Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского
Серия «Физика». Том 22 (61). 2009 г. № 1. С. 61-73

УДК 537.638.22

ЭФФЕКТИВНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ КОСВЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ПРОВОДЯЩИХ МАГНЕТИКОВ

Гопман А.Б.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: gopman@tnu.crimea.ua

Предложен метод интегрирования уравнений движения для операторов электронных переходов. Получены их решения в виде ряда по степеням операторов локализованных спинов. На основе полученных решений построены эффективные гамильтонианы косвенного взаимодействия в проводящем магнетике в четырех низших порядках по степеням операторов локализованных спинов.
Ключевые слова: косвенное взаимодействие, s-f модель, эффективный гамильтониан.

ВВЕДЕНИЕ

Последовательный учет электронов проводимости в проводящих магнетиках остается актуальной задачей по настоящее время. Традиционный подход к решению этой проблемы связан с применением s-f модели С.В.Вонсовского (см., например $[1]$). Согласно этой модели при описании металлов учитывается только внутризонный s-f – обмен, который и приводит к появлению косвенного обмена между локализованными спинами посредством подвижных коллективизированных электронов (электронов проводимости). В случае чистых металлов, для которых справедливо неравенство $I_0 S << \varepsilon_F$ ($I_0 S$ - энергия спин-электронного обмена, ε_F - фермиевская энергия электронов проводимости), возможно разложение обменного модельного гамильтониана в ряд по имеющемуся малому параметру $I_0 S / \varepsilon_F$. В результате во втором порядке разложения возникает эффективный магнитный гамильтониан, на котором основана теория Рудермана – Кителя – Касуя – Йосида. Однако попытки построить гамильтонианы косвенного обмена в высших порядках по степеням операторов локализованных спинов с использованием следующих приближений теории возмущения по $I_0 S / \varepsilon_F$ приводят к расходящимся выражениям. Причиной этого являются особенности спектров электронов проводимости $[2]$ и, как следствие этого, неаналитичность энергии рассматриваемой системы по этому параметру. В случае проводящих сплавов, для которых $I_0 S \approx \varepsilon_F$ невозможно применение, описанного выше подхода, и, насколько известно автору, нет приемлемых методов, позволяющих получить эффективный гамильтониан косвенного взаимодействия.

Существует еще целый круг проблем, в описании которых необходимо учитывать электронную подсистему проводящего магнетика. В качестве таковых можно привести, например, следующие проблемы. Это и гигантское магнетосопротивление при ориентационном фазовом переходе в полях, и s-d обменная неустойчивость магнитных флуктуаций спинового тока, управляющего состояниями спинтронных устройств $\left[3\right]$.

Поставим перед собой следующую задачу: последовательно исключить из рассмотрения переменные электронной подсистемы и получить эффективный гамильтониан косвенного взаимодействия в подсистеме локализованных спинов в рамках разложения по эффективному взаимодействию подсистем. Для этого сначала решим вспомогательную задачу: построим решения уравнений движения на операторы электронных переходов.

1. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОПЕРАТОРОВ

Рассмотрим динамическую систему, первая подсистема которой - система локализованных спинов $\vec{S}_f$ взаимодействует с подсистемой коллективизированных электронов, спиновые состояния которых на узле решетки описываются операторами $\vec{s}_f$. Полагаем, что взаимодействие между подсистемами носит адиабатический характер. Гамильтониан исследуемой системы будет иметь вид:

$$H = H_c + H_a + H_{ca}, \tag{1}$$

где

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma}$$

- гамильтониан невзаимодействующей электронной подсистемы в импульсном представлении, H_a - гамильтониан подсистемы локализованных спинов (например, гамильтониан Гейзенберга),

$$H_{ca} = -\frac{2}{N}\sum_{k,k'}\sum_{f} \exp\left[-i\left(k-k'\right)f\right] I_0(k,k')\vec{S}_f\vec{s}_{k,k'},$$

- обменный гамильтониан (гамильтониан взаимодействия подсистем), где $\vec{s}_{k,k'}$ - вектор, компонентами которого являются операторы электронных переходов. Для простоты рассуждений положим, что обменный интеграл, характеризующий взаимодействие подсистем, $I_0\left(k,k'\right) = I_0 = Const$. Тогда обменный гамильтониан примет вид

$$H_{ca} = -\frac{2I_0}{N}\sum_{k,k'}\sum_{f} \exp\left[-i\left(k-k'\right)f\right] \vec{S}_f\vec{s}_{k,k'}.$$

Подставим в это выражение явные выражения для компонент операторных векторов, и перейдем к полному импульсному представлению. Для этого воспользуемся преобразованием

$$S^\alpha_p = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{f} \mathrm{e}^{-ipf}\, S^\alpha_f. \tag{2}$$

В результате обменный гамильтониан в импульсном представлении примет вид

$$H_{ca} = -\frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_{k,p} \left\{ S_p^+ c_{k-p\downarrow}^+ c_{k\uparrow} + S_p^- c_{k-p\uparrow}^+ c_{k\downarrow} + S_p^z \left(c_{k-p\uparrow}^+ c_{k\uparrow} - c_{k-p\downarrow}^+ c_{k\downarrow} \right) \right\}, \tag{3}$$

где операторы обеих подсистем подчиняются следующей алгебре

$$\begin{gathered} \left[c_{k,\sigma}, c_{p,\nu}^+ \right]_+ = \delta_{kp} \delta_{\sigma,\nu}; \quad \left[c_{k,\sigma}^{\pm}, S_p^{\alpha} \right]_- = 0; \\ \left[S_p^+, S_k^- \right]_- = \frac{2}{\sqrt{N}} S_{p+k}^z; \quad \left[S_p^z, S_k^{\pm} \right]_- = \pm \frac{1}{\sqrt{N}} S_{p+k}^{\pm}. \end{gathered} \tag{4}$$

Согласно (2), правила сопряжения операторов локализованных спинов в импульсном представлении имеют вид

$$\left(S_p^{\pm} \right)^+ = S_{-p}^{\mp}; \quad \left(S_p^z \right)^+ = S_{-p}^z. \tag{5}$$

Рассмотрим уравнения движения на квазибозевские операторы переходов $c_{p\sigma}^+ c_{k\nu}$ коллективизированных электронов в рассматриваемой модели

$$i\frac{d}{dt} c_{p\sigma}^+ c_{k\nu} = \left[c_{p\sigma}^+ c_{k\nu}, H \right]_-.$$

Подставляя в эти уравнения явный вид гамильтониана (1), (3), получим уравнения движения на операторы электронных переходов $c_{p\sigma}^+ c_{k\nu}$ в виде

$$i\frac{d}{dt} c_{p\uparrow}^+ c_{k\uparrow} = \omega_{kp} c_{p\uparrow}^+ c_{k\uparrow} - \frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ -S_q^+ c_{p-q\downarrow}^+ c_{k\uparrow} + S_q^- c_{p\uparrow}^+ c_{k+q\downarrow} + S_q^z \left(c_{p\uparrow}^+ c_{k+q\uparrow} - c_{p-q\uparrow}^+ c_{k\uparrow} \right) \right\}; \tag{6a}$$

$$i\frac{d}{dt} c_{p\uparrow}^+ c_{k\downarrow} = \omega_{kp} c_{p\uparrow}^+ c_{k\downarrow} - \frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ S_q^+ \left(c_{p\uparrow}^+ c_{k+q\uparrow} - c_{p-q\downarrow}^+ c_{k\downarrow} \right) - S_q^z \left(c_{p\uparrow}^+ c_{k+q\downarrow} + c_{p-q\uparrow}^+ c_{k\downarrow} \right) \right\}; \tag{6b}$$

$$i\frac{d}{dt} c_{p\downarrow}^+ c_{k\uparrow} = \omega_{kp} c_{p\downarrow}^+ c_{k\uparrow} - \frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ S_q^- \left(c_{p\downarrow}^+ c_{k+q\downarrow} - c_{p-q\uparrow}^+ c_{k\uparrow} \right) + S_q^z \left(c_{p\downarrow}^+ c_{k+q\uparrow} + c_{p-q\downarrow}^+ c_{k\uparrow} \right) \right\}; \tag{6c}$$

$$i\frac{d}{dt} c_{p\downarrow}^+ c_{k\downarrow} = \omega_{kp} c_{p\downarrow}^+ c_{k\downarrow} - \frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ S_q^+ c_{p\downarrow}^+ c_{k+q\uparrow} - S_q^- c_{p-q\uparrow}^+ c_{k\downarrow} + S_q^z \left(c_{p-q\downarrow}^+ c_{k\downarrow} - c_{p\downarrow}^+ c_{k+q\downarrow} \right) \right\}, \tag{6d}$$

где введено обозначение

$$\omega_{kp} = \varepsilon_k - \varepsilon_p. \tag{7}$$

Заметим, что выражение (7) определяет энергию электронного перехода. Представим систему уравнений (6a-d) в более компактной матричной форме. Для этого введем в рассмотрение вектор – столбец $\left| p, k \right\rangle$, определенный на линейном метрическом гильбертовом пространстве операторов $\boldsymbol{H}$ и построенный из операторов электронных переходов по правилу

$$\left| p,k \right\rangle = \begin{pmatrix} c^{+}_{p\uparrow} c_{k\uparrow} \\ c^{+}_{p\uparrow} c_{k\downarrow} \\ c^{+}_{p\downarrow} c_{k\uparrow} \\ c^{+}_{p\downarrow} c_{k\downarrow} \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Тогда наша система уравнений в матричном представлении примет вид

$$i\frac{d}{dt}\left|p,k\right\rangle = \omega_{kp}\left|p,k\right\rangle - \frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q \left\{ \begin{pmatrix} S_q^z & S_q^- & 0 & 0 \\ S_q^+ & -S_q^z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_q^z & S_q^- \\ 0 & 0 & S_q^+ & -S_q^z \end{pmatrix} \left|p,k+q\right\rangle + \begin{pmatrix} -S_q^z & 0 & -S_q^+ & 0 \\ 0 & -S_q^z & 0 & -S_q^+ \\ -S_q^- & 0 & S_q^z & 0 \\ 0 & -S_q^- & 0 & S_q^z \end{pmatrix} \left|p-q,k\right\rangle \right\}. \tag{9}$$

Отметим, что возникшие в правой части уравнения (9) матрицы имеют блочную структуру. Заметим, что справедливо следующее утверждение:

$$\begin{pmatrix} S_m^z & S_m^- \\ S_m^+ & -S_m^z \end{pmatrix} = \vec{S}_m \vec{\sigma},$$

где $\vec{\sigma}$ - вектор, компонентами которого являются матрицы Паули.

Получим решения уравнения (9). Для этого воспользуемся методом вариации постоянной. Рассмотрим укороченное уравнение

$$i\frac{d}{dt}\left|p,k\right\rangle = \omega_{kp}\left|p,k\right\rangle,$$

решение которого, вследствие адиабатичности взаимодействия, имеет вид

$$\left|p,k\right\rangle = \left|Const\right\rangle_{p,k} \exp\left\{-i\omega_{kp}(t-t_0)\right\}, \tag{10}$$

где t_0 - момент включения взаимодействия между подсистемами, $\left|Const\right\rangle_{p,k}$ - векторная операторная константа интегрирования. Положим в решении (10) $\left|Const\right\rangle_{p,k} = \left|p,k,t\right\rangle$ и подставим в исходное уравнение (9). В результате получим уравнение на вектор $\left|p,k,t\right\rangle$ в следующем виде

$$\frac{d}{dt}\left|p,k,t\right\rangle = i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q \left[\begin{pmatrix} S_q^z & S_q^- & 0 & 0 \\ S_q^+ & -S_q^s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_q^z & S_q^- \\ 0 & 0 & S_q^+ & -S_q^s \end{pmatrix} \exp\left\{-i\omega_{k+q,k}\left(t-t_0\right)\right\}\left|p,k+q,t\right\rangle - \right. \tag{11}$$

$$\left.-\begin{pmatrix} S_q^z & 0 & S_q^+ & 0 \\ 0 & S_q^z & 0 & S_q^+ \\ S_q^- & 0 & -S_q^z & 0 \\ 0 & S_q^- & 0 & -S_q^z \end{pmatrix} \exp\left\{-i\omega_{p,p-q}\left(t-t_0\right)\right\}\left|p-q,k,t\right\rangle\right].$$

Построим формальное решение уравнения (11). Для этого введем в рассмотрение операторы $\underset{1\to\sum_q}{\Sigma}(t)$ и $\underset{2\to\sum_q}{\Sigma}(t)$, действие которых на вектор электронных состояний системы $\left|p,k,t\right\rangle$ определено следующим образом

$$\underset{1\to\sum_q}{\Sigma}(t)\left|p,k,t\right\rangle = \sum_q \begin{pmatrix} S_q^z & 0 & S_q^+ & 0 \\ 0 & S_q^z & 0 & S_q^+ \\ S_q^- & 0 & -S_q^z & 0 \\ 0 & S_q^- & 0 & -S_q^z \end{pmatrix} \exp\left\{-i\omega_{p,p-q}\left(t-t_0\right)\right\}\left|p-q,k,t\right\rangle; \quad (12)$$

$$\underset{2\to\sum_q}{\Sigma}(t)\left|p,k,t\right\rangle = \sum_q \begin{pmatrix} S_q^z & S_q^- & 0 & 0 \\ S_q^+ & -S_q^z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_q^z & S_q^- \\ 0 & 0 & S_q^+ & -S_q^z \end{pmatrix} \exp\left\{-i\omega_{k+q,k}\left(t-t_0\right)\right\}\left|p,k+q,t\right\rangle. \quad (13)$$

Из определений (12),(13) несложно понять введенные обозначения. Число, стоящее в определении оператора, указывает на порядок индекса, по которому в результате действия операторов, возникает суммирование.

Тогда уравнение (11) примет следующий символьный вид

$$\frac{d}{dt}\left|p,k,t\right\rangle = i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\left\{\underset{k\to\sum_q}{\Sigma}(t) - \underset{p\to\sum_q}{\Sigma}(t)\right\}\left|p,k,t\right\rangle. \quad (14)$$

Формально интегрируя это уравнение, получим его решение в следующем виде

$$\left|p,k,t\right\rangle = T\exp\left\{i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\int_{t_0}^{t}\left\{\underset{2\to\sum_q}{\Sigma}(\tau) - \underset{1\to\sum_q}{\Sigma}(\tau)\right\}d\tau\right\}\left|C(p.k)\right\rangle,$$

где $\left|C(p,k)\right\rangle$ - векторная операторная константа интегрирования. Подставляя полученное выражение в (10), получим формальное решение уравнения (9) в следующем виде

$$\left|p,k\right\rangle = T\exp\left\{i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\int_{t_0}^{t}\left\{\underset{k\to\sum_q}{\Sigma}(\tau) - \underset{p\to\sum_q}{\Sigma}(\tau)\right\}d\tau\right\}\exp\left\{-i\omega_{kp}(t-t_0)\right\}\left|C(p,k)\right\rangle. \quad (15)$$

Из начальных условий, налагаемых на уравнение (9), следует, что

$$\left|C(p,k)\right\rangle = \left|p,k\right\rangle_0 = \begin{pmatrix} \overset{0}{c}{}^{+}_{p\uparrow}\overset{0}{c}_{k\uparrow} \\ \overset{0}{c}{}^{+}_{p\uparrow}\overset{0}{c}_{k\downarrow} \\ \overset{0}{c}{}^{+}_{p\downarrow}\overset{0}{c}_{k\uparrow} \\ \overset{0}{c}{}^{+}_{p\downarrow}\overset{0}{c}_{k\downarrow} \end{pmatrix}$$

- вектор, построенный на операторах электронных переходов в момент включения взаимодействия. Тогда решение (15) примет вид

$$\left|p,k\right\rangle = T\exp\left\{ i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\int_{t_0}^{t}\left\{ \sum_{\substack{k\to\Sigma \\ q}}(\tau) - \sum_{\substack{p\to\Sigma \\ q}}(\tau) \right\} d\tau \right\} \exp\left\{-i\omega_{kp}(t-t_0)\right\}\left|p.k\right\rangle_0 . \quad (16)$$

Обсудим полученное выражение. Во-первых, полученное решение представляет собой формальный ряд, построенный по эффективному косвенному взаимодействию в подсистеме локализованных спинов, а, во-вторых, видно, что операторы электронных переходов в произвольный момент времени являются функциями от операторов электронных переходов в момент включения взаимодействия между подсистемами локализованных спинов и коллективизированных электронов. Таким образом, наши решения фактически определяются поведением свободного решеточного электронного газа. Этот момент является основным, поскольку в дальнейшем позволит провести точное усреднение по электронным переменным и получить эффективный гамильтониан косвенного взаимодействия в спиновой подсистеме.

Вернемся к нашему решению и выпишем искомые решения в нескольких низших порядках по эффективному взаимодействию в спиновой подсистеме. Для этого разложим в выражении (16) Т-экспоненту в ряд и представим решение в виде ряда по операторам $\sum(t)$. Тогда в нулевом приближении решение уравнений движения операторов электронных переходов примет вид

$$\begin{aligned} \left(c^{+}_{p\uparrow}c_{k\uparrow}\right)_0 &= \tilde{c}^{+}_{p\uparrow}\tilde{c}_{k\uparrow}; \\ \left(c^{+}_{p\uparrow}c_{k\downarrow}\right)_0 &= \tilde{c}^{+}_{p\uparrow}\tilde{c}_{k\downarrow}; \\ \left(c^{+}_{p\downarrow}c_{k\uparrow}\right)_0 &= \tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k\uparrow}; \\ \left(c^{+}_{p\downarrow}c_{k\downarrow}\right)_0 &= \tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k\downarrow}, \end{aligned} \quad (17)$$

где введено обозначение

$$\tilde{c}^{\pm}_{k\sigma} = \overset{0}{c}{}^{\pm}_{k\sigma}\mathrm{e}^{\mp i\varepsilon_k(t-t_0)} \quad (18)$$

Нижний индекс в левой части выражения (17) указывает на порядок приближения. Таким образом, видно, что в качестве нулевого приближения выступает невзаимодействующий эволюционирующий решеточный электронный газ.

Обратимся к поправке первого порядка по операторам $\sum(t)$

$$\left(\left|p,k\right\rangle\right)_1=\left\{i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\int\limits_{t_0}^{t}\left\{\sum_{2\to\sum\limits_q}(\tau)-\sum_{1\to\sum\limits_q}(\tau)\right\}d\tau\right\}\left|p,k\right\rangle_0\exp\left\{-i\omega_{kp}(t-t_0)\right\}, \qquad (19)$$

Воспользуемся правилами действия (12), (13) операторов $\sum\limits_{2\to\sum\limits_q}(t)$ и $\sum\limits_{1\to\sum\limits_q}(t)$ на операторный вектор $\left|p,k\right\rangle_0$, перейдем от матричной к обычной форме записи и вычислим возникающие в получаемых выражениях интегралы. Тогда из (19) получим искомую поправку к решениям уравнений (6a-d) в линейном по операторам локализованных спинов приближении

$$\left(c^+_{p\uparrow}c_{k\uparrow}\right)_1=-\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q\left\{\frac{1}{\omega_{k+q,k}}\left\{S^z_q\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}+S^-_q\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right\}-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\omega_{p,p-q}}\left\{S^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k\uparrow}+S^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k\uparrow}\right\}\right\}; \qquad (20a)$$

$$\left(c^+_{p\uparrow}c_{k\downarrow}\right)_1=-\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q\left\{\frac{1}{\omega_{k+q,k}}\left\{S^+_q\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}-S^z_q\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right\}-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\omega_{p,p-q}}\left\{S^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k\downarrow}+S^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k\downarrow}\right\}\right\}; \qquad (20b)$$

$$\left(c^+_{p\downarrow}c_{k\uparrow}\right)_1=-\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q\left\{\frac{1}{\omega_{k+q,k}}\left\{S^-_q\tilde{c}^+_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}+S^z_q\tilde{c}^+_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}\right\}-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\omega_{p,p-q}}\left\{S^-_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k\uparrow}-S^z_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k\uparrow}\right\}\right\}; \qquad (20c)$$

$$\left(c^+_{p\downarrow}c_{k\downarrow}\right)_1=\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_q\left\{\frac{1}{\omega_{k+q,k}}\left\{S^z_q\tilde{c}^+_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}-S^+_q\tilde{c}^+_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}\right\}-\right.$$
$$\left.-\frac{1}{\omega_{p,p-q}}\left\{S^z_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k\downarrow}-S^-_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k\downarrow}\right\}\right\}, \qquad (20d)$$

Вычислим поправку второго порядка по операторам $\sum(t)$ к полученным решениям. Эта поправка в символической форме имеет вид

$$\left|p,k\right\rangle_2=\frac{1}{2!}\left(i\frac{I_0}{\sqrt{N}}\right)^2\int\limits_{t_0}^{t}\left\{\sum_{\substack{2\to\sum\\ q}}(\tau')-\sum_{\substack{1\to\sum\\ q}}(\tau')\right\}d\tau'\int\limits_{t_0}^{t}\left\{\sum_{\substack{2\to\sum\\ q}}(\tau)-\sum_{\substack{1\to\sum\\ q}}(\tau)\right\}d\tau\left|p,k\right\rangle_0 \mathrm{e}^{-i\omega_{kp}(t-t_0)}.$$

Последовательно подействуем на вектор $\left|p,k\right\rangle_0$ операторами $\sum\limits_{\substack{2\to\sum\\ q}}(\tau)$ и $\sum\limits_{\substack{1\to\sum\\ q}}(\tau)$, перейдем от матричной формы записи к обычной. Тогда, вычисляя возникающие интегралы по времени, получим поправки к решениям уравнений движения в квадратичном по операторам локализованных спинов приближении:

$$\begin{aligned}(c^+_{p\uparrow}c_{k\uparrow})_2=\frac{I_0^2}{2N}\sum_{q,l}\Bigg\{&\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{k+q+l,k+q}}\Big[\left(S^z_lS^z_q+S^-_lS^+_q\right)\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q+l\uparrow}+\left(S^z_lS^-_q-S^-_lS^z_q\right)\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q+l\downarrow}\Big]-\\
&-\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{p,p-l}}\left(S^z_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}+S^z_lS^-_q\tilde{c}^+_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}+S^+_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}+S^+_lS^-_q\tilde{c}^+_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right)-\\
&-\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{k+l,k}}\left(S^z_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow}+S^-_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}+S^z_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow}+S^-_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}\right)+\\
&+\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{p-q,p-q-l}}\Big[\left(S^z_lS^z_q+S^+_lS^-_q\right)\tilde{c}^+_{p-q-l\uparrow}\tilde{c}_{k\uparrow}+\left(S^z_lS^+_q-S^+_lS^z_q\right)\tilde{c}^+_{p-q-l\downarrow}\tilde{c}_{k\uparrow}\Big]\Bigg\};\end{aligned}\qquad(21a)$$

$$\begin{aligned}(c^+_{p\uparrow}c_{k\downarrow})_2=\frac{I_0^2}{2N}\sum_{q,l}\Bigg\{&\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{k+q+l,k+q}}\Big[\left(S^+_lS^z_q-S^z_lS^+_q\right)\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q+l\uparrow}+\left(S^+_lS^-_q+S^z_lS^z_q\right)\tilde{c}^+_{p\uparrow}\tilde{c}_{k+q+l\downarrow}\Big]-\\
&-\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{p,p-l}}\left(S^z_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}-S^z_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}+S^+_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow}-S^+_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right)-\\
&-\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{k+l,k}}\left(S^+_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow}-S^z_lS^z_q\tilde{c}^+_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}+S^+_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow}-S^z_lS^+_q\tilde{c}^+_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}\right)+\\
&+\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{p-q,p-q-l}}\Big[\left(S^z_lS^z_q+S^+_lS^-_q\right)\tilde{c}^+_{p-q-l\uparrow}\tilde{c}_{k\downarrow}+\left(S^z_lS^+_q-S^+_lS^z_q\right)\tilde{c}^+_{p-q-l\downarrow}\tilde{c}_{k\downarrow}\Big]\Bigg\};\end{aligned}\qquad(21b)$$

$$
\begin{aligned}
(c^{+}_{p\downarrow}c_{k\uparrow})_2 = \frac{I_0^2}{2N}\sum_{q,l}\Bigg\{ & \frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{k+q+l,k+q}}\Big[\left(S^z_l S^z_q + S^-_l S^+_q\right)\tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q+l\uparrow} + \left(S^z_l S^-_q - S^-_l S^z_q\right)\tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q+l\downarrow}\Big] - \\
& -\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{p,p-l}}\left(S^-_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow} + S^-_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow} - S^z_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow} - S^z_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right) - \\
& -\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{k+l,k}}\left(S^z_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow} + S^-_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow} - S^z_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow} - S^-_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}\right) + \\
& +\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{p-q,p-q-l}}\Big[\left(S^-_l S^z_q - S^z_l S^-_q\right)\tilde{c}^{+}_{p-q-l\uparrow}\tilde{c}_{k\uparrow} + \left(S^-_l S^+_q + S^z_l S^z_q\right)\tilde{c}^{+}_{p-q-l\downarrow}\tilde{c}_{k\uparrow}\Big]\Bigg\};
\end{aligned}
\tag{21c}
$$

$$
\begin{aligned}
(c^{+}_{p\downarrow}c_{k\downarrow})_2 = \frac{I_0^2}{2N}\sum_{q,l}\Bigg\{ & \frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{k+q+l,k+q}}\Big[\left(S^+_l S^z_q - S^z_l S^z_q\right)\tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q+l\uparrow} + \left(S^+_l S^-_q + S^z_l S^z_q\right)\tilde{c}^{+}_{p\downarrow}\tilde{c}_{k+q+l\downarrow}\Big] - \\
& -\frac{1}{\omega_{k+q,k}\omega_{p,p-l}}\left(S^-_l S^+_q \tilde{c}^{+}_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow} - S^-_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-l\uparrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow} - S^z_l S^+_q \tilde{c}^{+}_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\uparrow} + S^z_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-l\downarrow}\tilde{c}_{k+q\downarrow}\right) - \\
& -\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{k+l,k}}\left(S^+_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow} - S^z_l S^-_q \tilde{c}^{+}_{p-q\uparrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow} - S^+_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\uparrow} + S^z_l S^z_q \tilde{c}^{+}_{p-q\downarrow}\tilde{c}_{k+l\downarrow}\right) + \\
& +\frac{1}{\omega_{p,p-q}\omega_{p-q,p-q-l}}\Big[\left(S^-_l S^z_q - S^z_l S^-_q\right)\tilde{c}^{+}_{p-q-l\uparrow}\tilde{c}_{k\downarrow} + \left(S^-_l S^+_q + S^z_l S^z_q\right)\tilde{c}^{+}_{p-q-l\downarrow}\tilde{c}_{k\downarrow}\Big]\Bigg\}.
\end{aligned}
\tag{21d}
$$

Приводить явный вид поправок третьего порядка, в силу их достаточной громоздкости, не будем, поскольку методика их вычисления ничем не отличается от вышеизложенной.

Повторяя приведенные выше рассуждения, можно получить поправки к решениям уравнений движения операторов электронных переходов и более высоких порядков по операторам локализованных спинов. Таким образом, наша вспомогательная задача оказалась решенной.

2. ЭФФЕКТИВНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ

Обратимся теперь к нашей основной задаче: получение эффективного гамильтониана косвенного взаимодействия. Для того, чтобы последовательно получить этот гамильтониан в различных приближениях по степеням операторов локализованных спинов, подставим поправки к решениям уравнений движения на операторы электронных переходов соответствующего порядка в обменный гамильтониан (3) и затем усредним полученный результат по электронным переменным. Следует отметить, что, поскольку решения уравнений движения на операторы электронных переходов зависят от электронных переменных, характеризующих свободный решеточный электронный газ, операция усреднения должна проводиться по гамильтониану H_c, характеризующему невзаимодействующий решеточный электронный газ. Вследствие этого вычисление средних проводится точно и не вызывает никаких трудностей. Продемонстрируем подробности вычислений на примере эффективных гамильтонианов нескольких низших порядков по степеням операторов локализованных спинов.

Для вычисления эффективного гамильтониана косвенного взаимодействия первого порядка по операторам локализованных спинов подставим в (3) решение нулевого порядка (17) уравнений движения и усредним результат по электронным переменным. В результате получим

$$\begin{aligned} H_{eff}^{(1)} &= -\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_{k,p}\left\{S_p^+\left\langle \tilde{c}_{k-p\downarrow}^+\tilde{c}_{k\uparrow}\right\rangle_{H_c} + S_p^-\left\langle \tilde{c}_{k-p\uparrow}^+\tilde{c}_{k\downarrow}\right\rangle_{H_c} + S_p^z\left(\left\langle \tilde{c}_{k-p\uparrow}^+\tilde{c}_{k\uparrow}\right\rangle_{H_c} - \left\langle \tilde{c}_{k-p\downarrow}^+\tilde{c}_{k\downarrow}\right\rangle_{H_c}\right)\right\} = \\ &= -\frac{I_0}{\sqrt{N}}\sum_{k,p} S_p^z\left(N_{k\uparrow}\delta_{k-p,k} - N_{k\downarrow}\delta_{k-p,k}\right) = -\frac{I_0}{\sqrt{N}} S_0^z \sum_k \left(N_{k\uparrow} - N_{k\downarrow}\right). \end{aligned} \tag{22}$$

В случае, когда газ коллективизированных электронов не поляризован по спиновым состояниям, т.е. $N_{k\uparrow} = N_{k\downarrow} = N_k$, эффективный гамильтониан косвенного взаимодействия в первом порядке по операторам локализованных спинов, обращается в тождественный ноль. Однако, если это не так, то эффективное взаимодействие коллективизированных электронов с решеткой локализованных спинов в первом порядке по операторам локализованных спинов сводится к появлению добавки к намагниченности образца, пропорциональной его намагниченности на узле решетки. Примером таких систем могут служить, например, активно обсуждаемые в литературе спинтронные устройства [3], в которых управление магнитным состоянием образца осуществляется поляризованными по спиновым состояниям электронов токами.

Для вычисления эффективного гамильтониана второго порядка по операторам локализованных спинов подставим в обменный гамильтониан (3) решения уравнений движения первого порядка (20a-d) по взаимодействию и усредним результат по электронным переменным. Продемонстрируем подробности вычислений. Усредним по гамильтониану H_c поправки первого порядка (20a-d) к решениям уравнений движения. В результате получим

$$\left\langle \left(c^{+}_{p\uparrow} c_{k\uparrow} \right)_1 \right\rangle_{H_c} = -\frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ \frac{1}{\omega_{qk}} S^{z}_{q-k} N_{p\uparrow} \delta_{q,p} - \frac{1}{\omega_{pq}} S^{z}_{p-q} N_{k\uparrow} \delta_{q,k} \right\};$$

$$\left\langle \left(c^{+}_{p\uparrow} c_{k\downarrow} \right)_1 \right\rangle_{H_c} = -\frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ \frac{1}{\omega_{qk}} S^{+}_{q-k} N_{p\uparrow} \delta_{q,p} - \frac{1}{\omega_{pq}} S^{+}_{p-q} N_{k\downarrow} \delta_{q,k} \right\};$$

$$\left\langle \left(c^{+}_{p\downarrow} c_{k\uparrow} \right)_1 \right\rangle_{H_c} = -\frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ \frac{1}{\omega_{qk}} S^{-}_{q-k} N_{p\downarrow} \delta_{q,p} - \frac{1}{\omega_{pq}} S^{-}_{p-q} N_{k\uparrow} \delta_{q,k} \right\};$$

$$\left\langle \left(c^{+}_{p\downarrow} c_{k\downarrow} \right)_1 \right\rangle_{H_c} = \frac{I_0}{\sqrt{N}} \sum_q \left\{ \frac{1}{\omega_{qk}} S^{z}_{q-k} N_{p\downarrow} \delta_{q,p} - \frac{1}{\omega_{pq}} S^{z}_{p-q} N_{k\downarrow} \delta_{q,k} \right\}.$$

Подставим эти соотношения в выражение для обменного гамильтониана (3). Тогда, снимая суммирование по q, делая замену $k \to k+p$ и учитывая введенное выше обозначение (7), получим

$$H^{(2)}_{eff} = -\frac{I_0^2}{N} \sum_{k,p} \frac{(-1)}{\varepsilon_{k+p} - \varepsilon_k} \left\{ \left(N_{k+p\downarrow} - N_{k\uparrow} \right) \left(S^{+}_{p} S^{-}_{-p} + S^{z}_{p} S^{z}_{-p} \right) + \right.$$
$$\left. + \left(N_{k+p\uparrow} - N_{k\downarrow} \right) \left(\left(S^{-}_{p} S^{+}_{-p} + S^{z}_{p} S^{z}_{-p} \right) \right) \right\}. \qquad (23)$$

В случае, если газ коллективизированных электронов не поляризован по спиновым состояниям, выражение (23) принимает вид

$$H^{(2)}_{eff} = -I_0^2 \sum_p \left(\frac{1}{N} \sum_k (-1) \frac{N_{k+p} - N_k}{\varepsilon_{k+p} - \varepsilon_k} \right) \vec{S}_p \vec{S}_{-p}.$$

Видно, что мы пришли к хорошо известному результату (модели Рудермана – Кителя – Касуя - Йосида). Таким образом, предлагаемый метод получения эффективного гамильтониана косвенного взаимодействия можно полагать, по крайней мере, не противоречивым.

Обратимся к эффективному гамильтониану косвенного взаимодействия следующего порядка. Для его вычисления подставим в (3) решение второго порядка по степеням операторов локализованных спинов (21a-d) уравнений движения и усредним результат по электронным переменным. Проводя вычисления, как было показано выше, после замены индексов суммирования, приходим к следующему результату

$$H^{(3)}_{eff} = -\frac{I_0^3}{N^{3/2}} \sum_{\substack{k,p,q \\ p \neq q}} \frac{1}{\left(\varepsilon_{k+p} - \varepsilon_{k+q} \right) \left(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k \right)} \left\{ \left(N_{k+p\downarrow} - N_{k\uparrow} \right) \left(S^{+}_{p} S^{-}_{-p} + S^{z}_{p} S^{z}_{-p} \right) + \right.$$
$$\left. + \left(N_{k+p\uparrow} - N_{k\downarrow} \right) \left(S^{-}_{p} S^{+}_{-p} + S^{z}_{p} S^{z}_{-p} \right) \right\}. \qquad (24)$$

В случае, когда электронный газ не поляризован по спиновым состояниям, эффективный гамильтониан косвенного взаимодействия в этом порядке принимает вид

$$H_{eff}^{(3)} = -\frac{I_0^3}{N^{3/2}} \sum_{\substack{k,p,q \\ p\neq q}} \frac{N_{k+p} - N_k}{\left(\varepsilon_{k+p} - \varepsilon_{k+q}\right)\left(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k\right)} \vec{S}_p \vec{S}_{-p}.$$

Видно, что у нас возникла поправка к модели Рудермана – Киттеля – Касуя - Йосида. Заметим, что полученная выше поправка лишена расходимости, имеющей место в традиционной теории возмущений.

Не демонстрируя подробности вычислений, в силу их громоздкости, приведем выражения для эффективного гамильтониана косвенного взаимодействия следующего порядка по степеням операторов локализованных спинов в случае, когда электронный газ поляризован по спиновым состояниям

$$H_{eff}^{(4)} = \frac{I^4}{N^2} \sum_{\substack{k,p,l,q \\ q\neq l}} \left\{ \frac{\left(N_{k-p\downarrow} - N_{k\uparrow}\right)}{\omega_{k-p,k+l}\omega_{k+l,k+q}\omega_{k+q,k}} \left(S_p^+ S_{-p-l}^- + S_p^z S_{-p-l}^z\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\left(N_{k-p\uparrow} - N_{k\downarrow}\right)}{\omega_{k-p,k+l}\omega_{k+l,k+q}\omega_{k+q,k}} \left(S_p^- S_{-p-l}^+ + S_p^z S_{-p-l}^z\right) \right\} \left(\vec{S}_{l-q} \vec{S}_q\right),$$

где энергия электронных переходов $\omega_{k,p}$ определена выражением (7).

В случае, когда электронная подсистема не поляризована по спиновым состояниям, этот гамильтониан приобретает вид

$$H_{eff}^{(4)} = \frac{I^4}{N^2} \sum_{\substack{k,p,l,q \\ q\neq l}} \frac{\left(N_{k-p} - N_k\right)}{\omega_{k-p,k+l}\omega_{k+l,k+q}\omega_{k+q,k}} \left(\vec{S}_p \vec{S}_{-p-l}\right)\left(\vec{S}_{l-q} \vec{S}_q\right).$$

Экстраполируя полученные результаты на гамильтонианы более высоких порядков, можно утверждать, что все четные порядки будут содержать выражения соответствующей степени по операторам локализованных спинов, а нечетные порядки – поправки к этим выражениям.

ВЫВОДЫ

Вернемся к проблеме расходимостей, возникающих при попытке получить эффективные гамильтонианы традиционными методами. Как указано в обширной литературе (смотри, например [1]), данная проблема связана с неаналитичностью спектров электронов проводимости магнетика [2]. Поэтому, попытки провести регулярное разложение энергии рассматриваемой системы по параметру $I_0 S / \varepsilon_F$ с неизбежностью порождают расходимости в этом разложении, поскольку энергия системы, в свою очередь, неаналитична по этому параметру. Несколько иная ситуация возникает в предложенном выше методе. Поскольку в основе получения эффективных гамильтонианов лежат решения уравнений движения для операторов электронных переходов, являющиеся функциями операторов электронных переходов для невзаимодействующего решеточного газа электронов проводимости, все величины, характеризующие коллективизированные электроны относятся именно к невзаимодействующему электронному газу. Вследствие этого, для получения эффективных гамильтонианов высших порядков по спиновым переменным нет необходимости проводить разложение энергии обмена в исследуемой системе. И, как, следствие этого, расходимости отсутствуют. Поэтому можно полагать, что полученные выше выражения для эффективных гамильтонианов косвенного взаимодействия могут быть положены в основу расчета магнитного состояния проводящих магнетиков в случае, когда модель Рудермана – Киттеля – Косуя – Йосида дает неудовлетворительные результаты.

Данная работа посвящена светлой памяти замечательного физика и прекрасного человека, доктора физико-математических наук, профессора Кузьмина Евгения Всеволодовича, стоявшего у истоков этой работы.

Список литературы

1. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями / Э.Л. Нагаев. – М. Наука, 1988. – 231с.
2. Дзялошинский И.Е. Теория геликоидальных структур в антиферромагнетиках / И.Е. Дзялошинский // ЖЭТФ. – т. **47**, № 1(7). – 1964. – С. 337–348.
3. Гуляев Ю.В. Спинтроника: обменное переключение ферромагнитных металлических переходов при малой плотности тока / Ю.В. Гуляев, П.Е. Зильберман, А.И. Панас, Э.М. Эпштейн // УФН. – т. **179**, № 4. – 2009. – С. 259-368.

Гопман А.Б. Ефективні гамільтоніани косвенної взаємодії у магнетиках, що проводять електричний струм / А.Б. Гопман // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізика. – 2009. – Т. 22(61), № 1. – С. 61-73.
Пропонован метод інтегрування рівнянь руху для операторів електронних переходів. Здобути їх розв'язкі у вигляді ряда по ступеням операторів локалізованих спинів. Базуючись на цих рішеннях здобути ефективні гамільтоніани косвенної взаємодії у магнетиках, що проводять електричний струм, у чотирьох низших порядках по ступеням операторів локалізованих спинів.
Ключові слова: косвенна взаємодія, s-f модель, ефективний гамільтоніан.

Gopman A.B. Effective Hamiltonians of indirect interaction in conductive magnets / A.B. Gopman // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics. – 2009. – Vol. 22(61), No. 1. – P. 61-73.
The method of integration of motion equations for the operators of electrons transitions is proposed. Their solutions are presented as power series expansion of localized spins operators. Using solutions obtained, we constructed the effective Hamiltonians of indirect interaction in conductive magnet as combination of localized spins operators up to the fourth degree.
Key-words: indirect interaction, s-f model, effective Hamiltonian.

Поступила в редакцию 16.10.2009 г.