Korrelationsfunktion eines klassischen Heisenberg Ferromagneten in der paramagnetischen Phase

Autor(en): **Tellenbach, U.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **48 (1975)**

Heft 2

PDF erstellt am: **10.08.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-114671

Helvetica Physica Acta
Vol. 48, 1975.

Birkhäuser Verlag Basel

Korrelationsfunktion eines klassischen Heisenberg Ferromagneten in der paramagnetischen Phase

von **U. Tellenbach**

Institut für Reaktortechnik ETHZ, E.I.R., CH-5303 Würenlingen/Schweiz

(20. I. 75)

Zusammenfassung. Für die Korrelationsfunktion eines klassischen Heisenberg Ferromagneten wird mit Hilfe des sogenannten 'Random Coupling Model' eine geschlossene Gleichung hergeleitet.

1. Einführung

In den letzten Jahren sind mit Hilfe der Neutronenstreuung eine grosse Zahl magnetischer Substanzen im paramagnetischen Zustand und in der Nähe des Ordnungspunktes untersucht worden. Dementsprechend gross ist auch die Zahl der Theorien, welche die experimentellen Resultate zu erklären versuchen [1]. Wir zeigen nun in dieser Arbeit, wie man mit Hilfe des sogenannten 'Random Coupling Model', welches urprünglich von Kraichnan [2] zur Behandlung des Turbulenzproblems entwickelt wurde, die dynamische Spin-Korrelationsfunktion berechnen kann.

2. Definitionen

In der paramagnetischen Phase hat der differentielle Streuquerschnitt die folgende Form:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\omega} \propto \frac{k'}{k} \{\beta\hbar\omega/[1-\exp(-\beta\hbar\omega)]\} \cdot \chi_q \hat{F}_q(\omega). \tag{1}$$

Hier bedeuten

$$\chi_q = \langle S^z_{-q} S^z_q \rangle \tag{2}$$

die statische Korrelationsfunktion und $\hat{F}_q(\omega)$ ist die Fouriertransformierte der Relaxationsfunktion $F_q(t)$

$$F^z_q(t) = \langle S^z_{-q} S^z_q(t) \rangle / \chi_q = C_q(t)/\chi_q \tag{3}$$

Unterstützung dieser Arbeit durch den Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung.

und $S_q(t)$ ist eine Fourierkomponente der Spindichte:

$$S_q(t) = N^{-1} \sum_i S_i(t) \exp(iq \cdot R_i). \tag{4}$$

In der paramagnetischen Phase ist keine Richtung ausgezeichnet. Es gilt also:

$$\begin{aligned} C_q^\alpha(t) &= C_q(t) \quad (\alpha = x, y, z) \\ F_q^\alpha(t) &= F_q(t). \end{aligned} \tag{5}$$

Aus der Definition des Hamiltonoperators

$$H = -\tfrac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i \cdot S_j \tag{6}$$

folgen die Bewegungsgleichungen für die Spins:

$$\dot{S}_q(t) = -\tfrac{1}{2} \sum_{q'} J_{q,q'} S_{q'}(t) \times S_{q-q'}(t) \tag{7}$$

mit

$$\begin{aligned} J_{q,q'} &= J_{q'} - J_{q-q'} \\ J_q &= \sum_j J_{ij} \exp(iq \cdot (R_i - R_j)). \end{aligned} \tag{8}$$

Es ist klar, dass die Bewegungsgleichungen (7) auch wie folgt formuliert werden können:

$$S_q^\alpha(t) + \tfrac{1}{2} \int_0^t d\tau \sum_{\substack{q', q'' \\ \beta, \gamma}} M_{q,q',q''}^{\alpha,\beta,\gamma} S_{q'}^\beta(\tau) S_{q''}^\gamma(\tau) = S_q^\alpha(0) \tag{9}$$

wobei die Koeffizienten $M_{q,q',q''}^{\alpha,\beta,\gamma}$ sich aus (7) ergeben. Da die Gleichung (9) etwas umständlich zu handhaben ist, formulieren wir sie in operationeller Form:

$$S + L(S, S) = S_0 \tag{10}$$

wobei $S = (S_q^\alpha(t))$, $S_0 = (S_q^\alpha(0))$ und L ist ein bilinearer Operator.

Eine infinitesimale Störung der Anfangsbedingungen bewirkt eine infinitesimale Variation der Lösungen, welche linear von der Störung abhängt

$$\delta S = g \cdot \delta S_0 \tag{11}$$

womit wir den Green'schen Operator g definiert haben.

Der Green'sche Operator erfüllt die linearisierte Gleichung

$$g + 2L(S, g) = I \quad I = \text{Identität}. \tag{12}$$

Wir nehmen an, dass wir die statistische Verteilung der Spins zur Zeit $t = 0$ kennen, und setzen uns zum Ziel, die Kovarianz $\langle S_q(t) S_{q'}(t') \rangle = \delta(q + q') \langle S_q(t - t') S_{-q}(0) \rangle$, die wir im folgenden mit $\langle S \otimes S \rangle$ bezeichnen, und den Mittelwert $\langle g \rangle$ des Green'schen Operators zu berechnen.

3. Das 'Random Coupling Model' von Kraichnan

Kraichnan hat eine systematische Methode entwickelt, welche erlaubt, geschlossene Gleichungen für die Kovarianz und den Mittelwert der Green'schen Funktion herzuleiten. Zu diesem Zweck betrachtet er N statistisch unabhängige Versionen

$$S^\alpha + L(S^\alpha, S^\alpha) = S_0^\alpha \tag{13}$$

(ohne Summation über α) der Bewegungsgleichung. In einem zweiten Schritt führt er eine Kopplung zwischen diesen N Gleichungen ein

$$S^\alpha + \frac{1}{N}\sum_{\beta,\gamma} \phi_{\alpha\beta\gamma} L(S^\beta, S^\gamma) = S_0^\alpha \tag{14}$$

wobei die Kopplungskoeffizienten $\phi_{\alpha\beta\gamma}$, welche invariant bezüglich einer Permutation der Indizes sein sollen, eine Kollektion von Gauss'schen Zufallsgrössen mit Mittelwert Null und Varianz Eins darstellen. Es ist eine bemerkenswerte Tatsache, dass man nun exakte Gleichungen für die Kovarianz $(1/N)\sum_\alpha \langle S^\alpha \otimes S^\alpha\rangle$ und den Mittelwert des Green'schen Operators $\langle g_{\alpha\beta}\rangle = \langle g\rangle \delta_{\alpha\beta}$ herleiten kann. Die Lösungen dieser Gleichungen ergeben dann Näherungslösungen für die 'wahre' Bewegungsgleichung (10). Eine sehr ausführliche Diskussion der Methode von Kraichnan findet man in [3]. Deshalb seien im folgenden nur die Schulssresultate angegeben:

$$\begin{aligned}\langle S \otimes S\rangle = \langle S_0 \otimes S\rangle &+ 2L(S, S) \otimes \langle g\rangle L(S, S)\\ &+ 4L(\langle g\rangle L(S, S), S) \otimes S\end{aligned} \tag{15}$$

$$\langle g\rangle - 4L(S, \langle g\rangle L(S, \langle g\rangle)) = I. \tag{16}$$

Dabei benützen wir die Konvention, dass der Erwartungswert separat zu nehmen ist für Terme, welche durch verschiedene Klammern verbunden sind; beispielsweise

$$S \otimes S \otimes S \otimes S = \langle S \otimes \langle S \otimes S\rangle \otimes S\rangle.$$

4. Berechnung der Korrelationsfunktion

Wir wenden den Operator d/dt auf beide Seiten der Gleichung (15) an, und benützen (9). Dann ergibt sich:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}C_q(t) &= 4\cdot\tfrac{1}{4}\int_0^t d\tau \sum_{\substack{\beta,\gamma\\ q'}} M^{\alpha,\beta,\gamma}_{q,q',q-q'}\, g^\beta_{q'}(t-\tau) \sum_{\substack{\alpha'',\gamma''\\ q''}} M^{\beta,\alpha'',\gamma''}_{q',q'',q'-q''}\\ &\quad\times \langle S^{\alpha''}_{q''}(\tau)\langle S^{\gamma''}_{q'-q''}(\tau)\, S^{\gamma}_{q-q'}(t)\rangle\, S^\alpha_{-q}\rangle\\ &= \int_0^t \sum M^{\alpha,\beta,\gamma}_{q,q',q-q'}\cdot M^{\beta,\alpha,\gamma}_{q',q,q-q'}\cdot g^\beta_{q'}(t-\tau)\\ &\quad\times C^\alpha_q(\tau)\, C^\gamma_{q-q'}(t-\tau)\, d\tau.\end{aligned}$$

Aus (5) und (7) folgt weiter:

$$\frac{d}{dt} C_q(t) = -2 \sum_{q'} \int_0^t J_{q,q'} \cdot J_{q',q} g_{q'}(t-\tau)\, C_{q-q'}(t-\tau)\, C_q(\tau)\, d\tau$$

$$\frac{d}{dt} C_q(t) = -2 \sum_{q_1} K_{q,q_1} \int_0^t g_{q-q_1}(t-\tau)\, C_{q_1}(t-\tau)\, C_q(\tau)\, d\tau \tag{17}$$

mit

$$K_{q,q_1} = J_{q,q-q_1} \cdot J_{q-q_1,q}. \tag{18}$$

Eine analoge Rechnung für $g_q = \langle g \rangle_q$ ergibt:

$$\frac{d}{dt} g_q(t) = -2 \sum_{q_1} K_{q,q_1} \int_0^t g_{q-q_1}(t-\tau)\, C_{q_1}(t-\tau)\, g_q(\tau)\, d\tau \tag{19}$$

mit

$$g_q(0) = 1.$$

Das Gleichungssystem (17) und (19) besitzt Lösungen von der Form

$$C_q(t) = f(q)\, g_q(t) \tag{20}$$

wo $f(q)$ eine Konstante ist. Aus $\chi_q = C_q(0) = f(q) g_q(0)$ folgt

$$C_q(t) = \chi_q\, g_q(t). \tag{21}$$

Aus (3) und (21) folgt $F_q(t) = g_q(t)$ und daraus das Schlussresultat:

$$\frac{d}{dt} F_q(t) = -2 \sum_{q'} K_{q,q'} \cdot \chi_{q'} \int_0^t F_{q'}(t-\tau) \cdot F_{q-q'}(t-\tau)\, F_q(\tau)\, d\tau. \tag{22}$$

5. Bemerkungen

Wir weisen zunächst daraufhin, dass unser Schlussresultat (22) übereinstimmt mit den Resultaten von Blume and McLean [4] u.a. Es ist auch bekannt, dass Gleichung (22) bei hoher Temperatur sehr gute Resultate liefert, andererseits aber bei der Beschreibung von Spinwellen in eindimensionalen Systemen versagt [4]. Ferner sei noch erwähnt, dass man mit denselben Methoden auch magnetische Systeme in *geordnetem* Zustand behandeln kann. (Die Rechnung ist weitgehend identisch mit derjenigen im Abschnitt 4.)

Verdankungen

Der Autor dankt Herrn Prof. W. Hälg und Herrn Dr. A. Furrer für wertvolle Diskussionen und für die kritische Durchsicht des Manuskripts.

Referenzen

[1] J. HUBBARD, J. appl. Phys. *42*, 1390 (1971).
[2] R. H. KRAICHNAN, J. Math. Phys. *2*, 124 (1961).
[3] M. LESIEUR, Ann. Geophys. *27*, 151 (1971).
[4] F. B. MCLEAN und M. BLUME, Phys. Rev. B*7*, 1149 (1973).