ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՌ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
XL 1965 2

ФИЗИКА

Ян Ши

Температурная зависимость намагниченности ферромагнетика в модели коллективизированных электронов

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Н. М. Кочаряном 9/VII 1964)

Существующие теории ферромагнетизма переходных металлов по существу базируются либо на модели локализованных электронов, либо на модели коллективизированных (блуждающих) электронов. В первой модели предполагается, что электроны, отвечающие за ферромагнетизм, локализованы на атомах кристаллической решетки и взаимодействуют между собой посредством обменных сил. В этой модели была развита теория спиновых волн ([1-3]) и рассчитана температурная зависимость намагниченности ([1, 4, 5]), которая, как известно, пропорциональна $T^{3/2}$ при низких температурах.

Вторая модель, модель коллективизированных электронов, допускает движение „магнитных" электронов в кристалле и поэтому представляется более реалистичной для описания ферромагнитных металлов (группы железа). Однако в ранних вариантах ([6]) этой модели не учитывалась корреляция между электронами, поэтому низкотемпературная зависимость намагниченности получалась квадратичной или даже экспоненциальной, что не согласовывалось с экспериментальными данными. В более поздних работах ([7, 8]) рассматривался вопрос об элементарных возбуждениях в такой модели. Оказалось, что наряду с однофермионными возбуждениями (которые только и рассматривались в ([6])), обладающими непрерывным спектром, существует еще дискретная ветвь возбуждений бозевского типа (спиновая волна), которая соответствует коллективному возбуждению в рассматриваемой модели (см. ([8])). В настоящей работе с помощью метода двухвременных функций Грина мы получим трансцендентное уравнение, определяющее зависимость намагниченности в модели коллективизированных электронов с учетом эффекта корреляции между взаимодействующими электронами. Оказывается, что в области низких температур наиболее существенный член намагниченности пропорционален $T^{3/2}$, как и в модели локализованных спинов, кроме того, существует еще член T^2 или $\exp(-\Delta E/T)$. При предельном переходе к случаю локализованных электронов полученное уравнение дает известную интерполяционную формулу Боголюбова и Тябликова ([4, 5]) для гейзенберговской модели.

Рассмотрим систему N взаимодействующих электронов, движущихся в поле ионов кристаллической решетки. Гамильтониан такой системы можно записать в виде*

$$H = \sum_f E(f) \overset{+}{a}_f a_f + \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2 f_2' f_1'} U(f_1, f_2; f_2', f_1') \overset{+}{a}_{f_1} \overset{+}{a}_{f_2} a_{f_2'} a_{f_1'}. \quad (1)$$

Введем „коллективные" двухвременные функции Грина (см. [9])

$$\langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+qs} | \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle \text{ и } \langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+q,-s} | \overset{+}{a}_{p+q,-s} a_{ps} \rangle\rangle. \quad (2)$$

Расцепляя цепочку уравнений для функций Грина на первом звене (см. [8]), получаем для Фурье-образов функций (2) уравнения

$$[E - \tilde{E}_s(k+q) + \tilde{E}_s(k)] \langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+qs} | \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle + [n_s(k) - n_s(k+q)] \times$$
$$\times \sum_{k'} \Big\{ [U(k', k+q; k'+q, k) - U(k', k+q; k, k'+q)] \times$$
$$\times \langle\langle \overset{+}{a}_{k's} a_{k'+qs} | \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle - U(k', k+q; k, k'+q) \langle\langle \overset{+}{a}_{k',-s} a_{k'+q,-s} | \times$$
$$\times \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle \Big\} = \frac{i}{2\pi} \delta(p-k) [n_s(k) - n_s(k+q)], \quad (3)$$

и

$$[E - \tilde{E}_{-s}(k+q) + \tilde{E}_s(k)] \langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+q,-s} | \overset{+}{a}_{p+q,-s} a_{ps} \rangle\rangle +$$
$$+ [n_s(k) - n_{-s}(k+q)] \sum_{k'} U(k', k+q; k'+q, k) \langle\langle \overset{+}{a}_{k's} a_{k'+q,-s} | \times$$
$$\times \overset{+}{a}_{p+q,-s} a_{ps} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta(p-k) [n_s(k) - n_{-s}(k+q)], \quad (4)$$

где — $\tilde{E}_s(k)$ — одночастичная энергия с учетом самосогласованного потенциала

$$\tilde{E}_s(k) = E_s(k) + \sum_{k', s'} [U(k, k'; k', k) - U(k, k'; k, k') \delta_{ss'}] n_{s'}(k'), \quad (5)$$

а $n_s(k) = \langle \overset{+}{a}_{ks} a_{ks} \rangle$ — среднее число заполнения в состоянии (k, s).

Общее исследование особенностей Фурье-образов функций Грина на основании уравнений (3) и (4) проводилось в [8]. Для вычисления намагниченности необходимо получить явный вид самих функций. Решить уравнения (3) и (4) в общем виде затруднительно. Имея в виду приложение к d-электронам переходных металлов, в настоящей работе мы будем рассматривать нашу задачу в приближении сильной связи.

Разложим волновую функцию одноэлектронного состояния $\psi_{ks}(r)$ по функциям Ванье $\Psi_s(r - R_m)$,

---

* Все обозначения те же, что и в работе [8].

$$\psi_{ks}(r) = N^{-1/2}\sum_m \Psi_s(r - R_m)\exp ikR_m, \tag{6}$$

где R_m — радиус-вектор m-го узла решетки.

Тогда собственная энергия электронов $E(k)$ и матричные элементы взаимодействия $U(k_1, k_2; k_2', k_1')$ выражаются формулами

$$E(k) = N^{-1}\sum_{m,\,m'} E(R_m, R_{m'})\exp ik(R_{m'} - R_m), \tag{7}$$

$$U(k_1, k_2; k_2', k_1') = N^{-2}\sum_{m,\,l,\,l',\,m'} U(R_m, R_l; R_{l'}, R_{m'})\times$$

$$\times\exp i(k_1' R_{m'} + k_2' R_{l'} - k_2 R_l - k_1 R_m), \tag{8}$$

где

$$E(R_m, R_{m'}) = \int \overset{*}{\Psi}(r - R_m)\,\mathrm{H}(r)\Psi(r - R_{m'})\,dr. \tag{9}$$

($\mathrm{H}(r)$ — аддитивная часть гамильтониана),

$$U(R_m, R_l; R_{l'}, R_{m'}) =$$

$$= e^2\int\int \overset{*}{\Psi}(r - R_m)\overset{*}{\Psi}(r' - R_l)\Psi(r' - R_{l'})\Psi(r - R_{m'})\,|r - r'|^{-1}dr\,dr'. \tag{10}$$

Вследствие малости перекрытия функций Ванье величины $E(R_m, R_{m'})$ и $U(R_m, R_l; R_{l'}, R_{m'})$ быстро уменьшаются при относительном удалении аргументов друг от друга. Единственным исключением является величина $U(R_m, R_l; R_l, R_m)$, которая уменьшается сравнительно медленно, приблизительно как $|R_m - R_l|^{-1}$. В качестве первого приближения ограничимся главными членами в разложениях (7) и (8):

$$E(k) = E_0 + E_1\varphi(k)/2, \tag{11}$$

$$U(k_1, k_2; k_2', k_1') = N^{-1}[U_0 + U_1\varphi(k_1 - k_2') +$$

$$+ \sum_R U(0, R; R, 0)\exp i(k_1 - k_1')R]. \tag{12}$$

Здесь $E_0 = E(0, 0)$, $E_1 = 2zE(0, a)$, $U_0 = U(0, 0; 0, 0)$, $U_1 = zU(0, a; 0, a)$, где a — радиус-вектор ближайшего соседа, а z — координационное число. Функция $\varphi(k)$ определяется формулой

$$\varphi(k) = z^{-1}\sum_a \exp ika, \tag{13}$$

где $\sum\limits_a$ означает суммирование по всем ближайшим соседям. Заметим, что вид функции $\varphi(k)$ зависит только от типа кристаллической структуры.

Из-за наличия экспоненциального множителя последний член в первой части равенства (12) имеет заметное значение лишь в весьма небольшой области k-пространства:

$$|k_1 - k_1'| \lesssim V^{-1/3}, \tag{14}$$

где V-объем кристалла.

В работе ([8]) уже отмечалось, что для параллельных спинов спектр индивидуальных (однофермионных) возбуждений начинается с нуля, а спектр коллективных возбуждений отделен от нуля энергетической щелью значительной величины. Поэтому для сравнительно невысоких температур можно вообще не учитывать последнего, а ограничиться только индивидуальными возбуждениями. Совершенно иное дело с антипараллельными спинами. Для них спектр коллективных возбуждений (спиновых волн) начинается с нуля или отделен щелью небольшой величины порядка зеемановской энергии, поэтому его учет является существенным. На основании сказанного в уравнении (3) мы опустим последний член в левой части и приближенно выразим функцию $\langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+qs} | \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle$ в виде

$$\langle\langle \overset{+}{a}_{ks} a_{k+qs} | \overset{+}{a}_{p+qs} a_{ps} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \delta(p-k) \frac{n_s(k) - n_s(k+q)}{E - \bar{E}_s(k+q) + \bar{E}_s(k)}. \tag{15}$$

Что касается уравнения (4), то его следует решать более тщательно. Подставляя сюда выражения (11) и (12) и имея в виду для последнего члена выражения (12) условие (14), можем написать

$$[E - \bar{E}_\downarrow(k+q) + \bar{E}_\uparrow(k)] \langle\langle \overset{+}{a}_{k\uparrow} a_{k+q\downarrow} | \overset{+}{a}_{p+q\downarrow} a_{p\uparrow} \rangle\rangle +$$

$$+ N^{-1}[U_0 + U_1\varphi(q)][n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k+q)] \sum_{k'} \langle\langle \overset{+}{a}_{k'\uparrow} a_{k'+q\downarrow} | \overset{+}{a}_{p+q\downarrow} a_{p\uparrow} \rangle\rangle =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \delta(p-k)[n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k+q)]. \tag{16}$$

Здесь мы уже отбросили члены порядка V^{-1}, исчезающие после предельного перехода $V \to \infty$, $N \to \infty$ ($V/N = v = \text{const}$).

Решение уравнения (16) имеет вид

$$\langle\langle \overset{+}{a}_{k\uparrow} a_{k+q\downarrow} | \overset{+}{a}_{p+q\downarrow} a_{p\uparrow} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{\delta(p-k)[n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k+q)]}{[E - \bar{E}_\downarrow(k+q) + \bar{E}_\uparrow(k)][1 - P(q, E)]}, \tag{17}$$

где $P(q, E)$ — „поляризационный оператор“ в принятом приближении

$$P(q, E) = N^{-1}[U_0 + U_1\varphi(q)] \sum_k \frac{n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k+q)}{\bar{E}_\downarrow(k+q) - \bar{E}_\uparrow(k) - E}, \tag{18}$$

Зная функции Грина, можно по известной спектральной теореме (см., например, ([9])) вычислить соответствующие корреляционные функции. Имеем

$$\langle a^+_{k+qs} a_{ks} a^+_{ps} a_{p+qs} \rangle = \delta(p-k) \frac{n_s(k) - n_s(k+q)}{\exp\{[\bar{E}_s(k+q) - \bar{E}_s(k)]/T\} - 1}, \quad (19)$$

$$\langle a^+_{k+q\downarrow} a_{k\uparrow} a^+_{k\uparrow} a_{k+q\downarrow} \rangle =$$

$$-\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [\exp(\omega/T) - 1]^{-1} \mathrm{Im} \frac{n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k+q)}{[\omega - \bar{E}_\downarrow(k+q) + \bar{E}_\uparrow(k)][1 - P(q, E)]} d\omega. \quad (20)$$

Намагниченность системы можно было бы получить стандартным путем как частную производную свободной энергии по внешнему магнитному полю. Однако мы поступим несколько иначе, задавшись целью сразу получить для нее трансцендентное уравнение, не вычисляя свободной энергии. Для этого воспользуемся условием постоянства полного числа частиц N, т. е. $\langle N^2 \rangle - \langle N^5 \rangle = 0$, или

$$\sum_{k,k',s} \langle a^+_{ks} a_{ks} a^+_{k's} a_{k's} \rangle + 2 \sum_{k,k'} \langle a^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow} a^+_{k'\downarrow} a_{k'\downarrow} \rangle = N^2 =$$

$$= N \sum_k [\langle a^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow} \rangle + \langle a^+_{k\downarrow} a_{k\downarrow} \rangle]. \quad (21)$$

Это равенство можно переписать в виде

$$N^{-1} \sum_{kk's} \langle a^+_{ks} a_{ks} a^+_{k's} a_{k's} \rangle - 2N^{-1} \sum_{kk'} \langle a^+_{k'\downarrow} a_{k\uparrow} a^+_{k\uparrow} a_{k'\downarrow} \rangle =$$

$$= \sum_{k'} [\langle a^+_{k\uparrow} a_{k\uparrow} \rangle - \langle a^+_{k\downarrow} a_{k\downarrow} \rangle] = N\sigma, \quad (22)$$

где $\sigma = M_z V / N\mu_0$ — относительная намагниченность системы.

Подставляя выражения (19) и (20) в равенство (22) и переходя от суммы к интегрированию, после небольших упрощений получаем

$$\sigma = 1 - \frac{2v}{\pi (2\pi)^3} \int \frac{dq}{U_0 + U_1 \varphi(q)} \int_{-\infty}^{\infty} [\exp(\omega/T) - 1]^{-1} \mathrm{Im} \frac{P(q, \omega)}{1 - P(q, \omega)} d\omega. \quad (23)$$

Интеграл, стоящий в правой части равенства (23), зависит от относительной намагниченности σ. Поэтому равенство (23) есть трансцендентное уравнение, определяющее намагниченность σ в зависимости от температуры T и магнитного поля H.

Как уже было показано в [8], особенности функции Грина для антипараллельных спинов при небольших q имеют вид изолированного полюса и линии разреза на действительной оси комплексной плоскости энергии. Соответственно формулу (23) можно записать в виде

$$\sigma = 1 - Q_1 - Q_2, \quad (24)$$

где Q_1 — вклад от коллективного возбуждения (изолированного полюса), Q_2 — вклад от индивидуальных возбуждений (линии разреза).

Рассмотрим сначала вклад Q_1. Из-за экспоненциального множителя в подынтегральной функции главную роль играют малые значения энергии. Для малых E и q, удовлетворяющих условиям

$$|E - 2\mu_0 H| \ll U\sigma \qquad (U = U_0 + U_1)$$

$$|q| \ll U\sigma / \left| \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right|, \tag{25}$$

поляризационный оператор $P(q, E)$ можно разложить по степеням E и q

$$P(q, E) = 1 + \frac{1}{U\sigma}\Bigg\{E - 2\mu_0 H + U_1\sigma q^2 \sum_{\alpha,\beta} e^\alpha e^\beta \varphi''(0) -$$

$$- \frac{E_1 q^2}{H\sigma} \sum_{k\,\alpha\,\beta} [n_\uparrow(k) - n_\downarrow(k)] e^\alpha e^\beta \left[\frac{\varphi''_{\alpha\beta}(k)}{2} - \frac{E_1}{U\sigma} \varphi'_\alpha(k)\, \varphi'_\beta(k)\right]\Bigg\} + \cdots =$$

$$= 1 + \frac{1}{U\sigma}(E - E_q), \tag{26}$$

$$(e^\alpha = q^\alpha / |q|).$$

Здесь

$$\varphi'_\alpha(k) = \frac{\partial \varphi(k+q)}{\partial q^\alpha}\Bigg|_{q=0} = i z^{-1} \sum_a a^\alpha \exp ika$$

$$\varphi''_{\alpha\beta}(k) = \frac{\partial^2 \varphi(k+q)}{\partial q^\alpha \partial q^\alpha}\Bigg|_{q=0} = - z^{-1} \sum_a a^\alpha a^\beta \exp ika. \tag{27}$$

Таким образом, для вклада Q_1 получаем простое выражение

$$Q_1 = \frac{2v\sigma}{(2\pi)^3} \int \frac{dq}{\exp(E_q/T) - 1}, \tag{28}$$

где спектр спиновых волн E_q определяется из формолы (26) (см. также ([8])). При низких температурах из (28) получаем: $Q_1 \sim \sigma T^{3/2}$.

Кстати заметим, что если ограничиться только этим вкладом, то из выражений (24) и (28) мы получим

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int \operatorname{cth} \frac{E_q}{2T}\, dq. \tag{29}$$

Уравнение (29) по виду точно совпадает с соответствующим уравнением для гейзенберговской модели, полученным и исследованным в работах Н. Н. Боголюбова и С. В. Тябликова ([4]) и С. В. Тябликова ([5]). Единственное различие состоит в спектре спиновых волн E_q: в модели коллективизированных электронов в выражении для E_q появляются дополнительные члены с E_1, обусловленные подвижностью электронов и связанные с конечной шириной соответствующей энергетической зоны. В предельном же случае, когда электроны считаются неподвижными и жестко закрепленными к атомам кристалла, ширина зоны стремится к нулю, и спектр E_q полностью совпадает со спектром спиновых волн в гейзенберговской модели — наша формула для намагниченности переходит в формулу Боголюбова—Тябликова.

Однако подвижность электронов не только вносит поправку в спектр спиновых волн. При ее учете мы должны еще рассматривать вклад в намагниченность от индивидуальных возбуждений. При этом следует различить два случая: а) когда спектр индивидуальных возбуждений отделен от нуля энергетической щелью ΔE:

$$\min\left[\bar{E}_{\downarrow}(k+q)-\bar{E}_{\uparrow}(k)\right]=\Delta E>0 \quad (k \in A); \tag{30}$$

б) когда этот спектр не отделен от нуля щелью, т. е. при некоторых значениях q $(q_1 \leqslant |q| \leqslant q_2)$

$$\min\left[\bar{E}_{\downarrow}(k+q)-\bar{E}_{\uparrow}(k)\right]=0. \tag{31}$$

В случае а) главная часть вклада Q_2 экспоненциально зависит от температуры:

$$Q_2 \sim \exp\left(-\Delta E/T\right), \tag{32}$$

а в случае б), если считать электроны обоих направлений спинов вырожденными, главная часть вклада Q_2 пропорциональна квадрату температуры:

$$Q_2 \sim T^2. \tag{33}$$

ЦНИ физико-техническая лаборатория
Академии наук Армянской ССР

ՅԱՆ ՇԻ

Ֆեռոմագնետիկի մագնիսականացման ջերմաստիճանային կախվածությունը կոլեկտիվիզացված էլեկտրոնների մոդելում

Հիմնվելով ([6])-ի վրա, ստացված է ֆեռոմագնիսական մետաղի մագնիսականացման ջերմաստիճանային կախվածությունը կոլեկտիվիզացված էլեկտրոնների մոդելի համար, էլեկտրոնների միջև կորելյացիայի հաշվառմամբ։

Ցածր ջերմաստիճաններում մագնիսականացումը պարունակում է ինչպես սպինային ալիքներով պայմանավորված $T^{3/2}$ անդամ, այնպես էլ անհատական գրգռումներով պայմանավորված $\exp(-\Delta/T)$ կամ T^2 անդամ։ Լոկալիզացված էլեկտրոնների գոտու համար սահմանային անցման ժամանակ ստացված բանաձևն անցնում է Հեյզենբերգի մոդելի համար Բոգոլյուբովի—Տյաբլիկովի հայտնի ինտերպոլյացիոն բանաձևին ([4, 5])։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *Ф. Блох*, Zs. f. Phys. 61, 206 (1930). [2] *Т. Хольштейн, Х. Примаков*, Phys. Rev. 58, 1098 (1940). [3] *Ф. Дайсон*, Phys. Rev. 102, 1217, 1230 (1956). [4] *Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов*, ДАН СССР, т. 126, 53 (1959). [5] *С. В. Тябликов*, УМЖ, 11, 287 (1959). [6] *Е. С. Стонер*, Proc. Roy. Soc. A165, 372 (1938); A169, 339 (1939).

Е. П. Уольфарт, Proc. Roy. Soc. A195, 434 (1949); Rev. Mod. Phys. 25, 211 (1953); *А. Б. Лидьяр,* Proc. Phys. Soc. A64, 814 (1951); A65, 885 (1952). [7] *А. А. Абрикосов, И. Е. Дзялошинский,* ЖЭТФ, 35, 771 (1958); *Т. Изуяма,* Prod. Theor. Phys. 23, 9.. (1960); *Д. М. Эдуардс,* Proc. Roy. Soc. A269, 338 (1962); *М. М. Антонов,* Bull. Ac. Phys. Soc. 8, 227 (1953). [8] *Ян Ши,* ДАН АрмССР, 39, № 2, 73 (1964). [9] *В. Л. Бонч-Буревич, С. В. Тябликов,* Метод функций Грина в статистической механике, Физматгиз, 1961.