

Ян Ши

К теории волны спиновой плотности

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Н. М. Кочаряном 24/V 1963)

Выяснение вопроса об основном и возбужденном состоянии системы взаимодействующих электронов имеет большое значение для построения микроскопической теории металлов, ферро- и антиферромагнетиков и т. д. На протяжении нескольких последних десятилетий этот вопрос изучался многими авторами. В частности, Блох⁽¹⁾ первый указал, что при низкой плотности электронов ферромагнитное состояние (когда спины всех электронов ориентированы параллельно) обладает меньшей энергией, чем обычное состояние вырожденного Ферми-газа. Вигнер⁽²⁾ и Пайнс⁽³⁾ отметили, что если учесть корреляционные эффекты, то энергия ферромагнитного состояния будет больше энергии вырожденного Ферми-газа. Однако, Ивамото и Савада⁽⁴⁾ показали, что в приближении Хартри-Фока при кулоновском взаимодействии между электронами состояние вырожденного Ферми-газа все же не является основным состоянием.

Недавно Оверхаузер^(5,6) предложил в качестве основного состояния системы взаимодействующих электронов в приближении Хартри-Фока рассмотреть так называемое состояние волны спиновой плотности (ВСП)— суперпозицию плоских волн с волновыми векторами k , $k + Q$ и с противоположными спинами.

Идея Оверхаузера во многом сходна с основной идеей теории сверхпроводимости^(7,8). Как известно, в теории сверхпроводимости большую роль играет метод канонического преобразования Н. Н. Боголюбова⁽⁸⁾. В настоящей работе будет показано, что с помощью этого метода не только легко получить все результаты Оверхаузера, но и естественным образом можно обобщить теорию ВСП на случай наличия кристаллической решетки. Кроме того, методом канонического преобразования весьма удобно изучать коллективные возбуждения.

Рассмотрим систему из N электронов, находящихся в периодическом потенциале положительных ионов кристаллической решетки. Будем считать, что одноэлектронная задача для периодического потенциала уже решена. Для простоты рассмотрим случай, когда име-

ется один валентный электрон на каждый ион и будем предполагать что в результате взаимодействия между собой электроны не переходят из одной зоны в другую. Иногда гамильтониан системы в представлении вторичного квантования может быть записан в виде:

$$H = \sum_{k,\sigma} E_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + (2N)^{-1} \sum V_{k_1 k_2, k_2' k_1'} a_{k_1 \sigma_1}^+ a_{k_2 \sigma_2}^+ a_{k_2' \sigma_2} a_{k_1' \sigma_1}, \quad (1)$$

где $a_{k\sigma}^+$, $a_{k\sigma}$ — Ферми-операторы порождения и уничтожения одноэлектронных состояний (блховских волн), матричные элементы $V_{k_1 k_2, k_2' k_1'}$ обладают следующей симметрией:

$$V_{k_1 k_2, k_2' k_1'} = V_{k_2 k_1, k_1' k_2'} = V_{k_1' k_2', k_2 k_1}^* \quad (2)$$

Во второй сумме гамильтониана (1) $k_1 + k_2 - k_1' - k_2' = 2\pi G$, где G — вектор обратной решетки.

Волнам спиновой плотности соответствуют операторы вторичного квантования b , которые связаны с операторами a соотношениями

$$b_{k0} = \cos \theta_k a_{k\uparrow} + \sin \theta_k a_{k+Q\downarrow}, \quad (3)$$

$$b_{k1} = \sin \theta_k a_{k\uparrow} - \cos \theta_k a_{k+Q\downarrow},$$

где θ_k и Q — некоторые параметры, которые определяются из условия минимума средней энергии.

Легко видеть, преобразование (3) является каноническим. Поэтому новые операторы b также являются фермиевскими.

В качестве основного состояния будем рассматривать состояние $|0\rangle$, для которого имеются следующие условия:

$$\begin{aligned} b_{k0}^+ |0\rangle = 0 \quad \text{для } k \in A; \quad b_{k0} |0\rangle = 0 \quad \text{для } k \in A; \\ b_{k1} |0\rangle = 0 \quad \text{для всех } k. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь область A в k -пространстве является совокупностью двух областей — области A_F , ограниченной поверхностью Ферми, и области A_F^Q , полученной из A_F сдвигом на вектор $-Q$.

Из соображения симметрии будем считать, что вектор Q направлен по одной из осей симметрии. Относительно величины Q заметим, что в предельном случае выключенного взаимодействия основным состоянием системы должно быть состояние вырожденного Ферми-газа. Это соответствует решению: $\theta_k = 0$ в области A_F , и $\pi/2$ в области A_F^Q . При этом величина Q должна быть такой, чтобы области A_F и A_F^Q соприкасались (например, если поверхность Ферми является сферической, то Q равняется удвоенному ее радиусу). В случае же неисчезающего взаимодействия значение Q несколько меньше, так что имеется небольшое пересечение двух поверхностей Ферми (фиг. 1).

Среднее значение энергии по состоянию, определенному условиями (4), равняется:

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle = & \sum_{k \in A} (E_k \cos^2 \theta_k + E_{k+Q} \sin^2 \theta_k) - \\
& - (2N)^{-1} \sum_{k_1, k_2 \in A} (V_{k_1 k_2, k_1 k_2} \cos^2 \theta_{k_1} \cos^2 \theta_{k_2} + \\
& + 2V_{k_1 k_2 + Q, k_1 + Q k_2} \cos \theta_{k_1} \sin \theta_{k_1} \cos \theta_{k_2} \sin \theta_{k_2} + \\
& + V_{k_1 + Q k_2 + Q, k_1 + Q k_2 + Q} \sin^2 \theta_{k_1} \sin^2 \theta_{k_2}), \quad (5)
\end{aligned}$$

Для стационарного решения вариация средней энергии по θ_k должна обращаться в нуль. Это приводит к уравнению минимизации

$$\begin{aligned}
(-E_k + E_{k+Q}) \sin 2\theta_k + N^{-1} \sum_{k' \in A} (V_{kk', k'k'} \sin 2\theta_k \cos^2 \theta_{k'} - \\
- \operatorname{Re} V_{kk'+Q, k'+Qk'} \cos 2\theta_k \sin 2\theta_{k'} - V_{k+Qk'+Q, k+Qk'-Q} \sin 2\theta_k \sin^2 \theta_{k'}) = 0. \quad (6)
\end{aligned}$$

Уравнение (6) можно записать в виде

$$(-\varepsilon_k + \varepsilon_{k+Q}) \sin 2\theta_k - 2g_k \cos 2\theta_k = 0, \quad (7)$$

$$\text{где } \varepsilon_k = E_k - N^{-1} \sum_{k' \in A} V_{kk', k'k'} \cos^2 \theta_{k'}, \quad (8)$$

$$\varepsilon_{k+Q} = E_{k+Q} - N^{-1} \sum_{k' \in A} V_{k+Qk'+Q, k+Qk'+Q} \sin^2 \theta_{k'}, \quad (9)$$

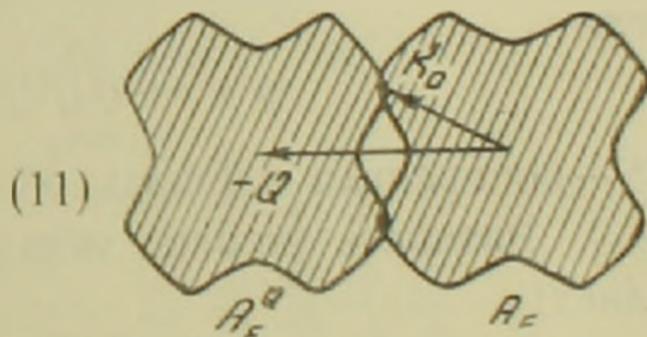
$$g_k = N^{-1} \sum_{k' \in A} \operatorname{Re} V_{kk'+Q, k'+Qk'} \sin \theta_{k'} \cos \theta_{k'}. \quad (10)$$

Спектр одночастичных возбуждений в ВСП вычисляется как значение энергии по связанным одночастичным состояниям:

$$\bar{E}_{k0} = \langle \hat{b}_{k0} H \hat{b}_{k0} \rangle_{\text{св}} \quad \text{для } k \in A$$

$$= \langle \hat{b}_{k0} H \hat{b}_{k0} \rangle_{\text{св}} \quad \text{для } k \notin A$$

$$\bar{E}_{k1} = \langle \hat{b}_{k1} H \hat{b}_{k1} \rangle_{\text{св}} \quad \text{для всех } k.$$



(11)

Фиг. 1. Область A в k-пространстве.

В результате получаем

$$\bar{E}_{k0} = \varepsilon_k \cos^2 \theta_k + \varepsilon_{k+Q} \sin^2 \theta_k - g_k \sin 2\theta_k \quad (12)$$

$$\bar{E}_{k1} = \varepsilon_k \sin^2 \theta_k + \varepsilon_{k+Q} \cos^2 \theta_k + g_k \sin 2\theta_k.$$

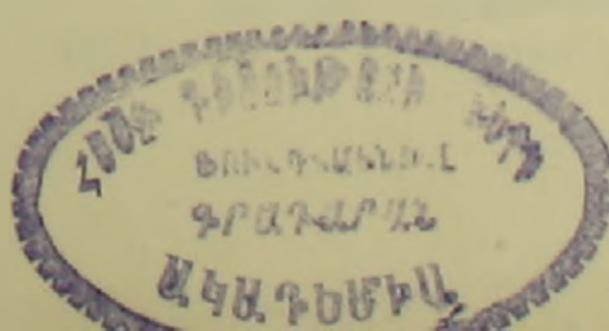
Заметим, что \bar{E}_{k0} и \bar{E}_{k1} удовлетворяют уравнениям

$$\bar{E}_k^2 - (\varepsilon_k + \varepsilon_{k+Q}) \bar{E}_k + (\varepsilon_k \varepsilon_{k+Q} - g_k^2) = 0. \quad (13)$$

Поэтому

$$\bar{E}_{k\pm} = (\varepsilon_k + \varepsilon_{k+Q})/2 \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+Q})^2/4 + g_k^2}. \quad (14)$$

Отсюда видно, что g имеет смысл минимальной щели между двумя ветвями в спектре одночастичных возбуждений.



Из (12), (7) и (10) получаем, что уравнение минимизации эквивалентно уравнению

$$g_k = N^{-1} \sum_{k' \in A} \operatorname{Re} V_{kk'+Q, k+Qk'} \frac{g_{k'}}{\bar{E}_{k'1} - \bar{E}_{k'0}}, \quad (15)$$

или

$$g_k = N^{-1} \sum_{k' \in A} \operatorname{Re} V_{kk'+Q, k+Qk'} \frac{g_{k'}}{2 [(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'+Q})^2/4 + g_{k'}^2]^{1/2}}. \quad (16)$$

Заметим, что при выключении взаимодействия уравнение (14) имеет лишь одно тривиальное решение $g_k = 0$. В случае же неисчезающего взаимодействия существует еще нетривиальное решение. Оно отлично от нуля в окрестности точки пересечения (k_0) областей A_F и A_F^Q и переходит в нуль вдали от нее. Для получения явного вида нетривиального решения мы заменяем матричный элемент V постоянной величиной γ , а параметр g_k аппроксимируем постоянной g вблизи k_0 на расстоянии L и нулем вдали. Вообще говоря, пересечение областей A_F и A_F^Q может быть в нескольких точках, и эти точки могут оказаться неэквивалентными. В этом случае для каждого типа неэквивалентных точек мы должны ввести параметр g_i . Для g_i мы получаем из уравнения (16) систему трансцендентных уравнений. В простейшем случае, когда области A_F и A_F^Q пересекаются в одной точке или все точки пересечения являются эквивалентными, мы получаем явное выражение для g :

$$g = \mu L/2 \operatorname{sh} (8\pi^3 \mu / \gamma S), \quad (17)$$

где

$$\mu = - (Q/Q) \operatorname{grad} \varepsilon_k |_{k=k_0}, \quad (k_0 Q = Q^2/2),$$

S — поперечная площадь области пересечения.

Разность энергии между решением (17) и тривиальным составляет:

$$\frac{\Delta \langle H \rangle}{N} = - \frac{\mu L^2 S}{32\pi^3} \left(\operatorname{cth} \frac{8\pi^3 \mu}{\gamma S} - 1 \right) \quad (18)$$

и является отрицательно определенной.

В частном случае свободных электронов, когда кристаллическое поле отсутствует, мы имеем

$$V_{k_1 k_2, k_3 k_4} = N \frac{4\pi e^2}{|k_3 - k_2|^2} = N \frac{4\pi e^2}{|k_4 - k_1|^2} \quad (19)$$

($k_1 + k_2 - k_3 - k_4 = 0$). Легко видеть, в этом случае из (5), (6), (14), (16) непосредственно получаем все результаты Оверхаузера⁽⁶⁾.

Нам остается еще исследовать вопрос устойчивости состояния ВСП. Для этого мы рассмотрим вгору вариацию средней энергии (5). В простейшем случае имеем

$$\delta^2 \langle H \rangle = 2 \sum_k \left| f(k) (\delta \theta_k)^2 - \gamma \sum_{k'} \cos 2(\theta_k - \theta_{k'}) \delta \theta_k \delta \theta_{k'} \right|, \quad (20)$$

где

$$f(k) = (-E_k + E_{k+Q}) \cos 2\theta_k - \gamma \sum_{k'} \cos 2(\theta_k - \theta_{k'}). \quad (21)$$

Используя уравнение минимизации (7), нетрудно записать функцию $f(k)$ в виде

$$f(k) = 2g_k / \sin 2\theta_k. \quad (22)$$

Приводя квадратичную форму (20) к диагональному виду, мы приходим к уравнению

$$(\omega - f(k)) \delta \theta_k + \gamma \sum_{k'} \cos 2(\theta_{k'} - \theta_k) \delta \theta_{k'} = 0. \quad (23)$$

Уравнение (23) решается просто. Пусть

$$\sum_{k'} \cos 2\theta_{k'} \delta \theta_{k'} = C_1, \quad \sum_{k'} \sin 2\theta_{k'} \delta \theta_{k'} = C_2. \quad (24)$$

Тогда для C_1 и C_2 получаем линейную систему однородных уравнений

$$\begin{aligned} C_1 \left[1 + \gamma \sum_{k'} \frac{\cos^2 2\theta_{k'}}{\omega - f(k')} \right] + C_2 \gamma \sum_{k'} \frac{\sin 2\theta_{k'} \cos 2\theta_{k'}}{\omega - f(k')} &= 0 \\ C_1 \gamma \sum_{k'} \frac{\sin 2\theta_{k'} \cos 2\theta_{k'}}{\omega - f(k')} + C_2 \left[1 + \gamma \sum_{k'} \frac{\sin^2 2\theta_{k'}}{\omega - f(k')} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Для того, чтобы существовали нетривиальные решения системы уравнений (25), необходимо и достаточно, чтобы ее детерминант равнялся нулю. Это приводит к уравнению для определения ω :

$$-1 = \gamma \sum_k \frac{1}{\omega - f(k)} + \gamma^2 \sum_{k'k''} \frac{\sin^2 2\theta_{k'} \cos^2 2\theta_{k''}}{[\omega - f(k')][\omega - f(k'')]} \quad (26)$$

Когда взаимодействие мало, можно пренебречь членами порядка γ^2 и выше. В этом случае мы имеем приближенное уравнение:

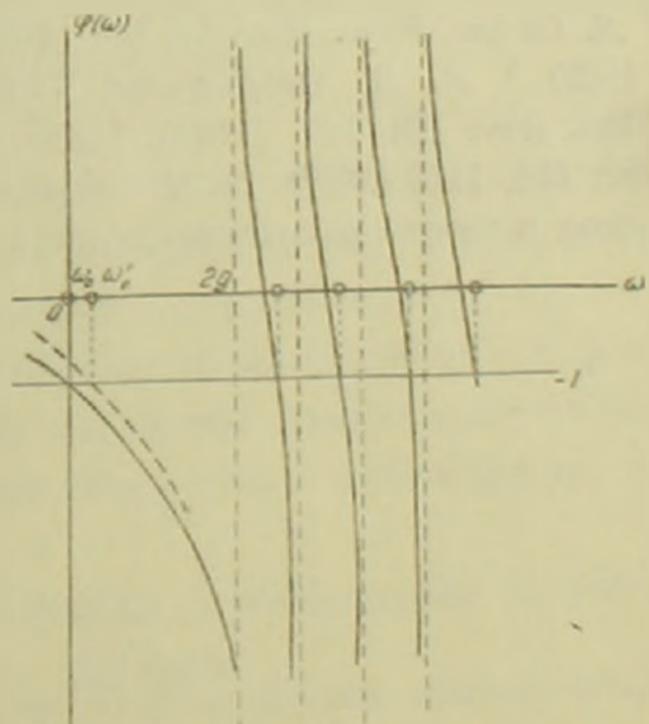
$$-1 = \gamma \sum_k \frac{1}{\omega - f(k)} \equiv \varphi(\omega). \quad (27)$$

Общий вид функции $\varphi(\omega)$ показан на фиг. 2. Пересечения прямой -1 с графиком функции $\varphi(\omega)$ дает корни уравнения (27). Мы имеем $N-1$ корней в области положительных значений ω . Кроме того,

$$\varphi(0) = -\gamma \sum_k \frac{1}{f(k)} = -1. \quad (28)$$

Поэтому существует еще один изолированный корень

$$\omega_0 = 0. \quad (29)$$



Фиг. 2. Графическое решение характеристического уравнения (27) для собственных значений второй вариации средней энергии. Пунктирная кривая — правая часть уравнения (26), учитывающая члены порядка γ^2 .

Для малых ω вторая сумма в правой части уравнения (26) положительна. Поэтому при учете членов порядка γ^2 изолированный корень (29) передвигается в область положительных значений ω (фиг. 2). Таким образом, мы убеждаемся, что все собственные значения ω_i квадратичной формы (20) положительны. Следовательно, вторая вариация средней энергии (20) является положительно определенной, что означает устойчивость состояния ВСП.

Автор выражает свою искреннюю благодарность академику Н. Н. Боголюбову за указание темы, С. В. Тябликову и В. В. Толмачеву за внимание к работе и обсуждение результатов.

Центральная научно-исследовательская
физико-техническая лаборатория
Академии наук Армянской ССР

ՀԱՆՇԻ

Արիֆալին խոսուքյան հետազոտական վերաբերյալ

Ինգոլլուրովի կանոնիկ ձևափոխությունների մեթոդով դիտարկվում է սպինային խոսուքյան ալիքի (ՍԽԱ) վիճակը փոխազդող էլեկտրոնների համար բյուրեղային ցանցի պարբերական դաշտում: Ցույց է տրված, որ ՍԽԱ վիճակը միշտ ավելի փոքր էներգիա ունի, քան այլասերված ֆերմի-գազի սովորական վիճակը և, որ նրա միջին էներգիայի երկրորդ վարիացիան հանդիսանում է դրականորեն որոշված մեծություն: Վերջին հանգամանքը ցույց է տալիս, որ ՍԽԱ վիճակը կայուն է:

ЛИТЕРАТУРА — ԿՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

¹ Ф. Блох, Z. Physik, 57, 549 (1929). ² Вигнер, Trans. Far. Soc. 34, 678 (1938).
³ Д. Пайнс, Phys. Rev. 92, 626 (1953). ⁴ Ф. Ивамото, Савада К. Phys. Rev. 126, 887 (1962). ⁵ А. В. Оверхаузер, Phys. Rev. Lett. 4, 462 (1960). ⁶ А. В. Оверхаузер, Phys. Rev. 128, 1437 (1962). ⁷ Дж. Бардин, Л. Купер, Дж. Шриффер, Phys. Rev. 106, 162; 108, 1175 (1957). ⁸ Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, Изд. АН СССР, 1958.