

Е. А. ТУРОВ

УЧЕТ МАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В $s-d$ -ОБМЕННОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНИТНОГО МЕТАЛЛА

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 29 V 1954)

1. Для объяснения некоторых особенностей магнитных и электрических свойств ферромагнетика представляет интерес произвести учет магнитного (анизотропного) взаимодействия между электронами в так называемой $s-d$ -обменной модели переходных металлов (^{1,2}). В соответствии с основным предположением этой модели будем описывать $3d$ -электроны (или электроны ферромагнетизма) в представлении «атомных» ортонормированных функций $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{n})$, а $4s$ -электроны (или электроны проводимости) — в представлении нелокализованных волновых функций одноэлектронной теории металла:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Считая для простоты, что на каждый узел решетки приходится по одному d -электрону с нескомпенсированным спином, примем также упрощающее предположение модели о невозможности реализации полярных состояний для d -электронов. Последнее условие может быть записано в виде $\sum_{\sigma} N_{n\sigma} = N_n = 1$, $\Delta = \infty$, где $N_{n\sigma}$ — число d -электронов около узла решетки с номером $\mathbf{n}$ в состоянии со спиновым квантовым числом σ ($\sigma = \pm 1/2$); Δ — энергия образования полярных состояний («двоек»). Как и в работах (^{1,2}), не будем совершенно учитывать взаимодействие между электронами проводимости.

Оператор энергии рассматриваемой системы взаимодействующих s - и d -электронов в поле атомных остатков имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + \sum_{i, \mathbf{n}} G(\mathbf{r}_i - \mathbf{n}) + \sum_{i < j} \Phi(i, j), \quad (2)$$

где первый член представляет кинетическую энергию электронов, второй — потенциальную энергию взаимодействия электронов с атомными остатками и третий — энергию взаимодействия электронов друг с другом. При указанных выше предположениях модели оператору (2) в представлении вторичного квантования соответствует оператор:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{(\mathbf{n}, \sigma)} L(\mathbf{n}\sigma, \mathbf{n}\sigma) \hat{a}_{\mathbf{n}\sigma}^+ a_{\mathbf{n}\sigma} + \sum_{(\mathbf{k}, \sigma)} L(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}\sigma) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{(\mathbf{n}_1 \neq \mathbf{n}_2, \sigma_1, \sigma_1', \sigma_2, \sigma_2')} [F(\mathbf{n}_1\sigma_1, \mathbf{n}_2\sigma_2; \mathbf{n}_1\sigma_1', \mathbf{n}_2\sigma_2') - \\ & - F(\mathbf{n}_1\sigma_1, \mathbf{n}_2\sigma_2; \mathbf{n}_2\sigma_2', \mathbf{n}_1\sigma_1')] \hat{a}_{\mathbf{n}_1\sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{n}_1\sigma_1'} \hat{a}_{\mathbf{n}_2\sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{n}_2\sigma_2'} + \end{aligned}$$

$$+ \sum_{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma_1, \sigma'_1, \sigma_2, \sigma'_2)} [F(\mathbf{n}\sigma_1, \mathbf{k}_1\sigma_2; \mathbf{n}\sigma'_1; \mathbf{k}_2\sigma'_2) - \\ - F(\mathbf{n}\sigma_1, \mathbf{k}_1\sigma_2; \mathbf{k}_2\sigma'_2, \mathbf{n}\sigma'_1)] \hat{a}_{\mathbf{n}\sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{n}\sigma'_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma'_2}, \quad (3)$$

где

$$L(\nu, \nu) = \int \theta_\nu^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_{\mathbf{n}} G(\mathbf{r} - \mathbf{n}) \right] \theta_\nu(x) dx, \quad (4)$$

$$F(\nu_1, \nu_2; \nu'_1, \nu'_2) = \int \theta_{\nu_1}^*(x_1) \theta_{\nu_2}^*(x_2) \Phi(1, 2) \theta_{\nu'_1}(x_1) \theta_{\nu'_2}(x_2) dx_1 dx_2. \quad (5)$$

Здесь приняты обозначения:

$$\theta_\nu(x) \equiv \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{n}) C_\sigma(s), \quad \text{когда } \nu \equiv \mathbf{n}\sigma; \\ \theta_\nu(x) \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) C_\sigma(s), \quad \text{когда } \nu \equiv \mathbf{k}\sigma, \quad (6)$$

где $C_\sigma(s)$ — спиновая часть волновой функции. Интегрирование в (4) и (5) проводится по всему координатному пространству и спиновым переменным s ($s = \pm 1/2$); $\hat{a}_{\mathbf{n}\sigma}^+$, $\hat{a}_{\mathbf{n}\sigma}$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+$, $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения частиц фермиевского типа, соответственно, для электронов ферромагнетизма и электронов проводимости.

Отказываясь от предположения о центральном типе взаимодействия между электронами, в самом общем случае можно положить, что

$$\Phi(1, 2) \equiv \Phi(\mathbf{r}_{12}, -i\hbar \vec{\nabla}_1, -i\hbar \vec{\nabla}_2, \hat{S}_1, \hat{S}_2), \quad (7)$$

где $\hat{S}$ — векторный оператор спина электрона.

2. Для случая низких температур можно, следуя методу примененному в работе (2), перейти от фермиевских операторов $\hat{a}_{\mathbf{n}\sigma}$ и $\hat{a}_{\mathbf{n}\sigma}^+$ к операторам рождения и уничтожения ферромагнонов $\hat{b}_{\mathbf{g}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{g}}^+$ бозевского типа. Тогда вместо (3) получим

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'_{dd} + \hat{H}'_{sd},$$

где

$$H_0 = U_0 + \sum_{\mathbf{g}} A_{\mathbf{g}} \hat{b}_{\mathbf{g}}^+ \hat{b}_{\mathbf{g}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} B_{\mathbf{g}} \hat{b}_{-\mathbf{g}} \hat{b}_{\mathbf{g}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} B_{\mathbf{g}}^* \hat{b}_{-\mathbf{g}}^+ \hat{b}_{\mathbf{g}}^+ + \\ + \sum_{(\mathbf{k}\sigma)} E_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{(\mathbf{k}\sigma, \sigma')} D(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}\sigma') \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma'} \quad (8)$$

главная часть оператора, собственные значения которой представляют в первом приближении энергетические уровни системы;

$$\hat{H}'_{dd} = \sum_{(\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_3 = 0)} C_{\mathbf{g}_3} \hat{b}_{\mathbf{g}_1}^+ \hat{b}_{\mathbf{g}_2} \hat{b}_{\mathbf{g}_3}^+ + \sum_{(\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_3 = 0)} C_{\mathbf{g}_3}^* \hat{b}_{\mathbf{g}_1}^+ \hat{b}_{\mathbf{g}_2} \hat{b}_{\mathbf{g}_3}, \quad (9)$$

часть оператора, соответствующая процессам рождения и уничтожения ферромагнонов вследствие их столкновений между собой;

$$\hat{H}'_{sd} = \sum_{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{g} = 0), \sigma, \sigma'} C_1(\mathbf{k}_1\sigma; \mathbf{k}_2\sigma') \hat{b}_{\mathbf{g}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma'} + \\ + \sum_{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 + \mathbf{g} = 0), \sigma, \sigma'} C_2(\mathbf{k}_1\sigma; \mathbf{k}_2\sigma') \hat{b}_{\mathbf{g}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma'} + \\ + \sum_{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 + \mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_1 = 0), \sigma, \sigma'} G(\mathbf{k}_1\sigma; \mathbf{k}_2\sigma') \hat{b}_{\mathbf{g}}^+ \hat{b}_{\mathbf{g}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma'} \quad (10)$$

часть оператора, соответствующая процессам столкновения между ферромагнонами и электронами проводимости. В формулах (8) — (10) введены следующие обозначения: U_0 — не зависящая от состояния постоянная величина;

$$A_g = \sum_n \{F(0^+, n^-; 0^+, n^-) - F(0^+, n^-; n^-, 0^+) - F(0^-, n^-; 0^-, n^-) + \\ + F(0^-, n^-; n^-, 0^-) + e^{ign} [F(0^+, n^-; 0^-, n^+) + F(0^+, n^-; n^+, 0^-)]\};$$

$$B_g = \sum_n [e^{ign} F(0^-, n^-; 0^+, n^+) - F(0^-, n^-; n^+, 0^+)] ; E_k = L(k\sigma; k\sigma);$$

$$C_g = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ign} [F(0^+, n^+; 0^+, n^-) - F(0^+, n^+; n^-, 0^+) - \\ - F(0^-, n^+; 0^-, n^-) + F(0^-, n^+; n^-, 0^-)] ;$$

$$D(k\sigma; k\sigma') = N [F(0^-, k\sigma; 0^-, k\sigma') - F(0^-, k\sigma; k\sigma', 0^-)] ;$$

$$C_1(k_1\sigma; k_2\sigma') = \sqrt{N} [F(0^+, k_1\sigma; 0^-, k_2\sigma') - F(0^+, k_1\sigma; k_2\sigma', 0^-)] ;$$

$$C_2(k_1\sigma; k_2\sigma') = \sqrt{N} [F(0^-, k_1\sigma; 0^+, k_2\sigma') - F(0^-, k_1\sigma; k_2\sigma', 0^+)] ;$$

$$G(k_1\sigma; k_2\sigma') = [F(0^+, k_1\sigma; 0^+, k_2\sigma') - F(0^+, k_1\sigma; k_2\sigma', 0^+) - \\ - F(0^-, k_1\sigma; 0^-, k_2\sigma') + F(0^-, k_1\sigma; k_2\sigma', 0^-)] .$$

В предыдущих формулах нами принята сокращенная форма записи, например,

$$F(0^+, k_1\sigma; 0^-, k_2\sigma') = F(0, +\frac{1}{2}; k_1\sigma; 0, -\frac{1}{2}; k_2\sigma') .$$

Для определения собственных значений оператора $\hat{H}_0$ необходимо привести его к диагональному виду. Заметим что первые четыре члена в (8) по внешнему виду точно совпадают с соответствующим выражением в работе (3), и, следовательно, их диагонализация может быть проведена тем же методом, что и в этой работе. Приведение к диагональному виду по спиновому квантовому числу σ остальных двух членов в (8) производится при помощи преобразований вида:

$$\hat{a}_k(\frac{1}{2}) = e^{-i\Phi_k/2} [l_+ \hat{d}_k(\frac{1}{2}) + l_- \hat{d}_k(-\frac{1}{2})], \\ \hat{a}_k(-\frac{1}{2}) = e^{-i\Phi_k/2} [l_+ \hat{d}_k(-\frac{1}{2}) - l_- \hat{d}_k(\frac{1}{2})], \quad (11'')$$

где l_+ и l_- удовлетворяют соотношениям *

$$l_{+,-}^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{D(k^+, k^+) - D(k^-, k^-)}{\sqrt{[D(k^+, k^+) - D(k^-, k^-)]^2 + 4 |D(k^+, k^-)|^2}} \right] . \quad (11')$$

После указанных преобразований для собственных значений оператора (8) получаем следующее выражение (с точностью до несущественной постоянной):

$$E_0 = \sum_g \varepsilon_g N_g + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} N_{k\sigma}, \quad (12)$$

* Здесь мы использовали соотношение $D(k^+, k^-) = D^*(k^-, k^+) = |D(k^+, k^-)| e^{i\Phi_k}$.

где

$$\varepsilon_g = \sqrt{A_g^2 - |B_g|^2} \quad (13)$$

энергия ферромагнона с квази-импульсом g ;

$$\varepsilon_{k\sigma} = E_k + \frac{1}{2} [D(k^+, k^+) + D(k^-, k^-)] + \sigma \frac{[D(k^+, k^+) - D(k^-, k^-)]^2 - 4|D(k^+, k^-)|^2}{V[D(k^+, k^+) - D(k^-, k^-)]^2 + 4|D(k^+, k^-)|^2} \quad (14)$$

энергия электрона проводимости с квази-импульсом k и спиновым квантовым числом σ .

Таким образом, согласно (12) энергия всей системы взаимодействующих «внешних» и «внутренних» электронов независимо от конкретного типа анизотропного взаимодействия между ними состоит из двух ветвей: бозевской (энергия ферромагнонов) и фермиевской (энергия электронов проводимости). Полученный результат дает возможность последовательно квантовомеханически (в рамках принятой модели) с единой точки зрения рассмотреть ряд свойств ферромагнитного металла, обусловленных магнитными силами, например таких, как явление магнитной анизотропии, гальваномагнитные явления и др. Не меньший интерес представляет рассмотрение членов (9) и (10), соответствующих процессам столкновения между квази-частицами. С этими членами связана возможность исследования кинетических и релаксационных явлений в ферромагнетиках, таких как дисперсия магнитной восприимчивости, ширина линии ферромагнитного резонансного поглощения, дополнительное электросопротивление ферромагнетиков при низких температурах и др.

3. Нетрудно провести соответствующее рассмотрение для температур, близких к точке Кюри. В этом случае для d -электронов можно принять приближение энергетического центра тяжести, для чего в (3) следует положить $n_1\sigma_1 = n_1\sigma'_1$, $n_2\sigma_2 = n_2\sigma'_2$ и затем операторы $\hat{a}_{n\sigma}^+ \hat{a}_{n\sigma} = \hat{N}_{n\sigma}$ заменить их средними значениями, равными $(1 - 2\sigma\mu)/2$ (μ — средняя намагниченность на атом). Тогда для энергии, соответствующей d -электронам, получим, как и в обычной теории Френкеля — Гайзенберга, выражение, в котором зависящий от самопроизвольной намагниченности член прямо пропорционален μ^2 , а для энергии электрона проводимости снова найдем выражение вида (14), в котором надо лишь произвести замену σ на $\sigma\mu$. Если перейти затем к приближению эффективной массы для электрона проводимости, то оказывается, что последняя зависит не только от μ и σ , но также и от направления квази-импульса k .

Этот вывод об анизотропии эффективной массы носителей тока дает возможность объяснить квантовую природу анизотропии электросопротивления в ферромагнетиках и, в частности, разницу между продольным и поперечным эффектами изменения электросопротивления в магнитном поле.

В заключение пользуюсь случаем выразить глубокую благодарность члену-корреспонденту АН СССР С. В. Вонсовскому за ряд ценных дискуссий и внимание к работе.

Поступило
17 III 1954

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ С. В. Вонсовский, ЖЭТФ, 16, 981 (1946). ² С. В. Вонсовский, Е. А. Туров, ЖЭТФ, 24, 419 (1953). ³ Т. Hohlstein, Н. Primakoff, Phys. Rev., 58, 1098 (1940).