

具有四次幂交换作用的 Heisenberg 铁磁体的低温自旋波理论*

陶 瑞 宝 蒲 富 恪

(复旦大学物理系) (中国科学院物理研究所)

提 要

本文讨论具有四次幂交换作用的 Heisenberg 铁磁体, 用 Малеев 玻色变换, 在低温区建立 $\langle S^z \rangle$ 的严格展式, 正确地包括了动力学相互作用和运动学相互作用, 得到自旋波谱和自发磁化的正确温度依赖关系。

一、引 言

在某些化合物中的磁性反常^[1,2], 说明自旋四次幂的交换作用 $(S_i \cdot S_j)^2$ 必须考虑^[3]. 这类磁学体系的相变行为与四次幂交换作用的强度关系密切, 往往可以由原来的第二类相变变为第一类相变^[4], 并且除了铁磁、顺磁相外, 还可以出现四极有序相^[4]. 对于这样一个体系的热力学理论, 最近几年已有不少发展, 较早的有 Joseph 的高温图形展开方法^[5], Allen 的高温集团展开^[6], Nauciel-Bloch^[4] 的平均场理论. 最近几年比较多的采用双时格林函数方法. 早期的这种方法有 Chaddha (1973)^[7], Chakraborty (1974)^[8], 后来一些作者对格林函数退耦方式作了各种不同的修改, 得到各种不同的结果^[9-11]. 在格林函数方法中, 得到高低温统一的 $\langle S^z \rangle$ 表达式, 结果按不同的作者可以有较大差别. 对于只有二次幂交换作用的各向同性的 Heisenberg 铁磁体, 在低温下有了一个严格的 Dyson 自旋波理论^[12], 因此许多理论工作都可以用此标准理论对照、检验. 可是, 这个体系至今还没有一个严格的低温自旋波理论, 因此目前的许多理论的比较, 至少在低温区还缺少一个标准. 本文用我们以前建立的方法^[13], 把它推广到此复杂体系, 建立了这个体系在低温区严格的自旋波理论. 并对大家感兴趣的 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 体系, 给出正确的自旋波谱(精确到 T^3 项)以及 $\langle S^z \rangle$ 有序参量的低温展式.

二、方法的描述

我们讨论的哈密顿量如下:

* 1979 年 5 月 12 日收到.

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{ij} I(i-j) \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{ij} I(i-j) (\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^+ + \hat{S}_i^- \cdot \hat{S}_j^-) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{ij} I(i-j) [\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^+ + \hat{S}_i^- \cdot \hat{S}_j^-] \\
&\quad - \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{ij} I(i-j) \left[\frac{\hat{S}_i^+ \cdot \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \cdot \hat{S}_j^+}{2} + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right]. \quad (1)
\end{aligned}$$

只考虑最近邻的交换作用, 并且是各向同性及铁磁性的. $\hat{S}^{\pm}$ 和 $\hat{S}^z$ 分别满足角动量对易关系:

$$[\hat{S}_i^-, \hat{S}_i^+] = -2\hat{S}_i^z \delta_{ii}, \quad [\hat{S}_i^{\pm}, \hat{S}_j^z] = \mp \hat{S}_i^{\pm} \delta_{ij} \quad (2)$$

$\hat{S}_i^z$ 的热力学平均定义为

$$\langle \hat{S}_i^z \rangle_s = \text{sp} \left[e^{-\beta \hat{H}} \sum_i \hat{S}_i^z \right] / \text{sp} [e^{-\beta \hat{H}}], \quad (3)$$

并限于 $(\hat{S}^+)^n = (\hat{S}^-)^n = 0$ 的子空间. 这就意味着我们讨论 $(n = 2S + 1)$ 自旋为 S 的体系. 满足 $(\hat{S}^+)^n = (\hat{S}^-)^n = 0$ 的子空间的投影算符为 $\hat{P}_s = \prod_i \theta(S' - \hat{S}_i^z)$, $S' = S + \varepsilon$, ε 为 > 0 的微量, $\theta(x)$ 为阶跃函数. 我们引进 Малеев 变换 $\hat{T}$ 如下:

$$\begin{aligned}
\hat{T}^{-1} \hat{S}_i^{\pm} \hat{T} &= -S + \hat{a}_i^{\pm} \hat{a}_i, \quad \hat{T}^{-1} \hat{S}_i^z \hat{T} = \sqrt{2S} \hat{a}_i^{\dagger}, \\
\hat{T}^{-1} \hat{S}_i^z \hat{T} &= \sqrt{2S} \left[\hat{a}_i - \frac{\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \hat{a}_i}{2S} \right], \quad \hat{T}^{-1} \hat{P}_s \hat{T} = \prod_i \theta(2S' - \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i) \equiv \hat{P}_a, \quad (4)
\end{aligned}$$

$\hat{a}_i, \hat{a}_i^{\dagger}$ 满足玻色对易关系, 且不同格点之间的算符互相对易. 正如我们以前的工作^[13]中那样, 有

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_i^z \rangle_s &= \text{sp} \left[e^{-\beta \hat{H}_s} \sum_i \hat{S}_i^z \hat{P}_s \right] / \text{sp} [e^{-\beta \hat{H}_s} \hat{P}_s] \\
&= \text{sp} \left\{ \hat{T} \left[\hat{T}^{-1} e^{-\beta \hat{H}_s} \hat{T} \left(\hat{T}^{-1} \sum_i \hat{S}_i^z \hat{T} \right) \hat{T}^{-1} \hat{P}_s \hat{T} \right] \hat{T}^{-1} \right\} / \text{sp} \{ \hat{T} \hat{T}^{-1} e^{-\beta \hat{H}_s} \hat{T} \hat{T}^{-1} \hat{P}_s \} \\
&= \frac{\sum_u \langle u | \hat{T} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_s} \hat{T}^{-1} \hat{H} \hat{T} \left(-NS + \sum_i \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i \right) \hat{P}_a \right\} \hat{T}^{-1} | u \rangle}{\sum_u \langle u | \hat{T} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_s} \hat{T}^{-1} \hat{H} \hat{T} \hat{P}_a \right\} \hat{T}^{-1} | u \rangle}. \quad (5)
\end{aligned}$$

这里由于用了 $\hat{P}_s$, 所以 $|u\rangle$ 为一切自旋空间

$$|u\rangle = \prod_i [(u_i!)^{-\frac{1}{2}} (\hat{S}_i^z)^{u_i} |0\rangle], \quad (6)$$

$|0\rangle$ 为自旋全部沿负 z 方向排列的“真空态”. $\hat{S}^- |0\rangle = 0$. 记 $|0\rangle = \hat{T}^{-1} |0\rangle$, 则 $|0\rangle$ 为玻色算符 $\hat{a}_i$ 所作用的真空态. 可证: $\hat{a}_i |0\rangle = 0$ 及 $\langle 0 | \hat{a}_i^{\dagger} = 0$. 有

$$\hat{T}^{-1} |u\rangle = \prod_i (u_i!)^{-\frac{1}{2}} (\hat{a}_i^{\dagger})^{u_i} |0\rangle. \quad (7)$$

记

$$\hat{H}_0 = \hat{T}^{-1} \hat{H} \hat{T} = U_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_4 + \hat{H}_6 + \hat{H}_8, \quad (8)$$

$$U_0 = -\frac{S^2}{2} \nu I(0)N - \frac{1}{2} \tilde{\beta} \nu S^4 I(0)N \quad (\nu \text{ 为最近邻数}), \quad (9)$$

$$\hat{H}_0 = A_0 \sum_{ij} I(i-j)(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = & A_1 \sum_{ij} I(i-j)[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i] \\ & - A_2 \sum_{ij} I(i-j)[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j - 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i], \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_6 = & B_1 \sum_{ij} I(i-j)[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i] \\ & + B_2 \sum_{ij} I(i-j)[\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_j - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i], \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_8 = & -\frac{\tilde{\beta}}{4} \sum_{ij} I(i-j)[3\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i - 4\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i \\ & + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i], \end{aligned} \quad (13)$$

(10)–(13) 式中的常数

$$A_0 = S + 2\tilde{\beta}S^3 - 2\tilde{\beta}S^2, \quad (14)$$

$$A_1 = \frac{1}{2} [1 + \tilde{\beta} - 6\tilde{\beta}S + 6\tilde{\beta}S^2], \quad A_2 = [2\tilde{\beta}S^2 - \tilde{\beta}S]/2, \quad (15)$$

$$B_1 = \frac{3}{2} [2\tilde{\beta}S - \tilde{\beta}], \quad B_2 = \frac{1}{2} [2\tilde{\beta}S - \tilde{\beta}]. \quad (16)$$

当 $S = \frac{1}{2}$ 时,

$$A_0 = A_1 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \tilde{\beta} \right], \quad A_2 = 0, \quad B_1 = B_2 = 0;$$

当 $S = 1$ 时,

$$A_0 = 1, \quad A_1 = \frac{1}{2} (1 + \tilde{\beta}), \quad A_2 = \frac{1}{2} \tilde{\beta}, \quad B_1 = \frac{3}{2} \tilde{\beta}, \quad B_2 = \frac{1}{2} \tilde{\beta}. \quad (17)$$

如果我们定义玻色粒子数算符 ($n_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$) 的本征值 $\geq 2S$ 的态为非固有态; 反之称为固有态. 它们分别记为 $|I\rangle$ 和 $|P\rangle$. 在附录中, 我们证明了 $\langle P | \hat{H}_D | I \rangle = 0$. 这样 (5) 式可写成

$$\sum_i \langle \hat{S}_i \rangle_s = -NS + \frac{\text{sp} \left[e^{-\beta \hat{H}_D} \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \prod_i \theta(2S' - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \right]}{\text{sp} \left[e^{-\beta \hat{H}_D} \prod_i \theta(2S' - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \right]}. \quad (18)$$

在文献 [13] 中, 我们证明了如下等式:

$$\begin{aligned} \theta(2S' - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) &= \sum_{l=0}^{\infty} B_l (\hat{a}_i^\dagger)^l (\hat{a}_i)^l, \\ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \theta(2S' - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) &= \sum_{l=1}^{\infty} C_l (\hat{a}_i^\dagger)^l (\hat{a}_i)^l, \end{aligned} \quad (19)$$

$$B_l = \begin{cases} 1 & l = 0, \\ 0 & l \leq 2S, \\ \frac{(-1)^{l-2S}(2S+1)(2S+2)\cdots(l-1)}{l!(l-2S-1)!} & l \geq 2S+1; \end{cases} \quad (20)$$

$$C_l = \begin{cases} 1 & l = 1, \\ 0 & l \leq 2S, \\ \frac{(-1)^{l-2S}2S(2S+1)\cdots(l-2)}{(l-1)!(l-2S-1)!} & l \geq 2S+1. \end{cases} \quad (21)$$

当 $S = 1/2$ 时,

$$\begin{aligned} \sum_j \langle \hat{S}_j^z \rangle_s &= -NS + \sum_i \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle_F - \sum_i \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i \rangle_F \\ &+ \frac{1}{2} \sum_i \langle \hat{a}_i^{\dagger 3} \hat{a}_i^3 \rangle_F + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle_F \\ &- \frac{1}{2} \sum_i \sum_{(j \neq i)} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j \rangle_F + O(\langle (\hat{a}^\dagger)^4 (\hat{a})^4 \rangle_F), \end{aligned} \quad (22)$$

式中 $\langle \hat{A} \rangle_F$ 表示对整个玻色粒子空间求平均,

$$\langle \hat{A} \rangle_F = \text{sp}[e^{-\beta \hat{H}_D} \hat{A}] / \text{sp}[e^{-\beta \hat{H}_D}]; \quad (23)$$

当 $S = 1$ 时,有

$$\begin{aligned} \sum_j \langle \hat{S}_j^z \rangle_s &= -NS + \sum_i \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle_F - \frac{1}{2} \sum_i \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i \hat{a}_i \rangle_F \\ &+ O[\langle (\hat{a}^\dagger)^4 (\hat{a})^4 \rangle_F]. \end{aligned} \quad (24)$$

所有运动学相互作用都变为高级关联函数,下面立即会发现,它们是按 T 的高次方趋于零.

现在把 $\hat{H}_0$ 作为零级哈密顿量,其他作为相互作用 $\hat{H}_1$,

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_1 + \hat{H}_6 + \hat{H}_8, \quad (25)$$

$\hat{H}_1$ 表征了自旋波的动力学相互作用. 作

$$\begin{aligned} \hat{a}_i &= \left(\frac{1}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k \hat{a}_k e^{-ik \cdot i}, \\ I(i-j) &= \frac{1}{N} \sum_k I(k) e^{ik \cdot (i-j)}, \end{aligned} \quad (26)$$

则

$$\hat{H}_0 = A_0 \sum_k [I(0) - I(k)] \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_k \varepsilon_k^{(0)} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \frac{A_1}{N} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} [I(k_1) - I(k_1 - k_4)] \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \\ &\quad (k_1 + k_2 = k_3 + k_4) \\ &- \frac{A_2}{N} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} [I(k_1 + k_2) - 2I(k_4) + I(0)] \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\hat{H}_6 = \frac{B_1}{N^2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \cdots \sum_{k_6} [I(k_1 + k_2 - k_5 - k_6)]$$

(k₁ + k₂ + k₃ = k₄ + k₅ + k₆)

$$-I(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_6)]\hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_2}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_4}\hat{a}_{\mathbf{k}_5}\hat{a}_{\mathbf{k}_6} \\ + \frac{B_2}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\mathbf{k}_2} \cdots \sum_{\mathbf{k}_6} [I(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) - I(\mathbf{k}_1)]\hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_2}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_4}\hat{a}_{\mathbf{k}_5}\hat{a}_{\mathbf{k}_6}, \quad (29)$$

(k₁+k₂+k₃=k₄+k₅+k₆)

$$\hat{H}_8 = -\frac{\tilde{\beta}}{4} \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_8} [3I(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_7 - \mathbf{k}_8) - 4I(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_8) \\ + I(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)]\hat{a}_{\mathbf{k}_1}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_2}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_3}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_4}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_5}\hat{a}_{\mathbf{k}_6}\hat{a}_{\mathbf{k}_7}\hat{a}_{\mathbf{k}_8}\delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \\ + \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_5 - \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}_7 - \mathbf{k}_8). \quad (30)$$

由各向同性的要求, 有 $I(\mathbf{k}) = I(|\mathbf{k}|)$.

在零级近似下, 不难算得

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \rangle_0 = \frac{1}{N} \sum_i \text{sp} [e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i] / \text{sp} [e^{-\beta \hat{H}_0}] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_0 \\ = a_0 \theta^{\frac{3}{2}} + a_1 \theta^{\frac{5}{2}} + a_2 \theta^{\frac{7}{2}} + O(\theta^{\frac{9}{2}}), \quad (31)$$

式中 a_0 , a_1 及 a_2 与 Dyson 的自由自旋波近似情况下的系数完全一样,

$$a_0 = \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \quad a_1 = \frac{3}{4} \pi \nu \zeta\left(\frac{5}{2}\right), \quad a_2 = \pi^2 \omega \nu^2 \zeta\left(\frac{7}{2}\right), \quad (32)$$

式中 ν 为最近邻数目,

$$\omega = \begin{cases} \frac{33}{32} & \text{简立方晶格,} \\ \frac{281}{288} & \text{体心立方晶格,} \\ \frac{15}{16} & \text{面心立方晶格.} \end{cases} \quad (33)$$

(31) 式中,

$$\theta^{-1} = \frac{2}{3} \pi \beta A_0 \nu I(0), \quad (34)$$

$$\zeta(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \quad (\text{黎曼 } \zeta \text{ 函数}). \quad (35)$$

由 (17) 式知, 当 $S = 1/2$ 时, 四次幂相互作用对自由自旋波的影响是比较大的, 它通过 θ 中的 $A_0 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \tilde{\beta} \right]$ 对 $\Sigma \langle \hat{S}_i^z \rangle_0$ 的 $T^{\frac{3}{2}}$ 项就有影响. 但当 $S = 1$ 时, 由于 $A_0 = 1$, 结果 (31) 式和 $\tilde{\beta} = 0$ 时 (即没有四次幂交换作用时) 的自由自旋波完全一样. 也就是说, 在 $S = 1$ 的体系中, 即使 $\tilde{\beta}$ 比较大, 但从自由自旋波近似来看, 它好像一点不存在四次幂交换作用一样. 下面进一步分析在现在的复杂磁学体系中, 动力学作用和运动学作用的影响.

三、自旋波谱的动力学修正

在没有四次幂交换作用的铁磁体中, 动力学作用对自旋波谱的修正是 $T^{\frac{3}{2}}$ 项开始的. 在现在情况下, 必须重新考虑. 为此, 需要求解格林函数 $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) / \hat{a}_{\mathbf{k}}^+(0) \rangle_E = G_{\mathbf{k}}(E)$ 的极

点. 这里 $\hat{a}_k(t) = e^{iH_0 t} \hat{a}_k e^{-iH_0 t}$. 以 $\hat{H}_1$ 作为相互作用, 画出费曼图形. 对应每一条内线
和每一个闭合圈, 多一个求和号 $\sum_k$, 在低温下它至少提供一个 $T^{\frac{1}{2}}$ 的因子. 所以如果只
要求精确到 T^3 项, 那末只需考虑如下费曼图形 (见图 1). $\hat{H}_1$ 的贡献中, 至少有三条内线,

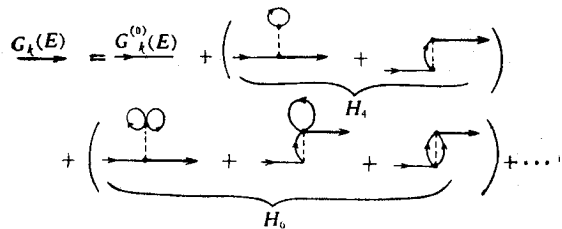


图 1

所以对 ε_k 的修正至少是 $T^{\frac{3}{2}}$ 项的. 分别把 H_1 的贡献记作 $\varepsilon_k^{(4)}$, H_0 的贡献记作 $\varepsilon_k^{(6)}$ 等等,
那末通过计算, 可以得如下结果:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= \varepsilon_k^{(0)} + \varepsilon_k^{(4)} + \varepsilon_k^{(6)} + O(T^{\frac{9}{2}}), \\ \varepsilon_k^{(0)} &= A_0 [I(0) - I(k)], \end{aligned} \quad (37)$$

$$\varepsilon_k^{(4)} = \frac{2(A_1 + 2A_2)}{N} \sum_{k_1} [I(k) + I(k_1) - I(k - k_1) - I(0)] n_{k_1} \quad (38)$$

式中

$$n_{k_1} = \langle \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle_0 = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k^{(0)}} - 1}. \quad (39)$$

通过计算可得下面结果:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^{(4)} &= -2(A_1 + 2A_2) \pi \nu \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \theta^{\frac{1}{2}} [I(0) - I(k)] + O(T^4) \\ &= -\frac{2(A_1 + 2A_2)}{A_0} \pi \nu \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \theta^{\frac{1}{2}} \varepsilon_k^{(0)} + O(T^4), \end{aligned} \quad (40)$$

$$\varepsilon_k^{(6)} = \frac{B_1 - 6B_2}{A_0} [a_0 \theta^{\frac{3}{2}}]^2 \varepsilon_k^{(0)} + O(T^4). \quad (41)$$

考虑了动力学相互作用 $\hat{H}_1$ 以后, 自旋波谱为

$$\varepsilon_k = \left[1 - \frac{2(A_1 + 2A_2)}{A_0} \pi \nu \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \theta^{\frac{1}{2}} + \frac{B_1 - 6B_2}{A_0} a_0^2 \theta^{\frac{3}{2}} \right] \varepsilon_k^{(0)} + O(T^4). \quad (42)$$

当 $S = 1/2$ 时, $B_1 = B_2 = 0$,

$$\varepsilon_k = \left[1 - 2\pi \nu \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \theta^{\frac{1}{2}} \right] \varepsilon_k^{(0)} + O(T^4), \quad (43)$$

即没有 T^3 项. 上式中虽然 $\varepsilon_k^{(0)}$ 的系数中只包含 $\theta^{\frac{1}{2}}$ 项, 但由于 $\varepsilon_k^{(0)}$ 中包含有 $A_0 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \beta \right]$, 所以四次幂交换作用对自旋波谱的温度无关项有修正, 其次通过 θ 中的 A_0 对 $T^{\frac{1}{2}}$ 项有修正. 但当 $S = 1$ 时,

$$\varepsilon_k = \left[1 - (1 + 3\tilde{\beta}) \pi \nu \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \theta^{\frac{1}{2}} - \frac{3}{2} \tilde{\beta} \left(\zeta \left(\frac{3}{2} \right) \right)^2 \theta^{\frac{3}{2}} \right] \varepsilon_k^{(0)} + O(T^4). \quad (44)$$

由于现在 $A_0 = 1$, 不包含 $\tilde{\beta}$, 所以 θ_0 及 $\varepsilon_k^{(0)}$ 与没有四次幂交换时的量一样. 因此 $S = 1$ 时, 四次幂对自旋波谱的修正从 $T^{\frac{1}{2}}$ 开始的. 由此可见, 对 $S = 1$ 的体系, 在低温下, 四次幂交换作用的影响正好反常地小, 而 $S = 1/2$ 时, 四次幂交换作用的影响就比较大(只要 $\tilde{\beta}$ 较大), 它直接修正了与温度无关的项 $\varepsilon_k^{(0)}$.

四、自发磁化

自发磁化 $M_z = \mu_B \sum_i \langle S_i^z \rangle_s$, 因此我们要求 $\sum_i \langle S_i^z \rangle_s$. 在考虑了动力学相互作用以后, 有

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle_F &= -S + \frac{1}{N} \sum_k \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle_F = -S + \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} - 1} \\ &= -S + \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k^{(0)} [1 + \Delta \varepsilon_k (T^{\frac{1}{2}})]} - 1} \\ &= -S + \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k^{(0)}} - 1} - \frac{1}{N} \sum_k \frac{\beta \varepsilon_k^{(0)} \Delta \varepsilon_k (T^{\frac{1}{2}}) e^{\beta \varepsilon_k^{(0)}}}{(e^{\beta \varepsilon_k^{(0)}} - 1)^2} + O(T^{\frac{3}{2}}) \\ &= -S + a_0 \theta^{\frac{1}{2}} + a_1 \theta^{\frac{3}{2}} + a_2 \theta^{\frac{5}{2}} + a_3 \frac{2(A_1 + 2A_2)}{A_0} \theta^4 + O(\theta^{\frac{7}{2}}), \end{aligned} \quad (45)$$

式中 a_0, a_1, a_2 的定义见 (32) 式, 而

$$a_3 = \frac{3}{2} \pi \nu \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right). \quad (46)$$

当 $S = 1$ 时, 运动学相互作用对 $\frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle_s$ 的修正是(见 (24) 式)

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_j \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger a_j a_j a_j \rangle_F = O(T^{\frac{3}{2}}). \quad (47)$$

此时 θ 中的 A_0 变为 1, 因此对于 $\sum_i \langle S_i^z \rangle_s$, 一直到 $T^{\frac{7}{2}}$ 项, 四次幂交换作用没有丝毫的影响. 修正只发生在 θ^4 项上. 由四次幂交换作用产生的对 $\frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle$ 的附加贡献为

$$\Delta \langle S^z \rangle = 3\tilde{\beta} a_3 \theta_0^4 + O(\theta^{\frac{7}{2}}). \quad (48)$$

这就是为什么 $S = 1$ 的磁学体系中, 即使四次幂交换作用较强烈, 但低温下的热力学行为却好像几乎没有四次幂交换作用的原因.

现在讨论 $S = 1/2$ 的体系中, 运动学相互作用的修正. 这时运动学修正的主要项为

$$-\frac{1}{N} \sum_j \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger a_j a_j \rangle_F = -\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\mathbf{p}_2} \sum_{\mathbf{p}_3} \sum_{\mathbf{p}_4} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \rangle_F.$$

$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$

在零级近似下

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \rangle_0 = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \rangle_0 \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \rangle_0 \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_4} + \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \rangle_0 \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \rangle_0 \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_4} \delta_{\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3},$$

因此,

$$-\frac{1}{N} \sum_j \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger a_j a_j \rangle_0 = -2n^2 = -2 \left[\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \right]^2 \theta^3 - 4a_0 a_1 \theta^4 + O(\theta^5),$$

$$n = \frac{1}{N} \sum_k \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle_0. \quad (49)$$

如文献[13]中附录所提出的计算那样,我们也可以计算 $\hat{H}_1$ 对此的修正,如果只要精确到 θ^4 项,只需计算 $\hat{H}_1$ 的一级修正,结果一级修正也出现 T^3 项,它的贡献为 $2n^2$,正好抵消了(49)式的零级修正项($-2n^2$).所以在 $S = 1/2$ 情况下,运动学相互作用的修正也只是从 T^4 项开始.不存在 T^3 项的修正.但由于 $S = 1/2$ 体系,四次幂交换作用对自发磁化的主要修正发生在 $T^{\frac{3}{2}}$ 项上,其次是 $T^{\frac{5}{2}}$, $T^{\frac{7}{2}}$ 项上.因此, T^4 项修正就微乎其微了.所以低温下 $\tilde{\beta}$ 对自发磁化的主要修正可以忽略运动学相互作用.

附 录

现在来证明 $\langle P | \hat{H}_D | I \rangle = 0$. 这里仅限于讨论 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 两种情况,这也是大家感兴趣的情况.

对 $S = 1/2$ 体系, $|P\rangle$ 态中,每个格点最多只有一个玻色子.在下面计算中,我们已利用了如下等式:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i (\hat{a}_i^\dagger)^n |0\rangle &= n (\hat{a}_i^\dagger)^{n-1} |0\rangle, \\ \langle 0 | (\hat{a}_i)^n (\hat{a}_i^\dagger)^n |0\rangle &= n!. \end{aligned}$$

上述等式不难用玻色对易关系证明.

因为 $S = 1/2$ 情况,我们有 $A_2 = B_1 = B_2 = 0$. 所以

$$\begin{aligned} \langle P | \hat{H}_D | I \rangle &= \langle P | \hat{H}_0 | I \rangle + \langle P | \hat{H}_4 | I \rangle \\ &= -A_0 \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | I \rangle + A_1 \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle, \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | I \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}!} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j (\hat{a}_i^\dagger)^2 | 0 \rangle = \frac{2}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}, \\ \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}!} \langle 0 | \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i (\hat{a}_i^\dagger)^2 | 0 \rangle = \sqrt{2}, \end{aligned}$$

故

$$\langle P | \hat{H}_D | I \rangle = \sqrt{2} (A_1 - A_0) \sum_{ij} I(i-j) = 0.$$

现在设法证明 $S = 1$ 体系中 $\langle P | \hat{H}_1 | I \rangle = 0$. 在 $S = 1$ 体系中,仔细观察 $\hat{H}_D$,发现要使 $\langle P | \hat{H}_1 | I \rangle$ 有贡献,非固有态只能限于三粒子态和四粒子态两种情况.先讨论 $|I\rangle$ 为三粒子态情况,记为 $|I\rangle_3$:

$$\begin{aligned} \langle P | \hat{H}_D | I \rangle_3 &= -A_0 \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | I \rangle_3 = [-\sqrt{3} - \sqrt{6}] \sum_{ij} I(i-j), \\ \langle P | \hat{H}_4 | I \rangle_3 &= A_1 \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3 + 2A_2 \sum_{ij} I(i-j) \\ &\quad \cdot \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j | I \rangle_3 - \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3, \\ &= \frac{1}{2} (1 + \tilde{\beta}) \left[\frac{3!2!2!}{\sqrt{3!2!2!}} + \frac{3!2!}{\sqrt{3!2!}} \right] \sum_{ij} I(i-j) + 2A_2 \frac{3!2!}{\sqrt{3!2!2!}} \sum_{ij} I(i-j) \\ &\quad - \sqrt{3} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) = \left\{ \frac{1}{2} (1 + \tilde{\beta}) (2\sqrt{6} + 2\sqrt{3}) + [\sqrt{6} \tilde{\beta} - \sqrt{3} \tilde{\beta}] \right\} \sum_{ij} I(i-j), \\ \langle P | \hat{H}_6 | I \rangle_3 &= -\frac{3}{2} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3 \\ &\quad + \frac{1}{2} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) \{ \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3 - \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3 \} \\ &= -3\sqrt{6} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) - \sqrt{6} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) = -4\sqrt{6} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j), \\ \langle P | \hat{H}_8 | I \rangle &= \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j) \langle P | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i | I \rangle_3 = 2\sqrt{6} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j). \end{aligned}$$

结果总贡献为

$$(P|\hat{H}_D|I)_s = 0,$$

即由三粒子非固有态到固有态的 $\hat{H}_D$ 的矩阵元自动为零。现在计算四粒子非固有态的贡献:

$$(P|\hat{H}_8|I)_s = -\frac{\tilde{\beta}}{4} \sum_{ij} I(i-j) (P|\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j|I)_s = -\sqrt{6} \tilde{\beta} \sum_{ij} I(i-j),$$

$$(P|\hat{H}_6|I)_s = \frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{ij} I(i-j) (P|\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_j|I)_s = 2\sqrt{6} \tilde{\beta},$$

$$(P|\hat{H}_4|I)_s = -\frac{\tilde{\beta}}{2} \sum_{ij} I(i-j) (P|\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j|I)_s = -\sqrt{6} \tilde{\beta}.$$

结果

$$(P|\hat{H}_1|I)_s = (P|\hat{H}_8|I)_s + (P|\hat{H}_6|I)_s + (P|\hat{H}_4|I)_s = 0.$$

几乎很易发现, 所有五粒子或以上的非固有态到固有态的矩阵元 $(P|\hat{H}_D|I)_s$, 自动为零。这只要观察每一个 $\hat{H}_s$, $\hat{H}_6$, $\hat{H}_8$, 即可发现它们的每一项均为零。因此在 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 情况, 我们证明了 $(P|\hat{H}_D|I) = 0$ 。

参 考 文 献

- [1] E. A. Harris and J. Owen, *Phys. Rev. Lett.*, **11**(1963), 9.
- [2] D. S. Rodbel *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **11**(1963), 10.
- [3] N. L. Huang and R. Orbach, *Phys. Rev. Lett.*, **12**(1964), 275.
- [4] M. Nauciel-Bloch *et al.*, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 4603.
- [5] R. L. Joseph, *Phys. Rev.*, **138A**(1965), 1441.
- [6] G. A. T. Allen and D. D. Betts, *Proc. Phys. Soc. (London)*, **91**(1967), 341.
- [7] G. Chaddha, *Nuovo Cim.*, **7**(1973), 163.
- [8] K. G. Chakraborty, *Z. Phys.*, **268**(1974), 179.
- [9] J. Adler, *et al.*, *J. Phys.*, **C9**(1976), 2911.
- [10] K. G. Chakraborty, *J. Phys.*, **C9**(1976), 1499.
- [11] Motoynki Tanaka *et al.*, *Prog. Theor. Phys.*, **57**(1977), 1112.
- [12] F. J. Dyson, *Phys. Rev.*, **102**(1956), 1217; 1230.
- [13] 陶云, 物理学报, **22**(1966), 449.

THE SPIN WAVE THEORY OF A HEISENBERG FERROMAGNETIC SYSTEM WITH BIQUADRATIC EXCHANGE INTERACTION AT LOW TEMPERATURES

TAO RUI-BAO

(Department of Physics, Fudan University)

PU FU-CHO

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

We presented here a theory of the Heisenberg ferromagnetic system with biquadratic exchange interaction at low temperatures. In our theory, the kinematic and dynamic interactions are correctly included. The expansion for S^z in terms of temperature and the temperature dependence of spin wave spectrum are obtained rigorously.