ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՌ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
XXXIX 1964 2

ФИЗИКА

Ян Ши

О коллективных возбуждениях некоторых магнитных состояний

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Н. М. Кочаряном 17/II 1964)

Основным состоянием системы электронов, находящихся в поле кристаллической решетки, в зависимости от взаимодействия электронов между собой и с ионами решетки, может быть либо нормальное парамагнитное состояние, либо ферро- или антиферромагнитное состояние. Вопрос об условиях, при которых нормальное парамагнитное состояние является основным состоянием системы для случая изотропного свободного электронного газа, рассматривался в работах [1,2]. Исследовался также спектр элементарных возбуждений этого состояния (см., напр., [3]). В настоящей работе мы будем исследовать спектр элементарных возбуждений двух магнитных состояний — ферромагнитного состояния с параллельной ориентацией спинов и состояния Оверхаузера с винтообразным расположением спинов [4,5]*. Такое исследование может представлять интерес для выяснения условий устойчивости этих состояний, а также для изучения поведения системы при действии на нее внешних полей.

Для нахождения спектра элементарных возбуждений мы будем исходить из варьированных уравнений для функций распределения $F(f_1, f_2) = \langle a^+_{f_1}, a_{f_2} \rangle$ и $\Phi(f_1, f_2) = \langle a_{f_1}, a_{f_2} \rangle$ (знак $\langle \cdots \rangle$ означает усреднение по ансамблю), которые рассматривались Н. Н. Боголюбовым [6] (см. также [7]) в связи с теорией сверхпроводимости. Эти уравнения в случае нормальной системы (т. е. системы, не обладающей сверхпроводимостью) значительно упрощаются. При этом если ограничиться лишь первым приближением, выражая вариации корреляционных функций типа $F_2 = \langle a_1^+ a_2^+ a_3 a_4 \rangle$ и $\Phi_2 = \langle a_1^+ a_2 a_3 a_4 \rangle$ через δF и $\delta\Phi$ в приближении самосогласованного поля, то уравнения для величин δF и $\delta\Phi$ окажутся независимыми. В настоящей работе мы обращаем свое внимание главным образом на магнитный спектр, соответствующий колебаниям намагниченности системы, поэтому будем рассматривать только уравнение для δF. После Фурье-преобразования оно имеет вид

* Оверхаузер употреблял термин „состояние волны спиновой плотности".

$$E\xi(f_1, f_2) = \sum \tilde{E}(f_2, f)\xi(f_1, f) - \sum \tilde{E}(f, f_1)\xi(f, f_2) +$$

$$+ \sum_{f_1', f_2', f} \{U(f_2, f; f_2', f_1') - U(f_2, f; f_1', f_2')\} F(f_1, f_1')\xi(f, f_2) -$$

$$- \sum_{f_1', f_2', f} \{U(f_1', f_2'; f, f_1) - U(f_1', f_2'; f_1, f)\} F(f_1', f_2)\xi(f_2', f), \quad (1)$$

$$f = (k, \sigma),$$

где $\xi(f_1, f_2)$ — Фурье-образ величины δF, $U(f_1, f_2; f_2', f_1')$ — матричный элемент энергии взаимодействия, $\tilde{E}(f, f')$ определяется формулой

$$\tilde{E}(f, f') = E(f)\delta_{ff'} + \sum_{f_1, f_2} \{U(f, f_1; f_2, f') - U(f, f_1; f', f_2)\} F(f_1, f_2) \quad (2)$$

$E(f)$ — собственные значения аддитивной части гамильтониана.

Рассмотрим уравнение (1) для ферромагнитного состояния, характеризуемого функцией распределения

$$F(f, f') = n(f)\delta_{ff'} \quad (n_\uparrow(k) > n_\downarrow(k)), \quad (3)$$

причем будем считать, что при $T \to 0$ функция $n(f)$ имеет следующие предельные значения:

$$n_\uparrow(k) = \begin{cases} 1 & \text{для } k \in G \\ 0 & \text{для } k \notin G, \end{cases} \qquad n_\downarrow(k) = 0 \text{ для всех } k, \quad (4)$$

где G — некоторая область одноэлектронных состояний, ограниченная „удвоенной“ поверхностью Ферми (объем области G в два раза превышает объем, ограниченный обычной поверхностью Ферми). Заметим, что в случае, когда имеется один электрон на узел, Ферми-область G полностью совпадает с некоторой зоной Бриллюэна (если энергии разных зон не перекрывают друг друга). В предельном случае сильно связанных электронов, когда одноэлектронная функция представляет собой функцию, сосредоточенную по узлам кристаллической решетки, рассматриваемое состояние переходит в основное состояние гейзенберговской модели.

В рассматриваемом случае уравнение (1) принимает вид:

$$E\xi(f_1, f_2) = (\tilde{E}(f_2) - \tilde{E}(f_1))\xi(f_1, f_2) +$$

$$+ (n(f_2) - n(f_1)) \sum \{U(f_1', f_2; f_2', f_1) - U(f_1', f_2; f_1, f_2')\} \xi(f_1', f_2'). \quad (5)$$

Предположим, как обычно,

$$U(f_1 f_2; f_2' f_1') = U(k_1, k_2; k_2', k_1')\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\delta(k_1 + k_2 - k_1' - k_2').$$

Тогда нетрудно видеть, что спектр распадается на две ветви. У одной из них $\xi_{\sigma\sigma} = 0$, а у другой, наоборот $\xi_{\uparrow\downarrow} = \xi_{\downarrow\uparrow} = 0$.

Для первой ветви имеем

$$E\xi_{\uparrow\downarrow}(k, k+q) = (\tilde{E}_{\downarrow}(k+q) - \tilde{E}_{\uparrow}(k))\,\xi_{\uparrow\downarrow}(k, k+q) -$$

$$-(n_{\uparrow}(k) - n_{\downarrow}(k+q)) \sum U(k', k+q; k'+q, k)\,\xi_{\uparrow\downarrow}(k', k'+q). \quad (6)$$

Здесь введено обозначение $k_1 = k$, $k_1' = k'$, $k_2 - k_1 = k_2' - k_1' = q$, и

$$\tilde{E}_{\sigma}(k) = E(k) + \sum_{k'\sigma'} [U(k, k'; k', k) - U(k, k'; k, k')\,\delta_{\sigma\sigma'}]\, n_{\sigma'}(k').$$

С точностью до членов порядка V^{-1} непрерывный спектр уравнения (6) определяется энергиями одночастичных возбуждений

$$\tilde{E}_{\downarrow}(k+q) - \tilde{E}_{\uparrow}(k) = E(k+q) - E(k) + \sum_{k'} \{U(k+q, k'; k', k+q) -$$

$$- U(k, k'; k'\, k)\}\, [(n_{\uparrow}(k') + n_{\downarrow}(k')] + \sum_{k'} [U(k, k'; k\, k')\, n_{\uparrow}(k') -$$

$$- U(k+q, k'; k+q, k')\, n_{\downarrow}(k')]. \quad (7)$$

При $q = 0$ этот спектр отделен от нуля щелью

$$\sum U(k, k'; k, k')\,(n_{\uparrow}(k') - n_{\downarrow}(k')). \quad (8)$$

С возрастанием q щель уменьшается. Для определения нижней границы значений щели необходимо знать конкретный вид функций $E(k)$ и U.

Во всяком случае можем утверждать, что

$$\min(\tilde{E}_{\downarrow}(k+q) - \tilde{E}_{\uparrow}(k)) \sim \bar{U}M/\mu_0 - E(k_F), \quad (9)$$

где $\bar{U}$ — некоторое среднее значение величины U; k_F — волновой вектор на „удвоенной" поверхности Ферми (так что $E(k_F)$ — граничная энергия Ферми). $M = \mu_0 V^{-1} \sum (n_{\uparrow}(k) - n_{\downarrow}(k))$ — намагниченность системы, μ_0 — магнетон Бора.

Очевидно, рассматриваемое ферромагнитное состояние будет устойчивым только в том случае, когда значение щели положительно, или

$$\min(\tilde{E}_{\downarrow}(k+q) - \tilde{E}_{\uparrow}(k)) > 0. \quad (10)$$

Из формулы (9) видим, что условие (10) имеет место только в случае узкой зоны (малое значение $E(k_F)$) и сильного взаимодействия (большое значение $\bar{U}$).

Помимо непрерывного спектра, уравнение (6) имеет еще дискретный спектр, соответствующий коллективному возбуждению бозевского типа. Действительно, при $q = 0$ секулярное уравнение (6) имеет решение

$$\xi_{\uparrow\downarrow} = \xi_0 = A\,(n_{\uparrow}(k) - n_{\downarrow}(k)), \; E = 0, \; A = \text{const}. \quad (11)$$

Для малых $|q|$ решение можно разложить по степеням $|q|$:

$$\begin{aligned} \xi &= \xi_0 + |q|\,\xi_1 + \cdots \\ E &= |q|\,E_1 + |q|^2 E_2 + \cdots \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя разложение (12) в уравнение (6) и выделяя члены первого порядка относительно $|q|$, получаем

$$\xi_1(k)\sum U(k', k; k', k)\,(n_\uparrow(k') - n_\downarrow(k')) - (n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k))\times$$
$$\sum U(k', k; k', k)\,\xi_1(k') = E_1\xi_0 - L'(\xi_0) \qquad (13)$$

где

$$L'(\xi_0) = \sum_\alpha e^\alpha \frac{\partial E_\downarrow(k+q)}{\partial q^\alpha}\bigg|_{q=0}\xi_0(k) - \sum_\alpha e^\alpha \bigg[\frac{\partial n_\downarrow(k+q)}{\partial q^\alpha}\times$$
$$\times\sum_{n'} U(k', k; k' k)\,\xi_0(k') - (n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k))\sum_{k'}\frac{\partial U(k', k; k'+q, k)}{\partial q^\alpha}\times$$
$$\times\,\xi_0(k')\bigg]_{q=0}$$
$$e^\alpha = q^\alpha/|q|. \qquad (14)$$

Это уравнение может иметь решение только если

$$\sum[E_1\xi_0(k) - L'(\xi_0)]\,\xi_0(k),$$

но $L'(\xi_0)$ — нечетная функция по k, а ξ_0 — четная функция, поэтому при суммировании второе слагаемое обращается в нуль. Отсюда получаем, что

$$E_1 = 0.$$

Таким образом, рассматриваемая дискретная ветвь спектра коллективного возбуждения при малых $|q|$ имеет дисперсионный закон $E \sim q^2$.

Для нахождения явного вида этого закона следует рассмотреть члены второго порядка по $|q|$. Имеем:

$$E_2 = \sum_k \xi_0(k)\,[L'(\xi_1) + L''(\xi_0)]/\sum_k \xi_0^2(k) \qquad (15)$$

где

$$L''(\xi_0) = \frac{1}{2}\sum_\alpha e^\alpha \frac{\partial L'(\xi_0)}{\partial q^\alpha}\bigg|_{q=0}, \qquad (16)$$

а ξ_1 определяется из уравнения (13) с учетом $E_1 = 0$.

В случае весьма короткого радиуса взаимодействия (что, по-видимому, имеет место для сильно связанных электронов), когда матричный элемент энергии взаимодействия слабо зависит от волнового вектора, приближенно имеем

$$E_2 = M\sum_{\alpha\beta} e^\alpha e^\beta \frac{\partial^2\bar{U}}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} +$$
$$+\frac{1}{M}\sum_{k\alpha\beta}(n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k))\,e^\alpha e^\beta\left\{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} - \frac{1}{\bar{U}M}\frac{\partial E}{\partial q^\alpha}\frac{\partial E}{\partial q^\beta}\right\}. \qquad (17)$$

Для устойчивости состояния необходимо также

$$E_2 > 0.$$

Первый член в правой части равенства (17) всегда положителен. Что касается второго члена, то в принципе он может быть как положительным, так и отрицательным. Поэтому для положительности E_2 необходимо, чтобы абсолютная величина первого члена была больше второго. Это снова приводит к требованию, чтобы зона была узкой, а взаимодействие между электронами было большим.

Физический смысл полученной ветви коллективного возбуждения легко выяснить из рассмотрения вектора намагниченности $M^z(r) = \mu_0 \langle \Psi_\sigma^+(r) S^z \Psi_\sigma(r) \rangle$ (S^z — матрицы Паули).

Переходя к Фурье-компонентам $M^z(r) = \sum M_q^z \exp i(qr)$ имеем:

$$M_0^x = M_0^y = 0, \quad M_0^z = \mu_0 V^{-1} \sum (n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k)) \tag{18}$$

$$M_q^x = \mu_0 V^{-1} \sum \{\xi_{\uparrow\downarrow}(k, k+q) + \xi_{\downarrow\uparrow}(k-q, k)\} \exp(-iEt) \tag{19}$$

$$M_q^y = -i\mu_0 V^{-1} \sum \{\xi_{\uparrow\downarrow}(k, k+q) - \xi_{\downarrow\uparrow}(k-q, k)\} \exp(-iEt) \tag{20}$$

$$M_q^z = \mu_0 V^{-1} \sum \{\xi_{\uparrow\uparrow}(k, k+q) - \xi_{\downarrow\downarrow}(k, k+q)\} \exp(-iEt) \tag{21}$$

Отсюда видно, что функции $\xi_{\uparrow\downarrow}$ и $\xi_{\downarrow\uparrow}$ представляют собой амплитуды колебаний поперечных компонент вектора намагниченности M^x и M^y, а полученная ветвь коллективного возбуждения может быть интерпретирована как отображающая колебания типа спиновых волн. Дисперсионный закон $E \sim q^2$, полученный в настоящей работе, совпадает с известным результатом ([8, 9]) для гейзенберговской модели, а также с результатом работы ([10]), полученным с помощью теории Фермижидкости Ландау.

Рассмотрим теперь вторую ветвь спектра, у которой $\xi_{\uparrow\downarrow} = \xi_{\downarrow\uparrow} = 0$. Для этой ветви имеем:

$$\begin{aligned} E\xi_{\uparrow\uparrow}(k, k+q) &= (\bar{E}_\uparrow(k+q) - \bar{E}_\uparrow(k))\,\xi_{\uparrow\uparrow}(k, k+q) + \\ &+ (n_\uparrow(k) - n_\uparrow(k+q)) \sum [U(k, k+q) - U(k, k')] \times \\ &\times (\xi_{\uparrow\uparrow}(k', k'+q) + \xi_{\downarrow\downarrow}(k', k'+q)); \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} E\xi_{\downarrow\downarrow}(k, k+q) &= (\bar{E}_\downarrow(k+q) - \bar{E}_\downarrow(k))\,\xi_{\downarrow\downarrow}(k, k+q) + \\ &+ (n_\downarrow(k) - n_\downarrow(n+q)) \sum [U(k, k+q) - U(k, k')] \times \\ &\times (\xi_{\uparrow\uparrow}(k', k'+q) + \xi_{\downarrow\downarrow}(k', k'+q)). \end{aligned} \tag{23}$$

Из выражения (21) видно, что эта ветвь соответствует колебаниям продольной компоненты вектора намагниченности M^z. Она также связана с колебаниями плотности числа частиц. Заметим, что при $T=0$ сумма в правой части уравнения (23) исчезает в силу (4) и в (22) можно полагать $\xi_{\downarrow\downarrow} = 0$. При этом, в случае, когда Ферми-область G совпадает с одной из зон Бриллюэна, непрерывный спектр рассматриваемой ветви отделен от нуля щелью порядка энергии запрещенной зоны. При отличных от нуля температурах появляется непрерывный спектр, начинающийся с нуля. Что касается дискретного спектра рассматриваемой ветви, то, не вдаваясь в детали решения уравнения (22) и (23), укажем лишь, что вследствие кулоновского взаимодействия между электронами мы имеем коллективное возбуждение значительной энергии, соответствующее обычным плазменным колебаниям.

Рассмотрим теперь уравнение (1) для состояния с винтообразным расположением спинов, предложенным Оверхаузером ([4]) (см. также ([5])). Нетрудно показать, что для этого состояния (при $T=0$):

$$F_{\uparrow\uparrow}(k, k') = \cos^2\theta_k \delta_{kk'}, \quad F_{\downarrow\downarrow}(k+Q, k'+Q) = \sin^2\theta_k \delta_{kk'},$$

$$F_{\uparrow\downarrow}(k, k') = \cos\theta_k \sin\theta_k \delta_{k', k+Q}, \tag{24}$$

$$\overline{E}_{\uparrow\uparrow}(k, k') = \varepsilon_k \delta_{kk'}, \quad \overline{E}_{\downarrow\downarrow}(k+Q, k'+Q) = \varepsilon_{k+Q}\delta_{kk'}$$

$$\overline{E}_{\uparrow\downarrow}(k, k') = -g_k \delta_{k', k+Q} \quad k \in A \tag{25}$$

(все обозначения совпадают с обозначениями работы ([5])).

Как видно, в этом случае амплитуды $\xi_{\uparrow\uparrow}$, $\xi_{\downarrow\downarrow}$, $\xi_{\uparrow\downarrow}$ и $\xi_{\downarrow\uparrow}$ оказались перепутанными и спектр элементарных возбуждений не распадается просто на две отдельные ветви $\xi_{\sigma\sigma}$ и $\xi_{\sigma,-\sigma}$, как в случае ферромагнитного состояния. Иными словами, колебания плотности и колебания спинов оказались связанными между собой. Однако если перейти к операторам b ([5]), описывающим пары электронов, характеризуемых волновыми векторами k и $k+Q$ и противоположными спинами, то в случае нулевого относительного волнового вектора двух элементарных возбуждений ($q = k_2 - k_1 = 0$) указанные две ветви для операторов b все же расщепляются. Имеем

$$E\xi_{\uparrow\downarrow}(k) = (2g_k/\sin 2\theta_k)\,\xi_{\uparrow\downarrow}(k) - \sum U(k', k)\cos^2(\theta_k - \theta_{k'})\xi_{\uparrow\downarrow}(k') +$$

$$+ \sum U(k', k)\sin^2(\theta_k - \theta_{k'})\,\eta_{\uparrow\downarrow}(k'), \tag{26}$$

$$\eta_E(k) = \xi^*_{-E}(k).$$

Нетрудно убедиться, что наряду с непрерывным спектром, отделенным от нуля щелью $2g$, уравнения (26) имеют еще изолированное решение

$$\xi_{\uparrow\downarrow}(k) = -\eta_{\uparrow\downarrow}(k) = \sin\theta_k \cos\theta_k, \quad E = 0. \tag{27}$$

Разлагая это решение по степеням $|q|$ и пренебрегая влиянием колебаний плотности, мы убеждаемся, что при малых $|q|$ закон дисперсии для дискретного спектра является линейным.

Автор выражает свою искреннюю благодарность академику Н. Н. Боголюбову и С. В. Тябликову за внимание и интерес к работе.

ЦНИ физико-механическая лаборатория
Академии наук Армянской ССР

ՅԱՆ ՇԻ

Որոշ մագնիսական վիճակների կոլեկտիվ գրգռումների մասին

Ստացվել և ուսումնասիրվել են պինդ մարմիններում էլեկտրոնների սիստեմի երկմասնի փալի էլեմենտար գրգռումների հավասարումները երկու մագնիսական վիճակների՝ ֆերոմագնիսական և օվերհաուզերի անտիֆերոմագնիսական վիճակների համար։ Ֆերոմագնիսական վիճակի համար ստացված էլեմենտար գրգռումների սպեկտրը բաժանվում է երկու ճյուղի։ Նրանցից մեկին համապատասխանում են հակադիր սպիններով, իսկ մյուսին՝ միատեսակ սպիններով մասնիկների և խոռոչների տատանումները։ Առաջին ճյուղը բացի անընդհատ սպեկտրից ունի նաև դիսկրետ սպեկտր, որն սկզբում քառակուսային կախվածություն ունի և համապատասխանում է պլազմային տատանումներին։ Օվերհաուզերի վիճակի համար այդ երկու ճյուղերը միմյանցից փոխադարձաբար կախված են դառնում։ Սպինային ալիքների սպեկտրն սկզբում մոտավորապես գծային կախվածություն ունի։

ЛИТЕРАТУРА — ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *Ф. Блох*, Z. Physik, 57, 549, (1929). [2] *Ф. Иsамото, К. Савада*, Phys. Rev. 126, 887, (1962). [3] *К. Савада, К. Бракнер, Н. Фукуда, Р. Брут*, Phys. Rev. 108, 507 (1957). [4] *А. В. Оверхаузер*, Phys. Rev. 128, 1437, (1962). [5] *Ян Ши*, ДАН СССР, 153, 798 (1963); ДАН АрмССР, 37, 191 (1963). [6] *Н. Н. Боголюбов*, УФН, 67, 549, (1959). [7] *Э. Р. Велибеков*, ДАН СССР 142, 1268, (1962). [8] *Ф. Блох*, Z. Physik, 61, 206, (1930). [9] *Л. Д. Ландау* и *Е. М. Лифшиц*, Sow. Phys. 8, 157, (1935). [10] *А. А. Абрикосов* и *И. Е. Дзялошинский*, ЖЭТФ, 35, 771, (1957).