

# Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 5 — 1968

УДК 539.2.011

Х. И. ПУШКАРОВ

## СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ И ЛОКАЛЬНЫЕ СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ЛИНЕЙНЫМИ ДЕФЕКТАМИ (ДИСЛОКАЦИЯМИ)

Рассмотрено изменение спектра спиновых волн в кристаллах, содержащих одномерные дефекты (дислокации). Полученные результаты относятся к исследованию локальных и квазилокальных спиновых состояний вблизи дефекта. Найдены условия возникновения локальных и квазилокальных состояний и даны формулы для характеристик спектра в наиболее интересных предельных случаях.

В конденсированных системах, где имеется сильное взаимодействие между частицами, нельзя говорить об уровнях энергии отдельных частиц, а лишь об их совокупности в целом. В таких системах, где имеется трансляционная симметрия, можно ввести представление об элементарных возбуждениях для описания сложного и взаимосвязанного движения частиц. Когда энергия этих возбуждений мала, то можно считать, что они распространяются в виде волн большой (по сравнению с межатомными расстояниями) длины (фононы, экситоны, спиновые волны и др.).

Как известно, дефекты и неоднородности кристаллической решетки весьма сильно влияют на физические свойства кристаллов. Типичными дефектами и неоднородностями являются примеси, вакансии, дислокации, дефекты упаковки и нарушения упорядоченности. Возмущения, вызванные такими дефектами, характеризуются не малостью их в смысле обычной теории возмущений, а своим локальным характером. Такие возмущения впервые были рассмотрены И. М. Лифшицем [1—6] и применены к решению ряда задач по исследованию спектра частот колебаний кристалла, содержащего нульмерные (примеси, вакансии), одномерные (дислокации) и двумерные (плоские) дефекты [7—13].

Аналогичные расчеты были проделаны и для других возбуждений кристалла. Например, Костер и Слэтер [14] рассмотрели влияние примеси на спектр электронов проводимости в металлах. Вольфрам и Коллэвей [15] рассмотрели спектр спиновых волн в ферромагнитном кристалле с примесным атомом. Изюмов и Медведев [16] дали общее решение о колебаниях спиновой системы ферромагнитного кристалла кубической структуры с примесью методом одночастичных функций Грина. Кроме того, они решили задачу о неупругом магнитном рассеянии медленных нейтронов в таком кристалле и показали, что в энерге-

тическом распределении рассеянных нейтронов имеются пики, соответствующие определенным типам локальных магнитных колебаний.

В данной работе рассматриваются локальные колебания в ферромагнитном кристалле простой кубической структуры в случае наличия линейной дислокации. Так как исследование локальных магнитных колебаний затруднительно из-за большого числа параметров, здесь использовалась максимально упрощенная модель, обеспечивающая, однако, достаточную общность и разумность.

### Выбор модели

Рассматриваемая модель является ферромагнитным кристаллом простой кубической структуры с дефектом в виде линейной дислокации, направленной вдоль оси  $z$ . Для простоты такую дислокацию можем себе представить как одинаковое смещение всех ближайших соседей в плоскости  $z_{\text{пост}}$  относительно узла, лежащего на оси  $z$ . Дислокацию будем считать неподвижной. Для общности будем предполагать, что атомы, лежащие на оси  $z$ , имеют спины, различающиеся от спинов остальных атомов. Спиновой гамильтониан такой системы в модели Гайзенберга можем записать в виде

$$\begin{aligned}
 H = \mu_0 \mathcal{H} & \left[ g_0 \sum_j S_j^z - g \sum_{1_z} S_{1_z}^z + g' \sum_{1_z} S_{1_z}^{\prime z} \right] - J \sum_j \sum_{\delta} \vec{S}_j \vec{S}_{j+\delta} + \\
 & + 2J \sum_{1_z} \sum_{\delta_{\xi}} \vec{S}_{1_z} \vec{S}_{1_z+\delta_{\xi}} + J \sum_{1_z} \sum_{\delta_z} \vec{S}_{1_z} \vec{S}_{1_z+\delta_z} - 2J' \sum_{1_z} \sum_{\delta_{\xi}} \vec{S}'_{1_z} \vec{S}_{1_z+\delta_{\xi}} - \\
 & - J'' \sum_{1_z} \sum_{\delta_z} \vec{S}'_{1_z} \vec{S}'_{1_z+\delta_z}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где  $j$  пробегает по всем узлам решетки (число их  $N^3$ ),  $\delta$  пробегает по узлам, ближайшим к данному,  $1_z$  пробегает по узлам, лежащим на оси  $z$ ,  $\delta_{\xi}$  пробегает по узлам, ближайшим к данному  $1_z$  в плоскости,  $\delta_z$  пробегает по узлам, ближайшим к данному  $1_z$ , но лежащим на оси  $z$ ,  $g_0$ ,  $g$  и  $g'$  — соответствующие  $g$ -факторы,  $\vec{S}_j$  — оператор спина обычного узла,  $\vec{S}'_{1_z}$  — оператор спина узла, лежащего на оси  $z$ .

Первый член в [1] представляет энергию спинов во внешнем магнитном поле, направленном против оси  $z$ ; второй член — это обменное взаимодействие в идеальном кристалле без дислокации. Второй, третий и четвертый члены дают обменное взаимодействие в кристалле, в котором вообще отсутствуют магнитные атомы на оси  $z$ . Предпоследний и последний члены дают обменную энергию магнитных атомов дислокации со всеми другими ближайшими соседями, при этом последний член учитывает взаимодействие с ближайшими соседями в плоскости (обменный интеграл равен  $J'$ ), а последний — с ближайшими соседями, находящимися на оси  $z$  (обменный интеграл равен  $J''$ ).

Обменные интегралы  $J$ ,  $J'$  и  $J''$  зависят только от относительных расстояний между узлами. Ввиду того что они очень быстро убывают с увеличением расстояния, их можно учитывать только для ближайших соседей и считать постоянными<sup>1</sup>. Явный вид  $J$ ,  $J'$  и  $J''$  через атомные величины не определяется, и они входят лишь как некоторые феноме-

<sup>1</sup> По теории возмущения это соответствует первому приближению (не учитывается взаимодействие со следующими координационными сферами).

нологические величины. Мы будем считать их положительными, что соответствует параллельному упорядочению всех спинов в основном состоянии. Хотя  $J''$  мало отличается от  $J$ , его надо учитывать, поскольку при  $J''=J$  возмущение на длинных волнах исчезает.

Используемая модель—система спинов, расположенных в узлах решетки, годится скорее для описания ферромагнитных диэлектриков, чем металлов, из-за пренебрежения взаимодействия электронов незаполненных оболочек с электронами проводимости.

Считая  $S$  большой величиной, введем операторы  $a_j$  и  $a_j^\dagger$  с помощью соотношений

$$\begin{aligned} S_j^+ &= \sqrt{2S}a_j, \quad S_j^- = \sqrt{2S}a_j^\dagger, \quad S_j^z = S - a_j^\dagger a_j, \\ S_{1z}^+ &= \sqrt{2S'}a_{1z}, \quad S_{1z}^- = \sqrt{2S'}a_{1z}^\dagger, \quad S_{1z}^z = S' - a_{1z}^\dagger a_{1z}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y \text{ и } [S_j^+ S_j^-]_- = S_j^z. \text{ Очевидно, } a_j^* a_g^\dagger - a_g^\dagger a_j = \delta_{jg}.$$

Тогда гамильтониан (1) с учетом (2) содержит члены второго и четвертого порядка по магнитным операторам.

### Функция Грина и длинноволновые колебания

Введем в рассмотрение запаздывающую одночастичную функцию Грина, определяемую соотношением

$$G_{g,k}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [a_g(t), a_k^\dagger(t')] \rangle,$$

где  $a_g(t)$  — оператор  $a_g$  в гайзенберговском представлении с гамильтонианом (1) или (2), а  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по гиббсовскому ансамблю с тем же гамильтонианом, при температуре  $T$ .

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1, & \text{если } t > t' \\ 0, & \text{если } t < t'. \end{cases}$$

Применив обычную схему построения функции Грина, в энергетическом представлении имеем

$$\begin{aligned} (E + \mu\mathcal{H}) G_{g,k} &= \delta_{g,k} + 2JS \sum_{\delta} (G_{g,k} - G_{g+\delta,k}) - \\ &- 2JS \sum_{\delta_{\xi}} (G_{g_z,k} - G_{g_z+\delta_{\xi}k}) (\delta_{g',0} - \delta_{g',\delta_{\xi}}) + \\ &+ 2J' \sqrt{S} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} G_{g_z,k} - \sqrt{S'} G_{g_z+\delta_{\xi},k}) \delta_{g',0} - \\ &- 2J' \sqrt{S'} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} G_{g_z,k} - \sqrt{S'} G_{g_z+\delta_{\xi},k}) \delta_{g',\delta_{\xi}} + \\ &+ 2(J''S' - JS) \sum_{\delta_z} (G_{g_z,k} - G_{g_z+\delta_z,k}) \delta_{g',0}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь мы получившуюся систему зацепляющихся уравнений оборвали, выражая вторые функции Грина через первые, и воспользовавшись тем, что при достаточно низких температурах число неупорядоченных спинов

очень мало. В дальнейшем  $G_{g,k}$  будет означать  $G_{g,k}(E)$ . Если  $S = S'$  и  $J = J' = J''$ , то (3) переходит в

$$(E + \mu\mathcal{H}) G_{g,k}^0 = \delta_{g,k} + 2JS \sum_{\delta} (G_{g,k}^0 - G_{g+\delta,k}^0),$$

т. е. в уравнение для функции Грина идеального кристалла, с решением

$$G_{g,k}^0 = \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{f}} G^0(\vec{f}) e^{i\vec{f}(\vec{g}-\vec{k})} = \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{f}} \frac{e^{i\vec{f}(\vec{g}-\vec{k})}}{E + \mu\mathcal{H} - E_f},$$

где

$$E_f = 2JS \left( q - \sum_{\delta} e^{i\vec{f}\delta} \right) = 4JS [3 - \cos f_x - \cos f_y - \cos f_z],$$

( $\delta$  пробегает по узлам (1, 0, 0), (-1, 0, 0), (0, -1, 0) и (0, 1, 0)), а  $E_f$  — энергия спиновой волны с волновым вектором  $\vec{f}$  в идеальном кристалле.

Когда спины и обменные интегралы различные, ввиду трансляционной симметрии вдоль оси  $z$ , функцию Грина можно представить в виде

$$G_{g,k} = G_{g',k'}(f_z) e^{if_z(g_z - k_z)}$$

и записать уравнение (3) следующим образом:

$$\begin{aligned} (E + \mu\mathcal{H}) G_{g',k'} = & \delta_{g',k'} + 2JS \sum_{\delta} (G_{g',k'} - G_{g'+\delta_{\mathbf{z}},k'}) e^{i\vec{f}\delta_{\mathbf{z}}} - \\ & - 2JS \sum_{\delta_{\mathbf{z}}} (G_{0,k'} - G_{\delta_{\mathbf{z}},k'}) (\delta_{g',0} - \delta_{g',\delta_{\mathbf{z}}}) + \\ & + 2J' \sqrt{S} \sum_{\delta_{\mathbf{z}}} (\sqrt{S} G_{0,k'} - \sqrt{S'} G_{\delta_{\mathbf{z}},k'}) \delta_{g',0} - \\ & - 2J' \sqrt{S'} \sum_{\delta_{\mathbf{z}}} (\sqrt{S} G_{0,k'} - \sqrt{S'} G_{\delta_{\mathbf{z}},k'}) \delta_{g',\delta_{\mathbf{z}}} + \\ & + 2(J''S' - JS) \sum_{\delta_z} (G_{0,k'} - G_{0,k'} e^{i\vec{f}\delta_z}) \delta_{g',0}, \delta_{g',\delta_{\mathbf{z}}} \vec{g} = (\vec{g}', g_z). \end{aligned} \quad (4)$$

Тем самым задача свелась к двумерной (плоской).

Опять при  $S = S'$  и  $J = J' = J''$  решение имеет вид

$$G_{g',k'}^0 = \frac{1}{N^3} \sum_{\vec{\kappa}} \frac{e^{i\vec{\kappa}(\vec{g}'-\vec{k}')} }{E + \mu\mathcal{H} - E_{\vec{f}}}, \quad \vec{\kappa} = (f_x, f_y), \quad \vec{f} = (\vec{\kappa}, f_z).$$

Решение задачи при наличии возмущения будем искать в виде разложения по невозмущенным функциям Грина  $G_{g',k'}^0$ :

$$G_{g',k'} = \sum_{p'} A_{g',p'} G_{p',k'}^0. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4) и учитывая уравнение, которому удовлетворяет  $G_{p',k'}^0$ , для коэффициентов  $A_{g',k'}$  получаем выражение

$$A_{g',k'} = \delta_{g',k} - 2JS \sum_{p'} \sum_{\delta_{\mathbf{z}}} (A_{0p'} - A\delta\delta_{\mathbf{z},p'}) (\delta_{g',0} - \delta_{g',\delta_{\mathbf{z}}}) G_{p',k'}^0 +$$

$$\begin{aligned}
& + 2J' \sqrt{S} \sum_{p'} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} A_{0p'} - \sqrt{S'} A_{\delta_{\xi} p'}) \delta_{g'0} G_{p', k'}^0 - \\
& - J' \sqrt{S'} \sum_{p'} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} A_{0p} - \sqrt{S'} A_{\delta_{\xi} p'}) \delta_{g' \delta_{\xi}} G_{p', k'}^0 + \\
& + 2 (J'' S' - JS) \sum_{p'} \sum_{\delta_z} (1 - e^{if_z \delta_z}) A_{0p'} \delta_{g'0} G_{p', k'}^0,
\end{aligned}$$

откуда имеем

$$\sum_{p'} (G^{0-1})_{g', p'} A_{p', k'} = (G^{0-1})_{g', k'} + \sum_{p'} V_{g', p'} A_{p', k'}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned}
V_{g', p'} = & - 2JS \sum_{\delta_{\xi}} (\delta_{p'0} \delta_{g'0} - \delta_{p' \delta_{\xi}} \delta_{g'0} - \delta_{p'0} \delta_{g' \delta_{\xi}} + \delta_{p' \delta_{\xi}} \delta_{g' \delta_{\xi}}) + \\
& + 2 (J'' S' - JS) \delta_{p'0} \delta_{g'0} \sum_{\delta_z} (1 - e^{(if_z \delta_z)}) + \\
& + 2J' \sqrt{S} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} \delta_{p'0} \delta_{g'0} - \sqrt{S'} \delta_{p' \delta_{\xi}} \delta_{g'0}) - \\
& - 2J' \sqrt{S'} \sum_{\delta_{\xi}} (\sqrt{S} \delta_{p'0} \delta_{g' \delta_{\xi}} - \sqrt{S'} \delta_{p' \delta_{\xi}} \delta_{g' \delta_{\xi}}).
\end{aligned}$$

Из (6) видно, что функция Грина возмущенного кристалла подчиняется уравнению Дайсона, в котором собственно энергетическая часть  $V_{g', p'}$  описывает взаимодействие с ближайшими соседями.

Из теории известно, что полюсы функции Грина дают спектр элементарных возбуждений. Для нахождения полюсов запишем (5) в матричном виде так:

$$\begin{aligned}
G_{g', k'} & = \sum_{p'} \left( \frac{1}{I - G^0 V} \right)_{g' p'} G_{p', k'}^0, \quad (7) \\
\left( \frac{1}{I - G^0 V} \right)_{g' p'} & = \frac{B_{p' g'}}{\Delta} = \frac{(-1)^{g'+p'} \text{Minor} \{ (I - G^0 V) \}_{p' g'}}{\Delta}, \\
\Delta & = \det |I - G^0 V|. \quad (8)
\end{aligned}$$

Видно, что кроме полюсов функции Грина  $G^0$  появляются еще полюсы из-за равенства нулю детерминанта  $\Delta$ . Условие  $\Delta=0$  определяет локальные колебания вблизи дислокации. Это уравнение, однако, имеет очень сложный вид ( $\Delta$  — детерминант 5-го порядка) и в таком виде неудобно для исследования. Однако, используя симметрию задачи, на основе теории групп можно найти унитарную матрицу

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & -1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/\sqrt{2} & -1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & -1/\sqrt{2} & -1/2 \end{bmatrix},$$

с помощью которой детерминант  $\Delta$  можно привести к квазидиагональному виду, благодаря чему уравнение принимает вид  $\Delta_1 \Delta_2^2 \Delta_3 = 0$ , где

$$\Delta_1 \equiv \begin{vmatrix} 1 - 8(J' - J)Sa + 8(J' \sqrt{SS'} - JS)b - 2\alpha(J''S' - JS)a \\ 4[(J' \sqrt{SS'} - JS)(a + 2c + d) - 4(J' - J)Sb - \alpha(J''S' - JS)b] \\ 4[(J' \sqrt{SS'} - JS)a - (J'S' - JS)b] \\ 1 + 8(J' \sqrt{SS'} - JS)b - 2(J'S' - JS)(a + 2c + d) \end{vmatrix} = 0, \quad (9)$$

$$\Delta_2 \equiv 1 - 2(J'S' - JS)(a - c) = 0, \quad (10)$$

$$\Delta_3 \equiv 1 - 2(J'S' - JS)(a - 2c + d) = 0. \quad (11)$$

Для краткости положим:

$$a = G_{00}^0 = G_{11}^0 = G_{22}^0 = G_{33}^0 = G_{44}^0 = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{E + \mu\mathcal{H} - E_f} =$$

$$= -\frac{1}{4JS} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{df_x df_y}{\eta - (\cos f_x + \cos f_y)},$$

$$b = G_{01}^0 = G_{10}^0 = G_{02}^0 = G_{20}^0 = G_{03}^0 = G_{30}^0 = G_{04}^0 = G_{40}^0 =$$

$$= -\frac{1}{4JS} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{e^{-if_x} df_x df_y}{\eta - (\cos f_x + \cos f_y)},$$

$$c = G_{12}^0 = G_{21}^0 = G_{34}^0 = G_{43}^0 = G_{14}^0 = G_{41}^0 = G_{23}^0 = G_{32}^0 =$$

$$= -\frac{1}{4JS} \iint \frac{e^{-i(f_x + f_y)} df_x df_y}{\eta - (\cos f_x + \cos f_y)},$$

$$d = G_{13}^0 = G_{31}^0 = G_{42}^0 = G_{24}^0 =$$

$$= -\frac{1}{4JS} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{e^{-2if_x} df_x df_y}{\eta - (\cos f_x + \cos f_z)},$$

$$\alpha = \sum_{\delta_z} (1 - e^{if_z \delta_z}) = 2(1 - \cos f_z),$$

$$\eta = 3 - \frac{E + \mu\mathcal{H}}{4JS} - \cos f_z.$$

Равенство выписанных элементов функции Грина  $G_{g', k'}^0$  можно показать, заменяя в соответствующих им интегралах  $f_x$  и  $f_y$  на  $-f_x$  и  $-f_y$ . При такой замене  $G_{g', k'}^0$  переходит в  $G_{g', k'}^{0*} = G_{k', g'}^0$ . Отсюда все  $G_{g', k'}^0$  вещественны.

В случае бесконечно длинных волн ( $f = 0$ ) возмущение на длинных волнах в уравнениях (10) и (11) исчезает. Если  $S = S'$ , то так как вклад в интегралах  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  дают только малые  $f$ , уравнение (9) можно пред-

ставить в виде

$$1 = \frac{(J - J'') f_z^2}{J} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{df_x df_y}{\eta' + f_x^2 + f_y^2}, \quad (12)$$

где

$$\eta' = -\frac{E + \mu\mathcal{H}}{2JS} + f_z^2.$$

Решение (12) имеет вид

$$E' - f_z^2 = -f_0^2 e^{-\frac{8\pi J}{(J - J'') f_z^2}}, \quad E' = \frac{E + \mu\mathcal{H}}{2JS} \quad (13)$$

( $f_0$  — некоторая константа, порядка величины предельного волнового вектора длинноволновых колебаний).

Как на это указывали И. М. Лифшиц и А. М. Косевич [8], закон дисперсии (13) является характерным для двухмерных задач. Сравнивая с результатами, полученными ими для фононов, видим, что имеется экспоненциальная зависимость от интенсивности возмущения и отсутствие критического значения этой интенсивности, начиная с которого происходит отщепление частоты локальных колебаний. Для существования последних, как и для фононов, требуется определенный знак возмущения и при нужном знаке частота отделена конечной щелью от начала спектра объемных колебаний кристалла.

Если  $S \neq S'$ , то решением уравнения  $\Delta_1 = 0$  служит

$$E' - f_z^2 = -f_0^2 \exp \left\{ -\frac{8\pi J' (\sqrt{SS'} - S) + (JS - J''S') f_z^2}{J' (\sqrt{SS'} - S) [4J' (\sqrt{SS'} - S) + (JS - J''S') f_z^2]} \pm \frac{\sqrt{32J'^2 (\sqrt{SS'} - S) + (JS - J''S')^2 f_z^2 + 8 (JS - J''S') (\sqrt{SS'} - S) f_z^2}}{J' (\sqrt{SS'} - S) [4J' (\sqrt{SS'} - S) + (JS - J''S') f_z^2]} \right\}. \quad (14)$$

При  $S = S'$  получается формула (13). Из (14) следует, что если  $S \neq S'$ , то длинноволновые колебания остаются и в случае, когда  $J'' = J$ . Если, однако, как отмечалось раньше,  $S = S'$  и  $J'' = J$ , то возмущение на них исчезает.

### Плотность состояний и колебания при $f \neq 0$

Для нахождения плотности состояний  $g(E)$  спиновой системы ферромагнитного кристалла с дислокацией воспользуемся формулой

$$g(E) = \frac{1}{\pi N^2} \text{Im Sp } G_{p', k'}(E - is), \quad (s = 0^+). \quad (15)$$

Из (6) и (7) следует, что функции Грина можно представить в виде

$$G = G^0 + G^0 V \frac{1}{I - G^0 V} G^0.$$

Используя также (8) и (15),  $g(E)$  запишем в виде

$$g(E) = \frac{1}{\pi N^2} \text{Im Sp } G(E);$$

$$\frac{1}{\pi N^2} \sum_{g'} G_{g'g'} = \frac{1}{\pi} G_0^0 + \frac{1}{\pi N^2 \Delta} \sum_{g's',k'l'} G_{g's'}^0 V_{s'k'} G_{l'g'}^0 B_{k'l'}$$

где  $G_0^0 \equiv G_{g'g'}^0$  не зависит от  $g'$ . Отсюда, с помощью соотношений

$$\frac{d}{dE} \sum_{g'} G_{g's'}^0 G_{l'g'}^0 = - \frac{d}{dE} G_{l's'}^0,$$

$$\Delta = \sum_{k'} (I - G^0 V)_{l',k'} B_{l',k'}$$

$$\frac{d\Delta}{dE} = - \sum_{l',s',k'} V_{s',k'} B_{l',k'} \frac{d}{dE} G_{l's'}^0$$

получаем

$$g(E) = g_0(E) + \frac{1}{\pi N^2} \text{Im} \frac{\Delta'_E(E - is)}{\Delta(E - is)}, \quad \Delta'_E \equiv \frac{d\Delta}{dE},$$

где  $g_0(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_0^0$  — плотность состояний «идеального» кристалла. В нашем случае  $\Delta = \prod_i \Delta_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ), где  $\Delta_i$  дается (9), (10), (11). Итак:

$$\frac{\Delta'_E}{\Delta} = \frac{\Delta'_1}{\Delta_1} + 2 \frac{\Delta'_2}{\Delta_2} + \frac{\Delta'_3}{\Delta_3},$$

т. е.

$$g(E) = g_0(E) + \frac{1}{\pi N^2} \text{Im} \frac{\Delta'_1}{\Delta_1} + \frac{2}{\pi N^2} \text{Im} \frac{\Delta'_2}{\Delta_2} + \frac{1}{\pi N^2} \text{Im} \frac{\Delta'_3}{\Delta_3},$$

которое указывает на то, что различные ветви колебаний вносят аддитивный вклад в плотность состояний с весами, соответствующими степени вырождения локального уровня.

Представим  $\Delta_i$  в виде

$$\Delta_i(E - is) \equiv \Delta_i(\zeta - is) = \text{Re} \Delta_i + \text{Im} \Delta_i, \\ \zeta = E - 4JS(1 - \cos f_2), \quad i = 1, 2, 3.$$

Тогда изменение плотности состояний за счет наличия дислокации

$$\Delta g_i(\zeta) \equiv \frac{1}{\pi N^2} \text{Im} \frac{\Delta'_i}{\Delta_i^2} = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Re} \Delta_i \text{Im} \Delta'_i - \text{Re} \Delta'_i \text{Im} \Delta_i}{[\text{Re} \Delta_i]^2 + [\text{Im} \Delta_i]^2}.$$

Отсюда, если при некотором  $\zeta_i^0$

$$\text{Re} \Delta_i(\zeta_i^0) = 0 \tag{16}$$

и, кроме того,  $\text{Im} \Delta_i(\zeta_i^0)$  мало, то  $\Delta g_i$  имеет резкий максимум. Для нахождения вида  $g(E)$  вблизи  $\zeta_i^0$  разложим  $\text{Re} \Delta_i(\zeta)$  в ряд вблизи  $\zeta_i^0$

$$\text{Re} \Delta_i(\zeta) = \text{Re} \Delta'_i(\zeta_i^0) (E - \zeta_i^0) + \dots$$

Положив  $\Gamma_i = -\text{Im} \Delta_i(\zeta_i^0) / \text{Re} \Delta'_i(\zeta_i^0)$ , то когда  $\zeta$  близко к  $\zeta_i^0$ , находим, что изменение плотности состояний дается формулой Лоренца

$$\Delta g_i = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_i}{(\zeta - \zeta_i^0) + \Gamma_i^2}.$$



Если решение уравнения (16) находится вне интервала, где обращается в нуль выражение  $\epsilon - 4JS(2 - \cos f_x - \cos f_y)$ , то мнимая часть  $\Delta_i$  исчезает и  $\Gamma_i = 0$ . В этом случае  $\Delta g_i = \delta(\epsilon - \epsilon_i^0)$ . Однако  $\epsilon$  зависит от  $\cos f_z$ , и таким образом наличие дислокации приводит к появлению целой ветви колебаний с непрерывным спектром частот. Если  $\epsilon_i^0$  такое, что  $\Gamma_i \neq 0$ , то в зависимости от того, будет ли  $\Gamma_i > 0$  или  $\Gamma_i < 0$ , можем говорить о «всплеске» или «провале» в функции  $\Delta g_i$  (при наличии примеси см. [17]). При  $\Gamma_i \neq 0$  появляются квазилокальные колебания.

Рассмотрим уравнение  $\Delta_2 = 0$ . Отделяя вещественную и мнимую часть  $\Delta_2(E - is)$ , получим

$$\Delta_2 = 1 + \frac{J'\sigma - J}{2J} \int_0^\infty \sin \eta t [J_0^2(t) + J_2^2(t)] dt + \\ + i \frac{J'\sigma - J}{2J} \int_0^\infty \cos \eta t [J_0^2(t) + J_2^2(t)] dt \quad (17)$$

( $J_n(t)$  — функции Бесселя действительного аргумента и целочисленного индекса). Интегралы, входящие в (17), после некоторых преобразований, могут быть найдены в справочниках (см., например, [18]). Они выражаются с помощью функций Лежандра полуцелого индекса. Решение [17] в интервале  $|\eta| < 2$  имеет вид

$$\frac{2J}{J'\sigma - J} = \begin{cases} P_{1/2}\left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right) - \left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right)P_{-1/2}\left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right) - \eta, & 0 < \eta < 2 \\ \left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right)P_{-1/2}\left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right) - P_{1/2}\left(1 - \frac{\eta^2}{2}\right) + \eta, & -2 < \eta < 0 \end{cases} \\ \sigma = S'/S.$$

На рис. 1 изображены правые части (кривая 2) и  $-I_m \Delta_2$  (кривая 2') ( $\epsilon = 3 - \eta$ ).

Так как  $J$  и  $J'$  положительны, то область  $-2 < \frac{2J}{J'\sigma - J}$  является воспрещенной. Это означает, что в рассматриваемом случае вблизи нижнего края спин-волновой полосы идеального кристалла не существует виртуальных уровней. При сравнительно больших  $J'\sigma$  ( $J'\sigma > 3, 3J$ ) тоже не возникают колебания. Квазилокальные колебания появляются всегда, когда выполняется соотношение  $3, 3J < J'\sigma < 6, 3J$ . Если  $J'\sigma > 6, 3J$ , то всегда за счет  $\cos f_z$  имеются «выпавшие» из непрерывного спектра локальные колебания. При этом чем больше  $J'\sigma$ , тем больше спектр частот этих колебаний.

Рассмотрим случай  $\eta > 2$ . При больших  $\eta$  легко получить зависимость частоты колебаний от  $J$  и  $J'$  в аналитическом виде. Действительно, как показали Костер и Слэтер [14], при вычислении входящих в  $\Delta_2$  интегралов можно воспользоваться формулой

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \iint \frac{e^{-i(nf_x + mf_y)}}{\eta - (\cos f_x + \cos f_y)} df_x df_y = \int_0^\infty e^{-\eta t} I_n(t) dt,$$

что дает

$$\frac{2J}{J'\sigma - J} = \int_0^\infty e^{-\eta t} [I_2(t) I_0(t) - I_0^2(t)] dt \quad (18)$$

( $I_n(t)$  — функции Бесселя 1-го рода чисто мнимого аргумента). Когда  $\eta$  сравнительно велико, вклад в интегралы будут давать малые  $t$ . Тогда заменяя  $I_n(t)$  ее асимптотикой при малых значениях аргумента

$$I_n(t) \rightarrow \frac{(t/2)^n}{\Gamma(n+1)},$$

находим

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta t} I_0^2(t) dt = \frac{1}{\eta} + \frac{1}{\eta^3}.$$

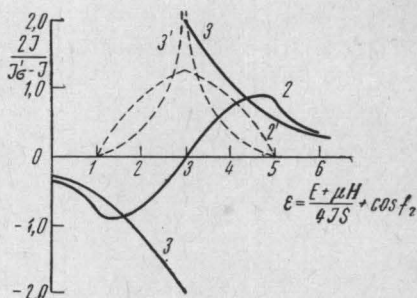
Отбрасывая второй член ввиду его малости и учитывая, что первый интеграл в (18) порядка  $\eta^{-3}$ , находим, что

$$\eta = \frac{J'\sigma - J}{2J}. \quad (19)$$

При  $\eta > 2$ , однако, должно выполняться соотношение  $1 - \frac{J'}{J}\sigma > 4$ . Об-

ласть таких значений  $J$  и  $J'$  является запрещенной, т. е. вблизи нижней границы  $\epsilon = 0$  нет локальных колебаний ( $\epsilon = 3 - \eta$ ). Ввиду антисимметричности действительной части уравнения (18) относительно  $\eta = 0$  ( $\epsilon = 3$ ), при  $-2 < \eta < 0$  получаем опять (19). Если учтем и более высокие степени  $1/\eta$ , получим кривую, данную на рис. 1.

Аналогично, отделяя вещественную и мнимую часть  $\Delta_3(E - is)$ , имеем



$$\Delta_3 = 1 + \frac{J'\sigma - J}{2J_i} \left[ 2P_{1/2} \left( 1 - \frac{\eta^2}{2} \right) + \frac{\eta^2}{2} P_{-1/2} \left( 1 - \frac{\eta^2}{2} \right) - \eta \right] - i \frac{J'\sigma - J}{2J} \left[ \left( 1 - \frac{\eta^2}{2} \right) P_{-1/2} \left( \frac{\eta^2}{2} - 1 \right) - 2P_{1/2} \left( \frac{\eta^2}{2} - 1 \right) \right].$$

На рисунке 1 показан вид  $-Re\Delta_3 + 1$  (кривая 3) и  $-Im\Delta_3$  (кривая 3').

Уравнение  $\Delta_3 = 0$  дает колебания другого типа<sup>1</sup>. В этом случае локальные и квазилокальные колебания появляются, когда  $0 < \frac{2J}{J'\sigma - J} < 2$ .

И здесь за счет наличия  $\cos f_z$  всегда имеются колебания, частоты которых лежат вне спин-волновой полосы идеального кристалла. При увеличении  $\frac{J'}{J}\sigma$  число частот тоже увеличивается.

Внутри спин-волновой полосы идеального кристалла возникают квазилокальные колебания, которые с увеличением  $\frac{2J}{J'\sigma - J}$  затухают. Как и в рассмотренном выше случае  $\Delta_2 = 0$ , вблизи нижней границы спектра колебаний не возникает. Длинноволновые колебания (вблизи нижней границы спектра) содержатся только в уравнении  $\Delta_1 = 0$ .

Автор выражает благодарность чл.-корр. И. М. Лифшицу за предложенную тему и ценные указания во время работы.

<sup>1</sup> Оно соответствует неприводимому представлению  $B_{1g}$  группы,  $c_{4v} \times c_i$ .  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  соответствовали представлениям  $A_{1g}$  и  $E_u$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Лифшиц И. М. ДАН СССР, 48, 83, 1945.
2. Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 17, 1017, 1947.
3. Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 17, 1076, 1947.
4. Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 18, 293, 1948.
5. Лифшиц И. М. «Успехи матем. наук», 7, 170, 1952.
6. Lifšic I. M. Nuovo Gim. 3 Suppl., 4, 716, 1956.
7. Лифшиц И. М., Степанова Г. ЖЭТФ, 30, 938, 1956.
8. Лифшиц И. М., Косевич А. М. Динамика кристаллической решетки с дефектами. Харьков, Физико-теоретич. изд-во АН УССР, 1965.
9. Лифшиц И. М. «Успехи физич. наук», 83, 617, 1964.
10. Коган Ю., Иосилевский Я. ЖЭТФ, 42, 259, 1962.
11. Коган Ю., Иосилевский Я. ЖЭТФ, 44, 1375, 1963.
12. Maradudin A. A., Mazur P., Montroll E. W., Weiss G. Rev. Mod. Phys., 30, 175, 1958.
13. Montroll E. W., Potts R. B. Phys. Rev., 100, 525, 1955.
14. Koster G. P., Slater J. S. Phys. Rev., 96, 1208, 1954.
15. Wolfram T., Callaway J. Phys. Rev., 130, 2207, 1963.
16. Изюмов Ю. А., Медведев М. А. ЖЭТФ, 48, 574, 1965.
17. Изюмов Ю. А., Медведев М. А. ЖЭТФ, 49, 1887, 1965.
18. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1963.

Поступила в редакцию  
1.11 1967 г.

Кафедра  
квантовой теории