

# 有缺陷鉄磁体的中子非弹性散射\*

方励之 顧世杰

(中国科学院)

## 提 要

本文对有缺陷鉄磁体的中子-自旋波散射作了理論研究。計算了在簡單情况下的非弹性散射的微分截面。通过慢中子的散射实验可能証实自旋波局域模<sup>[1]</sup>的存在。我們在文中得出了散射态波函数,并証明了它們与局域模波函数一起在自旋偏离为一的子空間中組成了正交归一完整的波函数系。

## 一、引 言

慢中子在磁性晶体中的非弹性散射既可能由吸收或放出声子,也可能由吸收或放出自旋波(磁振子)所引起。二者由于对外加磁化場的反应不同而能被区分开来。因而通过对散射中子的能量分布与角分布的測量既能用以研究晶格的结构和动力学性質,也能用来研究晶体的磁学性質,尤其是自旋波の色散关系。有关理想晶体中的中子磁散射的理論研究<sup>[2-7]</sup>已經不少,它們的結果同实验<sup>[7-11]</sup>是符合的。

由于理想晶体中原子的有規律的排列,在各个原子上被散射的中子是相干的。当晶体中有缺陷时,由于它們的分布是无規的,因而在缺陷上散射的中子将是不相干的。

在文献[1]中我們已經指出:当鉄磁体中存在有一定性質的磁性杂质或高度集中的应变时,都可能出現局域的自旋波,相应的分立能級是在連續帶之外。我們有兴趣考虑者是具有高于帶頂的能級的局域化自旋波的鉄磁体。由于局域模的能級較高,在一般情况下不能被热运动所激发。所以自旋波局域模的存在,对鉄磁体中热平衡性質不会有影响。但当慢中子通过有这种缺陷的鉄磁体时,它的能量足以激发起局域的自旋波。因此,从物理图象上可以預料:当慢中子被含有上述这种缺陷的鉄磁体散射后,在其能量分布中应反映出不相干散射的效果,以及出現新的相应于局域模的共振峯。

本文只就中子在有缺陷的鉄磁体中的非弹性磁散射作一理論分析。缺陷的类型和性質与文献[1]中所討論的一样。文献[1]中沒有完成的帶內波函数在第二节中討論,因为下面的問題要用到它。它同局域模波函数組成正交归一完整波函数系的証明在附录中給出。本文的主要部分——非弹性散射的微分截面的計算在第三节中进行,而在最后一节中,对第三节的结果作了一些討論。

## 二、有缺陷鉄磁体的正交归一的自旋波函数全集

在理想鉄磁体中的自旋波是一組正交的平面波。当鉄磁体中有缺陷时,这些平面波

\* 1963年2月19日收到。

要被散射,还可能在缺陷附近形成局域态.

在文献[1]中我們已經得到了不計磁偶極矩相互作用,只考虑最邻近交换作用的有缺陷的自旋系統的哈密頓量

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}'}, \quad (1)$$

其中  $a_{\mathbf{k}}^*$ ,  $a_{\mathbf{k}}$  是理想晶格中波矢为  $\mathbf{k}$  的自旋波的产生,消灭算符.

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \sum_s \bar{v}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}, \quad (2)$$

是散射势的矩陣元,  $v_{\mathbf{k}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ , 同缺陷的性质有关,  $\bar{v}$  为  $v$  的复共轭. 对  $s$  的求和是从 1 到晶体的配位数(若只考虑最近邻作用).

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2JS \sum_{\delta} (1 - \cos \mathbf{k} \cdot \delta) + g\mu H \quad (3)$$

是理想晶格自旋波的色散关系.

首先討論最简单的情況:  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \bar{v}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}$  (这种情况所表示的缺陷性质在文献[1]的第 4 节中已討論过). 波函数的一般形式可写成

$$|\Phi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle, \quad (4)$$

其中  $|0\rangle$  表示沒有自旋波的真空态,  $a_{\mathbf{k}} |0\rangle = 0$ . 把(4)代入 Schrödinger 方程

$$H|\Phi\rangle = \varepsilon|\Phi\rangle,$$

得到  $\varphi_{\mathbf{k}}$  所滿足的方程

$$(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))\varphi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \bar{v}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}'}. \quad (5)$$

### 1. 局域模波函数

对于局域模  $E > \varepsilon(\mathbf{k})$ , 可以用与文献[1]中同样的方法得到規一化局域模波函数

$$|\Phi_E\rangle = \frac{1}{(h'(E))^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})} a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle. \quad (6)$$

$E$  为局域模能級,  $h'(z)$  表示  $h(z)$  对  $z$  的微商.

$$h(z) = 1 - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|v_{\mathbf{k}}|^2}{z - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (7)$$

$h(E) = 0$  是决定局域模能級的方程. 在坐标空間中局域模波函数的形式为

$$\Phi(n) = \frac{1}{(Nh'(E))^{1/2}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n}, \quad (8)$$

$\mathbf{r}_n$  是第  $n$  个格点的原子的坐标.

### 2. 帶内波函数(散射态波函数)

为了計算方便起見,我們把  $\varepsilon(\mathbf{k})$  看成  $\mathbf{k}$  的連續函数. 这时由于  $\varepsilon$  在帶内,代替(5)可以把  $\varphi_{\mathbf{k}}$  写成

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} + \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}}}{\varepsilon(\mathbf{k}_0) - \varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta} \sum_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}'}, \quad (9)$$

$i\delta$  代表发散波。以  $v_{\mathbf{k}}$  乘上式之二边,再对  $\mathbf{k}$  求和,移項后得

$$\sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}_0}}{1 - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{|v_{\mathbf{k}'}|^2}{\varepsilon(\mathbf{k}_0) - \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta}} = \frac{v_{\mathbf{k}_0}}{\hbar(\varepsilon(\mathbf{k}_0) + i\delta)}.$$

把上式代入(9),得带内波函数为

$$|\Phi_{\mathbf{k}}\rangle = a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle + \frac{1}{\hbar(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{v_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta} a_{\mathbf{k}'}^* |0\rangle. \quad (10)$$

其在坐标空間中的表示为

$$\Phi_{\mathbf{k}}(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} + \frac{1}{\hbar(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{v_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_n} \right). \quad (11)$$

(11)式右边第一項表示入射平面波,第二項为散射波。按自旋波的半經典图象,(11)式模的平方代表由波矢为  $\mathbf{k}$  的自旋波所引起的在  $\mathbf{r}_n$  格点原子自旋的偏离。可以清楚地看到:現在每个原子的自旋偏离不再是相同的  $\frac{1}{N}$  了。但它們之間的差別  $\sim \frac{1}{N}$ ,所以这种差別与局域模所引起的显著的差別相比是可以略去的。

(6)和(11)在自旋偏离为一的子空間中組成正交归一完整的波函数系的証明将在附录中进行。

在  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  有(2)的一般形式时,所不同的只是在(6)和(10)中包含更多的項,有如  $\frac{\bar{v}_{\mathbf{k}}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}$  和  $\frac{v_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta}$  者,以及(7)被一行列式

$$\hbar(z) = \left\| \delta_{ml} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{v_{\mathbf{k}}^m \bar{v}_{\mathbf{k}}^l}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \right\| \quad (12)$$

所代替。

局域模的个数与缺陷的性質以及浓度有关。在这里和下面,为了簡單起見,都假定只有一个局域模,推广到多个局域模的計算是直截了当的。

### 三、非弹性散射的微分截面

始动量为  $P$  的中子被自旋波散射到单位立体角和单位能量間隔內的微分散射截面<sup>[6]</sup>是

$$\frac{d^2\Sigma}{d\Omega dE_{P'}} = \frac{1}{4} (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{P'}{P} \sum_{n,n'} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{P'} - E_P)t} \langle S_n^{\alpha} S_{n'}^{\beta}(t) \rangle dt. \quad (13)$$

其中  $r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$  为电子經典半径;  $\gamma$  为中子的旋轉磁比率;  $P'$  为散射后中子的动量;  $\mathbf{q} = \mathbf{P} - \mathbf{P}'$  为散射向量;  $\mathbf{e} = \mathbf{q}/q$ ;  $\mathbf{S}_n$  和  $\mathbf{r}_n$  为第  $n$  个格点的原子的自旋算符和坐标;  $E_P$  和  $E_{P'}$  为散射前后的中子能量;  $F(\mathbf{q})$  为原子的磁結構因子;  $S_n^{\alpha}(t)$  为海森堡表象中的  $S_n^{\alpha}$ ;  $\langle \dots \rangle = \text{Sp}(e^{-\beta H} \dots) / \text{Sp} e^{-\beta H}$  为对散射体的統計平均;  $\beta = \frac{1}{kT}$ 。

假定所有原子的自旋量子数全为  $S$ 。应用 Holstein-Primakoff<sup>[12]</sup> 近似,把自旋算符变

成波色算符  $b_n$  和  $b_n^*$

$$\left. \begin{aligned} S_n^+ &= S_n^x + iS_n^y \simeq (2S)^{1/2} b_n, \\ S_n^- &= S_n^x - iS_n^y \simeq (2S)^{1/2} b_n^*, \\ S_n^z &= S - b_n^* b_n, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

$z$  轴沿自发磁化方向.

现在  $b_n$  和  $b_n^*$  不再象在理想晶格中按平面波  $\frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_n}$  展开, 而要用前面讨论的带内波函数与局域模波函数组成的正交归一完整系展开:

$$\left. \begin{aligned} b_n &= \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}(n) b_{\mathbf{k}} + \Phi_E(n) b_E, \\ b_n^* &= \sum_{\mathbf{k}} \bar{\Phi}_{\mathbf{k}}(n) b_{\mathbf{k}}^* + \bar{\Phi}_E(n) b_E^*. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

这里我们仍假定只有一个局域模  $E$ , 若有许多个, 只须在第二项前加一个符号  $\sum_E$ , 它表示对所有局域模求和.

用  $b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^*$  以及  $b_E, b_E^*$  表示的哈密顿量(1)是对角化的,

$$H_d = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}} + E b_E^* b_E. \quad (16)$$

所以波色算符的海森堡表示为

$$\left. \begin{aligned} b_{\mathbf{k}}(t) &= b_{\mathbf{k}} e^{-i \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar} t}, & b_{\mathbf{k}}^*(t) &= b_{\mathbf{k}}^* e^{i \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{\hbar} t}; \\ b_E(t) &= b_E e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, & b_E^*(t) &= b_E^* e^{i \frac{E}{\hbar} t}. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

把(14),(15)和(17)代入(13), 以及只限于单个磁振子的非弹性过程. 在对时间积分后, 我们得到微分截面的表示式:

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2 \Sigma}{d\Omega dE_{p'}} \right)_{in} &= (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{P'}{P} \frac{S}{2} (1 + e_x)^2 \sum_{n, n'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})} \times \\ &\times \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}(n) \bar{\Phi}_{\mathbf{k}}(n') (1 + n_{\mathbf{k}}) \delta(E_{p'} - E_p + \varepsilon(\mathbf{k})) + \right. \\ &+ \Phi_E(n) \bar{\Phi}_E(n') (1 + n_E) \delta(E_{p'} - E_p + E) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}(n') \bar{\Phi}_{\mathbf{k}}(n) n_{\mathbf{k}} \delta(E_{p'} - E_p - \varepsilon(\mathbf{k})) + \\ &\left. + \Phi_E(n') \bar{\Phi}_E(n) n_E \delta(E_{p'} - E_p - E) \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

其中  $n_{\mathbf{k}}, n_E$  是波色分布函数.

1) 实际上在(1)和(16)中的  $\sum_{\mathbf{k}}$  应是不同的: 非但两个色散关系  $\varepsilon(\mathbf{k})$  不同, 并且在(1)中  $\mathbf{k}$  的值是  $N$  个, 而在(16)中只有  $N - N_{10c}$ ,  $N_{10c}$  是局域模的个数. 但在把  $\varepsilon(\mathbf{k})$  当作  $\mathbf{k}$  的连续函数处理中, 散射势对连续谱能级是没有影响的, 实际上的差别是与  $\frac{1}{N}$  成正比, 这在我们现在讨论的问题中是完全可以略去的. 同样由于  $N \gg N_{10c}$ , 所以对  $N$  个  $\mathbf{k}$  值求和与对  $N - N_{10c}$  个  $\mathbf{k}$  值求和之差别是可以略去的.

把  $\Phi_{\mathbf{k}}(n)$  和  $\Phi_{\mathbf{E}}(n)$  的表达式(11)和(8)代入(18),并利用关系式

$$\frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(0) = N$$

( $v_0$  是单位晶胞的体积),完成对  $n, n'$  的求和,最終得到平均每个原子的微分散射截面为

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \left( \frac{d^2 \Sigma}{d\Omega dE_{p'}} \right)_{in} &= (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{P'}{P} \frac{S}{2} (1 + e_z^2) \sum_{\mathbf{K}} \times \\ &\times \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \frac{(2\pi)^3}{N v_0} (1 + n_{\mathbf{k}}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q} - 2\pi\mathbf{K}) \delta(E_{p'} - E_p + \varepsilon(\mathbf{k})) + \right. \\ &+ \sum_{\mathbf{k}'}' \frac{|v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{q}+2\pi\mathbf{K}}|^2}{|\hbar(\varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta)|^2 |\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{q} + 2\pi\mathbf{K})|^2} (1 + n_{\mathbf{k}'}) \delta(E_{p'} - E_p + \varepsilon(\mathbf{k}')) + \\ &+ \frac{|v_{\mathbf{q}+2\pi\mathbf{K}}|^2}{|\hbar'(E)(E - \varepsilon(\mathbf{q} + 2\pi\mathbf{K}))|^2} (1 + n_E) \delta(E_{p'} - E_p + E) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \frac{(2\pi)^3}{N v_0} n_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} + 2\pi\mathbf{K}) \delta(E_{p'} - E_p - \varepsilon(\mathbf{k})) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}'}'' \frac{|v_{\mathbf{k}'} v_{-\mathbf{q}-2\pi\mathbf{K}}|^2}{|\hbar(\varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta)|^2 |\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(-\mathbf{q} - 2\pi\mathbf{K})|^2} n_{\mathbf{k}'} \delta(E_{p'} - E_p - \varepsilon(\mathbf{k}')) + \\ &+ \left. \frac{|v_{-\mathbf{q}-2\pi\mathbf{K}}|^2}{|\hbar'(E)(E - \varepsilon(-\mathbf{q} - 2\pi\mathbf{K}))|^2} n_E \delta(E_{p'} - E_p - E) \right\}. \quad (19) \end{aligned}$$

其中  $2\pi\mathbf{K}$  是倒易格子向量;  $\sum_{\mathbf{k}'}'$  和  $\sum_{\mathbf{k}'}''$  分别表示对  $\mathbf{k}'$  求和时不包括  $\mathbf{k}' = \mathbf{q} + 2\pi\mathbf{K}$  和  $\mathbf{k}' = -\mathbf{q} - 2\pi\mathbf{K}$  的項.

(19)式中每一項所代表的散射过程是很明显的: 第一和第四項表示放出和吸收一个自旋波(磁振子)的相干散射;第二和第五項是缺陷所引起的不相干散射;第三和第六項表示放出和吸收一个局域自旋波的散射. 第二,三,五和六項都与  $1/N$  成正比,即当我们不限于一个缺陷时,它們与  $N_i/N$  成正比,  $N_i$  是缺陷的个数.

#### 四、討 論

在上节中我們已經得到了中子在有缺陷鉄磁体中的非弹性磁散射的微分截面. 从(19)中可以清楚地看到: 滿足动量和能量守恆的相干散射其截面同无缺陷时的一样<sup>[6]</sup>. 因此,在一定散射角的能量分布中出现分立的共振峯. 由缺陷的无規性引起的不相干散射在能量分布中形成一个連續的背景. 它的強度同缺陷的浓度成正比.

最有兴趣的是(19)中的第三和第六項,它們表示中子有可能放出和吸收局域的自旋波. 但由于在通常温度下  $n_E \approx 0$ , 所以实际上只可能出现中子放出局域自旋波的过程. 当然,  $E_p$  应滿足能量条件,即它至少要大于自旋波能譜的頂值  $2zJS$  ( $z$  是配位数). 按照居里温度的公式

$$T_c = 2zJS(S + 1)/3k$$

来估計  $2zJS = 3kT_c/(S + 1)$ . 对于居里点不高 ( $T_c \lesssim 100^\circ\text{K}$ ) 的样品,目前在实验中常用的能量 0.04 eV 左右的单色中子,已可能激发局域的自旋波. 对于居里点較高 ( $T_c \approx 1000^\circ\text{K}$ ) 的样品,則必須选用能量相应提高的中子注.

从(19)式可知:局域模吸收峯的強度与散射角有关(通过因子  $v_{\mathbf{q}+2\pi\mathbf{K}}$ ),而它在吸收譜

中的位置与散射角无关。这使我们很容易把局域模吸收与连续带吸收区分开来。

中子的磁散射是同磁化方向有关的。在非弹性单个磁振子过程中,截面正比于  $(1 + e_x^2)$ , 其中  $e_x$  是散射方向与自发磁化方向间夹角的余弦。另一方面, 中子被声子的散射过程是同磁化方向无关的, 以及中子被磁振动散射的截面与因子  $(1 - e_x^2)$  成正比<sup>[5]</sup>。因而我们可以用外加磁化场的方法来区分中子的磁散射和中子被声子的散射。同样的方法可以把自旋波局域模的吸收峰与声子局域模区分开来。

当缺陷的浓度很小时, 缺陷之间没有相关效应, 局域能级的简并重数与缺陷数相同。这时中子放出局域模的散射截面与缺陷浓度成正比。因而, 为了加强局域模吸收峰的强度, 缺陷的浓度不宜太低。但另一方面, 当浓度高于一定值时, 缺陷间的相关效应将使简并的局域能级分裂。这时浓度的加大所引起的峰的强度的增加越来越小, 相反地将使峰宽加大而不利于观察。所以缺陷浓度的适当的选取, 对观察局域模吸收峰有很大影响。

在我们现在讨论的模型中, 自旋波都是稳定态, 即若不与中子碰撞, 自旋波的寿命是无限的。所以能谱是由  $\delta$  函数表示。如果考虑到自旋波-自旋波及自旋波-声子相互作用, 那么自旋波能级都有一定的宽度以及  $\delta$  函数被共振型函数代替。

上述相互作用还致使自旋波近似与温度有关。如 T. Riste 等<sup>[10]</sup> 由中子磁散射的实验所指出的, 自旋波能量越高, 自旋波近似适用的温度就越低。由于局域模自旋波的能量很高, 因而可以预料: 只有在很低温度下, 才能观察到局域模吸收峰。

在反铁磁体和亚铁磁体, 同样也可能因杂质或其他缺陷的影响而出现局域化自旋波。对于它们, 这里的讨论定性地也是适用的。

最近 B. Mozer 等<sup>[13]</sup> 已经在中子散射实验中观察到与声子局域模振动相对应的一个峰。由于声子与自旋波之间, 声子局域模与自旋波局域模之间, 以及中子-声子散射与中子-自旋波散射之间的明显的类同性, 这一实验事实, 对在实验中发现自旋波局域模是有很大的启发性的。

最后应提一下有关实验工作选择样品的考虑。在文献[1]中我们已经得到代位杂质和其他缺陷引起局域化自旋波的定性判据, 并且指出一些较肯定的例子。在金属中如镍, 钴或其他磁性合金含铁作为杂质者, 在化合物中如  $\text{CrTe}$ ,  $\text{CrO}_2$  或  $\text{CrBr}_3$  含 Mn 或 Fe 作为杂质者, 应该是观察自旋波局域模的恰当对象<sup>1)</sup>。由于文献[1]中只是通过对一维线性链的计算而得到一些论断, 所举的例子不一定是恰当的样品。

在工作过程中, 李蔭远先生不断地给予关怀和指导, 并帮助修改原稿, 作者谨此致谢。

## 附 录

$|\Phi_k\rangle$  和  $|\Phi_E\rangle$  在自旋偏离为一的子空间中组成

正交归一完整波函数系的证明

我们仅仅限于只有一个局域模的简单情况的证明, 按正文所指的方法推广到一般情况是直截了当的。

局域模波函数(6)式是已经规一化了的, 它与所有连续带波函数全都正交是当然的,

1) 关于样品选择的讨论可参阅[14]。

因為它們的本征值不同。現在第一步要證明連續帶波函數是正交歸一的。從(10)得

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathbf{k}'} | \Phi_{\mathbf{k}} \rangle &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) - i\delta]} + \\ &+ \frac{v_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}'}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta]} + \frac{1}{h(\varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta)h(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}''} \frac{v_{\mathbf{k}} \bar{v}_{\mathbf{k}'} |v_{\mathbf{k}''}|^2}{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta][\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta]}. \end{aligned} \quad (20)$$

把求和號內的項拆成

$$\left( \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta} - \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta} \right) \frac{v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} |v_{\mathbf{k}''}|^2}{\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) - i\delta}$$

注意到(7)式，很易看出，對  $\mathbf{k}''$  求和的項正好抵消(20)式中中間二項，因而證明了  $|\Phi_{\mathbf{k}}\rangle$  的正交歸一性，

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}'} | \Phi_{\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (21)$$

第二步要證明局域模波函數與連續帶波函數組成完整系，在現在簡單情況下只要證明

$$\sum_{\mathbf{k}} |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Phi_{\mathbf{k}}| + |\Phi_E\rangle \langle \Phi_E| = I \quad (22)$$

成立就可以了。為此，我們從上式左邊第一項出發，

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Phi_{\mathbf{k}}| &= \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta]} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}'} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta]} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}} a_{\mathbf{k}''}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}'} \frac{v_{\mathbf{k}'} \bar{v}_{\mathbf{k}''} |v_{\mathbf{k}}|^2}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)h(\varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta][\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta]} = \\ &= I + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} a_{\mathbf{k}''}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}'} \left\{ \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}''}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}'') - \varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta]} + \right. \\ &+ \frac{v_{\mathbf{k}'} \bar{v}_{\mathbf{k}''}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta]} + \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{|v_{\mathbf{k}}|^2}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta]} \times \right. \\ &\left. \left. \times \frac{v_{\mathbf{k}'} \bar{v}_{\mathbf{k}''}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta]} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

為了進一步進行計算，我們必需完成上式最後一項對  $\mathbf{k}$  的求和：

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{v_{\mathbf{k}'} \bar{v}_{\mathbf{k}''} |v_{\mathbf{k}}|^2}{h(\varepsilon(\mathbf{k}) + i\delta)h(\varepsilon(\mathbf{k}) - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta][\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta]} \right] = \\ &= \bar{v}_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}''} \int_0^{\varepsilon_{\max}} d\varepsilon \frac{1}{(\varepsilon - z_1)(\varepsilon - z_2)h(\varepsilon + i\delta)h(\varepsilon - i\delta)} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})) = \\ &= \bar{v}_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}''} \int_0^{\varepsilon_{\max}} d\varepsilon \frac{1}{2i\text{Im}h(\varepsilon - i\delta)(\varepsilon - z_1)(\varepsilon - z_2)} \left[ \frac{1}{h(\varepsilon + i\delta)} - \frac{1}{h(\varepsilon - i\delta)} \right] \times \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})), \end{aligned} \quad (24)$$

其中  $z_1 = \varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta$ ;  $z_2 = \varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta$ .

根据  $h(z)$  的定义(7), 以及利用算符关系式

$$\frac{1}{x - i\delta} = P \frac{1}{x} + i\pi\delta(x),$$

得到

$$\text{Im } h(\varepsilon - i\delta) = -\pi \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})).$$

把上式代入(24)后, 它就变成

$$\begin{aligned} & -\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\varepsilon_{\max}} d\varepsilon \frac{1}{(\varepsilon - z_1)(\varepsilon - z_2)} \left[ \frac{1}{h(\varepsilon + i\delta)} - \frac{1}{h(\varepsilon - i\delta)} \right] = \\ & = -\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz \frac{1}{(z - z_1)(z - z_2)h(z)}, \end{aligned} \quad (25)$$

其中迴路  $C$  是顶点在  $(\varepsilon_{\max}, -\delta)$ ;  $(\varepsilon_{\max}, \delta)$ ;  $(0, \delta)$ ;  $(0, -\delta)$  的长方形(图 1). 被积函数的性质: 在  $0 - \varepsilon_{\max}$  有割线; 在  $z_1, z_2, E$  (局域模能级) 处有极点, 在其他各处是正则的. 而且当  $|z| \rightarrow \infty$  时, 被积函数  $\rightarrow |z|^{-2}$ . 因此, 我们可以把迴路  $C$  作这样变形: 在

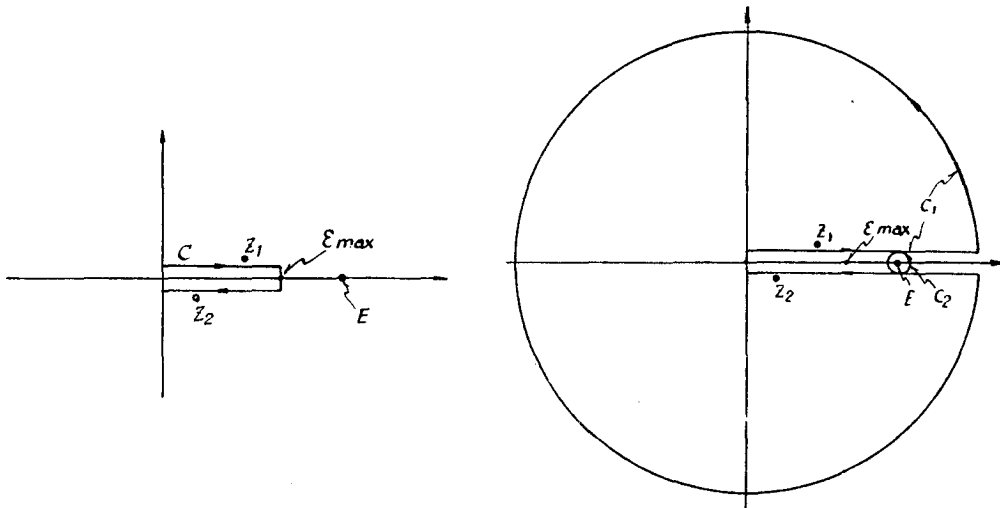


图 1

图 2

绕过奇点  $E$  后, 把矩形  $C$  向实轴正方向无限延伸. 然后再补上一半径趋于无限的大圆(图 2). 因为在所有这些附加线路上的积分全为零, 因而积分(25)变成

$$\oint_C = \oint_{c_1} + \oint_{c_2}.$$

在闭合迴路  $c_1$  和  $c_2$  中, 分别有一阶极点  $z_1, z_2$  和  $E$ . 应用留数定理可得积分为

$$\begin{aligned} & -\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'} \left[ \frac{1}{(z_1 - z_2)h(z_1)} + \frac{1}{(z_2 - z_1)h(z_2)} + \frac{1}{(E - z_1)(E - z_2)h'(E)} \right] = \\ & = -\frac{\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}'') - i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}'') - \varepsilon(\mathbf{k}') - i\delta]} - \\ & -\frac{\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'}}{h(\varepsilon(\mathbf{k}') + i\delta)[\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}'') + i\delta]} - \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}''} v_{\mathbf{k}'}}{h'(E)(E - \varepsilon(\mathbf{k}'))(E - \varepsilon(\mathbf{k}''))}. \end{aligned}$$

把这一结果代入(23), 我们最后得到



$$\sum_{\mathbf{k}} |\Phi_{\mathbf{k}}\rangle \langle \Phi_{\mathbf{k}}| = I - \frac{1}{h'(E)} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}'', E} \frac{\bar{v}_{\mathbf{k}'', E}}{E - \varepsilon(\mathbf{k}'')} a_{\mathbf{k}'', 0}^* |0\rangle \langle 0| a_{\mathbf{k}'} \times \\ \times \frac{v_{\mathbf{k}'}}{E - \varepsilon(\mathbf{k}')} = I - |\Phi_E\rangle \langle \Phi_E|.$$

这就证明了式(22)。总括以上二步, 我们已完全证明了  $|\Phi_{\mathbf{k}}\rangle$  和  $|\Phi_E\rangle$  组成一正交归一完整波函数系。

### 参 考 文 献

- [1] 李蔭远、方励之、顾世杰, 物理学报, **19** (1963), 599.
- [2] Halpern, O. and Johnson, M. H., *Phys. Rev.*, **55** (1939), 898.
- [3] Авакьянц, Г., *ЖЭТФ*, **18** (1948), 444.
- [4] Moorhouse, R. G., *Proc. Phys. Soc.*, **A64** (1951), 1097.
- [5] Elliott, R. J. and Lowde, R. D., *Proc. Roy. Soc.*, **A230** (1955), 46.
- [6] Изюмов, Ю. А., *ФММ*, **12** (1961), 480.
- [7] Shull, C. G., Wollan, E. O. and Koehler, W. C., *Phys. Rev.*, **84** (1951), 912.
- [8] Brockhouse, B. N., *Phys. Rev.*, **106** (1957), 859.
- [9] Brockhouse, B. N., *Phys. Rev.*, **111** (1958), 1273.
- [10] Riste, T., Blinowski, K. and Janik, J., *J. Phys. Chem. Solids*, **9** (1959), 153.
- [11] Sinclair, R. N. and Brockhouse, B. N., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 1638.
- [12] Holstein, T., Primakoff, H., *Phys. Rev.*, **58** (1940), 1098.
- [13] Mozer, B., et al., *Bull. Amer. Phys. Soc.*, **7** (1962), 16.
- [14] 李蔭远、朱硯馨, 立方铁磁体中的自旋波局域模, 物理学报(即将发表).

## INELASTIC SCATTERING OF NEUTRONS IN FERROMAGNETICS WITH IMPERFECTIONS

FANG LI-ZHI GU SHI-JIE

(Academia Sinica)

### ABSTRACT

In this paper a theoretical investigation has been made on the scattering of neutrons by the spin-wave in ferromagnetics with imperfections. The differential cross section of inelastic scattering has been calculated for a simple case. It has been found that the experimentation on scattering of thermal neutrons offers a method for the observation of localized modes of the spin-waves<sup>[1]</sup>. In our calculation we have shown that the wave-functions of the scattered spin-waves and those of the localized modes form a complete set of orthonormalized wave-functions in the subspace in which the total deviation of spins is equal to unity.