Вычисление парамагнитной восприимчивости редкоземельных соединений на основе контурного интегрирования и метода функций Грина

А. М. Савченко[1a], Е. М. Сорокина[2]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2. E-mail: [a] a.m.savchenko@gmail.com.* [2] *Московский государственный университет приборостроения и информатики, кафедра высшей математики*

Статья поступила 30.11.2008, подписана в печать 03.01.2009.

На основе микроскопической теории сложных соединений исследуется парамагнитная восприимчивость соединений редкоземельных металлов типа $\mathrm{Er}_{1-x}\mathrm{Ho}_x\mathrm{Rh}_4\mathrm{B}_4$. Показано, что обратная статистическая восприимчивость таких систем подчиняется закону Кюри–Вейсса, причем температура Кюри определяется обменным взаимодействием в самосогласованном приближении. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Ключевые слова: парамагнитная восприимчивость, контурное интегрирование, метод функций Грина.
УДК: 530.10. PACS: 75.20.–g.

В работе [1] была предложена микроскопическая теория сложных соединений редкоземельных металлов. Данная теория в дальнейшем нашла свое продолжение во флуктуационной теории магнитных систем, развитой в работах [2–5]. Из построенной микроскопической теории следует, что фазовые переходы между соответствующими состояниями оказываются фазовыми переходами второго рода. Однако в теории не были учтены длинноволновые термодинамические флуктуации, которые нарастают вблизи точек фазовых переходов. Вблизи линий фазовых переходов флуктуации сверхпроводящей компоненты возрастают, так как вместе со сверхпроводящей компонентой флуктуируют и волны спиновой плотности.

В настоящей работе показано, как данная теория может быть использована для вычисления восприимчивости сложных магнитных систем, в частности редкоземельных соединений. Рассмотрим флуктуации спиновой и зарядовой плотности, которые определяют поведение системы как в парамагнитной, так и в упорядоченных фазах [3]. Будем исследовать модель коллективизированных электронов, которые взаимодействуют между собой, а также с кристаллической решеткой и полем неупорядоченной системы электронных спинов $\hat{A}_\nu(\boldsymbol{x})$ [5].

В парамагнитной фазе магнитный порядок отсутствует, и спины электронов распределены хаотично. Так как электроны в нашей модели предполагаются коллективизированными, то пространственное распределение их спинов непрерывно меняется. Следовательно, можно предположить, что неупорядоченная система спинов флуктуирует и поэтому поле $\hat{A}_\nu = \hat{A}^0_\nu + \Delta\hat{A}_\nu$ описывает также флуктуации неупорядоченной системы спинов. В рассматриваемой модели распределение спинов электронов связано с пространственным распределением их зарядов. Тогда это означает, что флуктуации спиновой плотности ($\Delta\hat{A}_\nu$) неразрывно связаны с флуктуациями зарядовой плотности.

Гамильтониан рассматриваемой модели коллективизированных электронов, взаимодействующих с полем $\hat{A}_{nu}$ и с кристаллической решеткой, имеет вид [1]

$$\mathcal{H} = \mathcal{N}\,\mathrm{Tr}\int d\boldsymbol{x}\Bigg[\frac{1}{\mathcal{N}}\hat{T}e^{\left(\oint_\Gamma \hat{A}_\nu\,dx_\nu\right)}\Bigg[\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x})\frac{1}{2\mu_e}\hat{P}^2_{\boldsymbol{x}}\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}g_{ph}(\boldsymbol{x})\sum_{i,\kappa} e^2_{i,\kappa}\hat{b}^+_{i,\kappa}(\boldsymbol{x})\hat{\xi}_\kappa(\boldsymbol{x})\hat{b}_{i,\kappa}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x})\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})\Bigg]\times$$
$$\times\frac{1}{\mathcal{N}}\hat{T}e^{\left(\oint_\Gamma \hat{A}^+_\nu\,dx_\nu\right)} + \frac{1}{\mathcal{N}}\left(\left(\frac{\delta}{\delta s_{\mu\nu}}\right)^2 + I(\Gamma)\right)\hat{B}(\Gamma)\Bigg] +$$
$$+\frac{1}{2}\mathcal{N}\,\mathrm{Tr}\int d\boldsymbol{x}\,d\boldsymbol{x}'\Bigg[\frac{1}{\mathcal{N}}\hat{T}e^{\left(\oint_\Gamma \hat{A}_\nu\,dx_\nu\right)}\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^+_\beta(\boldsymbol{x}')\times$$
$$\times V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})\frac{1}{\mathcal{N}}\hat{T}e^{\left(\oint_\Gamma \hat{A}^+_\nu\,dx_\nu\right)}\Bigg],$$

где $\hat{A}_\nu = \frac{i}{2}\sum\limits_{\gamma=1}^{\mathcal{N}^2-1}\hat{\tau}^\gamma A^\gamma_\nu + \Delta\hat{A}_\nu$, $\hat{\tau}^\gamma$ — матрицы Паули, $\hat{\psi}^+_\alpha(\boldsymbol{x})$, $\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x})$, $\hat{b}^+_{i\kappa}(\boldsymbol{x})$, $\hat{b}_{i\kappa}(\boldsymbol{x})$ — операторы рождения и уничтожения электронов и фононов, $\hat{P}_{x_\nu} = \hat{\tau}_0\nabla_\nu - \left[\hat{A}_\nu,\right]$, $\hat{B}(\Gamma) = \frac{1}{\mathcal{N}}\hat{T}e^{\left(\oint_\Gamma \hat{A}_\nu\,dx_\nu\right)}$, $\frac{\delta}{\delta s_{\mu\nu}}$ — вариационная производная по приращению площади контура Γ.

Введем функции Грина электронов и фононов

$$G_{\alpha\beta}(\boldsymbol{x},\tau|\Gamma|\boldsymbol{x}',\tau') = \langle\hat{T}\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x},\tau)\,\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma)\hat{\psi}^+{}_\beta(\boldsymbol{x}',\tau')\rangle,$$
$$D_{ik\kappa\kappa'}(\boldsymbol{x},\tau|\Gamma|\boldsymbol{x}',\tau') = \langle\hat{T}\hat{b}_{i\kappa}(\boldsymbol{x},\tau)\,\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma)\hat{b}^+{}_{k\kappa'}(\boldsymbol{x}',\tau')\rangle.$$

Используя уравнения движения для функций Грина и полевого оператора $\hat{B}(\Gamma)$ [1], можно записать выражение для полной плотности заряда в системе

$$4\pi\rho_{\mathrm{tot}}(\boldsymbol{x}) = \frac{\pi}{2}\mathcal{N}^2\int\limits_{\Gamma+\kappa} dx'_0\,\delta(x-x')\times$$
$$\times\int\limits_{-\kappa\in\Gamma}\frac{D\kappa}{2\pi C_\kappa}\Big[\langle\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma)\,\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\kappa)\rangle - \langle\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma+\kappa)\rangle\Big] -$$
$$-\frac{i}{4}\mathcal{N}^2\lim_{\boldsymbol{x},\tau\to\boldsymbol{x}',\tau'}\int\limits_{-\kappa\in\Gamma}\frac{D\kappa}{2\pi C_\kappa}\Big(\nabla_{x'_0} - \nabla_{x_0}\Big)G_{\gamma\kappa}(\boldsymbol{x},\tau|\varepsilon|\boldsymbol{x}',\tau')\times$$
$$\times e^{\int_\kappa dx'_{\nu'}\,p_{0\nu'}[\kappa]}\Big[\langle\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma+\kappa)\rangle - \langle\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\Gamma)\,\mathrm{Tr}\,\hat{B}(\kappa)\rangle\Big],$$

из которого следует интегральное соотношение для обратной диэлектрической проницаемости системы

$$\varepsilon^{-1}_\kappa(\boldsymbol{P}|\Gamma) = 1 + 2\frac{T}{\varepsilon_F}\langle\mathrm{ch}(\pi l_\kappa p_{\perp 0})\rangle_{\rho(p_{\perp 0})}\times$$

$$\times \left(1 - \langle y_\kappa [1 - f(y_\kappa)]\rangle_{\rho(\kappa)}\right) - \frac{i}{\pi}\langle \mathrm{ch}(\pi l_\kappa p_{\perp 0})\rangle_{\rho(p_{\perp 0})} \times$$

$$\times \sum_\omega \omega \left\langle \int\limits_{-\kappa_1 \in \Gamma} \frac{D\kappa_1}{2\pi C_\kappa} \langle \mathrm{Tr}\, \hat{B}(\kappa_1)\rangle^2 \frac{\mathrm{Im}(\varepsilon^{-1}_{\gamma\gamma\omega\kappa}(\boldsymbol{p}|\kappa_1))}{y^2_{\kappa_1} + \beta^2\omega^2} \right\rangle_{\rho(\kappa)}, \quad (1)$$

где $y_\kappa = \beta[\omega_\kappa(\boldsymbol{p}) + \tilde{\mu}_\kappa(\Delta p_{0\nu})]$, $\beta = 1/T$, $\omega_\kappa(\boldsymbol{p})$ — частота электронного спектра, $f(y_\kappa) = (1+e^{y_\kappa})^{-1}$, $\tilde{\mu}_\kappa(\Delta p_{0\nu})$ — эффективный химический потенциал, учитывающий флуктуации плотности спина и заряда. Выражение (1) позволяет вычислить диэлектрическую проницаемость системы $\varepsilon_\kappa(\boldsymbol{p}|\Gamma)$ в парамагнитной области, на основе которой удается определить парамагнитную восприимчивость системы

$$\chi^{-1}(\boldsymbol{p}|\Gamma) = \left[\frac{\mu_0^2}{\chi_{0s}} \left\langle \frac{A(\Gamma|\varepsilon_F)}{1 + A(\Gamma|\varepsilon_F)B(\boldsymbol{p}|\Gamma)} \right\rangle_{\rho(\kappa)}\right]^{-1} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{1}{\langle\rho\rangle^2}\frac{\mu_0^2}{\chi_{0s}} \left\langle \frac{A(\Gamma|\varepsilon_F)Q(\varepsilon_F)}{[1 + A(\Gamma|\varepsilon_F)B(\boldsymbol{p}|\Gamma)]^2} \right\rangle_{\rho(\kappa)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\langle\rho\rangle^2}\frac{T}{T_{C_0}} \left\langle \frac{A(\Gamma|\varepsilon_F)Q(\varepsilon_F)}{[1 + A(\Gamma|\varepsilon_F)B(\boldsymbol{p}|\Gamma)]^2} \right\rangle_{\rho(\kappa)}\right]. \quad (2)$$

В этом выражении $A(\Gamma|\varepsilon_F) = \langle \mathrm{Tr}\, \hat{B}(\Gamma)\rangle^2 \langle \mathrm{ch}(\pi l_\kappa p_{\perp 0})\rangle_{\rho(p_{\perp 0})} \times \nu(\varepsilon_F) f[y_\kappa(\varepsilon_F)]$, $\nu(\varepsilon_F)$ — плотность состояний на поверхности Ферми. Тогда $\chi_{0s} = \mu_0^2 \langle A(\Gamma|\varepsilon_F)\rangle_{\rho(\kappa)}$ — восприимчивость Паули коллективизированных электронов, находящихся в поле $\hat{A}_\nu$, при этом $Q(\varepsilon_F) = \frac{\varepsilon_F}{\nu(\varepsilon_F)} \frac{\partial \nu(\varepsilon_F)}{\partial \varepsilon_F}$, при этом $a^2\langle\rho\rangle^2 = \left\langle \int d(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2) \frac{(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)^2\, \mathrm{Tr}\, \hat{J}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|\Gamma_{\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2})}{\left\langle \int d(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2)\, \mathrm{Tr}\, \hat{J}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|\Gamma_{\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2})\right\rangle} \right\rangle$ — обменный радиус корреляции флуктуаций в системе электронных спинов [5]. $B(\boldsymbol{p}|\Gamma) = V(\boldsymbol{p}|\Gamma)G(\boldsymbol{p}|\Gamma)$, где $V(\boldsymbol{p}|\Gamma)$ — эффективный кулоновский потенциал, а $G(\boldsymbol{p}|\Gamma)$ — функция, которая определяется обменно корреляционными эффектами в электронной подсистеме и взаимодействием электронов с кристаллической решеткой. Из формулы (2) можно легко видеть, что обратная статистическая восприимчивость системы подчиняется закону Кюри–Вейсса [6], причем величина T_{C_0} представляет собой затравочную температуру Кюри, определяемую обменным взаимодействием $\hat{J}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|\Gamma_{\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2})$ в самосогласованном приближении. Истинная же температура Кюри определяется из условия $\chi^{-1}(0|\Gamma) = 0$.

Выражение (2) может быть использовано для объяснения экспериментальных данных, полученных при исследовании температурной зависимости восприимчивости сложных соединений редкоземельных металлов, типа $\mathrm{Er}_{1-x}\mathrm{Ho}_x\mathrm{Rh}_4\mathrm{B}_4$ [7, 8]. Действительно, в области достаточно высокой концентрации ионов Ho, $x \approx 0.8 \div 1.0$, $\chi_{\mathrm{exp}} \simeq 0.5 \div 1.5$ численные значения χ_{theor} составляют вблизи точки фазового перехода при $T > T_C$ величины 0.585, 0.8, 1.13, что близко к экспериментальным значениям.

Интересно отметить, что в данной области температур величина диэлектрической проницаемости системы $\varepsilon_\kappa(\boldsymbol{p}|\Gamma)$ оказывается отрицательной, что позволяет оценить восприимчивость системы при $T < T_C$ в упорядоченной фазе, которая при $x = 0.813$ оказывается порядка $\chi_{\mathrm{exp}} \approx -0.9$, $\chi_{\mathrm{theor}} \approx -0.8$, что также близко к экспериментальному значению.

Следовательно, предложенная микроскопическая теория позволяет описывать поведение сложных магнитных систем не только в упорядоченных фазах, но и в парамагнитной области, что свидетельствует о сильном влиянии флуктуаций на физические свойства системы во всех фазах. Этот вывод совпадает с результатами феноменологической теории фазовых переходов в сложных соединениях редкоземельных элементов.

Список литературы

1. *Savchenko M.A., Stephanovich A.V.* // Sol. State. Commun. 1981. **39**. P. 725.
2. *Савченко М.А., Стефанович А.В.* Флуктуационная сверхпроводимость магнитных систем. М., 1986.
3. *Sadovnikov B.I., Savchenko A.M.* // Physica A. 1999. **271**. P. 411.
4. *Sadovnikova M.B., Savchenko A.M., Scarpetta G.* // Phys. Lett. A. 2000. **274**. P. 236.
5. *Savchenko M.A., Stefanovich A.V.* Fluctuational Superconductivity of Magnetic Systems. Springer-Verlag, 1990.
6. *Johnston D.C., Fertig W.A., Maple M.B.* // Sol. State. Commun. 1978. **26**. P. 141.
7. *Ku H.C., Braun H.F., Acker F.* // Physica C. 1981. **108**. P. 1231.
8. *Chang L.J., Tomy C.V., Paul D.M.* // Phys. Rev. B. 1996. **54**. P. 9031.

Rare-earth compounds paramagnetic susceptibility calculations based on the contour integration and Green function method

A. M. Savchenko[1a], **E. M. Sorokina**[2]

[1] *Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

[2] *Department of Higher Mathematics, Moscow State University of Instrument Engineering and Informatics, Stromynka Str., Moscow 107996, Russia.*

E-mail: [a] *a.m.savchenko@gmail.com.*

The paramagnetic susceptibility of magnetic systems is calculated with the help of the microscopic theory of complex magnetic systems $\mathrm{Er}_{1-x}\mathrm{Ho}_x\mathrm{Rh}_4\mathrm{B}_4$. It is shown that inverse static susceptibility will comply with the Curie–Weiss law and the Curie temperature is defined by exchange interaction in self-consistent approximation. These results are compared to the experimental data.

Keywords: paramagnetic susceptibility, contour integration, Green function method.

PACS: 75.20.–g.

Received 30 November 2008.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 3(2009).

Сведения об авторах

1. Савченко Александр Михайлович — к. ф.-м. н., доцент, ст. преподаватель; e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.
2. Сорокина Елена Михайловна — к. ф.-м. н., доцент; тел.: 155-32-33.