

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

$$\overline{E^2} = \frac{1}{4} 2 \sum_{m \neq n} J_{mn}^2 \overline{S_m S_{mk}} \overline{S_n S_{nk}} = 3 \frac{S^2 (S+1)^2}{9} \frac{N}{2} \sum_{q \neq 0} J_q^2$$

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

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

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)

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

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

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

(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 магнов

Существенный методический интерес представляет вопрос о вкладе в магнитную часть термодинамических величин ферромагнетика, происходящем от взаимодействия магнов; напомним, что вычисления в § 71 были основаны на представлении об идеальном газе невзаимодействующих магнов. 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 магнов. Это значит, что надо рассмотреть двухмагнронные состояния системы, в которых проекция полного спина равна $NS-2$.

Такой проекции отвечают волновые функции

$$\begin{aligned}\chi_{nn} &= [4S(2S-1)]^{-1/2} \hat{S}_n \cdot \hat{S}_n \chi_0, \\ \chi_{mn} &= (2S)^{-1} \hat{S}_m \cdot \hat{S}_n \chi_0, \quad m \neq n;\end{aligned}\quad (73,1)$$

поскольку операторы спина различных атомов коммутативны, то $\chi_{mn} = \chi_{nm}$ ¹⁾. Функции (73,1) нормированы условием $\chi_{mn} \chi_{mn} = 1$, в чем легко убедиться, раскрывая произведение таким же образом, как это было сделано для проверки нормировки в (72,9). Тем же способом можно убедиться и во взаимной ортогональности различных функций χ_{mn} .

Функции (73,1) не являются сами по себе собственными функциями гамильтониана. Волновые же функции двухмагнонных стационарных состояний системы должны представлять собой определенные линейные комбинации функций χ_{mn} , которые запишем в виде

$$\chi = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{mn} \chi_{mn} + \sum_n \psi_{nn} \chi_{nn} \quad (73,2)$$

(поскольку χ_{mn} и χ_{nm} — одно и то же, то надо полагать и $\psi_{mn} \equiv \psi_{nm}$). Совокупность коэффициентов ψ_{mn} составляет волновую функцию в представлении, в котором независимыми переменными являются номера атомов в решетке. Множитель $1/\sqrt{2}$ в первой сумме в (73,2) введен для того, чтобы квадрат модуля $|\chi|^2$ был равен сумме $\sum |\psi_{mn}|^2$, в которой каждая из различных ψ_{mn} встречалась бы лишь один раз.

Тем же способом, которым было найдено уравнение (72,11) для волновых функций одномагнонных стационарных состояний, найдем, что функции (73,2) должны удовлетворять аналогичному уравнению

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\chi &= \sum_{m \neq n} \frac{\psi_{mn}}{2^{3/2} S} \{\hat{H}, \hat{S}_m \cdot \hat{S}_n\} \chi_0 + \\ &+ \sum_n \frac{\psi_{nn}}{2[S(2S-1)]^{1/2}} \{\hat{H}, \hat{S}_n \cdot \hat{S}_n\} \chi_0,\end{aligned}\quad (73,3)$$

где теперь $\mathcal{E} = E - E_0$ — энергия двух взаимодействующих друг с другом магнов (а скобки $\{\dots\}$ означают коммутатор).

Раскроем коммутаторы в правой стороне уравнения (73,3). Для этого замечаем, что

$$\{\hat{H}, \hat{S}_m \cdot \hat{S}_n\} \equiv \{\hat{H}, \hat{S}_m\} \hat{S}_n + \hat{S}_m \cdot \{\hat{H}, \hat{S}_n\},$$

¹⁾ Если спин $S = 1/2$, то двукратное применение одного и того же оператора \hat{S}_n к функции основного состояния χ_0 обращает ее в нуль. В этом случае, следовательно, все «диагональные» функции $\chi_{nn} \equiv 0$.

и используем выражения (72,12) для коммутаторов $\{\hat{H}, \hat{S}_{n-}\}$. После этого с учетом правил коммутации (72,4) переставляем операторы \hat{S}_z в крайнее правое положение, где они, воздействуя на функцию χ_0 , умножают ее на S . В результате получим

$$\begin{aligned} \{\hat{H}, \hat{S}_{m-}\hat{S}_{n-}\} \chi_0 = & S \sum_{\uparrow} [J_{m1}(\hat{S}_{m-} - \hat{S}_{1-})\hat{S}_{n-} + \\ & + J_{n1}(\hat{S}_{n-} - \hat{S}_{1-})\hat{S}_{m-}] \chi_0 + \delta_{mn} \sum_{\uparrow} J_{n1}\hat{S}_{n-}\hat{S}_{1-}\chi_0 - J_{mn}\hat{S}_{m-}\hat{S}_{n-}\chi_0 + \\ & + 4\beta\delta\hat{S}_{m-}\hat{S}_{n-}\chi_0; \end{aligned} \quad (73,4)$$

для упрощения записи формул ограничения, налагаемые на индексы суммирования, не выписываются — суммирование производится по всем значениям l , по при этом подразумевается, что все «диагональные» $J_{ll} = 0$.

Дальнейшая процедура сводится к подстановке (73,4) в уравнение (73,3) и приравниванию коэффициентов, стоящих при одинаковых функциях χ_{mn} в обеих сторонах равенства. Вычисления элементарны, хотя и довольно громоздки. Они приводят в результате к следующей системе уравнений для величин ψ_{mn} :

$$\begin{aligned} (2JS - \mathcal{E}) \psi_{mn} = & S \sum_{\uparrow} (J_{1m}\psi_{1n} + J_{1n}\psi_{1m}) + J_{mn}\psi_{mn} - \\ & - A_S [J_{mn}(\psi_{mm} + \psi_{nn}) + 2\delta_{mn} \sum_{\uparrow} J_{1m}\psi_{1m}], \end{aligned} \quad (73,5)$$

где

$$A_S = S \left[1 - \left(\frac{2S-1}{2S} \right)^{1/2} \right]$$

и введено обозначение J для суммы $\sum_{\uparrow} J_{nl}$, не зависящей, очевидно, от индекса n ¹⁾.

Перейдем в этом уравнении от координатного представления (независимые переменные — координаты атомов $\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m$) к импульсному, т. е. положим

$$\psi_{mn} = \frac{1}{N} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}_m + \mathbf{r}_n)/2} \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)}. \quad (73,6)$$

Вектор \mathbf{K} играет роль суммарного квазиимпульса двух магнов, а \mathbf{k} — квазиимпульса их относительного движения; суммирование производится по N дискретным значениям \mathbf{k} , допускаемым для решетки объема Nv (N — число атомов в решетке, v —

¹⁾ Эти уравнения справедливы и в случае спина $S = 1/2$, когда все ψ_{mn} произвольны. Обратим внимание на то, что при $S = 1/2$ все «диагональные» величины ψ_{nn} вообще выпадают из уравнений с $m \neq n$. Уравнения же с $m = n$ в этом случае надо просто считать отсутствующими.

объем ее элементарной ячейки). Вместе с ψ_{mn} надо представить в виде ряда Фурье также и обменные интегралы:

$$J_{mn} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)} J(\mathbf{k}), \quad J(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} J_{0n} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_n)} \quad (73,7)$$

(поскольку $J_{mn} = J_{nm}$, то $J(\mathbf{k}) = J(-\mathbf{k})$).

Опустив простые промежуточные выкладки, приведем сразу окончательный результат преобразования уравнения (73,5):

$$\left[\varepsilon \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) + \varepsilon \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) - \mathcal{E} \right] \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) + \int U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}') \frac{V d^3 k'}{(2\pi)^3} = 0, \quad (73,8)$$

где

$$NU(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = A_S \left[J \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k} \right) + J \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k} \right) + J \left(\frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}' \right) + J \left(\frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}' \right) \right] - \frac{1}{2} [J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')], \quad (73,9)$$

а $\varepsilon(\mathbf{k})$ — энергия одного магнона, определяемая формулой (72,13); суммирование по \mathbf{k}' заменено интегрированием по одной ячейке обратной решетки.

Таким образом, точная (в рамках гамильтониана (72,1)) задача о двухмагнонных состояниях системы сводится к решению уравнения, вполне аналогичного уравнению Шредингера для системы двух частиц в импульсном представлении (ср. III (130,4)). При этом функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ играют роль кинетических энергий частиц, а ядро интегрального уравнения $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — роль матричного элемента энергии U их взаимодействия для перехода (рассеяния) из состояний с импульсами $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ в состояния с импульсами $\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$, где

$$\mathbf{k}_1 = \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}'_1 = \frac{\mathbf{K}}{2} + \mathbf{k}', \quad \mathbf{k}'_2 = \frac{\mathbf{K}}{2} - \mathbf{k}'.$$

В этом смысле $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ целесообразно записать в виде

$$NU(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = A_S [J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) + J(\mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}'_2)] - \frac{1}{2} [J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2)]. \quad (73,10)$$

В общем случае уравнение (73,8—9) очень сложно. Мы ограничимся вычислением поправки к термодинамическим величинам в предположении $S \gg 1$. Простота этого случая связана с тем, что энергия магнонов $\varepsilon(\mathbf{k})$ пропорциональна S , а их взаимодействие U не зависит от S (при $S \gg 1$ коэффициент в (73,9) $A_S \approx 1/4$). Поэтому U можно рассматривать как малое возмущение. Тогда поправка $\Omega_{\text{вз}}$ (от взаимодействия магнонов) к термодинамическому

потенциалу Ω будет даваться просто средним значением U . Взяв «диагональный матричный элемент»

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2N} [J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) - J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - J(0)], \quad (73,11)$$

мы тем самым усредняем по состоянию с заданными квазимпульсами магнов. После этого статистическое усреднение по равновесному распределению магнов осуществляется интегрированием

$$\Omega_{\text{вз}} = \int n(\mathbf{k}_1) n(\mathbf{k}_2) U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \frac{V^2 d^3 \mathbf{k}_1 d^3 \mathbf{k}_2}{(2\pi)^6}, \quad (73,12)$$

где $n(\mathbf{k}) = [\exp(\varepsilon(\mathbf{k})/T) - 1]^{-1}$ — функция распределения Бозе.

При низких температурах интеграл определяется областью малых значений $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$, соответственно чему следует разложить все $\varepsilon(\mathbf{k})$ и $J(\mathbf{k})$ по степеням \mathbf{k} . Тогда $\varepsilon(\mathbf{k})$ дается квадратичным выражением (72,14). Поскольку $J(\mathbf{k})$ — четная функция \mathbf{k} , то квадратичны также и первые члены ее разложения:

$$J(\mathbf{k}) \approx J(0) + a_{ik} k_i k_k.$$

Тогда

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N} a_{ik} k_{1i} k_{2k}.$$

Но при подстановке этого выражения, нечетного по \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , в (73,12) интеграл обращается в нуль в результате усреднения по направлениям \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 .

Поэтому в разложении $J(\mathbf{k})$ надо учесть члены четвертого порядка, в результате чего в интеграле (73,12) функция $U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ оказывается формой четвертой степени, причем отличный от нуля вклад в интеграл дают члены этой формы, квадратичные по \mathbf{k}_1 и по \mathbf{k}_2 . Ввиду быстрой сходимости интегрирование может быть распространено по всему \mathbf{k} -пространству. Заменой переменных $\mathbf{k} = \bar{\mathbf{k}} \sqrt{T}$ убеждаемся тогда, что зависимость $\Omega_{\text{вз}}$ от T и ξ имеет вид

$$\Omega_{\text{вз}} = VT^5 f(\xi/T), \quad (73,13)$$

причем $f(0)$ и $f'(0)$ конечны. Отсюда следует, что поправочный член в намагниченности

$$M_{\text{вз}} = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial \Omega_{\text{вз}}}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = \text{const} \cdot T^4. \quad (73,14)$$

Такому же закону следует поправочный член в теплоемкости¹⁾.

¹⁾ Эти результаты (в общем случае произвольного спина) были впервые получены Дайсоном (F. Dyson, 1956). В изложенном выводе уравнения (73,5) мы следовали в основном Бойду и Каллауэю (R. J. Boyd, J. Callaway, 1965).

Мы видим, что взаимодействие магнонов приводит к поправкам в термодинамических величинах лишь в высоком приближении по T/T_c . Напомним, что основные члены в намагниченности и в магнитной части теплоемкости следуют закону $T^{3/2}$. Между этими членами и поправками от $\Omega_{вз}$ существуют еще члены, пропорциональные $T^{5/2}$ и $T^{7/2}$, происходящие от следующих членов разложения энергии магнонов $\epsilon(\mathbf{k})$ по степеням k^2 .

С помощью полученных уравнений можно рассмотреть также вопрос о связанных состояниях двух магнонов. Эти состояния проявляются как дискретные (при заданном \mathbf{K}) собственные значения уравнения (73,8). Как функции переменной \mathbf{K} , эти собственные значения $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ представляют собой новые ветви элементарных возбуждений в системе. Исследование показывает, однако, что эти состояния существуют только при достаточно больших значениях \mathbf{K} ; поэтому они во всяком случае не влияют на термодинамические величины ферромагнетика при низких температурах¹⁾.

Задача

В предположении $S \gg 1$ найти поправочные члены от взаимодействия магнонов в намагниченности и теплоемкости для кубической решетки, в которой обменные интегралы отличны от нуля только для соседних (вдоль кубических осей) пар атомов.

Решение. Каждый атом имеет шесть ближайших соседних атомов. По определению (73,7), находим

$$J(\mathbf{k}) = 2J_0 (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

где J_0 — обменный интеграл для пары соседних атомов, а a — длина ребра кубической ячейки. При малых k

$$J(\mathbf{k}) \approx J_0 \left[2 - a^2 k^2 + \frac{a^4}{12} (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4) \right].$$

Отсюда

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{a^2 J_0}{4V} (k_{1x} k_{2x}^2 + k_{1y} k_{2y}^2 + k_{1z} k_{2z}^2)$$

(опущены члены, нечетные по k_1 и k_2). Энергия магнона (согласно (72,14))

$$\epsilon(\mathbf{k}) = S J_0 a^2 k^2 + 2\beta \delta.$$

Вычисление интеграла (73,12) приводит к следующим результатам:

$$\frac{M_{вз}}{M} = -\frac{3\pi \zeta^{(3/2)} \zeta^{(5/2)}}{2S^2} \left(\frac{T}{4\pi S J_0} \right)^4, \quad C_{вз} = \frac{15\pi \zeta^{(5/2)} N}{S} \left(\frac{T}{4\pi S J_0} \right)^4$$

(ζ — дзета-функция).

¹⁾ См. *M. Wortis*, Phys. Rev. 132, 85 (1963). Речь идет о трехмерной решетке. В двух- и одномерном случаях связанные состояния магнонов существуют при всех значениях k .