

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

**Расчет потенциала обменного взаимодействия при наличии
флуктуирующего поля неупорядоченной системы электронных спинов**

М. К. Бахнян¹, А. М. Савченко^{1,a}, Б. И. Садовников^{1,2,b}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

²Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН. Россия, 119991, Москва, Ленинский пр-т, д. 32А.
E-mail: ^aa.m.savchenko@gmail.com, ^bsadovnikov@phys.msu.ru

Статья поступила 15.06.2011, подписана в печать 27.07.2011

В работе для описания взаимодействий в приближении сильной связи используется контурное представление операторов. На основе такого представления найден потенциал обменного взаимодействия, показано, что эффективное обменное взаимодействие уже не определяется только парными корреляциями, а формируется более сложным образом с учетом четырехчастичного взаимодействия.

Ключевые слова: потенциал обменного взаимодействия, контурное представление, функция Грина.

УДК: 538.91. PACS: 71.10.-w.

Для описания взаимодействий в приближении сильной связи мы воспользуемся контурным представлением операторов, т.е. будем рассматривать нашу систему как систему «взаимодействующих» контуров, на которых определены операторы \hat{A}_ν , $\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x})$, $\hat{U}_{\alpha\nu\kappa}$, $\hat{\Omega}_{\gamma\kappa}$ [1–4]. Перейдем теперь в этом формализме к рассмотрению обменного взаимодействия между электронами. Рассмотрим взаимодействие пары электронов в данной системе. Они взаимодействуют с неупорядоченной спиновой подсистемой и самосогласованно взаимодействуют с кристаллической решеткой и между собой через кулоновское отталкивание.

Ориентация их спинов может быть параллельной или антипараллельной, чему соответствуют симметричная и антисимметричная волновая функция. Поскольку в данном случае система описывается совокупностью взаимодействующих контуров, то соответствующие волновые функции реализуются в контурном представлении:

$$\Psi_s(\mathbf{x}_i, t|\Gamma|\mathbf{x}_j, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \psi_i(\mathbf{x}_i, t) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_j(\mathbf{x}_j, t) \rangle + \langle \psi_j(\mathbf{x}_j, t) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}_i, t) \rangle) \sigma_s, \quad (1)$$

$$\Psi_a(\mathbf{x}_i, t|\Gamma|\mathbf{x}_j, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \psi_i(\mathbf{x}_i, t) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_j(\mathbf{x}_j, t) \rangle - \langle \psi_j(\mathbf{x}_j, t) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}_i, t) \rangle) \sigma_a, \quad (2)$$

где σ_s , σ_a — спиновые волновые функции, описывающие состояние пары электронов с полным спином $S_i + S_j$.

Функции «свободных» электронов $\Psi_i(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют системе самосогласованных уравнений в контурном представлении

$$i \left(\frac{\delta}{\delta c_i} + \frac{\partial(\omega)}{\partial t} \right) \Psi_i(\mathbf{x}, t|\Gamma) + \text{Tr} [\hat{D}_\nu^2, \Psi_i(\mathbf{x}, t|\Gamma)] =$$

$$= \frac{1}{2\pi C_\kappa} \int D_\kappa d\mathbf{x}'' g_{\text{ph}}(\mathbf{x}) g_{\text{ph}}(\mathbf{x}'') \times \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}'') \psi_\kappa^*(\mathbf{x}'', t'') \psi_\kappa(\mathbf{x}'', t'') \overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}, t) \rangle - \frac{1}{2\pi C_\kappa} \int D_\kappa d\mathbf{x}'' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \times \langle \psi_\kappa^*(\mathbf{x}'', t'') \psi_\kappa(\mathbf{x}'', t'') \overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}, t) \rangle. \quad (3)$$

Надо отметить, что интеграл здесь берется по $\varepsilon_j(\Gamma)$ — малой петле, «приклеенной» к контуру Γ :

$$\Psi_i(\mathbf{x}, t|\Gamma) = \left\langle \text{Tr} \frac{1}{N} \hat{T} \exp \left[\oint_\Gamma dx_\nu \hat{A}_\nu \right] \psi_i(\mathbf{x}, t) \right\rangle.$$

Уравнения (3) можно легко замкнуть, если предположить, что i -й электрон взаимодействует с конечным числом электронов. На языке контуров это означает, что внутри петли $\varepsilon_j(\Gamma)$ сосредоточено малое число электронов, взаимодействующих с электроном под номером i . Если же внутрь петли вообще попадает лишь один электрон, то мы получаем систему двух уравнений.

Используя выражения (1), (2), можно, как обычно, построить эффективное кулоновское взаимодействие пары электронов, которое распадается на прямое кулоновское взаимодействие $Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma)$ и так называемое обменное взаимодействие $J(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma)$.

Средние значения потенциалов $Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma)$ и $J(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma)$ тогда будут соответственно равны

$$\langle Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle = N \int d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_j \langle \psi_i^*(\mathbf{x}_i) \psi_j^*(\mathbf{x}_j) V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \times \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}_i) \psi_j(\mathbf{x}_j) \rangle, \quad (4)$$

$$\langle J(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle = N \int d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_j \langle \psi_i^*(\mathbf{x}_i) \psi_j^*(\mathbf{x}_j) V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \times \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \psi_i(\mathbf{x}_j) \psi_j(\mathbf{x}_i) \rangle. \quad (5)$$

Средние выражения (4), (5) следует понимать как средние хронологические произведения операторных

волновых функций. Поскольку система предполагается пространственно неоднородной, то средние значения потенциалов $\langle Q(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle$, $\langle J(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle$ приходится на выделенную элементарную ячейку с индексом κ . Размер ячейки l_κ при этом должен быть много меньше характерного размера неоднородности L_κ : $l_\kappa/L_\kappa \ll 1$.

Тогда

$$\langle Q_\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle = N f_2(N) \int d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_j \psi_{i\kappa}^*(\mathbf{x}_i) \psi_{j\kappa}^*(\mathbf{x}_j) \times \\ \times V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \psi_{i\kappa}(\mathbf{x}_i) \psi_{j\kappa}(\mathbf{x}_j) \langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i}) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma_{\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_j}) \rangle. \quad (6)$$

Контуры $\Gamma_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i}$, $\Gamma_{\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_j}$ непрерывной деформацией могут быть стянуты в точки, тогда выражение (6) с точностью до коэффициента переходит в выражение, впервые полученное Гайтлером и Лондоном [5].

Проводя усреднение по конфигурациям ячеек, получим

$$\langle \langle Q_\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)} = N f_2(N) Q_0.$$

При этом потенциал обменного взаимодействия можно выразить через функции Грина, а затем преобразовать к следующему виду:

$$\langle J_{\kappa_1 \kappa_2}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle = \frac{N^2}{(N^2 - 1)^2} N f_2(N) \times \\ \times \int_{-\kappa_1, -\kappa_2 \in \Gamma_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i}} \frac{D_{\kappa_1}(\mathbf{x}_i'') D_{\kappa_2}(\mathbf{x}_j'')}{(2\pi c_{\kappa_1})(2\pi c_{\kappa_2})} d\mathbf{x}_i'' d\mathbf{x}_j'' \times \\ \times G_{ii\kappa_1}^*(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) G_{jj\kappa_2}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) \times \\ \times \exp \left[\int_{\kappa_1(\mathbf{x}_i'')} d\mathbf{x}_\nu'' p_{0\nu}[\kappa_1] + \int_{\kappa_2(\mathbf{x}_j'')} d\mathbf{x}_\nu'' p_{20\nu}[\kappa_2] \right] \times \\ \times \sum_{\alpha_1, \alpha_2=1}^{N^2-1} \langle \text{Tr} \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\kappa_1) \rangle \langle \text{Tr} \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\kappa_2) \rangle, \quad (7)$$

$$G_{ii\kappa_1}^*(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) = \langle \psi_{i\kappa_1}^*(\mathbf{x}_i) \psi_{i\kappa_1}(\mathbf{x}_j) \rangle,$$

$$G_{jj\kappa_2}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) = \langle \psi_{j\kappa_2}(\mathbf{x}_i) \psi_{j\kappa_2}^*(\mathbf{x}_j) \rangle.$$

Отметим, что экспоненты в формуле (7) возникают из-за контурного Фурье-представления (κ -представления) функций Грина.

Подчеркнем физический смысл этих функций. Неупорядоченная система спинов не является «замерзшей». В ней даже при нуле температур всегда существуют флуктуации. Флуктуации электронных спинов связаны с их локальным «переворотом», который осуществляется за характерное время $\tau' \ll \tau$, $\tau' \sim 10^{-6}$ с, где τ — время свободного пробега электронов.

Распределение электронных спинов в пространстве определяется пространственным распределением зарядов. Действительно, за время «переворота» спина выделенного электрона, остальные электроны успевают перераспределиться в пространстве, т. е. происходит изменение распределения зарядовой плотности системы. Вследствие локальных «переворотов» происходит и изменение спиновой плотности в данной точке пространства \mathbf{x} . На этом основании можно сделать вывод, что флуктуации спиновой и зарядовой плотностей связаны друг с другом.

Неупорядоченная система электронных спинов описывается потенциалом калибровочного поля \hat{A}_ν , кото-

рый преобразуется как в координатном, так и в спиновом пространстве. Это поле ответственно также и за флуктуации и поэтому его можно представить в виде $\hat{A}_\nu = \hat{A}_\nu^0 + \hat{a}_\nu$. Тогда функции $p_{i0\nu}[\kappa_i]$ описывают поле импульса, который электрон приобретает за счет взаимодействия с флуктуирующим полем \hat{a}_ν . При этом корреляционная функция полей $p_{i0\nu}[\kappa_i]$, $p_{j0\nu}[\kappa_j]$ пропорциональна $\langle \text{Tr} \hat{a}_\nu[\kappa_i] \hat{a}_\nu'[\kappa_j] \rangle$, причем коэффициент пропорциональности выражается через магнитную восприимчивость системы, так как флуктуации спиновой плотности связаны с появлением в выделенном микроскопическом объеме неравновесной намагниченности $m(\kappa)$.

Из выражения (7) следует, что эффективное обменное взаимодействие уже не определяется только парными корреляциями, а формируется более сложным образом. Действительно, можно представить себе, что два связанных в ячейке κ_1 контура Γ электрона обмениваются импульсом с парой связанных электронов в ячейке κ_2 того же контура. Таким образом возникает так называемое четырехчастичное взаимодействие, при котором электроны взаимодействуют как внутри ячеек, так и между ячейками. Необходимо подчеркнуть, что на важность многочастичных, в частности четырехчастичных, взаимодействий в магнитных системах указывал в своих основополагающих работах и в последующих обобщающих исследованиях Н. Н. Боголюбов [6–8]. Им было показано, что представление о коллективных электронных возбуждениях как куперовских парах является концептуально важным первым приближением, но оно не может быть абсолютизировано, и, вообще говоря, мы имеем дело с коллективными возбуждениями всего электронного конденсата как с целостной системой.

В работе [9] впервые обсуждалась возможность спаривания электронов с неравными по модулю импульсами. Такое размытие импульсов объяснялось многочастичными корреляциями. В данном же случае мы имеем аналогичную ситуацию, однако за соответствующее размытие импульсов электронов ответственны флуктуации спиновой и зарядовой плотностей.

Перейдем к вычислению интегралов в (7). Для этого перепишем (7) в более компактной форме:

$$\langle J_{\kappa\kappa^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma) \rangle = \frac{N^2}{(N^2 - 1)^2} N f_2(N) \times \\ \times \int_{-\kappa, -\kappa^* \in \Gamma_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j}} \frac{D_\kappa(\mathbf{x}_i'') D_{\kappa^*}(\mathbf{x}_j'')}{(2\pi c_\kappa)(2\pi c_{\kappa^*})} d\mathbf{x}_i'' d\mathbf{x}_j'' \times \\ \times J_{\kappa\kappa^*} \exp \left[\int_{\kappa(\mathbf{x}_i'')} d\mathbf{x}_\nu'' p_{0\nu}[\kappa] + \int_{\kappa^*(\mathbf{x}_j'')} d\mathbf{x}_\nu'' p_{0\nu}[\kappa^*] \right] \times \\ \times \sum_{\alpha_1, \alpha_2=1}^{N^2-1} \langle \text{Tr} \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\kappa) \rangle \langle \text{Tr} \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\kappa^*) \rangle, \\ J_{\kappa\kappa^*} = \int d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_j G_{ii\kappa}^*(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) G_{jj\kappa^*}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j).$$

Здесь мы заменили κ_1, κ_2 на κ, κ^* , так как только в этом случае импульс получаемой пары электронов,

находящихся в данной ячейке κ_2 , совпадает с импульсом, испускаемым электронами в ячейке κ_1 .

Ячейки κ , κ^* отличаются только направлением обхода. В случае, если размер ячейки l_κ много меньше размера контура Γ , интегралы в (7) удается вычислить. Тогда имеем

$$\langle \langle J_{\kappa\kappa^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)} = \langle J_{\kappa\kappa^*} \rangle_{\rho(\kappa)} N f_2(N) \langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle^2 \langle \text{ch}(\pi l_\kappa p_0) \rangle_{\rho(\kappa, p_0)}, \quad (8)$$

где $\rho(\kappa)$ — функция распределения конфигурации ячеек; p_0 — средний импульс, передаваемый между ячейками κ , κ^* ; $p_0 \simeq 2\pi/L_\kappa$; $\langle J_{\kappa\kappa^*} \rangle_{\rho(\kappa)} \equiv J_0$; $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$ следует понимать как среднее по всем конфигурациям и ориентациям контура Γ в пространстве. Параметр $\langle \text{ch}(\pi l_\kappa p_0) \rangle$ является сложным функционалом от $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$. При $\hat{A}_\nu \neq 0$, $C \langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$ имеет численное значение такое, что при $l_\kappa/L_\kappa \ll 1$

$$\langle r_c \rangle = \left\langle \text{Tr} \int d\mathbf{x} x^2 \hat{J}(\mathbf{x} | \Gamma_x) \right\rangle / \left\langle \text{Tr} \int d\mathbf{x} \hat{J}(\mathbf{x} | \Gamma_x) \right\rangle$$

($\langle r_c \rangle$ — обменный радиус корреляции).

Функция $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$ может быть получена как решение полевого уравнения и зависит от среднего размера контура Γ .

Таким образом, выражение (8) можно также понимать как потенциал взаимодействия между электронными парами различных ячеек, т.е. $\langle \langle J_{\kappa\kappa^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}$ играет роль обменного взаимодействия между ячейками.

Если функция $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$ является осциллирующей в пространстве, это означает, что в системе могут возникнуть кластеры с дальним магнитным порядком: ферромагнитный, если $J < 0$, и антиферромагнитный, если $J > 0$.

Если $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle$ — медленно меняющаяся функция координат, это означает, что на фоне неупорядоченных спинов может возникнуть длинноволновая магнитная структура с модулированным по величине магнитным моментом.

Так как $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle \leq 1$, то при $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle \rightarrow 1$ обменное взаимодействие может оказаться существенно выше, чем в обычных магнитных системах, т.е. обычное обменное взаимодействие может быть усилено дополнительно обменным взаимодействием между ячейками.

При $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle \rightarrow 0$ обменное взаимодействие между электронами отсутствует, т.е. они сильно экранированы разупорядоченной системой спинов и между ними существует только кулоновское отталкивание. В этом случае дальний магнитный порядок будет отсутствовать.

Итак, физический смысл параметра $\langle \langle J_{\kappa\kappa^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}$ состоит в том, что он описывает обменное взаимодействие пары электронов, которые в свою очередь взаимодействуют с эффективным полем остальных электронов и с флуктуирующим полем неупорядоченной системы электронных спинов. Как уже отмечалось, из-за флуктуаций такое парное взаимодействие эквивалентно четырехчастичному. Если $\langle r_c \rangle \rightarrow \infty$, то это означает, что на каждый электронный спин действует постоянное самосогласованное поле. Но тогда этот случай соответствует отсутствию всяких флуктуаций.

Список литературы

1. Sadochnikov B.I., Savchenko A.M. // Phys. A. 1999. **271**. P. 411.
2. Sadochnikova M.B., Savchenko A.M., Scarpetta G. // Phys. Lett. A. 2000. **274**. P. 236.
3. Savchenko M.A., Stefanovich A.V. Fluctuational Superconductivity of Magnetic Systems. Springer-Verlag, 1990.
4. Савченко А.М., Сорокина Е.М. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2009. № 3. С. 12.
5. Гайтлер В. Элементарная квантовая механика. М., 1948.
6. Боголюбов Н.Н. Избр. тр.: В 3 т. Т. 3. Киев, 1971.
7. Боголюбов Н.Н. // Успехи физ. наук. 1959. **67**, № 4. С. 549.
8. Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. Новый метод в теории сверхпроводимости. М., 1958.
9. Heine V., Pippard A.B. // Philos. Mag. 1958. **3**. P. 1046.

The calculation of the exchange interaction potential in a fluctuating field of disordered system of electron spins

M. K. Bakhnyan¹, A. M. Savchenko^{1,a}, B. I. Sadochnikov^{1,2,b}

¹Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

²Institute of Nanotechnologies in Microelectronics, Russian Academy of Sciences, Leninsky ave. 32A, Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^aa.m.savchenko@gmail.com, ^bsadochnikov@phys.msu.ru.

To describe the interaction in the strong coupling approximation the contour representation of the operators is under consideration. On the basis of such a representation the exchange interaction potential is found. It is shown, that effective exchange interaction is not determined by pairing correlations only, but forms in a more complex way on a basis of four-particles interaction.

Keywords: exchange interaction potential, contour representation, Green's function.

PACS: 73.43.Nq.

Received 16 June 2011.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2012).

Сведения об авторах

1. Бахнян Михаил Константинович — аспирант; тел. (495) 939-12-90, e-mail: bakhnyan@gmail.com.

2. Савченко Александр Максимович — докт. физ.-мат. наук, доцент, ст. преподаватель; e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.

3. Садовников Борис Иосифович — докт. физ.-мат. наук, профессор; (495) 932-80-10, e-mail: sadochnikov@phys.msu.ru.