

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ
И
МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ

ТОМ 31

1

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

1971

УДК 548.116

К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНИТНОГО КРИСТАЛЛА С ДВУМЯ СПИНАМИ В УЗЛЕ

Л. А. Максимов и А. Л. Куземский

Рассматривалась задача о намагниченности и спектре магнитных возбуждений ферромагнитного кристалла в случае, когда суммарный спиновый момент в каждом узле образуется в результате сложения двух взаимодействующих электронных спинов.

На основе простой модели показано, что даже при относительно слабом, порядка междоузельного, взаимодействии внутри узла температура Кюри близка к предельной температуре Кюри при жесткой связи спинов в узле. Помимо обычной, «акустической» ветви магнитных возбуждений, найдены высокоэнергетические возбуждения системы, связанные с переходами между триплетным и синглетным состояниями в узле, что невозможно получить при рассмотрении сильно связанных спинов.

Задача о взаимодействии спинов внутри одного узла решается точно, а междоузельное взаимодействие учитывается в приближении самосогласованного поля при вычислении намагниченности и в приближении Боголюбова—Тябликова при исследовании спектра магнитных возбуждений.

1. Наиболее исследованной моделью ферромагнетизма является модель Гайзенберга (см., напр., [1]), в которой принимается, что в узлах решетки расположены спины, взаимодействующие обменным образом. Обычно [2—5] при этом не всегда учитывают тот факт, что спин узла с $s > 1/2$ образуется в результате сложения спинов нескольких электронов атома и, вообще говоря, при взаимодействии полный спин атома может не сохраняться.

Представляет определенный интерес проследить влияние внутренней структуры спина атома с $s > 1/2$ на спектр магнитных возбуждений кристалла. Методом приближенного вторичного квантования эта задача рассматривалась Е. И. Кондорским и А. С. Паховым [6, 7], а также Ю. А. Изюмовым [8]. Случай нескольких спинов в узле, когда внутриузельное взаимодействие много больше междоузельного, рассматривался Ю. А. Изюмовым и Е. Н. Яковлевым [9] методом двухвременных температурных функций Грина. Условия применимости модели Гайзенберга для случая нескольких магнитных электронов на атом подробно исследовались Ю. П. Ирхиным [10].

В предлагаемой работе рассматривается модель ферромагнитного кристалла, в каждом узле которого суммарный спиновый момент образуется в результате сложения двух взаимодействующих электронных спинов. В п. 3 исследуется характер температурной зависимости намагниченности системы в приближении самосогласованного поля. В п. 4 обсуждается точно решаемая задача о двух спинах во внешнем поле. Результаты этого рассмотрения используются в п. 5 при изучении спектра магнитных возбуждений системы методом двухвременных температурных функций Грина.

2. Будем исходить из модельного гамильтониана [11]

$$H = -\mu H \sum_{f\alpha} S_{f\alpha}^z - \frac{1}{2} \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha, \beta} J(f\alpha; g\beta) (\lambda S_{f\alpha}^+ S_{g\beta}^- + S_{f\alpha}^z S_{g\beta}^z) -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{f, \alpha+\beta} J(f\alpha; f\beta) (\lambda S_{f\alpha}^+ S_{f\beta}^- + S_{f\alpha}^z S_{f\beta}^z). \quad (2.1)$$

Здесь f — индекс узла ($f=1 \dots N$); α — номер спина в узле ($\alpha=1,2$); $S_{f\alpha}$ — оператор спина $s = \frac{1}{2}$; $I(f\alpha; g\beta)$ — обменный интеграл. Случаю $\lambda=1$ соответствует изотропная модель, а случаю $\lambda=0$ модель типа модели Изинга. В настоящей работе мы не будем интересоваться возможностью антиферромагнитного упорядочения спинов в решетке и поэтому будем считать, что обменные интегралы:

$$J(f\alpha; f\beta) = I_1, \quad \alpha \neq \beta;$$

$$J(f\alpha; g\beta) \approx J(f; g), \quad f \neq g$$

неотрицательны.

3. Для качественного исследования намагниченности системы применим метод самосогласованного поля. Во втором члене гамильтониана (2.1), описывающем взаимодействие между спинами из разных узлов, выделим член, квадратичный по отклонениям спина от среднего значения (подробно рассмотрим случай $\lambda=1$, а для $\lambda=0$ приведем результат)

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = 2I_2 \sigma^2 N - (2I_2 \sigma + \mu H) \sum_{f\alpha} S_{f\alpha}^z - \frac{1}{2} I_1 \sum_{f, \alpha+\beta} S_{f\alpha} S_{f\beta} - \frac{1}{2} \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha, \beta} I \times \\ \times (f\alpha; g\beta) (S_{f\alpha} - \sigma_\alpha) (S_{g\beta} - \sigma_\beta), \end{aligned} \quad (3.1)$$

где $I_2 = \sum_f I(f, g)$ и $\langle S_{f\alpha} \rangle = \sigma_\alpha$, $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$.

По междоузельному взаимодействию задачу можно решать в приближении самосогласованного поля. Как известно [12], нулевое приближение этого метода получается здесь отбрасыванием последнего члена в (3.1). Взаимодействие между спинами внутри одного узла ни в каком приближении свести к самосогласованному полю нельзя. Это взаимодействие мы будем учитывать точно. В результате мы приходим к гамильтониану вида

$$\mathbf{H} = \sum_f \mathbf{H}_f,$$

где

$$\mathbf{H}_f = 2I_2 \sigma^2 + (2I_2 \sigma + \mu H) (S_{f1}^z + S_{f2}^z) - I_1 S_{f1} S_{f2}.$$

Свободная энергия в этом приближении распадается на сумму свободных энергий в одном узле

$$F_f = -T \ln Z_f,$$

причем статистическая сумма Z_f

$$\begin{aligned} Z_f = \text{Sp} e^{-\beta \mathbf{H}_f} = e^{-2I_2 \sigma^2 \beta} \left\{ e^{y + \beta I_1 / 4} + e^{\beta I_1 / 4} + e^{-y + \beta I_1 / 4} + e^{-\beta I_1 / 4} \right\} = \\ = e^{-2I_2 \sigma^2 \beta} e^{\beta I_1 / 4} \left\{ 2 \text{ch } y + 1 + e^{-\beta I_1} \right\}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где $\beta = 1/T$; $y = \beta (2I_2 \sigma + \mu H)$.

Принимая во внимание (3.2), получим

$$\beta F_f = \frac{(y - \beta \mu H)^2}{2I_2 \beta} - \beta I_1 / 4 - \ln \{ 2 \text{ch } y + 1 + e^{-\beta I_1} \}. \quad (3.3)$$

Средний спин σ находится из условия минимума свободной энергии $\partial F_1 / \partial \sigma = 0$ и равен

$$\sigma = \frac{y - \beta \mu H}{\beta I_2} = \frac{2 \operatorname{sh} y}{2 \operatorname{ch} y + 1 + e^{-\beta I_1}}. \quad (3.4)$$

Когда взаимодействие внутри узла много больше междоузельного взаимодействия ($I_1 \rightarrow \infty$), уравнение для среднего спина принимает вид

$$\sigma = \frac{2 \operatorname{sh} y}{2 \operatorname{ch} y + 1},$$

что является частным случаем функции Бриллюэна при $s=1$. При $H=0$ в такой системе имеет место фазовый переход при $T_c = 2/3 I_2$, то есть в пределе бесконечно большого внутриузельного взаимодействия спинов мы получаем хорошо известные результаты метода молекулярного поля для ферромагнитного кристалла с $s=1$.

В общем случае (при $H=0$) уравнение для T_c имеет вид

$$3 + e^{-\beta_c I_1} = 2 I_2 \beta_c, \quad (3.5)$$

где $\beta_c = 1/T_c$. Введем новые переменные $x = 2 I_2 \beta_c$ и $\alpha = \frac{1}{2} I_1 / I_2$. Тогда уравнение (3.5) переписывается в виде

$$3 + e^{-\alpha x} = x. \quad (3.6)$$

Решая графически уравнение (3.6), легко увидеть, что при увеличении взаимодействия в узле (I_2 фиксировано) температура Кюри увеличивается вплоть до $T_c = 2/3 I_2$. Аналогичным образом легко найти поведение

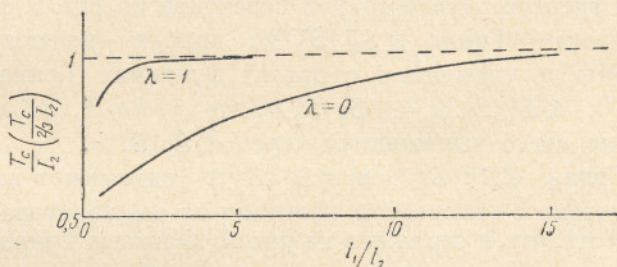


Рис. 1. Зависимость критической температуры от соотношения обменных интегралов.

намагниченности в модели типа Изинга (в (2.1) $\lambda=0$). Снова находим, что при фиксированном междоузельном взаимодействии ($I_2 = \text{const}$) температура Кюри возрастает с ростом I_1 вплоть до $T_c = I_2$. Результаты графического решения уравнения (3.6) для $\lambda=1$ и аналогичного уравнения для $\lambda=0$ представлены на рис. 1.

Таким образом, мы видим, что внутреннее движение спинов внутри одного узла сравнительно слабо влияет на поведение температурной зависимости намагниченности.

4. Для исследования спектра магнитных возбуждений системы мы воспользуемся методом двухвременных температурных функций Грина [1, 13].

Рассмотрим сначала систему, в которой обменное взаимодействие между узлами отсутствует. Тогда проблема сводится к точно решаемой задаче о двух взаимодействующих спинах во внешнем поле

$$\mathbf{H} = -\mu H (S_1^z + S_2^z) - I_1 (S_1 S_2). \quad (4.1)$$

Ясно, что энергетический спектр системы (4.1) легко получить непосредственным решением уравнения Шредингера. Однако для последующего анализа спектра магнитных возбуждений системы (2.1) полезно найти возбуждения системы (4.1) методом функций Грина. Очевидно, что для такого простого гамильтониана (4.1) система уравнений для функций Грина сводится всего к двум уравнениям и решается точно. При этом мы находим, что функция Грина $\langle\langle S_1^+(t) | S_1^-(0) \rangle\rangle$ имеет полюса μH ,

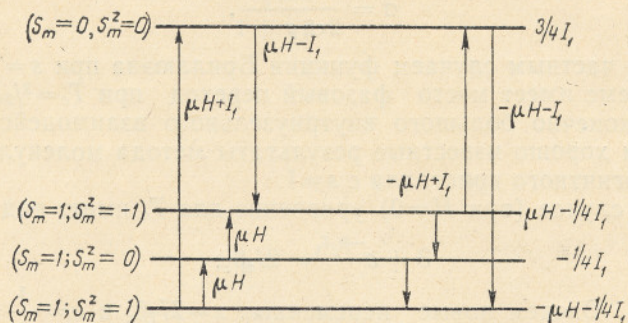


Рис. 2. Спектр магнитных возбуждений двухспиновой системы.

$\mu H + I_1$ и $\mu H - I_1$ функция Грина $\langle\langle S_1^-(t) | S_1^+(0) \rangle\rangle$ имеет полюсы — $\mu H_1 = \mu H - I_1$ и $-\mu H + I_1$. Интерпретация их изображена на рис. 2. Горизонтальные линии изображают уровни энергии системы. Слева отмечены величины полного спина S_i и его проекции. Справа — собственные значения энергии. Левая группа переходов на рис. 2 соответствует полюсам функции Грина $\langle\langle S_1^+ | S_1^- \rangle\rangle$, правая — полюсам функции $\langle\langle S_1^- | S_1^+ \rangle\rangle$. Мы не упоминаем о других функциях Грина, поскольку $\langle\langle S_1^i | S_2^k \rangle\rangle = 0$; $\langle\langle S_1^i | S_1^k \rangle\rangle = \langle\langle S_2^i | S_2^k \rangle\rangle$, где $i, k = \pm, z$, а остальные функции Грина легко выражаются через $\langle\langle S_1^i | S_1^k \rangle\rangle$.

Функции Грина $\langle\langle S_1^+ | S_1^- \rangle\rangle$ и $\langle\langle S_1^- | S_1^+ \rangle\rangle$ описывают всевозможные переходы в системе с изменением проекции на ось квантования суммарного спина на ± 1 , что и отражено на рис. 2. Функция Грина $\langle\langle S_1^z | S_1^z \rangle\rangle$ будет, очевидно, описывать переходы в системе без изменения проекции суммарного спина. В основном состоянии спины направлены параллельно полю ($S_i = 1, S_i^z = 1$). Полюсы функции Грина $\langle\langle S_1^+ | S_1^- \rangle\rangle$ равные μH и $\mu H + I_1$ отвечают разрешенным переходам из основного в возбужденные состояния, так что соответствующие вычеты отличны от нуля и при нулевой температуре. Полюс $\mu H - I_1$, который соответствует переходу из возбужденного состояния на более низкий энергетический уровень имеет вычет, исчезающий при нулевой температуре. Такое поведение вычетов связано с тем, что они пропорциональны населенности начальных состояний. Аналогично ведут себя вычеты полюсов функции Грина $\langle\langle S_1^- | S_1^+ \rangle\rangle$.

5. Определим теперь спектр магнитных возбуждений полной системы (2.1). Подробно рассмотрим случай $\lambda = 1$, а для случая $\lambda = 0$ приведем только результат.

Будем рассматривать следующие функции Грина:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_{m\lambda}^+(t) | S_{n\mu}^-(0) \rangle\rangle &= \theta(t) \langle [S_{m\lambda}^+(t), S_{n\mu}^-(0)] \rangle; \\ \langle\langle S_{m\lambda}^-(t) | S_{n\mu}^+(0) \rangle\rangle &= \theta(t) \langle [S_{m\lambda}^-(t), S_{n\mu}^+(0)] \rangle, \end{aligned} \quad (5.1)$$

где $S_{m\lambda}^{\pm}(t)$ — гайзенберговское представление оператора поперечных компонент спина с полным гамильтонианом (2.1) для $\lambda=1$. Функции Грина (5.1) описывают динамическое поведение системы с изменением z -проекции суммарного спина на единицу, при этом полюса функций Грина (5.1) определяют спектр магнитных возбуждений системы.

Перейдем к определению функций Грина. Пользуясь уравнением движения для оператора $S_{m\lambda}^{\pm}$, для функции Грина $\langle\langle S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle$ получаем уравнение

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle S_{m\lambda}^{\pm}(t) | S_{n\mu}^{\mp}(0) \rangle\rangle = i \delta(t) \delta_{mn} \delta_{\lambda\mu} \langle 2S_{m\lambda}^z \rangle + \mu H \langle\langle S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \\ + \sum_{f \neq m, \alpha} J(f\alpha; m\lambda) \langle\langle S_{f\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \sum_{\alpha \neq \lambda} J(m\alpha; m\lambda) \langle\langle S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle - \\ - \sum_{f \neq m, \alpha} J(f\alpha; m\lambda) \langle\langle S_{m\lambda}^z S_{f\alpha}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle - \sum_{\alpha \neq \lambda} J(m\alpha; m\lambda) \langle\langle S_{m\lambda}^z S_{m\alpha}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle. \quad (5.2)$$

Здесь и ниже члены с $f \neq m$ и член с $f = m$ мы будем писать отдельно. Это естественно, поскольку для одного узла задача решается точно, а по междоузельному взаимодействию — приближенно. Выразим в уравнении (5.2) часть вторых функций Грина (для которых $f \neq m$) через первые:

$$\langle\langle S_{f\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle \approx \langle S_{f\alpha}^z \rangle \langle\langle S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle, \quad f \neq m; \\ \langle\langle S_{m\lambda}^z S_{f\alpha}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle \approx \langle S_{m\lambda}^z \rangle \langle\langle S_{f\alpha}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle, \quad f \neq m. \quad (5.3)$$

Это расщепление принадлежит Тябликову [1]. Заметим, что в силу трансляционной инвариантности величины $\langle S_{f\alpha}^z \rangle$, не зависят от индекса узла,

$$\langle S_{f_1}^z \rangle = \langle S_{f_2}^z \rangle = \sigma.$$

Поскольку по внутриузельному взаимодействию мы хотим задачу решить точно, необходимо рассмотреть уравнения для вторых функций Грина. Причем, как видно из (5.2), необходимо рассмотреть уравнения движения лишь для функций Грина вида:

$$\langle\langle S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle,$$

в которых, кроме того, всегда $\alpha \neq \lambda$. Соответствующее уравнение движения имеет вид:

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle = i \delta(t) \langle [S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm}, S_{n\mu}^{\mp}] \rangle + \mu H \langle\langle S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle - \\ - \frac{1}{2} \sum_{p \neq m, \gamma} J(p\gamma; m\alpha) \langle\langle S_{m\alpha}^{\pm} S_{p\gamma}^{\mp} S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle - \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \gamma} J(m\gamma; m\alpha) \langle\langle S_{m\alpha}^{\pm} \times \\ \times S_{m\gamma}^{\mp} S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \frac{1}{2} \sum_{p \neq m, \gamma} J(p\gamma; m\alpha) \langle\langle S_{m\alpha}^{\mp} S_{p\gamma}^{\pm} S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \gamma} J(m\gamma; m\alpha) \langle\langle S_{m\alpha}^{\mp} S_{m\gamma}^{\pm} S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \sum_{p \neq m, \gamma} J(p\gamma; m\lambda) \langle\langle S_{m\alpha}^z S_{p\gamma}^z \times \\ \times S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle + \sum_{\gamma \neq \lambda} J(m\gamma; m\lambda) \langle\langle S_{m\alpha}^z S_{m\gamma}^z S_{m\lambda}^{\pm} | S_{n\mu}^{\mp} \rangle\rangle - \sum_{p \neq m, \gamma} J(p\gamma; m\lambda) \times$$

$$\ll S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^z S_{p\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg - \sum_{\gamma \neq \lambda} I(m\gamma; m\lambda) \ll S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^z S_{m\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg. \quad (5.4)$$

Рассмотрим в отдельности каждую из входящих в это уравнение гриновских функций:

$$1) \ll S_{m\alpha}^+ S_{p\gamma}^- S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg \approx 0 \text{ здесь } p \neq m;$$

$$2) \ll S_{m\alpha}^+ S_{m\gamma}^- S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg = \frac{1}{2} \ll S_{m\alpha}^+ | S_{n\mu}^- \gg - \ll S_{m\alpha}^+ S_{m\lambda}^z | S_{n\mu}^- \gg,$$

поскольку из $\gamma \neq \alpha$ и $\alpha \neq \lambda$ следует, что $\gamma = \lambda$, так как α, γ, λ принимают значения 1 и 2;

$$3) \ll S_{m\alpha}^- S_{p\gamma}^+ S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg \approx \langle S_{m\alpha}^- S_{m\lambda}^+ \rangle \ll S_{p\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg \text{ при } m \neq p;$$

$$4) \ll S_{m\alpha}^- S_{m\gamma}^+ S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg = 0 \text{ (здесь } \gamma \neq \alpha \text{ и } \alpha \neq \lambda, \text{ откуда } \gamma = \lambda); \quad (5.5)$$

$$5) \ll S_{m\alpha}^z S_{p\gamma}^z S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg \approx \langle S_{p\gamma}^z \rangle \ll S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg \text{ при } m \neq p;$$

$$6) \ll S_{m\alpha}^z S_{m\gamma}^z S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg = \frac{1}{4} \ll S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \gg \text{ (здесь } \gamma \neq \lambda$$

и $\alpha \neq \lambda$, следовательно, $\alpha = \gamma$);

$$7) \ll S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^z S_{p\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg \approx \langle S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^z \rangle \ll S_{p\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg \text{ при } p \neq m;$$

$$8) \ll S_{m\alpha}^z S_{m\lambda}^z S_{m\gamma}^+ | S_{n\mu}^- \gg = \frac{1}{2} \ll S_{m\lambda}^z S_{m\alpha}^+ | S_{n\mu}^- \gg \text{ (здесь также } \gamma \neq \lambda$$

и $\alpha \neq \lambda$, откуда $\gamma = \alpha$).

Соотношения 2, 4, 6, 8 в (5.5) являются точными. Такие соотношения используются при точном решении задачи о двух взаимодействующих спинах во внешнем поле в п. 4. Соотношение 5 в (5.5) является приближением Тябикова, как и (5.3). Соотношение 1, очевидно, хорошо выполняется при низких температурах. Расщепления 3 и 7 аналогичны тем, которые предложил Келлен [5], с тем отличием, что корреляторы операторов спина в разных узлах мы считаем малыми. Отметим здесь же, что при принятых допущениях результат, полученный ниже, не изменится, если вместо расщеплений 3 и 7 соответствующие функции Грина просто положить равными нулю.

Если подставить соотношение (5.3) в (5.2) и соотношения (5.5) в уравнение (5.4), то цепочка уравнений для гриновских функций замыкается. Переходя к фурье-представлению, найдем, что фурье-образ функции $\ll S_{m1}^+(t) | S_{n1}^-(0) \gg$ равен:

$$\begin{aligned} G_{1,1}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{i}{2\pi} \frac{\sigma}{\omega - \mu H - (I_2 - I_2(\mathbf{k})) 2\sigma} + \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \times \\ &\times \frac{\sigma - \langle 2S_{m1}^z S_{m2}^z \rangle - \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\omega - \mu H - I_2 2\sigma + I_1} + \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \times \\ &\times \frac{\sigma + \langle 2S_{m1}^z S_{m2}^z \rangle + \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\omega - \mu H - I_2 2\sigma - I_1}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

где $I_2(\mathbf{k}) = \sum_{f \neq m} I(f, m) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{m}-\mathbf{f})}$.

Проанализируем полученное выражение. Полюса функции Грина (5.6) определяют спектр спиновых возбуждений системы. Они имеют следующий вид:

$$\omega = \mu H + [I_2 - I_2(\mathbf{k})] 2\sigma; \quad (5.7)$$

$$\omega = \mu H + I_2 2\sigma + I_1; \quad (5.8)$$

$$\omega = \mu H + I_2 2\sigma - I_1. \quad (5.9)$$

Если воспользоваться известными соотношениями [1]:

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle_E^{(a)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) I_{AB}(\omega) \frac{d\omega}{E - \omega - i\varepsilon};$$

$$\langle\langle B|A\rangle\rangle_{-E}^{(r)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\omega/\theta} - \eta) I_{AB}(\omega) \frac{d\omega}{-E - \omega + i\varepsilon},$$

то нетрудно проверить, что функция Грина $\langle\langle S_{m\lambda}^- | S_{n\mu}^+ \rangle\rangle$ имеет полюсы, равные (5.7) — (5.9) с обратным знаком. Полюсы (5.7) представляют собой спектр энергий обычных спиновых волн (щель которых обращается в нуль при $H=0$) в ферромагнитной системе со спином $s=1$ в каждом узле. Спектр (5.7) обусловлен междоузельным взаимодействием, которое размывает внутриузельный переход $\omega = \mu H$ (см. п. 4) в зону.

Возбуждения (5.8), (5.9) аналогичны оптическим ветвям в динамике решетки и связаны с переходами между триплетным и синглетным состояниями в узле. В рассматриваемом приближении эти возбуждения не зависят от \mathbf{k} и носят чисто локальный характер. Междоузельное взаимодействие сводится в данном случае к дополнительному молекулярному полю $I_2 2\sigma$. Интересно отметить, что аналогичный характер имеют квазиоптические возбуждения в работе [7], если междоузельные обменные интегралы не зависят от номеров состояний электронов в узле.

Для модели типа модели Изинга (в (2.1) $\lambda=0$) спектр магнитных возбуждений имеет вид:

$$\omega = \mu H + 2I_2\sigma + I_1/2;$$

$$\omega = \mu H + 2I_2\sigma - I_1/2.$$

Такие полюсы имеет функция Грина $\langle\langle S_{m\lambda}^+ | S_{n\mu}^- \rangle\rangle$. Полюсы сопряженной функции Грина равны этим полюсам с обратным знаком.

Мы приносим глубокую благодарность Д. Н. Зубареву за внимание к работе и обсуждения, Ю. А. Изюмову, Н. М. Плакиде, Б. В. Васильеву — за интересные обсуждения, Е. Н. Яковлеву — за полезные критические замечания, а также доктору Э. Правецки, доктору Б. Тошичу и доктору Г. Конвенту за интерес к работе и полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Применяя стандартные методы [1], нетрудно получить уравнение для коррелятора поперечных компонент спина в одном узле

$$\langle S_{m2}^- S_{m1}^+ \rangle = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2\sigma}{\exp[\beta(\mu H + 2\sigma(I_2 - I_2(\mathbf{k})))] - 1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma - \langle 2S_{m1}^- S_{m2}^z \rangle - \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\exp[\beta(\mu H + I_2 2\sigma - I_1)] - 1} - \frac{\sigma + \langle 2S_{m1}^- S_{m2}^z \rangle + \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\exp[\beta(\mu H + 2I_2\sigma + I_1)] - 1} \right).$$

Аналогично из (5, 6) получим уравнение для относительной намагниченности

$$1 + 2\sigma = \frac{1}{N} \sum_k \frac{2\sigma}{\exp[\beta(\mu H + 2\sigma(I_2 - I_2(k)))] - 1} -$$

$$- \frac{\sigma - \langle 2S_{m1}^z S_{m2}^z \rangle - \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\exp[\beta(\mu H + I_2 2\sigma - I_1)] - 1} + \frac{\sigma + \langle 2S_{m1}^z S_{m2}^z \rangle + \langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle}{\exp[\beta(\mu H + 2I_2\sigma + I_1)] - 1}.$$

Исследование характера температурной зависимости намагниченности требует вычисления входящих в нее корреляционных функций $\langle S_{m1}^z S_{m2}^z \rangle$ и $\langle S_{m1}^- S_{m2}^+ \rangle$. Однако вычисление корреляционных функций операторов спина (в особенности продольных) как в одном узле, так и между узлами представляет собой, по существу, отдельную нетривиальную задачу (см., напр., [14—16]) и поэтому в этой работе не проводится.

Объединенный институт
ядерных исследований

Поступила в редакцию
9 октября 1969 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма, М., изд. «Наука», 1965.
2. Tahir-Kheli R. A. a. D. ter Haar. Phys. Rev., 1962, **127**, 88.
3. Тябликов С. В. ФММ, 1963, **16**, 321.
4. Praveccki E. Phys. Letters, 1963, **6**, 147.
5. Callen H. B. Phys. Rev., 1963, **130**, 890.
6. Кондорский Е. И., Пахомов А. С. ДАН СССР, 1953, **93**, 431.
7. Кондорский Е. И., Пахомов А. С. ЖЭТФ, 1957, **32**, 323.
8. Изюмов Ю. А. ЖЭТФ, 1957, **32**, 1058.
9. Изюмов Ю. А. и Яковлев Е. Н. ФММ, 1960, **9**, 667.
10. Ирхин Ю. П. ЖЭТФ, 1966, **50**, 379.
11. Изюмов Ю. А. ФММ, 1959, **8**, 3.
12. Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А. ЖЭТФ, 1966, **51**, 361.
13. Зубарев Д. Н. УФН, 1960, **71**, 71.
14. Tahir-Kheli R. A. a. Callen H. B. Phys. Rev., 1964, **135**, A679.
15. Liu S. H. Phys. Rev., 1965, **139**, A1522.
16. Tahir-Kheli R. A. Phys. Rev., 1967, **159**, 439.