

Х. И. ПУШКАРОВ

УДК 539.2.011

## СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ И ЛОКАЛЬНЫЕ СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ДВУМЕРНЫМИ (ПЛОСКИМИ) ДЕФЕКТАМИ

Исследованы локальные и квазилокальные спиновые колебания вблизи дефекта. Найдены условия возникновения этих колебаний и приведены формулы для наиболее интересных предельных случаев.

В настоящей работе рассматриваются локальные и квазилокальные колебания спинов в ферромагнитном кристалле простой кубической структуры в случае наличия двумерного дефекта. Такой дефект возникает, когда периодическая структура кристаллической решетки нарушается вблизи некоторой поверхности и характер искажений одинаков вдоль указанной поверхности. Мы будем предполагать, что такой дефект находится в плоскости  $z=0$  и выражается в том, что из своего положения равновесия сместились только ближайшие атомы, находящиеся на соседних к данной ( $z=0$ ) плоскостях. Для общности предположим еще, что в плоскости дефекта находятся атомы со спинами, отличающимися от спинов остальных атомов кристалла.

Спиновый гамильтониан системы в модели Гайзенберга запишем в виде

$$\begin{aligned}
 H = \mu_0 \mathcal{H} \left[ g_0 \sum_j S_j^z - g \sum_i S_i^z + g' \sum_i S_i'^z \right] - J \sum_j \sum_{\delta} \vec{S}_j \vec{S}_{j+\delta} + \\
 + 2J \sum_i \sum_{\delta'} \vec{S}_i \vec{S}_{i+\delta'} + J \sum_i \sum_{\delta'} \vec{S}_i S_{i+\delta'} - 2J' \sum_i \sum_{\delta'} \vec{S}_i' S_{i+\delta'} - J'' \sum_i \sum_{\delta'} \vec{S}_i' \vec{S}_{i+\delta'}'.
 \end{aligned}$$

Здесь  $j$  пробегает по узлам решетки,  $\delta$  пробегает по узлам, ближайшим к данному,  $i$  пробегает по узлам, лежащим в плоскости  $z=0$ ,  $\delta'$  и  $\delta''$  учитывают соответственно ближайших соседей, лежащих в плоскости дефекта и лежащих сверху и снизу от нее,  $\vec{S}_j$  — оператор спина обычного узла, а  $\vec{S}_i$  — оператор спина узла, лежащего в плоскости дефекта.

Так как кристалл будем считать ферромагнитным, то обменные интегралы  $J$ ,  $J'$  и  $J''$  положительные. Мы не можем ограничиваться только  $J$  и  $J'$ , так как при  $J'' = J$  возмущение на длинных волнах исчезает. Считая величину спина большой, введем бозевские операторы  $a_j$  и  $a_j^\dagger$  с помощью соотношений

$$S_j^+ = \sqrt{2S} a_j, \quad S_j^- = \sqrt{2S} a_j^\dagger, \quad S_j^z = S - a_j^\dagger a_j;$$

$$S_{j'}^+ = \sqrt{2S'} a_{j'}, \quad S_{j'}^- = \sqrt{2S'} a_{j'}^\dagger, \quad S_{j'}^z = S' - a_{j'}^\dagger a_{j'}.$$

$$S_j^+ = S_{j-}^x + iS_j^y.$$

В полученном таким образом гамильтониане кроме билинейной формы по спин-волновым переменным имеются еще члены четвертого порядка по магنونным операторам. Так как мы ограничиваемся рассмотрением низких температур, когда число спиновых возбуждений мало, то этими членами можно при расчетах пренебрегать.

Далее определим одночастичную запаздывающую функцию Грина:

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

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

где  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по ансамблю Гиббса с тем же гамильтонианом при температуре  $T$ . Используя ту же процедуру, что и в [1], запишем функцию Грина в  $E$ -представлении:

$$\begin{aligned} (E + \mu^g \mathcal{H}) G_{g,k} &= \delta_{g,k} + 2JS \sum_{\delta} (G_{g,k} - G_{g+\delta, k} e^{i\vec{\kappa}\delta}) + \\ &+ 2JS \sum_{\delta''} (G_{0,k} - G_{\delta'', k}) (\delta_{g\delta''} - \delta_{g0}) + 2(J''S' - JS) \sum_{\delta'} G_{0,k} (1 - e^{i\vec{\kappa}\delta'}) \delta_{g0} + \\ &+ 2J' \sqrt{S} \sum_{\delta''} (\sqrt{S} G_{0,k} - \sqrt{S'} G_{g,k}) \delta_{g0} - 2J' \sqrt{S'} \sum_{\delta''} (\sqrt{S} G_{0,k} - \sqrt{S'} G_{g,k}) \delta_{g\delta''}. \end{aligned} \quad (1)$$

При получении (1) мы воспользовались еще трансляционной симметрией задачи в плоскости  $z = \text{const}$ , представляя  $G_{g,k}$  в виде

$$G_{\vec{g}, \vec{k}}^{\rightarrow\rightarrow} = G_{g,k}(\vec{\kappa}) e^{i\vec{\kappa}(\vec{g}' - \vec{k}')}, \quad \vec{g} = (\vec{g}', g) \equiv (g_x, g_y, g \equiv g_z).$$

При  $S = S'$  и  $J' = J'' = J$  решением (1) служит

$$G_{g,k}^0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{f}_z} \frac{e^{i\vec{f}_z(g-k)}}{E - E_{\vec{f}_z}}, \quad (2)$$

$$E_{\vec{f}} = 4JS (3 - \cos f_x - \cos f_y - \cos f_z),$$

$$\vec{f} = (\vec{\kappa}, f_z).$$

При наличии дефекта будем искать решение задачи в виде разложения по невозмущенным функциям (2)

$$G_{g,k} = \sum_p A_{gp} G_{pk}^0. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), можно найти коэффициенты  $A_{gp}$  и показать, что функция Грина подчиняется уравнению Дайсона:

$$G_{g,k} = G_{g,k}^0 + \sum_{pl} G_{gp}^0 V_{pl} G_{lk}.$$

где собственно энергетическую часть  $V_{pl}$  можно брать в любом приближении. В нашем же случае она учитывает взаимодействие только между ближайшими соседями и  $V$  имеет вид

$$V = \begin{pmatrix} 2(J'S' - JS) & 2(JS - J'\sqrt{SS'}) & 0 \\ 2(JS - J'\sqrt{SS'}) & 4(J' - J)S + 2\alpha(J''S' - JS) & 2(JS - J'\sqrt{SS'}) \\ 0 & 2(JS - J'\sqrt{SS'}) & 2(J'S' - JS) \end{pmatrix}$$

$$\alpha = 2(2 - \cos f_x - \cos f_y).$$

Для нахождения полюсов функции Грина, которые дают спектр элементарных возбуждений, запишем (3) в матричном виде

$$G_{g,k} = \sum_p \frac{B_{pg}}{\Delta} G_{pk}^0, \quad B_{pg} = (-1)^{p+g} \text{Minor} \{(I - G^0 V)_{pg}\},$$

$$\Delta = \det |I - G^0 V|.$$

Следовательно, кроме полюсов функций  $G^0$  ввиду равенства нулю детерминанта  $\Delta$ , появляются еще полюсы. Условие  $\Delta=0$  определит локальные колебания вблизи дефекта.  $\Delta$  является детерминантом третьего порядка и его можно привести к виду  $\Delta = \Delta_1 \Delta_2$ :

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

$$\Delta_2 = 1 - 2(J'S' - JS) (a - c). \quad (5)$$

Тогда локальные состояния будут определяться уравнениями  $\Delta_1=0$  и  $\Delta_2=0$  и их можно обозначить как  $s$ - и  $p$ -состояния.

В выражениях (4) и (5) введены обозначения

$$a = G_{-1,-1}^0 = G_{0,0}^0 = G_{1,1}^0 = -\frac{1}{4JS} \frac{1}{2\pi} \int \frac{df_z}{\eta - \cos f_z},$$

$$b = G_{-1,0}^0 = G_{0,-1}^0 = G_{1,0}^0 = G_{0,1}^0 = -\frac{1}{4JS} \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{-if_z}}{\eta - \cos f_z} df_z,$$

$$c = G_{-1,1}^0 = G_{1,-1}^0 = -\frac{1}{4JS} \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{-2if_z}}{\eta - \cos f_z} df_z,$$

$$\eta = 3 - \frac{E + \mu\mathcal{H}}{4JS} - \cos f_x - \cos f_y,$$

где был сделан переход от суммы к интегралу по первой зоне Бриллюэна. Равенство соответствующих элементов матрицы  $G_{gk}^0$  определяется тем, что при замене  $f_z$  на  $-f_z$  соответствующие интегралы переходят в комплексно сопряженные и  $G_{gk}^{0*} = G_{kg}^0$ . Таким образом все  $G_{gk}^0$  вещественны.

В случае длинных волн локальные состояния системы определяются уравнением (4). При  $S = S'$  его можно записать в виде

$$1 = \frac{J - J''}{J} \kappa^2 \frac{1}{2\pi} \int \frac{df_z}{\eta' + f_z^2}, \quad \eta' = 2(\eta - 1). \quad (6)$$

Решением (6) служит  $\eta' = \frac{J - J''}{2J} \kappa^4$  и, следовательно,

$$E + \mu \mathcal{H} = 2JS\kappa^2 \left[ 1 - \left( \frac{J - J''}{J} \right)^2 \kappa^2 \right]. \quad (7)$$

Сравнивая (7) с результатами, полученными И. М. Лифшицем и А. М. Косевичем [1] для фононов, найдем, что и здесь колебания зависят от двумерного волнового вектора спиновой волны  $\vec{\kappa}$  и при фиксированном  $\kappa$  частота колебаний отделена от спектра обычных объемных колебаний кристалла щелью, исчезающей при  $\kappa \rightarrow 0$ . При этом к нулю стремится не только ширина щели, но и ее относительная величина:

$$\frac{E'^2 - \kappa^2}{\kappa^2} = - \left( \frac{J - J''}{2J} \right)^2 \kappa^2 \rightarrow 0 \quad (\kappa \rightarrow 0);$$

$$E' = \frac{E + \mu \mathcal{H}}{2JS}.$$

Если  $S \neq S'$ , то

$$E + \mu \mathcal{H} = 2JS \left\{ \kappa^2 - \frac{16J'^2 (\sqrt{\sigma} - \sigma) - 8J'\kappa^2 (\sqrt{\sigma} - \sigma)(J''\sigma - J) + \kappa^4 (J''\sigma - J)^2}{4J^2\sigma} \right\}. \quad (8)$$

При  $\sigma = 1$  (8) переходит в (7). При  $S \neq S'$  и  $J''\sigma = J$  щель остается постоянной и равной  $\frac{\sigma - \sqrt{\sigma}}{\sigma^2} \left( \frac{2J'}{J} \right)^2$ .

Легко могут быть найдены и локальные колебания, отщепившиеся от верха спин-волновой полосы идеального кристалла. Заменяя в интегралах для  $G_{gkl}^0 f_x$  и  $f_y$  на  $\pi - f_x$  и  $\pi - f_y$  и считая опять  $f_x$  и  $f_y$  малыми, получим при  $S = S'$

$$\frac{E + \mu \mathcal{H}}{2JS} + \kappa^2 - 12 = 16 \left( \frac{J' - J}{J} \right)^2,$$

$$\frac{E + \mu \mathcal{H}}{2JS} + \kappa^2 - 12 = \left( \frac{J'' - J}{2J} \right)^2 (8 - \kappa^2),$$

т. е. появляются два типа локальных колебаний, один из которых отделен щелью, зависящей от  $\left( \frac{J' - J}{J} \right)^2$  и другой щелью, зависящей от  $\left( \frac{J'' - J}{J} \right)^2$  и параметра  $\kappa^2$ .

Для нахождения и исследования квазилокальных состояний введем в рассмотрение функцию плотности  $g(E, \kappa)$  с помощью соотношения

$$g(E, \kappa) = \frac{1}{\pi N} \text{Im Sp } G(E - is, \kappa),$$

$$s = 0^+.$$

Аналогично тому, как показано в [2], находим, что ее изменение за счет дефекта равно

$$\Delta g_i(E, \kappa) = \frac{1}{\pi N} \text{Im} \frac{\Delta'_1}{\Delta_1} + \frac{1}{\pi N} \text{Im} \frac{\Delta'_2}{\Delta_2},$$

$$\Delta_i \equiv \frac{d\Delta_i}{dE}, \quad i = 1, 2,$$

т. е. различные ветви колебаний вносят аддитивный вклад в плотность состояний, с весами, соответствующими степени вырождения локального уровня.

Представим  $\Delta_i$  в виде  $\Delta_i(E - is, \kappa) = \text{Re}\Delta_i + i\text{Im}\Delta_i$ . Тогда, если при некотором  $E_i^0$

$$\text{Re}\Delta_i(E_i^0) = 0 \quad (9)$$

и, кроме того  $\text{Im}\Delta_i(E_i)$  мало, изменение функции плотности может иметь резкий максимум. Разлагая  $\text{Re}\Delta_i$  в ряд вблизи  $E_i^0$  и ограничиваясь первым неисчезающим членом разложения, получим

$$\Delta g_i = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_i}{(\epsilon - \epsilon_i^0)^2 + \Gamma_i^2}, \quad \Gamma_i = -\frac{\text{Im}\Delta_i(\epsilon_i^0)}{\text{Re}\Delta_i'(\epsilon_i^0)},$$

$$\epsilon_i^0 = E - 4JS(2 - \cos f_x - \cos f_y). \quad (10)$$

Если решение уравнения (9) находится вне интервала, где обращается в нуль выражение (10), то мнимая часть  $\Delta_i$  исчезает и  $\Gamma_i = 0$ . Так как  $\epsilon$  зависит от  $\cos f_x$  и  $\cos f_y$ , то наличие плоского дефекта приводит к появлению целой «поверхности» 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» функции  $\Delta g_i$  (при наличии примеси и дислокации [2, 3]). При  $\Gamma_i \neq 0$  появляются квазилокальные колебания.

Рассмотрим уравнение (10). Отделяя вещественную и мнимую части, получим после вычисления соответствующих интегралов

$$\Delta_2 = \begin{cases} 1 + \frac{J'\sigma - J}{J} (\eta - i\sqrt{1 - \eta}) & \eta < 1, \\ 1 + \frac{J'\sigma - J}{J} \frac{1}{\eta + \sqrt{\eta^2 - 1}} & \eta > 1. \end{cases}$$

Следовательно, уравнение, определяющее локальные колебания, имеет вид

$$\begin{cases} \frac{J}{J'\sigma - J} = -\eta, & \eta < 1, \\ \frac{J}{J'\sigma - J} = -\frac{1}{\eta + \sqrt{\eta^2 - 1}}, & \eta > 1. \end{cases}$$

На рисунке сплошной линией нарисованы правые части уравнения, а пунктиром —  $\text{Im}\Delta_2$ . Видно, что область  $-1 < \frac{J}{J'\sigma - J} < 0$  является запрещенной. Если  $J < J'\sigma < 2J$ , то справа от  $\epsilon = 4 \left( \epsilon = 3 - \eta = \frac{E + \mu\mathcal{H}}{4JS} + \cos f_x + \cos f_y \right)$  всегда могут возникать локальные колебания. Ввиду наличия  $\cos f_x$  и  $\cos f_y$  появляется целая «поверхность» колебаний с непрерывным спектром частот. Кроме того, когда дефект порождает локальные

колебания, частоты которых лежат вблизи  $\epsilon=4$ , появляются и квазилокальные колебания с частотами, находящимися внутри полосы идеального кристалла. При этом по мере возрастания  $J'\sigma$ , как видно из рисунка, соответствующие квазило-

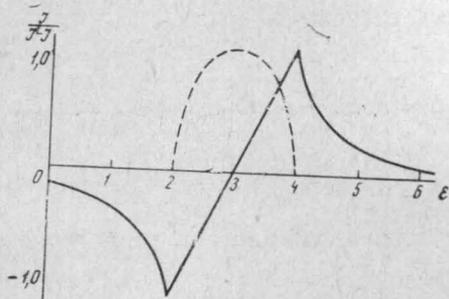


Рис. 1

кальные частоты перемещаются в глубь спин-волновой полосы идеального кристалла. Одновременно с этим соответствующий пик на спектральной плотности размывается, так как его ширина растет одновременно с увеличением самой спектральной плотности.

В заключение автор выражает благодарность чл.-корр. АН СССР И. М. Лифшицу за

предложенную тему и ценные указания в процессе работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Лифшиц И. М., Косевич А. М. Препринт ФТИ АН УССР, Харьков, 1965.
2. Пушкарлов Х. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 5, 1968.
3. Изюмов Ю. Я., Медведев М. А. ЖЭТФ, 49, 1887, 1965.

Поступила в редакцию  
3.11 1967 г.

Кафедра  
квантовой теории