第 56 卷 第 9 期 2007 年 9 月
1000-3290/2007/56(09)/5466-05
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.56,No.9,September,2007

海森伯铁磁系统的总能量

王怀玉[1)]　夏　青[2)]

1)(清华大学物理系,北京　100084)

2)(西安机电信息技术研究所,西安　710065)

(2007 年 1 月 12 日收到;2007 年 2 月 2 日收到修改稿)

对于海森伯铁磁系统,利用多体格林函数方法,在无规相近似下,并且考虑到关联函数$\langle S^+S^-\rangle$时,得到对于任意自旋 S 普遍适用的总能量的表达式.对于三维和二维的情况给出了计算结果.得到的总能量的数值低于没有考虑关联函数时的数值.

关键词:海森伯模型,铁磁系统,总能量,关联函数

PACC:7510,7510J

描述一个铁磁体的哈密顿量为

$$H=-\frac{1}{2}J\sum_{(i,j)}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j-K_2\sum_i(S_i^z)^2-B_z\sum_i S_i^z,\quad(1)$$

其中第一项是交换相互作用项.本文只考虑最近邻交换作用.第二项是单离子各项异性项.第三项是有外磁场时的能量.本文设交换强度 J、各项异性强度 K_2、外磁场 B_z 和温度 T 都是无量纲的量.对于这样一个系统,我们已经可以运用多体格林函数方法求出磁化强度随温度的变化,并且有一个对于任意自旋量子数 S 适用的普遍公式[1—3].本文要求的是对于任意自旋量子数 S 都适用的比较严格的总能量表达式.

总能量是哈密顿量的系综平均值.考虑到晶格的平移周期性,每一个格点上自旋的状态相同,我们只要计算平均每个自旋的能量如下:

$$E_i=-\frac{1}{2}J\sum_j\langle S_i^+S_j^-+S_i^zS_j^z\rangle-K_2\langle(S_i^z)^2\rangle-B_z\langle S_i^z\rangle.\quad(2)$$

式中对 j 的求和只涉及 i 的最近邻格点.由于平移周期性,i 格点可只取原点,(2)式中的下标 i 可以去掉.(2)式中的后两项是可以利用$\langle S^z\rangle$的表达式直接计算得到的[1—3].现在的主要任务就是处理交换相互作用项.

在最简单的近似下,可以直接采用无规相近似.由于 i 和 j 格点不相同,无规相近似就是$\langle \boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j\rangle\approx\langle\boldsymbol{S}_i\rangle\cdot\langle\boldsymbol{S}_j\rangle$[1—4].我们设磁化强度的方向是 z 方向.自旋算符在 x 和 y 两个方向上的平均值为零.因此得到的能量平均值为

$$E=-\frac{1}{2}z_0J\langle S^z\rangle^2-K_2\langle(S^z)^2\rangle-B_z\langle S^z\rangle.\quad(3)$$

也就是说,对于(2)式中的第一项做了这样的近似:$\langle S_i^+S_j^-+S_i^zS_j^z\rangle\approx\langle S_i^+\rangle\langle S_j^-\rangle+\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle=\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle$.在 z 方向的项做$\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle=\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle$这样的近似是没有问题的.可是$\langle S_i^+S_j^-\rangle$这一项由于近似而成为零是有问题的.这一项是表示自旋波传播的关联函数,而实际上关联函数是不为零的.因此必须小心地处理这一项.下面我们较为严格地得到$\langle S_i^+S_j^-+S_i^zS_j^z\rangle$这一项的表达式.

我们运用多体格林函数方法,这一方法运用于处理海森伯磁性系统已经被证明是非常成功的[4—11].用算符 A 和 B 构成推迟格林函数

$$\begin{aligned}G^{\mathrm{R}}(t-t')&=\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^{\mathrm{R}}\\&=-\mathrm{i}\theta(t-t')\langle A(t)B(t')\\&\quad-B(t')A(t)\rangle.\end{aligned}\quad(4)$$

由于哈密顿量不含时间,格林函数与下面的所有双时变量的函数都是时间差 $t-t'$ 的函数,都可以对宗量 $t-t'$ 做傅里叶变换.做时间傅里叶变换之后,格林函数所满足的运动方程为

$$\begin{aligned}&\omega\langle\langle A;B\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\omega)\\&=\langle[A,B]\rangle+\langle\langle[A,H];B\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\omega).\end{aligned}\quad(5)$$

我们选择的构成格林函数的两个算符为

$$A=S^+,\ B=\mathrm{e}^{uS^z}S^-.\quad(6)$$

考虑到每个格点都有一个自旋,算符加上格点的指标如下:

$$A_l=S_l^+,B_m=\mathrm{e}^{uS_m^z}S_m^-.\quad(7)$$

代入(5)式后,算得运动方程如下：

$$\begin{aligned}&\omega\langle\langle A_l;B_m\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\omega)\\&=2\langle[A,B]\rangle\delta_{lm}+g_l\mu_{\mathrm{B}}H\langle\langle A_l;B_m\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\omega)\\&\quad-2J\langle S^z\rangle\sum_j[\langle\langle A_l;B\rangle\rangle^{\mathrm{R}}-\langle\langle A_l;B_m\rangle\rangle^{\mathrm{R}}],\end{aligned}\tag{8}$$

其中利用了空间均匀性,$\langle S_m^z\rangle=\langle S^z\rangle$.对 j 的求和只涉及 l 格点的最近邻.再做空间傅里叶变换

$$\begin{aligned}G_{lm}^{\mathrm{R}}(\omega)&=\langle\langle A_l;B_m\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\omega)\\&=\frac{1}{N}\sum_k\langle\langle A;B\rangle\rangle^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m})},\end{aligned}\tag{9}$$

可解得格林函数

$$\begin{aligned}G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)&=G(\boldsymbol{k},\omega+\mathrm{i}0^+)\\&=\frac{1}{\omega-\omega(\boldsymbol{k})+\mathrm{i}0^+}.\end{aligned}\tag{10}$$

系统的能谱就是格林函数的极点.

$$\begin{aligned}\omega(\boldsymbol{k})&=\langle S^z\rangle[J(0)-J(\boldsymbol{k})]\\&\quad+2K_2C\langle S^z\rangle+B_z,\end{aligned}\tag{11}$$

其中

$$J(\boldsymbol{k})=J\sum_{\boldsymbol{a}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}},\tag{12}$$

$\boldsymbol{a}$ 表示原点的最近邻格点的位矢,并且

$$C=1-\frac{1}{2S^2}[S(S+1)-\langle(S^z)^2\rangle].\tag{13}$$

在对高阶格林函数降阶为低阶格林函数时,对于交换作用项,做了无规相近似[1].对于单离子各项异性项,做了 Anderson-Callen 近似[5]. Anderson-Callen 近似只适用于单离子各项异性系数 K_2 小于交换强度 J 的情况[12].

以下运用谱定理[1]

$$\begin{aligned}&\langle B_m(t')A_l(t)\rangle\\&=\frac{[A,B]\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1}\frac{1}{N}\\&\quad\times\sum_k[G(\omega+\mathrm{i}0^+)-G(\omega-\mathrm{i}0^+)]\\&\quad\times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m})}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')},\end{aligned}\tag{14}$$

当 $l=m$ 时,简化为

$$\begin{aligned}\langle B(t')A(t)\rangle&=[A,B]\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1}\frac{1}{2\pi N}\\&\quad\times\sum_k[G(\boldsymbol{k},\omega+\mathrm{i}0^+)\\&\quad-G(\boldsymbol{k},\omega-\mathrm{i}0^+)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')},\end{aligned}\tag{15}$$

当 $t-t'=0$ 时,用(10)式可以得到

$$\langle BA\rangle=\frac{[A,B]}{N}\sum_k\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega(\boldsymbol{k})}-1}=[A,B]\Phi,\tag{16}$$

其中定义了 Φ.(15)式两边对时间 t 求导一次,可以得到

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B(t')A(t)\rangle\\&=\langle B(t')[A(t),H]\rangle\\&=[A,B]\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\omega\mathrm{d}\omega}{\mathrm{e}^{\beta\omega}-1}\frac{1}{2\pi N}\\&\quad\times\sum_k[G(\boldsymbol{k},\omega+\mathrm{i}0^+)\\&\quad-G(\boldsymbol{k},\omega-\mathrm{i}0^+)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')},\end{aligned}\tag{17}$$

当 $t-t'=0$,

$$\begin{aligned}\langle B[A,H]\rangle&=\frac{[A,B]}{N}\sum_k\frac{\omega(\boldsymbol{k})}{\mathrm{e}^{\beta\omega(\boldsymbol{k})}-1}\\&=[A,B]\Phi_1,\end{aligned}\tag{18}$$

其中定义了 Φ_1.

做 A_l 和 B_m 两个算符的对易关系.

$$[S_l^+,\mathrm{e}^{uS_m^z}S_m^-]=\delta_{lm}[(\mathrm{e}^{-u}-1)\mathrm{e}^{uS^z}S^+S^-+2\mathrm{e}^{uS^z}S^z].\tag{19}$$

令

$$\psi(u)=\langle\mathrm{e}^{uS^z}\rangle\tag{20}$$

是宗量为 u 的函数,那么有

$$\langle\mathrm{e}^{uS^z}(S^z)^n\rangle=\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}u^n}\psi(u).\tag{21}$$

再利用恒等式

$$S^-S^+=S(S+1)-S^z-(S^z)^2,\tag{22}$$

(16)式的左边为

$$\langle\mathrm{e}^{uS^z}S^-S^+\rangle=S(S+1)\psi(u)-\psi'(u)-\psi''(u).\tag{23}$$

把(19)式代入(16)式得到

$$\begin{aligned}&S(S+1)\psi(u)-\psi'(u)-\psi''(u)\\&=\{(e^{-u}-1)[S(S+1)\psi(u)+\psi'(u)-\psi''(u)]\\&\quad+2\psi'(u)\}\Phi,\end{aligned}\tag{24}$$

此式是一个二阶常微分方程,其解为[3,13,14]

$$\psi(u)=\frac{(\Phi+1)^{2S+1}\mathrm{e}^{(S+1)u}-\Phi^{2S+1}\mathrm{e}^{-Su}}{[(\Phi+1)^{2S+1}-\Phi^{2S+1}][(\Phi+1)\mathrm{e}^u-\Phi]}.\tag{25}$$

这一函数及其各阶导数的初值可算得如下：

$$\psi(0)=1,\tag{26a}$$

$$\begin{aligned}\langle S^z\rangle&=\psi'(0)\\&=\frac{(\Phi+1+S)\Phi^{2S-1}-(\Phi-S)(\Phi+1)^{2S+1}}{(\Phi+1)^{2S+1}-\Phi^{2S+1}},\end{aligned}\tag{26b}$$

$$\begin{aligned}\langle(S^z)^2\rangle&=\psi''(0)\\&=S(S+1)-(1+2\Phi)\langle S^z\rangle,\end{aligned}\tag{26c}$$

$$\langle(S^z)^3\rangle=\psi'''(0)$$

$$= \frac{1}{2}[[S(S+1)-3]\langle (S^z)^2\rangle (1+2\Phi) + (2S^2+2S-1)\langle S^z\rangle]. \quad (26d)$$

由(18)式,得到关联函数对时间求导的结果为

$$\langle e^{uS^z} S^- [S^+, H]\rangle$$
$$= \langle [S^+, e^{uS^z} S^-]\rangle \Phi_1$$
$$= \{(e^{-u}-1)[S(S+1)\psi(u)+\psi'(u) - \psi''(u)] + 2\psi'(u)\}\Phi_1. \quad (27)$$

计算(27)式左边

$$\langle e^{uS_m^z} S_m^- [S_m^+, H]\rangle$$
$$= -J\langle e^{uS_m^z} S_m^- \sum_j [S_m^z S_j^+ - S_j^z S_m^+]\rangle + K_2\langle e^{uS_m^z} S_m^- (S_m^z S_m^+ + S_m^+ S_m^z)\rangle + B_z\langle e^{uS_m^z} S_m^- S_m^+\rangle. \quad (28)$$

我们逐项计算(28)式右边.第一项为

$$-J\langle e^{uS_m^z} \sum_j [S_m^- S_m^z S_j^+ - S_m^- S_m^+ S_j^z]\rangle$$
$$= -J\langle e^{uS_m^z} \sum_j [S_m^- S_j^+ + S_m^z S_j^z + S_m^z S_m^- S_j^+ - S(S+1)S_j^z + (S_m^z)^2 S_j^z]\rangle$$
$$= -J\langle e^{uS_m^z} \sum_j (S_m^- S_j^+ + S_m^z S_j^z)\rangle - J\sum_j \langle e^{uS_m^z} S_m^z S_m^- S_j^+\rangle + J(0)S(S+1)\psi'(u) - J(0)\psi''(u)\langle S^z\rangle. \quad (29)$$

其中要注意到对格点 j 的求和只涉及格点 m 的最近邻.(29)式中右边的第一项将通过(2)式用能量来表达.现在看(29)式中右边第二项的处理.首先计算 $J\sum_j \langle e^{uS_m^z} S_m^- S_j^+\rangle$.运用谱定理(14)式,令 $l=j$,并且是 m 的最近邻,再对 j 求和得到

$$J\sum_j \langle B_m A_j\rangle = \frac{[A,B]}{2\pi} \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\beta\omega}-1}\frac{1}{N} \times \sum_k [G(\omega+\mathrm{i}0^+) - G(\omega - \mathrm{i}0^+)]J(\boldsymbol{k})$$
$$= [A,B]\frac{1}{N}\sum_k \frac{J(\boldsymbol{k})}{e^{\beta\omega(\boldsymbol{k})}-1}$$
$$= [A,B]\Phi_2. \quad (30)$$

其中已定义了 Φ_2,再利用对易式(19)式,

$$-J\sum_j \langle e^{uS_m^z} S_m^z S_m^- S_j^+\rangle$$
$$= -\frac{d}{du} J\sum_j \langle e^{uS_m^z} S_m^- S_j^+\rangle$$
$$= -\frac{d}{du}\{(e^{-u}-1)[S(S+1)\psi(u) + \psi'(u) - \psi''(u)] + 2\psi'(u)\}\Phi_2$$
$$= \{e^{-u}[S(S+1)\psi(u) + \psi'(u) - \psi''(u)] - 2\psi''(u)\}\Phi_2 - (e^{-u}-1) \times [S(S+1)\psi'(u) + \psi''(u) - \psi'''(u)]\Phi_2. \quad (31)$$

现在计算(28)式右边的第二项,结果是

$$K_2\langle e^{uS^z} S^- (S^z S^+ + S^+ S^z)\rangle$$
$$= K_2[S(S+1)\psi(u) + (2S^2+2S-1)\psi'(u) - 3\psi''(u) - 2\psi'''(u)]. \quad (32)$$

(28)式右边的第三项,则可利用(23)式,将(23,29,31,32)式代入(28)式,使之与(27)式相等,并令 $u=0$,就得到能量的表达式为

$$E = \langle S^z\rangle \Phi_1 - \frac{1}{2}[S(S+1) + \langle S^z\rangle - 3\langle (S^z)^2\rangle]\Phi_2 - \frac{1}{2}J(0)[S(S+1) - \langle (S^z)^2\rangle]\langle S^z\rangle - \frac{1}{2}K_2[S(S+1) + (2S^2+2S-1)\langle S^z\rangle - \langle (S^z)^2\rangle - 2\langle (S^z)^3\rangle] - \frac{1}{2}B_z[S(S+1) + \langle S^z\rangle - \langle (S^z)^2\rangle]. \quad (33)$$

其中已代入(2)式.由于空间的平移不变性,我们已经略去了(2)式中表示格点的下标 i.$\langle S^z\rangle$,$\langle (S^z)^2\rangle$ 和 $\langle (S^z)^3\rangle$ 各量可由(26)式算出.

下面我们给出数值结果.我们令 $J=100$.在图1—图4中,实线是由(33)式计算得到,虚线是由(3)式计算得到,我们看到,由于对于(2)式中的 $\langle S_i^+ S_j^-\rangle$ 关联函数做了较为严格的考虑,实线的能量值比虚线的要低.在绝对零度时,两者的能量是一样的,因为零温时不存在热力学的涨落.

对于三维情况,令各项异性常数 $K_2=0$.图1是简立方晶格的 $S=1/2,1,3/2,2$ 时的数值结果.图2和图3给出体心立方和面心立方晶格的结果.

图4是二维的情况,由于各向同性的海森伯模型在二维情况下是没有自发磁化的[15,16],要加上各项异性项才会出现自发磁化,即在(1)式中 K_2 必须不为零.一般认为 K_2 比 J 小两个数量级.本文令 $K_2=1$,当 $S=1/2$ 时,$(S^z)^2 = \frac{1}{4}$,不显现各项异性.因此,图4画出了 $S=1,3/2,2,5/2$ 时的数值结果.

由能量的表达式对温度求导可得到比热,不过我们不在这儿具体地计算了.只要根据曲线的形状

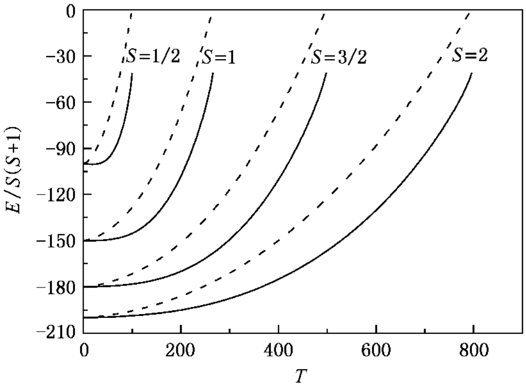

图 1　简立方晶格的铁磁能量随温度的变化

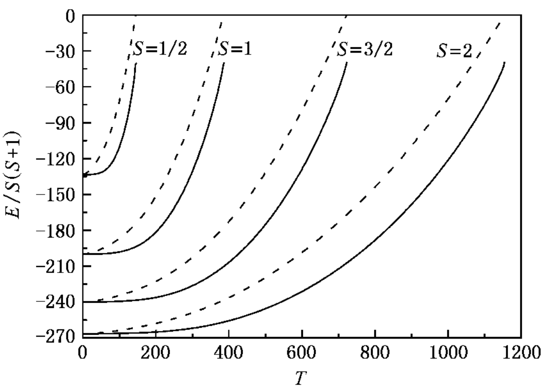

图 2　体心立方晶格的铁磁能量随温度的变化

就大致知道比热的变化的情况.在这儿做一定性地讨论.比热总是大于等于零的.接近零温时比热接近于零.随着温度的升高比热增加.

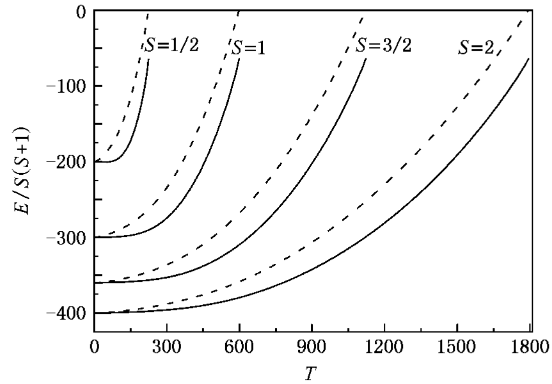

图 3　面心立方晶格的铁磁能量随温度的变化

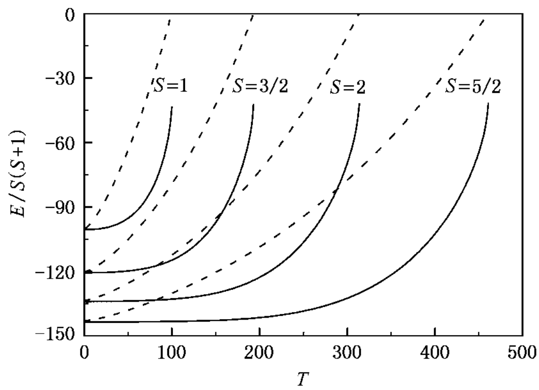

图 4　二维方格子的铁磁能量随温度的变化

尽管在公式中已经把外磁场考虑进去,本文的数值计算中未加进外磁场.从(33)式可以看出,加上外磁场后,能量会有所降低.

[1] Tyablikov S T 1967 *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (Plenum, New York)

[2] Tahir-Kheli R A, Haar D T 1962 *Phys. Rev.* **127** 88; 95

[3] Callen H B 1963 *Phys. Rev.* **130** 890

[4] Zheng Q Q, Pu F C 1964 *Acta. Phys. Sin.* **20** 624 (in Chinese) [郑庆祺、蒲富恪 1964 物理学报 **20** 624]

[5] Anderson F B, Callen H B 1964 *Phys. Rev.* **136** A1068

[6] Wang H Y, Zhou Y S, Wang C Y 2002 *Commun. Theor. Phys.* **38** 107

[7] Wang H Y, Zhou Y S, Wang C Y, Lin D L 2002 *Chin. Phys.* **11** 167

[8] Wang H Y, Xun K, Xiao L 2004 *Phys. Rev.* B **70** 214431

[9] Wang H Y, Dai Z H 2004 *Commun. Theor. Phys.* **42** 141

[10] Wang H Y, Chen K Q, Wang E G 2002 *Phys. Rev.* B **66** 092405

[11] Wang H Y, Wang S Y, Wang C Y, Duan W H, Chen K Q 2003 *J. Phys.: Condens. Matter* **15** 2783

[12] Wang H Y, Jen S U, Yu J Z 2006 *Phys. Rev.* B **73** 094414

[13] Wang H Y, Zhou B, Chen N X 2005 *Commun. Theor. Phys.* **43** 753

[14] Wang H Y, Long Y, Chen N X 2006 *Commun. Theor. Phys.* **45** 175

[15] Mermin N M, Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133

[16] Tao R B, Pu F C 1980 *Acta. Phys. Sin.* **29** 658 (in Chinese) [陶瑞宝、蒲富恪 1980 物理学报 **29** 658]

The total energy of Heisenberg ferromagnetic systems

Wang Huai-Yu[1] Xia Qing[2]

1)(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

2)(Xi'an Institute of Electromechanical Information Technology, Xi'an 710065, China)

(Received 12 January 2007; revised manuscript received 2 February 2007)

Abstract

The total energy of the Heisenberg ferromagnetic system is calculated by the many-body Green's function method under random phase approximation when the correlation function $\langle S^{+} S^{-} \rangle$ is considered. A general expression of the total energy universally applicable to any spin quantum number S is obtained. Numerical results are computed. The energy is lower than the case when the correlation function is not included.

Keywords: Heisenberg model, ferromagnetic system, total energy, correlation function

PACC: 7510, 7510J