第 19 卷 第 9 期　　物　理　学　报　　Vol. 19, No. 9
1963 年 9 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Sept., 1963

鉄磁体中缺陷对自旋波的影响*

李蔭远　方励之　顾世杰
(中国科学院物理研究所)

提　　要

本文提出了一个处理磁性杂質或其他缺陷在磁性晶体中对自旋波頻譜的影响的一般理論方法，并特别着重討論了局域模自旋波．以一維綫性格子为例进行計算的結果显示出：一个代位磁性杂質，可能产生不只一个高于連續带頂的局域模．其产生的条件和其能級位置均通过 $J'S'/JS$ 和 J'/J 表达出来，这里 S' 和 S 各为杂質原子和基質原子的自旋量子数，J' 和 J 各为杂質与近邻之間和一般近邻之間的交換作用系数．高度集中的应变和間隙原子如致使邻近处的交換作用增大，也导致局域模的出現．我們也考慮了磁偶极矩相互作用的影响，証明其并不破坏这些局域模的存在．我們还討論了在 $J'<0$ 时，連續譜之下出現的局域模能級．我們也指出，在某些情况下，自旋偏离过于局域在較少数的原子上，本文中所采用的 Holstein-Primakoff 近似就不十分合法了．

一、引　言

在这篇文章中，我們开始研究磁性晶体中的杂質原子、間隙原子、空位等点缺陷以及高度集中的应变对于自旋波的影响．在物理图象上，这一問題可以和晶体中这些缺陷对能带电子的运动或对格波(声子)的影响相类比．特别是声子与自旋波在理論处理的方式上几乎是可以逐步对比的．(自旋波理論可以写成諧振子問題的形式[1]．)差别在于前者从經典力学的运动方程出发，而后者根本上是量子力学的問題．在自旋波問題中，除近邻間的交換作用的主要項以外，还不可避免地存在着磁偶极矩的远程作用項．由于声子問題比自旋波具有更普遍得多的对象，并且晶体缺陷对格波的影响与发光中心有着密切的联系，近十年来，已有不少理論論文探討缺陷对格波的影响．无論在理論方法上或相关的物理效应的分析上，这方面的研究都获得了一定的进展，其中多数工作已經見于总結論文[2–5]中．至于缺陷对自旋波(或磁振子 magnons)的影响，国际上尙未有任何工作出現．我們在这篇論文中提出了一个处理这一問題的一般理論，具体对象是簡单晶格的鉄磁体；然后以一維綫性格子为例进行計算，証实了局域模的形成，并找到其出现的条件与其能級的位置．这些結果不仅对于(三維)鉄磁晶体有着定性的应用，而且对于反鉄磁和亚鉄磁体也有一定的意义．継此之后，我們感到兴趣的課題是：缺陷对于連續譜以內的自旋波的影响及通过自旋波对中子散射的影响[10]、亚鉄磁和反鉄磁中的局域模、两个或多个非孤立杂質的影响、三維晶体的具体計算[11]以及相关的弛豫效应等．

* 1963 年 2 月 5 日收到．

二、理論方法

設鉄磁体的基质原子的自旋量子数为 S，近邻間的交換作用系数为 J；而杂质原子的自旋量子数为 S'，其与近邻基質原子間的交換作用系数为 J'.（非磁性杂質原子或空位相当于 $S'=0$, $J'=0$ 的情况.）設晶体中点缺陷均相互远离，互不相关，我們只需要分析一个单独的杂質对于自旋波的影响．下面使用足标 $\mathbf{n}$ 表示晶体中的第 $\mathbf{n}$ 个原子相关的物理量．将杂質作为 $\mathbf{n}=0$ 者，并将杂質所占格点作为坐标的原点．晶体的 Heisenberg 自旋哈密頓量

$$\mathscr{H}=-\frac{1}{2}J\sum_{\substack{\langle\mathbf{n},\mathbf{n}'\rangle\\ \mathbf{n},\mathbf{n}'\neq 0}}\mathbf{S}_{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}_{\mathbf{n}'}-J'\sum_{\delta}\mathbf{S}_0'\cdot\mathbf{S}_\delta-g\mu H\Big(S_0'^z+\sum_{\mathbf{n}\neq 0}S_{\mathbf{n}}^z\Big). \tag{1}$$

这里的 J 是一般所謂交換积分的二倍，$\frac{1}{2}\sum\limits_{\substack{\langle\mathbf{n},\mathbf{n}'\rangle\\ \mathbf{n},\mathbf{n}'\neq 0}}$ 为对所有一切互为近邻的 $\mathbf{n}$ 和 $\mathbf{n}'$ 求和，但 $\mathbf{n}$ 和 $\mathbf{n}'$ 均 $\neq 0$. $\sum\limits_{\delta}$ 为对杂質的一切近邻求和．H 为外磁場与各向异性場之和的絕对值，其方向取为 z 軸．式(1)中将杂質原子的自旋算符写成 $\mathbf{S}_0'$，以表出其量子数为 S'.

定义一虛設自旋 $\mathbf{S}_0$，它与 $\mathbf{S}_0'$ 的关系为：当 $S_0'^z=S'-n(n=0,1\cdots 2S')$ 时，$S_0^z=S-n$. 由于 $S'\neq S$，只有在 $n\leqslant 2S$ 与 $2S'$ 中的較小者时，$\mathbf{S}_0$ 才有完整的定义．但是，我們在自旋波理論中只需要考虑 $\langle n\rangle$ 很小的情况，故可以引入 $\mathbf{S}_0$ 将(1)改写为

$$\mathscr{H}=-\frac{1}{2}J\sum_{\langle\mathbf{n},\mathbf{n}'\rangle}\mathbf{S}_{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}_{\mathbf{n}'}+J\sum_{\delta}\mathbf{S}_0\cdot\mathbf{S}_\delta-J'\sum_{\delta}\mathbf{S}_0'\cdot\mathbf{S}_\delta-$$
$$-g\mu H\Big(S_0'^z+\sum_{\mathbf{n}\neq 0}S_{\mathbf{n}}^z\Big), \tag{2}$$

上式中 $\sum\limits_{\langle\mathbf{n},\mathbf{n}'\rangle}$ 包括 $\mathbf{n}$ 或 $\mathbf{n}'=0$ 者．其次引入波色算符 $a_{\mathbf{n}}^*$ 和 $a_{\mathbf{n}}$，并采用众所周知的 H-P (Holstein-Primakoff) 近似[6]，于是

$$\begin{aligned}S_{\mathbf{n}}^+&\equiv S_{\mathbf{n}}^x+iS_{\mathbf{n}}^y\simeq\sqrt{2S}\,a_{\mathbf{n}},\\ S_{\mathbf{n}}^-&\equiv S_{\mathbf{n}}^x-iS_{\mathbf{n}}^y\simeq\sqrt{2S}\,a_{\mathbf{n}}^*,\\ S_{\mathbf{n}}^z&=S-a_{\mathbf{n}}^*a_{\mathbf{n}};\end{aligned} \tag{3}$$

以上 $\mathbf{n}\neq 0$，以及

$$\begin{aligned}S_0'^+&\equiv S_0'^x+iS_0'^y\simeq\sqrt{2S'}\,a_0,\\ S_0'^-&\equiv S_0'^x-iS_0'^y\simeq\sqrt{2S'}\,a_0^*,\\ S_0'^z&=S'-a_0^*a_0.\end{aligned} \tag{4}$$

根据 $\mathbf{S}_0$ 的定义，

$$\begin{aligned}S_0^+&\simeq\sqrt{2S}\,a_0,\\ S_0^-&\simeq\sqrt{2S}\,a_0^*,\\ S_0^z&=S-a_0^*a_0.\end{aligned} \tag{5}$$

因之，(2)改写为

$$\mathscr{H} = C + \frac{1}{2} JS \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{n}' \rangle} (a_{\mathbf{n}}^* - a_{\mathbf{n}'}^*)(a_{\mathbf{n}} - a_{\mathbf{n}'}) - JS \sum_{\delta} (a_0^* - a_\delta^*)(a_0 - a_\delta) + \\ + J' \sum_{\delta} (\sqrt{S}\, a_0^* - \sqrt{S'}\, a_\delta^*)(\sqrt{S}\, a_0 - \sqrt{S'}\, a_\delta) + g\mu H \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}}^* a_{\mathbf{n}}. \tag{6}$$

在这里应該指出，如上引用 H-P 近似我們便已經假定基态是絶对飽和磁化状态，即在基态杂质及其附近的磁矩均平行于整体的磁化方向．其次用傅里叶展开

$$a_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} a_{\mathbf{k}},$$

$$a_{\mathbf{n}}^* = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} a_{\mathbf{k}}^* \tag{7}$$

代入(6)，并将不必要保留之常量 C 省略，即得

$$\mathscr{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'}. \tag{8}$$

这里 $\mathbf{k}$ 为布里渊区中的波矢，N 为晶体格位的总数，$\mathbf{r}_{\mathbf{n}}$ 为第 $\mathbf{n}$ 个格位的位置矢量．(8)中的

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = JS \sum_{\delta} (1 - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\delta) + g\mu H, \tag{9}$$

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_{\delta} (\bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta} u_{\mathbf{k}'}^{\delta} - \bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta} v_{\mathbf{k}'}^{\delta}); \tag{10}$$

$$u_{\mathbf{k}}^{\delta} = \sqrt{\frac{J'S}{N}} (1 - \sigma e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\delta}). \tag{11}$$

$$v_{\mathbf{k}}^{\delta} = \sqrt{\frac{JS}{N}} (1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\delta}). \tag{12}$$

$$\sigma = \sqrt{S'/S}. \tag{13}$$

$\bar{u}$ 和 $\bar{v}$ 表示 u 和 v 的共軛复数．至此我們已将哈密頓量写成易于处理的形式．

在晶体无缺陷的情况下，$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0$，$\mathscr{H}$ 簡約为

$$\mathscr{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}.$$

$\mathscr{H}_0$ 在 $n_{\mathbf{k}}\,(\equiv a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}})$ 的表象內已經对角綫化．整体的自旋偏离为 1 ($n_{\mathbf{k}} = 1$，而对于一切 $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$ 的 $n_{\mathbf{k}'} = 0$) 的状态形成一連續能譜．其本征函数可写作 $a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle$，这里 $|0\rangle$ 即所謂眞空态，代表絶对飽和磁化状态．$a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle$ 代表自旋偏离以平面波的方式在晶体中传播的状态，在每一原子上的偏离 $\langle a_{\mathbf{n}}^* a_{\mathbf{n}} \rangle$ 只等于 $1/N$．自旋波近似(在理想晶体中采用 H-P 近似的理論)的本質是：当整体的磁化状态比較接近飽和磁化状态，即在每一原子上 $\langle a_{\mathbf{n}}^* a_{\mathbf{n}} \rangle \ll 2S$ 时，将状态近似地看作自旋波的迭加．现在我們考虑缺陷的影响：缺陷作为散射中心，除了致使平面波不再是本征态之外，还可能产生少数束縛态或局域模．后者的自旋偏离不是平均地分布在 N 个原子上，而是出現在杂質周围的一个有限区域內．局域模能級位于連續带之外，有如能带电子的施主或受主能級．我們假定，在缺陷影响下，整体的自旋偏离等于 1 的状态，无論其能級仍留在連續带內，或为带外的局域模均仍滿足 $\langle a_{\mathbf{n}}^* a_{\mathbf{n}} \rangle \ll 2S$ 或 $2S'$，則我們依旧可以只考虑自旋偏离为 1 的状态而将偏离更大一些的状态近似地作为这些元激发的叠加．

$a_{\mathbf{k}}^{*}|0\rangle$ 在自旋偏离为 1 的子空間中形成一正交函数的全集，故可将(8)在此子空間中的本征函数 $\Phi_\mu(\mu=1,\cdots,N)$ 展开为

$$\Phi_\mu=\sum_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}\mu}a_{\mathbf{k}}^{*}|0\rangle. \tag{14}$$

其归一条件为

$$\sum_{\mathbf{k}}|\varphi_{\mathbf{k}\mu}|^2=1, \tag{15}$$

代入

$$\mathscr{H}\Phi_\mu=E_\mu\Phi_\mu, \tag{16}$$

并通过

$$a_{\mathbf{k}}|0\rangle=0,\quad \langle 0|a_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}'}^{*}|0\rangle=\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'},$$

得到

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}\mu}+\sum_{\mathbf{k}'}V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\varphi_{\mathbf{k}'\mu}=E_\mu\varphi_{\mathbf{k}\mu}. \tag{17}$$ [1)]

如在連續譜之外，有分立能級（卽局域模的能級）E 存在，则相应的 $\varphi_{\mathbf{k}}(E)$ 被下式所决定：

$$\varphi_{\mathbf{k}}(E)=\sum_{\mathbf{k}'}V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\varphi_{\mathbf{k}'}(E)/E-\varepsilon_{\mathbf{k}}. \tag{18}$$

上式可以看作是一个以 $\varphi_{\mathbf{k}}(E)$ 为未知元的 N 个綫性齐次方程。

上面的推导适用于三維的簡单、体心、面心立方格子，二維的正方和六角格子以及一維綫性鏈。我們将利用(10)中 $V_{kk'}$ 所显示的可分性，以及这些晶格具有对称性将(18)簡約为 $2z$ 个方程。这里 z 是晶格的近邻配位数。注意到我們作为具体对象的各种簡单晶格中 z 个配位两两成对，卽 $\mathbf{r}_{-\delta}=-\mathbf{r}_\delta$，因而 $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ 是一实函数，并有 $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}=V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ 的对称性。于是可将(10)改写为

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}=\sum_\delta{}'(\bar{u}_{\mathbf{k}}^\delta u_{\mathbf{k}'}^\delta+u_{\mathbf{k}}^\delta\bar{u}_{\mathbf{k}'}^\delta-\bar{v}_{\mathbf{k}}^\delta v_{\mathbf{k}'}^\delta-v_{\mathbf{k}}^\delta\bar{v}_{\mathbf{k}'}^\delta), \tag{19}$$

其 $\sum_\delta{}'$ 只对 $\frac{1}{2}z$ 个互不对称的近邻求和。（从这里开始，以后的 $\boldsymbol{\delta}$ 只代表 $\frac{1}{2}z$ 个互不对称的近邻。）依次用 $u_{\mathbf{k}}^\delta$, $\bar{u}_{\mathbf{k}}^\delta$, $v_{\mathbf{k}}^\delta$ 和 $\bar{v}_{\mathbf{k}}^\delta$ 乘(18)的两端，并对 $\mathbf{k}$ 求和，我們得到

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^\delta\varphi_{\mathbf{k}}(E)=&\sum_{\delta'}{}'\sum_{\mathbf{k}'}\frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}u_{\mathbf{k}'}^\delta}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}\sum_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E)+\\&+\sum_{\delta'}{}'\sum_{\mathbf{k}'}\frac{u_{\mathbf{k}'}^{\delta'}u_{\mathbf{k}'}^\delta}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}\sum_{\mathbf{k}}\bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E)-\sum_{\delta'}{}'\sum_{\mathbf{k}'}\frac{u_{\mathbf{k}'}^{\delta}\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}\sum_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E)-\\&-\sum_{\delta'}{}'\sum_{\mathbf{k}'}\frac{u_{\mathbf{k}'}^{\delta}v_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}\sum_{\mathbf{k}}\bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E),\end{aligned}$$

---

1) (14)—(17)一段相当于引入一个么正变换

$$b_\mu=\sum_{\mathbf{k}}\bar{\varphi}_{\mathbf{k}\mu}a_{\mathbf{k}},\qquad b_\mu^{*}=\sum_{\mathbf{k}'}\varphi_{\mathbf{k}\mu}a_{\mathbf{k}}^{*},$$

使(8)对角綫化，成为

$$\mathscr{H}=\sum_\mu E_\mu b_\mu^{*}b_\mu.$$

$\varphi_{\mathbf{k}\mu}$ 和 E_μ 被(17)的积分方程（属于 Fredholm 第二类者）所决定。

$$
\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{k}} \bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta}\varphi_{\mathbf{k}}(E) = {} & \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) + \\
& + \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta}u_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} \bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta}\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \\
& - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta}v_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E), \\
\sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\delta}\varphi_{\mathbf{k}}(E) = {} & \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}v_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) + \\
& + \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{u_{\mathbf{k}'}^{\delta'}v_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} \bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}v_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \\
& - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{v_{\mathbf{k}'}^{\delta}v_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E), \\
\sum_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta}\varphi_{\mathbf{k}}(E) = {} & \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{u_{\mathbf{k}'}^{\delta'}\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) + \\
& + \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{u}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}}'} \sum_{\mathbf{k}} \bar{u}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta'}\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E) - \\
& - \sum_{\delta'}{}' \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'}^{\delta}v_{\mathbf{k}'}^{\delta'}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}}^{\delta'}\varphi_{\mathbf{k}}(E).
\end{aligned}
\tag{20}
$$

上列式子形成一个以 $2z$ 个参量 $\left(\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\delta}\varphi_{\mathbf{k}}(E)\cdots\right)$ 为未知元的綫性齐次方程組. $\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^{\delta}\varphi_{\mathbf{k}}(E)\cdots$ 有非 0 解的条件，(20)的系数行列式 $=0$，决定局域模的能級 E. 不同的解給出各个分立能級 $E_1, E_2, \cdots$，但其总数不可能超过 $z+1$，此数为杂質原子及其近邻原子数的和，在这一区域內，无缺陷晶格的完整对称性为缺陷的出現所破坏. 任一分立能級的波函数 Φ_E，可通过解(20)代入(18)得到 $\varphi_{\mathbf{k}}(E)$ 的相对値，再代入(14)即可.

Φ_E 又可改写为

$$
\Phi_E = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{n}} \varphi_{\mathbf{k}}(E) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} a_{\mathbf{n}}^{*} |0\rangle. \tag{21}
$$

因之，第 $\mathbf{n}$ 个原子的自旋偏离的振幅被坐标空間中的波函数

$$
\Phi_E(\mathbf{n}) = \mathfrak{N} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(E) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{n}}} \tag{22}
$$

所表出. 其中 $\mathfrak{N}$ 为归一因子，被

$$
\sum_{\mathbf{n}} |\Phi_E(\mathbf{n})|^2 = 1 \tag{23}
$$

所决定.

对于反鉄磁体和亚鉄磁体必須考虑次格子，問題就变得更繁难了一些，但在理論方法上与本文所已給出者是平行的. 其次由(18)到(23)，我們的注意力集中在局域模的問題上，至于連續譜以內的自旋波受杂質散射的問題，将在另一文中[10]写出.

三、磁性杂質的局域模(一維模型)

上节中确立了的理論方法将在这里具体地对一維綫性格子[图 1(a)]进行計算. 在

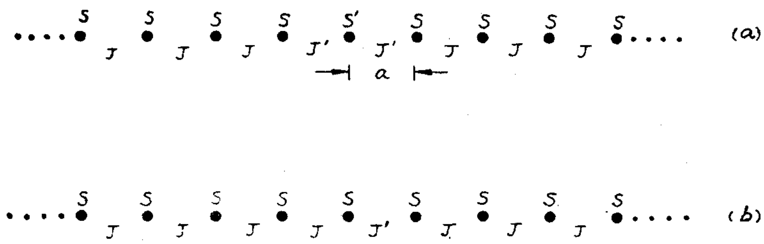

图1 二种一維模型

这种最簡单的情况下,(19)和(20)中的 $\sum_{\delta}'$ 以及标号 δ 可全被略去. 同时 ε_k 簡約为

$$\varepsilon_k = 2JS(1 - \cos ka) + g\mu H, \tag{24}$$

連續譜的下界和上界各为 $g\mu H$ 和 $4JS + g\mu H$. 高于带頂和低于带底的分立能級均有可能出現,我們在下面分别討論.

(A) 高于带頂的分立能級

对于連續譜之上的分立能級,定义

$$\Delta E = E - 4JS - g\mu H, \tag{25}$$

于是

$$E - \varepsilon_k = \Delta E + 2JS(1 + \cos ka). \tag{26}$$

令

$$\begin{aligned} u_E &= \sum_k u_k \varphi_k(E), \qquad u'_E = \sum_k \bar{u}_k \varphi_k(E), \\ v_E &= \sum_k v_k \varphi_k(E), \qquad v'_E = \sum_k \bar{v}_k \varphi_k(E). \end{aligned} \tag{27}$$

(20)簡約为

$$\begin{aligned} &(A-1)u_E + Bu'_E - Fv_E - Gv'_E = 0, \\ &Bu_E + (A-1)u'_E - Gv_E - Fv'_E = 0, \\ &Fu_E + Gu'_E - (C+1)v_E - Dv'_E = 0, \\ &Gu_E + Fu'_E - Dv_E - (C+1)v'_E = 0; \end{aligned} \tag{28}$$

其中

$$\begin{aligned} A &= \sum_k \frac{|u_k|^2}{E - \varepsilon_k}, \qquad B = \sum_k \frac{u_k^2}{E - \varepsilon_k}, \\ C &= \sum_k \frac{|v_k|^2}{E - \varepsilon_k}, \qquad D = \sum_k \frac{v_k^2}{E - \varepsilon_k}, \\ F &= \sum_k \frac{u_k \bar{v}_k}{E - \varepsilon_k}, \qquad G = \sum_k \frac{u_k v_k}{E - \varepsilon_k}. \end{aligned} \tag{29}$$

这六个系数均为实数, 因为 $\frac{u_k v_k}{E - \varepsilon_k}$ 之类的表达式对 k 求和之后虚部都等于 0 了. 为了計算方便,令 $\phi = ka$, 并将 $\sum_k \cdots$ 約化为 $\frac{N}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \cdots d\phi$, 通过实际积分,得

$$A = \frac{\gamma}{2\sinh t}(1 + \sigma^2 + 2\sigma e^{-t}),$$

$$B = \frac{\gamma}{2\sinh t}(1 + \sigma e^{-t})^2,$$

$$C = \frac{1}{\sinh t}(1 + e^{-t}),$$

$$D = \frac{1}{2\sinh t}(1 + e^{-t})^2,$$

$$F = \frac{\sqrt{\gamma}}{2\sinh t}(1 + \sigma)(1 + e^{-t}),$$

$$G = \frac{\sqrt{\gamma}}{2\sinh t}(1 + \sigma e^{-t})(1 + e^{-t}). \tag{30}$$

其中

$$\gamma = J'/J, \qquad t = 2\sinh^{-1}(\sqrt{\Delta E/4JS}), \tag{31}$$

亦即

$$\Delta E/2JS = \cosh t - 1. \tag{32}$$

在計算过程中，我們引用了积分公式

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{\cos n\phi d\phi}{\cos\phi + \cosh t} = \frac{(-1)^n}{2\sinh t} e^{-|n|t}, \qquad t > 0. \tag{33}$$

(28)的系数行列式等于 0 的方程經过簡約，最后得到

$$e^t = \gamma\sigma^2 - 1 \tag{34}$$

和

$$e^{2t} + (2 - \gamma\sigma^2 - 2\gamma)e^t + (1 - \gamma\sigma^2) = 0. \tag{35}$$

因 $t > 0$, $e^t > 1$，前者只在 $\gamma\sigma^2 > 2$ 的情况下才有合理解，即当

$$J'S'/JS > 2 \tag{36}$$

时出現一局域模，其能級通过(32)計算出

$$\Delta E_u = JS\left(\frac{J'S'}{JS} - 2\right)^2 \Big/ \left(\frac{J'S'}{JS} - 1\right). \tag{37}$$

(35) 在 $\gamma > 0$ 和 $\gamma(1 + \sigma^2) > 2$ 的情况下有一 $e^t > 1$ 的根，并且它在任何情况下，不可能有两个 $e^t > 1$ 的根。故另一局域模出現的条件为

$$\frac{J'S'}{JS} + \frac{J'}{J} > 2, \qquad J' > 0. \tag{38}$$

$$e^t = \frac{1}{2}\left\{\frac{J'S'}{JS} + \frac{2J'}{J} - 2 + \left[\left(\frac{J'S'}{JS} + 2\frac{J'}{J}\right)^2 - 8\frac{J'}{J}\right]^{1/2}\right\}, \tag{39}$$

其相应的

$$\Delta E_g = \frac{JS}{2}\left(\frac{J'S'}{JS} - 1\right)^{-1}\left\{\left(\frac{J'S'}{JS} + \frac{J'}{J} - 2\right)\left(\frac{J'S'}{JS} - 4\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{J'S'}{JS}\left(\frac{J'}{J} - 2\right) + \frac{J'S'}{JS}\left[\left(\frac{J'S'}{JS} + 2\frac{J'}{J}\right)^2 - 8\frac{J'}{J}\right]^{1/2}\right\}. \tag{40}$$

附加在 ΔE 旁的足标 g 和 u 分别表示相应的局域模的空間对称性的偶与奇。这在波

函数中明显地表現出来.

$$\Phi(n)=u_E\sum_k\frac{\bar{u}_k e^{-inka}}{E-\varepsilon_k}+u_E'\sum_k\frac{u_k e^{-inka}}{E-\varepsilon_k}-v_E\sum_k\frac{\bar{v}_k e^{-inka}}{E-\varepsilon_k}-$$
$$-v_E'\sum_k\frac{v_k e^{-inka}}{E-\varepsilon_k}. \tag{41}$$

相应于 E_u, (28)給出

$$u_E=-u_E',\quad v_E=-v_E',\quad u_E=\sqrt{\gamma\sigma^2}\,v_E; \tag{42}$$

而相应于 E_g, 則有

$$u_E=u_E',\quad v_E=v_E',\quad u_E=\frac{(e^t+1)^2/\sqrt{\gamma}}{(\sigma+2)e^t+\sigma}v_E. \tag{43}$$

将(42)代入(41)并計算积分,得到归一化波函数

$$\left.\begin{aligned}&\Phi_u(n)=-\Phi_u(-n)=(-1)^n(e^{t_u}\sin\mathrm{h}t_u)^{1/2}e^{-nt_u}, \qquad n>0,\\&\Phi_u(0)=0.\end{aligned}\right\} \tag{44}$$

即奇对称模在杂质原子上不出現自旋偏离,而在左右两近邻出現最大的偏离,并由此两点向外指数函数地衰減. 同样得

$$\left.\begin{aligned}&\Phi_g(n)=(-1)^n\frac{\sigma(e^{t_g}+1)}{2}\left[1+\frac{\sigma^2}{2\tanh\frac{1}{2}t_g}\right]^{-1/2}e^{-|n|t_g},\quad n\neq 0,\\&\Phi_g(0)=\left[1+\frac{\sigma^2}{2\tanh\frac{1}{2}t_g}\right]^{-1/2}.\end{aligned}\right\} \tag{45}$$

即在杂質原子和其近邻出現較大的自旋偏离,并由其近邻向外指数函数地衰減. 杂質的近邻的和杂質的自旋偏离的相对比为 $\frac{\sigma^2}{4}(1+e^{-t_g})^2$. 如 $S'>4S$, 則无論 ΔE_g 的高低,杂質的自旋偏离均小于其近邻者. 如 $S'<S$, 則情况正好相反. 而在 $4S>S'>S$ 时,則二者的相对大小視 ΔE_g 的高低而定. (44)和(45)中的 t_u 和 t_g 分别为(34)和(39)所給出.

无論是奇对称模或偶对称模,其自旋偏离的衰減率均随 ΔE 的增加而变大,即在 ΔE 較大的情况下,只有接近杂質的少数原子有不可忽略的自旋偏离. 从(44)和(45)容易看出: 当 ΔE 无限增大,奇模的自旋偏离集中在杂質的近邻原子上,$(\Phi(\pm))^2=1/2$; 而偶模則集中在杂質及其近邻上,$(\Phi(0))^2=2S/(2S+S')$, $(\Phi(\pm 1))^2=\frac{S'}{2}\Big/(2S+S')$. 对于高度局域化的自旋波应該注意到第二节中已經提到的,有关 H-P 近似是否可靠的問題. 通过这里所举的 $\Delta E\to\infty$ 的极端例子,容易看出: 对于奇模必須 $4S\gg 1$, 对于偶模則必須 $4S\gg S'/(2S+S')$ 和 $S'\gg S/(2S+S')$. 后者在 $\sigma=1$ 的情况下相当于要求 $S\gg 1/3$. 由此可見,当 $S\geqslant 3$, H-P 近似应用来处理局域化自旋波是十分合理的. 对于 $S=S'=1/2$ 的偶模和 $S=1/2$ 的奇模,情况是最不利的. 在这里必須是 $e^t-1\ll 1$ 或 $\Delta E/JS\leqslant 0.01$, 我們采取的近似方法才是可靠的; 这就是說,略为离开带頂远一些的能級的自旋偏离已經过于局域化了.

应該指出：在理想晶体中，只有在系統的磁化状态离开飽和磁化状态頗多（例如，当温度 $T \approx T_c$ 时），亦即自旋波高度被激发的状态，H-P 近似才成为可非議的；而在我們这里处理非理想晶体的自旋波，虽然只是单个局域模 $n_E = 1$ 的状态，H-P 近似亦可能存在問題．自然，对于带頂以上的能級，一般都不会被高度地激发．

将以上所得結果作图表示：图 2 中以 $J'S'/JS$ 和 J'/J 两个参量作縱横坐标，在双斜綫的区域內，应出現两个局域模（一奇一偶），在单斜綫的区域內仅出現偶对称的局域模，而在空白区域內不应出現局域模．图 3 給出 ΔE_u 和 ΔE_g 随 $J'S'/JS$ 变化的状况，其中 ΔE_g 是按照 $S' = S$ 的特殊情况計算的．图 4 表达出两种局域模的自旋偏离的空間分布．所采用的半經典表現方式与文献[7]中所用者类似，卽以进动角的张开度表达自旋偏离的大小，并以进动的相角表 $\Phi(n)$ 的相角．模的奇偶对称性在相角的空間分布上表現出来．

产生自旋偏离时需要供給的能量随着交换作用系数和自旋量子数的增加而增大［参看式(9)］，在連續譜之上出現分离能級的条件(36)和(38)，是与这一情况相吻合的；卽杂質原子有較大的自旋矩，并且其与近邻之間的交换作用較強者有利于形成局域模，后者能級的高度，亦随 J'/J 和 S'/S 而增加．由上所得判据可以推測，哪些鉄磁晶体中較肯定地可能有局域化自旋波．根据 Fe 在金属和化合物中均較其他过渡族元素有較大的磁矩，并其与近邻的交换作用也可能較大的理由，我們認为鈷、鎳或其他鉄磁合金含鉄作为少量杂質者是观察自旋波局域模的适当对象．鉄磁性化合物的例子可举 CrTe，CrO_2 或 $CrBr_3$ 含鉄（或錳）作为杂質者[1)]．

在一維格子中的非磁性杂質或空位，隔断了交换作用的延續性，不能反映它們在三維晶体中的影响．但是，根据(36)和(38)可以判断，在三維晶体中非磁性杂質或空位不可能形成局域模，而只对連續譜內的自旋波起着散射的效应．

(B) 低于带底的分立能級

由于缺陷的影响，在連續带下可能出現分立能級；这在不久前曾被人簡略地提到过[8]．

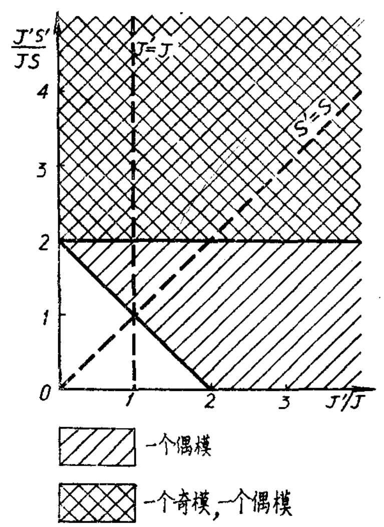

图 2　带頂以上产生局域模的条件

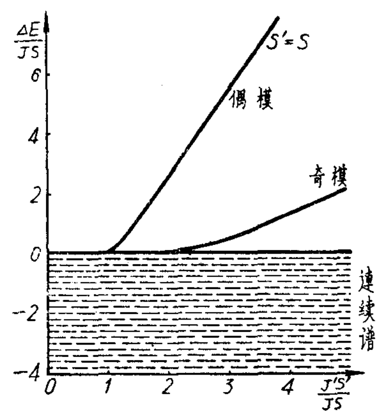

图 3　局域模能級

1) 有关这方面的較系統的討論見[11]．

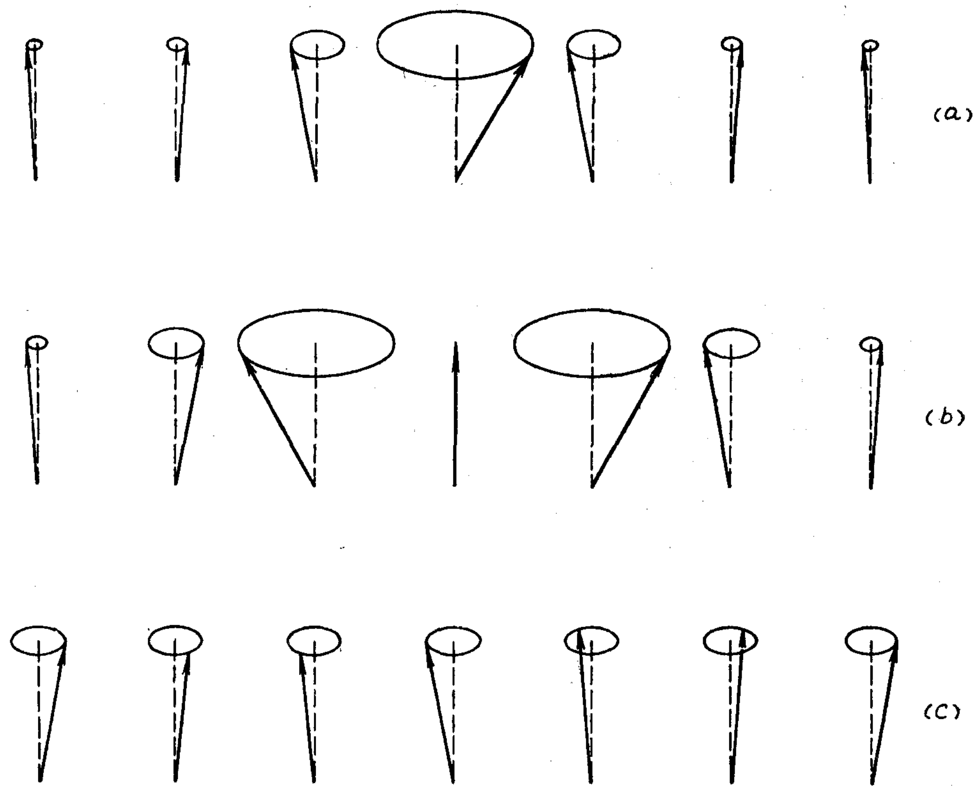

图 4 自旋波的半經典图象

(a) 偶对称局域模; (b) 奇对称局域模; (c) 均匀介質中的自旋波

代替(25)和(32),我們定义

$$\Delta E' = E - g\mu H, \tag{46}$$

$$\cosh t' = 1 - \frac{\Delta E'}{2JS}, \tag{47}$$

这里的 $\Delta E' < 0$. 在計算 A, B, $\cdots$ 等六个系数时,代替积分公式(33)的是

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \frac{\cos n\phi d\phi}{\cos\phi - \cosh t} = \frac{-e^{-|n|t}}{2\sinh t} \qquad t > 0. \tag{48}$$

依照前面对高于带頂的分立能級进行計算的程序,我們在这里得到

$$J' < 0$$

为同时出現两个低于带底的分立能級的条件. 它們的对称性也是一奇一偶. 其相关系数 t'、能級位置、自旋偏离的空間分布如下:

$$e^{t'_u} = 1 + \frac{|J'|S}{JS}, \tag{49}$$

$$e^{t'_g} = \frac{1}{2}\left\{2 + \left(2 + \frac{S'}{S}\right)\frac{|J'|}{J} + \left[\left(2 + \frac{S'}{S}\right)^2\left(\frac{J'}{J}\right)^2 + 8\frac{|J'|}{J}\right]^{1/2}\right\}, \tag{50}$$

$$\Delta E'_u = -JS\left(\frac{J'S'}{JS}\right)^2\left(1 + \frac{|J'|S'}{JS}\right)^{-1}, \tag{51}$$

$$\Delta E'_g = -JS\left(1+\frac{|J'|S'}{JS}\right)^{-1}\left\{\left(\frac{J'S'}{JS}\right)\frac{J'}{J}+\frac{1}{2}\left(\frac{J'S'}{JS}\right)^2+2\frac{|J'|}{J}+\right.$$
$$\left.+\frac{|J'|S'}{2JS}\left[\left(2+\frac{S'}{S}\right)^2\left(\frac{J'}{J}\right)^2+8\frac{|J'|}{J}\right]^{1/2}\right\}, \tag{52}$$

$$\left.\begin{aligned}&\Phi'_u(n) = -\Phi'_u(-n) = (e^{t'_u}\sinh t'_u)^{1/2}e^{-nt'_u}, \qquad n>0\\ &\Phi'_u(0)=0,\end{aligned}\right\} \tag{53}$$

$$\left.\begin{aligned}&\Phi'_g(n) = ce^{-|n|t'_g}, \qquad n\neq 0,\\ &\Phi'_g(0)=c_0.\end{aligned}\right\} \tag{54}$$

偶模的归一化因子 c 和 c_0 的表达式頗为复杂，不再一一給出．从(51)和(52)看出，当 J' 的絕对値足够大时，偶模的能級总比奇模的更低．由(53)和(54)与(44)和(45)比較，卽可看出，带之上和带之下的局域模波函数在形式上十分相近．由半經典图象看来，二者的差別主要地表現为：前者相邻自旋的进动相角差 π 角，而后者相邻自旋的进动相角均相同．在带之內的自旋波相邻自旋的相角各約差 ka．相邻自旋的相角差越大者，自旋能級愈高．

带之下的分立能級 $E=\Delta E'+g\mu H$，这里 H 是外加磁場和各向异性場之和．在一般情况下，$g\mu H \ll |\Delta E'|$，故当 $J'<0$ 而其絕对値不太小时，在带之下的局域模是"負能級"．我們原将絕对飽和磁化状态(所有一切原子磁矩均平行于 H 的状态)取作能量水平，如果存在着"負能級"，絕对飽和磁化状态並非基态．由此可見：只有在 H 足够地大，因而一切原子磁矩均平行于 H 的状态仍是基态的情况下，根据本文的理論分析所得的結果(49)—(54)才是有意义的．否則，整个問題必須重新考慮过．

四、另一个一維模型与偶极矩相互作用

考慮另一个一維模型如图 1 (b) 所示：所有一切原子的自旋均为 S，只有 $n=0$ 和 $n=1$ 之間的交换作用系数 $J'\neq J$．这一模型比第三节中引用的在数学形式上更单純一些，而在物理上可能得出对于間隙原子、高度集中的应变或化合物中阴离子杂質的影响有意义的結論．与第三节中的公式相类似，我們写出

$$V_{kk'} = \bar{v}_k v_{k'}, \tag{55}$$

$$v_k = \sqrt{\frac{S}{N}}(J'-J)^{1/2}(1-e^{-ika}). \tag{56}$$

分立能級的 E 滿足方程

$$\sum_k \frac{|v_k|^2}{E-\varepsilon_k} = 1, \tag{57}$$

解出

$$\Delta E = 4JS\left(\frac{J'}{J}-1\right)^2\bigg/\left(2\frac{J'}{J}-1\right). \tag{58}$$

这是(48)的独一的 $\Delta E>0$ 的解．高于带頂的局域模出現的条件是

$$J'>J, \tag{59}$$

其波函数

$$\left.\begin{aligned}&\Phi_E(n)=(-1)^n\left[2\frac{J'}{J}\left(\frac{J'}{J}-1\right)\right]^{1/2}e^{-nt} \qquad n>0,\\&\Phi_E(-n)=\Phi_E(n+1).\end{aligned}\right\} \tag{60}$$

具有以 $n=0$ 和 1 的二原子間的中点为中心的偶对称性.

与第三节（B）同样考虑时，得出結論：当 $J'<0$，在带底之下出現一局域模能級，其 $\Delta E'$ 的表达式与(58)相同，但其中的 J' 取負值.

这一模型不止提供了一个大概是最簡单的表現自旋波局域模的数学形式，而且定性地指出，在晶体中无論是高度集中的应变或間隙原子或化合物中阴离子的杂质，如使交換作用加強，就会导致自旋波出現高于带頂的局域状态.

使用这一模型，卽令考慮了偶极矩相互作用，哈密頓量也还較为簡单．我們得出

$$\mathscr{H}=\sum_k\left(A_ka_k^*a_k+\frac{1}{2}B_ka_ka_{-k}+\frac{1}{2}\bar{B}_ka_k^*a_{-k}^*\right)+\sum_{k,k'}\bar{v}_kv_{k'}a_k^*a_{k'}. \tag{61}$$

其中前一部分与无缺陷的情况完全一样，后一項代表缺陷的影响与不考慮偶极矩的情况下的表达式一样．式中系数[6]

$$A_k=4JS(1-\cos ka)+g\mu H+4\pi M\mu\sin^2\theta_k,$$
$$B_k=4\pi M\mu\sin^2\theta_k, \tag{62}$$
$$M=g\mu S/a. \tag{63}$$

θ_k 为 k 同 H 的交角．引入变換

$$a_k=f_kc_k+g_kc_{-k}^*,\quad a_k^*=f_kc_k^*+g_kc_{-k}, \tag{64}$$

其中

$$f_k=\left(\frac{A_k+\varepsilon_k}{2\varepsilon_k}\right)^{1/2},\quad g_k=-\left(\frac{A_k-\varepsilon_k}{2\varepsilon_k}\right)^{1/2}, \tag{65}$$

$$\varepsilon_k=(A_k^2-B_k^2)^{1/2}, \tag{66}$$

則

$$\begin{aligned}\mathscr{H}=&\sum_k\varepsilon_kc_k^*c_k+\sum_{k,k'}\bar{v}_kv_{k'}[\bar{f}_kf_{k'}c_k^*c_{k'}+g_k\bar{g}_{k'}c_{-k'}^*c_{-k}+\\&+g_kf_{k'}c_{-k}c_{k'}+\bar{f}_k\bar{g}_{k'}c_k^*c_{-k'}^*]+\sum_k|v_kg_k|^2.\end{aligned} \tag{67}$$

注意到下列諸关系：

$$v_{-k}=\bar{v}_k,\qquad f_k=f_{-k},\qquad g_k=g_{-k},$$

可以将 $\mathscr{H}$ 重写成

$$\begin{aligned}\mathscr{H}=&\sum_{k,k'}[\varepsilon_k\delta_{kk'}+\bar{v}_k\bar{f}_kv_{k'}f_{k'}+\bar{v}_k\bar{g}_kv_{k'}g_{k'}]c_k^*c_{k'}+\\&+\sum_{k,k'}\frac{1}{2}[v_kf_kv_{k'}g_{k'}+v_kg_kv_{k'}f_{k'}]c_kc_{k'}+\\&+\sum_{k,k'}\frac{1}{2}[\bar{v}_k\bar{f}_k\bar{v}_{k'}\bar{g}_{k'}+\bar{v}_k\bar{g}_k\bar{v}_{k'}\bar{f}_{k'}]c_k^*c_{k'}^*+\sum_k|v_kg_k|^2.\end{aligned} \tag{68}$$

应用 Тябликов 首先引用的变換（参看文献[9]中(4.201)式），把 $\mathscr{H}$ 对角化，而能量 E 是下列方程的本征值：

$$
\begin{aligned}
EP_k &= \sum_{k'} (\bar{v}_k \bar{f}_k \bar{v}_{k'} \bar{g}_{k'} + \bar{v}_k \bar{g}_k \bar{v}_{k'} \bar{f}_{k'}) Q_{k'} + \\
&\quad + \sum_{k'} (\varepsilon_k \delta_{kk'} + \bar{v}_k \bar{f}_k v_{k'} f_{k'} + \bar{v}_k \bar{g}_k v_{k'} g_{k'}) P_{k'}, \\
-EQ_k &= \sum_{k'} (v_k f_k v_{k'} g_{k'} + v_k g_k v_{k'} f_{k'}) P_{k'} + \\
&\quad + \sum_{k'} (\varepsilon_k \delta_{kk'} + v_k f_k \bar{v}_{k'} \bar{f}_{k'} + v_k g_k \bar{v}_{k'} \bar{g}_{k'}) Q_{k'}.
\end{aligned}
\tag{69}
$$

进行从(17)到(20)的同样的手續，得到决定 E 的方程式

$$
\begin{vmatrix}
\sum_k \frac{|v_k f_k|^2}{E-\varepsilon_k} - 1 & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{g}_k f_k}{E-\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{g}_k f_k}{E-\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k f_k|^2}{E-\varepsilon_k} \\
\sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E-\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k g_k|^2}{E-\varepsilon_k} - 1 & \sum_k \frac{|v_k g_k|^2}{E-\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E-\varepsilon_k} \\
\sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E+\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k f_k|^2}{E+\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k f_k|^2}{E+\varepsilon_k} + 1 & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E+\varepsilon_k} \\
\sum_k \frac{|v_k g_k|^2}{E+\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{g}_k f_k}{E+\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k|^2 \bar{g}_k f_k}{E+\varepsilon_k} & \sum_k \frac{|v_k g_k|^2}{E+\varepsilon_k} + 1
\end{vmatrix} = 0. \tag{70}
$$

作簡单的代数运算后（其中用到关系式 $|f_k|^2 - |g_k|^2 = 1$），本征值方程变为

$$
\begin{aligned}
&\left(1 - \sum_k \frac{|v_k|^2}{E-\varepsilon_k}\right)\left(1 + \sum_k \frac{|v_k|^2}{E+\varepsilon_k}\right) - 4\left(1 - \sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k|^2}{E^2-\varepsilon_k^2}\right)\left(\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k g_k|^2}{E^2-\varepsilon_k^2}\right) - \\
&\quad - 4\left|\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E^2-\varepsilon_k^2}\right|^2 + 4\left(\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k g_k|^2}{E^2-\varepsilon_k^2}\right)^2 = 0.
\end{aligned}
\tag{71}
$$

解方程(71)就得到所有带有偶极矩修正时的局域能級．由于 ε_k，f_k 和 g_k 的形式很复杂，代替求和的积分必須用数值方法进行計算．因此严格解(71)是很困难的．下面的定性討論指出：偶极矩修正不会減少局域模的个数．

一般的情况是 $|g_k| \ll 1$，$f_k \approx 1$．若令(71)中的 g_k 为 0（无偶极矩作用情况），它就回到本征方程(57)

$$
1 - \sum_k \frac{|v_k|^2}{E_0 - \varepsilon_k} = 0
$$

有一局域模 E_0．

考虑在带頂之上的模，利用(71)得到能級位置的改变

$$
E - E_0 \simeq \frac{4\left|\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k|^2 \bar{f}_k g_k}{E_0^2-\varepsilon_k^2}\right|^2 + 4\left(1 - \sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k|^2}{E_0^2-\varepsilon_k^2}\right)\left(\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k g_k|^2}{E_0^2-\varepsilon_k^2}\right)}{\left(\sum_k \frac{|v_k|^2}{(E_0-\varepsilon_k)^2}\right)\left(1 + \sum_k \frac{|v_k|^2}{E_0+\varepsilon_k}\right)}, \tag{72}
$$

其中我們已經略去了 g_k 的四次項．注意到 $E_0 > \varepsilon_k$ 以及 $\sum_k \varepsilon_k \frac{|v_k|^2}{E_0^2-\varepsilon_k^2} = \sum_k \frac{|v_k|^2}{E_0-\varepsilon_k} \cdot \frac{\varepsilon_k}{E_0+\varepsilon_k} < \sum_k \frac{|v_k|^2}{E_0-\varepsilon_k} = 1$，可推得近似等式的右边每一項全是正的，卽 $E - E_0 > 0$．这就是說，偶极矩作用是抬高了局域模能級，而不会使不带偶极矩修正时的局域模消失．

当然,偶极矩作用也抬高了带內的能級以及带頂,但它的一般趋势是使原来高的能級抬得更高,因此局域模不会进入带內. 同样的討論也适用于带之下的局域模. 这时带底比其下的局域模抬得更高,因而带下局域模不会消失. 至于偶极矩作用(由于它同交換作用相比是长程的)是否会引起新的局域模,那就必須解出方程(71)后才能肯定.

参 考 文 献

[1] Van Kranendonk, J., Van Vleck, J. H., *Rev. Mod. Phys.*, **30** (1958), 1.
[2] Maradudin, et al., *Rev. Mod. Phys.*, **30** (1958), 175.
[3] Lifshitz, I. M., *Nuovo cimento*, **3**, Suppl. AI (1956), 716.
[4] 戸田盛和, 日本物理学会志, **17** (1962), 164.
[5] Krumhansl, J. A., *J. Appl. Phys.*, **33** (1962), 307.
[6] Holstein, T., Primakoff, H., *Phys. Rev.*, **58** (1940), 1098.
[7] Keffer, et al., *Amer. J. Phys.*, **21** (1953), 250.
[8] Бонч-Бруевич, В. Л., *Физ. Метал. и Металловед.*, **2** (1956), 215.
[9] Боголюбов, Н. Н., 量子統計学 (1949 原著, 科学出版社中譯本, 1959).
[10] 方励之, 顧世杰, 有缺陷鉄磁体的中子非弹性散射, 物理学报(即将发表).
[11] 李蔭远, 朱硯磬, 立方鉄磁体中的自旋波局域模, 物理学报(即将发表).

EFFECT OF IMPERFECTIONS ON SPIN WAVES IN FERROMAGNETS

(*Academia Sinica*)

LI YIN-YUAN FANG LI-ZHI GU SHI-JIE

ABSTRACT

A general theoretical approach is developed to treat the effect of point imperfections on the spin waves in a ferromagnetic crystal. Special attention is paid to the formation of localized modes. As an example, the calculations have been carried out for a one-dimensional linear lattice. The main results obtained indicate the following features. A substitutional magnetic impurity atom may introduce more than one localized mode of spin waves. The conditions for the localized modes to appear and the positions of their energy levels are given in terms of $J'S'/JS$ and J'/J. Here S' and S are respectively the spin quantum number of the impurity and that of the normal atoms. J' and J are respectively the exchange integral between an impurity and its neighbors and that between the normal neighboring atoms. Highly concentrated strains and interstitial atoms which cause the exchange interaction between the atoms in their neighborhood to increase lead also to the formation of localized modes. Furthermore, the dipole-dipole interaction has been taken into consideration with the conclusion reached that it should not destroy the existence of these localized modes. Discussions have been given to the discrete energy levels which appear below the continuous spectrum in case of $J'<0$. It is pointed out that the Holstein-Primakoff approximation adopted in the present work is not quite legitimate for certain cases in which on one or more atoms the spin deviation becomes not very much smaller than $2S$ or $2S'$.