# Физика

УДК 537.611.2

## Учёт поверхностной энергии в спиновом Гамильтониане Гейзенберга

**Х. К. Фадель[*], А. К. Нухов[†], Г. М. Мусаев[†], К. К. Казбеков[†]**

[*] *Кафедра физики*
*Педагогический факультет, университет Басра*
*г. Басра, Ирак*

[†] *Физический факультет*
*Дагестанский государственный университет*
*г. Махачкала, р. Дагестан, Россия, 367025*

Используя квантово-механический гамильтониан Боголюбова для локализованных электронных возбуждений кристаллической системы, нами получен гамильтониан спиновых возбуждений модели Гейзенберга с учётом поверхностной энергии. Данный гамильтониан получен в нулевом приближении по спин-спиновому взаимодействию для ферромагнитного кристалла при условии жесткого закрепления ионов в узлах решётки. Также приведены соответствующие выражения для случая смещения ионов в узлах кристаллической решётки.

**Ключевые слова:** модель Гейзенберга, спектр ферромагнетика, поверхностные эффекты, спиновые возбуждения.

При изучении магнитных свойств наноструктур, сверхрешеток и интерфейсов привлекает внимание учет поверхностной энергии. В работе [1] рассмотрено влияние поверхностной энергии в классической теории спиновых на примере ферромагнитного кристалла и показано, что учет локальной геометрии поверхности приводит к затуханию спиновых волн. В работах [2–5] рассмотрены вопросы, связанные с наличием свободной поверхности и её влиянием на различные свойства модели Изинга и Гейзенберга. При теоретическом исследовании модели Гейзенберга возникают значительные математические трудности, и авторы используют феноменологический подход или численные методы.

Рассмотрим вывод микроскопического гамильтониана Гейзенберга с учетом поверхностной энергии для кристалла, в узлах $f$ и $f'$ которого находятся с незамкнутым и локальным слоем электронные оболочки с $z$ электронами в каждом.

Спиновый Гамильтониан такой системы $\hat{H}$ может быть записан в виде [6, 7]:

$$\hat{H} = \sum_{\begin{pmatrix} f,\lambda, \\ \sigma \\ f',\lambda' \end{pmatrix}} L\left(f,\lambda,f',\lambda'\right)\hat{a}^{+}_{f\lambda\sigma}\hat{a}_{f'\lambda'\sigma} + \\ + \frac{1}{2}\sum_{\begin{pmatrix} f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2; \\ \sigma_1,\sigma_2, \\ f'_1,\lambda'_1;f'_2,\lambda'_2 \end{pmatrix}} F\left(f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2;f'_1,\lambda'_1;f'_2,\lambda'_2\right)\hat{a}^{+}_{f_1\lambda_1\sigma_1}\hat{a}^{+}_{f_2\lambda_2\sigma_2}\hat{a}_{f'_2\lambda'_2\sigma'_2}\hat{a}_{f'_1\lambda'_1\sigma'_1}, \quad (1)$$

где $\lambda$, $\lambda'$ — орбитальные состояния электронов, $\sigma$ — спиновое квантовое число $\sigma = 1/2$.

Если пренебречь переходами между различными орбитальными состояниями электронов и образованием полярных связей, то условие гомеополярности:

$$\sum_{\sigma}\hat{a}^{+}_{f\lambda\sigma}\hat{a}_{f\lambda\sigma}, \quad \lambda = \lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_z, \quad (2)$$

Статья поступила в редакцию 23 марта 2013 г.

дает [6]:

$$\hat{H} = \varepsilon_0 - \frac{1}{2} \sum_{f_1, \lambda_1 \neq f_2, \lambda_2} A(f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2) \hat{a}^{+}_{f_1 \lambda_1 \sigma_1} \hat{a}_{f_1 \lambda_1 \sigma_2} \hat{a}^{+}_{f_2 \lambda_2 \sigma_2} \hat{a}_{f_2 \lambda_2 \sigma_1}, \tag{3}$$

где

$$\varepsilon_0 = \sum_{f, \lambda, f', \lambda', \sigma} L(f, \lambda; f', \lambda') \hat{a}^{+}_{f \lambda \sigma} \hat{a}_{f' \lambda' \sigma}$$

— энергия основного состояния кристалла, где не учитывается спин-спиновое взаимодействие,

$$A(f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2) = L(f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2; f_2, \lambda_2; f_1, \lambda_1)$$

— обменный интеграл между состояниями $f_1, \lambda_1$ и $f_2, \lambda_2$. Дополнительный оператор энергии $\hat{H}_S$ вводится при учете поверхностного влияния кристалла

$$\hat{H} = \hat{H}_V + \hat{H}_S. \tag{4}$$

По аналогии с известной формулой напишем для $\hat{H}_S$ следующее:

$$\hat{H}_S = \varepsilon_{0S} - \frac{1}{2} \sum_{\varphi_1 l_1 \neq \varphi_2 l_2}{}' A(\varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2) \hat{b}^{+}_{\varphi_1 l_1 \sigma_1} \hat{b}_{\varphi_1 l_1 \sigma_2} \hat{b}^{+}_{\varphi_2 l_2 \sigma_2} \hat{b}_{\varphi_2 l_2 \sigma_1}. \tag{5}$$

Гамильтониан (5) учитывает основное состояние и взаимодействия только поверхностных ферромагнонов ($S$-магнонов, $SS$-взаимодействие). Но кроме этого, имеется $SV$-взаимодействие (взаимодействие поверхностного с объемным магноном), тогда:

$$\hat{H} = \hat{H}_V + \hat{H}_S + \hat{H}_{SV} + \hat{H}_{VS} + \tilde{H}, \tag{6}$$

где $\hat{H}_{SV}$ и $\hat{H}_{VS}$ — операторы $SV$- и $VS$-взаимодействия, которые могут быть записаны в виде:

$$\hat{H}^2_{VS} = \\ = \frac{1}{2} \sum_{\begin{pmatrix} f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2; \\ \sigma_1, \sigma_2, \\ \varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2 \end{pmatrix}} F_{VS} \left(f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2; \varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2\right) \hat{a}^{+}_{f_1 \lambda_1 \sigma_1} \hat{a}^{+}_{f_2 \lambda_2 \sigma_2} \hat{b}_{\varphi_2, l_2 \sigma_2} \hat{b}_{\varphi_1, l_1 \sigma_1}, \tag{7a}$$

$$\hat{H}^2_{SV} = \\ = \frac{1}{2} \sum_{\begin{pmatrix} \varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2 \\ \sigma_1, \sigma_2, \\ f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2; \end{pmatrix}} F_{SV} \left(\varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2; f_1, \lambda_1; f_2, \lambda_2\right) \hat{b}^{+}_{\varphi_1 l_1 \sigma_1} \hat{b}^{+}_{\varphi_2 l_2 \sigma_2} \hat{a}_{f_2 \lambda_2 \sigma_2} \hat{a}_{f_1 \lambda_1 \sigma_1}, \tag{7b}$$

$$\hat{H}^1_{VS} = \frac{1}{2} \sum_{\begin{pmatrix} f, \lambda; \\ \sigma \\ \varphi, l \end{pmatrix}} L_{VS} \left(f, \lambda; \varphi, l\right) \hat{a}^{+}_{f \lambda \sigma} \hat{b}_{\varphi l \sigma}, \tag{8a}$$

$$\hat{H}^2_{SV} = \frac{1}{2} \sum_{\begin{pmatrix} \varphi, l; \\ \sigma \\ f, \lambda \end{pmatrix}} L_{SV} \left(\varphi, l; f, \lambda\right) \hat{b}^{+}_{\varphi l \sigma} \hat{a}_{f \lambda \sigma}, \tag{8b}$$

$$\hat{H}_{VS} = \hat{H}^1_{VS} + \hat{H}^2_{VS}; \qquad \hat{H}_{SV} = \hat{H}^1_{SV} + \hat{H}^2_{SV}, \tag{9}$$

где $(f,\lambda)$ — избранное обозначение для $V$, $(\varphi,l)$ — избранное обозначение для $S$, $F_{VS}$ и $F_{SV}$ — обменные интегралы между объемными магнонами, описываемыми состояниями $(f_1,\lambda_1,f_2,\lambda_2)$ и поверхностными магнонами, описываемыми состояниями $(\varphi_1,l_1,\varphi_2,l_2)$.

Условие поверхностной гомеополярности:

$$\sum_\sigma \hat{b}^+_{\varphi l\sigma}\hat{b}_{\varphi l\sigma} = 1, \quad l = l_1, l_2, \ldots, l_z. \tag{10}$$

Надо учесть, что здесь $f_1, f_2 \neq \varphi_1, \varphi_2$. Вообще говоря (7a,b) необходимо дополнить интерференционными членами: $(\hat{H}_2 = \hat{H}^+_1)$ $\hat{\hat{H}} = \hat{\hat{H}}_1 + \hat{\hat{H}}_2$

$$\hat{\hat{H}}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\begin{pmatrix} f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2 \\ \sigma_1,\sigma_2, \\ \varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2; \end{pmatrix}} \tilde{F}_1\left(f_1,\lambda_1;\varphi_2,l_2;f_2,\lambda_2;\varphi_1,l_1\right)\hat{a}^+_{f_1\lambda_1\sigma_1}\hat{b}^+_{\varphi_2 l_2\sigma_2}\hat{a}_{f_2\lambda_2\sigma_2}\hat{b}_{\varphi_1 l_1\sigma_1}. \tag{11}$$

Здесь предполагается, что $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ и $\hat{b}^+$, $\hat{b}$ — обычные полевые бозе-операторы, коммутирующие между собой, так как поверхностные и объемные состояния (волновые функции) различаются, и соответствующие операторы, действующие на эти состояния, должны коммутировать.

Поскольку орбитальные переходы считаются запрещенными, то единственными динамическими переменными системы являются спиновые переменные. Используя известные соотношения Боголюбова [6], связывающие операторы спинов с операторами вторичного квантования рождения и уничтожения, которые для объемных узлов имеют вид:

$$\begin{cases} {}^V\hat{S}^x_{f\lambda} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f\lambda,-\frac12}\hat{a}_{f\lambda,\frac12} + \hat{a}^+_{f\lambda,\frac12}\hat{a}_{f\lambda,-\frac12}\right), \\ {}^V\hat{S}^y_{f\lambda} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f\lambda,\frac12}\hat{a}_{f\lambda,-\frac12} - \hat{a}^+_{f\lambda,-\frac12}\hat{a}_{f\lambda,\frac12}\right), \\ {}^V\hat{S}^z_{f\lambda} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f\lambda,-\frac12}\hat{a}_{f\lambda,-\frac12} - \hat{a}^+_{f\lambda,\frac12}\hat{a}_{f\lambda,\frac12}\right) \end{cases}$$

и которые для поверхностных узлов аналогично будут иметь вид:

$$\begin{cases} {}^V\hat{S}^x_{\varphi,l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{\varphi,l,-\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,\frac12} + \hat{a}^+_{\varphi,l,\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,-\frac12}\right), \\ {}^V\hat{S}^y_{\varphi,l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{\varphi,l,\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,-\frac12} - \hat{a}^+_{\varphi,l,-\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,\frac12}\right), \\ {}^V\hat{S}^z_{\varphi,l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{\varphi,l,-\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,-\frac12} - \hat{a}^+_{\varphi,l,\frac12}\hat{a}_{\varphi,l,\frac12}\right). \end{cases}$$

Для $H_V$ и $H_S$ получаем следующие выражения:

$$\hat{H}_V = U_{0V} - \sum_{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2} A_V\left(f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2\right){}^V\hat{\vec{S}}_{f_1\lambda_1}{}^V\hat{\vec{S}}_{f_2\lambda_2}, \tag{12}$$

$$\hat{H}_S = U_{0S} - \sum_{\varphi_1,l_1\neq\varphi_2,l_2} A_S\left(\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2\right){}^S\hat{\vec{S}}_{\varphi_1 l_1}{}^S\hat{\vec{S}}_{\varphi_2\lambda_2}. \tag{13}$$

Дальнейшие вычисления связаны с нахождением аналогичных выражений для членов перекрестного $SV$ взаимодействия. Члены $\hat{H}^1_{VS}$ и $\hat{H}^1_{SV}$ образуют в $SV$

взаимодействии своеобразную «основную» энергию и связаны с существованием двухчастичного спинового взаимодействия, когда взаимопревращения идут между поверхностью и объемом. Однако такие члены, даже если они и не равны нулю, приводят лишь к некоторому смещению постоянной $U_0$ и не существенны. Для остальных четырех членов взаимодействия необходимо провести дополнительные преобразования, вводя смешанные операторы:

$$\begin{cases} {}^i_1\hat{S}^x_{f\varphi\lambda l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f,\lambda,-\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,\frac{1}{2}} + \hat{a}^+_{f,\lambda,,\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,-\frac{1}{2}}\right), \\ {}^i_1\hat{S}^x_{f\varphi\lambda l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f,\lambda,,\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,-\frac{1}{2}} - \hat{a}^+_{f,\lambda,,-\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,\frac{1}{2}}\right), \\ {}^i_1\hat{S}^z_{f\varphi\lambda l} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{a}^+_{f,\lambda,,-\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,-\frac{1}{2}} - \hat{a}^+_{f,\lambda,,\frac{1}{2}}\hat{b}_{\varphi,l,\frac{1}{2}}\right). \end{cases} \tag{14}$$

Аналогичные выражения могут быть написаны и для ${}^i_2\hat{S}^x_{f\varphi\lambda l}$, ${}^i_2\hat{S}^y_{f\varphi\lambda l}$, ${}^i_2\hat{S}^z_{f\varphi\lambda l}$. В этих терминах смешанных операторов, получаем:

$$\hat{\tilde{H}}^2_{VS} = \sum_{\substack{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2\\ \varphi,l_1\neq\varphi_2,l_2;}} F_{VS}\left(f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2;\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2\right)({}^i_1\hat{S}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1{}^z})({}_{1^i}\hat{S}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2{}^z}), \tag{15}$$

$$\hat{\tilde{H}}^2_{SV} = \sum_{\substack{\varphi,l_1\neq\varphi_2,l_2;\\ f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2}} F_{SV}\left(\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2;f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2\right)({}^i_2\hat{S}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1{}^z})({}^i_2\hat{S}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2{}^z}). \tag{16}$$

Легко заметить, что:

$$({}^i_0\hat{S}_{f\varphi\lambda l})^* = ({}^i_0\hat{\tilde{S}}_{f\varphi\lambda l}) \text{ и значит } ({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda l})^+ = ({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda l}), \tag{17}$$

$$\hat{\tilde{H}}_1 = \sum_{\substack{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2\\ \varphi,l_1\neq\varphi_2,l_2;}} \tilde{F}_1\left(f_1,\lambda_1;\varphi_2,l_2;f_2,\lambda_2;\varphi_1,l_1\right)({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}), \tag{18}$$

$$\hat{\tilde{H}}_2 = -{\sum_{1,2}}' \tilde{F}_1\left(\varphi_1,l_1;f_2,\lambda_2;\varphi_2,l_2;f_1,\lambda_1\right)({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}). \tag{19}$$

Таким образом преобразованный Гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} = U_0 &- {\sum_{1,2}}' A_V\left(f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2\right)^V \hat{\vec{S}}^V_{f_1\lambda_1}\hat{\vec{S}}_{f_2\lambda_2} - \\ &- {\sum_{1,2}}' A_S\left(\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2\right)^S \hat{\vec{S}}_{\varphi_1 l_1}{}^S\hat{\vec{S}}_{\varphi_2 l_2} + \\ &+ {\sum_{1,2}}'' F_{VS}\left(f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2;\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2\right)({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}) + \\ &+ {\sum_{1,2}}'' F_{SV}\left(\varphi_1,l_1;\varphi_2,l_2;f_1,\lambda_1;f_2,\lambda_2\right)({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})^+({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2})^+ + \\ &+ {\sum_{1,2}}'' \tilde{F}_1\left(f_1\lambda_1;\varphi_2 l_2;f_2\lambda_2;\varphi_1 l_1\right)({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}) + \\ &+ {\sum_{1,2}}'' \tilde{F}_2\left(\varphi_1 l_1;f_2\lambda_2;\varphi_2 l_2;f_1\lambda_1\right)({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})^+({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}), \end{aligned} \tag{20}$$

где $A_V$ и $A_S$ — это обменные интегралы взаимодействия, объемных и поверхностных магнонов соответственно. Здесь:

$$\sum_{1,2}{}' \equiv \sum_{\substack{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2\\ \text{или,}\\ \varphi_1,l_1\neq\varphi_2,l_2;}} \qquad \sum_{1,2}{}'' \equiv \sum_{\substack{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2\\ \varphi_1,l_1\neq\varphi_2,l_2}}. \tag{21}$$

Исходя из принципа детального равновесия, разобьем Гамильтониан (20) на две части: первая — между атомами $\substack{f_1,\lambda_1\neq f_2,\lambda_2\\ \varphi_1,l_1\neq\varphi_2,l_2;}$, вторая — внутри атомов $\substack{f_1,\lambda_1= f_2,\lambda_2\\ \varphi_1,l_1= \varphi_2,l_2;}$, тогда Гамильтониан (20) будет имеет вид:

$$\begin{aligned}\hat{H} = U_0 &- \sum_{f_1\neq f_2}{}' A_V(f_1\lambda_1; f_2\lambda_2)\, {}^V\hat{\vec{S}}_{f_1\lambda_1}{}^V\hat{\vec{S}}_{f_2\lambda_2} - \sum_f{}' A_V(f,\lambda_1; f,\lambda_2)^V\,\hat{\vec{S}}_{f\lambda_1}{}^V\hat{\vec{S}}_{f\lambda_2} - \\ &- \sum_{\varphi_1\neq\varphi_2}{}' A_S(\varphi_1 l_1; \varphi_2 l_2)\, {}^S\hat{\vec{S}}_{\varphi_1 l_1}{}^S\hat{\vec{S}}_{\varphi_2 l_2} - \sum_\varphi{}' A_S(\varphi, l_1; f,\lambda_2)^V\,\hat{\vec{S}}_{f\lambda_1}{}^V\hat{\vec{S}}_{f\lambda_2} + \\ &+ \sum_{1,2}{}'' F(f_1\lambda_1; f_2\lambda_2; \varphi_1 l_1; \varphi_2 l_2)\left[({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}) + ({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})^+({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2})^+\right] + \\ &+ \sum_{f,\varphi} F(f,\lambda_1; f,\lambda_2; \varphi_1, l_1; \varphi_2, l_2)\left[({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_1 l_1})({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_2 l_2}) + ({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_1 l_1})^+({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_2 l_2})^+\right] + \\ &+ \sum_{1,2}{}'' \tilde{F}(f_1\lambda_1; \varphi_2 l_2; f_2\lambda_2; \varphi_1 l_1)\left[({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2}) + ({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1\lambda_1 l_1})^+({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2\lambda_2 l_2})^+\right] + \\ &+ \sum_{f,\varphi}{}'' \tilde{F}(f\lambda_1; \varphi l_2; f\lambda_2; \varphi l_1)\,[({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_1 l_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_2 l_2}) + ({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_1 l_1})^+({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f\varphi\lambda_2 l_2})^+].\end{aligned} \tag{22}$$

Введем операторы суммарного спина узлов. Внутриатомное перекрытие электронных оболочек намного больше межатомных электронных перекрытий. Тогда можно написать:

$$^V S_f = \sum_{\lambda=1}^{i} S_{f\lambda} \equiv S_f; \qquad ^S S_\varphi = \sum_{l=1}^{z} S_{\varphi l} \equiv S_\varphi. \tag{23}$$

Тогда (22) перепишется в виде:

$$\begin{aligned}\hat{H} = W_0 - \sum_{1,2}{}' A_V(f_1,f_2)\,\hat{S}_{f_1}\hat{S}_{f_2} - \sum_{1,2}{}' A_S(\varphi_1,\varphi_2)\,\hat{S}_{\varphi_1}\hat{S}_{\varphi_2} \\ + \sum_{1,2}{}'' F(f_1,f_2;\varphi_1,\varphi_2)\,[({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1})({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2}) + ({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1})^+({}^i_1\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2})^+] \\ + \sum_{1,2}{}'' \tilde{F}(f_1,\varphi_2;f_2,\varphi_1)\,[({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1})({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2}) + ({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_1\varphi_1})^+({}^i_0\hat{\vec{S}}_{f_2\varphi_2})^+],\end{aligned} \tag{24}$$

где введены дополнительные «смешанные» суммарные спины:

$$^i_1\hat{S}_{f\varphi} = \sum_{\lambda=1}^{z}\sum_{l=1}^{z} {}^{ii}_{11}S_{f\varphi\lambda l}; \qquad ^i_1\hat{S}_{f\varphi} = \sum_{\lambda=1}^{z}\sum_{l=1}^{z}{}' \, {}^{ii}_{11}S_{f\varphi\lambda l}. \tag{25}$$

Можно сказать, что (25) есть спин псевдоатома, который равен спину $V$-атома плюс спин $S$-атома, объединенные обменным взаимодействием. Отметим, что если такие объединения, т.е. псевдоатомы, достаточно прочны, то представление (24) для них имеет место. В дальнейшем для удобства примем:

$$j = V; \quad \xi_i = f,\varphi; \quad |p = 0,1; \quad F_p = \tilde{F}, F; \quad (\xi_{ik} = \{f_k,\varphi\}); \quad k = 1,2,\ldots.$$

Введем спиновые операторы «гибридного» объединенного взаимодействия ${}^{g}_{p}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$ с коммутационными правилами:

$$\begin{aligned}
\left[{}^{g}_{p}\hat{\vec{S}}^{x}_{f_1\varphi_1}, {}^{g}_{p'}\hat{\vec{S}}^{y}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{j_1j_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_p\hat{\vec{S}}^{z}_{f_1\varphi_1}\right),\\
\left[{}^{g}_{p}\hat{\vec{S}}^{y}_{f_1\varphi_1}, {}^{g}_{p'}\hat{\vec{S}}^{z}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{j_1j_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_p\hat{\vec{S}}^{x}_{f_1\varphi_1}\right),\\
\left[{}^{g}_{p}\hat{\vec{S}}^{z}_{f_1\varphi_1}, {}^{g}_{p'}\hat{\vec{S}}^{x}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{j_1j_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_p\hat{\vec{S}}^{y}_{f_1\varphi_1}\right).
\end{aligned} \tag{26}$$

У гибридного взаимодействия следует различать две поляризации: правую $r$, связанную с характером формирования объемного взаимодействия, и левую — $l \Rightarrow {}^{gr}_{p}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$ и ${}^{gl}_{p}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$.

Следует различать два вида гибридных спиновых операторов: прямой и смешанный. Оба они возникают в результате дополнительного спин-спинового взаимодействия псевдоатомов с собственными атомами и псевдоатомов между собой.

Введем $ipp'$-коммутаторы:

$$\begin{aligned}
\left[{}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{x}_{f_1\varphi_1}, {}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{y}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{f_1f_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_{pp'}\hat{\vec{S}}^{z}_{f_1\varphi_1}\right),\\
\left[{}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{y}_{f_1\varphi_1}, {}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{z}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{f_1f_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_{pp'}\hat{\vec{S}}^{x}_{f_1\varphi_1}\right),\\
\left[{}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{z}_{f_1\varphi_1}, {}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{x}_{f_2\varphi_2}\right] &= i\delta_{f_1f_2}\delta_{\varphi_1\varphi_2}\left(g_{pp'}\hat{\vec{S}}^{y}_{f_1\varphi_1}\right).
\end{aligned} \tag{27}$$

В (27) отсутствие правой (левой) поляризации и случай распада и вырождения в исходное:

$$ {}^{g}_{pp'}\hat{\vec{S}}^{x}_{f\varphi} = {}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}^{x,y,z}_{f\varphi}. \tag{28}$$

Соотношение (28) показывает случай вырождения $gpp$-взаимодействия в $ip$-взаимодействие. В результате $ipf$ и $ifp$ взаимодействий может сниматься вырождение среднего дуплета в спектре значений ${}^{g}_{p}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$, что приводит к гибридному спектру значений. При этом отсутствие симметрии между состояниями ↑↓ и ↓↑ при $ipf$-взаимодействии и $ifp$ приводит к двум возможностям поляризации (r l). Другими словами, нули при $ipf$ и $ifp$ взаимодействиях ↑↓, ↓↑ не совпадают. В случае же $gpp'$ -взаимодействий происходит дополнительное смешение уровней значений спектра ${}^{i}_{p}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$, ${}^{i}_{p'}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$ оператора ${}^{g}_{pp}\hat{\vec{S}}_{f\varphi}$.

Как известно, гамильтониан $H$ в отсутствие поверхности (т.е., при $A_S = F = \tilde{F} = 0$) обладает двумя интегралами движения:

$$ {}^{V}\hat{\vec{S}}^{2} = \Big(\sum_{j} {}^{V}\hat{\vec{S}}_{f}\Big)^{2}, \qquad {}^{V}\hat{\vec{S}}_{z} = \sum_{j} {}^{V}\hat{\vec{S}}_{zf}. \tag{29}$$

Оба интеграла (29) являются скалярами, первый из которых есть квадрат суммарного спина $V$-системы, а второй — его проекция на направление вдоль оси $z$. В нашем случае, когда включены в $\hat{H}$ члены с $A_S, F$ и $\tilde{F}$, число интегралов движения, очевидно, должно возрасти. По аналогии с (29) рассмотрим возможные восемь операторов для квадрата и $z$-проекции каждого из спиновых операторов, входящих в (24). Соответствующие коммутаторы приводят к следующим результатам. Сразу замечаем, что все $z$-проекции исходных спиновых операторов являются интегралами движения. Действительно:

$$\left[\hat{H}, \hat{\vec{S}}_{zf}\right] = \left[\hat{H}, \hat{\vec{S}}_{z\varphi}\right] = \left[\hat{H}, \hat{\vec{S}}_{zf\varphi}\right] = 0, \tag{30}$$

где, например, $\hat{\vec{S}}_{zf}$ — скалярный оператор, равный $\vec{e}\cdot\hat{\vec{S}}^z_f$, $\vec{e}$ — единичный орт в $z$-направлении ($\hat{\vec{S}}^z_f$ — векторная $z$-компонента оператора $\hat{\vec{S}}_f = \hat{\vec{S}}^x_f + \hat{\vec{S}}^y_f + \hat{\vec{S}}^z_f$).

Для того, чтобы квадраты исходных операторов ${}^j\hat{S}^2$, ${}^j_p\hat{S}^2$ $(p = 0, 1)$, $(j = V, S)$ определенных равенствами:

$$ {}^j\hat{\vec{S}}^2 = \Big(\sum_{\xi_j}\hat{\vec{S}}_{\xi_j}\Big)^2, \qquad {}^i_p\hat{\vec{S}}^2 = \Big(\sum_j {}^i_p\hat{\vec{S}}_{f\varphi}\Big)^2 \tag{31} $$

также являлись интегралами движения, во всяком случае, необходимо выполнение следующих условий,

$$ \sum_{i=1}^{3}\left({}^{gl}_{p}\hat{\vec{S}}^{x_i}_{f\varphi} - {}^{gr}_{p}\hat{\vec{S}}^{x_{i+2}}_{f\varphi}\right) = 0, \tag{32} $$

$$ \sum_{i=1}^{3}\left\{\left({}^{g}_{pp'}\hat{\vec{S}}^{x_i}_{f\varphi}\right) - \left({}^{g}_{p'p}\hat{\vec{S}}^{x_{i+2}}_{f\varphi}\right)\right\} = 0, \tag{33} $$

где $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$. И дальше по правилу кольца, например, $x_4 = x, x_5 = y$. Верно и обратное утверждение, что если ${}^j\hat{S}^2$ и ${}^i_{ip}\hat{S}^2$ $(j = v,\ S;\ p = 0, 1)$ являются интегралами движения $\hat{H}$, то выполняются равенства (32), (33). В этом смысле можно сказать, что по сравнению с $\hat{\vec{S}}_{z\xi_j}$ и ${}^i_p\hat{\vec{S}}_{zf\varphi}$, являющимися как бы абсолютными интегралами, они являются условными его интегралами $\hat{H}$, ${}^jS^2$, ${}^j_pS^2$ (т.е. требующими выполнения дополнительных равенств (32), (33)).

Квадраты операторов спинов ${}^j\hat{S}^2$ и ${}^i_{ip}\hat{S}^2$ атомов и псевдоатомов системы, соответственно, имеют только одно собственное значение $S_j(S_{j+1})$ и $S_p(S_{p+1})$ или объединено $S_\chi(S_{\chi+1})$, где $\chi = j, p$, а $S_\chi$ — одно из значений [8, 9]: $1/2, 1, 3/2, \ldots..$ Спиновые операторы действуют в пространстве спиновых функций $|S_\chi, S_\chi\rangle$, где $S_\chi$-принимает $S_\chi + 1$ значений $\pm S_\chi$, $\pm(S_\chi - 1)$. Операторы можно заменить операторами:

$$ \hat{S}^+_\chi, \hat{S}^-_\chi \quad \text{где} \quad \hat{S}^+_\chi = \hat{S}_{\chi_x} + i\hat{S}_{\chi_y}, \quad \hat{S}^-_\chi = \hat{S}_{\chi_y} + i\hat{S}_{\chi_y}, \tag{34} $$

удовлетворяющим перестановочным соотношениям:

$$ \left[\hat{S}^+_\chi, \hat{S}^-_\chi\right] = 2\hat{S}^z_\chi, \quad \left[\hat{S}^z_\chi, \hat{S}^+_\chi\right] = \hat{S}^+_\chi, \quad \left[\hat{S}^z_\chi, \hat{S}^-_\chi\right] = 2\hat{S}^-_\chi. \tag{35} $$

Операторы $\hat{S}^+_\chi$ и $\hat{S}^-_\chi$ имеют следующие отличные от нуля матричные элементы:

$$ \left\langle \hat{S}^+_\chi\hat{S}_{\chi_z} + 1\middle|\hat{S}^+\middle|\hat{S}^+_{\chi'}\hat{S}_{\chi_z}\right\rangle = \left\langle \hat{S}'_{\chi'}\hat{S}_{\chi_z}\middle|\hat{S}^-\middle|\hat{S}'_{\chi'}\hat{S}_{\chi_z} + 1\right\rangle = \sqrt{(S_\chi - S_{\chi_z})(S_\chi + S_{\chi_z} + 1)}. $$

Таким образом, оператор $\hat{S}^+_\chi$ увеличивает, а оператор $\hat{S}^-_\chi$ уменьшает на единицу проекцию спина на ось $z$. Используя тождество

$$ \hat{\vec{S}}_n\hat{\vec{S}}_m = \left(\hat{\vec{S}}^z_n\hat{\vec{S}}^z_m\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{S}}^+_n\hat{\vec{S}}^-_m + \hat{\vec{S}}^-_n\hat{\vec{S}}^+_m\right), \tag{36} $$

для наших операторов $\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_2}} = \left(\hat{\vec{S}}^z_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}^z_{\xi_{j_2}}\right) + \dfrac{1}{2}\left(\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_2}} + \hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_2}}\right)$,

$$ \left({}^i_p\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\left({}^i_p\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right) = \left({}^i_p\hat{\vec{S}}^z_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\left({}^i_p\hat{\vec{S}}^z_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right) + $$

$$+\frac{1}{2}\left\{\left({}_p^i\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\left({}_p^i\hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right)+\left({}_p^i\hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\left({}_p^i\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right)\right\} \quad (37)$$

можно переписать гамильтониан в следующей форме:

$$\hat{H}=W_0-\frac{1}{2}\sum_j\sum_{1,2}{}'(\xi)A_j\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2}\right)\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_2}}+$$
$$+\frac{1}{16}\sum_p\sum_{j,j'}\sum_{1,2}{}''\left(\xi_j,\xi'_j\right)F_p\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2};\xi'_{j_1}-\xi'_{j_2}\right)(1-\delta_{jj'})\times$$
$$\times\left[\left({}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\left({}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right)+\left({}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)^+\left({}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right)^+\right], \quad (38)$$

где

$$\sum_{1,2}{}'(\xi_j)\equiv\sum_{\left(\substack{\xi_{j_1}\xi_{j_2};\\ \xi_{j_1}\neq\xi_{j_2}}\right)};\quad \sum_{1,2}{}''(\xi_j;\xi'_j)\equiv\sum_{\left(\substack{\xi_{j_1}\xi'_{j_1};\xi_{j_2}\xi'_{j_2};\\ \xi_{j_1}\neq\xi_{j_2};\xi'_{j_1}\neq\xi'_{j_2}}\right)}.$$

Причем

$$A_j\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2}\right)=A_j\left(\xi_{j_1}-\xi_{j_2}\right)=\begin{cases}2.A_V\left(f_1,f_2\right), & j=v;\\ 2.A_S\left(\phi_1,\phi_2\right), & j=s.\end{cases} \quad (39)$$

$$F_P\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2};\xi'_{j_1}-\xi'_{j_2}\right)=F_P\left(\xi_{j_1},\xi_{j_2};\xi'_{j_1},\xi'_{j_2}\right)=\begin{cases}16\tilde{F}\left(\xi_{j_1},\xi'_{j_2};\xi_{j_2},\xi'_{j_1}\right) & p=0;\\ 16\tilde{F}\left(\xi_{j_1},\xi_{j_2};\xi'_{j_1},\xi'_{j_2}\right) & p=1.\end{cases}$$

Дополнительно введенные в (38) обозначения удовлетворяют условиям:

$$\xi'_j\equiv\xi_j,\quad F_P\left(\xi_{j_1},\xi_{j_2};\xi'_{j_1},\xi'_{j_2}\right)\equiv F_P\left(\xi'_{j_1},\xi'_{j_2};\xi_{j_1},\xi_{j_2}\right),\quad {}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\equiv{}_p^i\hat{\vec{S}}_{\xi'_{j_1}}.$$

Подставляя тождества (37) в (38), преобразуем оператор (38) к виду:

$$\hat{H}=E_0+\hat{H}_1+\hat{H}_2, \quad (40)$$

$$E_0=-\mu_0B\sum_j S_jN_j-\frac{1}{2}\sum_j\hat{S}_jN_jL_j(0)+\frac{1}{8}\sum_P\sum_{j,j'}\hat{S}_pN_jN_{j'}L^p_{p'}(0),$$

$$\hat{H}_1=\sum_j\left(\mu_0B+L_j(0)\right)\sum_{\xi_j}\left(\hat{S}_j-\hat{S}^z_{\xi_j}\right)-\frac{1}{4}\sum_P\sum_{j,j'}\tilde{L}^p_{jj'}(0)\sum_{\xi_j\neq\xi'_j}\left(\hat{S}_p-{}^i_p\,\hat{S}_{\xi_j\xi'_j}\right)-$$
$$-\frac{1}{2}\sum_j\sum_{1,2}(\xi_j)A_j(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2})\hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_1}}\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_2}}+$$
$$+\frac{1}{8}\sum_P\sum_{j,j'}\sum_{1,2}{}''\left(\xi_j,\xi'_j\right)F_p(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}'_{j_1};\vec{\xi}_j-\vec{\xi}'_{j_2})\times(1-\delta_{jj'}){}^i_p\hat{\vec{S}}^-_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}{}^i_p\hat{\vec{S}}^+_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}},$$

$$\hat{H}_j=-\frac{1}{2}\sum_j\sum_{1,2}{}'(\xi_j)A_j(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2})(\hat{S}_j-\hat{S}^z_{\xi_{j_1}})(\hat{S}_j-\hat{S}^z_{\xi_{j_2}})+$$
$$+\frac{1}{8}\sum_P\sum_{j,j'}\sum_{1,2}{}''\left(\xi_j,\xi'_j\right)F_p\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2};\vec{\xi}'_{j_1}-\vec{\xi}'_{j_2}\right)\times$$
$$\times(1-\delta_{jj'})\left[S_p-\left({}^i_p\hat{S}^z_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}\right)\right]\left[S_p-\left({}^i_p\hat{S}_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}\right)\right], \quad (41)$$

где

$$L(0) = S\sum_{\xi_j} A_j(\vec{\xi}_j); \quad L^p_{jj'}(0) = S_p\sum_{\xi_j\xi'_j} F_p(\vec{\xi}_j,\vec{\xi}'_j); \quad \tilde{L}^p_{jj'}(0) = L^p_{jj'}(0)(1-\delta_{jj'}). \quad (42)$$

Используя преобразования Холстейна–Примакова, осуществим переход от спиновых операторов к операторам рождения и уничтожения спиновых возбуждений [8, 9]:

$$\hat{S}^-_{\xi_j} = \mu^+_{\xi_j}\sqrt{2S_j - \hat{\mu}^+_{\xi_j}\hat{\mu}^-_{\xi_j}}, \quad \hat{S}^+_{\xi_j} = \mu^-_{\xi_j}\sqrt{2S_j - \hat{\mu}^+_{\xi_j}\hat{\mu}^-_{\xi_j}}, \quad S^z_{\xi_j} = \hat{S}_{\xi_j} - \hat{\mu}^+_{\xi_j}\hat{\mu}^-_{\xi_j},$$
$${}^i_p\hat{S}^-_{\xi_j\xi'_j} = \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\sqrt{2S_p - \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p)}, \quad {}^i_p\hat{S}^+_{\xi_j\xi'_j} = \sqrt{2S_p - \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p)},$$
$${}^i_p\hat{S}^+_{\xi_j} = S_p - \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p).$$

Функции $\mu^-_{\xi_j\xi'_j}$, $\mu^+_{\xi_j\xi'_j}$, $\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p)$, $\mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)$ действуют соответственно в пространстве функций $|N_{\xi_j}\rangle$ и $|N_{\xi_j}(p)\rangle$, в которых аргументами повторяются целые числа, ограничивающие значения для $N_{\xi_j}$ и $N_{\xi_j}(p)$, для $N_{\xi_j}$ $2S_j+1(0,1,2,...2S_j)$ и для $N_{\xi_j}(p)$ $N_{\xi_j}$ $2S_p+1(0,1,2,...2S_p)$. Ограничения на «числа заполнения» отличают новые операторы от обычных бозевских операторов, которые действуют в пространстве функций с произвольными числами заполнения:

$$\hat{S}^-_{\xi_j} = \mu^+_{\xi_j}\sqrt{2S_j}, \quad \hat{S}^+_{\xi_j} = \mu^-_{\xi_j}\sqrt{2S_j}, \quad \hat{S}^z_{\xi_j} = S_j - \mu^+_{\xi_j}\mu^-_{\xi_j}$$
$${}^i_p\hat{S}^-_{\xi_j\xi'_j} = \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\sqrt{2S_p}, \quad {}^i_p\hat{S}^z_{\xi_j\xi'_j} = S_p - \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p).$$

Используя эти приближенные выражения, преобразуем оператор (38) к виду:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \quad (43)$$

где $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{int}$ соответственно равны:

$$\hat{H}_0 = E_0 + \sum_j \left(\mu_0 B + L_j(0)\right)\sum_{\xi_j}\mu^+_{\xi_j}\mu^-_{\xi_j} - \frac{1}{4}\sum_p\sum_{j,j'}\tilde{L}^p(0){\sum_{\xi_j\xi'_j}}' \mu^+_{\xi_j\xi'_j}(p)\mu^-_{\xi_j\xi'_j}(p) -$$
$$-\sum_j S_j{\sum_{1,2}}'(\xi_j)A_j(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2})\mu^+_{\xi_{j_1}}\mu^-_{\xi_{j_2}} + \frac{1}{4}\sum_p S_p\sum_{jj'}{\sum_{1,2}}'(\xi_j,\xi'_j)\times$$
$$\times F_p(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2},\vec{\xi}'_{j_1}-\vec{\xi}'_{j_2})(1-\delta_{jj'})\mu^+_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}(p)\mu^-_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}(p), \quad (44)$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2}\sum_j{\sum_{1,2}}'(\xi_j)\,A_j\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}_{j_2}\right)\mu^+_{\xi_{j_1}}\mu^-_{\xi_{j_1}}\mu^+_{\xi_{j_2}}\mu^-_{\xi_{j_2}} +$$
$$+\frac{1}{8}\sum_j\sum_{j,j'}{\sum_{1,2}}''(\xi_j,\xi'_j)F_p\left(\vec{\xi}_{j_1}-\vec{\xi}'_{j_2};\vec{\xi}'_{j_1}-\vec{\xi}'_{j_2}\right)(1-\delta_{jj'})\times$$
$$\times\mu^+_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}(p)\mu^-_{\xi_{j_1}\xi'_{j_1}}(p)\mu^+_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}(p)\mu^-_{\xi_{j_2}\xi'_{j_2}}(p). \quad (45)$$

Рассмотрим случай малых возбуждений и рассмотрим энергетический спектр изотропного ферромагнетика с поверхностью. В этом случае $\hat{H}_{int}$ можно представить как оператор возбуждения. Тогда в нулевом приближении энергетический спектр спиновых возбуждений можно определить диагонализованным оператором:

$$\triangle\hat{H} = \sum_{j}\sum_{k_j}\varepsilon_j(k)\mu_k^{j^+}\mu_k^{j^-} + \sum_{p}\sum_{j,j'}\sum_{k_j}\sum_{k',j}\tilde{\varepsilon}\,{}^{p}_{jj'}(k,k')\mu_{kk'}^{jj'^-}(p)\mu_{kk'}^{jj'^+}(p), \tag{46}$$

где

$$\varepsilon_j(k) = \mu_0 B + L_j(0) - L_j(k), \quad \tilde{\varepsilon}_{jj'}(k,k') = -\frac{1}{4}\left[\tilde{L}^p_{jj'}(0) - \tilde{L}^p_{jj'}(k,k')\right],$$

$$L^j(k) \equiv S_j = \sum_{\xi_j\neq 0} A_j(\vec{\xi_j})\exp(i\vec{k_j}\vec{\xi_j}),$$

$$L^p_j(k,k') \equiv S_p\sum_{\xi_j\neq 0}\sum_{\xi'_j\neq 0} F^p(\vec{\xi},\vec{\xi'})\exp(i\vec{k_j}\vec{\xi_j} + i\vec{k'_j}\vec{\xi'_j}),$$

$$\tilde{L}^p_{jj'}(k,k') \equiv L^p_{jj'}(k,k')(1-\delta_{jj'}), \quad \tilde{L}^p_{jj'}(0) \equiv L^p_{jj'}(00).$$

В области малых значений $k_j\alpha_j \ll 1$, $j = V, S$ закон дисперсии энергии магнонов и псевдомагнонов можно записать в виде:

$$\varepsilon_j(k) = \mu_0 B + \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m^{\cdot}_{1j}}, \quad \tilde{\varepsilon}^p_j(k,k') = \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m^{\cdot j}_{2jj'}(p)} + \frac{\hbar^2 k'^2_{j'}}{2m^{j'\cdot}_{2jj'}(p)} + \frac{\hbar^2(k_j k'_{j'})}{2m^{\cdot}_{3jj'}(p)}, \tag{47}$$

где

$$\begin{aligned} m^{\cdot}_{1j} &= \hbar^2/(v_j s_k\,|A_j|\,\alpha_j^2, \\ m^{\cdot j}_{2jj'}(p) &= -4\hbar^2/(s_p.F^p_{jj'}.v_j.v_{j'}.(1-\delta_{jj'}.)\alpha_j^2, \\ m^{j'\cdot}_{2jj'}(p) &= -4\hbar^2/(s_p.F^p_{jj'}.v_j.v_{j'}.(1-\delta_{jj'}.)\alpha_{j'}^2, \\ m^{\cdot}_{3jj'}(p) &= -4\hbar^2/(s_p.F^p_{jj'}.v_j.v_{j'}.(1-\delta_{jj'}.)\alpha_j\alpha_{j'}. \end{aligned} \tag{48}$$

Эти спектры описывают акустические ветви магнонов и псевдомагнонов, соответственно.

Отметим, что в нулевом приближении энергетический спектр спиновых возбуждений здесь определен при условии жесткого закрепления ионов ферромагнетика в узлах решетки. Если учесть возможность их смещения из равновесных положений, надо рассмотреть зависимость обменных интегралов от этих смещений. При малых смещениях атомов обменные интегралы заменяются рядами и произведя элементарные преобразования, можно получить следующие выражения для операторов спин (псевдоспин)-решеточного взаимодействия:

$$\hat{H}_{s.vib} = -\sum_{j}{}'\sum_{k,q,g}{}'(j)\left[D_j(\vec{k}-\vec{q}) - D_j(k)\right]\left(b^j_q + b^{j+}_{-q}\right)\mu_k^{j+}\mu^{j'-}_{k-q+g}, \tag{49}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{ps.vib} = &-\sum_{p}\sum_{jj'}\sum_{k,q,g}{}'(j)\sum_{k',q',g'}{}'(j)(1-\delta_{jj'})\left[\tilde{D}^p_j(\vec{k}-\vec{q}) - \tilde{D}^p_j(\vec{k})\right]\times \\ &\times\left[\tilde{D}^p_{j'}(\vec{k'}-\vec{q'}) - \tilde{D}^p_j(\vec{k'})\right]\left(b^j_q + b^{j+}_{-q}\right)\left(b^{j'}_{q'} + b^{j'+}_{-q'}\right)\mu^{jj'+}_{kk'}(p)\mu^{jj'-}_{k-q+g,k'-q'+g'}.\end{aligned}$$

Оператор $\hat{H}_{s.vib}$ в (49) — оператор $\hat{H}_{ps.vib}$ магнон-фононного взаимодействия, а оператор — оператор псевдоспин-фононного взаимодействия с участием двух псевдомагнонов и двух фононов.

## Литература


1. *Нухов А. К., Мусаев Г. М., Казбеков К. К.* Учёт локальной геометрии поверхности в классической теории спиновых волн // Вестник Московского университета. Серия 3 «Физика. Астрономия». — 2011. — Т. 5. — С. 8–12. [Nukhov A.K., Musaev G.M., Kazbekov K.K. Accounting for the Local Surface Geometry in the Classical Theory of Spin Waves // Moscow University Physics Bulletin. — 2011. — T. 66, № 5. — P. 416–421. ]
2. *Казанов М. И., Чубуков А. В.* Теория переориентационных фазовых переходов в пластинках // ЖЭТФ. — 1982. — Т. 55. — С. 1617–1627. [Kazanov M. I., Chubakov A. V. Theory Reorientation Phase Transitions in Plates // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1982. — Vol. 55. — P. 1617–1627. ]
3. *Bindes K., Hohenberg P. C.* Phase Transition and Static Spin Correlation in Ising Model with Free Surface // Phys. Rev. — 1972. — Vol. 9. — Pp. 3461–3487.
4. *Bindes K., Hohenberg P. C.* Phase Effects on Magnetic Phase Transition // Phys. Rev. — 2006. — Vol. 9. — Pp. 2194–2214.
5. *Пейсахович Н. Т., Тейлер В. А., Маргулие В. А.* Полное отражение ультразвука от ферромагнитной пластины при захреплении спинов на поверхности // ЖЭТФ. — 2000. — Т. 118. — С. 213–221. [Peisakhovich Yu.G. Tayler V.A., Margulie V.A. Total reflection of ultrasound from a ferromagnetic plate when fixing the spins at the surface // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2000. — Vol. 118. — P. 213–221. ]
6. *Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В.* Приближённый метод нахождения низших энергетических уровней электронов в металле // ЖЭТФ. — 1949. — Т. 19, вып. 3. — С. 256–268. [Bogolyubov N.N., Tyablikov S.V. An Approximate Method for Finding the Lowest Energy Levels of the Electrons in the Metal // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1949. — Vol. 16 (3). — P. 256–268. ]
7. *Kaneyoshi T.* Role of Applied Transverse Field in a Ferrimagnetic Bilayer System with Disordered Interfaces // Phys. Rev. — 1996. — Vol. 52. — Pp. 7304–7310.
8. *Holstein T., Primakoff H.* Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferrimagnet // Phys. Rev. — 1940. — Vol. 58. — Pp. 1098–1113.
9. *Киттель Ч.* Введение в физику твёрдого тела. — М.: Мир, 1978. — 792 с. [Kittel Ch. Introduction to Solid State Physics. — Moscow: Mir, 1978. ]


UDC 537.611.2

## Accounting for the Surface Energy in Spin Heisenberg's Hamiltonians

**H. Q. Fadel***, **A. K. Nukhov**†, **G. M. Musaev**†, **K. K. Kazbekov**†

* *Physics department*
*College of education, University of Basra*
*Basra, Iraq*

† *Department of Physics*
*Dagestan State University*
*Makhachkala, Russia, 367025*

Using the quantum mechanical Bogolubov's Hamiltonian hierarchy for localized electronic excitations of the crystal system, we have obtained the Hamiltonian of the spin excitations of the Heisenberg model, taking into account the surface energy. This Hamiltonian is obtained in the zero approximation in the spin-spin interaction for a ferromagnetic crystal, in case of rigid fixing of ions in the lattice sites. The corresponding expressions for the displacement of ions in the crystal lattice are also shown.

**Key words and phrases:** Heisenberg model, spectrum of a ferromagnet, surface effects, spins excitations.