

自旋波理論最近的發展*

吳 式 樞

(東北人民大學)

自旋波理論是 Bloch (1930) 所創立的, 目的在於探討鐵磁性自發磁矩 M 和溫度 T 的關係, 理論只適用於低溫領域, 出發點是根據 Heisenberg 模型. 誠然理論有更廣的應用範圍, 但為了能更簡明地闡述理論實質上所有的進展, 下面將和理論提出時所面對的命題一樣只針對鐵磁物質而言. 在報告中我們將着重討論最近 Dyson (1956) 的工作, 在這以前自旋波理論中最主要的方法除 Bloch 理論外還有 Holstein-Primakoff (1940) 理論, 其他一些相關的理論限於報告的目的和時間就不提及了. Bloch 與 Holstein-Primakoff 理論雖然方法不同, 但却有相似的局限性, 所得 $M = M(T)$ 的近似關係一致, 這關係就是著名的 Bloch $T^{3/2}$ 定理, 求得這結果時均未顧及自旋波相互干涉作用與狀態數過多的影響. Kramers 和 Opechowski (1937) 曾計算 Bloch 定理的修正項, 所得主要項比例於 T^2 , 最近 Schafroth (1954) 爲了研究自旋波相互干涉作用的影響, 以 Holstein-Primakoff 理論爲基礎引用自協近似方法又進行了一次計算, 所得主要修正項比例於 $T^{7/4}$, 且這項在實驗用的低溫區域內一般不可忽略不計, 例如對於簡單立方晶格自旋量子數 $S = 1/2$ 的情形, 其結果¹⁾爲

$$M(T)/m_0 = S\{1 - 0.33(kT/J)^{3/2} + 0.63(kT/J)^{7/4} - 0.37(kT/J)^2 + \dots\},$$

式中 $m_0 = M(0)/S$, J 表示近鄰原子間的交換積分. 倘 Schafroth 的結論正確, 這結論是有重要實際意義的, 因以往以 Bloch 定理爲基礎進行的實驗分析均當予以相應的修正; 但 Schafroth 所得的主要修正項不僅與 Kramers 和 Opechowski 所得的不同, 和稍後 Van Kranendonk (1955) 引用自旋偏差氣體模型得到的結果在比例係數值上也互不一樣, 雖然這些理論都是以 Heisenberg 模型爲出發點. Dyson 的目的就在於探討根據 Heisenberg 模型、關於 $M = M(T)$ 所應有的嚴格關係, 這樣一方面得以判斷以上不同結果孰是孰非, Bloch 定理是否可靠, 另一方面若理論結果仍與實驗有不一致, 則將可明確地歸結爲 Heisenberg 模型尚不够全面或完善. Dyson 工作的貢獻不僅是成功地求得了相當嚴格準確的結果, 並提出了新的處理問題的數學方法.

下面讓我們仿照以上所提作者忽略磁矩相互作用、假定晶體有立方對稱性, 並選均勻靜磁場 H 的方向爲 $-Z$ 軸. 這樣, 根據 Heisenberg 模型體系的哈密頓量可寫如下形:

$$H = H_0 + L \sum_j S_j^z, \quad (1)$$

$$H_0 = -\frac{1}{2} J \sum_{j\delta} S_j \cdot S_{j+\delta}, \quad (2)$$

* 1958 年 1 月 12 日上午在固體電子論上報告, 本文是該報告的提要.

1) Schafroth 工作中 β 前的符號有遺誤, 但這並不影響這裏所引證的公式.

式中 j 為晶點 (j) 的位置矢量, δ 為相鄰兩晶點間的距離矢量, $\hbar S_j$ 為位於晶點 (j) 上原子的自旋算符, $m_0 S_j$ 為其磁矩算符, $L = m_0 H$, $\sum_{\delta}$ 為向與晶點 (j) 相鄰各晶點求和, $\sum_j$ 為向所有晶點求和。熟知地, 在溫度 T 每一原子所有平均磁矩 $M(T, H)$ 與“狀態和” Z 間有如下關係:

$$M(T, H) = (kT/N) (\partial \ln Z / \partial H), \quad (3)$$

其中 N 表同一磁疇內晶體所含原子總數, Z 的形式如下:

$$Z = \sum_n \exp(-\beta \epsilon_n), \quad (4a)$$

$$= \text{Spur} \{ \exp(-\beta \hat{H}) \}, \quad (4b)$$

式中 $\beta = (kT)^{-1}$, ϵ_n 為 H 的第 n 個本徵值, $\sum_n$ 為向 H 的所有本徵態求和, $\text{Spur}\{O\}$ 表算符 O 在狀態矢量空間一正交歸一化坐標系中所有矩陣表象的陣跡。由此爲了求

$$M = M(T) = \lim_{H \rightarrow 0} M(T, H),$$

我們有以下二途徑:

一、首先求解

$$H\psi_n = \epsilon_n \psi_n, \quad (5)$$

然後以所得本徵值 ϵ_n 代入式 (4a) 以求 Z 。注意到 $S^z = \sum_j S_j^z$ 和 H_0 交換, 且本徵方程 $S^z \psi_n = \mu_n \psi_n$ 的解已知, 因而求解式 (5) 也就可歸結爲求解以下本徵方程

$$H_0 \psi_n = E_n \psi_n. \quad (6)$$

二、避開求解式 (5), 直接利用式 (4b) 以求 Z 。

Bloch 和 Holstein-Primakoff 都是選用第一途徑, 而 Dyson 採用的是第二途徑。現在先簡單介紹一下 Bloch 與 Holstein-Primakoff 理論, 以便更好地闡明 Dyson 工作的特色及其思考的依據。

Bloch 理論 爲了能簡潔地說明理論的實質, 我們將只針對 $S = 1/2$ 的情形而言。我們的主要問題就是求解式 (6)。注意到 $[H_0, S^z] = 0$, 在 S^z 表象裏 H_0 的久期方程將依 S^z 所有不同本徵值分解爲一系列小久期方程, 因而求解式 (6) 可簡化爲依次地求解這些更簡單的久期方程。讓我們先討論綫型晶格的情況。令 r 爲處於 S_j^z 的本徵值等於 $1/2$ 的本徵態的原子數, 這時 $S^z = \sum_j S_j^z$ 的本徵值即爲 $(2r - N)/2$, 由此爲了求解式 (6) 我們可引入下形的展開式:

$$\psi = \sum_{j_1 < j_2 < \dots < j_r} \dots \sum a(j_1, j_2, \dots, j_r) \psi(j_1, j_2, \dots, j_r), \quad (7)$$

式中 $j_\sigma (\sigma = 1, 2, \dots, r)^{1)}$ 可取值在間隔 $(1, N)$ 之間, j_1 可等於 1, j_r 可等於 N ,

$$\psi(j_1, j_2, \dots, j_r) = \beta(1)\beta(2)\dots\beta(j_1 - 1)\alpha(j_1)\beta(j_1 + 1)\dots\beta(j_r - 1) \times \\ \times \alpha(j_r)\beta(j_r + 1)\dots\beta(N),$$

$$S_j^z \alpha(j) = \frac{1}{2} \alpha(j), \quad S_j^z \beta(j) = -\frac{1}{2} \beta(j).$$

1) 注意, $j_\sigma \delta$ 才是真正的位位置矢量。

注意到,自旋算符與 Dirac 自旋坐標交換算符 $P_{i,j}^s$ 間有以下關係:

$$S_j \cdot S_{j+\delta} = \frac{1}{2} P_{j,j+\delta}^s - \frac{1}{4},$$

以式(7)代入式(6),並令

$$\epsilon = \left(E + \frac{1}{2} J N r_0 S^2 \right) / J,$$

我們可立即求得 Bloch 久期方程的形式如下:

$$2\epsilon a(j_1, j_2, \dots, j_r) = \sum_{j'_1 j'_2 \dots j'_r} [a(j_1, j_2, \dots, j_r) - a(j'_1, j'_2, \dots, j'_r)], \quad (8)$$

式中 Σ 表向所有由 $(j_1, j_2, \dots, j_r)$ 通過交換相鄰一對反平行自旋而得的排列 $(j'_1, j'_2, \dots, j'_r)$ 求和, r_0 表近鄰原子數。下面我們討論一下 Bloch 的解法與所得解。

$r = 0$. 所有自旋都向下,因而只有一個狀態 $\psi(0)$; 式(8)的解顯然即為本徵值: $\epsilon = \epsilon(0) = 0$,

歸一化的本徵函數: $a(0) = 1$; 由式(7)這也就是說,我們應有

$$\psi = a(0)\psi(0) = \psi(0) = \beta(1)\beta(2)\dots\beta(N).$$

$r = 1$. 只有一個自旋向上,簡稱 j_1 為 j , 式(8)的具體形式如下:

$$2\epsilon a(j) = a(j) - a(j+1) + a(j) - a(j-1),$$

應用代入法很容易地可求得上式的嚴格解即為

$$\epsilon \equiv \epsilon(\lambda) = 1 - \cos \lambda, \quad (9)$$

$$a(j) = \alpha e^{i\lambda j}, \quad (10)$$

由式(7)亦即我們有

$$\psi = \psi(\lambda) = \alpha \sum_{j=1}^N e^{i\lambda j} \psi(j),$$

式中 α 表歸一化常數。由波函數的物理涵義我們看到, $a(j)$ 的物理意義就是表示晶點 (j) 上的自旋所有旋轉運動的情況; (10) 所示 $a(j)$ 形式, 例如, 和晶格振動的彈性波相似, 這就是理論名稱——自旋波理論的來源。

$r = 2$. 這時有二自旋向上。依這二向上自旋相鄰還是不相鄰, 久期方程 (8) 的具體形式現分為不同的兩組。

$j_2 \neq j_1 + 1$ (即不相鄰)。由式(8)我們有

$$2\epsilon a(j_1, j_2) = a(j_1, j_2) - a(j_1 + 1, j_2) + a(j_1, j_2) - a(j_1 - 1, j_2) + a(j_1, j_2) - a(j_1, j_2 + 1) + a(j_1, j_2) - a(j_1, j_2 - 1), \quad (11a)$$

$j_2 = j_1 + 1$. 這時依式(8)所得應為

$$2\epsilon a(j_1, j_1 + 1) = a(j_1, j_1 + 1) - a(j_1, j_1 + 2) + a(j_1, j_1 + 1) - a(j_1 - 1, j_1 + 1). \quad (11b)$$

Bloch 求解以上方程組的方法分為兩步。(一)首先假定方程組的形式全如式(11a)所示, 這時利用代入法可立即求得其解為

$$\epsilon = \epsilon(\lambda_1, \lambda_2) = 1 - \cos \lambda_1 + 1 - \cos \lambda_2, \quad (12)$$

$$a(j_1, j_2) = \alpha \exp\{i(\lambda_1 j_1 + \lambda_2 j_2)\} + \beta \exp\{i(\lambda_1 j_2 + \lambda_2 j_1)\}, \quad (13)$$

式中 α, β 為兩任意常數。(二)以這解代入式(11b), 選擇係數 α 與 β 使之也能滿足這組方

程. Bloch 求得, 倘令 $\alpha = \beta$, 則所得解(12) 與 (13) 不僅嚴格滿足式 (11a), 也近似地滿足式(11b), 亦即這解即為所求近似解.

$r > 2$. 這時久期方程 (8) 也依向上的 r 個自旋是否全不相鄰、有兩個相鄰或多個相鄰而分為許多不同形式的方程組; Bloch 的解法和 $r = 2$ 中所敘相同, 所得近似解的形式如下:

$$\varepsilon = \varepsilon(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r) = \sum_{\sigma=1}^r (1 - \cos \lambda_{\sigma}), \quad (14)$$

$$a(j_1, j_2, \dots, j_r) = \alpha \sum_{P=1}^{r!} \exp \left\{ i \sum_{\sigma=1}^r \lambda_{P_{\sigma}} j_{\sigma} \right\}, \quad (15)$$

式中 α 仍表一歸一化常數, 排列符號 P 的含意為

$$P = \uparrow \begin{pmatrix} P_1 P_2 \dots P_{\sigma} \dots P_r \\ 1 \ 2 \ \dots \sigma \ \dots r \end{pmatrix}.$$

這解嚴格地滿足久期方程所含 r 個向上自旋全不相鄰¹⁾的各方程, 但和 $r = 2$ 的情形一樣, 也只近似地滿足其他含有相鄰向上自旋¹⁾的方程, 這相當於 Bloch 解不能顧及自旋波相互干涉作用. 我們注意到, 當 r 增大時, 有相鄰向上自旋的方程總個數將很快地增多, 此外為了滿足 Born-von Kármán 週期條件

$$a(j_1, \dots, j_{\sigma-1}, j_{\sigma}, \dots, j_r) = a(j_1, \dots, j_{\sigma-1}, j_{\sigma+1}, \dots, j_r, j_{\sigma} + N) \quad \sigma = 1, 2, \dots, r,$$

我們應要求

$$\lambda_{\sigma} = 2\pi K_{\sigma}/N, \quad K_{\sigma} = 0, 1, 2, \dots, N-1, \quad \sigma = 1, 2, \dots, r,$$

因 Bloch 的解允許不同 λ_{σ} 取相同的值, 由此 Bloch 解的個數為 $\binom{N+r-1}{r}$, 而由式

(7) 所可得到的獨立解的個數只應為 $\binom{N}{r}$, 當 $r > N^{\frac{1}{2}}$ 時這二者之差很大, 這告訴我們

Bloch 所得的解至多只適用於 r 值小的情況, 亦即低能量區域. Bloch 的解推廣到二度和三度晶格是很簡單的, 我們只需重複一遍以上的思考, 將 j_{σ} 了解為標誌晶點位置的矢量 j_{σ} , λ_{σ} 了解為波數矢量 λ_{σ} , 我們可立即求得 Bloch 近似解的一般形式如下:

$$a(j_1, j_2, \dots, j_r) = \alpha \sum_{P=1}^{r!} \exp \left\{ i \sum_{\sigma=1}^r \lambda_{P_{\sigma}} \cdot j_{\sigma} \right\}, \quad (16)$$

$$\varepsilon = \varepsilon(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^r \left\{ \sum_{\delta} (1 - \exp [i \lambda_{\sigma} \cdot \delta]) \right\}. \quad (17)$$

我們看到, 上述 Bloch 解法的數學表達式比較繁瑣, 物理直觀性也比較差, 因而不提供一個簡單明白的途徑以進一步求得更準確的解, 也不容易讓我們洞察問題的關鍵. Bethe (1931) 曾依照 Bloch 方法求得一度晶格的嚴格解, 但如何應用 Bloch-Bethe 方法以求實際情況——三度晶格的嚴格解問題迄今仍未解決.

對闡明鐵磁性的成因來說, 低溫領域自發磁矩和溫度的關係是有重要意義的, 這時依式(3)與式(4)只有小的 E_n 值重要, 因此雖然 Bloch 解有上述局限性, 却有可能利用來探討這領域的 $M = M(T)$ 關係. 由式(17)我們注意到, 小的 E_n 值對應於小的 λ_{σ} 值, 所以

1) 針對方程式的左邊而言.

爲了計算簡便我們可引用以下展開式：

$$\exp [i\lambda_{\sigma} \cdot \delta] = 1 + i\lambda_{\sigma} \cdot \delta + \frac{1}{2!} (i\lambda_{\sigma} \cdot \delta)^2 + \dots, \quad (18)$$

並忽略其中高於二次方的項。以式(18)代入式(17),由於晶格的對稱性,一次方的項將互相抵消,由此依式(3)與(4)很容易就可求得 $M = M(T)$ 關係,這樣所得的結果就是 Bloch 的 $T^{3/2}$ 定理;例如對簡單立方晶系,式(17)的具體形式如下：

$$\varepsilon(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r) = \sum_{\sigma=1}^r \{3 - \cos \lambda_{\sigma x} - \cos \lambda_{\sigma y} - \cos \lambda_{\sigma z}\} \simeq \frac{1}{2} \sum_{\sigma=1}^r \lambda_{\sigma}^2,$$

所得 $M - T$ 關係爲

$$M(T)/m_0 = S - \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \theta^{3/2},$$

式中 $\theta = 3kT/2\pi\gamma_0 JS$, $\zeta(q) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-q}$.

Holstein-Primakoff 理論。從方法上看, Holstein-Primakoff 理論比 Bloch 理論前進了一步,但卻保留着相似的困難。如所周知,量子力學理論中有以下兩個簡單的結果：

1) 如算符 a 滿足下面的交換關係

$$aa^* - a^*a = 1, \quad (19)$$

其中 a^* 表 a 的共軛算符,則厄米算符 $n \equiv a^*a$ 所有本徵值爲 $0, 1, 2, \dots, \infty$, 亦即我們有

$$a^*a|n\rangle = n|n\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots, \infty, \quad (20)$$

式中 $|n\rangle$ 表 n 的本徵函數。由上式與交換關係(19),很容易地還可求得以下的關係：

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^*|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (21)$$

由此在 n 表象裏 a 可解釋爲消滅算符, a^* 爲產生算符。

2) 由於自旋算符 $\hbar S$ 滿足以下交換關係：

$$[S^z, S^+] = S^+, \quad [S^z, S^-] = -S^-, \quad [S^+, S^-] = 2S^z, \quad (22)$$

其中 $S^{\pm} \equiv S^x \pm iS^y$, 倘我們以 $|S, m\rangle$ 表 S^2 與 S^z 的本徵函數,我們有

$$S^2|S, m\rangle = S(S+1)|S, m\rangle, \quad S^z|S, m\rangle = m|S, m\rangle \\ m = -S, -S+1, \dots, S; \quad (23)$$

$$S^{\pm}|S, m\rangle = [(S \mp m)(S \pm m + 1)]^{\frac{1}{2}}|S, m \pm 1\rangle. \quad (24)$$

當絕對溫度 $T = 0$ 時,鐵磁體處於基態,這時每一原子的 S^z 所有值皆等於¹⁾ $-S$,由此在低溫領域裏 $S^z + S$ 的平均值將很小。注意到算符 $S^z + S$ 所有值恆爲零或正整數, Holstein-Primakoff 想到,如引入以下代換

$$S^z + S = n, \quad n = a^*a, \quad (25)$$

理論有可能易於簡化,算符 n 依其含意常稱爲自旋偏差算符;以式(24)與式(21)相對比並注意到,在引入代換(25)後狀態 $|S, -S+n\rangle$ 和狀態 $|n\rangle$ 相對應,我們很容易地且可求得以下關係：

$$S^+ = (2S)^{\frac{1}{2}} a^* [1 - (a^*a/2S)]^{\frac{1}{2}}, \quad S^- = (2S)^{\frac{1}{2}} [1 - (a^*a/2S)]^{\frac{1}{2}} a. \quad (26)$$

1) 自然也可稱這值爲 $+S$, 爲了顧及以後有外加磁場時討論方便起見,這裏選爲 $-S$ 。

倘對每一 S_j 都相應地引入代換(25)與(26), 那麼式(2)所示哈密頓量 H_0 也可寫如下式:

$$H_0 = -\frac{1}{2} N \gamma_0 J S^2 + \gamma_0 J S \sum_j n_j - \frac{1}{2} J \sum_{j\delta} n_j n_{j+\delta} - \frac{1}{2} J S \sum_{j\delta} \{a_j^* f(n_j) f(n_{j+\delta}) a_{j+\delta} + a_{j+\delta}^* f(n_{j+\delta}) f(n_j) a_j\}, \quad (27)$$

式中 $f(n) \equiv [1 - (n/2S)]^{\frac{1}{2}}$. 依式(23)算符 $S_j^z + S$ 所有最大本徵值應為 $2S$, 而依式(20)算符 $n_j = a_j^* a_j$. 所有本徵值可為任意大的正整數, 這讓我們懷疑代換(25)是否正確. 注意到

$$a^* f(n) |2S\rangle = a^* [1 - (2S/2S)]^{\frac{1}{2}} |2S\rangle = 0,$$

因此由 $0 \leq n_j \leq 2S$ ($j = 1, 2, \dots, N$) 所定義的狀態子空間是 H_0 的一個不變子空間, 即我們可限於在這子空間中討論式(27)所示 H_0 的本徵方程所有解, 這樣所得的解顯然和未變換前式(2)所示 H_0 之解一致, 亦即代換(25)是嚴格可用的, 困難的只是式(27)形的 H_0 所有本徵方程也並不容易求解. 根據在低溫領域將有

$$\langle\langle n_j \rangle\rangle_{A_\nu} \equiv \sum_\nu \langle n_j \rangle_\nu \exp(-E_\nu/kT) / \sum_\nu \exp(-E_\nu/kT) \ll 2S,$$

式中 $\langle n_j \rangle_\nu$ 表 n_j 在本徵態 ψ_ν 的期望值 [$H_0 \psi_\nu = E_\nu \psi_\nu$], Holstein-Primakoff 假定

$$\text{“在低溫領域 } f(n_j) \text{ 可看為等於 1, 而且式(27)中的第三項可忽略不計”,} \quad (28)$$

由此我們得到

$$H_0 \cong H_0^0 = -\frac{1}{2} N \gamma_0 J S^2 + \gamma_0 J S \sum_j n_j - \frac{1}{2} J S \sum_{j\delta} \{a_j^* a_{j+\delta} + a_{j+\delta}^* a_j\}. \quad (29)$$

H_0^0 的本徵方程所有解現很易求得. 想到 Bloch 的解為自旋波, Holstein-Primakoff 考慮到, 如引入下形的 Fourier 變換:

$$a_\lambda = N^{-\frac{1}{2}} \sum_j \exp(-i\lambda \cdot j) a_j, \quad a_\lambda^* = N^{-\frac{1}{2}} \sum_j \exp(i\lambda \cdot j) a_j^*, \quad (30)$$

式(29)將可能簡化. 由 Born-von Kármán 週期條件, 我們有

$$\sum_j \exp(\pm i\lambda \cdot j) = N \delta_{\lambda,0}; \quad \sum_\lambda \exp(\pm i\lambda \cdot j) = N \delta_{j,0}, \quad (31)$$

因而式(30)的逆變換為

$$a_j = N^{-\frac{1}{2}} \sum_\lambda \exp(i\lambda \cdot j) a_\lambda, \quad a_j^* = N^{-\frac{1}{2}} \sum_\lambda \exp(-i\lambda \cdot j) a_\lambda^*. \quad (32)$$

此外, 根據 a_j 所滿足交換關係(隸屬不同指標 j 的算符是互相獨立的, 故恆交換), 我們可以立即求得算符 a_λ 滿足交換關係:

$$[a_\lambda, a_\mu] = [a_\lambda^*, a_\mu^*] = 0, \quad [a_\lambda, a_\mu^*] = \delta_{\lambda\mu}. \quad (33)$$

將變換式(32)代入式(29), 我們有

$$H_0^0 = -\frac{1}{2} N \gamma_0 J S^2 + J S \sum_\lambda \left[\sum_\delta \{1 - \exp(i\lambda \cdot \delta)\} \right] a_\lambda^* a_\lambda, \quad (34)$$

由此依式(33), (19)與(20), H_0^0 的本徵值為

$$E^0 = -\frac{1}{2} N \gamma_0 J S^2 + J S \sum_\lambda \left[\sum_\delta \{1 - \exp(i\lambda \cdot \delta)\} \right] a_\lambda, \quad (35)$$

式中 a_λ 表 $a_\lambda^* a_\lambda$ 的本徵值, a_λ 可取之值為 $0, 1, 2, \dots, \infty$. 由式(17)與 ϵ 的定義我們看

到, E^0 之值和 Bloch 所得結果一致, 而且這裏所得的 E^0 公式有更大的普遍性, 因在式 (35) 中 S 之值不限於為 $1/2$. 根據式 (27), 我們也許很自然地會想到, 現在為了進一步求 H_0 的解, 我們可取 H_0 的解當作零級近似而應用攝動理論. 可惜在沒有外場或外加場很弱的情況, Holstein-Primakoff 所忽略的自旋波相互干涉項在低能量區域並不能認為小. 此外由 $0 \leq n_j \leq 2S$ ($j = 1, 2, \dots, N$) 所定義的狀態子空間現在不再是 H_0 的不變子空間, 因而上面 Holstein-Primakoff 求得的近似結果和 Bloch 理論一樣也含有過多的、問題並不該有的解, 後者使應用攝動理論所得結果的可靠性問題更增加了困難. 總的來講, Holstein-Primakoff 理論的數學表達形式的確比 Bloch 理論更簡潔明確, 因而應用更方便, 但由假定 (28) 理論仍只是一個低溫理論, 保留着和 Bloch 理論相似的局限性.

Dyson 理論 雖然在 Holstein-Primakoff 理論裏 ($H_0 - H_0^0$) 在低能量區域並不能認為小, 但這却不足以說明在這區域 Bloch 解不夠準確, 因式 (27) 所示的 H_0 並不和式 (2) 所示的 H_0 是等同的. 在引用了假定 (28) 後, 事實上如上所述、問題已有一定的變質; 這反過來却指出, Holstein-Primakoff 理論不是一個很好的使用 Bloch 解當作零級近似以進一步求更準確解的方法. 前面我們已經看到, Bloch 理論原有數學表達形式不便於應用, 因此我們首先有需要給 Bloch 解一個更簡便的數學表示. 由 Bloch 解的自旋波形式 [參看式 (7) 與式 (16)], Dyson 注意到, 如引入 Fourier 變換

$$S_\lambda = N^{-\frac{1}{2}} \sum_j S_j \exp(i\lambda \cdot j), \quad (36)$$

則 Bloch 波函數除了一個歸一化常數外也可寫為

$$|r\rangle = \prod_\lambda [(2S)^{-r_\lambda/2} (r_\lambda!)^{-\frac{1}{2}} (S_\lambda^\dagger)^{r_\lambda}] |0\rangle, \quad (37)$$

式中 $r = \sum_\lambda r_\lambda$, r_λ 表 Bloch 解所含 λ_σ ($\sigma = 1, 2, \dots, r$) 中互相相等且等於 λ 的個數, $|0\rangle$ 表鐵磁體的基態, 其定義可表為

$$S_j^- |0\rangle = 0, \quad S_j^z |0\rangle = -S |0\rangle, \quad (38)$$

上式對所有的 j 都應成立. 根據式 (38), 應用式 (24), 我們很容易地就可驗證式 (37) 所示結果; 這表達式的優越性是很顯明的, 例如由此我們可立即看出 Bloch 解互不正交; 此外由式 (36) 的逆變換

$$S_j = N^{-\frac{1}{2}} \sum_\lambda S_\lambda \exp(-i\lambda \cdot j) \quad (39)$$

[參看式 (31)], 我們很容易地且可看到¹⁾ Bloch 解的個數只是過多並不是不足, 也就是說: 任一個由 H_0 的本徵函數綫型組合而得的波函數都可寫為 Bloch 自旋波解的綫型組合, 即 Bloch 解組成一完整函數系列 (只是這系列所含函數並不全都互相正交和綫性無關, 因而一般將使以這系列所含函數為基函數而得的展開式或表象有某些不便), 以這系列為基而得的表象將稱為自旋波表象. Dyson 想到, 倘 Bloch 解的確近似地滿足式 (6) 和式 (5), 則在自旋波表象中本徵方程 (5) 和 (6) 將可能有易於處理的形式. 為了簡單起

1) 因 $|n\rangle = \prod_j (S_j^\dagger)^{n_j} |0\rangle$ 組成一完整正交函數系列, 式中 n_j ($j=1, 2, \dots, N$) 可分別地獨立地取 $0, 1, 2, \dots, 2S$ 之值; 注意 $n_j > 2S$ 時, $|n\rangle = 0$.

見,我們將直接針對式(5)而言;爲求得這本徵方程在自旋波表象中所有具體形式,我們需要知道在這表象中 H 的形式,也就是需要計算 $H|r\rangle$. 注意到,以式(39)代入式(1)並應用式(31), H 也可寫如

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\lambda} \gamma_{\lambda} S_{\lambda} \cdot S_{-\lambda} + N^{\frac{1}{2}} L S_{\lambda=0}^z, \quad (40)$$

$$\gamma_{\lambda} = \sum_{\delta} \exp(i\lambda \cdot \delta). \quad (41)$$

此外由 S_j 各分量所滿足的交換關係我們有

$$\left. \begin{aligned} [S_{\lambda}^z, S_{\mu}^{\pm}] &= N^{-1/2} S_{\lambda \pm \mu}^{\pm}, \\ [S_{\lambda}^{\pm}, S_{\mu}^{\mp}] &= -N^{-1/2} S_{\lambda \pm \mu}^{\mp}, \\ [S_{\lambda}^{\pm}, S_{\mu}^{\pm}] &= 2N^{-1/2} S_{\lambda \pm \mu}^z, \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

由此我們可以很容易地計算出以下的交換關係:

$$Q_{\rho} \equiv [H, S_{\rho}^+] = L S_{\rho}^+ - \frac{1}{2} J N^{-1/2} \sum_{\lambda} (\gamma_{\lambda} - \gamma_{\lambda-\rho}) (S_{\lambda}^z S_{\rho-\lambda}^+ - S_{\lambda}^+ S_{\rho-\lambda}^z), \quad (43)$$

$$R_{\rho\sigma} \equiv [Q_{\rho}, S_{\sigma}^+] = -\frac{1}{2} J N^{-1} \sum_{\lambda} \Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda} S_{\rho-\lambda}^+ S_{\sigma+\lambda}^+, \quad (44)$$

$$[R_{\rho\sigma}, S_{\lambda}^+] = 0, \quad (45)$$

上式中 $\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda}$ 的含意爲

$$\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda} = \gamma_{\lambda} - \gamma_{\lambda-\rho} - \gamma_{\lambda+\sigma} + \gamma_{\lambda+\sigma-\rho}. \quad (46)$$

根據式(36)與式(38),我們很快地還可求得

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle, \quad E_0 = -\frac{1}{2} J N S^2 \gamma_0 - L N S, \quad (47)$$

$$Q_{\rho}|0\rangle = (L + \varepsilon_{\rho}) S_{\rho}^+ |0\rangle, \quad \varepsilon_{\rho} = J S (\gamma_0 - \gamma_{\rho}); \quad (48)$$

應用以上結果,經過一些計算,最後有

$$H|r\rangle = \left[E_0 + \sum_{\lambda} (L + \varepsilon_{\lambda}) r_{\lambda} \right] |r\rangle + \sum_s Q_{rs} |s\rangle, \quad (49)$$

式中 Q_{rs} 爲含有 $\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda}$ 當作因子的數值係數, $|s\rangle$ 表由 $|r\rangle$ 將其中一對自旋波 (ρ, σ) 換爲另一對波數矢量分別爲 $(\rho - \lambda, \sigma + \lambda)$ 的自旋波而得的狀態(參看附錄), $\sum_s$ 表向所有 $|s\rangle$ 求和. 由式(49)的右邊我們看到,在自旋波表象裏, H 明確地分爲兩部分:含 Q_{rs} 的非對角綫部分,這部分依 $|s\rangle$ 的含意顯明地表示一自旋波被另一自旋波作了一次散射,即表示自旋波所存有的相互干涉作用,這作用的強度由 Q_{rs} 所決定. Dyson 稱這種相互干涉作用爲自旋波間的動力干擾,由此所導致的關於 Bloch 理論的修正爲動力修正. 另一部分就是對角綫部分,也就是 $|r\rangle$ 前的係數,其物理含意顯然就是表自由自旋波所有的能量. 注意這部分也就是 Bloch 所求得的能量值,這不僅說明 Bloch 所得 $M = M(T)$ 定理沒有顧及動力修正,由式(49)與式(4)我們且看到, Bloch 求 $M = M(T)$ 的方法相當於將 Spur 了解爲向自旋波表象的對角綫元素求和. 這樣做顯然是不够準確的,因爲式(4a)與式(4b)只有當 Spur 表向一正交歸一化表象的對角綫元素求和時才相等;式(37)

1) Q_{rs} 的具體形式的理論不需知道,因而未寫出,請參看附錄.

所示自旋波函數未歸一化,但當我們將式(49)右邊 $|r\rangle$ 前的係數了解為自旋波表象的對角綫元素時,對計算這些元素來說相當所選表象已歸一化了。雖然如此,我們已提到“自旋波”函數 $|r\rangle$ 不僅不全都互相不正交,而且由這些函數所組成的系列含有過多的、不必要的狀態,因此由這二因素也必將引致 Bloch 理論有所修正, Dyson 稱這類修正為動力修正。最後我們注意到,求得 Bloch $T^{3/2}$ 定理時應用了展開式(18)而忽略了其中所含高於二次方的項,由這些高次方的項所引起的修正, Dyson 稱之為譜值修正。綜合以上所述,自旋波表象從數學方面來看是有不正交與含有過多元素的缺點,但從反映物理問題的內容來說,這表象的優點却是很顯明的,不僅如此,由式(46)與式(41)我們還看到 $\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda}$ 也可表如

$$\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda} = \sum_{\delta} \exp(i\lambda \cdot \delta) [1 - \exp(-i\rho \cdot \delta)] [1 - \exp(i\sigma \cdot \delta)].$$

這說明不論 λ 為何值,只要 ρ 與 σ 所對應的波長比 $|\delta|$ 大得多時, $\Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda}$ 值將很小,因而對只含長波的自旋波狀態 Q_{rs} 值都將很小,亦即這時動力修正將很小, H 在自旋波表象裏將基本上是對角綫化的,這突出地說明對低溫領域自旋波表象的優越性。由式(49)與自旋波函數在數學性質上所有缺點要想應用自旋波表象以嚴格地求解本徵方程(5)將是一個很繁雜的工作;由式(3)與式(4)我們看到,為了嚴格地求得 $M = M(T)$ 的關係,我們並不必須首先求出 H 的本徵值,這裏的一個新問題是:自旋波表象不是一個正交表象,如何和式(4b)相似地應用一個非正交表象,這裏即應用式(49),以嚴格地表達狀態和 Z 。Dyson 成功地解決了這問題,但由於式(49)形式的複雜與狀態函數 $|r\rangle$ 在數學性質上存有的缺點,要想由此直接計算狀態和 Z 仍是很不方便的。為了克服這困難, Dyson 想到 Holstein-Primakoff 理論中所有的優點和缺點,在這基礎上引入了理想自旋波表象並尋求得和式(49)在優點方面等效而形式却更簡單的哈密頓量。由此使 Z (實際計算是針對自由能 $A = -kT \ln Z$ 進行的,因後者的數學表達式將更為簡單)有一個新的嚴格數學表達式。這表達式不僅便於進行計算,且使我們得以辨明運動修正以及動力與譜值修正分別所將有的影響。據此再通過引入恰當的展開式, Dyson 除了證明在低溫領域運動修正的影響可以忽略不計,並且指出譜值修正的計算十分簡單而對動力修正的計算我們可以引用場論中强有力的 Feynman-Dyson 方法。由此在低溫領域, Dyson 求得以下甚為精確的公式:

$$M(T)/m_0 = S - a_0\theta^{3/2} - a_1\theta^{5/2} - a_2\theta^{7/2} - a_3S^{-1}\theta^4 + O(\theta^{9/2}), \quad (50)$$

式中 $a_i (i = 0, 1, 2, 3)$ 等均為常數,例如對簡單立方晶格我們有 $a_0 = \zeta(3/2) = 2.612$, $a_1 = 3.15$, $a_2 = 11.5$, $a_3 = 27.8$ ($S = 1/2$), 21.7 ($S = 1$); 這公式表明,對低溫領域的實際應用而言, Bloch 的 $T^{3/2}$ 定理是足夠準確的。推導得式(50)時,關於由兩個以上自旋波相互干涉作用所引起的修正項 Dyson 只引用了 Born 展開進行估計(結果表明,這些項和溫度的方次關係均高於溫度的五次方,故公式中未具體寫出),對展開式的收斂性沒有作嚴密的驗證,這是式(50)可能尚有不够嚴格的地方,但和其他企圖改進 Bloch 定理的理論相比,除了這點外 Dyson 理論中不含有任何只是看起來很合理但却未嚴加論證的假設。此外,由於實際計算狀態和 Z 與自由能 A 時所用等效哈密頓量也在低能量區域有界,因而 Born 展開式收斂的存在可能性是很大的,這說明式(50)的精確性的確可以引入相

信。Dyson 理論所用方法與推導過程的詳情將爭取在報告中較仔細地討論，這裏就不多敘述了。理論顯然可能會有其他的應用，也可能導致建立解決其他問題的方法，爲了能較清楚地反映這些可能性，我們也將爭取足夠詳細地談論到 Dyson 理論的關鍵與引入近似的地方。

參 考 文 獻

- Bloch, F., *Z. f. Phys.* **61** (1930), 206.
 Bethe, H. A., *Z. f. Phys.* **71** (1931), 205.
 Opechowski, W., *Physica* **4** (1937), 715.
 Holstein, T. and Primakoff, H., *Phys. Rev.* **58** (1940), 1098.
 Schafroth, M. R., *Proc. Phys. Soc.* **A67** (1954), 33.
 Van Kranendonk, J., *Physica* **21** (1955), 81, 749 and 925.
 Dyson, F. J., *Phys. Rev.* **102** (1956), 1217 and 1230.

附 錄

式(49)中 $|s\rangle$ 與 Q_{rs} 的具體形式

應用數學歸納法，由式(43)，(44)與(45)，我們很容易地可以求得

$$\begin{aligned} H \prod_{\lambda} (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}} = & \left\{ \prod_{\lambda} (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}} \right\} H + \sum_{\lambda} \left\{ \prod_{\sigma \neq \lambda} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}} \right\} r_{\lambda} (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-1} Q_{\lambda} + \\ & + \sum_{\lambda} \left\{ \prod_{\sigma \neq \lambda} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}} \right\} \frac{r_{\lambda}(r_{\lambda}-1)}{2} (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-2} R_{\lambda\lambda} + \\ & + \sum_{\lambda < \sigma} \sum_{\tau \neq \lambda \& \sigma} \left\{ \prod_{\tau \neq \lambda \& \sigma} (S_{\tau}^{\dagger})^{r_{\tau}} \right\} r_{\lambda} r_{\sigma} (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-1} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}-1} R_{\lambda\sigma}, \end{aligned}$$

由此根據式(37)，(44)，(47)與(48)，我們有

$$\begin{aligned} H|r\rangle = & \left[E_0 + \sum_{\lambda} (L + \epsilon_{\lambda}) r_{\lambda} \right] |r\rangle + \sum_{\mu} \sum_{\lambda} \left(-\frac{1}{4} JN^{-1} \right) [r_{\lambda}(r_{\lambda}-1)]^{1/2} \Gamma_{\lambda\lambda}^{\mu} \times \\ & \times \left\{ \left[\prod_{\sigma \neq \lambda} (2S)^{-r_{\sigma}/2} (r_{\sigma}!)^{-1/2} \right] (2S)^{-r_{\lambda}/2} [(r_{\lambda}-2)!]^{-1/2} \left[\prod_{\sigma \neq \lambda} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}} \right] \times \right. \\ & \times (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-2} S_{\lambda-\mu}^{\dagger} S_{\lambda+\mu}^{\dagger} \left. \right\} |r\rangle + \sum_{\mu} \sum_{\lambda < \sigma} \left(-\frac{1}{2} JN^{-1} \right) r_{\lambda}^{1/2} r_{\sigma}^{1/2} \Gamma_{\lambda\sigma}^{\mu} \times \\ & \times \left\{ \left[\prod_{\tau \neq \lambda \& \sigma} (2S)^{-r_{\tau}/2} (r_{\tau}!)^{-1/2} \right] (2S)^{-r_{\lambda}/2} [(r_{\lambda}-1)!]^{-1/2} (2S)^{-r_{\sigma}/2} [(r_{\sigma}-1)!]^{-1/2} \times \right. \\ & \times \left. \left[\prod_{\tau \neq \lambda \& \sigma} (S_{\tau}^{\dagger})^{r_{\tau}} \right] (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-1} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}-1} S_{\lambda-\mu}^{\dagger} S_{\sigma+\mu}^{\dagger} \right\} |r\rangle, \end{aligned}$$

式中只有 $\sum_{\mu}$ 表向所有波數矢量求和， $\sum_{\lambda}$ 與 $\sum_{\sigma}$ 的含意由等式 $\sum_{\lambda} r_{\lambda} = r$ 所規定。上式表明， $|s\rangle$ 與 Q_{rs} 或爲

$$\begin{aligned} |s\rangle = & \left\{ \left[\prod_{\sigma \neq \lambda} (2S)^{-r_{\sigma}/2} (r_{\sigma}!)^{-1/2} \right] (2S)^{-r_{\lambda}/2} [(r_{\lambda}-2)!]^{-1/2} \times \right. \\ & \times \left. \left[\prod_{\sigma \neq \lambda} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}} \right] (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-2} S_{\lambda-\mu}^{\dagger} S_{\lambda+\mu}^{\dagger} \right\} |r\rangle, \end{aligned}$$

$$Q_{rs} = \left(-\frac{1}{4} JN^{-1} \right) r_{\lambda} (r_{\lambda} - 1)^{1/2} \Gamma_{\lambda\lambda}^{\mu},$$

或為

$$\begin{aligned} |s\rangle = & \left\{ \left[\prod_{\tau \neq \lambda \& \sigma} (2S)^{-r_{\lambda}/2} (r_{\tau}!)^{-1/2} \right] (2S)^{-r_{\lambda}/2} [(r_{\lambda}-1)!]^{-1/2} (2S)^{-r_{\sigma}/2} [(r_{\sigma}-1)!]^{-1/2} \times \right. \\ & \times \left. \left[\prod_{\tau \neq \lambda \& \sigma} (S_{\tau}^{\dagger})^{r_{\tau}} \right] (S_{\lambda}^{\dagger})^{r_{\lambda}-1} (S_{\sigma}^{\dagger})^{r_{\sigma}-1} S_{\lambda-\mu}^{\dagger} S_{\lambda+\mu}^{\dagger} \right\} |r\rangle, \\ Q_{rs} = & \left(-\frac{1}{2} JN^{-1} \right) r_{\lambda}^{1/2} r_{\sigma}^{1/2} \Gamma_{\lambda\sigma}^{\mu}, \end{aligned}$$

以上即為所欲求得的結果。