СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 10084

Б.В.Мощинский, В.К.Федянин

МЕТОД ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

1976

P17 - 10084

Б.В.Мощинский, В.К.Федянин

МЕТОД ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Мощинский Б.В., Федянин В.К. P17 - 10084

Метод функционального интегрирования для спиновых систем с негейзенберговым взаимодействием

Методом функционального интегрирования проанализированы эффекты в модели кластерного типа (с биквадратичным обменом).

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Moshchinski B.V., Fedyanin V.K. P17 - 10084

Functional Integration Method for Spin Systems with Nonheisenberg Interaction

Using functional integration method the effects in the model of cluster type (with biquadratic exchange) have been analysed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

Как показывают экспериментальные и теоретические исследования, в соединениях редких земель и солях переходных металлов, наряду с обменным взаимодействием, существенны эффекты мультипольного взаимодействия между атомами [1-3]. Причины появления мультипольного взаимодействия могут быть различны; перечислим некоторые из них:

а/ В соединениях редких земель f-электроны обладают конечным орбитальным моментом, слабо связанным с решеткой, что обуславливает несферичность зарядового облака f-электронов и, как следствие этого, появление в низшем порядке электростатического квадруполь-квадрупольного взаимодействия между f-ионами, четверного по полному моменту иона [1].

б/ Квадрупольное /и, вообще, мультипольное/ взаимодействие между ионами может быть индуцировано фононами /эффект Яна-Теллера/, что приводит как к магнитным, так и структурным переходам в таких соединениях [4].

в/ Взаимодействие между спинами более высокой степени, чем билинейное, может быть также обусловлено электронами проводимости [5].

г/ Модель Гейзенберга является первым нетривиальным приближением при построении магнитного гамильтониана. Учет последующих членов теории возмущения приводит к взаимодействию между спинами более высокой степени, чем билинейное [6,7].

е/ На основании обменного оператора Шредингера была сформулирована обменная модель ферромагнетика, которая только для спина $S=1/2$ эквивалентна обычной формулировке Гейзенберга [2].

В данной работе предлагается метод исследования таких систем, основанный на функциональном осреднении и некоторой аппроксимационной процедуре. Это позволяет в рамках единого подхода развить самосогласованную теорию для таких систем, получить корреляционные функции и спектры элементарных возбуждений. Далее с помощью развитого формализма исследуется анизотропная модель Гейзенберга с биквадратичным обменом.

1. Пусть $\mathfrak{L}_{if}$, $\mathfrak{L}^{+}_{if}$, $i = 1,2,\ldots,m$ - система линейно-независимых спиновых операторов на узле f. Например, S^z_f , S^+_f , S^-_f , $(S^z_f)^2 - \frac{1}{3}S(S+1)$ и вообще операторы Рака /12/. Гамильтониан

$$H = H_0 + H_{int}, \; H_0 = -\sum_{i=1}^{m}(h_i \cdot \mathfrak{L}_i + h^*_i \cdot \mathfrak{L}^+_i), \quad \mathfrak{L}_i = \sum_f \mathfrak{L}_{if}.$$

h_i , h^*_i - соответствующие "поля" /магнитное поле, анизотропия, мультиполя/. Двухузельное взаимодействие, порождаемое операторами $\mathfrak{L}_{if}$, $\mathfrak{L}^+_{if}$, возьмем в виде:

$$H_{int} = -\frac{1}{2}\sum_{ijq} J_{ij}(q)\mathfrak{L}_{iq}\mathfrak{L}_{j-q}, \qquad /1/$$

где

$$\mathfrak{L}_{iq} = N^{-1/2}\sum_f e^{iR_f q}\cdot \mathfrak{L}_{if} .$$

Взаимодействие $J_{ij}(q)$ может включать обменное, квадруполь-квадрупольное, мультипольные взаимодействия или некое эффективное взаимодействие между узлами через промежуточную среду /электроны проводимости, фононы/.

Введем систему флуктуирующих полей ℓ_{iq} , ℓ^*_{iq} , $i = 1,2,\ldots,m$, $q = (q, \omega_n)$, $\omega_n = 2\pi n\theta$, $n = 0, \pm1, \pm2, \pm3$, соответствующих операторам $\mathfrak{L}_{if}$, $\mathfrak{L}^+_{if}$. Тогда статистическую сумму и соответствующую ей свободную энергию системы можно представить в виде функционального интеграла по флуктуирующим полям:

$$Sp\, e^{-\beta H} = \int D(\ell_{iq})\cdot e^{\phi}, \quad F = -\theta \ln Sp\, e^{-\beta H}, \quad \phi = \phi_0 + \phi_1,$$

$$\phi_0 = -\frac{1}{2}\beta \sum J^{-1}_{ij}(q)\ell_{iq}, \ell_{j-q} , \qquad /2/$$

$$\phi_1 = \ell n\, Sp\, e^{-\beta H_o}\cdot T\exp\{\Sigma\beta(\ell_{iq}\mathfrak{L}_{i-q} + \ell^*_{iq}\mathfrak{L}_{i-q})\}.$$

Функциональный аналог статсуммы и свободной энергии не позволяет нам точно их вычислить даже для простейшей структуры операторов $\mathfrak{L}_{if}$ и поэтому без формулировки какой-нибудь процедуры его вычисления сам по себе бесполезен. Мы предлагаем аппроксимационную процедуру, которая оказывается хорошим приближением во всех областях температуры θ за исключением окрестностей точек возможных фазовых превращений II рода. Метод состоит в следующем. Вдали от точек фазовых превращений II рода, где флуктуации малы, можем представить флуктуирующие поля в виде: $\ell_{iq} = \tilde{\ell}_{iq} + \xi_{iq}$; $\tilde{\ell}_{iq}$, $\tilde{\ell}^*_{iq}$ - эффективные поля, доставляющие минимум свободной энергии, т.е. удовлетворяющие уравнениям:

$$\frac{\delta\phi}{\delta\ell_{iq}} = 0, \quad \frac{\delta\phi}{\delta\ell^*_{iq}} = 0, \qquad /3/$$

а ξ_{iq} , ξ^*_{iq} - малые флуктуации, малые в том смысле, что в выражении $\phi[\ell_{iq}] - \phi[\tilde{\ell}_{iq}]$ мы можем ограничиться билинейным по флуктуациям членом $\delta_2\phi$. Таким образом, получим: $\phi = \tilde{\phi} + \delta_2\phi$,

$$\tilde{\phi} = \min_{\ell_{iq}}\phi = -\frac{1}{2}\beta\sum_{ijq} J^{-1}_{ij}(q)\ell_{iq}\ell^*_{jq} + \ell n\, Sp\, e^{-\beta\tilde{H}_o},$$

$$\tilde{F} = \frac{1}{2}\sum_{ijq} J^{-1}(0)\ell_i\ell^*_j - \theta\,\ell n\, Sp\, e^{-\beta\tilde{H}_o}, \qquad /4/$$

$$\tilde{H}_0 = H_0 - \sum_i(\ell_i\mathfrak{L}_i + \ell^*_i\mathfrak{L}^+_i).$$

Эффективные /молекулярные/ поля ℓ_i , ℓ^*_i определяются из системы уравнений:

$$\sum_i J^{-1}_{ij}(0)\ell^*_j = \langle\mathfrak{L}_i\rangle_{\tilde{H}_o} ,$$
$$\qquad /5/$$
$$\sum_j J^{-1}_{ij}(0)\ell_j = \langle\mathfrak{L}^+_i\rangle_{\tilde{H}_o} .$$

Рассмотрим малые флуктуации в системе. Имеем

$$\delta_2\phi = -\frac{1}{2}\beta\sum_{ijq} J^{-1}_{ij}(q)\,\xi_{iq}\xi_{j-q} + \frac{1}{2}\sum_{ijq}\left(\frac{\delta^2\phi_1}{\delta\ell_{iq}\,\delta\ell^*_{j-q}}\right)_{\tilde H_o}\xi_{iq}\xi_{j-q}, \qquad /6/$$

где

$$\left(\frac{\delta^2\phi_1}{\delta\ell_{iq}\,\delta\ell^*_{j-q}}\right)_{\tilde H_o} = \beta^2\cdot K^\circ_{ij}(\omega_n),$$

$$K^\circ_{ij}(\omega_n) = \langle T\,\mathcal{L}_{iq}\mathcal{L}_{j-q}\rangle_{\tilde H_o} - \langle\mathcal{L}_{iq}\rangle_{\tilde H_o}\cdot\langle\mathcal{L}^+_{j-q}\rangle_{\tilde H_o}, \qquad /7/$$

т.е. $K^\circ_{ij}(\omega_n)$ - фурье-образ приведенного T-произведения по эффективному гамильтониану $\tilde H_0$. Функциональный интеграл для статсуммы становится гауссовым, и мы получаем:

$$\int D(\xi_{iq})\cdot e^{\delta_o\phi} = \prod_q\{\mathrm{Det}\,\|1-\sum_r\beta J_{ir}(q)K^0_{rj}(\omega_n)\|\}^{-1/2}.$$

Для корреляционной свободной энергии получаем выражение:

$$F_\ell = \frac{1}{2}\theta\sum_q \ln\mathrm{Det}\,\|1-\sum_r\beta J_{ir}(q)K^\circ_{rj}(\omega_n)\|. \qquad /8/$$

Вводя температурные корреляторы, имеем

$$K_{ij}(q) = \langle T\mathcal{L}_{iq}\mathcal{L}^+_{j-q}\rangle - \langle\mathcal{L}_{iq}\rangle\langle\mathcal{L}^+_{j-q}\rangle. \qquad /9/$$

Из выражения для корреляционной свободной энергии /8/ получим

$$K_{ij}(q) = \sum_r d^{-1}_{ir}K^\circ_{rj}(\omega_n), \qquad /10/$$

где

$$d = \|1-\sum_r\beta J_{ir}(q)K^\circ_{rj}(\omega_n)\|.$$

Как известно, спектры элементарных возбуждений системы определяются полюсами причинной функции Грина, которая есть аналитическое продолжение введенных нами корреляторов $K_{ij}(q)$ /7/. Таким образом, получаем дисперсионное уравнение для спектра коллективных возбуждений системы:

$$\mathrm{Det}\,\|1-\sum_r\beta J_{ir}(q)K_{rj}(-i\epsilon(q))\| = 0. \qquad /11/$$

2. Для иллюстрации полученных выше результатов рассмотрим анизотропную модель Гейзенберга с биквадратичным обменом:

$$H = -h\sum_f S^z_f - D\sum_f (S^z_f)^2 - \frac{1}{2}\sum_{\langle fg\rangle}\{J_1S^z_fS^z_g + J_2Q^z_fQ^z_g + J_3(S^+_f)^2(S^-_g)^2 + K_1S^+_fS^-_g + K_{12}(S^+_fS^z_fS^-_g + \text{э.с.}) + K_2S^+_fS^z_fS^z_gS^-_g\}, \qquad /12/$$

где

$$Q^z_f = (S^z_f)^2 - \frac{1}{3}S(S+1).$$

В случае

$$J_1 = J - \frac{1}{2}K,\quad J_2 = \frac{3}{2}K,\quad J_3 = \frac{1}{2}K,\quad K_1 = J,\ K_{12} = K,\ K_2 = 2K$$

имеем модель Гейзенберга с изотропным обменом и биобменом:

$$H = E_0 - h\sum_f S^z_f - D\sum(S^z_f)^2 - \frac{1}{2}\sum_{\langle fg\rangle}(JS_fS_g + K(S_fS_g)^2). \qquad /13/$$

Действуя по схеме, изложенной выше, получаем:

а/ Самосогласованные результаты.

Эффективный гамильтониан и свободная энергия в приближении эффективных полей:

$$\tilde H_0 = NJ_2(0)\frac{1}{3}S(S+1)\sigma_2 - \tilde h\sum_f S^z_f - \tilde D\sum_f (S^z_f)^2, \qquad /14/$$

$$\frac{F}{N} = \frac{1}{2} J_1 \sigma_1^2 + \frac{1}{2} J_2 \sigma_2^2 + \frac{1}{3} J_2 S(S+1)\sigma_2 -$$

$$- \theta \ln \sum_{m=-S}^{m=+S} \exp\{\beta \tilde{h} m + \beta \tilde{D} m^2\},$$

где для магнитного $\sigma_1 = \langle S_f^z \rangle_{\tilde{H}_o}$ и квадрупольного $\sigma_2 = \langle Q_f^z \rangle_{\tilde{H}_o}$ параметров порядка получаем уравнения самосогласования:

$$\sigma_1 = \frac{\sum_m m \cdot \exp\{\beta \tilde{h} m + \beta \tilde{D} m^2\}}{\sum_m \exp\{\beta \tilde{h} m + \beta \tilde{D} m^2\}}, \qquad /15/$$

$$\sigma_2 = -\frac{1}{3} S(S+1) + \frac{\sum_m m^2 \cdot \exp\{\beta \tilde{h} m + \beta \tilde{D} m^2\}}{\sum_m \exp\{\beta \tilde{h} m + \beta \tilde{D} m^2\}},$$

где

$$\tilde{h} = h + J_1(0)\sigma_1, \quad \tilde{D} = D + J_2(0)\sigma_2.$$

Исследование уравнений самосогласования проводилось в работах /8–11/. Было установлено, что система может находиться в четырех различных по внутренней симметрии состояниях: парамагнитном /П/ $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$, полуупорядоченном /ПУ/, $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 > 0$, квадрупольном /К/ $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 < 0$, ферромагнитном /Ф/ $\sigma_1 > 0$, $\sigma_2 > 0$. Если $J_1/J_2 > \frac{3}{2S-1}$, то основное Ф-состояние при этом $\sigma_1 = S, \sigma_2 = S^2 - \frac{1}{3} S(S+1)$. Если $J/J < \frac{3}{2S-1}$, то основное К-состояние $\sigma_1 = 0, \sigma_2 = -\frac{1}{3} S(S+1)$. При достаточно высоких температурах $\theta \gg J_{1,2}$ система находится в П-состоянии. При увеличении J_2 характер фазового перехода из Ф в П-состояние может измениться и происходить через К и ПУ-фазы. Если $J_2 \gg J_1$, то при повышении температуры К-фаза скачком переходит в ПУ-фазу, которая непрерывно переходит в П-состояние.

Интерес представляет исследование корреляций параметров порядка:

$$\mathcal{G}_1 = \langle (S_f^z - \langle S_f^z \rangle)(S_g^z - \langle S_g^z \rangle) \rangle,$$

$$\mathcal{G}_2 = \langle (Q_f^z - \langle Q_f^z \rangle)(Q_g^z - \langle Q_g^z \rangle) \rangle, \qquad /16/$$

$$\mathcal{G}_{12} = \langle (Q_f^z - \langle Q_f^z \rangle)(S_g^z - \langle S_g^z \rangle) \rangle .$$

Из приведенных выше формул получаем:

$$\mathcal{G}_{1,2} = \frac{P_{1,2}(1 - P_{2,1} j_{2,1}(k)) + P_{12} j_{2,1}(k)}{(1 - P_1 j_1(k))(1 - P_2 j_2(k)) - P_{12} j_1(k) \cdot j_2(k)}, \qquad /17/$$

$$\mathcal{G}_{12} = \left(\frac{J_1}{J_2} + \frac{J_2}{J_1}\right) \cdot \frac{P_{12}}{(1 - P_1 j_1(k))(1 - P_2 j_2(k)) - P_{12} j_1(k) j_2(k)},$$

где $P_1 = \sigma_2 - \sigma_1^2 + \frac{1}{3} S(S+1)$, $P_2 = \langle (S_f^z)^4 \rangle - (\sigma_2 + \frac{1}{3} S(S+1))^2$, $P_{12} = \langle (S_f^z)^3 \rangle - \sigma_1(\sigma_2 + \frac{1}{3} S(S+1))$. Из полученных выражений для корреляционных функций видно, что в К, ПУ - и П-фазах флуктуации параметров порядка σ_1 и σ_2 независимы, т.е. не влияют друг на друга. В этих фазах

$$\mathcal{G}_{12} = 0, \quad \mathcal{G}_{1,2}(k) = \frac{P_{1,2}}{1 - P_{1,2} j_{1,2}(k)}, \quad j_{1,2}(k) = \beta J_{1,2}(k). \qquad /18/$$

Считая, что при малых k: $J_{1,2}(k) = J_{1,2}(0) \cdot (1 - \alpha k^2)$, получим:

$$\mathcal{G}_{1,2}(R) = R^{-1} \cdot e^{-R/R_{1/2}}$$

$$R_{1,2} = \left(\frac{\alpha P_{1,2} J_{1,2}(0)}{\theta - P_{1,2} J_{1,2}(0)} \right)^{1/2} . \qquad /19/$$

Здесь $R_{1,2}$ - радиусы корреляций, которые характеризуют средний размер областей соответственно ϕ- и К - упорядочения в парамагнитной фазе.

В Ф-фазе $P_{12}=0$ при $\theta=0$, но при возрастании температуры P_{12} также растет, что приводит к связи флуктуаций параметров порядка σ_1 и σ_2 ($\mathcal{G}_{12}\neq 0$). В этом случае радиусы корреляций магнитного и квадрупольного параметров порядка совпадают:

$$R_1=R_2=\left(\frac{2a(P_{12}-P_1\cdot P_2)j_1(0)j_2(0)+P_1\,j_1(0)+P_2 j_2(0)}{1-P_1\cdot j_1(0)-P_2\,j_2(0)-(P_{12}-P_1\cdot P_2)j_1(0)\cdot j_2(0)}\right)^{1/2}. \qquad /20/$$

Связь флуктуаций при достаточно больших J_2 и θ приводит к срыву ферромагнитной фазы и скачкообразному переходу системы в квадрупольное или полуупорядоченное состояние с последующим переходом в парамагнитное /11/.

б/ Спектры коллективных возбуждений.

Используя полученное выше дисперсионное уравнение /11/, после вычисления $K^{\circ}_{ij}(\omega_n)$ для $S=1$ получаем в общем случае три ветви элементарных возбуждений:

$$\epsilon_{1,2}(q)=\tilde{h}-\frac{1}{2}(\nu K+\mu K_1\pm\sqrt{\nu K+\mu K_1-2\tilde{D})^2+8\nu K\tilde{D}+4d\nu\mu})$$

$$\epsilon_3(q)=2\tilde{h}-2J_3(q), \qquad /21/$$

$$K=K_1(q)+K_2(q)-2K_{12}(q),\quad d(q)=K^2_{12}(q)-K_1(q)\cdot K_2(q),$$

$$\nu=\frac{1}{2}(\sigma_1-3\sigma_2),\quad \mu=\frac{1}{2}(\sigma_1+3\sigma_2).$$

В случае изотропной модели Гейзенберга с биквадратичным обменом /13/:

$$\epsilon_{1,2}(q)=\tilde{h}-\frac{1}{2}(\sigma_1 J(q)\pm\sqrt{(\sigma_1 J(q)-2\tilde{D})^2+8\tilde{D}\nu J(q)+4\nu\mu K(q)(K(q)-2J(q))}, \qquad /22/$$

$$\epsilon_3(q)=2\tilde{h}-\sigma_1(K(0)+K(0)).$$

В случае $\theta=0$, если основное состояние есть Ф-состояние $\sigma_1=1$, $\sigma_2=1/3$, имеем 2 ветви коллективных возбуждений:

$$\epsilon_1(q)=h+D+J(0)-J(q),$$
$$\epsilon_3(q)=2(h+J(0))-K(0)-K(q). \qquad /23/$$

При малых q: $J(q)=J(0)(1-\alpha q^2)$, $K(q)=K(0)(1-\alpha q^2)$

$$\epsilon_1(q)=h+D+\alpha\cdot J(0)\cdot q^2,$$
$$\epsilon_3(q)=2h+2J(0)-2K(0)+\alpha K(0)q^2 \qquad /24/$$

- спектр магнонного типа.

Если основное состояние - квадрупольное /$\sigma_1=0$, $\sigma_2=-2/3$ /, то

$$\epsilon_{1,2}(q)=h\pm\sqrt{(K(0)-D-J(q))^2-(J(q)-K(q))^2}. \qquad /25/$$

При малых q, $D=0$:

$$\epsilon_{1,2}(q)=h\pm 2\sqrt{\alpha K(0)(K(0)-J(0))}\cdot q \qquad /26/$$

- налицо "звуковой" характер спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. R.J.Birgeneau, M.T.Hutching, J.M.Baker, J.D.Riley. J.of Appl. Phys., 40, 1071 (1969).
2. H.H.Chen, R.K.Joseph. J.Math,Phys., 13, 725 (1972).
3. Blume, Hsieh. J. of Appl. Phys., 40, 1249 (1969).
4. R.J.Eliott. Proc.Roy.Soc.Ser.A., 328, 217 (1972).
5. P.Anderson. Phys.Rev., 115, 2 (1959).
6. Н.Н.Боголюбов. Избранные труды в трех томах, т. 2, Киев, Наукова думка, 1971.
7. С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М., Наука, 1975.

8. Blume, Sivardiere. Phys.Rev., B5, 1126 (1972).
9. H.H.Chen, P.Levy. Phys.Rev.Lett., 27, 1383, 1385 (1971).
10. M.Nauciel-Bloch, G.Sarma, A.Castets. Phys.Rev., B5, 4603 (1972).
11. В.А.Матвеев. ЖЭТФ, 65, 1626 /1973/.
12. R.J.Birgeneau. Can. J. Phys., 45, 3761 (1976).

*Рукопись поступила в издательский отдел
3 сентября 1976 года.*