Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. М. Плакида, Двухвременные функции Грина и диаграммная техника, *ТМФ*, 2011, том 168, номер 3, 518–535

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6698>

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: 54.147.182.235

26 апреля 2023 г., 17:25:29

© 2011 г.

Н. М. Плакида*

ДВУХВРЕМЕННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА И ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

Обсуждаются вычисления динамической спиновой восприимчивости и корреляционных функций в модели Гейзенберга, основанные на составлении уравнений движения для двухвременных функций Грина. На основе метода проектирования типа Мори выводится точное уравнение Дайсона с массовым оператором в виде многочастичных функций Грина. Вычисление массового оператора в приближении взаимодействующих мод в ферромагнитной фазе приводит к результатам температурной диаграммной техники, в том числе дает корректную формулу для низкотемпературной намагниченности. Рассмотрено также вычисление спектра спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе в рамках метода уравнений движения для функции релаксации.

Ключевые слова: динамическая спиновая восприимчивость, модель Гейзенберга, запаздывающие и опережающие функции Грина, расщепление Тябликова, диаграммная техника для спиновых функций Грина.

1. ВВЕДЕНИЕ

Двухвременные температурные функции Грина (ФГ) (запаздывающие и опережающие), введенные в статистическую физику Боголюбовым и Тябликовым [1], [2], оказались весьма эффективным методом изучения спектра возбуждений и фазовых переходов в многочастичных системах [3]. Применение этого метода в спиновых системах позволило Тябликову уже в простейшем приближении среднего поля построить интерполяционную теорию для описания намагниченности ферромагнетика в широком интервале температур, включая парамагнитную фазу [2], [4]. Некоторым недостатком развитой теории было появление в формуле для низкотемпературной намагниченности вкладов порядка T^3 , обусловленных “кинематическим взаимодействием”, что противоречит теории Дайсона [5] и результатам спиновой диаграммной техники, разработанной позднее [6]–[9] (см. также монографии [10]–[12]).

В дальнейшем было показано, что в рамках более строгой теории [13], учитывающей затухание спиновых волн, удастся получить корректную формулу для низкотемпературной намагниченности [14], [15]. На основе метода проектирования типа Мори [16] при дифференцировании ФГ по двум временам было выведено точное

*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: plakida@theor.jinr.ru

уравнение Дайсона [17]. Приближенное вычисление массового оператора в этом уравнении позволяет воспроизвести результаты диаграммной техники [7] и получить корректную формулу для низкотемпературной намагниченности [18], как и в работах [14], [15]. Общий метод получения формально точной системы уравнений для двухвременных ФГ при дифференцировании ФГ по двум временам был предложен в работе [19] и затем использован для построения теории спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе [20]. Вычисление массового оператора ФГ в приближении взаимодействующих мод позволило получить интерполяционную формулу для описания спектра спиновых возбуждений в ферромагнитной и парамагнитной областях [21].

На основе метода двухвременных ФГ была разработана также общая теория динамической спиновой восприимчивости в антиферромагнетике при наличии дырочных возбуждений в рамках t - J модели [22]. Вычисление спектра спиновых флуктуаций на основе развитой теории было проведено как в нормальной фазе [23], так и в сверхпроводящей фазе [24] при учете вкладов более высокого порядка в массовом операторе, отсутствующих в температурной диаграммной технике [25]. Учет этих членов необходим для построения корректной теории магнитной резонансной моды, наблюдаемой в высокотемпературных купратных сверхпроводниках (см. монографию [26]).

В настоящей работе мы обсуждаем общий метод вычисления динамической спиновой восприимчивости на примере модели Гейзенберга, используя метод проектирования типа Мори в уравнениях для ФГ и приближение взаимодействующих мод для вычисления массового оператора. В разделе 2 обсуждается общая теория, которая используется для вычисления спектра спиновых волн и намагниченности в ферромагнитной фазе. Спектр спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе для антиферромагнитной модели Гейзенберга рассмотрен в разделе 3.

2. ФЕРРОМАГНИТНАЯ МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА

2.1. Уравнение Дайсона. В качестве примера применения техники уравнений движения для двухвременных ФГ рассмотрим изотропную ферромагнитную модель Гейзенберга для спиновых операторов $S = 1/2$:

$$H = -h \sum_i S_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

где $h = \mu_B H^z$ – зеемановская энергия спина во внешнем магнитном поле H^z и J_{ij} – обменное взаимодействие для спинов на узлах решетки $i \neq j$. Спектр спиновых возбуждений определяется динамической восприимчивостью для поперечных компонент оператора спина $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_\omega = -\frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_\omega. \quad (2)$$

Здесь мы ввели фурье-образ запаздывающей двухвременной коммутаторной ФГ в обозначениях Зубарева [3]:

$$\langle\langle A | B \rangle\rangle_\omega = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [A(t), B] \rangle, \quad \text{Im } \omega > 0, \quad (3)$$

где $A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$ и $\langle AB \rangle$ – статистическое среднее от оператора AB при температуре T . В дальнейшем мы пользуемся системой единиц, в которой $\hbar = 1$, $k_B = 1$ и $\beta = 1/k_B T = 1/T$.

Для вычисления двухвременной спиновой ФГ в (2) воспользуемся уравнением движения

$$\omega \langle \dot{S}_i^+ | S_j^- \rangle_\omega = 2 \langle S_i^z \rangle \delta_{ij} + \langle \dot{S}_i^+ | S_j^- \rangle_\omega, \quad (4)$$

где для операторов спина $i\dot{S}_i^\pm = i(d/dt)S_i^\pm$ имеем уравнение

$$\pm i\dot{S}_i^\pm = [S_i^\pm, H] = hS_i^\pm + \sum_m J_{im} (S_m^z S_i^\pm - S_i^z S_m^\pm). \quad (5)$$

В правой части этого уравнения появляются многочастичные спиновые операторы, в которых удобно провести разделение когерентных и некогерентных процессов в распространении спиновых возбуждений с помощью некоторой проекционной техники. При этом устраняется произвол в расщеплении ФГ, возникающий в обычном методе обрыва цепочки уравнений для двухвременных ФГ [3]. Для исключения секулярных членов из временных корреляционных функций наиболее часто используется метод Мори [16], основанный на введении неприводимых операторов, и метод неприводимого оператора Лиувилля (см., например, работу [27]). В то время как вычисление неприводимых (irreducible) операторов является достаточно простым, вычисление временной зависимости с помощью неприводимого оператора Лиувилля представляет определенные трудности и иногда приводит к необоснованным результатам (см. работу [28]). Церковников предложил общий метод проектирования для временных ФГ [19], в котором в качестве скалярного произведения используется временная ФГ. При таком подходе спроектированные ФГ удовлетворяют формально точной цепочке уравнений, обрыв которой на некотором шаге позволяет получить приближенное выражение для исходной ФГ.

Здесь мы применим обычную версию проекционной техники типа Мори для ФГ [29]. Применение этого метода позволяет достаточно просто получить уравнение Дайсона в модели Гейзенберга [17]. Метод основан на введении неприводимых операторов со скалярным произведением, определенным для статических корреляционных функций. Для этого выделим в уравнении движения (5) линейную часть и ортогональное к ней дополнение $Z_i^{+(\text{irr})}$ согласно правилу проектирования:

$$[S_i^+, H] = hS_i^+ + \sum_l E_{il} S_l^+ + Z_i^{+(\text{irr})}, \quad \langle [Z_i^{+(\text{irr})}, S_j^-] \rangle = 0. \quad (6)$$

Это уравнение определяет матрицу частот E_{ij} и соответствующую нулевую ФГ в обобщенном приближении среднего поля (ПСП) [17] (см. также работу [14]):

$$E_{ij} = \frac{\langle [[S_i^+, H], S_j^-] \rangle}{\langle [S_i^+, S_i^-] \rangle} = \sum_m J_{im} [\delta_{i,j} - \delta_{j,m}] \frac{2\langle S_i^z S_m^z \rangle + \langle S_i^- S_m^+ \rangle}{2\langle S_i^z \rangle}, \quad (7)$$

$$G_{ij}^{(0)}(\omega) = \langle \dot{S}_i^+ | S_j^- \rangle_\omega^{(0)} = 2\langle S_i^z \rangle \{(\omega - h)\delta_{ij} - E_{ij}\}^{-1}. \quad (8)$$

Вводя далее фурье-разложение по волновым векторам $\mathbf{q}$ в пространстве обратной решетки согласно (2), получим

$$G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}^{(0)} = \frac{\sigma}{\omega - h - E_{\mathbf{q}}}, \quad (9)$$

$$E_{\mathbf{q}} = \langle S_i^z \rangle (J_0 - J_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{\sigma N} \sum_{\mathbf{k}} (J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) [2K^{zz}(\mathbf{k}) + K^{-+}(\mathbf{k})]. \quad (10)$$

Здесь введены средняя намагниченность системы $\sigma = \langle S_i^z \rangle / S = 2\langle S_i^z \rangle$, фурье-компонента обменного взаимодействия $J_{\mathbf{q}} = (1/N) \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} J_{i,j}$ и корреляционные функции флуктуаций продольных компонент спина $\delta S_i^z = S_i^z - \langle S_i^z \rangle$,

$$\langle \delta S_i^z \delta S_j^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} K^{zz}(\mathbf{q}),$$

и поперечных компонент спина,

$$\langle S_i^- S_j^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} K^{-+}(\mathbf{q}).$$

Первый член в формуле (10) соответствует ПСП Тябликова [1], [4], в котором не учитываются вклады от статических флуктуаций спинов. Такие же результаты для спектра спиновых возбуждений в ПСП (обобщенном приближении Хартри–Фока) были получены в работе [14] (более подробно см. дополнение в книге [2]).

Учитывая представление (6), запишем уравнение движения (4) для ФГ в виде

$$\sum_m [(\omega - h)\delta_{i,m} - E_{im}] \langle\langle S_m^+ | S_j^- \rangle\rangle_{\omega} = \sigma \delta_{ij} + \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | S_j^- \rangle\rangle_{\omega}. \quad (11)$$

Вычислим многочастичную ФГ в правой части этого уравнения, дифференцируя ее по второму времени t' , т. е. вычисляя $-i(d/dt') \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})}(t) | S_j^-(t') \rangle\rangle$. Для фурье-компоненты ФГ получим уравнение

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | S_j^- \rangle\rangle_{\omega} &= \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | -i\dot{S}_j^- \rangle\rangle_{\omega} = h \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | S_j^- \rangle\rangle_{\omega} + \\ &+ \sum_m E_{jm} \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | S_m^- \rangle\rangle_{\omega} + \langle\langle Z_i^{+(\text{irr})} | Z_j^{-(\text{irr})} \rangle\rangle_{\omega}, \end{aligned} \quad (12)$$

где мы учли, что $\langle [Z_i^{+(\text{irr})}, S_j^-] \rangle = 0$, и ввели неприводимую часть оператора $-i\dot{S}_j^-$ аналогично уравнению (6). Учитывая определение нулевой ФГ (8), (9), мы можем представить решение системы уравнений (11), (12) для фурье-компоненты ФГ $G(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}$ в виде

$$G(\mathbf{q}, \omega) = G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) + G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega) G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega), \quad (13)$$

где введена матрица рассеяния

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\sigma} \langle\langle Z_{\mathbf{q}}^{+(\text{irr})} | Z_{\mathbf{q}}^{-(\text{irr})} \rangle\rangle_{\omega} \frac{1}{\sigma}.$$

Для устранения секулярных членов во временной зависимости в матрице рассеяния определим собственную часть (proper part) этой матрицы $T^{(pp)}(\mathbf{q}, \omega) = \Sigma(\mathbf{q}, \omega)$ с помощью уравнения

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \Sigma(\mathbf{q}, \omega) + \Sigma(\mathbf{q}, \omega)G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)T(\mathbf{q}, \omega).$$

Как и в методе Мори, это уравнение исключает вклад от свободного распространения возбуждений в уравнении для одночастичной ФГ (13), которое принимает вид уравнения Дайсона для полной ФГ,

$$G(\mathbf{q}, \omega) = G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) + G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)\Sigma(\mathbf{q}, \omega)G(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma}{\omega - h - E_{\mathbf{q}} - M(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (14)$$

с массовым оператором

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \sigma\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle Z_{\mathbf{q}}^{+(\text{irr})} | Z_{\mathbf{q}}^{-(\text{irr})} \rangle\rangle_{\omega}^{(pp)} \frac{1}{\sigma}. \quad (15)$$

Спектр спиновых возбуждений определяется мнимой частью восприимчивости (2), или спектральной плотностью ФГ (14):

$$A(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\sigma\pi} \text{Im} G(\mathbf{q}, \omega + i\delta) = -\frac{1}{\pi} \frac{M''(\mathbf{q}, \omega)}{[\omega - h - E_{\mathbf{q}} - M'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [M''(\mathbf{q}, \omega)]^2}, \quad (16)$$

где $M(\mathbf{q}, \omega + i\delta) = M'(\mathbf{q}, \omega) + iM''(\mathbf{q}, \omega)$. Здесь $M'(\mathbf{q}, \omega)$ – реальная часть и $M''(\mathbf{q}, \omega)$ – мнимая часть массового оператора. Когерентное распространение спиновых возбуждений описывается спектром возбуждений в обобщенном ПСП $E_{\mathbf{q}}$, в то время как массовый оператор $M(\mathbf{q}, \omega)$ определяет некогерентную часть спектра, обусловленную неупругими процессами рассеяния. Последние определяют затухание спиновых возбуждений: $\Gamma(\mathbf{q}, \omega) = -M''(\mathbf{q}, \omega) > 0$.

В спиновой диаграммной технике для ФГ используется представление Ларкина с эффективным взаимодействием [6]–[8], [10]. В методе проектирования Мори получается точное уравнение Дайсона (14) с массовым оператором в виде многочастичной ФГ (15) относительно неприводимых операторов $Z_i^{\pm(\text{irr})}$ (6), не содержащих одночастичных операторов. Оба представления оказываются эквивалентными, если провести точное вычисление всех вкладов [12]. Однако при приближенном вычислении массового оператора и эффективного взаимодействия результаты могут отличаться. Как показано ниже, при учете диаграмм низшего порядка результаты для спектра спиновых волн и корреляционных функций совпадают.

2.2. Приближенное вычисление массового оператора. Для вычисления массового оператора воспользуемся приближением взаимодействующих мод, которое эквивалентно приближению непересекающихся диаграмм. Используя спектральные представления для ФГ [3], выразим массовый оператор (15) через неприводимую часть многочастичной двухвременной корреляционной функции:

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega't} \times \\ \times \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{j}-\mathbf{i})} \langle Z_j^{-(\text{irr})}(t) | Z_i^{+(\text{irr})} \rangle^{(pp)}. \quad (17)$$

Учитывая определение неприводимой части оператора тока $Z_i^{\pm(\text{irr})}$ (6) в уравнениях движения (5), запишем многочастичную двухвременную функцию в правой части равенства (17) в виде

$$\langle Z_j^-(\text{irr})(t) | Z_i^+(\text{irr}) \rangle^{(\text{pp})} = \sum_{l,m} J_{jm} J_{li} \langle [\delta S_m^z(t) S_j^-(t) - \delta S_j^z(t) S_m^-(t)] \times \\ \times [\delta S_l^z S_i^+ - \delta S_i^z S_l^+] \rangle. \quad (18)$$

В этом выражении вклады вида $\sum_l E_{il} S_l^+$ в формуле для неприводимого оператора (6) были исключены в соответствии с определением собственной части многочастичной корреляционной функции, которая не должна содержать одночастичных функций типа $\langle S_i^-(t) S_j^+ \rangle$.

В приближении взаимодействующих мод предполагается, что распространение “одетых” спиновых флуктуаций δS_m^z и $S_j^{\pm}$ происходит независимо. Это приближение соответствует самосогласованному борновскому приближению, в котором пренебрегают перенормировкой вершин, и эквивалентно вычислению скелетной диаграммы в низшем приближении по взаимодействию. В предположении о независимом распространении спиновых возбуждений многочастичные временные корреляционные функции записываются в виде произведения соответствующих одночастичных функций:

$$\langle \delta S_{\mathbf{k}}^z(t) S_{\mathbf{q}}^-(t) \delta S_{\mathbf{k}'}^z S_{\mathbf{q}'}^+ \rangle = \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \langle \delta S_{\mathbf{k}}^z(t) \delta S_{-\mathbf{k}}^z \rangle \langle S_{\mathbf{q}}^-(t) S_{\mathbf{q}}^+ \rangle, \quad (19)$$

где $\Delta(\mathbf{k}) = 1$ для векторов $\mathbf{k} = 0$, $\mathbf{k} = \mathbf{G}$ обратной решетки и $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ в остальных случаях. Рассмотрим приближенное вычисление корреляционных функций в (19).

Наиболее простой результат можно получить, если в уравнении (19) пренебречь зависимостью флуктуаций продольного спина от времени, полагая $\langle \delta S_{\mathbf{k}}^z(t) \delta S_{-\mathbf{k}}^z \rangle \simeq \langle \delta S_{\mathbf{k}}^z \delta S_{-\mathbf{k}}^z \rangle = K^{zz}(\mathbf{k})$ при условии, что энергия этих возбуждений много меньше энергии поперечных возбуждений. При этом временную корреляционную функцию поперечных флуктуаций спина можно вычислить в низшем приближении:

$$\langle S_{\mathbf{q}}^-(t) S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} N(\omega) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G^{(0)}(\mathbf{q}, \omega + i\delta) \right) = \sigma N(E_{\mathbf{q}}) e^{iE_{\mathbf{q}} t}. \quad (20)$$

Здесь $N(\omega) = \{e^{\beta\omega} - 1\}^{-1}$ и принято $\hbar = 0$. В этом приближении для массового оператора получаем формулу [17]

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} K^{zz}(\mathbf{k}) \frac{(J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{q}-\mathbf{k}})^2}{\omega - E_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}}.$$

Это выражение соответствует результатам вычисления массового оператора в диаграммной технике за счет рассеяния спиновых волн на продольных флуктуациях спина (см. формулу (12) в работе [7]).

Массовый оператор, обусловленный рассеянием спиновых возбуждений на поперечных компонентах спина, описывается многочастичной функцией (18), в которой для оператора продольной компоненты спина δS_i^z используется соотношение $S_i^z = 1/2 - S_i^- S_i^+$. В этом представлении получим

$$\langle Z_j^-(\text{irr})(t) | Z_i^+(\text{irr}) \rangle^{(\text{pp})} = \sum_{l,m} J_{jm} J_{li} I_{jm,li}(t),$$

где

$$I_{jm,li}(t) = \langle [S_m^-(t)S_m^+(t)S_j^-(t) - S_j^-(t)S_j^+(t)S_m^-(t)] [S_l^- S_l^+ S_i^+ - S_i^- S_i^+ S_l^+] \rangle. \quad (21)$$

Приближение взаимодействующих мод для двухвременной корреляционной функции (21) определяется соотношением

$$I_{jm,li}(t) = [\langle S_m^+(t)S_l^- \rangle - \langle S_m^+(t)S_i^- \rangle - \langle S_j^+(t)S_l^- \rangle + \langle S_j^+(t)S_i^- \rangle] \times \\ \times [\langle S_m^-(t)S_l^+ \rangle \langle S_j^-(t)S_i^+ \rangle + \langle S_m^-(t)S_i^+ \rangle \langle S_j^-(t)S_l^+ \rangle], \quad (22)$$

где мы учли, что $j \neq m$ и $i \neq l$. Вводя фурье-разложение для корреляционных функций,

$$\langle S_i^-(t)S_j^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} K^{-+}(\mathbf{q}, t),$$

для неприводимой корреляционной функции в массовом операторе (17) получим представление

$$\langle Z_{\mathbf{q}}^{-(\text{irr})}(t) | Z_{\mathbf{q}}^{+(\text{irr})} \rangle^{(\text{pp})} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \sum_{l,m} J_{jm} J_{li} I_{jm,li}(t) = \\ = \frac{1}{2N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} [V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)]^2 K^{-+}(\mathbf{q}_1, t) K^{-+}(\mathbf{q}_2, t) K^{-+}(\mathbf{q}_3, t), \quad (23)$$

где $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = \mathbf{q}$. Вершина взаимодействия при учете симметрии по перестановке импульсов $\mathbf{q}_2 \leftrightarrow \mathbf{q}_3$ в (23) определяется формулой

$$V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = J_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2} - J_{\mathbf{q}_2} + J_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3} - J_{\mathbf{q}_3} = \\ = V_{\mathbf{kqp}} = J_{\mathbf{q}} - J_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{p}-\mathbf{q}} - J_{\mathbf{p}+\mathbf{q}},$$

где мы ввели вершину $V_{\mathbf{kqp}}$ – эффективный потенциал взаимодействия спиновых волн в теории Дайсона [5], обычно используемый для описания четырехспинового взаимодействия (см., например, дополнение в книге [2]). При этом была проведена замена исходных переменных $\mathbf{q}_1 = -\mathbf{p}$, $\mathbf{q}_2 = \mathbf{p} + \mathbf{q}$, $\mathbf{q}_3 = \mathbf{k} - \mathbf{q}$, где импульс при рассеянии удовлетворяет закону сохранения $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 = \mathbf{k}$.

Вводя фурье-компоненты временных корреляционных функций и используя спектральные представления (20), для массового оператора после интегрирования по dt' и $d\omega'$ в (17) получим выражение

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma^2}{2N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 - \mathbf{q}) [V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)]^2 \times \\ \times \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega_2 + \omega_3 - \omega_1 - \omega} A(\mathbf{q}_1, \omega_1) A(\mathbf{q}_2, \omega_2) A(\mathbf{q}_3, \omega_3) \times \\ \times \{N(\omega_1)[1 + N(\omega_2)][1 + N(\omega_3)] - [1 + N(\omega_1)]N(\omega_2)N(\omega_3)\}, \quad (24)$$

где использована спектральная функция спиновых возбуждений $A(\mathbf{q}, \omega)$ (16). Применяя нулевую ФГ (8) при вычислении спектральной функции $A^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \delta(\omega - E_{\mathbf{q}})$,

для массового оператора (24) в низшем порядке по взаимодействию получим

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\sigma^2}{2N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 - \mathbf{q}) [V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)]^2 \times \\ \times \frac{N(E_{\mathbf{q}_1})[1 + N(E_{\mathbf{q}_2}) + N(E_{\mathbf{q}_3})] - N(E_{\mathbf{q}_2})N(E_{\mathbf{q}_3})}{E_{\mathbf{q}_2} + E_{\mathbf{q}_3} - E_{\mathbf{q}_1} - \omega}, \quad (25)$$

где мы учли соотношение

$$N(\omega_1)[1 + N(\omega_2)][1 + N(\omega_3)] - [1 + N(\omega_1)]N(\omega_2)N(\omega_3) = \\ = N(\omega_1)[1 + N(\omega_2) + N(\omega_3)] - N(\omega_2)N(\omega_3).$$

Выражение (25) для массового оператора соответствует результатам диаграммной техники (см. формулу (286) в работе [7]) и приближению второго порядка в теории возмущений для временных ФГ (см. формулы (2.10) и (2.11) в работе [15]).

2.3. Низкотемпературная намагниченность. Для вычисления намагниченности можно воспользоваться точным соотношением для спиновых операторов $S = 1/2$:

$$\sigma = 2\langle S_i^z \rangle = 1 - 2\langle S_i^- S_i^+ \rangle = 1 - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle. \quad (26)$$

Среднее значение корреляционной функции определяется формулой

$$\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \sigma \int_{-\infty}^{\infty} d\omega N(\omega) A(\mathbf{q}, \omega), \quad (27)$$

где использована спектральная функция (16). В обобщенном ПСП (9) получаем $\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \sigma N(h + E_{\mathbf{q}})$, и уравнение для намагниченности принимает простой вид:

$$\frac{1}{\sigma} = 1 + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} N(h + E_{\mathbf{q}}) \equiv 1 + 2P(h, T).$$

Эта формула была использована Тябликовым [2] для построения самосогласованной теории намагниченности в широкой области температур, включая парамагнитную фазу при $T > T_C$, $h \neq 0$, где T_C – температура Кюри. При этом спектр спиновых волн вычислялся в ПСП, $E_{\mathbf{q}}^{(0)} = (\sigma/2)(J_0 - J_{\mathbf{q}})$, без учета вкладов от статических флуктуаций спина в (10). В области низких температур $T \ll J_0$ среднее число спиновых возбуждений мало, $N(h + E_{\mathbf{q}}) \ll 1$, и для намагниченности можно написать разложение

$$\sigma = \{1 + 2P(h, T)\}^{-1} = 1 - 2P(h, T) + [2P(h, T)]^2 + \dots \quad (28)$$

В ПСП получаем [2]

$$P^{(0)}(h, T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} N(h + E_{\mathbf{q}}^{(0)}) = Z_{3/2} \left(\frac{\tilde{h}}{\tau} \right) \tau^{3/2} + \frac{3\pi}{4} Z_{5/2} \left(\frac{\tilde{h}}{\tau} \right) \tau^{5/2} + \dots, \quad (29)$$

где

$$Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p} e^{-nx}, \quad Z_p(0) = \zeta(p).$$

При вычислении суммы по волновым векторам использован спектр для решетки со взаимодействием z ближайших соседей, $J_{\mathbf{q}} = J_0 z \gamma(\mathbf{q})$, $\gamma(\mathbf{q}) = (1/z) \sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{a})}$, и введены безразмерные температура $\tau = 3T/(4\pi z J_0)$ и магнитное поле $\tilde{h} = 3h/(4\pi z J_0)$ (см. формулы (15.14)–(15.21) в работе [2]). В то время как первый член в (28) дает формулу Блоха для намагниченности $\sigma(T)|_{T \rightarrow 0} = 1 - BT^{3/2}$, второй член $\propto [P(h, T)]^2$ приводит к поправкам $\propto T^3$, обусловленным кинематическим взаимодействием. Если использовать при вычислении суммы по волновым векторам в (29) спектр $E_{\mathbf{q}}$ (10) с учетом вкладов от флуктуаций спина, то мы получим вклады более высокого порядка по T в функцию $P(h, T)$ в (28), которые, однако, не компенсируют кинематический вклад $[P(h, T)]^2$, и вклад порядка T^3 в намагниченности сохранится (см., тем не менее, более общее представление спектра в теории первого порядка в работе [14]). Более того, если для вычисления низкотемпературной намагниченности в спиновой диаграммной технике использовать точное соотношение (26) и полученную в этой теории формулу для корреляционной функции поперечных компонент спина $\langle S_i^- S_i^+ \rangle \propto \sigma$ (см. работу [7]), то такие же поправки $\propto P^2 \propto T^3$ с необходимостью появятся в формуле (28) (в диаграммной технике для вычисления намагниченности используется теория возмущений для свободной энергии [6]). Таким образом, появление членов порядка T^3 в низкотемпературной намагниченности совершенно не связано с “расщеплением Тябликова”, а является результатом применения теории низшего порядка, без учета вкладов от массового оператора в спектральной плотности (16) при вычислении корреляционной функции в (27). Более подробно эта проблема обсуждается в дополнении к монографии [2].

Покажем, что учет массового оператора (25) при вычислении корреляционной функции (27) приводит к компенсации кинематического вклада и исключению членов порядка T^3 в низкотемпературной намагниченности [18]. Чтобы приближенно учесть члены второго порядка по взаимодействию, запишем спектральную плотность (16) для $h = 0$ в виде

$$A(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}(\omega)}{[\omega - E_{\mathbf{q}} - M'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + \Gamma_{\mathbf{q}}^2(\omega)} \simeq (1 - \alpha_{\mathbf{q}}) \delta(\omega - \tilde{E}_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}(\omega)}{(\omega - \tilde{E}_{\mathbf{q}})^2},$$

где введена перенормированная энергия спиновых возбуждений $\tilde{E}_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{q}} + M'(\mathbf{q}, E_{\mathbf{q}})$, а также их затухание $\Gamma_{\mathbf{q}}(\omega) = -M''(\mathbf{q}, \omega)$. Весовой множитель $\alpha_{\mathbf{q}}$, определяющий квазичастичный вклад, находится из правила сумм:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{q}, \omega) = 1, \quad \alpha_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\Gamma_{\mathbf{q}}(\omega)}{(\omega - \tilde{E}_{\mathbf{q}})^2}.$$

Учитывая выражение для массового оператора (25), находим

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{q}}(\omega) = & \frac{\pi \sigma^2}{2N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} [V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)]^2 \delta(E_{\mathbf{q}_2} + E_{\mathbf{q}_3} - E_{\mathbf{q}_1} - \omega) \times \\ & \times \{N(E_{\mathbf{q}_1})[1 + N(E_{\mathbf{q}_2}) + N(E_{\mathbf{q}_3})] - N(E_{\mathbf{q}_2})N(E_{\mathbf{q}_3})\}. \end{aligned}$$

В этом приближении получим корреляционную функцию (27):

$$\langle S_{\mathbf{q}}^- S_{\mathbf{q}}^+ \rangle = \sigma N(\tilde{E}_{\mathbf{q}}) + \frac{\sigma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{[N(\omega) - N(\tilde{E}_{\mathbf{q}})] \Gamma_{\mathbf{q}}(\omega)}{(\omega - \tilde{E}_{\mathbf{q}})^2}.$$

Соответственно, спиновую корреляционную функцию запишем в виде

$$\begin{aligned}\langle S_i^- S_i^+ \rangle &= \frac{\sigma}{N} \sum_{\mathbf{q}} N(\tilde{E}_{\mathbf{q}}) + \frac{\sigma}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{[N(\omega) - N(\tilde{E}_{\mathbf{q}})]\Gamma_{\mathbf{q}}(\omega)}{(\omega - \tilde{E}_{\mathbf{q}})^2} \equiv \\ &\equiv \sigma[P^{(1)}(T) + P^{(2)}(T)],\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}P^{(2)}(T) &= \frac{\sigma^2}{2N^3} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} [V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)]^2 [N(E_{\mathbf{q}_2} + E_{\mathbf{q}_3} - E_{\mathbf{q}_1}) - N(\tilde{E}_{\mathbf{q}})] \times \\ &\times \frac{N(E_{\mathbf{q}_1})[1 + N(E_{\mathbf{q}_2}) + N(E_{\mathbf{q}_3})] - N(E_{\mathbf{q}_2})N(E_{\mathbf{q}_3})}{(E_{\mathbf{q}_2} + E_{\mathbf{q}_3} - E_{\mathbf{q}_1} - E_{\mathbf{q}})^2}.\end{aligned}\quad (30)$$

В низкотемпературном пределе поправки второго порядка оцениваются величиной $P^{(2)} \simeq 2[P^{(0)}]^2(1 + 2P^{(0)})$ (см. формулы (2.27), (2.32) в работе [15]). В результате в уравнении для намагнитченности (28)

$$\sigma = [1 + 2P(T)]^{-1} \simeq 1 - 2\{P^{(0)}(T) + 2[P^{(0)}(T)]^2\} + [2P^{(0)}(T)]^2 \simeq 1 - 2P^{(0)}(T)$$

происходит компенсация кинематического вклада $[2P^{(0)}(T)]^2 \propto T^3$ за счет динамического взаимодействия–рассеяния спиновых волн (30), как и в теории Дайсона [5]. Для получения более строгих результатов необходимо рассмотреть приближение T -матрицы рассеяния при вычислении массового оператора (см. работу [15]).

3. ПАРАМАГНИТНАЯ СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

В этом разделе мы рассмотрим модель Гейзенберга (1) со взаимодействием только ближайших соседей, $J_{\mathbf{i}, \mathbf{i}+\mathbf{a}} = J$, и вычислим динамическую спиновую восприимчивость (2) в парамагнитной фазе.

3.1. Метод функции релаксации. В парамагнитной фазе с нулевой намагнитченностью среднее значение коммутатора $\langle [S_i^+, S_j^-] \rangle = 2\delta_{ij} \langle S_i^z \rangle$ равно нулю. Поскольку эта величина входит в качестве неоднородного члена в уравнение (4) для ФГ, удобнее рассматривать уравнение движения для функции релаксации Кубо–Мори [20], [27]:

$$((A|B))_{\omega} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} (A(t), B), \quad (31)$$

где $(A(t), B)$ – скалярное произведение Кубо–Мори, определяемое выражением

$$(A(t), B) = \int_0^{\beta} d\lambda \langle A(t - i\lambda) B \rangle. \quad (32)$$

Функция релаксации (31) связана с ФГ (3) уравнением

$$\omega((A|B))_{\omega} = \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega} - \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega=0}. \quad (33)$$

Для этих функций можно получить также соотношения

$$((i\dot{A}|B))_{\omega} = ((A|-i\dot{B}))_{\omega} = \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega}, \quad (34)$$

$$(i\dot{A}, B) = (A, -i\dot{B}) = \langle[A, B]\rangle, \quad (35)$$

$$(A, B) = -\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega=0}. \quad (36)$$

Согласно уравнению (33) динамическую спиновую восприимчивость (2) можно определить, вычисляя спиновую функцию релаксации $\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \langle (S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega}$:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} - \omega \Phi(\mathbf{q}, \omega), \quad (37)$$

где $\chi_{\mathbf{q}} \equiv \chi(\mathbf{q}, 0) = \langle S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^- \rangle$ – статическая спиновая восприимчивость. Используя метод уравнения движения, получим следующую систему уравнений для функции релаксации:

$$\omega \langle (S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega} = \chi_{\mathbf{q}} + \langle (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega}, \quad \omega \langle (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega} = \langle (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega}, \quad (38)$$

где в последнем уравнении согласно (35) неоднородный член в парамагнитной фазе равен нулю, $\langle i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^- \rangle = \langle [S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = (2/\sqrt{N}) \langle S_{\mathbf{q}=0}^z \rangle = 0$.

Воспользуемся далее методом проектирования Мори аналогично рассмотренному выше для ФГ. Для этого запишем уравнение для операторов спинового тока $i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$ в виде

$$i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} = [S_{\mathbf{q}}^{\pm}, H] = \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} S_{\mathbf{q}}^{\pm} + \{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})}, \quad (\{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp}) = 0, \quad (39)$$

где неприводимые части операторов определяются из условия ортогональности в терминах скалярного произведения Кубо–Мори (32). При этом линейный член в уравнении (39), в отличие от уравнения (6) для ФГ, в парамагнитной фазе вклада не дает:

$$\omega_{\mathbf{q}}^{(0)} = \frac{\langle i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp} \rangle}{\langle S_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp} \rangle} = \frac{\langle [S_{\mathbf{q}}^{\pm}, S_{-\mathbf{q}}^{\mp}] \rangle}{\chi_{\mathbf{q}}} = 0.$$

Следовательно, неприводимые части операторов (39) равны исходным операторам: $\{i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})} = i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$. В результате решения системы уравнений (38) для функции релаксации мы можем написать уравнение

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) + \Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega) \Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega), \quad \Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_{\mathbf{q}}}{\omega}, \quad (40)$$

где матрица рассеяния первого порядка определена как функция релаксации токов:

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\chi_{\mathbf{q}}^2} \langle (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega}. \quad (41)$$

Чтобы учесть только спроектированную временную зависимость корреляционных функций в матрице рассеяния (41), как и в методе ФГ, мы определяем собственную часть матрицы, которая не содержит частей, соединенных одной функцией релаксации нулевого порядка $\Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$. Собственная часть определяет функцию памяти $M(\mathbf{q}, \omega)$ согласно уравнению

$$T(\mathbf{q}, \omega) = \frac{M(\mathbf{q}, \omega)}{\chi_{\mathbf{q}}^2} + \frac{M(\mathbf{q}, \omega)}{\chi_{\mathbf{q}}^2} \Phi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) T(\mathbf{q}, \omega). \quad (42)$$

В терминах функции памяти решение уравнения (40) записывается в виде

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \langle (S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega} = \frac{\chi_{\mathbf{q}}}{\omega - M(\mathbf{q}, \omega)/\chi_{\mathbf{q}}}, \quad (43)$$

где функция памяти выражается через операторы спинного тока $i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$:

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}}^2 T_{\mathbf{q}}^{(\text{pp})}(\omega) = ((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{(\text{pp})}.$$

В отличие от ферромагнитного состояния, где операторы $S_{\mathbf{q}}^{\pm}$ соответствуют операторам рождения и уничтожения квазичастиц, и поэтому уравнения первого порядка позволяют получить спектр квазичастиц в ПСП (10) и найти поправки за счет массового оператора (15) от операторов тока $J_i^{\pm} = (i d/dt) S_i^{\pm}$, в парамагнитном случае необходимо рассмотреть уравнения второго порядка для операторов спиновой плотности $S_{\mathbf{q}}^{\pm}$, где спектр возбуждений определяется операторами силы $F_i^{\pm} = i^2 (d^2/dt^2) S_i^{\pm}$. Для этого продифференцируем двухвременное представление функции памяти $((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+(t) | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-(t'))$ по двум временам t и t' . В результате получим следующие уравнения:

$$\omega((i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega} = m(\mathbf{q}) + ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}, \quad (44)$$

$$\omega((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega} = ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}, \quad (45)$$

где в (44) мы ввели статическую корреляционную функцию

$$m(\mathbf{q}) = (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle. \quad (46)$$

При этом неоднородный член в уравнении (45) равен нулю,

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) = \langle [-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega^2 \text{Im} \chi_{\mathbf{q}}(\omega + i\delta) = 0,$$

поскольку все четные моменты мнимой части восприимчивости, являющейся нечетной функцией от частоты ω , равны нулю. Далее мы повторим процедуру проецирования для операторов силы $F_i^{\pm} = i^2 (d^2/dt^2) S_i^{\pm}$ аналогично (39):

$$-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} = [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, H] = \omega_{\mathbf{q}}^{(1)} i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm} + \{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})}, \quad (\{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})}, i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp}) = 0. \quad (47)$$

При этом, как показано выше, неоднородный член в уравнении (47) равен нулю: $\omega_{\mathbf{q}}^{(1)} = (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp}) / (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}, -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^{\mp}) = 0$. Следовательно, неприводимые части операторов (47) равны исходным операторам, $\{-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}\}^{(\text{irr})} = -\ddot{S}_{\mathbf{q}}^{\pm}$.

По аналогии с выводом уравнений для функции релаксации (40), матрицы рассеяния (41) и функции памяти (42) мы можем записать решение системы уравнений (44), (45) для функции памяти в виде

$$M(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega - \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (48)$$

где массовый оператор представляет собой собственную часть матрицы рассеяния второго порядка:

$$\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{m(\mathbf{q})} ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{(\text{pp})}. \quad (49)$$

Используя представления (43) для функции релаксации и (48) для функции памяти, получим окончательное выражение для функции релаксации через массовый оператор (49):

$$\Phi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} \frac{\omega - \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega)},$$

где мы ввели частоту спиновых флуктуаций в статическом пределе:

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = \frac{m(\mathbf{q})}{\chi_{\mathbf{q}}}. \quad (50)$$

Следовательно, динамическая спиновая восприимчивость согласно (37) принимает вид

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{q}} - \omega \Phi(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{m(\mathbf{q})}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (51)$$

Полученное выражение для динамической спиновой восприимчивости с массовым оператором в виде (49) совпадает по форме с результатами работ [20], [30]. Спектр спиновых флуктуаций определяется спектральной плотностью (мнимой частью динамической спиновой восприимчивости (51)):

$$B(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \chi''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{-\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega) m(\mathbf{q})}{[\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega)]^2}; \quad (52)$$

здесь $\Sigma(\mathbf{q}, \omega + i0^+) = \Sigma'(\mathbf{q}, \omega) + i\Sigma''(\mathbf{q}, \omega)$, где $\Sigma'(\mathbf{q}, \omega) = -\Sigma'(\mathbf{q}, -\omega)$ и $\Sigma''(\mathbf{q}, \omega) = \Sigma''(\mathbf{q}, -\omega)$ — действительная и мнимая части массового оператора соответственно.

3.2. Статическая спиновая восприимчивость. В методе функции релаксации в отличие от метода ФГ для определения статической спиновой восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}$ необходимо независимо вычислить частоту спиновых флуктуаций $\omega_{\mathbf{q}}^2$ (50) в статическом пределе. В работе [20] эта функция была найдена из уравнений для функции релаксации в высокочастотном пределе, а в работе [30] для этого использовалось спектральное представление $\chi_{\mathbf{q}} = \int_{-\infty}^{\infty} (d\omega/\pi\omega) \chi''(\mathbf{q}, \omega)$. Для вычисления $\omega_{\mathbf{q}}^2$ аналогично работам [31], [32] мы воспользуемся более простым методом, основанным на приближенном решении уравнения

$$\langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-). \quad (53)$$

Левую часть этого уравнения легко вычислить:

$$m(\mathbf{q}) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = 8J(1 - \gamma_{\mathbf{q}})C_{10}, \quad (54)$$

где введена спиновая корреляционная функция для узлов i, j ($\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{i} - \mathbf{j}$)

$$C_{ij} = \langle S_i^+, S_j^- \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q}\mathbf{R}_{ij}) C_{\mathbf{q}}, \quad C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle.$$

Вычислим корреляционную функцию в правой части (53), записывая ее в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \sum_{\mathbf{R}_{il}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{il}} (-\ddot{S}_i^+, S_l^-), \quad (55)$$

где $-\ddot{S}_i^+ = [[S_i^+, H], H]$ определяется уравнением

$$-\ddot{S}_i^+ = \hbar^2 S_i^+ + \sum_{j \neq n} J_{ij} \{J_{jn}(P_{jin} - P_{nij}) - J_{in}(P_{ijn} - P_{nji})\}, \quad (56)$$

в котором $P_{jin} = (S_j^z S_i^z + S_j^- S_i^+ / 2) S_n^+$. Подставляя (56) в уравнение (55), получим многоузельные корреляционные функции, которые мы вычислим в приближении взаимодействующих мод аналогично соотношению (22) для двухвременных корреляционных функций. При этом появляются уравнения следующего типа:

$$(S_i^+ S_j^- S_n^+, S_l^-) \simeq \alpha_1 \langle S_n^+ S_j^- \rangle (S_i^+, S_l^-) + \alpha_2 \langle S_i^+ S_j^- \rangle (S_n^+, S_l^-).$$

Здесь аналогично работам [31], [32] введены множители α_1 и α_2 , учитывающие приближенный характер расщепления с помощью перенормировки вершин для спиновых корреляционных функций ближайших и следующих за ближайшими соседями соответственно. Определение этих множителей должно проводиться при численном расчете статической восприимчивости на основе правил сумм, например $C_{i,i} = \langle S_i^+ S_i^- \rangle = (2/3)S(S+1) = 1/2$.

В результате приближенного вычисления многочастичных корреляционных функций мы можем записать исходное уравнение (55) в виде

$$(-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) \simeq \omega_{\mathbf{q}}^2 (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \omega_{\mathbf{q}}^2 \chi_{\mathbf{q}},$$

где частота спиновых флуктуаций в ПСП определяется уравнением

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = 2J^2(1 - \gamma_{\mathbf{q}})[1 - 2\alpha_1 C_{01}(1 + 4\gamma_{\mathbf{q}}) + 2\alpha_2(2C_{11} + C_{02})]. \quad (57)$$

Следовательно, статическая восприимчивость согласно (50) имеет вид

$$\chi_{\mathbf{q}} = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2} = \frac{4C_{10}}{J[1 - 2\alpha_1 C_{01}(1 + 4\gamma_{\mathbf{q}}) + 2\alpha_2(2C_{11} + C_{02})]}.$$

Температура Кюри T_C перехода из парамагнитной фазы в упорядоченную ферромагнитную фазу определяется из условия $\chi_{\mathbf{q}} \rightarrow \infty$. Расходимость статической восприимчивости возникает за счет роста с понижением температуры корреляционной функции $C_{10} > 0$ ближайших соседей. При этом знаменатель обращается в ноль для волнового вектора $\mathbf{q} = 0$, для которого $\gamma_{\mathbf{q}} = 1$, так что температура Кюри определяется уравнением $10\alpha_1 C_{10} = 2\alpha_2(2C_{11} + C_{02})$. Для антиферромагнитной модели Гейзенберга с обменным взаимодействием $J < 0$ корреляционная функция ближайших соседей отрицательна, $C_{10} < 0$. В результате расходимость статической восприимчивости возникает для антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, для которого $\gamma_{\mathbf{q}} = -1$, и температура Нееля T_N определяется уравнением $6\alpha_1 C_{10} = 2\alpha_2(2C_{11} + C_{02})$, где $C_{11} > 0$ и $C_{02} > 0$ (см. работу [23]).

3.3. Массовый оператор. Выразим массовый оператор (49) через неприводимую часть временной корреляционной функции сил аналогично формуле (17):

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{m(\mathbf{q})} ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{(\text{pp})} = \frac{1}{2\pi m(\mathbf{q})} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{e^{\beta\omega'} - 1}{\omega'(\omega - \omega')} \times \\ &\times \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega' t} \langle F_i^-(t) | F_j^+ \rangle^{(\text{pp})}, \end{aligned} \quad (58)$$

где оператор силы $F_i^{\pm} = -\ddot{S}_i^{\pm}$ в координатном представлении определяется уравнением (56). Для вычисления неприводимой части временной корреляционной функции в правой части соотношения (58) воспользуемся приближением взаимодействующих мод, как и в уравнении (22) в методе ФГ:

$$\langle S_i^z(t) S_j^z(t) S_n^-(t) S_k^z S_l^z S_m^+ \rangle = \langle S_n^-(t) S_m^+ \rangle [\langle S_i^z(t) S_k^z \rangle \langle S_j^z(t) S_l^z \rangle + \langle S_i^z(t) S_l^z \rangle \langle S_j^z(t) S_k^z \rangle].$$

Используя спектральные представления для временных корреляционных функций в последнем соотношении и интегрируя по dt' и $d\omega'$ аналогично (24), для мнимой части массового оператора (58) получим выражение

$$\begin{aligned} \Sigma''(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{\pi(2J)^4(e^{\beta\omega} - 1)}{2m(\mathbf{q})\omega} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} W(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \iiint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \times \\ &\times N(\omega_1)N(\omega_2)N(\omega_3)\delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 - \omega)A_{\mathbf{q}_1}(\omega_1)A_{\mathbf{q}_2}(\omega_2)A_{\mathbf{q}_3}(\omega_3), \end{aligned} \quad (59)$$

где $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2$. Спектральная плотность $A_{\mathbf{q}}(\omega)$ определяется формулой (52). Вершина взаимодействия спиновых возбуждений имеет вид

$$W(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \{\Gamma_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3}^2 + \Gamma_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3}\Gamma_{\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1\mathbf{q}_3}\},$$

где

$$\Gamma_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3} = 4(\gamma_{\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_1} - \gamma_{\mathbf{q}_2})(\gamma_{\mathbf{q}_3} - \gamma_{\mathbf{q}_1}) - \gamma_{\mathbf{q}_1} + \gamma_{\mathbf{q}_3} + \gamma_{\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3} - \gamma_{\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_1}.$$

При выводе формулы (59) использовалось соотношение $\langle\langle S_{\mathbf{q}}^z | S_{-\mathbf{q}}^z \rangle\rangle_{\omega} = \langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega}/2$, имеющее место в парамагнитной фазе. Подставляя массовый оператор в общее выражение для динамической спиновой восприимчивости (51) и учитывая выражение (57) для статической частоты $\omega_{\mathbf{q}}$, мы можем определить спектр спиновых возбуждений с учетом неупругих процессов их рассеяния.

При этом возможно провести самосогласованное вычисление спектра, пользуясь методом итераций. Вычисляя массовый оператор (59) со спектральными интенсивностями в ПСП, $A_{\mathbf{q}}^{(0)}(\omega) = [m(\mathbf{q})/2\omega_{\mathbf{q}}][\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}})]$, находим выражение для массового оператора и спектральной интенсивности (52) в низшем порядке по взаимодействию. Полученное выражение для спектральной интенсивности можно использовать при вычислении массового оператора (59) в приближениях следующего порядка. В общем случае требуется проведение достаточно сложных численных расчетов. Подобные расчеты были проведены для определения спектра спиновых возбуждений в рамках более общей t - J модели с антиферромагнитным обменом ($J < 0$), как в нормальной фазе [23], так и в сверхпроводящей фазе [24].

Можно, однако, сделать некоторые общие замечания о характере спектра спиновых возбуждений в пределах низких и высоких частот. Рассмотрим выражение для

спиновой восприимчивости в пределе $\omega \rightarrow 0$ низких частот. Действительная часть массового оператора является нечетной функцией от частоты, и поэтому ее вкладом $\text{Re } \Sigma(\mathbf{q}, \omega) \propto \omega$ можно пренебречь, а мнимая часть является четной функцией и имеет конечный предел. В этом случае асимптотическое выражение для $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ может быть записано в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2 - i\omega\Gamma(\mathbf{q})} = \chi_{\mathbf{q}} \frac{i\gamma(\mathbf{q})}{\omega + i\gamma(\mathbf{q})},$$

где $\Gamma(\mathbf{q}) = -\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Im } \Sigma(\mathbf{q}, \omega + i0^+)$ – затухание, $\gamma(\mathbf{q}) = \omega_{\mathbf{q}}^2/\Gamma(\mathbf{q})$. Следовательно, в низкочастотном пределе следует ожидать, что спиновые флуктуации имеют релаксационное поведение с характерным затуханием $\gamma(\mathbf{q})$.

В области высоких частот, где определяемое мнимой частью массового оператора затухание может быть мало по сравнению с частотой спиновых флуктуаций, асимптотическое выражение для спиновой восприимчивости можно представить в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2 + \Omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega^2},$$

где высокочастотная перенормировка частоты определяется выражением $\Omega_{\mathbf{q}}^2 = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \text{Re } \Sigma(\mathbf{q}, \omega)$. В этом случае спиновые возбуждения могут носить характер распространяющихся квазичастиц. Общий анализ спектра возбуждений в рамках анизотропной модели Гейзенберга был проведен в работе [20].

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Представленный в настоящей работе метод вычисления двухвременных ФГ [1] на основе дифференцирования ФГ по двум временам и применения проекционной техники типа Мори имеет ряд преимуществ по сравнению с методом “расщепления” ФГ при последовательном дифференцировании ФГ по одному времени [3]. Метод проектирования исключает произвол в методе расщеплений ФГ, а дифференцирование по двум временам позволяет получить точное уравнение типа Дайсона с массовым оператором в виде многочастичной ФГ. Во многих случаях вычисление массового оператора в приближении взаимодействующих мод оказывается вполне достаточным для получения разумных физических результатов, соответствующих вычислению массового оператора в приближении непересекающихся диаграмм в диаграммной технике. При этом точность того или иного приближения в методе уравнений движения для двухвременных ФГ нетрудно проконтролировать, сопоставляя его с соответствующими диаграммами в температурной диаграммной технике. Определенным недостатком этого метода является невозможность обратной процедуры – определения расщепления, которое соответствовало бы выбранному ряду диаграмм.

Однако простота построения цепочки уравнений в случае операторов со сложными коммутационными соотношениями, таких как спиновые операторы или операторы Хаббарда, диаграммная техника для которых необычайно сложна [10], в значительной степени компенсирует недостатки метода уравнений движения для двухвременных ФГ. В качестве примера подобных вычислений для сложных моделей можно привести работы по изучению модели Хаббарда [33], сверхпроводимости в t – J модели [34] и в модели Хаббарда [35] при использовании техники операторов

Хаббарда. Этот метод оказался необычайно удобным при анализе спектра фононов в сильно ангармонических кристаллах при учете ангармонического взаимодействия всех порядков [36]. С помощью метода уравнений движения для ФГ удастся сформулировать теорию самосогласованных фононов, спектр которых зависит от корреляционных функций смещений атомов в решетке; данные функции вычисляются с помощью этого же спектра. В результате аналогично теории Тябликова ренормированных спиновых волн получается самосогласованная система уравнений, что позволяет исследовать спектр фононов вплоть до температуры неустойчивости решетки, определяющей верхнюю границу температуры плавления кристалла [37].

Благодарности. Автор благодарен Ю. Г. Рудому за полезные обсуждения.

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*, ред. Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, Наука, М., 1975.
- [3] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71**:5 (1960), 71–116; Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёнке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Физматлит, М., 2002.
- [4] С. В. Тябликов, *Укр. матем. журн.*, **11** (1959), 287–294.
- [5] F. Dyson, *Phys. Rev.*, **102**:5 (1956), 1217–1230.
- [6] В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, *ЖЭТФ*, **53**:1 (1967), 281–299.
- [7] В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, *ЖЭТФ*, **53**:3 (1967), 1089–1106.
- [8] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-Оглы, *ФММ*, **30**:2 (1970), 225–234.
- [9] В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *ЖЭТФ*, **85** (1983), 601–613.
- [10] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-Оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, М., 1974.
- [11] Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, М., 1987.
- [12] В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наукова думка, Киев, 1984.
- [13] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **7**:2 (1971), 250–261.
- [14] Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **14**:1 (1973), 102–122.
- [15] Ю. Г. Рудой, Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **15**:3 (1973), 388–406.
- [16] Н. Mori, *Progr. Theor. Phys.*, **33**:3 (1965), 423–455; **34**:3, 399–416.
- [17] N. M. Plakida, *Phys. Lett. A.*, **43**:6 (1973), 481–482.
- [18] Н. М. Плакида, П. Р. Русек, *Низкотемпературная намагниченность гейзенберговского ферромагнетика*, Препринт ОИЯИ Р4-8032, ОИЯИ, Дубна, 1974.
- [19] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **49**:2 (1981), 219–233.
- [20] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **52**:1 (1982), 147–160.
- [21] Ю. А. Церковников, *ТМФ*, **154**:1 (2008), 197–206.
- [22] А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, *ТМФ*, **145**:2 (2005), 240–255.
- [23] A. A. Vladimirov, D. Ihle, N. M. Plakida, *Phys. Rev. B*, **80**:10 (2009), 104425, 12 pp.
- [24] A. A. Vladimirov, D. Ihle, N. M. Plakida, *Phys. Rev. B*, **83** (2011), 024411.
- [25] Yu. A. Izyumov, B. M. Letfulov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**:28 (1991), 5373–5391.
- [26] N. M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer Series in Solid-State Sciences, **166**, Springer, Heidelberg, Berlin, 2010.
- [27] Д. Форстер, *Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции*, Атомиздат, М., 1980.

- [28] В. П. Калашников, *ТМФ*, **34**:3 (1978), 412–425.
- [29] M. Ichiyanagi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **32**:3 (1972), 604–609.
- [30] I. Sega, P. Prelošek, J. Bonča, *Phys. Rev. B*, **68**:5 (2003), 054524, 6 pp.
- [31] H. Shimahara, S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **60**:7 (1991), 2394–2405.
- [32] S. Winterfeldt, D. Ihle, *Phys. Rev. B*, **59**:9 (1999), 6010–6012.
- [33] F. Mancini, A. Avella, *Advances in Physics*, **53**:5–6 (2004), 537–768.
- [34] N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B*, **59**:18 (1999), 11949–11961.
- [35] Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, *ЖЭТФ*, **124**:2 (2003), 367–378.
- [36] Н. М. Плакида, “Метод двухвременных функций Грина в теории ангармонических кристаллов”, *Статистическая физика и квантовая теория поля*, ред. Н. Н. Боголюбов, Наука, М., 1973, 205–240.
- [37] Н. М. Плакида, *ФТТ*, **11**:3 (1969), 700–707.

Поступила в редакцию 24.02.2011