есть искомая энергия магнона. Мнимая часть выражения под знаком суммы, будучи нечетной функцией $\mathbf{r_q}$, обращается в нуль в результате суммирования, так что окончательно

$$\varepsilon(\mathbf{k})=S\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}}(1-\cos\mathbf{kr_q})+2\beta\mathfrak{H} \quad (72,13)$$

(*F. Bloch*, 1930).

Эта формула дает точный закон дисперсии магнонов в системе, описываемой гамильтонианом (72,1). В предельном случае малых $\mathbf{k}$ она переходит, естественно, в квадратичный закон:

$$\varepsilon(\mathbf{k})=\frac{1}{2}Sk_ik_k\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}}x_{\mathbf{q}i}x_{\mathbf{q}k}+2\beta\mathfrak{H}. \quad (72,14)$$

Точка Кюри рассматриваемой системы лежит при температуре $T_c\sim J$, так что при температурах $T\gg J$ система уже заведомо парамагнитна. При таких температурах можно, в первом приближении, вовсе пренебречь взаимодействием между атомами. В этом приближении магнитная восприимчивость системы будет совпадать с восприимчивостью идеального газа атомов со спином S и даваться формулой

$$\chi=\frac{N}{V}\frac{4\beta^2S(S+1)}{3T} \quad (72,15)$$

(см. V § 52); восприимчивость отнесена к единице объема. Это выражение является первым членом разложения функции $\chi(T)$ по степеням $1/T$. Следующие члены разложения уже зависят от взаимодействия атомов; определим первый из них.

Восприимчивость (в нулевом поле) определяется как производная $\chi=\partial M/\partial\mathfrak{H}$ при $\mathfrak{H}\to 0$, а намагниченность M вычисляется как производная от свободной энергии: $VM=-\partial F/\partial\mathfrak{H}$. Для решения поставленной задачи надо вычислить F с точностью до членов $\sim 1/T^2$.

Исходим из формулы $F=-T\ln Z$, где Z—статистическая сумма

$$Z=\sum_n e^{-E_n/T}\approx\sum_n\left(1-\frac{E_n}{T}+\frac{E_n^2}{2T^2}-\frac{E_n^3}{6T^3}\right);$$

суммирование производится по всем уровням энергии системы[1]). Полное число уровней в спектре рассматриваемой системы конечно и равно числу всех возможных комбинаций ориентаций атомных спинов относительно решетки. Каждый спин имеет $2S+1$ различных ориентаций; поэтому указанное число есть $(2S+1)^N$. Обозначая чертой над буквой простое арифметическое усреднение, перепишем Z в виде

$$Z=(2S+1)^N\left[1-\frac{1}{T}\overline{E}+\frac{1}{2T^2}\overline{E^2}-\frac{1}{6T^3}\overline{E^3}\right].$$

Среднее значение $\overline{E^m}=\mathrm{Sp}\hat{H}^m/(2S+1)^N$. По известному свойству следа оператора он может вычисляться по любой полной системе волновых функций; пусть это будут функции, отвечающие всем возможным наборам ориентаций атомных спинов. Тогда усреднение сводится к независимому усреднению каждого из спинов по его направлениям; при этом $\overline{E}=0$. Логарифмируя теперь Z и снова разлагая по степеням $1/T$, с той же точностью получим

$$F=N\ln(2S+1)-\frac{1}{2T}\overline{E^2}+\frac{1}{6T^2}\overline{E^3}. \tag{72,16}$$

В этом выражении нас интересуют члены, содержащие $\mathfrak{H}^2$; только эти члены дадут вклад в восприимчивость. Опустив все остальные члены и заметив, что при усреднении нечетные степени компонент спина обращаются в нуль, получим

$$F=-\frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T}\sum_{\mathbf{n}}\overline{S_{\mathbf{n}z}^2}-\frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T^2}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}}2J_{\mathbf{mn}}\overline{(S_{\mathbf{n}}S_{\mathbf{n}z})}\,\overline{(S_{\mathbf{m}}S_{\mathbf{m}z})}.$$

Средние значения

$$\overline{S_{\mathbf{n}z}S_{\mathbf{n}x}}=\overline{S_{\mathbf{n}z}S_{\mathbf{n}y}}=0,\quad \overline{S_{\mathbf{n}z}^2}=S(S+1)/3.$$

Таким образом,

$$F=-\frac{2}{3T}\beta^2\mathfrak{H}^2NS(S+1)-\frac{2}{9}\beta^2\mathfrak{H}^2NS^2(S+1)^2\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}},$$

и отсюда окончательно восприимчивость

$$\chi=\frac{4\beta^2S(S+1)N}{3TV}\left[1+\frac{S(S+1)}{3T}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}J_{\mathbf{q}}\right]. \tag{72,17}$$

Обратим внимание на то, что знак поправочного члена в квадратных скобках зависит от знака обменного интеграла.

---

[1]) Последующее вычисление свободной энергии соответствует вычислениям в V § 73, продлевая их до следующего члена разложения.

Задачи

1. Найти магнитную часть теплоемкости системы, описывающейся гамильтонианом (72,1), при температурах $T \gg J$.

Решение. Первый член разложения теплоемкости по степеням $1/T$ возникает от члена $-\overline{E^2}/2T$ в свободной энергии (72,16). Усредняя тем же способом квадрат гамильтониана (72,1), получим

$$\overline{E^2} = \frac{1}{4} 2 \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J^2_{\mathbf{mn}} \overline{S_{\mathbf{m}i} S_{\mathbf{m}k}}\, \overline{S_{\mathbf{n}i} S_{\mathbf{n}k}} = 3 \frac{S^2 (S+1)^2}{9} \frac{N}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J^2_{\mathbf{q}}$$

(так как $\overline{S_i S_k} = S(S+1)\delta_{ik}/3$). Для теплоемкости находим в результате

$$C_{\text{маг}} = \frac{NS^2 (S+1)^2}{6T^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J^2_{\mathbf{q}}$$

в соответствии с V (73,4).

2. Пренебрегая взаимодействием между спинами, вычислить намагниченность парамагнетика при произвольном соотношении между $\beta\mathfrak{H}$ и T.

Решение. Статистическая сумма (для одного спина в поле)

$$Z = \sum_{S_z=-S}^{S} \exp\left(-\frac{2\beta\mathfrak{H}}{T} S_z\right) = \frac{\operatorname{sh}\,[2\beta\mathfrak{H}(S+{}^1\!/_2)/T]}{\operatorname{sh}\,(\beta\mathfrak{H}/T)}.$$

Вычисляя свободную энергию и дифференцируя ее по $\mathfrak{H}$, находим намагниченность

$$M = \frac{N}{V} T \frac{\partial}{\partial \mathfrak{H}} \ln Z = \frac{2\beta N}{V} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{cth} \frac{2\beta\mathfrak{H}(S+{}^1\!/_2)}{T} - \frac{1}{2} \operatorname{cth} \frac{\beta\mathfrak{H}}{T} \right\}$$

(*L. Brillouin*, 1927). При $\beta\mathfrak{H} \ll T$ это выражение переходит в (72,15). В обратном пределе, при $\beta\mathfrak{H} \gg T$, намагниченность стремится к своему номинальному значению по закону

$$M = \frac{2\beta N}{V} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{4\beta\mathfrak{H}}{T} \right) \right\}.$$

§ 73. Взаимодействие магнонов

Существенный методический интерес представляет вопрос о вкладе в магнитную часть термодинамических величин ферромагнетика, происходящем от взаимодействия магнонов; напомним, что вычисления в § 71 были основаны на представлении об идеальном газе невзаимодействующих магнонов. Рассмотрим этот вопрос для системы, описываемой обменным спиновым гамильтонианом (72,1).

Имея в виду нахождение вклада только наиболее низкого порядка по малому отношению T/T_c, мы можем ограничиться лишь парным взаимодействием магнонов. Это значит, что надо рассмотреть двухмагнонные состояния системы, в которых проекция полного спина равна $NS-2$.