1991 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 33, № 7
1991 SOLID STATE PHYSICS Vol. 33, N 7

ОПИСАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ С $S=1$ С УЧЕТОМ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ИЗОТРОПНОГО ОБМЕНА

В. М. Калита

Описано влияние негейзенберговского изотропного обмена на ферромагнитные свойства системы с локализованными магнитными моментами $s=1$. Показано, что в основном состоянии возможны два типа магнитного порядка, определяемого величиной магнитного момента узла. Показано, что эффективный спин узла может зависеть от температуры и величины внешнего магнитного поля, в связи с чем при $T\neq 0$ возможен фазовый переход второго рода из состояния, когда эффективный спин меньше единицы, в состояние, когда эффективный спин узла равен единице. В рамках данной модели возможно объяснение максимумов на кривых намагниченности в зависимости от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля для соединений типа $Th_xU_{1-x}S$.

Описание изотропных магнетиков с локализованными магнитными моментами, обменное взаимодействие между которыми носит более сложный характер, чем гейзенберговский обмен, позволяет объяснить некоторые свойства магнетиков, которые в [1, 2] называют аномальными. К примеру: негейзенберговский обмен может привести к появлению неколлинеарной антиферромагнитной фазы [3], к появлению квадрупольной фазы [4], к изменению рода фазового перехода со 2-го на 1-й, к метамагнитному переходу в изотропной среде [3, 5].

Оценки вклада биквадратичного, трех-, четырехчастичного обмена очень сложны и для реальных объектов не позволяют что-либо утверждать о количественной или хотя бы о знаковой точности. Для некоторых модельных систем показано, что интегралы негейзенберговского обмена могут составлять десятки процентов от парного обмена, т. е. быть такого же порядка величинами, что и гейзенберговский обмен [1]. Это возможно, например, в модели прямого обмена между ионами с большим спином; в модели эффективного четырехспинового обмена, возникающего при учете взаимодействия магнитной подсистемы с решеткой; в модели обмена в системе с орбитально-вырожденным основным состоянием (с ян-теллеровскими ионами). В действительности, нелинейные эффекты могут быть определяющими, например, в теории изоструктурных фазовых переходов [6].

В настоящей работе построена модель изотропного одноподрешеточного магнетика для системы с локализованными магнитными моментами с $s=1$ с учетом четырехспинового, трехспинового, биквадратичного обмена. На примере этой модели, в частности, изучается возможность эффекта обменного сокращения спина в основном состоянии и исследуется зависимость намагниченности от температуры и во внешнем поле.

1. Гамильтониан. Основное состояние

Гамильтониан системы с негейзенберговским обменом при учете взаимодействия ближайших соседей имеет вид

$$\hat{H} = \mathcal{J}\sum_{f,g}(\hat{s}_f\hat{s}_g) + B\sum_{fg}(\hat{s}_f\hat{s}_g)^2 + D\sum_{f,g,l}(\hat{s}_f\hat{s}_g)(\hat{s}_g\hat{s}_l) + \mathcal{K}\sum_{f,g,l,p}(\hat{s}_f\hat{s}_g)(\hat{s}_l\hat{s}_p), \tag{1}$$

где $\mathcal{J}$, $\mathcal{K}$, D, B — интегралы гейзенберговского, четырехспинового, трехспинового и биквадратичного обмена; $\mathcal{J}$, $B < 0$; расстояния между узлами фиксированы, положения узлов задают векторы **f**, **g**, **l**, **p**, причем они не могут совпадать друг с другом; $\hat{s}_f$ — оператор спина на узле для момента $s=1$.

Имея в виду процедуру самосогласования, рассмотрим состояние $|\psi_f\rangle$ отдельного спина в узле с номером **f** и определим для этого узла собственную систему координат [7], в которой справедливы равенства

$$\langle\psi_f\hat{s}_{xf}\psi_f\rangle = \langle\psi_f\hat{s}_{yf}\psi_f\rangle = \left\langle\psi_f\,\frac{1}{2}(\hat{s}_{xf}\hat{s}_{yf} + \hat{s}_{yf}\hat{s}_{xf})\,\psi_f\right\rangle = 0, \tag{2}$$

где x, y, z — оси в собственной для каждого узла системе координат. Тогда волновая функция $|\psi_f\rangle$, удовлетворяющая условиям (2), имеет вид

$$|\psi_f\rangle = \cos\alpha\,|1\rangle + \sin\alpha\,|-1\rangle. \tag{3}$$

При этом выполняются равенства

$$\left\langle\psi_f\,\frac{1}{2}(\hat{s}_{xf}\hat{s}_{zf} + \hat{s}_{zf}\hat{s}_{xf})\,\psi_f\right\rangle = \left\langle\psi_f\,\frac{1}{2}(\hat{s}_{yf}\hat{s}_{zf} + \hat{s}_{zf}\hat{s}_{yf})\,\psi_f\right\rangle = 0. \tag{4}$$

В приближении среднего поля для ферромагнетика все состояния узлов эквивалентны; следовательно, предположив, что магнитный момент системы не равен нулю, получаем: собственная система координат каждого узла ориентирована вдоль вектора суммарной намагниченности **M**. Пусть **M** направлено вдоль оси z. Тогда энергию системы, приходящуюся на одну частицу в приближении среднего поля, можно записать в виде

$$e/N = \left(\mathcal{J} - \frac{1}{2}B\right)\bar{s}_z + D\bar{s}_z^2\bar{Q}_{zz} + B(\bar{Q}_{xx}^2 + \bar{Q}_{yy}^2 + \bar{Q}_{zz}^2) + \mathcal{K}\bar{s}_z^4, \tag{5}$$

где $\bar{s}_z$, $\bar{Q}_{zz}$, $\bar{Q}_{xx}$, $\bar{Q}_{yy}$ — средние значения операторов $\hat{s}_z$, $\hat{s}_z^2$, $\hat{s}_x^2$, $\hat{s}_y^2$; N — число узлов. С учетом (3) средние значения $\bar{s}_z$, $\bar{Q}_{zz}$, $\bar{Q}_{xx}$, $\bar{Q}_{yy}$ выражаются через параметр α. Тогда энергию (5) можно переписать в виде

$$e/N = (\mathcal{J} + D - B)\cos^2 2\alpha + \mathcal{K}\cos^4 2\alpha + 2B. \tag{6}$$

Параметр α определим из условия минимальности энергии основного состояния

$$\frac{1}{N}\frac{\partial e}{\partial\alpha} = -4(\mathcal{J} + D - B + 2\mathcal{K}\cos^2 2\alpha)\cos 2\alpha\sin 2\alpha = 0. \tag{7}$$

Уравнение (7) имеет три типа решений разной симметрии

$$\sin 2\alpha = 0, \quad \cos^2 2\alpha = -\frac{\mathcal{J} + D - B}{2\mathcal{K}}, \quad \cos 2\alpha = 0.$$

Эти решения получены в одноподрешеточном приближении, т. е. в этом случае не рассматриваются возможные для системы (1) многоподрешеточные или неоднородные состояния.

Первое решение соответствует условию $\bar{s}_z=1$, возможно, когда $\mathcal{J}+D-B+\mathcal{K} < -(\mathcal{J}+D-B)^2/4\mathcal{K}$, $\mathcal{J}+D-B+\mathcal{K} < 0$. В этом состоянии для компонент квадрупольного момента выполняется соотношение $\bar{Q}_{xx} = \bar{Q}_{yy}$. Второе решение $\bar{s}_z = \pm\sqrt{-(\mathcal{J}+D-B)/2\mathcal{K}}$ возможно, когда $0 < -(\mathcal{J}+D-B)/2\mathcal{K} < 1$, $-(\mathcal{J}+D-B)^2/4\mathcal{K} < 0$, $-(\mathcal{J}+D-B)^2/4\mathcal{K} < \mathcal{J}+D-B+\mathcal{K}$. В этом состоянии для компонент квадрупольного момента выполняется неравенство $\bar{Q}_{xx} \neq \bar{Q}_{yy}$. Следует заметить, что в методе самосогласованного поля это решение существует только при условии $B \neq 0$ (см. Приложение). Третье решение не является магнитоупорядоченным, магнитный момент узла равен нулю. Возможно, когда $B<0$ и $\mathcal{J}+D-B+\mathcal{K}>0$, $-(\mathcal{J}+D-B)^2/4\mathcal{K}>0$. Это состояние отличается от состояния с волновой функцией $|\psi_2\rangle=|0\rangle$ лишь значениями компонент квадрупольного момента. Так, в состоянии $1/\sqrt{2}\cdot(|1\rangle+|-1\rangle)$ компоненты квадрупольного момента имеют значения $\bar{Q}_{zz}=1$, $\bar{Q}_{xx}=1$, $\bar{Q}_{yy}=0$, а в состоянии $|\psi_2\rangle=|0\rangle$ соответствующие значения компонент равны $\bar{Q}_{zz}=0$, $\bar{Q}_{xx}=1$, $\bar{Q}_{yy}=1$. Значения энергии этих состояний, вычисленных по формуле (3), равны, откуда следует, что эти состояния в обменном приближении являются доменами.

Таким образом, в обменном приближении для основного состояния возможны два вида магнитоупорядоченных решений, когда эффективный спин узла имеет максимально возможное значение $\bar{s}_z=1$ и когда эффективный спин узла меньше единицы и функционально определяется интегралами обмена.

2. Свободная энергия

Описание системы при $T\neq 0$ предполагает определение всех возможных микроскопических состояний. В методе самосогласованного поля состояние системы определяется в одноузельном приближении. Тогда, имея в виду процедуру самосогласования аналогично случаю $T=0$, введем собственную систему координат узла, в которой волновые функции узла имеют вид

$$
\begin{aligned}
|\psi_{1f}\rangle &= \cos\alpha\,|1\rangle+\sin\alpha\,|-1\rangle,\\
|\psi_{2f}\rangle &= -\sin\alpha\sin\delta e^{i\gamma}\,|1\rangle+\cos\delta\,|0\rangle+\sin\delta\cos\alpha e^{i\gamma}\,|-1\rangle,\\
|\psi_{3f}\rangle &= -\sin\alpha\cos\delta\,|1\rangle-\sin\delta e^{-i\gamma}\,|0\rangle+\cos\alpha\cos\delta\,|-1\rangle,
\end{aligned}
\tag{8}
$$

а функция $|\psi_{1f}\rangle$ удовлетворяет условиям (2).

Однако термодинамические средние от операторов, соответствующие условиям (2), в собственной системе координат не обращаются в нуль.

В дальнейшем будут описаны термодинамические свойства системы (1) в приближении самосогласованного поля [8] при следующих симметрийных ограничениях для термодинамических средних: равенство нулю x, y-компонент намагниченности системы и равенство нулю недиагональных компонент квадрупольного момента системы. В этом случае собственная система координат совпадает с кристаллографической и волновые функции узла имеют вид

$$
\begin{aligned}
|\psi_{1f}\rangle &= \cos\alpha\,|1\rangle+\sin\alpha\,|-1\rangle,\\
|\psi_{2f}\rangle &= |0\rangle,\\
|\psi_{3f}\rangle &= -\sin\alpha\,|1\rangle+\cos\alpha\,|-1\rangle.
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Из эквивалентности узлов в методе самосогласованного поля следует, что равны намагниченности и квадрупольные моменты каждого из узлов и они соответственно равны средней намагниченности и средним компонентам квадрупольного момента системы в расчете на один узел. В силу этого энергия взаимодействия, соответствующая (1), запишется в виде

$$
E/N=\left(\mathcal{J}-\frac{1}{2}B\right)M_z^2+DM_z^2d_z+B\,(d_x^2+d_y^2+d_z^2)+\mathcal{K}M_z^4,
\tag{10}
$$

где

$$
M_z=\frac{1}{N}\sum_f \bar{s}_{zf},\quad d_z=\frac{1}{N}\sum_f \bar{Q}_{zzf},\quad d_x=\frac{1}{N}\sum_f \bar{Q}_{xxf},\quad d_y=\frac{1}{N}\sum_f \bar{Q}_{yyf},
\tag{11}
$$

а $\bar{s}_{zf}$, $\bar{Q}_{zzf}$, $\bar{Q}_{xxf}$, $\bar{Q}_{yyf}$ — значения спина и компонент квадрупольного момента на узле, вычисляемые в базисе волновых функций (9). Например, значения спина на узле могут быть равны $\cos 2\alpha$, 0, $-\cos 2\alpha$. Конфигурационная энтропия системы соответственно записывается в виде

$$\sigma = \ln \frac{N!}{\prod_k N_k!} \approx N \ln N - \sum_k N_k \ln N_k = N \ln N - N_1 \ln N_1 - N_2 \ln N_2 - - N_3 \ln N_3, \qquad (12)$$

где N_k — число узлов, находящихся в одном из состояний (9).

Тогда макроскопические характеристики системы (11) примут следующий вид:

$$M_z = \frac{1}{N}(N_1 \cos 2\alpha - N_3 \cos 2\alpha) = x \cos 2\alpha, \quad d_z = \frac{1}{N}(N_1 + N_3), \qquad (13)$$

$$d_x = 1 - \frac{1}{2} d_z + \frac{1}{2} x \sin 2\alpha, \quad d_y = 1 - \frac{1}{2} d_z - \frac{1}{2} x \sin 2\alpha. \qquad (14)$$

Как видим из (13), (14), в приближении среднего поля термодинамические средние d_x, d_y зависят от M_z и d_z.

Дополнив систему (13) условием $N = N_1 + N_2 + N_3$ и выразив N_1, N_2, N_3 через x и d_z, запишем энтропию как функцию от неравновесных d_z и x

$$\sigma = -\left[\frac{1}{2}(d_z + x) \ln \frac{1}{2}(d_z + x) + \frac{1}{2}(d_z - x) \ln \frac{1}{2}(d_z - x) + (1 - d_z) \ln (1 - d_z)\right]. \qquad (15)$$

Окончательно получаем для принятой модели следующий вид свободной энергии как функции неравновесных параметров x, d_z, α:

$$F = (\mathcal{J} - B) x^2 \cos^2 2\alpha + D x^2 \cos^2 2\alpha d_z + B\left(d_z^2 + 2\left(1 - \frac{1}{2} d_z\right)^2\right) + + \mathcal{K} x^4 \cos^4 2\alpha + \frac{1}{2} B x^2 + \frac{1}{\beta}\left[\frac{1}{2}(d_z + x) \ln \frac{1}{2}(d_z + x) + + \frac{1}{2}(d_z - x) \ln \frac{1}{2}(d_z - x) + (1 - d_z) \ln (1 - d_z)\right]. \qquad (16)$$

3. Уравнения состояния

Минимизируя потенциал (16) по α, x, d_z, находим систему уравнений, определяющих равновесные макроскопические характеристики

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 2(\mathcal{J} - B) x \cos^2 2\alpha + 2 D d_z x \cos^2 2\alpha + 4\mathcal{K} x^3 \cos^4 2\alpha + B x + + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{d_z + x}{d_z - x} = 0, \qquad (17а)$$

$$\frac{\partial F}{\partial d_z} = D x^2 \cos^2 2\alpha + 3B\left(d_z - \frac{2}{3}\right) + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{(d_z - x)(d_z + x)}{4(1 - d_z)^2} = 0, \qquad (17б)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha} = -4\left(\mathcal{J} - B + D d_z + 2\mathcal{K} x^2 \cos^2 2\alpha\right) x^2 \cos 2\alpha \sin 2\alpha = 0. \qquad (17в)$$

Полностью неупорядоченное состояние — парамагнитная фаза — соответствует решениям вида $x=0$, $d_z=2/3$.

Как и при $T=0$, существуют три вида решений, определяемых параметром α.

I) $\cos 2\alpha = 0$, эффективный спин узла равен нулю, соответственно равна нулю и намагниченность системы. Узел характеризуется только квадрупольным моментом, поэтому для системы возможно лишь квадрупольное упорядочение, определяемое уравнениями

$$Bx+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{d_z+x}{d_z-x}=0,$$

$$3B\left(d_z-\frac{2}{3}\right)+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{(dz-x)(d_z+x)}{4(1-d_z)^2}=0. \qquad (18)$$

Такое квадрупольное состояние обозначим как КФI. Здесь, как и при $T=0$, $B<0$. В этом случае для системы возможен только фазовый переход КФI—парафаза, который протекает вторым родом при $T_{\text{КФI}}=(-2/3)B$. Для компонент квадрупольного момента системы выполняется соотношение $d_x\neq d_y\neq d_z$.

II) $\cos 2\alpha=1$, узел характеризуется максимально возможным значением спина, для компонент квадрупольного момента узла выполняется соотношение $\bar{Q}_{xx}=\bar{Q}_{yy}$. Намагниченность системы равна $M_z=x$, и для компонент квадрупольного момента системы выполняется равенство $d_x=d_y=$ $=1-(1/2)d_z$. Система (17) принимает вид

$$2\left(\mathcal{J}-\frac{1}{2}B\right)M_z+2DM_zd_z+4\mathcal{K}M_z^3+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{d_z+M_z}{d_z-M_z}=0,$$

$$DM_z^2+3B\left(d_z-\frac{2}{3}\right)+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{(d_z-M_z)(d_z+M_z)}{4(1-d_z)^2}=0 \qquad (19)$$

и допускает два вида решений: а) $M_z=0$, $d_z\neq 2/3$ (в отличие от состояния КФI является статистической квадрупольной фазой, которую обозначим КФ II) возможно, когда $\mathcal{J}+2/3D>B$, $B<0$; б) $M_z\neq 0$, $d_z\neq 2/3$, магнитоупорядоченное решение с отличной от нуля намагниченностью системы.

III) $\cos 2\alpha\neq 0$, $\sin 2\alpha\neq 0$. В этом случае величина спина узла меньше единицы и для компонент квадрупольного момента узла выполняется соотношение $\bar{Q}_{xx}\neq\bar{Q}_{yy}$. Намагниченность системы определяется из выражения

$$M_z=\pm\sqrt{-\frac{\mathcal{J}+Dd_z-B}{2\mathcal{K}}}. \qquad (20)$$

При $D>0$ величина намагниченности с ростом температуры возрастает, т. е. $M_z(T)$ имеет точку максимальной намагниченности при $T\neq 0$. Решение определяется уравнениями

$$Bx+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{d_z+x}{d_z-x}=0,$$

$$-\left(2B+\frac{\mathcal{J}-B}{2\mathcal{K}}D\right)+\left(3B-\frac{D^2}{2\mathcal{K}}\right)d_z+\frac{1}{2\beta}\ln\frac{(d_z-x)(d_z+x)}{4(1-d_z)^2}=0,$$

$$\cos^2 2\alpha=-\frac{\mathcal{J}+Dd_z-B}{2\mathcal{K}x^2}. \qquad (21)$$

Эффективный спин узла зависит от конфигурации, т. е. определяется x и d_z

$$s_z=\frac{1}{x}\sqrt{-\frac{\mathcal{J}+Dd_z-B}{2\mathcal{K}}}. \qquad (22)$$

Таким образом, величина эффективного спина узла зависит от температуры.

Максимальная температура, когда решение III возможно, определяется из системы уравнений (21) при условии, что $\cos 2\alpha=1$. Эта температура $T_{\text{пр}}$ является предельной, начиная с которой решение III переходит в решение II, а эффективный спин узла принимает значение, равное единице. Этот переход в модели является фазовым переходом 2-го рода.

4. Влияние внешнего магнитного поля

Ненулевое внешнее магнитное поле приводит к необходимости учета в гамильтониане зеемановского оператора $H_z\sum_f \hat{s}_{zf}$, а в свободной энергии члена $H_z x\cos 2\alpha$. В этом случае при $T=0$ основное состояние системы определяется уравнением

$$\frac{1}{N}\frac{\partial e}{\partial \alpha} = -2\left(2(\mathcal{J}+D-B)\cos 2\alpha + 4\mathcal{K}\cos^3 2\alpha - H_z\right)\sin 2\alpha = 0. \quad (23)$$

Это уравнение имеет только два типа решений $\sin 2\alpha=0$: спин на узле равен 1 и $\sin 2\alpha\neq 0$; в этом случае спин на узле меньше 1 и его величина зависит от внешнего магнитного поля. Критическое поле, когда второе решение переходит в первое, равно $H_k=2(\mathcal{J}+D-B)+4\mathcal{K}$. Продольная восприимчивость для первого решения равна 0, тогда как продольная восприимчивость второго решения при $H_z\to 0$

$$\chi^{-1}_{H_z\to 0} = -2(\mathcal{J}+D-B). \quad (24)$$

Учет внешнего магнитного поля при решении уравнения состояния для $T\neq 0$ приводит к тому, что $T_{\text{пр}}$ является функцией от поля, так как уравнение (17в) имеет следующий вид:

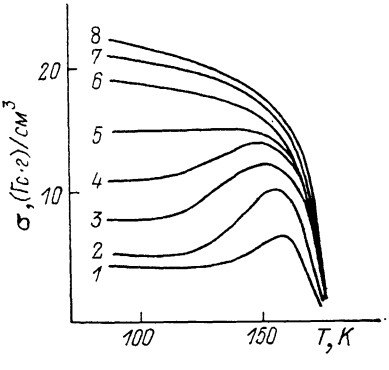
$$2\left[-2(\mathcal{J}-B+Dd_z+2\mathcal{K}x^2\cos^2 2\alpha)x\cos 2\alpha + H_z\right]x\sin 2\alpha = 0. \quad (25)$$

Для слабых полей, когда H_z мало, а x и d_z порядка 1, эффективный спин линейно зависит от поля

$$s_z = \sqrt{-\frac{\mathcal{J}+Dd_z-B}{2\mathcal{K}x^2} - \frac{H_z}{4(\mathcal{J}+Dd_z-B)x}}. \quad (26)$$

Таким образом, $T_{\text{пр}}$ с ростом поля уменьшается (в слабых полях линейно по H_z) и по достижении полем критической H_k возможно только состояние, для которого эффективный спин узла максимален и равен единице.

Таким образом, в случае сильного негейзенберговского обмена упорядоченное состояние определяется магнитным и квадрупольными моментами. При $T=0$ система имеет следующие магнитоупорядоченные состояния: спин узла равен $\bar{s}_z=\cos 2\alpha=1$, а квадрупольные моменты $\bar{Q}_{xx}$, $\bar{Q}_{yy}$ равны или спин узла меньше единицы $\bar{s}_z=\cos 2\alpha<1$, а $\bar{Q}_{xx}\neq\bar{Q}_{yy}$. Во втором случае магнитный момент узла зависит от обменных констант и внешнего магнитного поля. При этом продольная восприимчивость не равна нулю и при $T=0$. Фазовый переход из состояния $\bar{Q}_{xx}=\bar{Q}_{yy}$ в состояние $\bar{Q}_{xx}\neq\bar{Q}_{yy}$ является переходом второго рода. При $T\neq 0$ возможны два магнитоупорядоченных состояния: $d_x=d_y$, система ведет себя как обычный магнетик; $d_x\neq d_y$. В последнем случае при $D>0$ намагниченность как функция температуры имеет максимум при $T\neq 0$. Переход из состояния $d_x=d_y$ в состояние $d_x\neq d_y$ может осуществляться как при изменении температуры, так и под влиянием внешнего магнитного поля. Согласно принятой модели, такой переход протекает как переход второго рода. При этом зависимость намагниченности от внешнего магнитного поля в состоянии $d_x=d_y$ качественно отличается от зависимости $M(H)$ в состоянии $d_x\neq d_y$.



Зависимость намагниченности от температуры для сплава $Th_{0.1}U_{0.9}S$.
1 — 0.6, 2 — 1.2, 7 — 2.0, 4 — 2.4, 5 — 3.0, 6 — 4.0, 7 — 6.0, 8 — 7.0 кЭ.

В рамках данной модели [9] находит объяснение зависимость намагниченности от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля, которое наблюдается в актинидах и их соединениях. Так, типичные кривые зависимости $M\ (T)$ и $M\ (H)$ для $Th_xU_{1-x}S$ приведены на рисунке, взятом из [10]. Зависимость $M\ (T)$, имеющая максимум; характерна также и для лантанидов. Обычно такое поведение объясняют гистерезисными явлениями и разбиением кристалла на домены при низких температурах. Однако при такой интерпретации трудно объяснить обратимость процесса разбиения на домены в веществах с гигантской магнитострикцией. Известно, что даже при относительно малой стрикции в CoF_2 при фазовом переходе наблюдается растрескивание материала. Предлагаемое объяснение этой зависимости оставляет возможность для понимания природы обратимости процессов намагничивания, так как максимумы на кривых зависимости $M\ (T)$ имеют обменную природу и возможны при сильном негейзенберговском изотропном обмене.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Одноузельный гамильтониан f-го узла в методе самосогласованного поля имеет вид

$$\hat{H}_{\mathbf{f}} = \mathbf{h}\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{f}} + \sum_{ij} N_{ij}\hat{Q}_{ij\mathbf{f}}, \tag{27}$$

где $i,\ j=x,\ y,\ z$; $\mathbf{h}$ — магнитное поле; N_{ij} — компоненты квадрупольного поля, действующие на квадрупольный момент узла, компоненты которого определяются выражением $\hat{Q}_{ij}=1/2\ (\hat{s}_i\hat{s}_j+\hat{s}_j\hat{s}_i)$. С учетом выполнения условий (2) и (3), т. е. предположив, что магнитный момент системы направлен вдоль оси z и равны нулю недиагональные компоненты квадрупольного момента системы, гамильтониан (27) можно записать в виде

$$\hat{H}_{\mathbf{f}} = h_z\hat{s}_{z\mathbf{f}} + N_{zz}\hat{s}^2_{z\mathbf{f}} + N_{xx}\hat{s}^2_{x\mathbf{f}} + N_{yy}\hat{s}^2_{y\mathbf{f}}, \tag{28}$$

где

$$h_z = 2\left(\mathcal{J}-\frac{1}{2}B\right)\bar{s}_z + 4\mathcal{K}\bar{s}^3_z + 2D\bar{Q}_{zz}\bar{s}_z, \quad N_{xx} = 2B\bar{Q}_{xx},$$

$$N_{zz} = 2B\bar{Q}_{zz} + D\bar{s}^2_z, \quad N_{yy} = 2B\bar{Q}_{yy},$$

т. е. эффективные поля, действующие на узел, зависят от средних значений z-компоненты магнитного момента и диагональных компонент квадрупольного момента. Решая задачу на собственные значения, находим, что собственные волновые функции оператора (28) имеют вид (9) и собственные значения энергии равны

$$\varepsilon_{\pm} = N_{zz} + \frac{1}{2}(N_{xx}+N_{yy}) \pm \sqrt{h^2_z + \frac{1}{4}(N_{xx}-N_{yy})^2},$$

$$\varepsilon_0 = -(N_{xx}+N_{yy}). \tag{29}$$

Уравнения самосогласования для магнитоупорядоченного состояния можно записать в виде

$$\bar{s}_z = -\partial\varepsilon_-/\partial h_z = h_z\Big/\sqrt{h^2_z + \frac{1}{4}(N_{xx}-N_{yy})^2}. \tag{30}$$

Решения этого уравнения совпадают с решениями уравнения (6). В случае, когда $B=0$, уравнение (30) имеет только одно решение $\bar{s}_z=1$.

Список литературы

[1] Нагаев Э. Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988. 232 с.
[2] Нагаев Э. Л. // УФН. 1982. Т. 136. № 1. С. 61—100.

[3] Матвеев В. М., Нагаев Э. Л. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 2. С. 492—501.
[4] Матвеев В. М. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. № 4. С. 1626—1632.
[5] Гуфан Ю. М., Калита В. М. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 11. С. 3302—3307.
[6] Гуфан Ю. М., Ларин Е. С. // ДАН СССР. 1978. Т. 242. № 6. С. 1311—1313.
[7] Островский В. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 5. С. 1690—1701.
[8] Браут Р. Фазовые переходы. М.: Мир, 1967. 288 с.
[9] Калита В. М. // Тез. докл. II Всес. семинара «Магнитные фазовые переходы и критические явления». Махачкала, 1988. С. 216.
[10] Чачхиани З. В., Чечерников В. И., Чачхиани Л. Г. Магнетизм сплавов и соединений тория. Тбилиси, 1986. С. 305.

Ростовский-на-Дону
государственный педагогический институт

Поступило в Редакцию
3 мая 1990 г.
В окончательной редакции
10 сентября 1990 г.