Магнитная неупорядоченность в сверхрешетке, образуемой комплексами ферромагнитных атомов, внедренных в диэлектриктрический кристалл

Мироненко Л. П.
Донецкий национальный технический университет

У статті розглядається вплив невпорядкованості на спектр елементарних збудженнь комплексу феромагнітних атомів у діелектричній матриці. Сумарний спин комплексу магнітних атомів в основному феромагнітному стані є щодо великою величиною, а відстань між комплексами порядку розмірів самих комплексів, тоді в діелектрику може бути застосовна гейзенберговская модель обмінної взаємодії, у якій інтеграл перекриття виникає не за рахунок перекриття атомних хвильових функцій, як це відбувається в магнітних атомах, а за рахунок так називаної непрямої взаємодії електронів атомів комплексу.

В настоящее время магнетизм неупорядоченных систем является отдельной областью физики магнитных явлений. Быстрому развитию этой области исследования способствуют два обстоятельства - большой интерес к проблеме беспорядка в твердых телах и широкий спектр новых свойств неупорядоченных магнитных систем, и, соответственно, их практическое применение [1-2].

В статье рассматривается влияние неупорядоченности на спектр элементарных возбуждений комплекса ферромагнитных атомов в диэлектрической матрице. Суммарный спин комплекса магнитных атомов в основном ферромагнитном состоянии является относительно большой величиной, а расстояние между комплексами порядка размеров самих комплексов, тогда в диэлектрике применима гейзенберговская модель обменного взаимодействия, в которой интеграл перекрытия возникает не за счет перекрытия атомных волновых функций, как это происходит в магнитных атомах, а за счет так называемого косвенного взаимодействия электронов атомов комплекса [3].

Как известно, размеры комплексов регулярных систем испытывают значительные отклонения (до 30% и выше) от некоторого среднего значения. Это отражается в конечном счете на величине суммарного спина каждого из комплексов. Нетрудно установить соответствие изменения размеров комплексов и величины его суммарного спина.

Предполагается, что в пространственном отношении комплексы образуют регулярную решетку, а неупорядоченность состоит в том, что точечные магнитные моменты (суммарный спин каждого комплекса) отличаются от узла к узлу, их величины распределены случайно. В предположении косвенного обменного взаимодействия комплексов приближение сильной связи приводит к тому, что энергетический спектр одночастичных возбуждений системы образует полосу квазинепрерывных уровней, описываемых соответствующим законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ [4].

Расчет свойств неупорядоченной ферромагнитной системы основывается на гейзенберговской модели ферромагнетизма к которой применяется метод двухвременных функций Грина [5].

1. Выражение гамильтониана модели через бозевские операторы элементарных возбуждений

Гамильтониан магнитной решетки запишем в стандартном виде модели Гейзенберга

$$H = H_o + V, \tag{1}$$

$$H_o = -\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta} \left(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+\Delta} \right), \tag{2}$$

$$V = -2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda,)\left(\mathbf{S}_n(\mu) \cdot \mathbf{S}_{n+\Delta}(\xi) \right), \tag{3}$$

где H_o - гамильтониан гейзенберговской модели идеального кристалла, $V(\lambda,\mu,\xi)$ - возмущающий потенциал в системе, обусловленный тем, что суммарные спины каждой из комплексов отличаются от некоторого среднего значения S, $\mathbf{S}_n$ - оператор спина в узле n, $I_{n,n+\Delta}(\lambda)$ - обменный интеграл взаимодействия между комплексами в узле n и соседним комплексом в узле $n+\Delta$, λ,μ,ξ - случайные параметры, смысл которых выяснится позже, n пробегает по всем узлам решетки, $\Delta \neq 0$ - только по ближайшим соседним узлам.

Используя представление $S_n^{\pm} = S_n^x \pm i S_n^y$, выразим произведение $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+\Delta}$ через операторы $S_n^{\pm}$

$$\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+\Delta} = \frac{1}{2}(S_n^- S_{n+\Delta}^+ + S_n^+ S_{n+\Delta}^-) + S_n^z S_{n+\Delta}^z\,, \tag{4}$$

и запишем гамильтониан (1) в виде

$$\begin{aligned} H_o &= -\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left[\frac{1}{2}(S_n^- S_{n+\Delta}^+ + S_n^+ S_{n+\Delta}^-) + S_n^z S_{n+\Delta}^z\right], \\ V &= -2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{\frac{1}{2}\left[S_n^-(\mu) S_{n+\Delta}^+(\xi) + S_n^+(\mu) S_{n+\Delta}^-(\xi)\right] + S_n^z(\mu) S_{n+\Delta}^z(\xi)\right\}. \end{aligned} \tag{5}$$

Для отыскания слабо возбужденных состояний кристалла используем представление операторов $S_n^{\pm}$, S_n^z через “бозе-операторы” элементарных возбуждений b_n и b_n^+ [6]:

$$S_n^+ = \sqrt{2S}\, f(S, n_n) b_n^-, \quad S_n^- = \sqrt{2S}\, f(S, n_n) b_n^+, \quad S_n^z = S - n_n, \tag{6}$$

где $n_n = b_n^+ b_n^-$, $\quad f(S, n_n) = \sqrt{1 - n_n / 2S}$.

Операторы b_n и b_n^+ удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$b_n b_m - b_m b_n = 0, \quad b_n b_m^+ - b_m^+ b_n = \delta_{nm}\left\{1 - \frac{2S+1}{(2S)!}\prod_{k=0}^{2S-1}(b_n^+ b_n - k)\right\}. \tag{7}$$

Для слабо возбужденных состояний выражение $\prod\limits_{k=0}^{2S-1}(b_n^+ b_n - k)$ мало и соотношение (7) является приближенно бозевским. Разлагая функцию $f(S, n_n)$ в ряд по степеням $n_n / 2S$, в нулевом приближении (6) имеет вид

$$S_n^+ = \sqrt{2S} b_n,\; S_n^- = \sqrt{2S} b_n^+,\; S_n^z = S - b_n^+ b_n\,. \tag{8}$$

Операторы спина возмущающего потенциала запишутся в соответствии с (6) и (8) в виде

$$\begin{aligned} &S_n^+(\mu) = \sqrt{2S(\mu)} b_n,\; S_n^-(\mu) = \sqrt{2S(\mu)} b_n^+,\; S_n^z(\mu) = S(\mu) - b_n^+ b_n, \\ &S_{n+\Delta}^+(\xi) = \sqrt{2S(\xi)} b_{n+\Delta},\; S_{n+\Delta}^-(\xi) = \sqrt{2S(\xi)} b_{n+\Delta}^+,\; S_{n+\Delta}^z(\xi) = S(\xi) - b_{n+\Delta}^+ b_{n+\Delta}. \end{aligned} \tag{9}$$

Подставляя выражения (8) и (9) в (4), получим выражение гамильтониана $H = H_o + V$ через бозевские операторы b_n и b_n^+

$$H=-\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left[\sqrt{SS}(b_n^+ b_{n+\Delta}+b_n b_{n+\Delta}^+)+(S-b_n^+ b_n)(S-b_{n+\Delta}^+ b_{n+\Delta})\right]-$$
$$-2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left[\sqrt{S(\mu)S(\xi)}(b_n^+ b_{n+\Delta}+b_n b_{n+\Delta}^+)+(S(\mu)-b_n^+ b_n)(S(\xi)-b_{n+\Delta}^+ b_{n+\Delta})\right] \tag{10}$$

Составим уравнения движения операторов b_n и b_n^+, используя уравнение Гейзенберга для операторов [7]

$$i\frac{db_n(t)}{dt}=-[H(t),b_n(t)], \qquad i\frac{db_n^+(t)}{dt}=[H(t),b_n^+(t)], \tag{11}$$

где принята система единиц измерений в которой $\hbar=1$.

Вычисляя коммутатор $[H(t),b_l(t)]$, получим уравнение движения оператора b_l

$$\begin{aligned} i\frac{db_l(t)}{dt}&=\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left[S(\delta_{nl}b_{n+\Delta}+\delta_{n+\Delta,l}b_n)\right]-\\ &-\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left[(S-b_n^+ b_n)\delta_{n+\Delta,l}b_{n+\Delta}+(S-b_{n+\Delta}^+ b_{n+\Delta})\delta_{nl}b_n)\right]+\\ &+2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{\sqrt{S(\mu)S(\xi)}(\delta_{nl}b_{n+\Delta}+\delta_{n+\Delta,l}b_n)\right\}-\\ &-2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{(S(\mu)-b_n^+ b_n)\delta_{n+\Delta,l}b_{n+\Delta}+(S(\xi)-b_{n+\Delta}^+ b_{n+\Delta})\delta_{nl}b_n\right\} \end{aligned} \tag{12}$$

При вычислении коммутаторов использованы коммутационные соотношения для бозе-операторов в форме правил [8]

$$[A(n),b_l]=-\sum_n \frac{\partial A}{\partial b_n^+}\delta_{nl}, \; [A(n),b_l^+]=\sum_n \frac{\partial A}{\partial b_n^-}\delta_{nl} \; .$$

2. Уравнение движения функции Грина

Введем в рассмотрение температурную двухвременную опережающую функцию Грина [9]

$$G_{nm}(t-t')=i\theta(t'-t)\left\langle\left[b_n(t),b_m^+(t')\right]\right\rangle, \tag{13}$$

где $\langle ... \rangle$ означает усреднение по ансамблю Гиббса с гамильтонианом H; $\theta(t'-t)=\begin{cases}1, & t'>t\\ 0, & t'<t.\end{cases}$

Уравнение движения функции Грина G_{nm} получим, дифференцируя (13) по времени t и использования уравнения (12)

$$i\frac{dG_{nm}(t-t')}{dt}=\delta(t'-t)\left\langle\left[b_n(t),b_m^+(t')\right]\right\rangle-\theta(t'-t)\left\langle\left[\frac{db_n(t)}{dt},b_m^+(t')\right]\right\rangle. \qquad (14)$$

Подставим в (14) уравнение (12), получим

$$\begin{aligned}
i\frac{dG_{lm}}{dt}=&\ \delta(t'-t)\left\langle\left[b_l(t),b_m^+(t')\right]\right\rangle-\sum_{n,\Delta}I_{n,n+\Delta}\left\{S(\delta_{nl}G_{n+\Delta,m}+\delta_{n+\Delta,l}G_{nm})\right\}+\\
&+\sum_{n,\Delta}I_{n,n+\Delta}\left\{(S-n_n)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m}+(S-n_{n+\Delta})\delta_{nl}G_{nm})\right\}-\\
&-2\sum_{n,\Delta}I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{\sqrt{S(\mu)S(\xi)}(\delta_{nl}G_{n+\Delta,m}+\delta_{n+\Delta,l}G_{nm})\right\}+\\
&+2\sum_{n,\Delta}I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{(S(\mu)-n_n)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m}+(S(\xi)-n_{n+\Delta})\delta_{nl}G_{nm}\right\},
\end{aligned} \qquad (15)$$

где $G_{lm}=G_{lm}(t-t',\lambda,\mu,\xi)$.

При термодинамическом усреднении коммутатора $\left\langle[b_{n+\Delta}^+b_{n+\Delta}b_n(t),b_m^+(t')]\right\rangle$ использована аппроксимация расцепления операторов $\left\langle b_{n+\Delta}^+b_{n+\Delta}\right\rangle\left\langle[b_n(t),b_m^+(t')]\right\rangle$ [10-11]. Как будет показано далее этим и подобными членами в (15) в рамках принятого приближения можно пренебречь.

Применим к (14) преобразование Фурье

$$G_{nm}(t-t')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G_{nm}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}d\omega,\ G_{nm}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}G_{nm}(t-t')e^{i\omega(t-t')}dt \qquad (16)$$

получим

$$\omega G_{lm}(\omega)=\delta_{nm}-\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left\{S(\delta_{nl}G_{n+\Delta,m}+\delta_{n+\Delta,l}G_{nm})\right\}+$$
$$+\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left\{(S-n_n)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m}+(S-n_{n+\Delta})\delta_{nl}G_{nm})\right\}-$$
$$-2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{\sqrt{S(\mu)S(\xi)}(\delta_{nl}G_{n+\Delta,m}+\delta_{n+\Delta,l}G_{nm})\right\}+ \tag{17}$$
$$+2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{(S(\mu)-n_n)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m}+(S(\xi)-n_{n+\Delta})\delta_{nl}G_{nm}\right\}$$

Преобразуем невозмущенные члены уравнения к виду

$$S\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(G_{nm}-G_{n+\Delta,m})(\delta_{nl}-\delta_{n+\Delta,l})-$$
$$-\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(n_{n+\Delta}\delta_{nl}G_{nm}+n_n\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m})= \tag{18}$$
$$=2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}[G_{nm}(1-n_{n+\Delta}/S)-G_{n+\Delta,m}],$$

откуда видно, что в рамках приближения (8) членом $n_{l+\Delta}/2S$ можно пренебречь. Это же замечание относится к соответствующим членам в (17) возмущенной части уравнения. Следует подчеркнуть, что при малых возмущениях соответствующие члены $n_l/2S$ и $n_{l+\Delta}/2S$ могут быть сравнимы с возмущением, но они являются постоянными величинами и их влияние на спектр возбуждения сводится к смещению уровней на постоянную величину. Последнее замечание позволяет их не учитывать вообще. В дальнейших расчетах будем опускать эти постоянные, не влияющие качественно на закон дисперсии возбуждений в системе. Таким образом, (17) запишется в виде

$$\omega G_{lm}(\omega)=\delta_{nm}+2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}(G^{o}_{nm}-G^{o}_{n+\Delta,m})-$$
$$-2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{\sqrt{S(\mu)S(\xi)}(\delta_{nl}G_{n+\Delta,m}+\delta_{n+\Delta,l}G_{nm})\right\}+ \tag{19}$$
$$+2\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}(\lambda)\left\{S(\mu)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m}+S(\xi)\delta_{nl}G_{nm}\right\}$$

Ясно, что в отсутствие неупорядоченности выражение (18) представляет собой уравнение невозмущенной функции Грина, соответствующей гамильтониану H_o

$$\omega G^o_{nm}(\omega) - 2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}[G^o_{nm}(\omega) - G^o_{n+\Delta,m}(\omega)] = \delta_{nm}\,. \tag{20}$$

Решение уравнения имеет вид

$$G^o_{nm} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{\exp\{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)\}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i\delta}, \quad \delta = +0\,, \tag{21}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ - энергия спиновой волны в идеальном кристалле

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2S\sum_{\Delta=1}^{z} I_{n,n+\Delta}(1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{\Delta}})\,, \tag{22}$$

В частном случае $I = const$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2ISz\left[1 - \frac{1}{z}\sum_{\mathbf{\Delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{\Delta}}\right], \tag{23}$$

z - число ближайших соседних комплексов.

Для конкретизации возмущения в (19), заметим, прежде всего, что в отсутствие возмущения $I_{n,n+\Delta}(\lambda) = I_{n,n+\Delta}$, $S(\mu) = S(\xi) = S$ равна $2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}(G^o_{nm} - G^o_{n+\Delta,m})$. Поэтому вычтем эту величину из случайной части, получим

$$\begin{aligned}
\omega G_{lm}(\omega) &= \delta_{nm} + 2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}(G^o_{nm} - G^o_{n+\Delta,m}) - \\
&- 2\sum_{n,\Delta}\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)\left\{\delta_{nl}G_{n+\Delta,m} + \delta_{n+\Delta,l}G_{nm}\right\} + \\
&+ 2\sum_{n,\Delta}\left\{\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi)\delta_{n+\Delta,l}G_{n+\Delta,m} + \rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)\delta_{nl}G_{nm}\right\},
\end{aligned} \tag{24}$$

где

$$\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi) = \frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\frac{S(\xi)}{S} - 1\,, \tag{25}$$

$$\rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu) = \frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\frac{S(\mu)}{S} - 1\,, \tag{26}$$

$$\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)=\frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\sqrt{\frac{S(\xi)}{S}\frac{S(\mu)}{S}}-1\,. \tag{27}$$

Заметим важную особенность введенных обозначений: при $\xi=\mu$ имеем $\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)=\rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)=\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)$. Таким образом, каждая из случайных величин $\rho^{(1)},\rho^{(2)},\gamma$ зависит одновременно от случайной обменной связи и случайной величины суммарного спина и по сути дела отношение $\frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\frac{S(\mu)}{S}$ является параметром задачи. В этом принципиальное отличие от однопримесной проблемы, где возможно выделение отдельных вкладов как от случайной обменной связи, так и случайной величины суммарного спина.

С одной стороны, исследование спектра возбуждений упрощается, поскольку задача содержит один параметр и элементы матрицы возмущения не содержат случайных величин (точнее, случайная величина возмущения сводится к числовому множителю матрицы возмущения). С другой стороны, исследование спектра возбуждений усложняется по сравнению с однопримесной проблемой, поскольку усреднение по возможным конфигурациям требует дополнительной операции усреднения.

Построим матрицу возмущения V согласно уравнению Дайсона

$$G_{nm}(\omega,\lambda,\mu,\xi)=G^{o}_{nm}(\omega)+\sum_{l,p}G^{o}_{nl}(\omega)V_{lp}(\lambda,\mu,\xi)G_{pm}(\omega,\lambda,\mu,\xi) \tag{28}$$

или

$$\sum_{n}\left[G^{o}_{nl}(\omega)\right]^{-1}G_{nm}(\omega;\lambda,\mu,\xi)=\delta_{lm}+\sum_{p}V_{lp}(\lambda,\mu,\xi)G_{pm}(\omega;\lambda,\mu,\xi). \tag{29}$$

Сравнивая (24) и (29), получим

$$\sum_{p}V_{lp}(\lambda,\mu,\xi)G_{pm}(\lambda,\mu,\xi;\omega)=$$

$$=-2S\sum_{n,p,\Delta}I_{n,n+\Delta}\left\{\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)(\delta_{nl}\delta_{n+\Delta,p}+\delta_{n+\Delta,l}\delta_{pn})\right\}G_{pm}+ \tag{30}$$

$$+2S\sum_{n,p,\Delta}I_{n,n+\Delta}\left\{\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi)\delta_{n+\Delta,l}\delta_{n+\Delta,p}+\rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)\delta_{nl}\delta_{pn}\right\}G_{pm}$$

Откуда следует, что выражение для матрицы возмущающего потенциала системы

$$
\begin{aligned}
V_{lp}(\lambda,\mu,\xi) = -2S\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left\{\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)(\delta_{nl}\delta_{n+\Delta,p} + \delta_{n+\Delta,l}\delta_{pn})\right\} + \\
+ 2S\sum_{n,\Delta} I_{n,n+\Delta}\left\{\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi)\delta_{n+\Delta,l}\delta_{n+\Delta,p} + \rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)\delta_{nl}\delta_{pn}\right\}
\end{aligned} \tag{31}
$$

На каждом узле решетки происходит случайная реализация возмущающего потенциала. В одночастичном приближении задача сводится к поведению квазичастиці в случайном поле. Естественно предположить, что N комплексов системы одинаковые в вероятностном смысле. Последнее утверждение эквивалентно введению ансамбля N одинаковых систем. Тогда задача сводится в некотором смысле к однопримесной проблеме, но в вероятностной трактовке; и принципиально отличается от последней необходимостью проведения усреднения по случайным реализациям. Поэтому считаем, что на каждом $n-$м узле возмущение одинаковое и перепишем (31) для одного узла, например, $n=0$

$$
\begin{aligned}
V_{lp}(\lambda,\mu,\xi) = -2S\sum_{\Delta} I_{0,0+\Delta}\left\{\gamma_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)(\delta_{0l}\delta_{0+\Delta,p} + \delta_{0+\Delta,l}\delta_{0p})\right\} + \\
+ 2S\sum_{\Delta} I_{0,0+\Delta}\left\{\rho^{(1)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi)\delta_{0+\Delta,l}\delta_{0+\Delta,p} + \rho^{(2)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\mu)\delta_{0l}\delta_{0p}\right\}
\end{aligned} \tag{32}
$$

В матричном форме (32) имеет вид

$$
V = 2S\cdot\begin{pmatrix}
V_0 & -V_{01} & -V_{02} & \dots & -V_{0z} \\
-V_{10} & V_1 & 0 & & 0 \\
-V_{20} & 0 & V_2 & & 0 \\
 & & & \dots & \\
-V_{z0} & 0 & 0 & & V_z
\end{pmatrix} \tag{33}
$$

где

$$
\begin{aligned}
V_0 = \sum_{\Delta}\rho^{(1)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi),\ V_\Delta = \rho^{(2)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\mu), \\
V_{0\Delta} = V_{\Delta 0} = \gamma_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi,\mu),\ \Delta = 1,2,\dots,z.
\end{aligned} \tag{34}
$$

Для анализа матрицы возмущения считаем все обменные интегралы $I_{0,0+\Delta}$ соседних комплексов идеальной решетки одинаковыми и равными I. Тогда (33) и (34) имеют вид

$$V = 2IS \cdot \begin{pmatrix} zU_0 & -U_{01} & -U_{01} & \dots & -U_{01} \\ -U_{01} & U_1 & 0 & & 0 \\ -U_{01} & 0 & U_1 & & 0 \\ & & & \dots & \\ -U_{01} & 0 & 0 & & U_1 \end{pmatrix}, \tag{35}$$

где

$$U_0 = \rho^{(1)}(\lambda,\xi),\ U_\Delta = \rho^{(2)}(\lambda,\mu),\ V_{0\Delta} = V_{\Delta 0} = \gamma(\lambda,\xi,\mu),\ \Delta = 1,2,\dots,z. \tag{36}$$

Отметим вид матрицы возмущения: недиагональные элемент зависят от всех случайных параметров λ,μ,ξ. Другими словами, любая неупорядоченность приводит к возникновению недиагональных элементов в матрице возмущения.

Ввиду важности дальнейшего анализа результатов отметим частный случай матрицы возмущения (35), когда $\xi = \mu$

$$V = 2IS \cdot \rho(\lambda,\mu)\tilde{U},\ \tilde{U} = \begin{pmatrix} z & -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 1 & 0 & & 0 \\ -1 & 0 & 1 & & 0 \\ & & & \dots & \\ -1 & 0 & 0 & & 1 \end{pmatrix}, \tag{37}$$

где $\rho(\lambda,\mu) = \rho^{(1)}(\lambda,\mu) = \rho^{(2)}(\lambda,\mu) = \gamma(\lambda,\mu)$.

Уравнение (28) можно записать в операторном виде

$$\tilde{G}(\omega,\lambda,\mu,\xi) = \tilde{G}^o(\omega) + \tilde{G}^o(\omega)\tilde{V}(\lambda,\mu,\xi)\tilde{G}(\omega,\lambda,\mu,\xi)\,, \tag{38}$$

где $\vec{G}(\omega;\lambda,\mu,\xi)$ и $G^o(\omega)$ есть матрицы размерности $(z+1)\times(z+1)$, а матрица возмущения $V\ (\lambda,\mu,\xi)$ той же размерности и дается выражением (33) или (35).

Усредненная функция Грина $G(\omega)$ получится из (38) усреднением по случайным параметрам λ,μ,ξ

$$\tilde{G}(\omega) = \tilde{G}^o(\omega) + \tilde{G}^o(\omega)\overline{\tilde{V}(\lambda,\mu,\xi)\tilde{G}(\omega,\lambda,\mu,\xi)}\,, \tag{39}$$

где усреднение по λ,μ,ξ обозначено чертой сверху.

Для проведения усреднения гриновской функции (39) следует определиться в законе изменения случайных величин $\varepsilon(\lambda)$, $\rho(\mu)$, $\rho(\xi)$. Для получения результата усреднения рассмотрим простейшие реализации случайных величин.

Вначале считаем, что обменный интеграл не является случайной величиной задачи, а величина спина комплекса $S(\mu)$ зависит от случайного параметра μ, индуцированного случайными размерами комплексов. При этом предполагается, что случайная величина μ изменяется на некотором интервале $(-a,a)$, определяемом минимальным и максимальным пространственными размерами комплексов. Так, в качестве a может быть взято отношение максимального радиуса комплекса к среднему. Тогда величина a есть максимальное относительное изменение размера комплекса, а безразмерная величина μ приводит к случайным реализациям относительных размеров комплексов.

Исходя из нормального закона распределения случайной величины μ в первом приближении можно положить квадратичный закон $\rho(\lambda,\mu)=\alpha\mu^2$, α - некоторая константа, зависящая от величины среднего спина комплекса. Другим обоснованием выбора квадратичной зависимости является разложение величины $\rho(\lambda,\mu)=\frac{S(\mu)}{S}-1$ в ряд по степеням μ: $\rho(\lambda,\mu)=\frac{S'}{S}\mu+\frac{1}{2}\frac{S''}{S}\mu^2$. Первый член разложения после усреднения исчезает, остается только второй член, пропорциональный $\overline{\mu^2}$. В случае анизатропии формы комплекса $\rho(\lambda,\mu)=\alpha_{ij}\mu_i\mu_j$, где α_{ij} - симметричный тензор второго ранга, характеризующий форму комплекса в условиях равновесного распределения в ней намагниченности. Однородной намагниченности комплекса с анизатропией типа легкая ось соответствует форма эллипсоида с осью направленной вдоль главной оси эллипсоида. В этом случае в системе, связанной с главными осями эллипсоида, функция распределения должна иметь вид $\rho(\lambda,\mu)=\overline{\alpha}\mu_z^2+\overline{\overline{\alpha}}(\mu_x^2+\mu_y^2)$, где $\overline{\alpha},\overline{\overline{\alpha}}$ -

константы, характеризующие неупорядоченность соответственно вдоль осей z и x, y.

Наконец, примем естественное предположение о том, что неупорядоченность в фиксированном комплексе и ее соседей реализуются одной случайной переменной μ, т.е. полагаем в (25) - (27) $\xi = \mu$ и имеем $\rho^{(1)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu) = \rho^{(2)}_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu) = \gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\mu)$.

В рамках принятых предположений элементы матрицы возмущения определяются формулой (37), т.е.

$$V = 2IS\alpha\mu^2\tilde{U}, \quad \tilde{U} = \begin{pmatrix} z & -1 & -1 & \ldots & -1 \\ -1 & 1 & 0 & & 0 \\ -1 & 0 & 1 & & 0 \\ & & & \ldots & \\ -1 & 0 & 0 & & 1 \end{pmatrix}. \tag{40}$$

В рассматриваемом случае ряд теории возмущений, полученный итерацией уравнения для неусредненной гриновской функции (38) легко суммируется

$$\begin{aligned} G(\omega) &= G^o(\omega)\sum_{n=0}^{\infty}(2IS\rho(\lambda,\mu)\tilde{U})^n[G^o(\omega)]^n = \\ &= G^o(\omega)\frac{1}{1-2IS\tilde{U}G^o(\omega)\rho(\lambda,\mu)}, \end{aligned} \tag{41}$$

где A и $G^o(\omega)$ матрицы, размерности $(z+1)\times(z+1)$.

На данном этапе решения задачи, в сравнении с однопримесной проблемой [4], расчет физических свойств системы значительно усложняется.

Литература

1. Korenbkit I.Y., Shender E.F. Theory of magnetic excitations in disordered systems// in Modern Problems in Condensed Matter Sciences.: Norh-Holland Phys. Publ. - 1988, v.22.2, P.109-175.

2. Юрченко С.Е. Магнитные запоминающие устройства большой емкости на вертикальных блоховских линиях// Микроэлектроника,- 1986.- т.15, N1.- С.3-15.

3. Маттис Д. Теория магнетизма. Введение в изучение кооперативных явлений.- Москва: Мир, 1967. - 407с.
4. Изюмов Ю.А., Медведев М.В. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. - М.: Наука, 1970. - 272с.
5. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов//ЖЭТФ. - 1964, т.47, N4.- С.1515-1527.
6. Барьяхтар В.Г., Яблонский Д. Функции Грина в теории магнетизма. - Киев: Наукова думка 1984.- 336с.
7. Давыдов А.С. Теория твердого тела. - М.: Наука, 1981. - 639с.
8. Хаккен Х. Квантовополевая теория твердого тела/Пер с нем. А.В. Колпакова, под ред. Г.С. Жданова. - М.: Наука, 1989. - 344с.
9. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов//ЖЭТФ. - 1964, т.47, N4.- С.1515-1527.
10. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.) Введение в квантовую статистическую механику. - М.: Наука, 1984.- 384с.
11. Боголюбов Н.Н. (мл), Садовничий Б.И. Некоторые вопросы статистической механики.- М.: Наука, 1975.- 352с.
12. Мироненко Л.П., Щербак Я.Я. Аналитическое выражение массового оператора электронов в аморфных системах/ Донец. политехн. ин-т. Донецк, 1992 Деп. в УкрИНТЭИ N 1689-Ук92 от 19.10.92.