STUDIA UNIVERSITATIS MOLDAVIAE, 2016, nr.7(97)
Seria "Ştiinţe exacte şi economice" ISSN 1857-2073 ISSN online 2345-1033 p.156-161

CZU: 621.3.01: 537.622.4

НАМАГНИЧЕННОСТЬ НАСЫЩЕНИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Александр КЛЮКАНОВ, Денис НИКА

Молдавский государственный университет

Намагниченность насыщения, внутренняя энергия и дисперсия магнонов вычислены без использования модельных представлений. Показано, что температурная зависимость магнитного момента и внутренней энергии ферромагнетика находятся в согласии с теорией, основанной на модели Гейзенберга, что является отражением резонансного характера переходов, обусловленных спин-орбитальным взаимодействием.

Ключевые слова: *намагниченность насыщения, магнон, теплоемкость, ферромагнетик.*

MAGNETIZAREA DE SATURAŢIE ŞI CAPACITATEA TERMICĂ A SUBSTANŢEI FEROMAGNETICE

Magnetizarea de saturaţie, energia internă şi dispersia magnonilor au fost calculate fără folosirea reprezintărilor model. A fost demonstrat că dependenţa de temperatură a momentului magnetic şi a energiei interne a substanţei feromagnetice se află în acord cu teoria bazată pe modelul lui Heisenberg ce reflectă caracterul rezonant al tranziţiilor cauzate de interacţiunea spin-orbitală.

Cuvinte-cheie: *magnetizare de saturaţie, magnon, capacitate termică, feromagnetic.*

SATURATION MAGNETIZATION AND HEAT CAPACITY OF FERROMAGNETIC

Saturation magnetization, magnon dispersion law and heat capacity of ferromagnetic are calculated from the first principles. It has been demonstrated that temperature dependence of magnetic momentum and internal energy of ferromagnetic is in a good agreement with that obtained in the framework of the Heisenberg model. The latter reflects the resonance character of the electron transitions due to the spin-orbit coupling.

Keywords: *saturation magnetization, magnon, heat capacity, ferromagnetic.*

Введение

Основу физики магнетизма, вплоть до настоящего времени, составляет модель Гейзенберга и ее модификации [1,2]. Гейзенберговский спи□новый гамильтониан, в котором обменное нерелятивистское взаимодействие представляется спин-спиновым, позволил объяснить многие экспериментальные результаты. Можно ли получить эти результаты без использования модели Гейзенберга – совсем не очевидно. Нам не известны работы, в которых закон $T^{3/2}$ Блоха был бы доказан стандартными методами квантовой механики. Величина константы спин-гамильтониана складывается из суммы вкладов обменного и спин-орбитального взаимодействия, которым обычно пренебрегают. Легко убедиться, что спин-орбитальное взаимодействие в ряде случаев может внести вклад, сравнимый с обменным. Действительно, энергия кристалла с учетом недиагональных матричных элементов определяется из уравнения $\mathrm{E} = \mathrm{H}_{nn} - \sum \left|\mathrm{V}_{nm}^{so}\right|^2 / \left(\mathrm{H}_{mm} - \mathrm{E}\right)$ [3]. Метод исключения быстрого орбитального движения ведет к уравнениям для медленных переменных и широко используется в теоретической физике [4,5]. В соответствии с этим методом, $\Delta E = -\sum \left(A_i \cdot S_i\right)_{nm} \left(A_j \cdot S_j\right)_{mn} / \left(H_{mm} - E\right) = -\sum I_{i,i+\delta}^{so} \left(S_i \cdot S_{i+\delta}\right)_{nn}$. Константа взаимодействия $\mathrm{I}_{i,i+\delta}^{so}$ зависит не только от операторов $\mathrm{A}_i \approx c^{-2}$, но и от разности энергий $\mathrm{H}_{mm} - \mathrm{E}$. Если величина разности энергий $\mathrm{H}_{mm} - \mathrm{E}$ определяется спин-орбитальным взаимодействием, то константа $\mathrm{I}_{i,i+\delta}^{so}$ не будет зависеть от скорости света и может доминировать в сравнении с обменом. Вычислим намагниченность насыщения ферромагнетика вблизи температуры T=0 К исходя из первых принципов и проведем сравнение с теорией магнонов в модели Гейзенберга [1,2].

STUDIA UNIVERSITATIS MOLDAVIAE, 2016, nr.7(97)
Seria "Ştiinţe exacte şi economice" ISSN 1857-2073 ISSN online 2345-1033 p.156-161

Постановка задачи и основные уравнения

Гамильтониан системы электронов и ядер твердого тела в представлении вторичного квантования включает сумму нерелятивистских членов и спин-орбитальное взаимодействие:

$$H=\sum_{lm} h_{lm}a_l^+a_m+\frac{1}{4}\sum_{qj}\hbar\omega_{qj}\left(P_{qj}^+P_{qj}\right)+\frac{1}{2}\sum_q V_q^T,V_q^T=V_q\left\{\rho_{-q}^N\rho_q^T-\sum_{lm}e_{lm}(-q)a_l^+\rho_q^C a_m-\sum_{lm}e_{lm}^{iqr}a_l^+\rho_q^{SO}a_m\right\},V_q=\frac{4\pi e^2}{Vq^2}. \quad (1)$$

Здесь введены следующие обозначения для плотности заряда электронов ρ_q^E и плотности заряда ядер ρ_q^N в единицах $\mathrm{e/V}$, $(\mathrm{e}=|\mathrm{e}|)$:

$$\rho_q^C=\rho_q^N+\rho_q^E,\ \rho_q^T=\rho_q^C+\rho_q^{SO}=\rho_q^N-\sum_{lm}e_{lm}(q)a_l^+a_m,\ e(q)=e^{-iqr}+e^{SO}(q),\ e^{SO}(q)=\frac{i\hbar}{(2mc)^2}e^{-iqr}(\sigma\cdot[p\times q]). \quad (2)$$

Распределение заряда (2) зависит от спина электрона. Положение ядер с учетом их смещений выражается через операторы рождения и уничтожения фононов [6]. Остальные обозначения стандартны. В качестве базиса вторичного квантования может быть использован полный набор ортонормированных функций $|l\rangle|n_{qj}\rangle$. Здесь $|l\rangle$ – набор блоховских волновых функций, или функций Ванье, $|n_{qj}\rangle$ – волновые функции фононов в гармоническом приближении. Оператор невзаимодействующих квазичастиц, собственные волновые функции которого выбраны в качестве базиса вторичного квантования, имеет вид

$$H_0=\sum_l\varepsilon_l a_l^+a_l+\sum_{qj}\hbar\omega_{qj}\left(b_{qj}^+b_{qj}+\frac{1}{2}\right). \quad (3)$$

Введение оператора H_0 эквивалентно использованию метода неопределенных множителей Лагранжа, которыми служат параметры $\varepsilon_l,\omega_{qj}$. Исследование электронных и фононных свойств наноструктур основывается на различных теоретических моделях [6-8]. В данной работе мы получим уравнения Хартри-Фока для спектра энергий электронов с учетом корреляций плотности заряда [9] и спин-орбитального взаимодействия в рамках расчета намагниченности ферромагнетика. В представлении вторичного квантования среднее значение магнитного момента единицы объема ферромагнетика в проекции на выделенное направление вдоль оси Oz определяется выражениями

$$M_z=-\frac{\mu_B}{V}\sum_{nm}(l_z+\sigma_z)_{mn}<a_m^+a_n>,\qquad P_{mn}=<a_m^+a_n>=Sp\left\{\exp(-\lambda H)a_m^+a_n\right\}/Sp\left\{\exp(-\lambda H)\right\}. \quad (4)$$

Намагниченность насыщения, согласно формуле (4), вычисляется в термодинамическом равновесии. Величина P_{mn} (4) может быть представлена в виде ряда по степеням флуктуаций $\Delta\mathrm{V}$:

$$P_{mn}=<a_m^+a_n>=<a_m^+a_n>_0-\int_0^\lambda<\Delta V(\sigma)\Delta a_m^+a_n>_0d\sigma+\int_0^\lambda d\sigma\int_0^\sigma d\sigma_1V_{mn}(\sigma,\sigma_1),\quad V_{mn}(\sigma,\sigma_1)=<\Delta V(\sigma)\Delta V(\sigma_1)\Delta a_m^+a_n>_0. \quad (5)$$

В нулевом порядке по возмущению $V=H-H_0$ получим $<a_m^+a_n>_0=n_m\delta_{nm}$. Здесь $\mathrm{n_m}$ – функция распределения Ферми-Дирака. С учетом поправок первого порядка по флуктуациям $\Delta V(\sigma)=V(\sigma)-<V(\sigma)>_0$, где $V(\sigma)=\exp(\sigma H_0)V\exp(-\sigma H_0)$, находим $\mathrm{P_{mn}=n_m\delta_{nm}+(n_n-n_m)(h_{nm}^{HF}-\varepsilon_n\delta_{nm})/\hbar\omega_{nm}}$. Здесь

$$h_{nm}^{HF}=h_{nm}-\sum_q V_qF_{nm}^{HF}(q),\ F_{nm}^{HF}(q)=\left(<\rho_q^C>_0e_{nm}(-q)+<\rho_q^{SO}>_0e_{nm}^{iqr}+\sum_l\left(e_{nl}(q)e_{lm}^{iqr}+e_{nl}^{iqr}e_{lm}^{SO}(q)\right)n_l\right). \quad (6)$$

Подставляя найденное выражение для P_{mn} в формулу (4) для намагниченности, получим для M_z уравнение $\mathrm{M_z=-\mu_B\sum_m(l_z+\sigma_z)_{mm}n_m/V}$, которое справедливо при выполнении следующих условий:

$$\sum_m\left(h_{nm}^{HF}-\varepsilon_n\delta_{nm}\right)G_{mn}=0. \quad (7)$$

STUDIA UNIVERSITATIS MOLDAVIAE, 2016, nr.7(97)
Seria "Ştiinţe exacte şi economice" ISSN 1857-2073 ISSN online 2345-1033 p.156-161

Из системы линейных уравнений (7) в приближении Хартри-Фока (6) следует, что энергетический спектр электронов ε_n определяется диагонализацией матрицы h_{nm}^{HF}, которая зависит как от прямого кулоновского взаимодействия, так и от обменного. Магнитный момент единицы объема, при условии, что орбитальные моменты заморожены, в первом порядке по возмущению $V = H - H_0$ имеет вид:

$$M_z = -\frac{\mu_B}{V}\sum_n (\sigma_z)_{nn} n_n. \tag{8}$$

При нуле температуры $M(0) = 2\mu_B NS$, где N – число атомов в единице объема, S – квантовое число полного спина атома. Корреляционные поправки определяются слагаемыми второго прядка по возмущению в уравнении (5). Как известно, второй порядок теории возмущений приводит к кулоновским расходимостям в пределе $q \to 0$. В нашем случае, если все средние вычислить на матрице плотности квазичастиц с гамильтонианом H_0 (3), такая расходимость возникает в слагаемом, которое соответствует учету двух трансформант кулоновского взаимодействия с $q_1 = \pm q$ в качестве возмущения:

$$V_{mn}(\sigma,\sigma_1) = \sum_q V_q^2 < \rho_q^C(\sigma)\rho_{-q}^C(\sigma_1) >_0 < \rho_{-q}(\sigma)\rho_q(\sigma_1)(a_m^+ a_n - < a_m^+ a_n >_0) >_0 . \tag{9}$$

Для устранения расходимости в пределе $q \to 0$ перейдем от среднего на матрице плотности квазичастиц $< \rho_q^C(\sigma)\rho_{-q}^C(\sigma_1) >_0$ к среднему на точной матрице плотности, а поправками по степеням возмущения $V = H - H_0$ пренебрежем. Согласно флуктуационно-диссипационной теореме,

$$< \rho_q^C(\sigma)\rho_{-q}^C(\sigma_1) > = \frac{\hbar}{\pi V_q}\int_{-\infty}^{\infty}(n(\omega)+1)\,\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\}\exp\{-\hbar\omega(\sigma-\sigma_1)\},\; n(\omega) = \left(\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1\right)^{-1}. \tag{10}$$

Здесь функция Грина заряд-заряд $\Pi(q,\omega)$, которая характеризует отклик системы на продольные возмущения $\Pi(q,\omega) = 1 - 1/\varepsilon(q,\omega)$, определяется Фурье-образом средней величины коммутатора плотности заряда, вычисленной на точной матрице плотности:

$$\Pi(q,\omega) = i\frac{V_q}{\hbar}\int_0^{\infty} e^{i(\omega+i\delta)t}\left\langle\left[\rho_q^C(t),\rho_{-q}^C(0)\right]\right\rangle dt. \tag{11}$$

Вычисляя оставшиеся средние в формуле (9) для функции $V_{mn}(\sigma,\sigma_1)$ на матрице плотности квазичастиц и интегрируя по σ и σ_1 в уравнении (5), получим

$$P_{mn} = n_m\delta_{nm} + \frac{n_n - n_m}{\hbar\omega_{nm}}\left(h_{nm}^C - \varepsilon_n\delta_{nm}\right) - \sum_q V_q\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi\hbar}(n(\omega)+1)\,\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\}\sum_l e_{nl}(q)e_{lm}(-q)\left\{\frac{n_m(1-n_l)}{(\omega+\omega_{lm})(\omega+\omega_{ln})} - \frac{n_l(1-n_m)}{(\omega-\omega_{lm})(\omega-\omega_{ln})}\right\}. \tag{12}$$

С учетом поляризации кристалла матрица h_{nm}^C имеет вид $\mathrm{h}_{nm}^C = \mathrm{h}_{nm} - \sum_q \mathrm{V}_q\left(\mathrm{F}_{nm}^{HF}(q) + \mathrm{F}_{nm}^C(q)\right)$, где

$$F_{nm}^C(q) = < \rho_{-q} >_0 e_{nm}(q)\left(\frac{1}{\varepsilon(q,0)}-1\right) + \sum_l e_{nl}(q)e_{lm}(-q)\left\{n_l\left(\frac{1}{\varepsilon(q,\omega_{nl})}-1\right) + \int_{-\infty}^{\infty}(n(\omega)+1)\,\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\}\frac{1}{\omega-\omega_{nl}}\frac{d\omega}{\pi}\right\}. \tag{13}$$

Функция $F_{nm}^C(q)$ помимо статической и динамической экранировки включает поляронную перенормировку спектра энергий электрона.

Результаты и обсуждение

Используя уравнение (12) и считая орбитальные моменты замороженными, с учетом поляризации ферромагнетика для температурной поправки намагниченности насыщения $\Delta M(T) = M(0) - M(T)$ находим

$$\Delta M(T) = 2\frac{\mu_B}{V}\sum_q V_q\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi\hbar}n(\omega)\,\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\}\sum_{nl}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2\frac{n_n(1-n_l)}{(\omega-\omega_{ln})^2}. \tag{14}$$

STUDIA UNIVERSITATIS MOLDAVIAE, 2016, nr.7(97)
Seria "Științe exacte și economice" ISSN 1857-2073 ISSN online 2345-1033 p.156-161

Релятивистское спин-орбитальное взаимодействие является слабым, поскольку константа $e_{nl}^{SO}(q) \approx (\hbar q)^2/(mc)^2$. Тем не менее, вклад его в $\Delta M(T)$ оказывается значительным благодаря множителю $(\omega - \omega_{ln})^{-2}$ в формуле (14) в резонансных условиях. Согласно полученным результатам, как намагниченность (14), так и спектр энергий электронов существенным образом зависят от гриновской функции $\Pi(q,\omega)$, при расчете которой ограничимся двумя компонентами кулоновского взаимодействия в качестве возмущения $V = \left(V_q^T + V_{-q}^T\right)/2$, где $\tilde{H} = H - V$. Именно эти слагаемые приводят к кулоновским расходимостям, а расходящиеся вклады должны быть отсуммированы, например, в приближении хаотических фаз. Отметим, что разница между гамильтонианами $\tilde{H}$ и H в пределах бесконечного объема $V \to \infty$ исчезает. Определим $\Pi(q,\omega)$ в обобщенном приближении хаотических фаз с учетом спин-орбитального взаимодействия. Используя формально точное решение уравнения Гейзенберга [6], получим:

$$\Pi(q,\omega) = \tilde{\Pi}(q,\omega)\left(1 - \Pi_C^{SO}(q,\omega)\right) - \left(\tilde{\Pi}(q,\omega) + \tilde{\Pi}_{SO}^{C}(q,\omega)\right)\Pi(q,\omega). \tag{15}$$

Здесь новые функции Грина определяются в соответствии со следующими уравнениями:

$$\Pi_B^A(q,\omega) = i\frac{V_q}{\hbar}\int_0^\infty e^{i(\omega+i\delta)t}\left\langle\left[\rho_q^A(t), \rho_{-q}^B(0)\right]\right\rangle dt, \quad \tilde{\Pi}_B^A(q,\omega) = i\frac{V_q}{\hbar}\int_0^\infty e^{i(\omega+i\delta)t}\left\langle\left[\tilde{\rho}_q^A(t), \rho_{-q}^B(0)\right]\right\rangle dt, \quad \tilde{\rho}_q(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t}\rho_q e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t}. \tag{16}$$

Аналогично находим уравнение для функции Грина Π_C^{SO}:

$$\Pi_C^{SO}(q,\omega) = \tilde{\Pi}_C^{SO}(q,\omega) - \left(\Pi(q,\omega) + \Pi_C^{SO}(q,\omega)\right)\tilde{\Pi}_C^{SO}(q,\omega) - \tilde{\Pi}_{SO}^{SO}(q,\omega)\Pi(q,\omega). \tag{17}$$

Уравнение (17) совместно с уравнением (15) составляет систему двух уравнений для функций Грина $\Pi(q,\omega)$ и $\Pi_C^{SO}(q,\omega)$. Решая эту систему, находим:

$$\Pi(q,\omega) = \tilde{\Pi}(q,\omega)/\left\{1 + \tilde{\Pi}(q,\omega) + \tilde{\Pi}_C^{SO}(q,\omega) + \tilde{\Pi}_{SO}^{C}(q,\omega) + \tilde{\Pi}_{SO}^{C}(q,\omega)\tilde{\Pi}_C^{SO}(q,\omega) - \tilde{\Pi}_{SO}^{SO}(q,\omega)\tilde{\Pi}(q,\omega)\right\}. \tag{18}$$

Правую часть уравнения (18) вычислим в представлении взаимодействия. Выполняя усреднение на равновесной матрице плотности квазичастиц с оператором Гамильтона (3), находим:

$$\Pi(q,\omega) = \frac{\tilde{\Pi}(q,\omega)}{1 + \tilde{\Pi}(q,\omega) - \tilde{\Pi}_{SO}^{SO}(q,\omega)\tilde{\Pi}(q,\omega)}, \quad \tilde{\Pi}_{SO}^{SO}(q,\omega) = 2\frac{V_q}{\hbar}\sum_{nl}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2 \frac{n_n(1-n_l)}{\omega_{ln}^2 - (\omega + i\delta)^2}\omega_{ln}. \tag{19}$$

Полюса функции Грина $\Pi(q,\omega)$ определяют частоты возбуждений, с которыми взаимодействуют электроны. С учетом спин-орбитального взаимодействия при низких частотах переходы с переворотом спина соответствуют полюсам функции Грина (19), которые удовлетворяют уравнению

$$2\frac{(\varepsilon(q,0)-1)V_q}{\hbar\varepsilon(q,0)}\sum_{nl}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2\frac{n_n(1-n_l)}{\omega_{ln}^2 - \omega^2}\omega_{ln} = 1, \; \tilde{\Pi}(q,\omega) = \varepsilon(q,0) - 1. \tag{20}$$

Уравнение (20) определяет закон дисперсии магнона, частота которого приближенно равна частоте перехода ω_{ln}. В двухзонном приближении $\omega_{ln} = \Delta_{ln} + \hbar\left(k_l^2 - k_n^2\right)/2m^*$. Здесь m^* – эффективная масса электрона. Закон сохранения квазиимпульса выражается уравнением $k_l = q + k_n$. Пренебрегая зависимостью матричного элемента $e_{ln}^{SO}(q)$ от импульса электрона k_n, интегрирование в уравнении (19) можно выполнить точно аналитически. Тем не менее, получить закон дисперсии магнона в предположении, что в обоих состояниях n и l электроны являются зонными квазичастицами, невозможно. Как известно [10], в магнитном упорядочении важную роль играют как локализация электронов, так и их зонные свойства. Этот дуализм требуется и для описания магнонов. В соответствии с моделью Хаббарда, будем считать, что в начальном состоянии $n\uparrow$ электроны находятся на дискретном уровне энергии, а в состоянии $l\downarrow$ – в энергетической зоне. При этом частота перехода равна $\omega_{ln} = \Delta + \hbar q^2/2m^* = \omega(q)$. Здесь Δ – расстояние между уровнем и дном зоны. Для частоты магнона ω_q при этом находим

$$\omega_q = \omega(q)\left\{1 - f(q)\right\}^{1/2}, \qquad f(q) = 2\frac{(\varepsilon(q,0)-1)V_q}{\hbar\omega(q)\varepsilon(q,0)}\sum_{nl}{}^{\prime}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2 n_n(1-n_l). \tag{21}$$

При малых значениях q матричный элемент $e_{nl}^{SO}(q)$ зависит от q по закону $e_{nl}^{SO}(q) \approx q^2$. Следовательно, при $f(q) = f(0)$ закон дисперсии магнона является квадратичным, причем $\omega_q \cong \omega(q)$ с высокой точностью, так как $f(0) << 1$. Если глубина залегания уровня энергии $\mathrm{n}\uparrow$ мала ($\Delta_{\mathrm{ln}} \to 0$), магноны являются акустическими. Квадратичный закон дисперсии магнона в гейзенберговском ферромагнетике аналогичен закону дисперсии зонного электрона [1,2]. Полученные нами результаты показывают, что эта аналогия не случайна. Более того, исследование дисперсии магнона определяет фактически закон дисперсии электронов в зоне $l\downarrow$. Небольшое отличие частоты магнона ω_q от величины $\omega(q)$, согласно формуле (20), обусловлено малостью спин-орбитального взаимодействия. Однако этим отличием нельзя пренебрегать при определении намагниченности, поскольку намагниченность существенно зависит от разности $\omega(q) - \omega_q$. Без учета уширения уровней энергии (экспериментальное значение времени жизни магнона [2] порядка микросекунды) для мнимой части функции Грина в области низких частот находим

$$\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\} = \frac{\pi}{2}\frac{(\varepsilon(q,0)-1)}{\varepsilon(q,0)}\frac{\omega^2(q)-\omega_q^2}{\omega_q}\left(\delta(\omega-\omega_q)-\delta(\omega+\omega_q)\right). \tag{22}$$

Уравнение (21) позволяет выполнить интегрирование по ω в формуле (14) и получить для температурной поправки намагниченности насыщения следующий результат:

$$\Delta M(T) = \frac{\mu_B}{V}\sum_q V_q \frac{(\varepsilon(q,0)-1)}{\varepsilon(q,0)}\frac{\left(\omega^2(q)-\omega_q^2\right)}{\hbar\omega_q}\sum\nolimits_{nl}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2 n_n(1-n_l)\left(\frac{n(\omega_q)}{(\omega_q-\omega_{\mathrm{ln}})^2}+\frac{n(\omega_q)+1}{(\omega_q+\omega_{\mathrm{ln}})^2}\right). \tag{23}$$

Легко видеть, что процессами с излучением магнонов можно пренебречь. Основной вклад в $\Delta M(T)$ вносят процессы поглощения магнонов. Множитель $(\omega_q - \omega_{\mathrm{ln}})^{-2}$ в резонансных условиях $\omega_{\mathrm{ln}} = \omega(q)$ усиливает процессы неупругого рассеяния электронов с переворотом спина при поглощении магнонов в силу малости функции $f(q)$ (20). Закон $T^{3/2}$ Блоха в форме, совпадающей с результатом теории магнонов в модели Гейзенберга [1,2], следует из уравнения (23), так как в силу соотношения (21) множитель при $n(\omega_q)$ оказывается равным $2\mu_B/V$. В результате для температурной поправки к намагничесннности насыщения находим

$$\Delta M(T) = 2\mu_B \sum_q n(\omega_q)/V. \tag{24}$$

Согласно полученным результатам (21-24), малость спин-орбитального взаимодействия в резонансных условиях не проявляется. Таким образом, можно заключить, что модель Гейзенберга отражает резонансный характер спин-орбитального взаимодействия в явлениях магнетизма.

Аналогично вычисляем магнонный вклад в электронную внутреннюю энергию ферромагнетика $\mathrm{U_e} = \sum_{\mathrm{l}} \varepsilon_{\mathrm{l}} < \mathrm{a_l^+ a_l} >$. Используя формулу (12), находим, в соответствии с моделью Гейзенберга [1,2],

$$\Delta U(T) = \sum_q V_q \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi\hbar} n(\omega)\,\mathrm{Im}\{\Pi(q,\omega)\}\sum_{nl}\left|e_{nl}^{SO}(q)\right|^2 \frac{n_n(1-n_l)}{(\omega-\omega_{\mathrm{ln}})^2}(\varepsilon_l-\varepsilon_n) = \sum_q \hbar\omega(q) n(\omega_q). \tag{25}$$

Развитое нами приближение позволяет рассчитать магнитные свойства твердого тела с помощью регулярной процедуры без использования модельных подгоночных параметров.

Литература:

1. KITTEL, C. *Quantum Theory of Solids*. Wiley. 1987.
2. NOLTING, W., RAMAKANTH, A. *Quantum Theory of Magnetism.* Springer, 2009.
3. ДАВЫДОВ, А. *Квантовая механика.* М.: Наука, 1973.
4. GARDINER, C., ZOLLER, P. *Quantum Noise a handbook of methods.* Springer N.Y., 2000. P.458.
5. MEYSTRE, P. *Atom Optics.* Springer N.Y., 2001. P.311.

6. КЛЮКАНОВ, А., КОЧЕМАСОВ, А., НИКА, Д. Приближение решеточных сумм в динамике кристаллов. In: *Studia Universitatis. Seria "Ştiinţe Exacte şi Economice"*, 2014, nr.2(72).
7. NIKA, D., BALANDIN, A. Two-dimensional phonon transport in graphene. In: *J. Phys.: Cond. Matter.*, 2012, vol.24, p.233203.
8. BALANDIN, A., NIKA, D. *Phononics in low-dimensional materials.* Materials Today. 2012, vol.15, p.266-275.
9. KLYUKANOV, A. *Multiquantum kinetic equation*. Solid State comm., 2009. V.149, p.476-480.
10. HUBBARD, J. Proc.Roy.Soc. A276, 238 (1963), A277, 237 (1964), A281, 401 (1964).

Примечание: *Авторы выражают благодарность за частичную финансовую поддержку исследования в рамках институционального проекта Республики Молдова 15.817.02.29F.*

Prezentat la 21.09.2016