Теоретико-групповой подход анализа плотности состояний в неупорядоченной магнитной системе кубической структуры

Мироненко Л. П.
Донецкий национальный технический университет

Незважаючи на комплексні дослідження властивостей магнітоупорядкованих систем, що здійснюються не одне десятиліття, напрямок вивчання впливу невпорядкованості на спектр елементарних збуджень у комплексу феромагнітних атомів є одним із найбільше перспективних. Розрахунок властивостей багатьох неупорядкованих феромагнітних систем, заснованих на гейзенберговской моделі феромагнетизму, зручно проводити, використовуючи метод функцій Гріна. У роботі обчислюються матричні елементи усередненої гриновской функції методом унітарного перетворення, заснованому на симетрії кристала. Для простоти розрахунку розглядається кубічна гратка комплексів феромагнітних атомів у діелектрику аналогічної симетрії.

Несмотря на комплексные исследования свойств магнито-упорядоченных систем, которое осуществляется уже не одно десятилетие, направление изучения влияния неупорядоченности на спектр елементарних возбуждений в феромагнитных материалах остается одним из наиболее перспективных.

Расчет свойств многих неупорядоченных ферромагнитных систем, основанных на гейзенберговской модели ферромагнетизма, удобно проводить, используя метод двухвременных функций Грина [1-2]. В работе вычисляются матричные элементы усредненной гриновской функции методом унитарного преобразования, основанном на учете точечной симметрии кристалла [3-4]. Для простоты расчета рассматривается кубическая решетка комплексов ферромагнитных атомов в диэлектрике аналогичной симметрии.

Для простой кубической решетки в приближении ближайших соседей координационное число $z = 6$ и матрица унитарного преобразования должна быть размерности 7×7. Последнюю можно представить в совокупности прямоугольных матриц

$$T(s)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{6}\end{pmatrix},\ T(p)=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0\\ -1/\sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0\\ 0 & -1/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2}\\ 0 & 0 & -1/\sqrt{2}\end{pmatrix},\ T(d)=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1/\sqrt{3}\\ 0 & 1/\sqrt{3}\\ 1/2 & -1/\sqrt{12}\\ 1/2 & -1/\sqrt{12}\\ -1/2 & -1/\sqrt{12}\\ -1/2 & -1/\sqrt{12}\end{pmatrix} \quad (1)$$

По классификации состояний Бокарта, Смолуховского и Вигнера [4-5] матрица $T(s)$ относится к одномерному представлению Γ_1, $T(p)$ - к трехмерному представлению Γ_{15}, $T(d)$ - к двухмерному Γ_{12}.

Действуя этими матрицами на матрицу возмущения (см. предыдущую статью),

$$V_{lp}(\lambda,\mu,\xi)=-2S\sum_{\Delta} I_{0,0+\Delta}\left\{\gamma_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)(\delta_{0l}\delta_{0+\Delta,p}+\delta_{0+\Delta,l}\delta_{0p})\right\}+$$
$$+2S\sum_{\Delta} I_{0,0+\Delta}\left\{\rho^{(1)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\xi)\delta_{0+\Delta,l}\delta_{0+\Delta,p}+\rho^{(2)}_{0,0+\Delta}(\lambda,\mu)\delta_{0l}\delta_{0p}\right\},$$

получим

$$T^{+}(s)VT(s)=IS\begin{pmatrix}zV_o & -\sqrt{z}V_{01}\\ -\sqrt{z}V_{01} & V_1\end{pmatrix},T^{+}(p)VT(p)=IS\begin{pmatrix}V_1 & 0 & 0\\ 0 & V_1 & 0\\ 0 & 0 & V_1\end{pmatrix}, \quad (2)$$
$$T^{+}(d)VT(d)=IS\begin{pmatrix}V_1 & 0\\ 0 & V_1\end{pmatrix}.$$

Аналогично, действуем матрицами $T(s)$, $T(p)$ и $T(d)$ на $G^o(\omega)$

$$G^o(\omega)=\begin{pmatrix}G^o_{00} & G^o_{01} & G^o_{01} & G^o_{01} & G^o_{01} & G^o_{01} & G^o_{01}\\ G^o_{01} & G^o_{00} & G^o_{12} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13}\\ G^o_{01} & G^o_{12} & G^o_{00} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13}\\ G^o_{01} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{00} & G^o_{12} & G^o_{13} & G^o_{13}\\ G^o_{01} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{12} & G^o_{00} & G^o_{13} & G^o_{13}\\ G^o_{01} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{00} & G^o_{12}\\ G^o_{01} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{13} & G^o_{12} & G^o_{00}\end{pmatrix}, \quad (3)$$

элементы которой выбираются из нумерации атомов первой координационной сферы как показано на рисунке 1 и свойств симметрии кубической решетки. В результате матрица (3) разбивается на группу матриц, соответствующим неприводимым представлениям группы куб O_h :

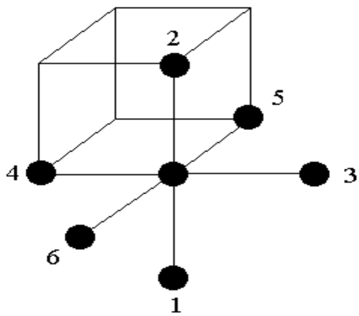

Рис. 1

$$T^{+}(s)G^{o}(\omega)T(s)=\begin{pmatrix} G_{00}^{o} & \sqrt{z}G_{01}^{0} \\ \sqrt{z}G_{01}^{0} & \sum_{i=1}^{z}G_{i1}^{o} \end{pmatrix},$$

$$T^{+}(p)G^{o}(\omega)T(p)=\begin{pmatrix} G_{00}^{o}-G_{12}^{o} & 0 & 0 \\ 0 & G_{00}^{o}-G_{12}^{o} & 0 \\ 0 & 0 & G_{00}^{o}-G_{12}^{o} \end{pmatrix},$$

$$T^{+}(d)G^{o}(\omega)T(d)=\begin{pmatrix} G_{00}^{o}+G_{12}^{o}-2G_{13}^{o} & 0 \\ 0 & G_{00}^{o}+G_{12}^{o}-2G_{13}^{o} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Условие локализованных состояний $\det\left|1-VG^{o}(\omega)\right|=0$ можно представить в виде произведения

$$\prod_{i=s,p,d}\det\left|1-T^{+}(i)G^{o}(\omega)T(i)T^{+}(i)VT(i)\right|=A_{S}(\omega)A_{p}^{2}(\omega)A_{d}^{3}(\omega), \tag{5}$$

где

$$A_{S}(\omega)=1+2ISz\left\{G_{01}^{o}(\omega)2U_{01}-G_{00}^{o}(\omega)U_{0}-U_{1}\frac{1}{z}\sum_{i}G_{i1}^{o}(\omega)\right\}+$$
$$+(2ISz)^{2}\left(U_{1}U_{0}-U_{01}^{2}\right)\cdot\left(G_{00}^{o}(\omega)\frac{1}{z}\sum_{i}G_{i1}^{o}(\omega)-\left[G_{01}^{o}(\omega)\right]^{2}\right), \tag{6}$$

$$A_{p}(\omega)=1-2ISU_{1}\left[G_{00}^{o}(\omega)-G_{12}^{o}(\omega)\right],$$
$$A_{d}(\omega)=1-2ISU_{1}\left[G_{00}^{o}(\omega)+G_{12}^{o}(\omega)-2G_{12}^{o}(\omega)\right]. \tag{7}$$

В выражение $A_{S}(\omega)$ входит величина $\sum_{i}G_{i1}^{o}(\omega)$, которая на основании свойств симметрии кубической решетки может быть выражена через функцию Грина $G_{00}^{o}(\omega)$. Непосредственно из уравнения движения функции Грина (см. предыдущую статью)

$$\omega G^{o}_{nm}(\omega) - 2S\sum_{\Delta} I_{n,n+\Delta}[G^{o}_{nm}(\omega) - G^{o}_{n+\Delta,m}(\omega)] = \delta_{nm},$$

которое запишем в предположении одинаковых обменных констант I для ближайших соседей, матричный элемент $G^{o}_{01}(\omega)$ имеет вид

$$\omega G^{o}_{01}(\omega) - 2IS\sum_{\Delta}[G^{o}_{01}(\omega) - G^{o}_{0+\Delta,1}(\omega)] = 0$$

или

$$\omega G^{o}_{01}(\omega) - 2ISzG^{o}_{01}(\omega) + 2IS\sum_{i=1}^{z} G^{o}_{i1}(\omega) = 0.$$

Откуда

$$\frac{1}{z}\sum_{i=1}^{z} G^{o}_{i1}(\omega) = \left(1 - \frac{\omega}{2ISz}\right) G^{o}_{01}(\omega). \qquad (8)$$

Для оценки $A_S(\omega)$ выразим $G^{o}_{01}(\omega)$ через $G^{o}_{00}(\omega)$, используя свойства кубической симметрии кристалла. Для этого запишем функции $G^{o}_{01}(\omega)$ и $G^{o}_{00}(\omega)$ в приближении сильной связи

$$G^{o}_{00}(\omega) = \frac{a^3}{(2\pi)^3}\prod_{i=x,y,z}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_i \frac{1}{\omega - 2ISz\left\{1 - \frac{2}{z}\sum_{i=x,y,z}\cos(k_i a)\right\}}, \qquad (9)$$

$$G^{o}_{01}(\omega) = \frac{a^3}{(2\pi)^3}\prod_{i=x,y,z}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_i \frac{\frac{2}{z}\sum_{i=x,y,z}\cos(k_i a)}{\omega - 2ISz\left\{1 - \frac{2}{z}\sum_{i=x,y,z}\cos(k_i a)\right\}}, \qquad (10)$$

В дальнейшем, для расчета резонансных и локализованных состояний магнонов приведем гриновские функции $G^{o}_{12}(\omega)$ и $G^{o}_{13}(\omega)$:

$$G^{o}_{12}(\omega) = \frac{a^3}{(2\pi)^3}\prod_{i=x,y,z}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_i \frac{\frac{2}{z}\sum_{i=x,y,z}\cos(2k_i a)}{\omega - 2ISz\left\{1 - \frac{2}{z}\sum_{i=x,y,z}\cos(2k_i a)\right\}}, \qquad (11)$$

$$G_{01}^{o}(\omega)=\frac{a^3}{(2\pi)^3}\prod_{i=x,y,z}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}dk_i\,\frac{\frac{2}{z}\cdot\prod\limits_{i=x,y,z}\cos(\sqrt{2}k_ia)\cdot\cos(\sqrt{2}k_ia)}{\omega-2ISz\left\{1-\frac{2}{z}\sum\limits_{i=x,y,z}\cos(k_ia)\right\}}\,. \qquad (12)$$

Комбинируя формулы (9) и (10), получим

$$G_{01}^{o}(\omega)=\left(1-\frac{\omega}{2ISz}\right)G_{00}^{o}(\omega)+\frac{1}{2ISz}\,. \qquad (13)$$

Анализ выражения $A_S(\omega)$, даваемого формулой (6), в отличие от последующих двух $A_p(\omega)$ и $A_d(\omega)$, более трудоемкий, поэтому выполним следующие преобразования. Подставим (8) в (6), получим

$$A_S(\omega)=1+2ISz\left\{\left(2U_{01}-U_1+U_{01}^2-U_oU_1+U_1\frac{\omega}{2ISz}\right)G_{01}^{o}(\omega)-U_oG_{00}^{o}(\omega)\right\}. \qquad (14)$$

Используя выражение (13), имеем

$$A_S(\omega)=1+U+U_o+U_1\frac{\omega}{2ISz}+2ISz\left\{U+(U_1-U-U_o)\frac{\omega}{2ISz}-U_1\left(\frac{\omega}{2ISz}\right)^2\right\}G_{00}^{o}(\omega), \qquad (15)$$

где $U=2U_{01}-U_1-U_o+U_{01}^2-U_oU_1$. Используя определения (см. предыдущую статью)

$$\rho_{n,n+\Delta}^{(1)}(\lambda,\xi)=\frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\frac{S(\xi)}{S}-1\,,\quad \rho_{n,n+\Delta}^{(2)}(\lambda,\mu)=\frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\frac{S(\mu)}{S}-1\,,$$

$$\gamma_{n,n+\Delta}(\lambda,\xi,\mu)=\frac{I_{n,n+\Delta}(\lambda)}{I_{n,n+\Delta}}\sqrt{\frac{S(\xi)}{S}\frac{S(\mu)}{S}}-1\,.$$

и $U_0=\rho^{(1)}(\lambda,\xi)$, $U_\Delta=\rho^{(2)}(\lambda,\mu)$, $V_{0\Delta}=V_{\Delta 0}=\gamma(\lambda,\xi,\mu)$, $\Delta=1,2,...,z.$, нетрудно убедиться, что U обращается в нуль тождественно. Поэтому

$$A_S(\omega)=1+U_o+U_1\frac{\omega}{2ISz}+2ISz\left\{(U_1-U_o)\frac{\omega}{2ISz}-U_1\left(\frac{\omega}{2ISz}\right)^2\right\}G_{00}^{o}(\omega), \qquad (16)$$

где $U_o(\lambda,\xi)=\frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\xi)}{S}-1$, $U_1(\lambda,\mu)=\frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\mu)}{S}-1$.

Следует обратить внимание на то, что в выражение $A_S(\omega)$, как впрочем и в $A_p(\omega)$ и $A_d(\omega)$, не входят недиагональные элементы матрицы возмущения U_{01}.

В важном частном случае $\xi = \mu$ имеем $U_1 = U_o$ и (2.68) имеет вид

$$A_S(\omega) = 1 + U_o\left(1 + \frac{\omega}{2ISz} - \frac{\omega^2}{2ISz} G_{00}^o(\omega)\right). \qquad (17)$$

Найдем энергию ω_s локального уровня s, исходя из уравнения $\operatorname{Re} A_S(\omega) = 0$

$$1 + U_o + U_1\frac{\omega}{2ISz} + 2ISz\left\{(U_1 - U_o)\frac{\omega}{2ISz} - U_1\left(\frac{\omega}{2ISz}\right)^2\right\}\operatorname{Re} G_{00}^o(\omega) = 0, \qquad (18)$$

где $U_o(\lambda,\xi) = \frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\xi)}{S} - 1$, $U_1(\lambda,\mu) = \frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\mu)}{S} - 1$.

Введем обозначения $\tilde{U}_o = \frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\xi)}{S}$, $\tilde{U}_1 = \frac{I(\lambda)}{I}\frac{S(\mu)}{S}$, тогда $U_o = \tilde{U}_o - 1$, $U_1 = \tilde{U}_1 - 1$ и (18) имеет вид

$$\tilde{U}_o + (\tilde{U}_1 - 1)\frac{\omega}{2ISz} + 2ISz\left\{(\tilde{U}_1 - \tilde{U}_o)\frac{\omega}{2ISz} - (\tilde{U}_1 - 1)\left(\frac{\omega}{2ISz}\right)^2\right\}\operatorname{Re} G_{00}^o(\omega) = 0, \qquad (19)$$

После несложных алгебраических преобразований получим

$$\left(\frac{\omega}{2ISz} - \tilde{U}_o\right)(\omega \operatorname{Re} G_{00}^o(\omega) - 1) + \tilde{U}_1\frac{\omega}{2ISz}\left[1 + (2ISz - \omega)\operatorname{Re} G_{00}^o(\omega)\right] = 0, \qquad (20)$$

откуда в условиях $\tilde{U}_1\frac{\omega}{2ISz} << 1$ решение уравнения (20) имеет вид

$$\omega_S \approx 2ISz\tilde{U}_o = 2z\overline{I(\lambda)}\cdot\overline{S(\xi)}. \qquad (21)$$

Как видно, энергия локального s – уровня имеет билинейную форму от $\overline{I(\lambda)}$ и $\overline{S(\xi)}$. Поскольку $\overline{I(\lambda)} = \alpha' a^2$ и $\overline{S(\xi)} = \alpha a^2$, то $\omega_S \approx 2ISz\tilde{U}_o = 2z\alpha\alpha' a^4$, где a - максимальная величина отклонения размеров комплекса от среднего значения.

Литература

1. Тябликов С.В., Бонч-Бруевич В.Л. Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина. - М.: 1962, Adv. in Phys., 1962, v.11, P.317.
2. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. - М.:ГИФМЛ, 1961. - 312с.
3. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. Основные принципы и простые приложения, т.1. - М.: Мир, 1983. - 364с.
4. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. Дальнейшие приложения, т.2. - М.: Мир, 1983. - 410с.
5. Бир Г.Л. Пикус Г.Э. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках -М.:Наука, 1972. - 584 с.