Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Церковников, Уравнения для двухвременных температурных функций Грина гейзенберговского ферромагнетика в приближении взаимодействующих мод, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 197–206

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6160>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.237.59.107

26 апреля 2023 г., 10:33:21

© 2008 г.

Ю. А. Церковников*

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ДВУХВРЕМЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА В ПРИБЛИЖЕНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МОД

В приближении взаимодействующих мод получена замкнутая система уравнений для функций Грина поперечных и продольных компонент спина, точно учитывающая правила сумм, связанных с конечностью спина.

Ключевые слова: приближение взаимодействующих мод, правила сумм для спиновых операторов.

К 90-летию со дня рождения Д. Н. Зубарева

1. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

В работе рассмотрен анизотропный (типа “легкая ось”) гейзенберговский ферромагнетик со спином $1/2$, гамильтониан которого в импульсном представлении имеет вид

$$\mathcal{H} = -\mu H \sqrt{N} s_0^z - \frac{1}{2} \sum_k I(k) \{ \xi s_k^- s_k^+ + s_k^z s_{-k}^z \}, \quad (1.1)$$

где H – внешнее магнитное поле; $\mu = g\mu_B$, $g \approx 2$; μ_B – магнетон Бора; ξ – параметр анизотропии, $\xi \leq 1$; $I(k) = I(0)\gamma_k$, $I(0) > 0$; $\gamma_k = z^{-1} \sum_\delta e^{ik\delta}$; z – число ближайших соседей в узле кристаллической решетки; δ – ненулевые векторы, определяющие их положение относительно выбранного узла f . Мы ограничиваемся случаем простой кубической решетки с постоянной a .

Фурье-образы спиновых операторов $s_k^\pm = s_k^x \pm s_k^y$, s_k^z в узлах f задаются формулами

$$s_k^\pm = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f s_f^\pm e^{\pm ifk}, \quad s_k^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f s_f^z e^{ifk}, \quad (1.2)$$

где N – число узлов решетки.

Перестановочные соотношения для операторов (1.2) имеют вид

$$[s_k^+, s_{k'}^-]_- = \frac{2}{\sqrt{N}} s_{k-k'}^z, \quad [s_k^\pm, s_{k'}^\pm]_- = \mp \frac{1}{\sqrt{N}} s_{k\pm k'}^\pm, \quad [s_k^\pm, s_{k'}^\pm]_- = 0. \quad (1.3)$$

*Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, Москва, Россия

Кроме того, вследствие конечности состояний спина в узле f операторы s_k^+ , s_k^- , и s_k^z подчиняются более сложным, чем бозе- и ферми-операторы, кинематическим соотношениям. В случае спина $s = 1/2$ эти соотношения имеют вид

$$\begin{aligned}
 s_k^+ &= \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'}^z s_{-k'+k}^+ = -\frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{-k'+k}^+ s_{k'}^z, \\
 s_{-k}^- &= \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'-k}^- s_{k'}^z = -\frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'}^z s_{k'-k}^-, \\
 s_k^z &= \frac{\sqrt{N}}{2} \delta_{k,0} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'}^- s_{k'+k}^+ = -\frac{\sqrt{N}}{2} \delta_{k,0} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'+k}^+ s_{k'}^- = \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{k'} (s_{k'+k}^+ s_{k'}^- - s_{k'}^- s_{k'+k}^+), \\
 \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'}^z s_{-k'+k}^z &= \frac{1}{4} \delta_{k,0}, \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'}^- s_{-k'+k}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} s_{k'+k}^+ s_{-k'+k}^+ = 0.
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

В (1.4) суммирования по k' производятся по первой приведенной зоне Бриллюэна.

Дифференцируя по времени операторы $s_q^+(t)$ и $s_q^z(t)$, записанные в гейзенберговском представлении ($s(t) = e^{it\mathcal{H}} \cdot s \cdot e^{-it\mathcal{H}}$), получаем бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений. Для $s_q^+(t)$ имеем

$$i \frac{d}{dt} s_q^+ = [s_q^+, \mathcal{H}]_- = \mu H s_q^+ + \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \xi \gamma_{-k+q}) s_k^z s_{-k+q}^+, \tag{1.5}$$

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} s_k^z s_{-k+q}^+ &= [s_k^z s_{-k+q}^+, \mathcal{H}]_- = \mu H s_k^z s_{-k+q}^+ + \\
 &+ \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k \left\{ (\gamma_k - \xi \gamma_{-k_1-k+q}) s_k^z s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ - \right. \\
 &\left. - \frac{\xi}{2} (\gamma_{k_1} - \gamma_{k_1+k}) s_{k_1}^- s_{k_1+k}^+ s_{-k+q}^+ \right\}
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

и т.д.; для $s_q^z(t)$ имеем

$$i \frac{d}{dt} s_k^z = [s_k^z, \mathcal{H}]_- = -\frac{\xi I(0)}{2\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \gamma_{-k+q}) s_{-k}^- s_{-k+q}^+, \tag{1.7}$$

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} s_{-k}^- s_{-k+q}^+ &= [s_{-k}^- s_{-k+q}^+, \mathcal{H}]_- = \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k \left\{ (\gamma_{k_1} - \xi \gamma_{-k_1-k+q}) s_{-k}^- s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ - \right. \\
 &\left. - (\gamma_{k_1} - \xi \gamma_{-k_1+k}) s_{-k+k_1}^- s_{k_1+k}^z s_{-k+q}^+ \right\}
 \end{aligned} \tag{1.8}$$

и т.д. (для простоты записи зависимость операторных уравнений от t в (1.5)–(1.8) не указана).

При построении уравнений для двухвременных температурных функций Боголюбова–Тябликова–Зубарева (см. работы [1]–[3]) воспользуемся методом дифференцирования по двум временам [4] (см. также раздел 2 работы [5]). Будем рассматривать функции Грина двух видов: запаздывающие коммутаторные функции

$$\langle\langle A|B^+\rangle\rangle_E = -i \int_0^\infty dt e^{iEt} \langle[A(t), B^+]_-\rangle, \quad \text{Im } E > 0, \quad (1.9)$$

и Фурье-образы функции релаксации Кубо [6]

$$((A|B^+))_E = -i \int_0^\infty dt e^{iEt} (A(t)|B^+), \quad \text{Im } E > 0, \quad (1.10)$$

где

$$(A(t)|B^+) = i \int_t^\infty dt' \langle[A(t'), B^+]_-\rangle \quad (1.11)$$

– функция, обладающая свойствами скалярного произведения. В дальнейшем мы полагаем, что выполнены условия эргодичности [6], и функция $(A|B^+)$ также равна $(A|B)^T = \int_0^\beta d\tau \langle\Delta A \cdot \Delta B^+(\tau)\rangle$, где $\beta = 1/(kT)$, $\Delta A = A - \langle A \rangle$, $\Delta B^+ = B^+ - \langle B^+ \rangle$.

Согласно методу работы [4] для последовательности операторов (или столбцов операторов) $A_1, A_2, \dots$ получается бесконечная система уравнений (по существу, тождеств)

$$E \langle\langle A_n | A_n^+ \rangle\rangle_{E,n-1} = \langle A_n | A_n \rangle + \{ \langle i \dot{A}_n | A_n^+ \rangle + \langle i \dot{A}_n | - i \dot{A}_n^+ \rangle_{E,n} \} \times \\ \times \langle A_n | A_n^+ \rangle^{-1} \langle\langle A_n | A_n^+ \rangle\rangle_{E,n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.12)$$

A_1 – исходный оператор (или столбец операторов), определяющий поставленную задачу, и $A_2, A_3, \dots$ – операторы входящие соответственно в производные $i\dot{A}_1 = [A_1, \mathcal{H}]_-$, $i\dot{A}_2 = [A_2, \mathcal{H}]_-$, $\dots$. Операторы $A_2, A_3, \dots$ последовательно ортогонализированы относительно скалярных произведений $\langle A_1 | A_1^+ \rangle$, $\langle A_2 | A_2^+ \rangle$, $\dots$, поэтому $\langle A_n | A_n^+ \rangle_{n-1} = \langle A_n | A_n \rangle$. В (1.12) коммутаторные функции, отмеченные индексом n , определяются рекуррентными соотношениями

$$\langle\langle A | B^+ \rangle\rangle_{E,n} = \langle\langle A | B^+ \rangle\rangle_{E,n-1} - \langle\langle A | A_n^+ \rangle\rangle_{E,n-1} \langle\langle A_n | A_n^+ \rangle\rangle_{E,n-1}^{-1} \langle\langle A_n | B^+ \rangle\rangle_{E,n-1} \quad (1.13)$$

и обладают свойством неприводимости, поскольку $\langle\langle A_m | B^+ \rangle\rangle_{E,n} = \langle\langle A | A_m^+ \rangle\rangle_{E,n} = 0$ при $m \leq n$. Функции (1.9) и (1.10) связаны простым соотношением

$$((A|B^+))_E = \frac{\langle\langle A | B^+ \rangle\rangle_E + (A|B^+)}{E}, \quad (1.14)$$

где $\chi_{AB^+} = (A|B^+) = \langle\langle A | B^+ \rangle\rangle_{E=0}$ – величина, имеющая смысл восприимчивости.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОДНОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Исходя из уравнений движения (1.5) и (1.7) мы можем получить цепочки уравнений как для коммутаторных функций (1.9), так и для функций релаксации (1.10). Функции релаксации (1.10) предпочтительнее, поскольку для них уравнения более симметричны относительно $s_k^\pm$ и s_k^z в силу того, что начальные условия (при $t = 0$)

для $(s_k^+|s_k^-)$ и $(s_k^z|s_k^z)$ отличны от нуля. Поэтому функции релаксации более удобны для рассмотрения как вблизи температуры $\theta = kT \cong 0$, так и при $\theta \neq 0$. Для коммутаторных функции (1.9) имеем $\langle [s_k^+ s_k^-]_- \rangle = 2\langle s_{k=0}^z \rangle / \sqrt{N}$, тогда как $\langle [s_k^z, s_k^z]_- \rangle = 0$, и эта симметрия теряется. В дальнейшем мы будем в основном рассматривать получающиеся из (1.12) первые уравнения цепочек

$$((s_q^+|s_q^-))_E = \frac{(s_q^+|s_q^-)}{E - (i\dot{s}_q^+|s_q^-)/(s_q^+|s_q^-) - ((i\dot{s}_q^+|-i\dot{s}_q^-))_{1,E}/(s_q^+|s_q^-)}, \quad (2.1)$$

$$((s_q^z|s_{-q}^z))_E = \frac{(s_q^z|s_{-q}^z)}{E - ((i\dot{s}_q^z|-i\dot{s}_{-q}^z))_{1,E}/(s_q^z|s_{-q}^z)}, \quad (2.2)$$

где $(i\dot{s}_q^+|s_q^-) = \langle [s_q^+, s_q^-]_- \rangle = 2\sigma$, $\sigma = \langle s_0^z \rangle / \sqrt{N}$ – намагниченность в узле f (спонтанная при $H = 0$), $(i\dot{s}_q^z|s_{-q}^z) = \langle [s_q^z, s_{-q}^z]_- \rangle = 0$. В (2.1) и (2.2) неприводимые функции (“массовые операторы”) равны

$$\begin{aligned} ((i\dot{s}_q^+|i\dot{s}_q^-))_{1,E} &= \frac{I^2(0)}{N} \sum_{k,k'} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q})(\gamma_{k'} - \xi\gamma_{-k'+q}) \times \\ &\quad \times ((s_k^z s_{-k+q}^+|s_{-k'+q}^- s_{-k'}^z))_{1,E}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} ((i\dot{s}_q^z|-i\dot{s}_{-q}^z))_{1,E} &= \frac{\xi^2 I^2(0)}{4N} \sum_{k,k'} (\gamma_k - \gamma_{-k+q})(\gamma_{k'} - \gamma_{-k'+q}) \times \\ &\quad \times ((s_{-k}^- s_{-k+q}^+|s_{-k'+q}^- s_{-k'}^+))_{1,E} \end{aligned} \quad (2.4)$$

и не содержат согласно (1.13) частей, сводящихся соответственно к s_k^+ , s_k^- и s_k^z . Уравнения (2.1) и (2.2) удобно переписать, введя в левые части с помощью (1.14) вместо функций релаксации коммутаторные функции

$$\langle\langle s_q^+|s_q^- \rangle\rangle_E = \frac{2\sigma + ((i\dot{s}_q^+|-i\dot{s}_q^-))_{1,E}}{E - (2\sigma + ((i\dot{s}_q^+|-i\dot{s}_q^-))_{1,E})/(s_q^+|s_q^-)}, \quad (2.5)$$

$$\langle\langle s_q^z|s_{-q}^z \rangle\rangle_E = \frac{((i\dot{s}_q^z|-i\dot{s}_{-q}^z))_{1,E}}{E - ((i\dot{s}_q^z|-i\dot{s}_{-q}^z))_{1,E}/(s_q^z|s_{-q}^z)}. \quad (2.6)$$

В равенствах (2.5) и (2.6) можно произвести сдвиг операторов s_k^z на величину намагниченности: $s_k^z = \delta_{k,0}\sqrt{N}\sigma + \delta s_k^z$ ($\langle \delta s_k^z \rangle = 0$). При этом $i\dot{s}_q^z = i\delta\dot{s}_q^z$ и $(s_q^z|s_{-q}^z) = (\delta s_q^z|\delta s_{-q}^z)$ (см. равенство (1.11))

Уравнения для восприимчивостей. В уравнения (2.1)–(2.6) вошли не определенные пока статические восприимчивости $(s_q^+|s_q^-)$ и $(s_q^z|s_{-q}^z)$. Покажем, что мы можем их получить из коммутаторных функций Грина (1.9), взятых при $E = 0$, если воспользуемся тем, что скалярные произведения операторов A и B^+ равны $(A|B^+) = -\langle\langle A|B^+ \rangle\rangle_{E=0}$. За основу возьмем функции Грина $\langle\langle \delta s_k^z s_{-k+q}^+|s_q^- \rangle\rangle_E$ и $\langle\langle s_{-k}^- s_{-k+q}^+|\delta s_{-q}^z \rangle\rangle_E$, построенные на уравнениях движения второго звена цепочек (1.6) и (1.8). Для них начальные условия (коммутаторы $\langle [s_k^z s_{-k+q}^+ s_q^-]_- \rangle$ и $\langle [s_{-k}^- s_{-k+q}^+ \delta s_{-q}^z]_- \rangle$) отличны от нуля при всех значениях температуры $\theta = kT$. Напротив, для функции $\langle\langle s_q^+|s_q^- \rangle\rangle$ начальное условие $\langle [s_q^+, s_q^-]_- \rangle = 2\sigma$ является ненулевым только при $\theta < \theta_{кр}$, а для $\langle\langle s_q^z|s_{-q}^z \rangle\rangle$ всегда равно нулю ($\langle [s_q^z, s_{-q}^z]_- \rangle = 0$).

Умножая уравнения для $\langle\langle \delta s_k^z s_{-k+q}^+ | s_q^- \rangle\rangle_E$ и $\langle\langle s_{-k}^- s_{-k+q}^+ | \delta s_{-q}^z \rangle\rangle_E$ соответственно на $I(0)(\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q})/\sqrt{N}$ и $I(0)(\gamma_k - \gamma_{-k+q})/\sqrt{N}$ и суммируя по k при $E = 0$, получаем (см. (1.6) и (1.8))

$$\begin{aligned} \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \langle [s_k^z s_{-k+q}^+, s_q^-]_- \rangle = \\ = \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \omega_{-k+q}^T (\delta s_k^z s_{-k+q}^+ | s_q^-) + \\ + \frac{I^2(0)}{N} \sum_{k, k_1} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \left\{ (\gamma_{k_1} - \xi\gamma_{-k_1-k+q}) (\delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | s_q^-) - \right. \\ \left. - \frac{\xi}{2} (\gamma_{k_1} - \gamma_{-k_1+k}) (s_{-k_1}^- s_{-k_1+k}^+ s_{-k+q}^+ | s_q^-) \right\}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \gamma_{-k+q}) \langle [s_{-k}^- s_{-k+q}^+, s_{-q}^z]_- \rangle = \\ = \sigma \frac{\xi I^2(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \gamma_{-k+q})^2 (s_{-k}^- s_{-k+q}^+ | \delta s_{-q}^z) + \\ + \frac{I^2(0)}{N} \sum_{k, k_1} \{ (\gamma_k - \gamma_{-k+q}) (\gamma_{k_1} - \xi\gamma_{-k_1-k+q}) - \\ - (\gamma_{k+k_1} - \gamma_{-k_1-k+q}) (\gamma_{k_1} - \xi\gamma_k) \} (s_{-k}^- \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | \delta s_{-q}^z), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где $\omega_q^T = \mu H + \sigma I(0)(1 - \xi\gamma_q)$ – перенормированная энергия магнона [1].

Повысив с помощью (1.4) порядок спиновых произведений в первых членах правых частей (2.7) и (2.8), получим

$$\begin{aligned} \frac{I(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \omega_{-k+q}^T (\delta s_k^z s_{-k+q}^+ | s_q^-) = \\ = \frac{2I(0)}{N} \sum_{k, k_1} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \omega_{-k+q}^T (\delta s_k^z s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | s_q^-) = \\ = \frac{2}{1-2\sigma} \frac{I(0)}{N} \sum_{k, k_1} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \omega_{-k+q}^T (\delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | s_q^-), \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \sigma \frac{\xi I^2(0)}{\sqrt{N}} \sum_k (\gamma_k - \gamma_{-k+q})^2 (s_{-k}^- s_{-k}^+ | \delta s_{-q}^z) = \\ = 2\sigma \frac{\xi I^2(0)}{N} \sum_{k, k_1} (\gamma_k - \gamma_{-k+q})^2 (s_{-k}^- s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | \delta s_{-q}^z) = \\ = \frac{2\sigma}{1-2\sigma} \frac{\xi I^2(0)}{N} \sum_{k, k_1} (\gamma_k - \gamma_{-k+q})^2 (s_{-k}^- \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ | \delta s_{-q}^z), \end{aligned} \quad (2.10)$$

Произведем теперь спаривания спиновых операторов $\langle s_{-k}^- s_k^+ \rangle$ и $\langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle$ в правых частях (2.7), (2.8) (с учетом (2.9), (2.10)) и выделим тем самым скалярные произведе-

ния $(s_q^+|s_q^-)$ и $(\delta s_q^z|\delta s_q^z)$; в результате получим связь восприимчивостей с усредненными коммутаторами в левых частях (2.7), (2.8). Однако прежде чем производить спаривания в (2.7)–(2.10), необходимо учесть снижение порядка спиновых произведений в совпадающих узлах, обусловленное конечностью состояний спина. В импульсном представлении произведениям в совпадающих узлах соответствуют свертки произведений операторов (1.4) (см. также работу [8]). Только после этого можно производить спаривания операторов в правых частях (2.7)–(2.10). В оставшихся при этом произведениях, отмеченных точками $(:\delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+; :s_{-k_1}^- s_{-k_1+k}^+ s_{-k+q}^+; :s_{-k}^- \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+;)$, спаривания запрещены. В приближении взаимодействующих мод мы полагаем

$$\begin{aligned} (: \delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+; | s_q^-) &\cong 0, & (: s_{-k_1}^- s_{-k_1-k}^+ s_{-k+q}^+; | s_q^-) &\cong 0, \\ (: s_{-k}^- \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+; | \delta s_q^z) &\cong 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Опустим довольно громоздкие выкладки и приведем окончательные (с учетом (2.11)) результаты для поперечной $(s_q^+|s_q^-)$ и продольной $(\delta s_q^z|\delta s_q^z)$ восприимчивостей (ср. с формулами (49)–(53) работы [8] при $\theta > \theta_{\text{кр}}$):

$$\begin{aligned} (s_q^+|s_q^-)^{-1} I(0) \{ (1 - \xi \gamma_q) \nu^{(1)} + (\xi - \gamma_q) n^{(1)} \} &= \frac{I^2(0)}{2} (1 - \xi \gamma_q) \times \\ &\times \left\{ \frac{I^{-1}(0)}{N} \sum_k \omega_{-k+q}^T \gamma_k \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle - \right. \\ &- \sigma \frac{\xi}{z} n^{(1)} + (1 - \xi \gamma_q) \nu^{(1)} + \nu^{(2)} - \nu^{(1)} - \frac{\xi}{z} n^{(1)} + \frac{2}{z} n(1 - n) \Big\} + \\ &+ \frac{I^2(0)}{2} (\xi - \gamma_q) \left\{ \frac{I^{-1}(0)}{N} \sum_k \omega_k^T \gamma_k \langle s_{-k}^- s_{-k}^+ \rangle - \right. \\ &- \sigma \frac{\xi}{2nz} \nu^{(1)} + (1 - \xi \gamma_q) n^{(1)} + \xi n^{(2)} - n^{(1)} - \frac{\xi}{z} \nu^{(1)} + \frac{\xi}{z} n \Big\}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} (s_q^z|s_q^z)^{-1} I(0) (1 - \gamma_q) n^{(1)} &= \xi I^2(0) (1 - \gamma_q) \left\{ \frac{\xi}{2} (1 - \gamma_q) \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k^2 \langle s_{-k}^- s_{-k}^+ \rangle + \right. \\ &+ (1 - \gamma_q) n^{(1)} + \xi n^{(2)} - \left(1 + \frac{1}{z} \right) n^{(1)} + \frac{\xi}{z} n \Big\}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

В (2.12) и (2.13) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{2} - n, & n &= \frac{1}{N} \sum_k \langle s_k^- s_k^+ \rangle, & n^{(1)} &= \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \langle s_k^- s_k^+ \rangle, \\ n^{(2)} &= \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k^2 (\langle s_k^- s_k^+ \rangle - n) = \frac{1}{N} \sum_k \left(\gamma_k^2 - \frac{1}{z} \right) \langle s_k^- s_k^+ \rangle, \\ \nu &= \frac{2}{N} \sum_k \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle = 2n(1 - n) = \frac{1 - 4\sigma^2}{2}, & \nu^{(1)} &= \frac{2}{N} \sum_k \gamma_k \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle, \\ \nu^{(2)} &= \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k^2 (2 \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle - n(1 - n)) = \frac{2}{N} \sum_k \left(\gamma_k^2 - \frac{1}{z} \right) \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

где $N^{-1} \sum_k \gamma_k = 0$, $N^{-1} \sum_k \gamma_k^2 = z^{-1}$.

3. ФУНКЦИИ ГРИНА В ПРИБЛИЖЕНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МОД

Приведенные в предыдущих разделах соотношения представляют собой систему тождеств, которые становятся уравнениями, если приближенно вычислить временные корреляционные функции (2.3), (2.4). Естественным приближением является приближение взаимодействующих мод, согласно которому спариваются разновременные операторы, входящие в (2.3) и (2.4). Однако при этом сразу же нарушаются основные правила сумм

$$\frac{1}{2} - \sigma = \frac{1}{N} \sum_k \langle s_k^- s_{-k}^+ \rangle, \quad \frac{1}{4} - \sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_k \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle. \quad (3.1)$$

В работах [9], [10] (см. также [8]) производилось умножение приближенного “массового оператора” на произвольный параметр, который использовался затем для того, чтобы обеспечить выполнение правил сумм. Такая процедура представляется достаточно грубой. В настоящей работе мы естественным образом введем в уравнения для функций Грина поперечной и продольной компонент спина параметры a и b , воспользовавшись тем, что для s_q^+ (и s_q^-) мы имеем два представления для свертки операторов s_k^z и s_k^+ (см. формулу (1.4)):

$$\begin{aligned} s_k^+ &= \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+ = -\frac{2}{\sqrt{N}} \sum_k s_{-k_1+k}^+ s_{k_1}^z = \\ &= \frac{1+a}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+ - \frac{1-a}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{-k_1+k}^+ s_{k_1}^z, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где параметр a считаем пока произвольным.

В (3.2) можно выделить намагнитченность, положив

$$\begin{aligned} s_k^+ &= 2\sigma s_k^+ + \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} \delta s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+ = \frac{2}{1-2\sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} \delta s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+, \\ s_k^+ &= -2\sigma s_k^+ - \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{-k_1+k}^+ \delta s_{k_1}^z = -\frac{2}{1+2\sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{-k_1+k}^+ \delta s_{k_1}^z. \end{aligned} \quad (3.3)$$

В результате получим

$$s_k^+ = \frac{1+a}{1-2\sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} \delta s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+ - \frac{1-a}{1+2\sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_1} \delta s_{k_1}^z s_{-k_1+k}^+. \quad (3.4)$$

Представление (3.2) аналогично представлению Кэллена [11] для продольной компоненты спина,

$$s_k^z = \frac{a}{2} \sqrt{N} \delta_{k0} - \frac{1+a}{2\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{k_1}^- s_{k_1+k}^+ + \frac{1-a}{2\sqrt{N}} \sum_{k_1} s_{k_1+k}^+ s_{k_1}^-, \quad (3.5)$$

использовавшемся для исследования спиновых систем вблизи нулевой температуры. Вводя вместо (3.5) представления (3.2), (3.4), мы пытаемся получить уравнения, пригодные в широком диапазоне температур, используя скрытую симметрию между компонентами спина, которая наиболее сильно проявляется в парамагнитной области и особенно в изотропном случае при $\xi = 1$.

Используя (3.2) и (3.4), запишем уравнения движения (1.5), (1.7) в виде

$$i\dot{s}_q^+ = \left\{ \omega_q^T + \frac{2a + 4\sigma}{1 - 4\sigma^2} \frac{I(0)}{N} \sum_k (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \langle \delta s_k^z \delta s_{-k}^z \rangle \right\} s_q^+ + \frac{I(0)}{N} \sum_{k,k_1} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q}) \times \\ \times \left\{ \frac{1+a}{1-2\sigma} : \delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ : - \frac{1+a}{1+2a} : s_{-k_1-k+q}^+ \delta s_k^z \delta s_{k_1}^z : \right\}, \quad (3.6)$$

$$i\dot{s}_q^z = i\delta s_q^z = -\frac{2b + 4\sigma}{1 - 4\sigma^2} \frac{\xi I(0)}{2N} \sum_k (\gamma_k - \gamma_{-k+q}) \langle s_k^- s_k^+ \rangle \delta s_q^z - \frac{\xi I(0)}{2N} \sum_{k,k_1} (\gamma_k - \gamma_{-k+q}) \times \\ \times \left\{ \frac{1+b}{1-2\sigma} : \delta s_{k_1}^z \delta s_{-k}^- s_{-k_1-k+q}^+ : - \frac{1-b}{1+2\sigma} : s_{-k}^- s_{-k_1-k+q}^+ \delta s_{k_1}^z : \right\}, \quad (3.7)$$

где вновь точками выделены произведения операторов, спаривания которых запрещены. В (3.6) и (3.7) были использованы перестановочные соотношения (1.3) с целью сгруппировать операторы s_k^+ , s_k^- отдельно от операторов δs_k^z и δs_{-k}^z , кроме того, учтено следующее свойство функций γ_k : $\sum_k \gamma_k = 0$. Подставляя теперь в (2.3), (2.4) представления (3.6), (3.7), получим

$$((i\dot{s}_q^+ | - i\dot{s}_q^-))_{1,E} = \frac{I^2(0)}{N^2} \sum_{k,k_1,k',k'_1} (\gamma_k - \xi\gamma_{-k+q})(\gamma_{k'} - \xi\gamma_{-k'+q}) \times \\ \times \left(\left(\frac{1+a}{1-2\sigma} : \delta s_k^z \delta s_{k_1}^z s_{-k_1-k+q}^+ : - \frac{1-a}{1+2\sigma} : s_{-k_1-k+q}^+ \delta s_k^z \delta s_{k_1}^z : \right. \right. \\ \left. \left. \frac{1+a}{1-2\sigma} : s_{-k'_1-k'+q}^- \delta s_{-k'_1}^z \delta s_{-k'}^z : - \frac{1-a}{1+2\sigma} : \delta s_{-k'_1}^z \delta s_{-k'}^- s_{-k'_1-k'+q}^- : \right) \right)_{1,E}, \quad (3.8)$$

$$((i\dot{s}_q^z | - i\dot{s}_q^z))_{1,E} = \frac{\xi^2 I^2(0)}{4N^2} \sum_{k,k_1,k',k'_1} (\gamma_k - \gamma_{-k+q})(\gamma_{k'} - \gamma_{-k'+q}) \times \\ \times \left(\left(\frac{1+b}{1-2\sigma} : \delta s_{k_1}^z \delta s_{-k}^- s_{-k_1-k+q}^+ : - \frac{1-b}{1+2\sigma} : s_{-k}^- s_{-k_1-k+q}^+ \delta s_{k_1}^z : \right. \right. \\ \left. \left. \frac{1+b}{1-2\sigma} : s_{-k'_1-k'+q}^- s_{-k'_1}^- \delta s_{-k'_1}^z : - \frac{1-b}{1+2\sigma} : \delta s_{-k'_1}^z s_{-k'_1-k'+q}^- s_{-k'}^- : \right) \right)_{1,E}. \quad (3.9)$$

Благодаря свойствам неприводимости (1.13) из выражений (3.8), (3.9) выпали входившие в (3.6), (3.7) члены, пропорциональные s_q^+ и δs_q^z .

До сих пор все приведенные ранее соотношения были точными, а параметры a и b – произвольными. Производя в правых частях (3.8) и (3.9) спаривания разновременных операторов $\langle s_k^+(t) s_k^- \rangle$, $\langle s_k^-(t) s_k^+ \rangle$ и $\langle \delta s_k^z(t) \delta s_{-k}^z \rangle$ и учитывая при этом, что величины $\langle : \delta s_k^z(t) \delta s_{k_1}^z(t) s_{-k_1-k+q}^+(t) : s_q^- \rangle$, ... в выражениях для неприводимых

функций (см. (1.13)) равны нулю, получаем “массовые операторы” (3.8), (3.9) в приближении взаимодействующих мод. С учетом спектральных представлений [3] выражения для них запишутся в виде

$$((i\dot{s}_q^+ | -i\dot{s}_q^-))_{1,E} \cong u^2 M_q(E), \quad ((i\dot{s}_q^z | -i\dot{s}_{-q}^z))_{1,E} \cong v^2 \Pi_q(E), \quad (3.10)$$

где

$$\begin{aligned} M_q(E) = & \frac{I^2(0)}{2N^2} \sum_{k,k_1} (\gamma_k + \gamma_{k_1} - \xi \lambda_{-k+q} - \xi \gamma_{-k_1+q})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' d\omega'' \times \\ & \times \frac{(1+n(\omega))(1+n(\omega'))(1+n(\omega'')) - n(\omega)n(\omega')n(\omega'')}{(\omega + \omega' + \omega'')(E - \omega - \omega' - \omega'')} \times \\ & \times \Psi_k(\omega) \Psi_{k_1}(\omega') \Phi_{-k_1-k+q}(\omega''), \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \Pi_q(E) = & \frac{\xi^2 I^2(0)}{4N^2} \sum_{k,k_1} (\gamma_k - \gamma_{-k+q})^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' d\omega'' \times \\ & \times \frac{(1+n(\omega))n(\omega')(1+n(\omega'')) - n(\omega)(1+n(\omega'))n(\omega'')}{(\omega - \omega' + \omega'')(E - \omega + \omega' - \omega'')} \times \\ & \times \Psi_{k_1}(\omega) \Phi_k(\omega') \Phi_{-k_1-k+q}(\omega''). \end{aligned} \quad (3.12)$$

В формулах (3.11), (3.12) $n(\omega) = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}$, $\beta^{-1} = \theta = kT$, а спектральные плотности $\Phi_k(\omega)$ и $\Psi_k(\omega)$ равны

$$\Phi_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle s_q^+ | s_q^- \rangle_{\omega+i\varepsilon}, \quad \Psi_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle s_k^z | s_{-k}^z \rangle_{\omega+i\varepsilon}, \quad (3.13)$$

Функции Грина (2.5) и (2.6) в приближении взаимодействующих мод представляются в виде

$$\langle s_q^+ | s_q^- \rangle_E = \frac{2\sigma + u^2 M_q(E)}{E - (2\sigma + u^2 M_q(E))/(s_q^+ | s_q^-)}, \quad (3.14)$$

$$\langle s_q^z | s_{-q}^z \rangle_E = \frac{v^2 \Pi_q(E)}{E - v^2 \Pi_q(E)/(s_q^z | s_{-q}^z)}. \quad (3.15)$$

В правые части (3.10), (3.14) и (3.15) вошли параметры

$$u = \frac{1+a}{1-2\sigma} - \frac{1-a}{1+2\sigma} = \frac{2a+4\sigma}{1-4\sigma^2}, \quad v = \frac{1+b}{1-2\sigma} - \frac{1-b}{1+2\sigma} = \frac{2b+4\sigma}{1-4\sigma^2} \quad (3.16)$$

(см. (3.8), (3.9)). Их уже нельзя считать произвольными. В отличие от работ [9], [10] параметры u и v входят в уравнения естественным образом и имеют структуру, которая существенна при получении замкнутой системы уравнений для a , b и σ .

На действительной оси, отделяя действительную и мнимую части, имеем $M_q(\omega) = M'_q(\omega) + iM''_q(\omega)$ и $\Pi_q(\omega) = \Pi'_q(\omega) + i\Pi''_q(\omega)$. Используя уравнения (3.14) и (3.15), получаем приближенные выражения для спектральных плотностей:

$$\Phi_q(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{u^2 M''_q(\omega) \omega}{\{\omega - (2\sigma + u^2 M'_q(\omega))/(s_q^+ | s_q^-)\}^2 + \{u^2 M''_q(\omega)/(s_q^+ | s_q^-)\}^2}, \quad (3.17)$$

$$\Psi_q(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{v^2 \Pi_q''(\omega) \omega}{\{\omega - v^2 \Pi_q'(\omega)/(s_q^z | s_{-q}^z)\}^2 + \{v^2 \Pi_q''(\omega)/(s_q^z | s_{-q}^z)\}^2}. \quad (3.18)$$

Выражения (3.14)–(3.18) в совокупности с выражениями (2.12) и (2.13) для восприимчивостей $(s_q^+ | s_q^-)$ и $(s_q^z | s_{-q}^z)$ представляют собой замкнутую систему уравнений. Используя спектральные представления корреляционных функций

$$\langle s_k^- s_k^+ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{\beta\omega} - 1)^{-1} \Phi_k(\omega), \quad \langle \delta s_{-k}^z \delta s_k^z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (e^{\beta\omega} - 1)^{-1} \Psi_k(\omega), \quad (3.19)$$

подставляя в них приближенные выражения (3.17), (3.18) и производя суммирование по k , получаем из соотношений (3.1) уравнения для определения параметров u и v (или a и b). Усредняя гамильтониан (1.1) и учитывая (3.17)–(3.19), получаем приближенное выражение для средней энергии системы $\langle \mathcal{H} \rangle_\theta$, которую можно использовать для представления свободной энергии F в виде

$$F = E_0 - \theta \int_0^\theta \frac{d\theta'}{\theta'^2} \langle \mathcal{H} - E_0 \rangle_{\theta'}, \quad (3.20)$$

где $E_0 = -N\{I(0)/8 + \mu H/2\}$. Уравнение для намагниченности σ найдем из условия экстремума свободной энергии системы

$$\frac{dF}{d\sigma} = 0. \quad (3.21)$$

Вычисляя величины (3.19)–(3.21) с помощью приближенных спектральных плотностей (3.17), (3.18), мы должны учитывать структуру параметров u и v (3.16).

Уравнения, получающиеся из (3.1), и уравнение (3.21) представляют собой систему трансцендентных уравнений для определения параметров σ , a и b , зависящих от температуры θ . При $\sigma \rightarrow 0$ и $H = 0$ они переходят в уравнения для критической температуры $\theta_{\text{кр}}$. При $\theta > \theta_{\text{кр}}$ остаются два уравнения, обеспечивающие в принятом приближении выполнение точных правил сумм $N^{-1} \sum_k \langle s_k^- s_k^+ \rangle = 1/2$ и $N^{-1} \sum_k \langle s_k^z s_{-k}^z \rangle = 1/4$.

Список литературы

- [1] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *Докл. АН СССР*, **126**:1 (1959), 53–56.
- [2] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1965.
- [3] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71**:1 (1960), 71–116.
- [4] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **49**:2 (1981), 219–233.
- [5] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **129**:3 (2001), 432–463.
- [6] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**:6 (1957), 570–568.
- [7] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **52**:1 (1982), 147–160.
- [8] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **40**:2 (1979), 251–268.
- [9] S. A. Scales, H. A. Gersch, *J. Stat. Phys.*, **7**:2 (1973), 95–118.
- [10] K. Fujii, I. Mannari, S. Kadowaki, *Progr. Theor. Phys.*, **50**:5 (1973), 1501–1509.
- [11] H. B. Callen, *Phys. Rev.*, **130**:3 (1963), 890–898.