

中
80-02

中国物理学会 1963年年会論文摘要

(内部資料・注意保存)

一九六三年八月

北 京

類 別

A. 固体 (固体理論、金屬物理和磁学)	(1)
B. 半导体	(61)
C. 光学及波譜学	(84)
D. 电学和声学	(115)
E. 原子、电子和分子	(128)
F. 原子核物理	(133)
G. 基本粒子和場論	(165)
H. 其他	(182)

A. 00013

A. 固体 (固体理论、金属物理和磁学)

A1. 量子统计中的线性输运系数理论

陈式刚 (科学院物理所)

在本文中, 我們利用 Kubo⁽¹⁾ 的输运系数公式及 Van Hove⁽²⁾ 的趋向平衡理论, 普遍地讨论了输运系数中的弛豫过程。在整个讨论过程中没有利用无规相位假设, 而粗粒密度假设是自动地包含在被微扰的平衡态密度矩阵中的。

在频率为 ω 的外场中, 得到输运系数的一般表示式为:

$$L_{BA}(\omega) = f_{BA}(\omega) + \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P}{\omega' - \omega} f_{BA}(\omega') d\omega'$$

$$f_{BA}(\omega) = \frac{4\pi}{\omega} \sin h \frac{1}{Z} \beta \omega \operatorname{Re} \int_C dE B \left[\omega - i \left(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \widetilde{\omega}_{-+}(E, \omega) \right) \right]^{-1} A \left(D_{-}(E, \omega) - D_{+}(E, \omega) \right) e^{-\beta E}$$

(符号参见[1], [2])。当 $\omega = 0$ 时得到的结果在定性上与波尔兹曼方程一致, 与是否作无规相位假设无关。在 $\omega \neq 0$ 时得到的结果与波尔兹曼方程有定性上的差别, 这称为非马尔科夫效应或记忆效应。它在时间行为上表现为: 多个弛豫时间行为的叠加, 振荡现象, 在输运过程中出现单个态的弛豫时间。它在频率行为上有相应的表现。

这种相位关联效应不会被测量仪器破坏, 是可以测量的。最直接的是测量它的频率行为。不过这种效应只有在强作用系统中才有明显表现, 对这种系统的理论分析会遇到相当大的困难。

进一步我们将上述结果推广到电流算符为非对角的输运过程中去, 作为一个具体例子讨论了强磁场下横向输运过程。在讨论中指出为什么在这情况下不需要解波尔兹曼型的方程, 只要用微扰法就能给出正确的结果。此外讨论了其他较具体的问题, 指出一种正确的消除态密度发散方法会使纵磁阻与横磁阻之比得到与实验一致的结果。

参 考 文 献

[1] R. Kubo J. Phys. Soc. Japan 12 570 (1957)

[2] L. Van Hove Physica 21 517 (1955), 23 441 (1957)

A2. 量子統計格林函数的微扰結構

陈春先 黃綺* (科学院物理所)

量子時間格林函数应用(包括推迟、超前和因果函数。)在量子体系非平衡过程的一般理論中占重要地位。時間格林函数沒有成熟和方便的微扰理論是这方面前进的障碍。目前已有的一些微扰論分析不但形式十分复杂,而且由于在数学結構上彼此沒有联系很难从统一的观点加以理解。

本文建立在“复時間”变量平面上的形式微扰論,討論了回路变形和解析延拓的关系。同时广泛的应用了四維图与三維图解法的联系,建立了一种時間格林函数的微扰論規則,并使最近关于時間格林函数微扰論工作納入統一的数学結構。討論了直接作譜函数微扰展开的可能性。对于不含內部自能部分的图,証明了可以把迴路变形到无穷,从而給具体計算提供了相当的便利。此外,文中还討論了所发展的理論对輸运过程理論的意义。

A3. 关于双时格林函数的切断近似

陶瑞宝 (复旦大学)

文章討論了几个主要双时格林函数的正常切断近似,并和寻常費曼图形的比較。对单粒子格林函数:

$$\langle\langle a_k(t)/a_k^+(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \left\{ \langle a_k(t)a_k^+(t') \rangle + \langle a_k^+(t')a_k(t) \rangle \right\},$$

作一級及二級切断近似,在一級情况下是哈特里-福克近似,在二級情况下,对正常的微扰判系(非长程和奇性的相互作用),得到的自能部份就是寻常Dyson方程中正确到二級修正的固有自能部份。

对密度涨落格林函数:

$$\langle\langle \rho_k(t)/\rho_k^+(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \left\{ \langle \rho_k(t)\rho_k^+(t') \rangle - \langle \rho_k^+(t')\rho_k(t) \rangle \right\}.$$

$$\rho_k(t) = \sum_{p\sigma} a_{k+p,\sigma}^+ (t) a_{p\sigma}(t).$$

在一級切断近似下,就得到象电子气体中准确到泡沫近似,并且还包含了所有交換的修正,而且每一条內綫用哈特里-福克近似代替。

对粒子对格林函数:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{k-m\downarrow}(t)a_{k+m\uparrow}(t)/a_{k+n\uparrow}^+(t')a_{k-n\downarrow}^+(t') \rangle\rangle = \\ = -i\theta(t-t') \left\{ \langle a_{k-m\downarrow}(t)a_{k+m\uparrow}(t)a_{k+n\uparrow}^+(t')a_{k-n\downarrow}^+(t') \rangle - \right. \\ \left. - \langle a_{k+n\uparrow}^+(t')a_{k-n\downarrow}^+(t')a_{k-m\downarrow}(t)a_{k+m\uparrow}(t) \rangle \right\} \end{aligned}$$

所作的一级切断近似,得到的解就是寻常费曼图形中的梯形近似。

文章指出,双时格林函数即使遵循同一种切断近似的规则,对于不同的格林函数,近似的好坏十分不同。粒子对格林函数的切断近似,对短程低密度体系较好;而密度涨落格林函数的切断近似,却对长程高密度体系(象高密度电子气体)较好。

A4. 关于非理想多费米子体系的微扰理论(I)

——应用于各向同性相互作用的情况——

陶瑞宝(复旦大学)

从定态薛定谔方程的微扰论出发,直接求出正确到所有级的基态能量的连接图形展式和相应的基态波函数,还求得了弱激发态的能量和波函数,结果与Hugenholtz的一致。

A5. 关于非理想多费米子体系的微扰理论(II)

——应用于各向异性相互作用的情况——

陶瑞宝;陈开泰;汤祥辉(复旦大学)

文章发展了处理各向异性相互作用多费米子体系的微扰理论。指出,在零温下关于基态能量的Goldstone微扰展式的不正确是由于他们用球对称的费米真空态作为出发态来求微扰波函数;而由它出发求得的状态,当相互作用是各向异性的时候,并不代表最低的能量状态。用我们的方法,原则上可以严格地找到各向异性相互作用体系的基态。在二级情况下,我们找到的最低能量状态正好和Kohn-Luttinger从温度微扰论的零温极限求得的状态完全一致。我们还论证了;在一般情况下(正确到相互作用的所有级),只要相互作用是各向同性时,对正常的多费米子体系,Goldstone展式的确对应真正的基态。

A6. 关于玻色系的激发能谱及其寿命

龔昌德 邵惠民(南京大学)

1. 形式为

$$H = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} A_{\alpha\beta}^{*} b_{\alpha} b_{\beta} + \sum_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta} \quad (1)$$

$$A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha}, B_{\alpha\beta} = B_{\beta\alpha}^{*} \quad (2)$$

的哈密顿(其中 $b_{\alpha}, b_{\alpha}^{\dagger}$ 为玻色子算符)可以用来处理弱激发的互作用玻色系及金属的极性模型理论。波戈留博夫与加布利可夫已建立了对角化这一哈密顿的方法。这一方法首先引入一正则变换将算符($b_{\alpha}, b_{\alpha}^{\dagger}$)变为($\xi_{\alpha}, \xi_{\alpha}^{\dagger}$),再对变换系数(u, v)建立方程并附加以一定条件,最后由(u, v)方程的系数行列式解得(1)的能谱。

本文利用格林函数方法,直接从如下因果格林函数

$$G_{\alpha\beta}(t-t') = \langle b_{\alpha}(t), b_{\beta}^{\dagger}(t') \rangle \quad (3)$$

出发,利用(1)式可得(2)的解

$$G = -\frac{1}{2\pi} \left[E - B + A(E + B^*)^{-1} A^* \right]^{-1} \quad (4)$$

其中 E 为单位矩陣的 E 倍, A, B 为(2)式中的矩陣。矩陣 $G_{\alpha\alpha}$ 的極点即为(1)的激发譜, 它滿足方程

$$\left[E - B + A(E + B^*)^{-1} A^* \right]_{\alpha\alpha} = 0 \quad (5)$$

若取

$$A_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta}^* = 2\beta_k \delta_{kk'}, \quad B_{\alpha\beta} = \alpha_k \delta_{kk'}, \quad \alpha_k = \frac{k^2}{2m} + \rho_0 v(k), \quad \beta_k = \frac{\rho_0}{2} v(k)$$

則(1)式即为波戈留博夫利用近似二次量子化方法所得到的弱激发玻色系的哈密頓。把这数值代入(5)得到激发譜

$$E_k = \sqrt{\alpha_k^2 - 4\beta_k^2} = \sqrt{\frac{k^4}{4m^2} + \rho_0 v(k) \frac{k^2}{m}}$$

与波戈留博夫所得到的相同

2. 近似二次量子化方法不能用来求得能譜的高一級修正以及膺粒子的寿命。目前一般認為С.Т. Беляев的理論是处理弱耦合玻色系(玻色气体)的比較成功的方法。在一級气体近似下, 他获得了与波戈留博夫同样的結果, 在二級近似下, 求得激发譜的微小修正及激发的寿命。对于长波激发(声子)的衰減正比于声子动量 k 的五次幂。这一衰減与声子的分裂过程有关。但是Беляев在計算中利用了图形技术, 即使在二級近似下, 計算也很繁长。

本文利用了格林函数方法并采用了波戈留博夫在另一工作中所得到的玻色系哈密頓, 并保留它的和膺粒子分裂过程有关的部份(长波激发部份):

$$H = H_0 + H_I.$$

$$H_0 = \sum_k E(k) b_k^\dagger b_k, \quad E(k) = \sqrt{\frac{N}{V} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)^2}$$

$$H_I = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_1 + k_2 \neq 0}} V_{k_1 k_2} \left(b_{k_1 + k_2}^\dagger b_{k_1} b_{k_2} + b_{k_1}^\dagger b_{k_2}^\dagger b_{k_1 + k_2} \right) \quad (6)$$

其中

$$V_{k_1 k_2} = \frac{\hbar^2}{8m} \left\{ (k_1 \cdot k_2) \frac{\lambda_{k_1 + k_2}}{\lambda_{k_1} \lambda_{k_2}} + \left[k_1 \cdot (k_1 + k_2) \right] \frac{\lambda_{k_2}}{\lambda_{k_1} \lambda_{k_1 + k_2}} + \right.$$

$$\left. + \left[k_2 \cdot (k_1 + k_2) \right] \frac{\lambda_{k_1}}{\lambda_{k_2} \lambda_{k_1 + k_2}} \right\} \lambda_k^4 \left(\frac{N}{V} v(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} \right) =$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{4m}$$

在同样近似下求得了热力学格林函数

$$G_k(t-t') = \langle\langle b_k(t), b_k^\dagger(t') \rangle\rangle$$

的解, 其譜表式

$$G_k(E) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - \epsilon_k - \Sigma_k(E)} \quad (7)$$

式中

$$\sum_k(E) = 2 \sum_q \frac{V_{k-q,q}^2}{N} \frac{(n_q + n_{k-q} + 1)}{E - \epsilon_{k-q} - \epsilon_q} + 2 \sum_q \frac{V_{k,q}^2}{N} \frac{(n_q - n_{k+q})}{E - \epsilon_{k+q} + \epsilon_q} \quad (8)$$

由 (8) (7) 立即得激发谱的修正为

$$\tilde{E}_k = \epsilon_k + P \left\{ \sum_q \frac{V_{k-q,q}^2}{N} \frac{(n_q + n_{k-q} + 1)}{E - \epsilon_{k-q} - \epsilon_q} + \sum_q \frac{V_{k,q}^2}{N} \frac{(n_q - n_{k+q})}{E - \epsilon_{k+q} + \epsilon_q} \right\} \quad (9)$$

激发的衰减为

$$\gamma_k(\omega) = \pi \sum_q 2 V_{k-q,q}^2 (n_q + n_{k-q} + 1) \delta(\omega - \epsilon_{k-q} - \epsilon_q) + \pi \sum_q 2 V_{k,q}^2 (n_q - n_{k+q}) \delta(\omega - \epsilon_{k+q} + \epsilon_q) \quad (10)$$

若声子分佈近似地用玻色分佈代入 (10) 式則可通过积分 (10) 式求得激发的衰减, 特别在绝对零度下我們得到长波激发的衰减为

$$\gamma_k(\epsilon_k) \sim \sqrt{n_0 f_0^3} \frac{\epsilon_k^5}{(n_0 f_0)^4}$$

这一结果与 Беляев 的结果一致。

A7. 铁磁体中缺陷对自旋波的影响

李蔭远 方励之 顧世杰 朱碩馨 (科学院物理所)

这一报告是以下三篇論文:

铁磁体中缺陷对自旋波的影响 (李、方、顧) 立方铁磁体中的自旋波局域模 (李、朱) 和有缺陷铁磁体的中子非弹性散射 (方、顧) 的综合叙述。

晶格中缺陷对于声子或 Bloch 电子的影响, 在国际文献中已有不少的理論分析和实验探索。至于缺陷对自旋波的影响, 我們尚未見到有任何工作出现。在使用 Heisenberg 交换哈密頓量并只包括近邻作用的前提下, 我們考虑一个代位杂质可能引起的自旋波散射和局域模的形成。能極在連續带之外的局域模的出现条件、能級位置和自旋偏离的空间分布通过一含 $z+1$ 个未知元的綫性齐次方程組来求出。这里 z 是晶格的近邻配位数。对于最简单的模型: 一維綫性鍊, 局域模可能有二个, 偶对称模和奇对称模。二者出现在能带頂以上的条件分别是 $\frac{J'S'}{JS} + \frac{J'}{J} > 2$, 和 $\frac{J'S'}{JS} > 2$ 。出现在能带之下的条件是 $J' < 0$ 。这里 S 和 S' 分别为基質原子和杂质原子的自旋, J' 和 J 各为杂质与其近邻之間和一般近邻之間的交换积分。局域模的自旋偏离集中在杂质和其較邻近的原子上, 自最近邻向外指数函数地衰减。高度集中的应变和間隙原子, 如致使邻近处的交换作用增大或变号都引起局域模的出现。包括磁偶極矩相互作用进行計算的结果, 証明了这些局域模并不遭到破坏。

对于三維铁磁晶体, 通过对称分析可將 $z+1$ 阶的久期行列式約化为几个低阶的, 并求出相应的局域模。例如, 在简单立方可能有类 s 型模, 类 p 型模 (三重簡併) 和类 d 型模 (二重簡併)。其出现条件、能級高度和自旋偏离的对称分布將在报告时以图表示之。

带內散射波受到杂质的影响使各个格点上的自旋偏离相互間有了差别, 但这一差别的数

量級只达到 $1/N$ 。这里 N 是原子的总数。我們分析了散射模和局域模的波函数，証明它們一起組成总自旋偏离为 1 的元激发态的子空間中的一个正交归一全系。我們計算了有缺陷鉄磁体的中子-自旋波散射，得到非弹性散射的微分截面，肯定了用慢中子的散射实验可能証实局域模的存在。

立方鉄磁体中的类 s 型模最有可能实际观测到。作为观测局域自旋波的样品的鉄磁体，其居里点应随渗杂浓度的增加而上升。

A 8. 交换作用漲落所引起的鉄磁共振綫寬

許政一 (科学院物理所)

Clogston 等⁽¹⁾最早从磁性离子无序分佈来解释反型尖晶石型鉄氧体的綫寬比磁性离子有序分佈的鉄氧体的綫寬要大得多这一現象。他們考虑了交换积分和膺偶極作用常数的空間漲落，但略去了自旋矩的空間漲落，算得的结果仅膺偶極作用的漲落对共振綫寬有贡献。他們取膺偶極作用常数比单纯磁偶極作用常数大二个数量級，才得到与实验值在数量級上相符的结果。但根据：(1) 各向異性理論⁽²⁾及实验⁽³⁾，(2) 鉄氧体在居里溫度以上的順磁共振綫寬的实验⁽⁴⁾，(3) 鉄磁共振綫寬的实验⁽⁵⁾，⁽⁶⁾，膺偶極作用常数該比 Clogston 等所取值小二个数量級。因此膺偶極作用漲落所引起的綫寬要比实验值小四个数量級，可略去。

若同时考虑交换积分和自旋矩的空間漲落，則交换作用漲落对綫寬也有贡献。我們从以下的等效鉄磁哈密頓量出发：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_0 = -g\beta H \sum_i S_{iz} - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{3}{\gamma_{ij}} (\vec{\gamma}_{ij} \cdot \vec{S}_i) (\vec{\gamma}_{ij} \cdot \vec{S}_j) \right], \quad (2)$$

$$\mathcal{H}' = g\beta H \sum_i (S_{iz} - S'_{iz}) + \sum_{i,j} J'_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i,j} J'_{ij} \vec{S}'_i \cdot \vec{S}'_j. \quad (3)$$

$\mathcal{H}_0$ 表示若磁离子有序分佈时的哈密頓量， J_{ij} ， $\vec{S}_i$ 为相应之等效交换积分和自旋矩。 $\mathcal{H}'$ 表示磁离子无序分佈所引起的哈密頓量之改正。 J'_{ij} ， $\vec{S}'_i$ 为磁离子无序分佈时的交换积分和自旋矩，均随空間位置变化。 $\mathcal{H}_0$ 决定自旋波頻譜， $\mathcal{H}'$ 引起自旋波散射。用与 [1] 相同的方法算得綫寬

$$\Delta H = \frac{V}{Na^3} \frac{2c(1-c)^2}{\pi \gamma^2 \hbar^2} (1 - \sqrt{\sigma})^2 (J_{uv} Z S_v)^2 \frac{\sqrt{4\pi M}}{H_e^{3/2}} I\left(\frac{H}{4\pi M}, n_t\right). \quad (4)$$

$\sigma = \frac{S_u}{S_v}$ 是二种阳离子的等效自旋之比， J_{uv} 是二者間之等效交换积分， c 为 u 离子波度，

$I\left(\frac{H}{4\pi M}, n_t\right)$ 是 n_t 及 $\frac{H}{4\pi M}$ 的函数，其值介于零与一之間。以上其它符号之意义与 [1] 同。

以上結果对 c 小时适用。但我們將它外推至反型尖晶石型鉄氧体情形，估計得 $\Delta H \sim 50$ 奥，在数量級上与实验相符。故可确定交换作用涨落是反型尖晶石型鉄氧体内稟綫寬大的主要原因。

若 u, v 有一为非磁性离子，則 $J_{uv} = 0$ ；若 u, v 为自旋相等的不同离子，則 $\sigma = 1$ 。由 (4) 知，在这二种情形 $\Delta H = 0$ ，即交换作用涨落对共振綫寬均无贡献。从而可解释无序鋰鉄氧体和鎂錳鉄氧体的綫寬特別小的事实。因为对前者， Li^+ 为非磁性离子，其余阳离子为 Fe^{3+} ；

对后者， Mg^{2+} 为非磁性离子， Mn^{2+} 和 Fe^{3+} 的自旋都是 $\frac{5}{2}$ 。

参 考 文 献

- (1) Clogston, A. M. et al., J. Phys. Chem. Solids, 1 (1956), 129.
- (2) Yosida, K. and Tachiki, M., Prog. Theor. Phys. 17 (1957), 331.
- (3) Folen, V. J. and Rado, G. T. J. Appl. Phys. 29 (1958), 438.
- (4) White, R. L. Phys. Rev. 115 (1959), 1519.
- (5) Гуревич, А. Г., Гублер, И. Е. и Титова, А. Г., ФТТ, 3 (1961), 19.
- (6) Denton, R. T. and Spencer, E. G., J. Appl. Phys. 33 (1962), 1300, Suppl.

A9. 关于稀土金属中价电子间的交换作用

苟清泉 曾 琴 常 滿 鐘心剛 徐家振 (吉林大学 物理系)

过渡金属与合金的磁性的本質問題，一直到現在还了解得很少。过去有很多人在交换作用概念的基础上提出了若干交换作用模型来分析过渡金属与合金的磁性，但一般所用的概念和模型都比較粗糙，且缺乏系統的定量計算，往往得不出肯定的結論。因此一直到現在固体中比較完善的交换作用的定量理論还未形成，建立交换作用理論中的一个重要問題，就是价电子間的交换积分的符号与大小。由于这种交换积分的計算比較困难，过去长期以来很少人进行过严格的定量計算，有很多人常常把它作为一个未知参数来討論，其符号与大小只能作为一个假設提出，因此得不出定量的結果和肯定的結論。近年来，有若干作者进行了一些定量計算，但是由于各人所用的关于交换积分的定义不同和所用的电子波函数不同，所得的結論也是不同的。因此，我們認為，进一步研究过渡族金属中价电子間的交换作用，进行系統的計算，以确定有关交换积分的符号和大小，对发展鉄磁性理論是十分重要的。

近两年来有人只对少数鉄族金属的直接交换积分进行了比較系統而严格的計算。至今尚沒有人对稀土金属进行过系統的計算。我們准备对稀土金属原子間价电子的交换作用进行系統的計算，以探討各种金属中交换积分的符号和大小，及其在产生磁性上的作用。

我們先以釔为例来进行系統計算。我們設計了一种簡單的解析原子波函数，按照通常分子結構理論中計算取中心积分的方法，計算了一对 Gd 原子間的 $s-s$, $s-d$, $d-d$ 交换积分与原子間距离的关系，并計算了同一原子中的 $s-d$, $s-f$, $d-f$ 交换积分。对两原子間的交换积分分別采用了 Heisenberg 和 Löwdin 关于交换积分的不同定义来进行計算，將两种計算結

果加以比較。所得結果主要为：

1. $s-s$ 交换积分 J_{s-s} , 按 Heisenberg 定义計算是正的, 且随原子間距的增大而减小, 但按 Löwdin 定义計算則是負的, 且随原子間距的增大而負值减小。

2. $d-d$ 交换积分 $J_{d-d}(\sigma\sigma)$, 按 Heisenberg 定义計算是正的, 随原子間距的增大而逐渐增大然后又逐渐减小, 但按 Löwdin 定义計算則原子間距小时是正的, 原子間距大时变为負的。

3. $d-d$ 交换积分 $J_{d-d}(\pi\pi)$, 按 Heisenberg 定义計算, 原子間距小时是正的, 原子間距大时是負的。但按 Löwdin 定义計算則是負的, 原子間距小时負值很大, 原子間距增大时負值减少很快。

4. $s-d$ 交换积分 J_{s-d} , 按 Heisenberg 定义計算是正的, 随原子間距的增大而逐渐减小; 按 Löwdin 定义計算, 原子間距小时也是正的, 但数值較小, 原子間距大时变为負的。

由以上的計算結果表明:

1. 按两种不同的交换积分定义計算得到的結果有很大的不同。Löwdin 的定义比較严格。既然按 Heisenberg 的定义計算有很大的差異, 則对严格的計算, 就不能用这种定义來計算交换积分。

2. 我們所算得的結果与以往的两种論点不同, 一种論点認為直接交换积分 J 总是負的 (Zener 的观点), 另一种論点認為直接交换积分 J 在小距离时为負的, 距离大时变为正的, 并經過一極大而后下降至零 (Slater 和 Bette 的观点)。我們算出的 J 强烈地依赖于軌道的角度部分, 而結果一般并不与以往的两种論点一致。

我們根据一种交换作用模型并应用以上計算結果, 估計了 Gd 的居里点溫度, 結果与实验值比較接近。

A10. 鉻的 $d-d$ 、 $s-d$ 交换作用

吳代鳴、曾令文、周泳娥、靳仲蘭、張家祥、孫伯祥、

馬士賓、張存富 (吉林大学、东北物理所)

过渡金属鉄磁性理論中一个重要問題是 $3d$ 电子間的交换积分 J_{d-d} 的符号与大小。近年来, 不少作者 [1] 对 J_{d-d} 进行了实际計算。由于各人所用的关于 J_{d-d} 的定义及 $3d$ 电子的波函数不同, 所得結論是不同的。其中最有意义的是 Freeman 和 Watson 所作的計算。他們按照 Löwdin [2] 最近提出的关于 J_{d-d} 的严格定义, 采用由 Hartree-Fock 自洽場方法計算出的原子波函数, 計算了一对 $\text{Co}(3d^9)$ 原子和一对 Co^{++} 离子的 $d-d$ 交换积分, 結果 J_{dd} 是負的。因此, 他們認為, 过渡金属中 $3d$ 电子間的直接交换作用不能产生鉄磁性, 从而支持了 Zener (3) 提出的关于过渡金属中 $d-d$ 交换作用是負的, 鉄磁性的主要来源是 $s-d$ 交换作用的假定。

我們認為, 进一步研究过渡金属中 $d-d$ 、 $s-d$ 交换作用的符号及相对大小对发展鉄磁理論具有重大意义。从已有的工作看来, 以下三个基本問題还没有解决: (1) $d-d$ 交换积分是否对不同金属以及在不同核間距离下都是負的? (2) $s-d$ 交换积分的符号与大小, (3) 对于反鉄磁性过渡金属如 Cr、Mn 等, 是否象 Zener [3] 所假定的那样, 主要是由 $d-d$ 直接交换作用决定的?

为了探讨上述问题, 我们针对一对Cr原子进行了计算。我们采用苟清泉、李光伟、金信默〔4〕用变分法计算出的Cr原子的解析波函数, 按照通常在量子化学中计算双中心积分的方法〔5〕计算了相应于Cr晶体中最近邻及次近邻原子间距离的一对Cr原子间的d-d、s-d交换积分。并且比较了Heisenberg〔6〕和Löwdin〔2〕关于J的不同定义所得的结果。主要结果如:

(1) d-d交换积分是负的, 与Freeman Watson的结论一致。仿然stuart Mashall〔1〕的做法, 得到平均一对3d电子的交换积分对于最近邻及次近邻原子间距离下分别为 $J = -9.762 \times 10^{-4}(\text{au})$, $-4.064 \times 10^{-4}(\text{au})$ 因此, Cr中3d电子的直接交换作用是引起反铁磁性。

(2) s-d交换作用是正的, 引起铁磁性。但其数值要比d-d交换作用小, 支持了Zener〔3〕关于Cr的反铁磁性主要由d-d交换作用产生的假定。

(3) 根据由分子场理论导出的Neil点 T_N 的公式〔1〕算出 $T_N = 430^\circ\text{K}$ 与实验值 $T_N = 312^\circ\text{K}$ 比较接近。

参 考 文 献

- 〔1〕 E. P. Wohlfarth, Nature **163** 57 (1949), H. Kaplan, Phys Rev **81** 1038 (1952), R. Stuart and W. Marshall, Phys Rev **120** 353 (1960), A. J. Freeman and R. E. Watson, Phys Rev **124** 1439 (1962)
- 〔2〕 P. O. Löwdin Rev Mod Phys **34** 80 (1962)
- 〔3〕 C. Zener Phys Rev **81** 440 (1951), **82** 403 (1951), **83** 299 (1951), **85** 324 (1951)
- 〔4〕 苟清泉、李光伟、金信默第一过渡金属元素的解析原子波函数 (未发表)
- 〔5〕 M. Kotani, A. Amemiya, E. Ishiguro, T. Kimura "Table of molecular integrals" Tokyo. (1955)
- 〔6〕 W. Heisenberg. Z. Phys **49** 619 (1928)
- 〔7〕 G. W. Pratt Phys Rev **106** 53 (1957)

A11. 铁磁体的热力学性质

孙鑫 黄静宜 叶红娟 (复旦大学物理系)

利用Maleev变换:

$$S_i^z = -S + b_i^\dagger b_i; S_i^+ = \sqrt{2S} b_i^\dagger; S_i^- = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{b_i^\dagger b_i}{2S}\right) b_i \quad (1)$$

将铁磁系统的Heisenberg交换哈密顿

$$H = g\mu_B \sum_i S_i^z - \sum_{i,m} J(1-m) S_i \cdot S_m \quad (2)$$

用b算符表示为:

$$H = -g\mu_B S N - S^2 N J(O) + \left[g\mu_B + 2SJ(O) \right] \sum_i b_i^\dagger b_i - 2S \sum_{i,m} J(1-m) b_i^\dagger b_m +$$

$$+ \sum_m I(l-m) \left[b_l^\dagger b_m^\dagger b_m b_m - b_l^\dagger b_l b_m^\dagger b_m \right] \quad (3)$$

其中四算符之項对应于自旋波的相互散射，称为“动力学相互作用”。本文导出了b算符的对易关系为：

$$b_l b_m^\dagger - b_m^\dagger b_l = \left(1 - \frac{2S+1}{(2S)!} b_l^{2s} b_l^{2s} \right) \delta_{lm}, \quad b_l^{2s+1} = b_l^{2s+1} = 0 \quad (4)$$

所以b、b⁺不再是玻色算符，这是由于自从偏离不能超过2S而引起的，称它为“运动学相互作用”。由于本文同时考虑了动力学及运动学相互作用，因而由此建立的理论不受温度的限制，能够计算任意自旋数值（S≥1）的铁磁体在各种温度范围内的热力学量，并用来讨论居里点附近的相变性质。

利用双时温度格林函数求得了磁化强度σ、居里点T_c、热力学势Ω以及其它热力学量。当外磁场不存在时，Ω及其一级微商（熵S = -∂Ω/∂T）在居里点连续，但二级微商（比热C_v = -T ∂²Ω/∂T²）有一跳跃，这就给出了铁磁体在居里点发生二级相变的微观解释。本文的计算结果与实验及分子场理论相符合。

A12. 含顺磁杂质超导体中的束缚态

于 绿 (科学院物理所)

本文中利用广义正则变换和自洽场方法讨论了单个杂质对超导体的影响。

计算表明，磁性杂质除引起连续谱中无激发波函数的畸变外还能形成一个束缚态的无激发，其能级位于能隙之中。在交换作用较弱的条件下：

$$\omega_0 = \Delta_0 \left(1 - \frac{2J_0'^2 S_z^2}{(1+V_0')^2} \right)$$

Δ₀是能隙，V₀'，J₀'是无量纲的散射势和交换积分，S_z是局域自旋。相应的波函数是：

$$A \left[\frac{\sin k_F r}{k_F r} - V_0' \frac{\cos k_F r}{k_F r} \right] e^{-\sqrt{\Delta_0^2 - \omega_0^2} \frac{r}{v_F}}$$

A是归一常数，v_F、k_F是费米速度和费米动量。

我们计算了束缚能级所引起的附加电磁吸收。由于波函数扩展范围很大，附加吸收虽正比于杂质浓度，但系数很大。在主吸收边界前可能出现一个附加吸收峰。

文中还讨论了与束缚能级存在有关的隧道效应和高频吸收实验。

此外，本文中讨论了连续谱无激发在杂质场中所产生的畸变及所引起的能隙的变化。计算表明，能隙相对变化是较小的，且随距离增大衰减很慢（r⁻²）。

A13. 超导薄膜的临界磁理论

吴杭生 (北京大学物理系)

(1) 为了解释Douglass和Blumberg实验结果⁽¹⁾, 我们从理论上计算超导薄膜的临界磁场 H_0 (在 T_c 附近)。设膜的厚度为 d , 长宽各为 L ($L \gg d$)。设磁场沿着 r_3 方向, 相应的矢势为 $A(r)$ 。

(2) 首先, 我们把适用于无限大超导体的Горьков格林函数方程组⁽²⁾推广到薄膜的情形:

$$\begin{cases} i\omega + \frac{1}{2m} \left(D - ieA(r) \right)^2 + U(r) + \mu \} G_\omega(r, r') + \Delta(r) F_\omega^+(r, r') = \delta(r - r'), \\ -i\omega + \frac{1}{2m} \left(D + ieA(r) \right)^2 + U(r) + \mu \} F_\omega^+(r, r') - \Delta^*(r) G_\omega(r, r') = 0, \\ \Delta^*(r) = (g) + \sum F_\omega^+(r, r), \end{cases} \quad (1)$$

其中 $U(r)$ 代表薄膜的边界势能。 $G_\omega(r, r')$ 和 $F_\omega^+(r, r')$ 满足如下边界条件:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G_\omega(r, r')}{\partial r_1} \right|_{r_1 = \pm \frac{d}{2}} &= \left. \frac{\partial G_\omega(r, r')}{\partial r'_1} \right|_{r'_1 = \pm \frac{d}{2}} = 0 \\ \left. \frac{\partial F_\omega^+(r, r')}{\partial r_1} \right|_{r_1 = \pm \frac{d}{2}} &= \left. \frac{\partial F_\omega^+(r, r')}{\partial r'_1} \right|_{r'_1 = \pm \frac{d}{2}} = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

对于足够薄的膜 ($d < \xi_0 \sim 10^{-4} \text{cm}$), $\Delta(r)$ 可以近似看成常数。利用文章⁽²⁾方法, 从(1)得到决定超导薄膜的临界磁场 H_0 的方程:

$$1 = \frac{1}{d} |g| T \sum_\omega \iint d\mathbf{l} \, dr_1 \tilde{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{l}, r) \tilde{G}_{-\omega}^{(0)}(\mathbf{l}, r). \quad (3)$$

上式中的积分是局限于薄膜的内部, 又 $\tilde{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 满足类似(2)的边界条件, 它是由下方程定义的:

$$\begin{aligned} \left\{ i\omega + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial r_2} - ieH_0 r_1 \right)^2 + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \right. \\ \left. + U(r) + \mu \right\} \tilde{G}_\omega^{(0)}(r, r') = \delta(r - r'). \end{aligned} \quad (4)$$

(3) 我们对方程(4)的解进行了分析, 得到如下结论: 方程(4)的准经典近似解⁽²⁾只有对无限大超导体适用, 对于薄膜 $\tilde{G}_\omega^{(0)}(r, r')$ 应当采用如下表达式,

$$\tilde{G}_\omega^{(0)}(r, r') = G_\omega^{(0)}(r, r') + \frac{ieH_0}{m} d\mathbf{l} G_\omega^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{l}) l_1 \frac{\partial}{\partial l_2} G_\omega^{(0)}(\mathbf{l}, r') +$$

$$+ \left(\frac{ieH_0}{m} \right)^2 \iint d\mathbf{l} d\mathbf{s} G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}\mathbf{l}) l_1 \frac{\partial}{\partial l_2} G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{l}\mathbf{s}) s_1 \frac{\partial}{\partial s_2} G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{s}\mathbf{r}) + \dots, \quad (5)$$

其中:

$$G_{\omega}^{(0)}(\mathbf{r}\mathbf{r}') = \iint \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \sum_k \frac{1}{i\omega - \xi_{k\mathbf{p}\mathbf{q}}} e^{ip(r_2 - r'_2) + iq(r_3 - r'_3)} \psi_k(r_1) \psi_k(r'_1), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \psi_k(r_1) &= \sqrt{\frac{1}{2d}} \quad (k=0), \\ &= \frac{1}{d} \cos k \left(r_1 - \frac{d}{2} \right) \quad (k \neq 0). \end{aligned} \quad (6a)$$

(4) 把(5)代入(3), 保留到 H_0^4 项, 計算得到薄膜的临界磁場是:

$$H_0 = \sqrt{\frac{32\pi r}{3\zeta(s)}} \frac{1}{ed^{3/2} \xi_0^{1/2} (1 - \mu(x))^{1/2} (\Delta t)^{1/2} \{1 + \epsilon(\Delta t)\}} \quad (7)$$

其中 $\Delta t = 1 - \frac{T}{T_c}$, $\xi_0 = 0.18 \frac{v_0}{kT_c}$, $r = \ln c$ (c 是 Euler 常数), $\zeta(s)$ 是黎曼 ζ -函数, $\mu(x) = 0.54 \times \left\{ \ln \frac{1}{x} + 1.27 - 0.195x^3 \right\}$, $x = 0.361 \frac{d}{\xi_0} \left(\frac{T_c}{T} \right)$, 又 ϵ 是与 d 有关的正数。

依照 Ландау-Гинзбург 理論, 薄膜的临界場 H_0 是与 $\frac{1}{d}$ 成正比, 而 $(\Delta t)^{3/2}$ 系数 $\epsilon = -0.75$ 。

把(7)和 Douglass-Blumberg 实验結果比較, 在 $\xi_0 = 1.9 \times 10^{-5}$ cm 时, 理論和实验很好符合。

(5) 我們还准备对改进 Ландау-Гинзбург 理論問題进行研究。

参 考 文 献

- (1) D. H. Douglass Jr. and R. H. Blumberg Phys. Rev. **127** (1962) 2038
- (2) Горьков ЖЭТФ **36** (1959) 1918

A14. 杂质对超导体转变温度的影响

孫鑫 阮可妃 叶 令 (复旦大学 物理系)

提出杂质超导体中传导电子与杂质原子的相互作用机构, 并用来解释磁性和非磁杂质引起超导体转变温度改变的实验现象。

在杂质超导体中, 传导电子一方面受到杂质原子的散射:

$$H_s' = \sum_{k k' \sigma} T_{k k'}^+ a_{k\sigma} a_{k'\sigma},$$

一方面还与杂质原子中束缚电子相互作用, 将它二次量子化后可分为交换作用 H'_e 与直接作用 H'_d 两部分:

$$H'_d = \sum_{kk'}' \sum_{\sigma} e^{-i(k-k') \cdot R_l} (I_{kk'} - \frac{1}{2} J_{kk'}) a_{k\sigma}^+ a_{k'\sigma}$$

$$H'_e = - \sum_{kk'}' J_{kk'} \left[a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow} S_{k-k'}^+ + a_{k\downarrow}^+ a_{k'\uparrow} S_{k-k'}^- + (a_{k\downarrow}^+ a_{k'\downarrow} - a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}) S_{k-k'}^z \right]$$

因而杂质超导体的总哈密顿量为:

$$H = H_{Fr} + H'_{im}$$

$$\text{即 } H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q + \sum_{k, -k=q} g \left(\frac{\omega_q}{2v} \right)^{\frac{1}{2}} a_{k\sigma}^+ a_{k'\sigma} (b_q^+ + b_{-q}) + H'_s + H'_d + H'_e$$

从此哈密顿出发, 利用 u v 变换和变分法 (或抵消危险图)⁽¹⁾, 根据超导介的存在条件求得了杂质超导体的转变温度 T_c 为:

$$T_c = T_c^0 \exp \left\{ \frac{1.12 D^2}{\rho k T_c} \left[m^2 (I_0 - \frac{1}{2} J_0)^2 + t^2 - J_0^2 S(S+1) \right] \right\}$$

因而交换作用 J_0 将使 T_c 下降, 这是由于交换作用使传导电子自旋反向, 折散了“Cooper对”的缘故。而散射 t 和直接作用 I_0 将使 T_c 上升, 这是因为散射作用会间接地在传导电子间产生附加吸引力。

将镧系稀土元素(顺磁杂质)加入超导体镧中时⁽²⁾, 週期性势场畸变很小且直接作用受到屏蔽, 交换作用占优势, 因而使 T_c 下降。并存在着杂质的临界浓度

$$D_c = \frac{0.035}{S(S+1) - m^2/4}$$

将过渡元素(铁磁杂质)加入超导体钛中时⁽³⁾, 当直接作用 I_0 足够大时, 促使 T_c 上升。对于非磁杂质⁽⁴⁾⁽⁵⁾, 如果交换作用大于散射和直接作用, 则 T_c 下降, 反之, T_c 将上升。理论的计算与实验的结果基本符合。

参 考 文 献

- (1) Д. Н. Зубарев, ДАН СССР, **122**, 6, (1958), 999.
- (2) B. T. Matthias, Phys. Rev. Lett. **1**, (1958), 92.
- (3) B. T. Matthias, Phys. Rev. **115**, 6, (1959), 1597.
- (4) E. A. Lynton, J. Phys. Chem. Solids. **3**, (1957), 165.
- (5) D. J. Quiun, Phys. Rev. **123**, 2, (1961)466.

A15. 关于超导金属的 Knight 移动

蔡建华 徐定藩 毛镇道 (南京大学物理系)

自从吉田⁽¹⁾在BCS理论⁽²⁾的基础上用微扰论得出在绝对零度超导金属的 Knight 移动 K 等于零的结果后, 许多人寻求各种因素来解释 K 不等于零的实验数据⁽³⁾。其中主要有 Pi-pard, Cooper 等⁽⁴⁾遵循的不精确配对的途径和 Anderson, Горьков 等⁽⁵⁾遵循的考虑自

旋軌道互作用的途径。本文嘗試討論引入这些因素是否必要,也就是探討在BCS理論本身的范围以內是否一定会得出在絕對零度 $K=0$ 的結果。

为了不用微扰論,我們遵从的途径是直接由均匀磁場中的单电子态⁽⁶⁾出发,在以这些态为基底的二次量子化表象中利用中島变换⁽⁷⁾确定由交換声子而导致的电子-电子互作用,然后按照BCS用变分法决定互作电子系統的平衡态,从而計算了超导态的磁化强度和磁化率 χ_s ,后者与正常态数值 χ_n 的比給出了 K 。

这里主要之点是:根据在均匀磁場中单电子的能級来計算其态密度时,我們发现电子軌道动量矩沿磁場方向分量为正或負的状态数不等。利用WKB近似来确定磁量子数 m 的最大許可絕對值后得到

$$\text{电子能量本征值 } \varepsilon = (2n_r + m + |m| + 1)\hbar\omega_L + \frac{p^2}{2\mu}, \quad \omega_L = \frac{eH}{2\mu c} \quad (1)$$

$$\text{态密度 } g(\varepsilon) = \frac{L}{2\pi\hbar} g(\varepsilon, p), \quad g(\varepsilon, p) = g_+(\varepsilon, p) + g_-(\varepsilon, p) = \frac{\mu\omega_L}{\hbar} R^2 \quad (2)$$

$$g_+(\varepsilon, p) = n + 1, \quad g_-(\varepsilon, p) = \frac{\mu\omega_L}{\hbar} R^2 - (n + 1), \quad n = \frac{\varepsilon - p^2/2\mu - \hbar\omega_L}{2\hbar\omega_L} \quad (3)$$

这里我們假設超导金属样品为圆柱形,磁場 H 在其軸向, L 为圆柱长, R 为其半径, μ 为电子动量, p 为电子沿磁場方向动量, n_r 为径向量子数, g_+ 为 $m \geq 0$ 的状态数而 g_- 为 $m < 0$ 的状态数。

我們采用按 (n, m, p, σ) ($n, -m, -p, -\sigma$) 配对⁽⁸⁾。于是可能配成的电子对数显然將与磁場有关,这將使一部份电子态沒有对偶,因而会影响磁化率。遵照BCS我們依据如下的考虑来选取变分波函数:在 $T \neq 0$ 时可能有(i)处于基态的电子对,(ii)激发对,

(iii)单独沒有配成对的电子和(iv)处于根本不可能配成对的状态的电子。使自由能(由于哈密頓量已含有磁場,这其实已是吉勃斯函数)極小化求得平衡态电子分佈,再由自由能对磁場偏微分得到磁化强度。我們的結果如下:

$$K = \frac{\chi_s}{\chi_n} = \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{192\pi} \frac{L}{(V/z)^{1/3}} \frac{1}{N^{2/3}} \left(\frac{\epsilon_F}{\mu_0 H} \right)^4, \quad \text{当 } T \rightarrow 0^\circ K \quad (4)$$

其中 V 为金属原子体积, z =原子价, N =亚佛加德罗常数, ϵ_F =費米能, μ_0 =玻尔磁子。以 S_n 的数据代入,并取 L 为穿透深度 $5 \times 10^{-6} \text{ cm}$, $H=1400 \text{ gauss}$ (在实验⁽³⁾所用磁場强度范围以內)得 $K=0.7$ 与实验数据 $\frac{1}{2}$ 接近。

因此我們的結論是在BCS理論本身范围內,充份考虑磁場因素,有可能解释实验結果。必須指出(4)式的一个重要缺点是 K 依賴于 H 較为强烈,这一点与目前实验存在分歧。

参 考 文 献

- (1) Yosida, Phys. Rev. **110** 769, (1958).
- (2) Bardeen, Cooper and Schriffer, Phys. Rev. **108** 1175 (1957).
- (3) Knight, Androes and Hammond, Phys. Rev. **104** 852 (1956).
Reif, Phys. Rev. **106** 208 (1957).
Androes and Knight, Phys. Rev. **121** 779 (1961).
- (4) Heine and Pippard, Phil. Mag. **3** 1046 (1958).
Cooper, Phys. Rev. Lett. **8** 367 (1962).

(5) Anderson, Phys. Rev. Lett. **3** 325 (1959) .

Абрикосов и Горьков, ЖЭТФ **42** 1088 (1962) .

(6) Sondheimer and Wilson, Proc. Roy. Soc. **A210** 173 (1951) .

(7) Bardeen and Pines, Phys. Rev. **99** 1140 (1955) .

(8) 关于这样配对的可能性见

Oliphant and Tobochnan, Phys. Rev. **119** 502 (1960) .

Anderson, J. Phys. and Chem. of Solids **11** 26 (1960) .

又可参考

Вонсовский, ДАН, СССР **122** 204 (1958)

ЖЭТФ, **39** 384 (1960) .

A16. 推广的等效自旋哈密顿

林福成 祝繼康 (中国科学院电子所)

本文用羣論的方法提出了一种推广的等效自旋哈密顿, 用它来描述晶体中过渡族离子的順磁共振性質。这种描述形式是基于下述的思想: 如果順磁离子的基态能級組有 $2S+1$ 个能級, 那么自旋空間的不可約張量組 T_{LM} ($L=0, 1, \dots, 2S$) 可以完全地描述順磁离子的行为。对于零場分裂部分 $\hat{H}_0^z$, 利用哈密顿的厄米性和時間反演特性, 得到 L 只能取偶数。 $\hat{H}_0^z$ 是由順磁离子所处环境对称点羣的么表示的基构成的。对于跟磁場有关的部分 $\hat{H}_1^z$, L 只能取奇数。利用有限点羣的 Wigner-Eckart 定理, 得到普通的自旋哈密顿所沒有的項, 这些項包含自旋算符的高次多項式。 $\hat{H}_1^z$ 是晶体点羣的某些不可約表示的基的綫性組合, 这些不可約表示就是以 S_x , S_y 和 S_z 为基的不可約表示。

Koster 和 Statz 在 1959 年提出了一种描述晶体中順磁离子的塞曼能級的新形式——K-S 矩陣 (Koster-Statz 矩陣), 我們証明了推广的等效自旋哈密顿跟 K-S 矩陣是完全等价的。

把晶体点羣的不可約表示的基認為是点羣的不可約張量, 我們对点羣 D_4 , D_{4v} , D_{2d} , D_3 , C_{3v} , D_6 , C_{6v} , D_{3h} , D_2 , C_{2v} , C_3 , O 和 T_d 在 $L \leq 5$ 的張量組 T_{LM} 中求出了对应于么表示和由 S_x , S_y 和 S_z 构成的不可約表示的不可約張量, 并列成表, 以便于求出推广的等效自旋哈密顿。

作为理論是否正确的檢驗和应用, 我們推导了 Bleaney 在 1959 年提出的 U' 綫的自旋哈密顿和 $Al_2O_3:Cl^{3+}$ 的推广的等效自旋哈密顿, 后者经过波函数相位的适当調节, 可以跟 Statz 和 Koster 得到的矩陣完全一致。

利用推广的等效自旋哈密顿来計算跃迁几率和順磁共振綫型时, 跟普通的自旋哈密顿有一些区别。

推广的等效自旋哈密顿能够描述大多数順磁离子的性質, 如, 3d 族軌道单态、所有以 Kramers 双态为基态的离子和 S 态离子。其中几乎包括了所有的量子順磁放大感兴趣的晶体。

推广的等效自旋哈密顿虽然跟 K-S 矩陣完全等价, 但是在晶体点羣是高对称度的点羣时, 求推广的等效自旋哈密顿比求 K-S 矩陣方便, 并且在形式上容易跟通常的自旋哈密顿比較, 为实验决定其中的参数提供了方便。