

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



267/2-79

P17 - 11978

Ф - 855

715/2-79

Т.Фрауенхайм, Ю.Шрейбер

К САМОСОГЛАСОВАННОМУ ПРИБЛИЖЕНИЮ  
ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ ДЛЯ СИСТЕМ  
СО СЛОЖНЫМИ УРОВНЯМИ  
И МАГНИТНЫМ ОБМЕНОМ

**1978**

P17 - 11978

Т.Фраунхайм, Ю.Шрейбер

К САМОСОГЛАСОВАННОМУ ПРИБЛИЖЕНИЮ  
ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ ДЛЯ СИСТЕМ  
СО СЛОЖНЫМИ УРОВНЯМИ  
И МАГНИТНЫМ ОБМЕНОМ

*Направлено в журнал "Физика металлов и металло-*  
*ведение"*

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Фрауенхайм Т., Шрейбер Ю.

P17 - 11978

К самосогласованному приближению хаотических фаз  
для систем со сложными уровнями и магнитным обменом

Исследуется возможность построения самосогласованной теории в приближении хаотических фаз для модели металлических редкоземельных соединений. С помощью численных расчетов показано, что обычный подход вычисления параметра порядка на основе правил сумм в этом случае не подходит.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Frauenheim T., Schreiber J.

P17 - 11978

On a Self-Consistent Random Phase Approximation  
for Systems with a Complicated Level Structure  
and Magnetic Exchange

The possibility is considered to construct a self-consistent RPA-theory for a model of metallic rare-earth compounds. With the help of numerical results it is shown that the conventional method of determination of the order parameter by applying sum rules fails to work in this case.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna 1978

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Металлические редкоземельные соединения, в которых кристаллическое поле приводит к сложной структуре энергетических уровней, обладают интересными электронными и магнитными свойствами. Последнее время в таких системах особенно интенсивно исследуется магнитный фазовый переход /ФП/. Развита ряд модельных представлений, которые основаны на теории кристаллического поля, включая магнитный обмен. В этих теориях до сих пор использовано только приближение молекулярного поля /ПМП/ и несамосогласованное приближение хаотических фаз /ПХФ/ <sup>2,3/</sup>.

Чтобы лучше понять динамику ФП, особенно взаимоотношение между центральным пиком и мягкой модой, необходимо построить самосогласованную теорию <sup>3/</sup>. Целью этой работы является выяснение возможности самосогласовать развитие в работе <sup>3/</sup> ПХФ на основе правил сумм для спиновых операторов <sup>4/</sup>. В изотропной модели Гейзенберга подход успешно применяется <sup>4/</sup>. Но, с другой стороны, известно, что в рамках ПХФ для модели Изинга в поперечном поле обычный способ вычисления параметра порядка  $\langle J^z \rangle$  не подходит <sup>5,6/</sup>. Это связано с тем, что правила сумм как тождества не являются условиями равновесия <sup>6/</sup>. Очевидно, эти трудности особенно проявляются в анизотропных системах /см. и <sup>7/</sup>/. Поэтому следовало ожидать, что и в исследуемой модели металлических редкоземельных соединений <sup>3/</sup> появляются подобные проблемы вычисления  $\langle J^z \rangle$  при использовании правила сумм.

Сделанные численные расчеты подтверждают это. Подробно рассмотрены причины, из-за которых обычная процедура самосогласования не подходит для ПХФ, предложенного в работе /3/.

## 2. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ПХФ

Кристаллическое поле и магнитный обмен, встречающийся в редкоземельных металлах, принято описывать с помощью следующего гамильтониана /2,3/:

$$H = \sum_i H_{\text{КП}}(i) - \sum_{ij} I_{ij} \vec{J}_i \vec{J}_j, \quad /1/$$

где  $\vec{J}_i$  - оператор полного момента;  $H_{\text{КП}}$  - гамильтониан кристаллического поля - имеет стандартный вид /2,3/, и мы для краткости его здесь не приводим.

В качестве примера исследуем соединение  $\text{Pr}_3\text{Tl}$ , где ионы  $\text{Pr}^{3+}$  / $J=4$ / имеют кубическую окрестность. В кристаллическом поле вырожденное основное состояние  $^3H_4$  расщепляется на  $\Gamma_1$ -синглет,  $\Gamma_4$ -триплет,  $\Gamma_3$ -дублет,  $\Gamma_5$ -триплет /соответствующие энергии: 0,  $\Delta$   $12/7\Delta$  и  $\Delta$  /3/. В дальнейшем удобно в /1/ отделить одноионную часть от двухионной:

$$H = H_1 + H_2,$$

$$H_1 = \sum_i H_{\text{КП}}(i) + N \cdot I(0) \langle J^z \rangle^2 - 2 \sum_i I(0) \langle J^z \rangle J_i^z, \quad /2/$$

$$H_2 = - \sum_{ij} I_{ij} \delta \vec{J}_i \delta \vec{J}_j, \quad \delta \vec{J}_i = \vec{J}_i - \langle J^z \rangle \vec{e}_z,$$

/ $\vec{e}_z$  - единичный вектор в  $z$ -направлении/. После диагонализации  $H_1$  принимает следующий вид:

$$H_1 = \sum_{i,n} E_n(i) c_n^+(i) c_n(i), \quad /3/$$

где  $c_n^+(i)$  и  $c_n(i)$  - операторы рождения и уничтожения одноионных состояний  $|n\rangle$  на узле  $i$  и  $E_n(i)$  -

соответствующие энергии уровней. Тогда оператор  $\vec{J}_i$  можно представить в виде

$$\vec{J}_i = \sum_{m,n} \langle m | \vec{J}_i | n \rangle c_m^+(i) c_n(i). \quad /4/$$

В простейшем приближении /ПМП/  $H_2$  пренебрегают и параметр порядка  $\langle J^z \rangle$ ,

$$\langle J^z \rangle = \sum_n \langle n | J^z | n \rangle e^{-\beta E_n} / Z, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad /5/$$

получают на основе /4/ /2/. Однако использование отношения /4/ для определения  $\langle J^z \rangle$  в ПХФ не выходит за рамки ПМП /3,9/. Поэтому попытаемся вычислить  $\langle J^z \rangle$  на основе правил сумм, чтобы учесть флуктуации параметра порядка самосогласованным образом. Имеется следующая система уравнений /4/:

$$\langle (J^z)^n J^- J^+ \rangle = J(J+1) \langle (J^z)^n \rangle - \langle (J^z)^{n+1} \rangle - \langle (J^z)^{n+2} \rangle$$

и  $/6/$

$$\prod_{r=-J}^J (J^z - r) = 0; \quad n = 0, 1, \dots, 2J - 1.$$

Из-за сложности исследуемой системы с моментом  $J=4$  технически невозможно решить полную систему уравнений /6/. Рассмотрим такое приближение, в котором учитываются только квадратичные флуктуации параметра порядка, т.е.  $\langle (\delta J^z)^a \rangle = 0, \quad a \geq 3$ . Затем из формул /6/ получаем

$$\begin{aligned} \langle J^z \rangle &= \langle J^- J^+ \rangle (1 + 3 \langle J^z \rangle) - \langle J^z J^- J^+ \rangle + \\ &+ 2 \langle J^z \rangle^3 + 3 \langle J^z \rangle^2 - 20 / 39. \end{aligned} \quad /7/$$

Корреляционные функции, которые входят в это уравнение, вычислим с помощью следующих функций Грина /ФГ/:

$$G_{ij}^{+z-}(t) = \langle\langle J_i^+(t), (J_j^z(0))^n J_j^-(0) \rangle\rangle =$$

$$= -i\theta(t) \langle [J_i^+(t), (J_j^z(0))^n J_j^-(0)] \rangle$$

/8/

на основе метода уравнения движения /3,9/. Для этого необходимо знать коммутационные отношения между  $c$ -операторами, относящимися к конечному набору атомных уровней. В предыдущих работах /3,9/ принято рассматривать  $c$ -операторы приближенно как ферми-операторы, т.е.  $[c_n^+, c_m] = \delta_{nm}$ . Здесь также применяем этот подход. Тогда вычисление ФГ /8/ проводится аналогично тому, как в теории зонного ферромагнетизма /10/.

Оставаясь в рамках теории первого порядка /ПХФ/, необходимо сделать следующие приближения:

i. Корреляционные функции в неоднородном члене уравнения движения расцепим в соответствии с теоремой Вика /11/. Оставшиеся величины  $\langle c_n^+ c_m^+ \rangle$  можно вычислить из ФГ  $\langle\langle c_m^+, c_n^+ \rangle\rangle$ . В приближении первого порядка следует  $\langle c_n^+ c_m^+ \rangle \approx \langle c_n^+ c_n^+ \rangle \delta_{nm} = f_n \delta_{nm}$ , где  $f_n = 1/(e^{\beta E_n} + 1)$ . Однако этот результат ошибочен, например,  $\sum_n f_n \neq 1$ . Уже здесь видно, что применение

фермиевских коммутационных отношений для  $c_n^+$  и  $c_m$  не подходит для самосогласованного улучшения ПМП. Чтобы получить по крайней мере /хотя бы/ частичное самосогласование, при определении  $\langle J^z \rangle$  вычислим

$$f_n \text{ в ПМП: } f_n = e^{-\beta E_n} / Z.$$

ii. Таким же образом, как корреляционные функции, расщепляются и ФГ высшего порядка, т.е. в уравнении движения проведем замену

$$c_m^+(i) c_n(i) c_r^+(j) c_s(j) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow f_m \delta_{nm} c_r^+(j) c_s(j) + f_r \delta_{rs} c_m^+(i) c_n(i).$$

/9/

В результате этого фурье-образ поперечной ФГ принимает вид

$$G^{+-}(q, \omega) = \frac{g^{+-}(\omega)}{1 - I_q g^{+-}(\omega)},$$

/10/

где одноионная ФГ

$$g^{+-}(\omega) = \sum_{mn} \frac{J_{mn}^+ J_{mn}^- (f_m - f_n)}{\omega - \omega_n + \omega_m + i\epsilon}.$$

/11/

Для  $G^{+z-}(q, \omega)$  получаем

$$G^{+z-}(q, \omega) = \frac{g^{+z-}(\omega)}{1 - I_q g^{+z-}(\omega)},$$

/12/

с одноионной ФГ

$$g^{+z-}(\omega) = \sum_{mnp} \{ J_{mn}^+ J_{nm}^- J_{pp}^z - J_{mn}^+ J_{np}^- J_{pm}^z -$$

$$- J_{mn}^+ J_{pm}^- J_{np}^z \} f_p (f_m - f_n) / (\omega - \omega_n + \omega_m + i\epsilon).$$

/13/

С помощью спектрального представления корреляционные функции вычисляются по формуле

$$\langle (J_i^z)^n J_i^- J_i^+ \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{q,\nu} \frac{1}{e^{\beta \omega_{q,\nu}} - 1} g^{+z-}(\omega_{q,\nu}) \left. \frac{\partial g^{+z-}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_{q,\nu}} I_{q,\nu}$$

/14/

$\omega_{q,\nu}$  - полюсы ФГ в /10/ и /12/, где  $\nu$  обозначает номер полюсов. Суммирование по  $q$  проводится следующим образом:

$$\frac{1}{N} \sum_q f(I_q / I(0)) = \int_{-1}^1 dx \rho_0(x) f(x),$$

/15/

где  $\rho_0(x)$  - плотность состояния относительно величины  $I_q$ . Для простоты исследуется модельный случай, когда  $I_{ij} \neq 0$  только для ближайших соседей и решетка простая кубическая.

Существенное упрощение численных расчетов получается, если учесть дисперсию  $I_q \neq 0$  только для переходов между четырьмя низкими уровнями /синглет-триплет-система/. Это упрощение оправдывается, если ограничиться низкими температурами.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сначала проверим, каким образом сделанные в разделе 2 приближения влияют на результат ПМП / $I_q=0$ / для модели Гейзенберга / $H_{\text{КП}}=0$ /. Для этого анализируем в численном виде уравнения /5/ /рис. 1 - кривая 1/

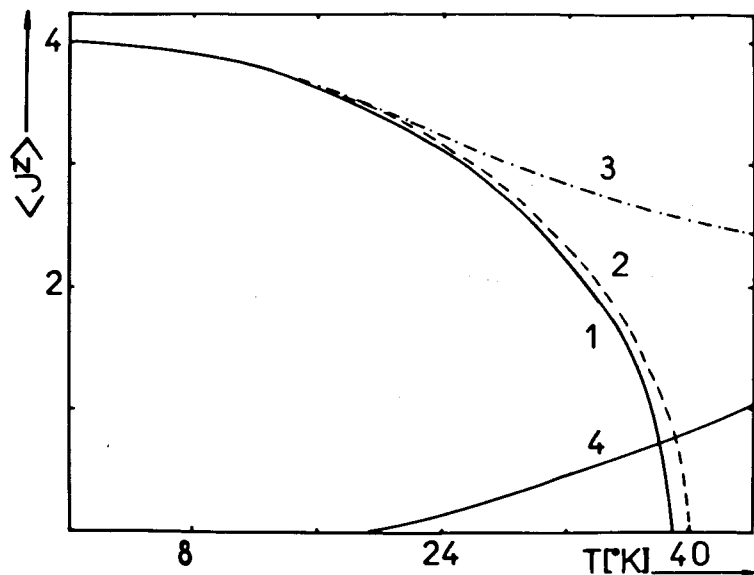


Рис.1. Температурная зависимость параметра порядка  $\langle J^z \rangle$  для модели Гейзенберга: кривая 1 - ПМП из уравнения /5/; кривая 2 - ПМП из уравнения /7/, ФГ получены в приближении Тябликова; кривая 3 - ПМП из /7/, ФГ из /10/ и /12/; кривая 4 - отклонение в первом моменте ФГ  $\Delta_1$ .

и /7/. Корреляционные функции определяем в двух видах:  
i. Из ФГ в приближении Тябликова и в случае  $I_q=0$  /рис. 1 - кривая 2/;  
ii. Из ФГ /10/ и /12/ при  $H_{\text{КП}}=0$  и  $I_q=0$  /рис. 1 - кривая 3/.

Из сравнения результатов уравнения /5/ и /7/ в случае i следует, что флуктуации выше квадратических существенны только в окрестности точки Кюри  $T_C$ . Поскольку изменение  $T_C$  мало, можно считать, что уравнение /7/ представляет довольно хорошее приближение.

При использовании способа ii получаются большие отклонения от результатов ПМП /уравнения /5//. Это объясняется тем, что применялись неправильные коммутационные отношения для  $s$ -операторов. Для ферми-операторов расщепление корреляционных функций было бы точно в рамках ПМП. Однако  $s$ -операторы имеют более сложную структуру, похожую на структуру спиновых операторов. Следовательно, расщепление приводит уже в ПМП к отклонениям в первом моменте ФГ  $G^{+-}(q, \omega)$  и  $G^{+z-}(q, \omega)$ , т.е.

$$2\langle J^z \rangle - \sum_{mn} J_{mn}^+ J_{nm}^- (f_m - f_n) = \Delta_1 \neq 0,$$

$$2\langle J^z \rangle^2 - \langle J^z \rangle + \frac{1}{2} - \sum_{mnp} \{ J_{mn}^+ J_{nm}^- J_{pp}^z -$$

$$- J_{mn}^+ J_{np}^- J_{pm}^z - J_{mn}^+ J_{pm}^- J_{np}^z \} f_p (f_m - f_n) = \Delta_2 \neq 0.$$

На рис. 1 /кривая 4/ приведено также температурное поведение  $\Delta_1$ , что показывает наглядно, почему в способе ii появляются такие большие ошибки.

Результаты для случая  $H_{\text{КП}} \neq 0$  представлены на рис. 2 /кривая 1 соответствует уравнению /5/ и кривая 2 - уравнению /7/, решаемому по методу ii /. Большое значение величины  $\Delta_1$  /рис. 2 - кривая 4/ может объяснить, почему и в этом случае из правил сумм получается столь неправильный ответ для  $\langle J^z \rangle$ . С другой стороны, отброшенные флуктуации

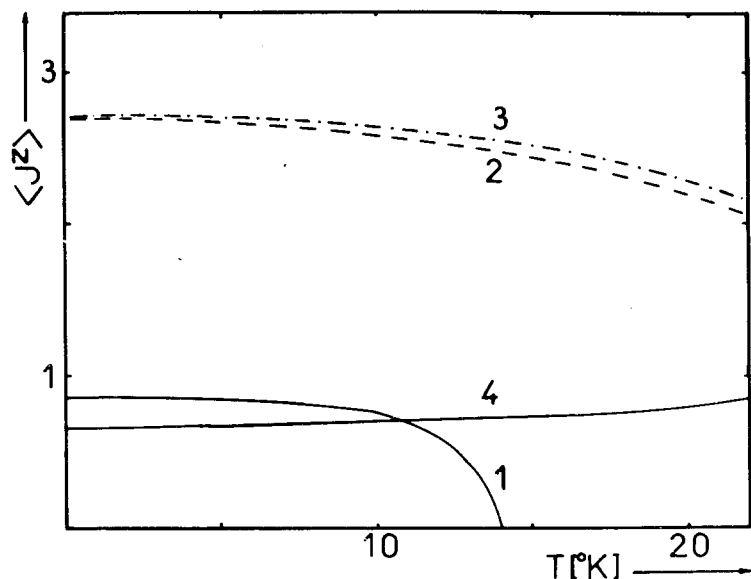


Рис.2. Температурная зависимость  $\langle J^z \rangle$  в модели /1/: кривая 1 - ПМП из уравнения /5/; кривая 2 - ПМП из /7/, ФГ из /10/ и /12/; кривая 3 - ПХФ из /7/; кривая 4 - отклонение в первом моменте ФГ  $\Delta_1$ .

в уравнении /7/ могут влиять на этот результат больше, чем в случае  $H_{\text{КП}} = 0$ , поскольку  $\langle J^z \rangle$  при всех температурах намного меньше насыщенного значения.

Как отмечалось во введении, при  $H_{\text{КП}} \neq 0$  способ вычисления  $\langle J^z \rangle$  на основе правил сумм, возможно, является физически неправильным. Например, для модели Изинга в поперечном поле этот подход учитывает флуктуации параметра порядка в ПХФ нефизически, т.е.  $\langle J^z \rangle_{\text{ПХФ}} > \langle J^z \rangle_{\text{ПМП}}$  /5,6/. Такой же результат получаем и в нашей модели при  $H_{\text{КП}} \neq 0$ . Включая  $I_q \neq 0$  для синглет-триплет-системы, чем учитываются дополнительные флуктуации параметра порядка относительно ПМП, при всех температурах  $\langle J^z \rangle$  лежит выше значения ПМП /рис. 2 - кривая 3/.

Использованные приближения, особенно замена с-операторов на фермиевские, могут модифицировать результат ПХФ. Несмотря на это, можно сделать вывод,

что в исследованной модели применение правил сумм для вычисления  $\langle J^z \rangle$ , наверное, не подходит. Следовательно, единственным физическим способом определения параметра порядка является минимизация свободной энергии, которую можно вычислить с помощью ФГ /5/. Самосогласованное ПХФ должно быть построено на такой основе.

Авторы признательны Н.М.Плакиде и В.А.Аксенову за ценные обсуждения и замечания.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Taylor K.N.R. *Adv.Phys.* 1971, 20, p. 551.
2. Fulde P., Peschel I. *Adv.Phys.* 1972, 21, p. 1.
2. Bak P. *Riso Report No. 312*, 1974.
3. Buyers W.J.L., Holden T.M. *Phys.Rev.* 1975, B11, p. 266; *AIP Conference Proceedings*, 1974, 24, p.27.
4. Tahir-Kheli R.A., ter Haar D. *Phys.Rev.* 1962, 127, p. 88; Тябликов С.В. *Методы квантовой теории магнетизма*. "Наука", М., 1975.
5. Аксенов В.Л., Конвент Г., Шрайбер Ю. *ОИЯИ*, P17-11369, Дубна, 1978.
6. Aksionov V.L., Konvent H., Schreiber J. *phys.stat. sol. (b)*, 88, K43; *JINR*, E17-11359, Dubna, 1978.
7. Онуфриева Ф.П. *Журнал Физика низк.темп.* 1977, 3, с. 1050.
8. Birgeneau R.J., Als-Nielsen J., Buscher E. *Phys. Rev.Lett.* 1971, 27, p. 1530.
9. Buyers W.J.L., Holden T.M. *Phys.Rev.* 1974, B9, p. 3797.
10. Cooke J.F. *Phys.Rev.* 1973, B7, p. 1108.
11. Bloch C., de Dominicis C. *Nucl.Phys.*, 1958, 7, p. 459.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 октября 1978 года.