Доклады Академии наук СССР
1974. Том 219, № 1

УДК 530.161:537.635 *ФИЗИКА*

В. П. КАЛАШНИКОВ

НОВЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В ТЕОРИИ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 10 I 1974)

В теории линейной реакции Кубо ([1]) тензор магнитной восприимчивости $\chi^K_{\mu,\nu}(\omega)$ дается выражением

$$\chi^K_{\mu,\nu}(\omega)=-\frac{1}{i\hbar}\int\limits_{-\infty}^{0}dt\, e^{t(\varepsilon-i\omega)}\langle[M^\mu, M^\nu(t)]\rangle_0, \quad \varepsilon\to+0,$$

$$\langle\ldots\rangle_0=\mathrm{Sp}\,\rho_0\ldots, \qquad M^\nu(t)=e^{itH/\hbar}M^\nu e^{-itH/\hbar}, \tag{1}$$

где ρ_0 — равновесное распределение Гиббса при температуре β^{-1}.

Будем считать гамильтониан системы H инвариантным относительно вращений вокруг оси z и примем, что круговые компоненты оператора магнитного момента $M^\nu=(M^0,\ M^+,\ M^-)$, где $M^0=M^z$, $M^\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}(M^x\pm iM^y)$ удовлетворяют уравнениям движения

$$\dot{M}^\nu=-i\nu\omega_0M^\nu+\lambda R^\nu, \quad \nu=(0,\ \pm), \tag{2}$$

ω_0 — постоянная частота, а λR^ν — некоторый оператор.

Адмиттанс (1) можно записать в виде

$$\chi^K_{\mu,\nu}(\omega)=(M^\mu, M^\nu)+i\omega G_{\mu,\nu}(\omega),$$

$$(M^\mu, M^\nu)=\int\limits_0^\beta d\tau\langle\Delta M^\mu\Delta M^\nu(i\hbar\tau)\rangle_0, \qquad \Delta M^\nu=M^\nu-M^{0\nu}, \tag{3}$$

$$G_{\mu,\nu}(\omega)=\int\limits_{-\infty}^{0}dt\, e^{t(\varepsilon-i\omega)}(M^\mu, M^\nu(t)).$$

где $M^{0\nu}$ — инвариантная часть оператора M^ν по отношению к гамильтониану H.

Теория Кубо соответствует системам, изолированным от термостата. Можно доказать, что для систем в термостате восприимчивость $\chi^T_{\mu,\nu}(\omega)$ дается теми же формулами (3), но с заменой $M^\nu-M^{0\nu}$ на $M^\nu-\langle M^\nu\rangle_0$. Эти (изолированная $\chi^K_{\mu,\nu}(\omega)$ и изотермическая $\chi^T_{\mu,\nu}(\omega)$) восприимчивости отличаются только в точке $\omega=0$, причем разность статических пределов ([1], [2])

$$\chi^K_{\mu,\nu}(0)-\chi^T_{\mu,\nu}(0)=-\{\langle M^{0\mu}M^{0\nu}\rangle_0-\langle M^\mu\rangle_0\langle M^\nu\rangle_0\}. \tag{4}$$

Отсюда $\chi_{+-}{}^K(\omega)=\chi_{+-}{}^T(\omega)$ при всех ω, $\chi_{zz}{}^K(\omega)=\chi_{zz}{}^T(\omega)$ при $\omega\neq0$.

Восприимчивость (1) обычно связывают с двухвременной коммутаторной функцией Грина. При этом

$$\chi^{K}_{\nu,-\nu}(\omega)=-\frac{1}{i\hbar}\frac{\langle[M^{\nu},M^{-\nu}]\rangle_0}{\Sigma_{\nu,-\nu}(\omega)+\varepsilon+i(\nu\omega_0-\omega)}=\frac{i\gamma\nu\langle M^z\rangle_0}{\Sigma_{\nu,-\nu}(\omega)+\varepsilon+i(\nu\omega_0-\omega)},\tag{5}$$

$$\Sigma_{\nu,-\nu}(\omega)=\lambda\int\limits_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}\langle[M^{\nu},R^{-\nu}(t)]\rangle_0\left\{\int\limits_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}\langle[M^{\nu},M^{-\nu}(t)]\rangle_0\right\}^{-1},$$

γ — гиромагнитное отношение. Отметим, что этот метод неприменим для вычисления магнитной восприимчивости в изотермических условиях.

При вычислении Σ с помощью теории возмущений по λ в любом конечном порядке $\Sigma\simeq\Sigma^{(N)}=\sum\limits_{s=1}^{N}\lambda^s\Sigma^{(s)}$ нарушается низкочастотная асимптотика восприимчивости χ^{K}_{+-} $(\omega\to0)$. Действительно,

$$\chi^{K}_{+-}(0)=(M^+,M^-)\neq\frac{i\gamma\langle M^z\rangle_0}{\Sigma^{(N)}_{+-}(0)+\varepsilon+i\omega_0}.\tag{6}$$

Это показывает, что ряд теории возмущений для $\Sigma(\omega)$ содержит вклад от разложения статической части восприимчивости $(M^+,\ M^-)$. Поэтому затухание намагниченности как чисто динамический эффект, вообще говоря, нельзя связывать с массовым оператором Σ. Это обстоятельство отмечалось в работах ([3], [4]), где было показано, что алгебраическая структура выражения (5) не согласуется с феноменологическими формулами для восприимчивости

$$\chi_{zz}(\omega)=\chi_1\frac{\nu_1}{\nu_1-i\omega},\quad \chi_{+-}(\omega)=\chi_2\frac{\nu_2+i\omega_0}{\nu_2+i(\omega_0-\omega)};\tag{7}$$

здесь $\chi_{1,2}$ и $\nu_{1,2}$ — статические восприимчивости и частоты релаксации магнитного момента в продольном и поперечном случае сооответственно. Кроме того, при вычислении $\chi_{zz}(\omega)$ возникает известная трудность, обусловленная тем, что $[M^z,M^z]=0$.

В настоящей работе предлагается новый способ вычисления восприимчивости, который:

а) одинаково пригоден для $\chi^{T}_{\mu,\nu}(\omega)$ и $\chi^{K}_{\mu,\nu}(\omega)$,

б) автоматически обеспечивает правильную асимптотику восприимчивости при $\omega\to0$,

в) согласуется с феноменологическими теориями восприимчивости,

г) дает возможность вычислять $\chi_{zz}(\omega)$ и $\chi_{+-}(\omega)$ с помощью единого простого алгоритма.

Возьмем за основу выражение (3), где адмиттанс разделен на статическую и динамическую части. Отметим, что поглощение энергии, распространение и затухание нормальных колебаний и другие динамические эффекты могут быть связаны только с динамической частью восприимчивости $i\omega G_{\mu,\nu}(\omega)$.

Рассмотрим функции Грина следующего вида:

$$G_{\mu,\nu}(t)=\theta(-t)e^{\varepsilon t}(M^{\mu},M^{\nu}(t))=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\omega t}G_{\mu,\nu}(\omega).\tag{8}$$

Обычным образом можно получить цепочку уравнений

$$\begin{aligned}&(i\omega-i\nu\omega_0-\varepsilon)G=-(M^{\nu},M^{-\nu})+\lambda G_1,\\&(i\omega-i\nu\omega_0-\varepsilon)G_1=-(M^{\nu},\ R^{-\nu})-\lambda G_2,\ldots\end{aligned}\tag{9}$$

$$G=G_{\nu,-\nu}(\omega),\quad G_1=\int\limits_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}(M^{\nu},R^{-\nu}(t)),\quad G_2=\int\limits_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}(R^{\nu},R^{-\nu}(t)).$$

Введя массовый оператор $\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)=\lambda G_1 G^{-1}$, получим формальное решение цепочки (9) в виде

$$G_{\nu,-\nu}(\omega)=\frac{(M^{\nu},M^{-\nu})}{\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)+\varepsilon+i(\nu\omega_0-\omega)},\quad \varepsilon\to+0. \tag{10}$$

Подставляя (10) в (3), будем иметь $(\chi_{\nu,-\nu}(\omega)=\overset{K}{\chi}_{\nu,-\nu}(\omega)$ или $\overset{T}{\chi}_{\nu,-\nu}(\omega))$

$$\begin{aligned}\chi_{zz}(\omega)&=(M^z,M^z)\frac{\Gamma_{zz}(\omega)+\varepsilon}{\Gamma_{zz}(\omega)+\varepsilon-i\omega},\\ \chi_{+-}(\omega)&=(M^+,M^-)\frac{\Gamma_{+-}(\omega)+\varepsilon+i\omega_0}{\Gamma_{+-}(\omega)+\varepsilon+i(\omega_0-\omega)}.\end{aligned} \tag{11}$$

При этом $\operatorname{Im}\chi_{\nu,-\nu}(\omega)=\omega\operatorname{Re}G_{\nu,-\nu}(\omega)$, а средняя мощность Q, поглощаемая системой в переменном магнитном поле $H^{\nu}(t)=\sum\limits_{\omega}H^{\nu}(\omega)e^{i\omega t}$, равна

$$\begin{aligned}Q&=\sum_{\omega,\nu}|H^{\nu}(\omega)|^2\omega^2\operatorname{Re}G_{\nu,-\nu}(\omega)=\\ &=\sum_{\omega,\nu}|H^{\nu}(\omega)|^2\omega^2(M^{\nu},M^{-\nu})\frac{\operatorname{Re}\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)}{[\operatorname{Re}\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)]^2+(\nu\omega_0+\operatorname{Im}\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)-\omega]^2}.\end{aligned} \tag{12}$$

Формулы (11) имеют структуру феноменологических выражений (7), причем для перехода к феноменологии нужно положить $\Gamma_{zz}(\omega)=\nu_1$, $\Gamma_{+-}(\omega)=\nu_2$. При $\omega=0$ имеем

$$\chi_{\mu,\nu}(0)=(M^{\mu},M^{\nu}),\ (M^z,M^z)=\chi_{zz}(0)\equiv\chi_1,\ (M^+,M^-)=\chi_{+-}(0)\equiv\chi_2,$$

т. е. точные значения статических восприимчивостей $\chi_{\mu\nu}{}^{K}(0)$ или $\chi^{\mu T}(0)$ с указанным различием в определении корреляционных функций (B, A) для изолированной системы и системы в термостате. С помощью цепочки уравнений (9) массовый оператор Γ можно представить в одной из следующих форм:

$$\begin{aligned}\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)&=\lambda\frac{G_1}{G}=\lambda\frac{(M^{\nu},R^{-\nu})+\lambda G_2}{(M^{\nu}\,M^{-\nu})-\lambda G_1}=\\ &=\frac{\lambda}{(M^{\nu},M^{-\nu})}\{(M^{\nu},R^{-\nu})+\lambda G_2+\lambda G_1{}^2G^{-1}\}.\end{aligned}$$

При $\lambda\to0$ легко получить разложение Γ в ряд теории возмущений по λ, $\Gamma=\sum\limits_{s=1}^{\infty}\lambda^s\Gamma^{(s)}$, причем с точностью до членов второго порядка

$$\Gamma_{zz}^{(1)}(\omega)=0,\quad \Gamma_{zz}^{(2)}(\omega)=G_{2zz}(M^z,M^z)^{-1}, \tag{13}$$

$$\Gamma_{+-}^{(1)}(\omega)=(M^+,R^-)(M^+,M^-)^{-1},\quad \Gamma_{+-}^{(2)}(\omega)=(\overset{0}{G}_{2+-}+\Gamma_{+-}^{(1)}\overset{0}{G}_{1+-})(M^+,M^-)^{-1},$$

где верхний индекс (0) означает нулевой порядок по λ.

Для затухания во втором порядке имеем

$$\begin{aligned}\nu_{zz}(\omega)&=\operatorname{Re}\Gamma_{zz}(\omega)=\frac{\lambda^2}{(M^z,M^z)^0}\operatorname{Re}\int_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}(R^z,R^z(t))^0,\\ \nu_{+-}(\omega)&=\operatorname{Re}\Gamma_{+-}(\omega)=\frac{\lambda^2}{(M^+,M^-)^0}\operatorname{Re}\int_{-\infty}^{0}dt\,e^{t(\varepsilon-i\omega)}(R^+,R^-(t))^0.\end{aligned} \tag{14}$$

Из формул (11) видно, что значение статистического предела $\chi_{\nu,-\nu}(\omega\to 0)$ сохраняется в любом порядке теории возмущений для Г. Массовые операторы Σ и Γ связаны между собой следующим образом $(\omega\neq 0)$:

$$\Sigma_{\nu,-\nu}(\omega)=\frac{i\nu\omega_0\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)-\lambda^2G_2G^{-1}}{i\nu\omega_0+\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega)}\neq\Gamma_{\nu,-\nu}(\omega). \tag{15}$$

Отсюда $\Sigma^{(1)}=\Gamma^{(1)}$, но $\Sigma^{(2)}\neq\Gamma^{(2)}$, так что сдвиг частоты второго порядка и затухание намагниченности (14), вообще говоря, не совпадают с таковыми для массового оператора Σ. Отметим, что для поперечной восприимчивости формулы (5) и (11) совпадают только в нулевом порядке по λ, причем в обоих случаях $\chi_{+-}{}^0(\omega)=\gamma\langle M^z\rangle_0{}^0(\omega_0-\omega-i\varepsilon)^{-1}$ и $\chi_{+-}{}^0(0)=$ $=\frac{\gamma}{\omega_0}\langle M^z\rangle_0{}^0=(M^+,M^-)$. В этом же пределе из (11) получаем

$$\chi_{zz}{}^0(\omega)=(M^z,M^z)^0\frac{\varepsilon}{\varepsilon-i\omega},$$

причем $\chi_{zz}{}^{Ko}(\omega)\equiv 0$, $\chi_{zz}{}^{To}(\omega)=0$ при $\omega\neq 0$, и $\chi_{zz}{}^{To}(0)=\langle(M_z)^2\rangle_0{}^0-\langle(M^z\rangle_0{}^0)^2$ при $\omega=0$. Если гамильтониан системы не является аксиально симметричным, все матрицы $\chi_{\mu,\nu}$, $G_{\mu,\nu}$, $\Gamma_{\mu,\nu}$ становятся недиагональными, что вносит несущественное усложнение при вычислении функции Грина $G_{\mu,\nu}(\omega)$.

Отметим, что применение функций Грина типа (8) оказывается очень удобным при вычислении многих других кинетических коэффициентов.

Институт физики металлов
Уральского научного центра Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
26 XII 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *R. Kubo*, J. Phys. Soc. Japan, v. 12, 570 (1957). [2] *W. Brenig*, Zs. Phys., B. 206, 212 (1967). [3] *M. B. Walker*, Phys. Rev.. B1, 3690 (1970). [4] *H. J. Spenser, R. Orbach*, Phys. Rev., v. 179, 683 (1969).