

Расчет параметра квадрупольного обменного взаимодействия в системе неупорядоченных магнитных моментов

М. К. Бахнян^a, А. М. Савченко^b, Б. И. Садовников^c

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

E-mail: ^abakhnyan@gmail.com, ^ba.m.savchenko@gmail.com, ^csadovnikov@phys.msu.ru

Статья поступила 11.12.2011, подписана в печать 19.12.2011

В рамках модели обменного взаимодействия вычислены параметры квадрупольного обменного и электрон-фононного взаимодействий. Показано, что магнитная неупорядоченная подсистема играет определяющую роль в формировании эффективного обменного взаимодействия между электронами.

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

УДК: 538.91. PACS: 71.10.-w.

В настоящей работе рассматривается магнитная система, в которой магнитные моменты не являются локализованными и распределены в пространстве хаотично. Такая магнитная система формируется спинами нормальных электронов, находящихся в делокализованных (d, f) - состояниях и взаимодействует с электронами, находящимися в s -состояниях, которые определяют высокочастотные и кинетические свойства упорядоченной системы. Таким образом, мы будем рассматривать модель, в которой взаимодействующие s -электроны обтекают кристаллическую решетку и неупорядоченную систему спинов.

Для того чтобы записать гамильтониан такой системы, необходимо правильно задать взаимодействие электронной подсистемы с неупорядоченной в данном случае магнитной подсистемой. Взаимодействие электронной подсистемы с неупорядоченной магнитной подсистемой обычно описывается гамильтонианом типа $s-d(f)$ обменной модели:

$$\hat{H}_{s-d(f)} = - \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{r}} J(\mathbf{R}_e, \mathbf{r}) S_{\mathbf{R}_e} \sigma_{\mathbf{r}},$$

где $S_{\mathbf{R}_e}$ и $\sigma_{\mathbf{r}}$ — операторы спина $d(f)$ и s -электронов соответственно.

Обменный интеграл $J(\mathbf{R}_e, \mathbf{r})$ является случайной функцией координат узлов решетки \mathbf{R}_e . Однако основной недостаток такого подхода состоит еще и в том, что спины $d(f)$ -электронов предполагаются локализованными на узлах. Кроме того, гамильтониан $\hat{H}_{s-d(f)}$ не учитывает реальной группы симметрии упорядоченной системы.

Поскольку магнитная подсистема предполагается неупорядоченной, то, следовательно, ее энергия должна быть инвариантна относительно преобразований группы вращений в спиновом пространстве $SO(3)$. Кроме того, волновые функции s -электронов обладают $SU(2)$ -симметрией, так как выражаются через матрицы Паули, которые являются генераторами группы $SU(2)$, а так как $SO(3) = SU(2)/Z_2$ [1], где Z_2 — группа вычетов по модулю два или группа центра, то это означает, что $SU(2)$ -симметрия является фундаментальной для рассматриваемой нами системы, что необходимо учитывать при построении гамильтониана.

Поскольку природа спиновой подсистемы электромагнитная, то ее можно описать с помощью введения эффективного потенциала A_{ν}^{α} электромагнитного поля, который преобразуется как в координатном, так и в спиновом пространстве.

Тогда можно записать тензор напряженности эффективного электромагнитного поля неупорядоченной системы спинов, который будет выглядеть следующим образом:

$$F_{\mu\nu}^{\alpha} = \nabla_{\nu} A_{\mu}^{\alpha} - \nabla_{\mu} A_{\nu}^{\alpha} + g e^{\alpha\beta\gamma} A_{\mu}^{\beta} A_{\nu}^{\gamma}. \quad (1)$$

Здесь g — константа связи. Надо отметить, что при таком рассмотрении неупорядоченной системы спинов выражение (2) совпадает с тензором поля Янга-Миллса [2].

Таким образом, гамильтониан рассматриваемой модели можно представить в следующем виде [3–5]:

$$H = H_{ee} + H_{ph} + H_{aa} + H_{e-ph}, \quad (2)$$

где

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{x}) \hat{D}_{\alpha\nu k} \hat{D}_{\beta\nu k} \psi_{\beta}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{x}) \psi_{\beta}^{+}(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi_{\beta}(\mathbf{x}') \psi_{\alpha}(\mathbf{x})$$

— гамильтониан электронной подсистемы,

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \left[\sum_{\kappa} \frac{p_{\kappa}^2}{\rho_{\kappa}} + \sum_{\alpha, \beta, \nu, \nu', \kappa, \kappa'} (\lambda_{\alpha\beta\nu\nu'kk'} u_{\alpha\nu k} u_{\beta\nu'k'} + \mu_{\alpha\beta\nu\nu'kk'} \Omega_{\alpha\nu k} \Omega_{\beta\nu'k'}) \right]$$

— фононный гамильтониан,

$$H_{aa} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \left[(E_{\nu}^{\alpha})^2 + (C_{\nu}^{\alpha})^2 \right]$$

— гамильтониан неупорядоченной системы спинов,

$$H_{e-ph} = \int d\mathbf{x} g_{ph}(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{x}) \psi_{\alpha}(\mathbf{x})$$

— гамильтониан взаимодействия электронной подсистемы с кристаллической решеткой.

Здесь $\psi_\alpha(\mathbf{x})$, $\psi_\alpha^+(\mathbf{x})$ — электронные операторы; $\hat{D}_\nu = \nabla_\nu - \frac{i}{2}g_1\hat{\tau}^\gamma\hat{A}_\nu^\gamma$; $\hat{A}_\nu^\gamma = A_\nu^\gamma + \frac{g_2}{g_1}\Omega_{\gamma\nu}$; $V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ — кулоновский потенциал; $\lambda'_{\alpha\beta\nu\nu'kk'}$, $\mu_{\alpha\beta\nu\nu'kk'}$ — тензоры упругих констант; $u_{\alpha\nu\kappa} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_{\alpha\kappa}}{\partial x_\nu} + \frac{\partial u_{\nu\kappa}}{\partial x_\alpha})$, $\Omega_{\alpha\nu\kappa} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_{\alpha\kappa}}{\partial x_\nu} - \frac{\partial u_{\nu\kappa}}{\partial x_\alpha})$ — симметричная и антисимметрическая части тензора деформаций; $g_{ph}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})$ — потенциал решетки.

Далее можно выписать уравнения для электронной и фононной функции Грина, а также для оператора $\hat{A}_\nu = (\hat{\tau}^\gamma\hat{A}_\nu^\gamma)$. Однако поскольку система является сильно неоднородной, то анализ этих уравнений оказывается весьма затруднительным и из них можно получить решения только в пределе слабой связи с помощью стандартной теории возмущений. Если же рассматривать взаимодействие электронной подсистемы с магнитной подсистемой и кристаллической решеткой в приближении сильной связи, то вышеупомянутый подход оказывается неэффективным, так как малый параметр в данном случае отсутствует.

Поэтому 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 , $\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x})$, $\hat{U}_{\alpha\nu\kappa}$, $\hat{\Omega}_{\gamma\nu\kappa}$. Они будут зависеть не только от обычных переменных координат и времени, но еще и от некоторой контурной переменной Γ . Переходим к их построению. Введем полевой оператор следующего вида [6–8]:

$$\hat{B}(\Gamma) = \frac{1}{N}\hat{T} \exp\left\{\oint_{\Gamma_\kappa} dx_\nu \hat{A}_\nu\right\},$$

где $\hat{A}_\nu = \frac{i}{2}g_1 \sum_{\gamma=1}^{N^2-1} (\hat{\tau}^\gamma \hat{A}_\nu^\gamma)$, \hat{T} — хронологический оператор.

Тогда электронные операторы в контурном представлении будут иметь вид

$$\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}|\Gamma) = \hat{B}(\Gamma)\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}), \quad \hat{\psi}^{\alpha+}(\mathbf{x}|\Gamma) = \hat{\psi}^{\alpha+}(\mathbf{x})\hat{B}^+(\Gamma). \quad (3)$$

Соотношения антикоммутаций для $\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}|\Gamma)$, $\hat{\psi}^{\alpha+}(\mathbf{x}|\Gamma)$ могут быть легко получены:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{\psi}^{\beta+}(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right\} &= \delta_{\alpha\beta} \oint_{\Gamma} e_\nu dx_\nu \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{1}{N} \hat{B}(\Gamma_{xx'}), \\ \left\{ \hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{\psi}^\beta(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right\} &= \left\{ \hat{\psi}^{\alpha+}(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{\psi}^{\beta+}(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Учитывая выражения для оператора смещения узла кристаллической решетки через операторы рождения и уничтожения фононов с импульсом \mathbf{q} , \hat{b}_q^+ , b_q

$$u_\kappa^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_q \frac{e_\kappa^\alpha}{\sqrt{2\rho_\kappa\omega_\kappa(\mathbf{q})}} \left(\hat{b}_{q\alpha\kappa} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} + \hat{b}_{q\alpha\kappa}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \right), \quad (4)$$

можно определить операторы

$$\begin{aligned} \hat{u}_{\nu\kappa}^\alpha(\mathbf{x}) &= i \sum_q \left[\frac{1}{\sqrt{2\rho_\kappa\omega_\kappa(\mathbf{q})}} \left(e_{\alpha\kappa} q_\nu \hat{b}_{q\alpha\kappa} + e_{\nu\kappa} q_\alpha \hat{b}_{q\nu\kappa} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2\rho_\kappa\omega_\kappa(\mathbf{q})}} \left(e_{\alpha\kappa} q_\nu \hat{b}_{q\alpha\kappa}^+ + e_{\nu\kappa} q_\alpha \hat{b}_{q\nu\kappa}^+ \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_{\nu\kappa}^\alpha &= i \sum_q \left[\frac{1}{\sqrt{2\rho_\kappa\omega_\kappa(\mathbf{q})}} \left(e_{\alpha\kappa} q_\nu \hat{b}_{q\alpha\kappa} - e_{\nu\kappa} q_\alpha \hat{b}_{q\nu\kappa} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2\rho_\kappa\omega_\kappa(\mathbf{q})}} \left(e_{\alpha\kappa} q_\nu \hat{b}_{q\alpha\kappa}^+ - e_{\nu\kappa} q_\alpha \hat{b}_{q\nu\kappa}^+ \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \right]. \quad (6) \end{aligned}$$

Тогда по аналогии с (3) можно ввести контурные операторы для фононов

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}|\Gamma) &= \hat{B}(\Gamma_x) b_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}), \\ \hat{b}_{\alpha\kappa}^+(\mathbf{x}|\Gamma) &= b_{\alpha\kappa}^+(\mathbf{x}) \hat{B}^+(\Gamma_x), \\ \hat{b}_{\alpha\kappa} &= \frac{1}{N} \hat{T} \sum_q \exp\left\{ i\mathbf{q}\mathbf{x} + \oint_{\Gamma_x} dx_\nu \hat{A}_\nu \right\} b_{q\alpha\kappa}, \\ \hat{b}_{\alpha\kappa}^+ &= \frac{1}{N} \hat{T} \sum_q b_{q\alpha\kappa}^+ \exp\left\{ -i\mathbf{q}\mathbf{x} + \oint_{\Gamma_x} dx_\nu \hat{A}_\nu^+ \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Соответствующие соотношения коммутаций будут иметь вид

$$\begin{aligned} \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}^+(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\kappa'} \oint_{\Gamma} e_\nu dx_\nu \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{1}{N} \hat{B}(\Gamma_{xx'}), \\ \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] &= \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}^+(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}^+(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] = 0. \end{aligned}$$

Так как фононный оператор коммутирует с оператором поля \hat{A}_ν , то в формулах (7) интеграл $\oint_{\Gamma_{xx'}} dx_\nu \hat{A}_\nu$ распадается на сумму двух интегралов $\oint_{\Gamma_x} dx_\nu \hat{\Omega}_\nu$ и $\oint_{\Gamma_{x'}} dx_\nu \hat{\Omega}_\nu$, собственные значения которых отличны от нуля, если контуры Γ_x , $\Gamma_{x'}$ охватывают особенность поля Ω_ν^α (например, пластическую дисклинацию, так как $\oint_{\Gamma_x} dx_\nu \Omega_\nu^\alpha$ — полный вектор пластического поворота на контуре Γ).

Если в системе отсутствуют крупномасштабные пластические дисклинации, то $\oint_{\Gamma} dx_\nu \Omega_\nu^\alpha \rightarrow 0$ и соотношения для фононных операторов упрощаются:

$$\begin{aligned} \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}^+(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\kappa'} \frac{1}{N^2} \hat{T}^0 \int_{\Gamma} e_\nu dx_\nu \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] &= \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}^+(\mathbf{x}|\Gamma_x), \hat{b}_{\beta\kappa'}^+(\mathbf{x}'|\Gamma_{x'}) \right] = 0. \end{aligned}$$

После того как мы определили соотношения коммутаций для электронных и фононных операторов в контурном представлении, введем «одночастичные» функции Грина для электронов и фононов. В дальнейшем мы будем опускать вниз спиновые индексы электронных операторов:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}', \tau') &= \left\langle \hat{T} \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}', \tau') \right\rangle, \\ D_{\alpha\beta\gamma\gamma'}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}', \tau') &= \left\langle \hat{T} b_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \hat{b}_{\beta\gamma'}^+(\mathbf{x}', \tau') \right\rangle, \\ F_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}', \tau') &= \left\langle \hat{T} \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \hat{\Psi}_\beta(\mathbf{x}', \tau') \right\rangle. \end{aligned}$$

Здесь $\tau = it$ — мнимое время.

Уравнения движения для функций Грина и для полевого оператора выглядят следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') = \delta_{\alpha\beta} \oint_{\Gamma} e_{\nu} dx_{\nu} \tilde{\delta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \text{Tr } B(\Gamma) \rangle + \\ + \left\langle \hat{T} [\hat{H}_{\Gamma}, \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)] \overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}} \hat{B}(\Gamma) \hat{\psi}_{\beta}^{+}(\mathbf{x}', \tau') \right\rangle, \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} D_{\alpha\beta\kappa\kappa'}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') = \\ = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\kappa'} \oint_{\Gamma} e_{\nu} dx_{\nu} \tilde{\delta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \text{Tr } B(\Gamma) \rangle + \\ + \left\langle \hat{T} [\hat{H}_{\Gamma}, \hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}, \tau)] \overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}} \hat{B}(\Gamma) \hat{b}_{\beta\kappa}^{+}(\mathbf{x}', \tau') \right\rangle, \quad (9)$$

$$\langle \text{Tr } \hat{D}_{\mu} \hat{F}_{\mu\nu} \hat{B}(\Gamma) \rangle = \langle \text{Tr } \hat{J}_{\nu}(\Gamma) \hat{B}(\Gamma) \rangle. \quad (10)$$

Оператор $\overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}}$ действует на все операторы, стоящие под знаком усреднения, $\hat{J}_{\nu}(\Gamma)$ — оператор тока. Отметим, что под $\tilde{\delta}$ понимается обобщенная δ -функция на контуре Γ , введенная следующим образом:

$$\tilde{\delta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \oint_{\Gamma_{x'', \tau''} \in \Gamma_{x, \tau, x', \tau'}} dx''_{\nu} e_{\nu} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') + \\ + \left\langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{T} \cdots \frac{\partial}{\partial \tau'} \overset{\leftrightarrow}{\text{Tr}} \hat{A}_{\nu}(\mathbf{x}, \tau') \cdots \right\rangle.$$

В уравнениях (8)–(10) гамильтониан исследуемой системы записан в контурном представлении и получается из исходного гамильтониана следующим образом. Запишем эффективный гамильтониан (2) с учетом формул (4)–(6) в контурном представлении:

$$H_{\Gamma} = N \text{Tr} \int_{x \in \Gamma} d\mathbf{x} \left\{ \hat{B}(\Gamma) \left\{ \frac{1}{2} \hat{\Psi}_{\alpha'}^{+}(\mathbf{x}) \hat{D}_v^2 \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) + \right. \right. \\ + \frac{1}{2} \left[\hat{\Psi}_{\alpha'}^{+}(\mathbf{x}) \hat{\Delta}_{\alpha'\gamma'}^{+}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\gamma'}(\mathbf{x}) + \hat{\Psi}_{\alpha'}^{+}(\mathbf{x}) \hat{\Delta}_{\alpha'\gamma'}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\gamma'}^{+}(\mathbf{x}) \right] + \\ + \sum_{\alpha, \kappa} \hat{b}_{\alpha\kappa}^{+} \hat{\xi}_{\kappa}(\mathbf{x}) \hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}) + \frac{i}{\sqrt{2}} \sum_{\alpha, \kappa} g_{\text{ph}}(\mathbf{x}) e_{\alpha\kappa} \hat{\eta}_{\kappa}(\mathbf{x}) \times \\ \times \left[\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x}) - \hat{b}_{\alpha\kappa}^{+}(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}_{\alpha'}^{+}(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) \left. \right\} \hat{B}^{+}(\Gamma) + \\ + \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{\delta s_{\mu\nu}} \right)^2 + \hat{I}(\Gamma) \right] \hat{B}(\Gamma) \left. \right\} + \\ + N \text{Tr} \int_{x, x' \in \Gamma} d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{B}(\Gamma) \hat{\Psi}_{\alpha'}^{+}(\mathbf{x}) \times \\ \times \text{Tr} \left[\hat{\Psi}_{\beta'}^{+}(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}_{\beta'}(\mathbf{x}') \right] \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{x}) \hat{B}^{+}(\Gamma),$$

В данном выражении $\hat{D}_v^2 = -\frac{\hbar^2}{\mu_e} \hat{D}_v \hat{D}_v^{-1}$, $\hat{D}_v^{\pm} = \hat{D}_v^{\pm} i \times \sqrt{2\mu_e \mu / \hbar^2}$; $\delta s_{\mu\nu}$ — безразмерное приращение площади контура Γ ; $\hat{I}(\Gamma)$ — неопределенный множитель Лагранжа; $\hat{b}_{\alpha\kappa}(\mathbf{x})$, $\hat{b}_{\alpha\kappa}^{+}$ — фононные операторы в координатном представлении; κ — индекс соответствующей выделенной элементарной ячейки кристалла; операторы

$\hat{\xi}_{\kappa}(\mathbf{x})$, $\hat{\eta}_{\kappa}(\mathbf{x})$ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\int d\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\xi}_{\kappa}(\mathbf{x}') \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = \omega_{\kappa \text{ ph}}(\mathbf{p}), \\ \int d\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\eta}_{\kappa}(\mathbf{x}') \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = [\omega_{\kappa \text{ ph}}(\mathbf{p})]^{1/2}$$

где $\omega_{\kappa \text{ ph}}$ — фононные частоты, $\hat{\Delta}_{\alpha'\gamma'}$ определяет параметр порядка.

Расцепляя многочастичные средние, производя варьирование соответствующего функционала по $I(\Gamma)$ и используя некоторые упрощения, получаем следующие уравнения для функции Грина и полевого оператора:

$$\left(\frac{\delta}{\delta c_{\tau\tau'}} + \frac{\partial(\omega)}{\partial \tau} \right) G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \\ - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\hat{D}_v^2 \hat{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right] + \\ + \left[\Delta_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma |) - \Delta_{\alpha\gamma}^{*t}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma |) \right] F_{\gamma\beta}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \\ = \delta_{\alpha\beta} \oint_{\Gamma} e_{\nu'} dx'_{\nu'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle = \\ - \frac{1}{2} N^2 f_3(N) \int_{x'', \tau'' \in \Gamma} d\mathbf{x}'' g_{\text{ph}}(\mathbf{x}) g_{\text{ph}}(\mathbf{x}'') \sum_{\alpha'} \eta(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}'') \times \\ \times \left[D_{\alpha'\alpha'}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') + D_{\alpha'\alpha'}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') \right] \times \\ \times \left[G_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') G_{\gamma\beta}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \right. \\ \left. - F_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') F_{\gamma\beta}^{*}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right] + \\ + N f_2(N) \int_{x'', \tau'' \in \Gamma} d\mathbf{x}'' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \times \\ \times \left[G_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') G_{\gamma\beta}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \right. \\ \left. - F_{\alpha\gamma}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') F_{\gamma\beta}^{*}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right], \quad (11)$$

$$\left(\frac{\delta}{\delta c_{\tau\tau'}} + \frac{\partial(\omega)}{\partial \tau} \right) F_{\alpha\beta}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') + \\ + \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\hat{D}_v^2 F_{\alpha\beta}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right] + \left[\Delta_{\alpha\gamma}^{*t}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma |) - \right. \\ \left. - \Delta_{\alpha\gamma}^{*t}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma |) \right] G_{\gamma\beta}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') = \\ = \frac{1}{2} N^2 f_3(N) \int_{x'', \tau'' \in \Gamma} d\mathbf{x}'' g_{\text{ph}}(\mathbf{x}) g_{\text{ph}}(\mathbf{x}'') \sum_{\alpha'} \hat{\eta}(\mathbf{x}) \hat{\eta}(\mathbf{x}'') \times \\ \times \left[D_{\alpha'\alpha'}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') + D_{\alpha'\alpha'}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') \right] \times \\ \times \left[F_{\alpha\gamma}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') G_{\gamma\beta}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \right. \\ \left. - G_{\alpha\gamma}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') F_{\gamma\beta}^{*}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right] - \\ - N f_2(N) \int_{x'', \tau'' \in \Gamma} d\mathbf{x}'' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \times \\ \times \left[F_{\alpha\gamma}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') G_{\gamma\beta}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') - \right. \\ \left. - G_{\alpha\gamma}^{*}(\mathbf{x}, \tau | \Gamma | \mathbf{x}'', \tau'') F_{\gamma\beta}^{*}(\mathbf{x}'', \tau'' | \Gamma | \mathbf{x}', \tau') \right], \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\delta}{\delta c_{\tau\tau'}} + \frac{\partial(\omega)}{\partial\tau} + \hat{\xi}(\mathbf{x}) \right) D_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}', \tau') = \\ & = \delta_{\alpha\beta} \oint_{\Gamma} e_{v'} dx'_{v'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle - \\ & - \frac{1}{2} N^2 f_3(N) \int_{x'', \tau'' \in \Gamma} d\mathbf{x}'' g_{\text{ph}}(\mathbf{x}) g_{\text{ph}}(\mathbf{x}') \hat{\eta}(\mathbf{x}) \times \\ & \times \left[G_{\gamma\delta}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}'', \tau'') G_{\delta\gamma}(\mathbf{x}'', \tau''|\Gamma|\mathbf{x}, \tau) - \right. \\ & \left. - F_{\gamma\delta}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}'', \tau'') F_{\delta\gamma}^*(\mathbf{x}'', \tau''|\Gamma|\mathbf{x}, \tau) \right] \times \\ & \times \hat{\eta}(\mathbf{x}'') D_{\alpha\beta}(\mathbf{x}'', \tau''|\Gamma|\mathbf{x}', \tau'), \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \nabla_{\mu} \frac{\delta}{\delta \delta_{\mu\nu}} \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle + \frac{i}{4} f_1 N^2 \lim_{\substack{\mathbf{x}, \tau \rightarrow \mathbf{x}', \tau' \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \int_{x \in \Gamma_{x, \tau, x', \tau'}} \frac{D\kappa(\mathbf{x}'', \tau'')}{2\pi c_{\kappa}} \times \\ & \times (\nabla_{\mathbf{x}\nu} - \nabla_{\mathbf{x}\nu}) \sum_{\gamma=1}^2 G_{\gamma\gamma\kappa}(\mathbf{x}, \tau|\varepsilon|\mathbf{x}', \tau') \exp \left(\int_{\kappa} dx''_{\nu} p_{0\nu}[\kappa] \right) \times \\ & \times [\langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma + \kappa) \rangle - \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle \langle \text{Tr } \hat{B}(\kappa) \rangle] = \\ & = \frac{i}{2} g_1 N^2 \oint_{\Gamma} dx'_{v'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \times \\ & \times \left[\langle \text{Tr } \hat{B}(c_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}) \text{Tr } \hat{B}(c_{\mathbf{x}', \mathbf{x}}) \rangle - \frac{1}{N^2} \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

В этих уравнениях $\frac{\delta}{\delta c_{\tau, \tau'}}$ — производная, описывающая эволюцию во времени контура Γ , иными словами описывающая динамический сдвиг электронной частоты, обусловленный взаимодействием электрона с флюктуирующими полем $A_{\nu}^{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)$, а также аналогичный сдвиг фононной частоты; $\frac{\partial(\omega)}{\partial\tau}$ — производная по времени τ , от которого зависят электронные и фононные операторы, определяющая частоту электронных возбуждений вблизи уровня Ферми, а также фононов, которыми обмениваются электроны, участвующие в сверхпроводящем спаривании; $f_i(N)$ — дискретные функции размерности группы $SU(N)$.

Рассмотрим несколько подробнее правую часть в выражении (14). Формально его появление связано с изменением площади контура Γ на $\delta s_{\mu\nu}$. Изменяя площадь контура Γ на $\delta s_{\mu\nu}$, мы тем самым изменяем поток флюктуирующего поля $A_{\nu}^{\alpha}(\mathbf{x})$ через контур. Изменение потока приводит к наведению в контуре эффективной электродвижущей силы, которая создает электромагнитное поле, способное воздействовать на электроны проводимости. Следовательно, это слагаемое можно понимать как «ток смещения», обусловленный флюктуациями спиновой и зарядовой плотности:

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_v(\mathbf{x}) \rangle & = \frac{i}{4} g_1 N^2 \lim_{\mathbf{x}, \tau \rightarrow \mathbf{x}', \tau'} (\nabla_{\mathbf{x}'_v} - \nabla_{\mathbf{x}_v}) \times \\ & \times \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \sum_{\gamma=1}^2 \text{Tr} \left[\hat{\tau}^{\alpha}, \hat{G}_{\gamma\gamma}^{\alpha}(\mathbf{x}, \tau|\Gamma|\mathbf{x}', \tau') \right] + \\ & + \frac{i}{2} g_1 N^2 \oint_{\Gamma} dx'_{v'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \left\langle \text{Tr } \hat{\tau}^{\alpha} \hat{B}(c_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}) \hat{\tau}^{\alpha} \hat{B}(c_{\mathbf{x}', \mathbf{x}}) \right\rangle. \end{aligned}$$

Итак, уравнения (11)–(14) описывают состояния сверхпроводника при отсутствии магнитной подсистемы.

Потенциал $A_{\nu}^{\alpha}(\mathbf{x})$ есть не что иное, как обобщенный векторный потенциал электромагнитного поля. Уравнения показывают, что взаимодействие электронов можно эффективно рассматривать не только как парное, но и как четырехчастичное, т. е. обменное взаимодействие существует не только между электронами, образующими пару, но и между электронами разных пар. Полученные уравнения учитывают флюктуации электромагнитного поля, которое определяется электрон-ионной системой. Следовательно, в процессе образования связанных электронных пар по-прежнему будут участвовать флюктуации.

Наряду с обменным взаимодействием в рассматриваемых магнитных системах существует еще и квадрупольное обменное взаимодействие, которое необходимо учитывать для объяснения свойств магнитных систем [9–11].

В рамках рассматриваемой модели средний потенциал такого взаимодействия имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle \langle K_{\kappa_1, \kappa_1^*, \kappa_2, \kappa_2^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma|\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)} & = \frac{N^4}{(N^2 - 1)^4} N^3 f_4(N) \times \\ & \times \int_{\substack{-\kappa_1, -\kappa_1^*, \\ -\kappa_2, -\kappa_2^* \in \\ \in \Gamma_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l}}} \frac{D_{\kappa_1}(\mathbf{x}'_i)}{2\pi c_{\kappa}} \frac{D_{\kappa_1^*}(\mathbf{x}'_j)}{2\pi c_{\kappa}} \frac{D_{\kappa_2}(\mathbf{x}'_k)}{2\pi c_{\kappa}} \frac{D_{\kappa_2^*}(\mathbf{x}'_l)}{2\pi c_{\kappa}} d\mathbf{x}_i d\mathbf{x}_j d\mathbf{x}_k d\mathbf{x}_l \times \\ & \times \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4=1}^{N^2-1} G_{i i \kappa_1}^*(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) G_{k k \kappa_2}^*(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_l) V(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l) \times \\ & \times G_{l l \kappa_1^*}(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j) G_{l l \kappa_2^*}(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_l) \left\langle \text{Tr } \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_1} \hat{B}(\kappa_1) \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \text{Tr } \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_2} \hat{B}(\kappa_1^*) \right\rangle \times \\ & \times \exp \left(\int_{\kappa_1} dx''_{\nu} p_{10\nu}[\kappa_1] + \int_{\kappa_1^*} dx''_{\nu} p_{10\nu}[\kappa_1^*] \right) \times \\ & \times \left\langle \text{Tr } \hat{\tau}^{\alpha_3} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_3} \hat{B}(\kappa_2) \right\rangle \left\langle \text{Tr } \hat{\tau}^{\alpha_4} \hat{B}(\Gamma) \hat{\tau}^{\alpha_4} \hat{B}(\kappa_2^*) \right\rangle \times \\ & \times \exp \left(\int_{\kappa_2} dx''_{\nu} p_{20\nu}[\kappa_2] + \int_{\kappa_2^*} dx''_{\nu} p_{20\nu}[\kappa_2^*] \right), \\ f_4(N=1) & = 1, \quad f_4(N \rightarrow \infty) \rightarrow 1/N^3. \quad (15) \end{aligned}$$

Вычислив интегралы при $l_{\kappa}/L_{\kappa} \ll 1$, получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \langle \langle K_{\kappa_1, \kappa_1^*, \kappa_2, \kappa_2^*}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j|\Gamma|\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)} & = \\ & = N^3 f_4(N) K_0 \langle \text{Tr } \hat{B}(\Gamma) \rangle^4 \langle \text{ch}(\pi l_{\kappa} p_0) \rangle_{\rho(\kappa, p_0)}^2. \quad (16) \end{aligned}$$

Обычно $K_0/J \ll 1$, однако за счет обмена импульсами между ячейками квадрупольное взаимодействие может быть усилено.

Итак, мы определили параметры обменного и квадрупольного обменного взаимодействий. Если в системе существует дальний магнитный порядок, то свойства системы можно описать с помощью микроскопического гамильтонiana, который в данном случае аналогичен модели Гейзенберга:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{x_1, x_2} \text{Tr} \left[J((x_1 - x_2) | \Gamma_{x_1, x_2}) (\hat{\mathbf{S}}_{x_1} \hat{\mathbf{S}}_{x_2}) \right] - \\ -\frac{1}{2} \sum_{x_1, x_2} \text{Tr} \left[K((x_1 - x_2) | \Gamma_{x_1, x_2}) (x_2 - x_1) | \Gamma_{x_2, x_1}) (\hat{\mathbf{S}}_{x_1} \hat{\mathbf{S}}_{x_2})^2 \right],$$

причем операторы $\hat{\mathbf{S}}_{x_i}$ определены в контурном представлении:

$$\hat{\mathbf{S}}_{x_i} = \frac{1}{N} \hat{T} \exp \left\{ \oint_{\Gamma_{x_i}} dx_\nu \hat{A}_\nu \right\} \mathbf{S}_{x_i},$$

а средние значения обменных интегралов $J((x_1 - x_2) | \Gamma_{x_1, x_2})$ и $K((x_1 - x_2) | \Gamma_{x_1, x_2}) (x_2 - x_1) | \Gamma_{x_2, x_1})$ определяются функциями $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle^2 \langle \text{ch}(\pi l_\kappa p_0) \rangle_{\rho(\kappa, p_0)}$ и $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle^4 \langle \text{ch}(\pi l_\kappa p_0) \rangle_{\rho(\kappa, p_0)}^2$, т. е. структурой неупорядоченной магнитной подсистемы.

Магнитная неупорядоченная система способна усиливать эффективное взаимодействие между s -электронами, что может привести к установлению дальнего магнитного порядка или связанных электронных пар. Из формул (15)–(16) следует, что величина K не зависит от J , т. е. если неупорядоченная магнитная подсистема отсутствует, то величины обменного и квадрупольного обменного интегралов не зависят друг от друга.

При наличии неупорядоченной системы спинов квадрупольный обменный интеграл зависит от функции, которая определяет величину обменного интеграла $\langle \langle J_{\kappa\kappa^*}(x_i, x_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}$.

Выражение (16) можно переписать в следующем виде:

$$\langle \langle K_{\kappa_1, \kappa_1^*; \kappa_2, \kappa_2^*}(x_i, x_j | \Gamma | x_k, x_l) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)} = \\ = N \frac{f_4(N)}{f_2^2(N)} K_0 \frac{\langle \langle J_{\kappa_1 \kappa_1^*}(x_i, x_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}}{J} \frac{\langle \langle J_{\kappa_2 \kappa_2^*}(x_k, x_l | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}}{J}.$$

Это означает, что при $\langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle \rightarrow 1$ квадрупольное обменное взаимодействие может быть усилено параметром обменного взаимодействия. Это оказывается возможным из-за того, что наличие неупорядоченной

спиновой подсистемы приводит к возникновению в системе эффективного электромагнитного поля, которое переводит нормальные s -электроны в связанные пары (возможен и обратный процесс), взаимодействующие между собой с помощью обмена виртуальной квазичастицей. Математически это означает, что внутри контуров Γ отсутствуют особые точки, в окрестности которых имеет место сингулярность поля A_ν^α .

Если рассматривать электрон-фононное взаимодействие в неупорядоченной магнитной системе, то на основе вышеприведенных выражений оказывается возможным вычислить параметр электрон-фононной связи, который будет иметь вид

$$\langle \lambda_{e-\text{ph}} \rangle = \lambda_{e-\text{ph}0} \langle \text{Tr} \hat{B}(\Gamma) \rangle^2 \langle \text{ch}(\pi l_\kappa p_0) \rangle_{\rho(\kappa, p_0)},$$

или

$$\langle \lambda_{e-\text{ph}} \rangle = \lambda_{e-\text{ph}0} \frac{\langle \langle J_{\kappa\kappa^*}(x_i, x_j | \Gamma) \rangle \rangle_{\rho(\kappa)}}{N f_2(N) J},$$

т. е. оказывается перенормированным относительным обменным взаимодействием между электронами и может быть им усилен, что приводит в конечном счете к перенормировке частот фононного спектра.

Итак, мы показали, что магнитная неупорядоченная подсистема играет определяющую роль в формировании эффективного обменного взаимодействия между электронами, которое способно усиливать взаимодействия релятивистской природы.

Список литературы

- Хьюзмоллер Д. Расслоенные пространства. М., 1970.
- Yang C., Mills R.G. // Phys. Rev. 1954. **96**. P. 191.
- Sadovnikov B.I., Savchenko A.M. // Physica A. 1999. **271**. P. 411.
- Sadovnikova M.B., Savchenko A.M., Scarpetta G. // Phys. Lett. A. 2000. **274**. P. 236.
- Savchenko M.A., Stefanovich A.V. Fluctuational superconductivity of magnetic systems. Springer-Verlag, 1990.
- Зайлер Э. Калибровочные теории. М., 1985.
- Mandelstam S. // Phys. Rev. 1968. **175**. P. 1580.
- Де Бут Р. Континуальная теория дисклинаций. М., 1977.
- Rado G.T., Suhl H. Magnetism. N. Y., 1963.
- Van Vleck J.H. // Phys. Rev. 1937. **52**. P. 1178.
- Bertaut E.F. // Ann. Phys. 1972. **7**. P. 433.

The calculation of the quadrupole exchange interaction parameter in the system of disordered magnetic moments

М. К. Бахнян^a, А. М. Савченко^c, В. И. Садовников^b

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

E-mail: ^abakhnyan@gmail.com, ^ba.m.savchenko@gmail.com, ^csadovnikov@phys.msu.ru.

Parameters of quadrupole exchange and electron-phonon interaction are calculated within the limits of exchange interaction model. It is shown, that magnetic disorder system forms an effective exchange interaction between electrons.

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

PACS: 73.43.Nq.

Received 11 December 2011.

English version: Moscow University Physics Bulletin 2(2012).

Сведения об авторах

- Михаил Константинович Бахнян — аспирант; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: bakhnyan@gmail.com.
- Александр Максимович Савченко — докт. физ.-мат. наук, доцент, ст. преподаватель; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.
- Борис Иосифович Садовников — докт. физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 932-80-10, e-mail: sadovnikov@phys.msu.ru.