1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 9
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, N 9

УДК 548 : 537.611.45

К ТЕОРИИ ЗОННОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМА В СИСТЕМЕ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ

Е. А. Баранник

В приближении самосогласованного поля рассмотрено антиферромагнитное состояние системы с коллективизированными магнитными электронами, возникающее при наложении соизмеримых волн зарядовой (ВЗП) и спиновой (ВСП) плотности. С учетом всех магнитных степеней свободы системы получено высокотемпературное разложение функционала свободной энергии. Исследуется фазовая диаграмма и обсуждается возможность применения рассмотренной модели к описанию антиферромагнитных свойств фаз Магнелли V_nO_{2n-1} $(2 < n \leqslant 9)$.

Теории основного состояния и коллективных возбуждений антиферромагнетиков с достаточно широкой частично заполненной зоной магнитных электронов (случай коллективизированных магнитных электронов) посвящено большое число работ (см. обзоры [1–4]). Обилие теоретических подходов и моделей обусловлено прежде всего различием микроскопических механизмов магнитного упорядочения в реальных антиферромагнетиках, которые лишь на макроскопическом уровне, например в терминах свободной энергии, приводят к близким картинам. Выбор же конкретной модели для описания магнитных свойств того или иного антиферромагнетика определяется, как отмечалось в [1], особенностями его зонной структуры.

В настоящее время наиболее популярны модель антиферромагнетика с пространственной структурой ВСП [1, 5, 6] и модель двухзонного антиферромагнетизма [3, 4, 7, 8]. Последняя представляет собой непосредственное обобщение теории Стонера (см. [9]) на случай антиферромагнитного упорядочения и пригодна для описания магнетиков с двумя компонентами (зонами) фермиевской жидкости магнитных электронов. В частности, если уровень Ферми проходит через e_g-зону переходного $3d$-металла с кубической симметрией, то компонентами фермиевской жидкости магнитных электронов являются подзоны двукратновырожденной e_g-зоны, а антиферромагнитное состояние появляется в результате магнитного расщепления Δ_A одноэлектронного спектра, при котором парциальные спонтанные намагниченности компонент $\mathbf{m}_1$ и $\mathbf{m}_2$ равны по величине и противоположны по направлению [7, 8].

Магнитная структура типа ВСП реализуется, как известно, в металлах, топология многосвязной поверхности Ферми которых характеризуется наличием электронного и дырочного участков, совмещающихся при параллельном переносе на некоторый вектор $\mathbf{q}$. ВСП возникает из-за триплетного спаривания одночастичных возбуждений этих участков. Картина несколько усложняется [10–12], если ВСП накладывается на уже имеющуюся в системе ВЗП, обусловленную синглетным спариванием электронных и дырочных состояний. Сосуществующие однофазные соизмеримые ВСП и ВЗП индуцируют дополнительное магнитное расщепление Δ_F спектра одночастичных возбуждений, в результате чего появляется магнитный момент $\mathbf{m}$ единицы объема кристалла — так называемый «экситонный ферромагнетизм» [10]. Как будет показано ниже, парциальные индуцированные намагниченности, отвечающие электронному и дырочному участкам поверхности Ферми, в общем случае оказываются различными и, следовательно, макроскопическое состояние системы характеризуется не только вектором $\mathbf{m}=\mathbf{m}_1+\mathbf{m}_2$, но и отличным от нуля вектором «экситонного антиферромагнетизма» $\mathbf{l}=\mathbf{m}_1-\mathbf{m}_2$. Иными словами, если под компонентами фермиевской жидкости понимать одночастичные возбуждения электронной и дырочной поверхностей, то при $\mathbf{m}_1\neq\mathbf{m}_2$ можно говорить о появлении в системе дополнительно к ВСП двухзонного антиферромагнетизма.

Модель состояния с сосуществующими ВЗП и ВСП, которым отвечают синглетный и триплетный параметры порядка Δ_s и Δ_t, применялась для объяснения антиферромагнетизма окислов ванадия V_nO_{2n-1} [13, 14], в которых антиферромагнитное превращение происходит на фоне уже имеющейся ВЗП. В этой связи представляет интерес выяснение условий, при которых возможно с учетом возникающего двухзонного антиферромагнетизма сосуществование соизмеримых с постоянной решетки ВСП и ВЗП.

1. Уравнения самосогласования

При выводе самосогласованных уравнений параметров порядка удобно перейти к представлению Намбу, в котором для локальной плотности магнитного момента справедливо выражение

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})=-\mu_Б \sum_{\mathbf{p}} \Phi_{\mathbf{p},\mathbf{q}}^{\alpha'\beta'}(\mathbf{r})\,\sigma_{\alpha\beta}F_{\beta\alpha}^{\beta'\alpha'}(\mathbf{p}), \tag{1}$$

где изотопические индексы α', β' нумеруют компоненты и принимают значения 1 и 2; $\mu_Б$ — магнетон Бора; σ — спиновые матрицы Паули. Величины $\Phi_{\mathbf{p},\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ и $\sigma_{\alpha\beta}F_{\beta\alpha}(\mathbf{p})$ являются матрицами в изотопическом пространстве [3]

$$\Phi_{\mathbf{p},\mathbf{q}}(\mathbf{r})=\frac{1+\tau_3}{2}\,|u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2+\frac{1-\tau_3}{2}\,|u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2+$$
$$+\frac{\tau_+}{2}u_{1\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\,u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,e^{i\mathbf{qr}}+\frac{\tau_-}{2}u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,u_{2\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\,e^{-i\mathbf{qr}}, \tag{2}$$

$$\sigma_{\alpha\beta}\hat{F}_{\beta\alpha}=\{{}^1\!/_2(n_1+n_2)+{}^1\!/_2(n_1-n_2)\,\tau_3+\tilde{n}\,(\mathbf{R}_\gamma\tau)\}\,\mathbf{P}. \tag{3}$$

Здесь $\tau_\pm=\tau_1\pm i\tau_2$, τ_3 — изотопические матрицы Паули; $u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ и $u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ — модулирующие блоховские функции возбуждений электронного и дырочного участков; $\mathbf{P}$ — вектор спиновой поляризации; $\mathbf{R}_\gamma=(\cos\gamma,\ \sin\gamma,\ 0)$ — изовектор, определяющий гибридизацию электронных и дырочных состояний; $n_1(\mathbf{p})$, $n_2(\mathbf{p})$ и $\tilde{n}(\mathbf{p})\,e^{\pm i\gamma}$ — соответственно внутри- и межкомпонентные аномальные средние (по спину) рассматриваемого состояния. Выражение (3) является наиболее общим, исключающим из рассмотрения состояния с мнимой намагниченностью. Подставляя (2) и (3) в (1), находим

$$\mathbf{m}(\mathbf{r})=-\mu_Б\mathbf{P}\sum_{\mathbf{p}}\Big\{\frac{1}{2}(n_1+n_2)\,[|u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2+|u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2]+$$
$$+\frac{1}{2}(n_1-n_2)\,[|u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2-|u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2]+2\tilde{n}\cos(\mathbf{qr}+\gamma)\,\mathrm{Re}\,[u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,u_{2\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})]+$$
$$+2\tilde{n}\sin(\mathbf{qr}+\gamma)\,\mathrm{Im}\,[u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})\,u_{2\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})]\Big\}. \tag{4}$$

Первые два члена в (4) описывают двухзонный ферро- и антиферромагнетизм системы. Параметр γ в третьем слагаемом определяет фазу возникающей ВСП. Замечая, что спаривающим операторам τ_1 и τ_2 отвечают, согласно (4), пространственные волны плотности, сдвинутые по фазе на $\pi/2$, представим одночастичную функцию Грина состояния с сосуществующими однофазными ВСП и ВЗП в виде

$$\hat{G}(\mathbf{p},\ \omega_n)=\{i\omega_n+\delta\mu+\Delta_F(\mathbf{P}\sigma)-[\xi+\Delta_A(\mathbf{P}\sigma)]\tau_3-[\Delta_s+\Delta_t(\mathbf{P}\sigma)](\mathbf{R}_\gamma\tau)\}^{-1}, \tag{5}$$

где $\gamma=0$ или $\pi/2$; $\delta\mu$ — параметр неконгруэнтности электронной и дырочной поверхностей, играющий роль химического потенциала; $\omega_n=\pi T(2n+1)$, $n=0, \pm 1, \ldots$. В неупорядоченной фазе $\delta\mu=\delta\mu_0$, а полюсами гриновской функции для носителей с квадратичным законом дисперсии являются величины $\pm\xi-\delta\mu_0=\pm(p^2-p_F^2)/2m-\delta\mu_0$. В адекватности описания рассматриваемого состояния функцией Грина (5) несложно убедиться, сравнивая (3) со спиновой частью одночастичной матрицы плотности, получающейся из (5)

$$\hat{n}=\frac{1}{2}(n_+^F+n_-^F)+\frac{1}{2}\left(\frac{\xi_+}{\varepsilon_+}n_++\frac{\xi_-}{\varepsilon_-}n_-\right)\tau_3+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_+}{\varepsilon_+}n_++\frac{\Delta_-}{\varepsilon_-}n_-\right)(\mathbf{R}_\gamma\tau)+$$

$$+\left[\frac{1}{2}(n_+^F-n_-^F)+\frac{1}{2}\left(\frac{\xi_+}{\varepsilon_+}n_+-\frac{\xi_-}{\varepsilon_-}n_-\right)\tau_3+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_+}{\varepsilon_+}n_+-\frac{\Delta_-}{\varepsilon_-}n_-\right)(\mathbf{R}_\gamma\tau)\right](\mathbf{P}\sigma),$$

где

$$n_\pm^F=\frac{1}{2}[n(\varepsilon_\pm-\delta\mu_\pm)+n(-\varepsilon_\pm-\delta\mu_\pm)],\quad n_\pm=\frac{1}{2}[n(\varepsilon_\pm-\delta\mu_\pm)-n(-\varepsilon_\pm-\delta\mu_\pm)],$$

$$n(\varepsilon)=[1+\exp(\varepsilon/T)]^{-1}.$$

Величины $\varepsilon_\pm=\sqrt{\xi_\pm^2+\Delta_\pm^2}=\sqrt{(\xi\pm\Delta_A)^2+(\Delta_s\pm\Delta_t)^2}$ и $\delta\mu_\pm=\delta\mu\pm\Delta_F$ характеризуют электронный спектр в упорядоченной фазе.

Применение τ-матричного формализма позволяет использовать для получения уравнений самосогласования уравнение Дайсона в его каноническом виде [15]

$$\hat{G}^{-1}(\mathbf{p},\ \omega_n)=i\omega_n-\xi\tau_3+\delta\mu_0-T\sum_{\omega_m}\mathrm{Sp}'\int\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}\hat{\Gamma}(\mathbf{p},\ \mathbf{p}')\hat{G}(\mathbf{p}',\ \omega_m),$$

где след берется как по спиновым, так и по изотопическим индексам, поскольку вершинная функция затравочного взаимодействия электронов $\hat{\Gamma}(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ является матрицей в изотопическом пространстве [3]

$$\hat{\Gamma}(\mathbf{p},\ \mathbf{p}')=\sum_{i=0}^{3}[\theta_i(\mathbf{p},\ \mathbf{p}')+\psi_i(\mathbf{p},\ \mathbf{p}')(\sigma\sigma')]\tau_i\tau_i' \tag{6}$$

($\tau_0\equiv 1$). Подставляя (5) и (6) в уравнение Дайсона, для $\gamma=0$ находим

$$\Delta_s=\Delta_s 2\theta_1\int d\xi N(\xi)\left(\frac{n_+}{\varepsilon_+}+\frac{n_-}{\varepsilon_-}\right)+\Delta_t 2\theta_1\int d\xi N(\xi)\left(\frac{n_+}{\varepsilon_+}-\frac{n_-}{\varepsilon_-}\right),$$

$$\Delta_t=\Delta_t 2\psi_1\int d\xi N(\xi)\left(\frac{n_+}{\varepsilon_+}+\frac{n_-}{\varepsilon_-}\right)+\Delta_s 2\psi_1\int d\xi N(\xi)\left(\frac{n_+}{\varepsilon_+}-\frac{n_-}{\varepsilon_-}\right),$$

$$\Delta_A=2\psi_3\int d\xi N(\xi)\left(\frac{\xi_+}{\varepsilon_+}n_+-\frac{\xi_-}{\varepsilon_-}n_-\right),\quad \Delta_F=2\psi_0\int d\xi N(\xi)(n_+^F-n_-^F). \tag{7}$$

Здесь и в дальнейшем полагаем для простоты вершинную функцию затравочного взаимодействия независящей от импульсов одночастичных возбуждений. Полную систему самосогласованных уравнений для параметров порядка получаем, учитывая уравнение баланса числа частиц, аналогичное [16]

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\xi N(\xi)[n_+^F+n_-^F-n(\xi-\delta\mu_0)-n(-\xi-\delta\mu_0)]+N_r(0)(\delta\mu-\delta\mu_0)=0, \tag{8}$$

где $N(\xi)$ и $N_r(0)$ — энергетическая плотность числа состояний магнитных электронов и немагнитного резервуара.

2. «Экситонный антиферромагнетизм»

Средняя по кристаллу намагниченность отсутствует, если $\delta\mu_0=0$ [10, 11]. В этом случае без учета двухзонного антиферромагнетизма система самосогласованных уравнений нетривиальных решений не имеет, на основании чего в [10, 11] был сделан вывод о невозможности сосуществования однофазных соизмеримых ВСП и ВЗП при полностью конгруэнтных электронной и дырочной поверхностях. В то же время полная система уравнений (7)—(8) допускает решение, при котором $\delta\mu=\Delta_F=0$, но Δ_s, Δ_t, $\Delta_A\neq0$. Имея в виду индуцированный сосуществующими ВЗП и ВСП параметр $\Delta_A \backsim \Delta_s\Delta_t$, можно говорить о вырождении состояния «экситонного ферромагнетизма» в состояние «экситонного антиферромагнетизма». В пренебрежении различием пространственной зависимости модулирующих блоховских функций $u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ и $u_{2\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ реально возникающая в кристалле антиферромагнитная структура есть ВСП. В общем случае к ВСП, согласно (4), подмешивается неелевский подрешеточный антиферромагнитный порядок.

Функционал Ландау плотности свободной энергии, получающийся из (7)—(8) для состояния «экситонного антиферромагнетизма», имеет вид

$$F=\alpha_s\Delta_s^2+\alpha_t\Delta_t^2+\alpha_A\Delta_A^2+\frac{\beta_1}{2}(\Delta_s^4+\Delta_t^4)+\beta_2\Delta_s^2\Delta_t^2+2\beta_3\Delta_s\Delta_t\Delta_A, \tag{9}$$

где

$$\alpha_A=-\frac{\pi^2}{6}\frac{N''(0)}{N(0)}(T^2-T_A^2),\quad T_A^2=-\frac{3}{2\pi^2}\frac{1+4\psi_3N(0)}{\psi_3N''(0)},\quad \beta_3=\frac{N'(0)}{N(0)}\ln\frac{2\gamma w}{\pi eT}, \tag{10}$$

а остальные коэффициенты даются выражениями [11]

$$\alpha_{s,\,t}=\alpha(T-T_{s,\,t})=\frac{T-T_{s,\,t}}{T},\qquad 3\beta_1=\beta_2=\frac{3}{(\pi T^2)}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)^{-3}=\frac{21\zeta(3)}{8(\pi T)^2}. \tag{11}$$

Здесь $N(0)=mp_F/2\pi^2$; штрих означает производную по ξ, взятую при $\xi=0$; w — масштаб обрезания кулоновского взаимодействия; $\zeta(x)$ — дзета-функция Римана; $\ln\gamma$ — постоянная Эйлера; $T_s>T_t$ — температуры фазовых превращений в состояние ВЗП (при $\Delta_t=0$) и ВСП (при $\Delta_s=0$) соответственно.

Уравнения для параметров порядка Δ_s, Δ_t и Δ_A вытекают из условия минимизации функционала свободной энергии (9). Ниже температуры магнитного фазового превращения T_N, когда отличны от нуля все три параметра, находим

$$\Delta_s^2=\frac{\alpha_t(\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A)-\alpha_s\beta_1}{\beta_1^2-(\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A)^2},\qquad \Delta_t^2=\frac{\alpha_s(\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A)-\alpha_t\beta_1}{\beta_1^2-(\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A)^2}, \tag{12}$$

$$\Delta_A=(-\beta_3/\alpha_A)\,\Delta_t\Delta_s. \tag{13}$$

Вводя зависящую от температуры величину

$$\Theta(T)=T_s-\frac{\beta_1}{\beta_1-\beta_2+\beta_3^2/\alpha_A}(T_s-T_t), \tag{14}$$

синглетный и триплетный параметры порядка можно представить в виде

$$\Delta_s^2=\frac{\alpha_s+\alpha_t+\alpha(\Theta-T)}{\beta_1+\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A},\qquad \Delta_t^2=\frac{\alpha(\Theta-T)}{\beta_1+\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A}. \tag{15}$$

Подставляя, наконец, соотношения (15) и (13) в (9), приходим к окончательному выражению для плотности свободной энергии вблизи точки магнитного фазового превращения

$$F=-\frac{\alpha^2}{2\beta_1}(T_s-T)^2-\frac{\alpha^2}{2\beta_1}\frac{\beta_1-\beta_2+\beta_3^2/\alpha_A}{\beta_1+\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A}(\Theta-T)^2. \tag{16}$$

Из выражения (16) следует, что антиферромагнитный фазовый переход термодинамически выгоден, если $\beta_1 > \beta_2 - \beta_3^2/\alpha_A$ при одновременном выполнении неравенства $\beta_1 > -\beta_2 + \beta_3^2/\alpha_A$, а также при $\beta_1 < \beta_2 - \beta_3^2/a_A$ и $\beta_1 < -\beta_2 + \beta_3^2/\alpha_A$. Последняя система неравенств, однако, решений не имеет, поскольку, согласно (11), $\beta_1 + \beta_2 > \beta_2 - \beta_1$. В результате с учетом (10) и (11) появление «экситонного антиферромагнетизма» возможно в интервале температур

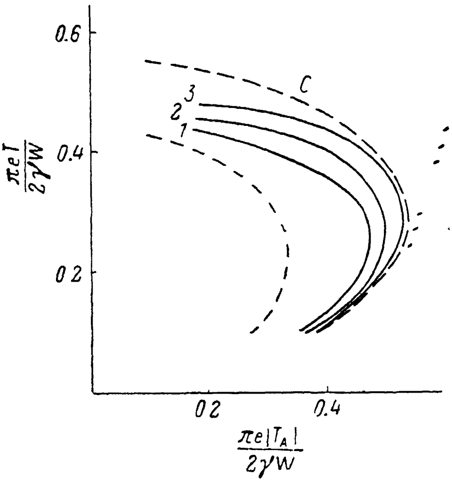
$$\frac{7\zeta(3)}{24} < -\frac{N'^2(0)}{N''(0)\,N(0)}\,\frac{T^2}{T^2 - T_A^2}\ln^2\frac{2\gamma w}{\pi e T} < \frac{7\zeta(3)}{12}. \tag{17}$$

При этом ввиду $T_s > T_t$ величина $\Theta(T)$ оказывается меньше T_s, а для неотрицательности величины Δ_t^2 необходимо $\Theta(T) \geqslant T$.

Подчеркнем, что в пренебрежении вкладом в свободную энергию параметра порядка Δ_A ($\beta_3 = 0$) двойное неравенство (17) решений не имеет.

Искомый интервал температур определяется прежде всего величиной параметра T_A^2 и, следовательно, величиной антиферромагнитного обменного взаимодействия ψ_3, которое в терминах модели экситонного диэлектрика [8] равно $-(g_0 - g_2)/4$, где g_0, g_2 — константы соответственно внутризонного взаимодействия электронов и межзонного с обменом электронами. Состояние ВЗП наиболее выгодно, как известно, при $g_2 < 0$, поэтому для носителей с квадратичным законом дисперсии

$$T_A^2 = \frac{6}{\pi^2}\left(\frac{p_F^2}{2m}\right)^2 \frac{1 + 4\psi_3 N(0)}{\psi_3 N(0)} < 0,$$



Фазовая диаграмма состояния «экситонного антиферромагнетизма».

если $1 + 4\psi_3 N(0) > 0$. На рисунке область температур, удовлетворяющая (17) при $T_A^2 < 0$, ограничена штриховыми линиями.

Температуру Нееля фазового перехода второго рода можно найти, очевидно, приравняв нулю разность $\Theta - T$

$$\frac{T_s - T_t}{T_s - T_{N_{II}}}\,\frac{7\zeta(3)}{48} + \frac{7\zeta(3)}{24} = -\frac{N'^2(0)}{N''(0)\,N(0)}\,\frac{T_{N_{II}}^2}{T_{N_{II}}^2 - T_A^2}\ln^2\frac{2\gamma w}{\pi e T_{N_{II}}}. \tag{18}$$

Сплошными линиями на рисунке показаны границы раздела (18) парамагнитной фазы ВЗП и «экситонного антиферромагнетизма» для $\pi e T_s/2\gamma w = 0.5$ при $\pi e(T_s - T_t)/2\gamma w = 10^{-1}$, $5\cdot 10^{-2}$ и 10^{-2} (линии *1*, *2*, *3* соответственно). Нетрудно видеть, что с уменьшением разности $T_s - T_t$ линия фазовых переходов второго рода приближается к границе области существования (17), на которой $\beta_1 = \beta_2 - \beta_3^2/\alpha_A$.

Интересно отметить, что рассматриваемая модель допускает также антиферромагнитные фазовые переходы первого рода. С этой целью подробнее рассмотрим случай $T_s = T_t$, когда $\Theta = T_s$. Тогда из (15) получаем $\Delta_t^2 = \Delta_s^2$; однако правее точки C, находящейся на пересечении прямой $T = T_s$ и границы $\beta_1 = \beta_2 - \beta_3^2/\alpha_A$, возникновение состояния «экситонного антиферромагнетизма» энергетически выгодно не при $T = T_s$, а на границе области существования, которая является, таким образом, линией фазовых переходов первого рода

$$\frac{7\zeta(3)}{24} = -\frac{N'^2(0)}{N''(0)\,N(0)}\,\frac{T_{N_I}^2}{T_{N_I}^2 - T_A^2}\ln^2\frac{2\gamma w}{\pi e T_{N_I}}. \tag{19}$$

О первом роде антиферромагнитного перехода свидетельствует скачкообразное появление параметров порядка Δ_t и Δ_A

$$\Delta_t^2 \left(T_{N_{\mathrm{I}}}\right) = \frac{\alpha\left(T_s - T_{N_{\mathrm{I}}}\right)}{2\beta_1}, \quad \Delta_A \left(T_{N_{\mathrm{I}}}\right) = \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_3} \Delta_t^2 \left(T_{N_{\mathrm{I}}}\right).$$

Приведенные выше результаты качественно не изменятся и в том случае, если в разложении Ландау свободной энергии удерживать члены более высокого порядка малости. В частности, следующие по порядку величины члены имеют вид

$$\frac{1}{3} \gamma_1 (\Delta_s^6 + \Delta_t^6) + \gamma_2 (\Delta_s^2 + \Delta_t^2) \Delta_s^2 \Delta_t^2 + \gamma_3 \Delta_A^2 (\Delta_s^2 + \Delta_t^2) + 2\gamma_4 \Delta_s \Delta_t \Delta_A (\Delta_s^2 + \Delta_t^2), \tag{20}$$

где

$$\gamma_4 = -\frac{N'(0)}{N(0)} \frac{7\zeta(3)}{4(\pi T)^2}, \quad \gamma_3 = -\frac{N''(0)}{2N(0)} \ln \frac{2\gamma w}{\pi e^\delta T}, \quad \delta = \frac{3}{2} + \frac{N(0)}{N''(0) w}$$

(выражения для коэффициентов $\gamma_{1,2}$ приведены в [12], поэтому мы их не выписываем). Тогда при $\alpha_t = \alpha_s$ выигрыш в свободной энергии, обусловленный переходом в антиферромагнитное состояние, в окрестности точки C описывается выражением

$$\delta F = -\frac{\alpha_s^2}{4\beta_1^2} \left\{\beta_1 - \beta_2 + \frac{\beta_3^2}{\alpha_A} - \frac{\alpha_s}{\beta_1}\left(\gamma_1 - \gamma_2 - \frac{\gamma_3 \beta_3^2}{\alpha_A^2} + 2\frac{\gamma_4 \beta_3}{\alpha_A}\right)\right\}. \tag{21}$$

Отсюда следует, что с учетом добавки (20) уравнение для температуры Нееля фазового перехода первого рода имеет вид

$$\beta_1 \left(\beta_1 - \beta_2 + \frac{\beta_3^2}{\alpha_A}\right) - \alpha_s \left(\gamma_1 - \gamma_2 - \frac{\gamma_3 \beta_3^2}{\alpha_A^2} + 2\frac{\gamma_4 \beta_3}{\alpha_A}\right) = 0 \tag{22}$$

и отличается от (19) слагаемым, пропорциональным α_s. Аналогичным образом изменяется и уравнение, определяющее $T_{N_{\mathrm{II}}}$

$$\beta_1 \frac{T_s - T_t}{T_s - T_{N_{\mathrm{II}}}} = \beta_1 - \beta_2 + \frac{\beta_3^2}{\alpha_A} - \frac{\alpha_s}{\beta_1} \left(\gamma_1 - \gamma_2 - \frac{\gamma_3 \beta_3^2}{\alpha_A} + 2\frac{\gamma_4 \beta_3}{\alpha_A}\right). \tag{23}$$

Отметим, наконец, что учет членов (20) устраняет также нефизическую расходимость параметров порядка (и свободной энергии) вблизи внутренней границы области (17).

3. Обсуждение результатов

В связи с антиферромагнетизмом окислов ванадия в работе [14] указывалось, что магнитный момент единицы объема не возникает и при сосуществующих ВЗП и ВСП, сдвинутых по фазе на $\pi/2$. В терминах изотопических операторов это обстоятельство является следствием антикоммутативности матриц τ_1 и τ_2, определяющих добавку $\Delta_s \tau_1 + \Delta_t (\mathbf{P}\sigma) \tau_2$ к одночастичному гамильтониану. Уравнение баланса числа электронов получается из (8) заменой $\varepsilon_\pm \to \varepsilon = \sqrt{\xi^2 + \Delta_s^2 + \Delta_t^2}$ и $\delta\mu_\pm \to \delta\mu$. Подобное вырождение спектра одночастичных возбуждений по сравнению с «экситонным антиферромагнетиком» приводит к тому, что за вычетом членов $a_s \Delta_s^2$ и $a_t \Delta_t^2$ разложение функционала Ландау свободной энергии для соизмеримых ВСП и ВЗП является разложением по степеням суммы $\Delta_s^2 + \Delta_t^2$. В результате уравнения для параметров порядка имеют решение лишь при $T_s = T_t$, что существенно сужает, очевидно, возможности применения такой модели для объяснения свойств реальных антиферромагнетиков с ВЗП и, в частности, фаз Магнелли.

В то же время при любых T_s и T_t корректный учет вклада индуцированного двухзонного антиферромагнетизма, приводящего, согласно (13) и

(9), к дополнительному понижению энергии основного состояния системы, показывает возможность сосуществования однофазных соизмеримых ВЗП и ВСП по крайней мере в высокотемпературной области, где справедливо разложение (9), (20). Вопрос о том, какие из двух ($\gamma=0$ или $\pi/2$) ВЗП и, ниже T_N, ВСП реализуются, зависит от соотношения вершин θ_1 и θ_2 (см. (6)). В простейшем случае, когда $q=1/2\,G$ (G — вектор обратной решетки), неинвариантность вершины $\hat{\Gamma}$ относительно вращений в плоскости XY изотопического пространства отражает энергетическую неэквивалентность волн плотности, максимумы амплитуды которых приходятся на узлы и междоузлия кристаллической решетки. Такая неэквивалентность снимается для несоизмеримых структур, что в отсутствие пиннинга волн плотности примесями приводит, в частности, к появлению безактивационной фазовой (или трансляционной) моды спиновых волн [17, 18].

Представленная модель не учитывает особенностей микроскопической структуры окислов ванадия и потому неприменима для описания антиферромагнитных свойств этих соединений. С другой стороны, в работах [13, 14], где была построена такая феноменологическая теория, исключался из рассмотрения двухзонный параметр порядка Δ_A. Непосредственным сравнением соответствующих выражений для величин Δ_s^2 и Δ_t^2 нетрудно, однако, убедиться, что выводы феноменологической теории [13, 14] остаются справедливыми с точностью до перенормировки коэффициента β_2, под которым следует понимать величину $\beta_2-\beta_3^2/\alpha_A$. При учете членов более высокого порядка малости в разложении свободной энергии перенормировка затрагивает также коэффициент γ_2.

Список литературы

[1] Куликов Н. И., Тугушев В. В. // УФН. 1984. Т. 144. № 4. С. 643—680.
[2] Кулатов Э. Т., Куликов Н. И., Тугушев В. В. // Тр. Ин-та общ. физ. 1986. № 3. С. 122—142.
[3] Ахиезер И. А., Баранник Е. А. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 3. С. 3—21.
[4] Силин В. П. // Препринт ФИАН № 141. М., 1982. 27 с.
[5] Козлов А. Н., Максимов Л. А. // ЖЭТФ. 1965. Т. 48. № 4. С. 1184—1193.
[6] Fedders P. A., Martin P. C. // Phys. Rev. 1966. V. 143. N 1. P. 245—259.
[7] Ахиезер И. А., Чудновский Е. М. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 7. С. 1907—1913.
[8] Силин В. П., Солонцов А. З. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. № 3. С. 1073—1084.
[9] Уайт Р. Квантовая теория магнетизма: Пер. с англ. М., 1985. 304 с.
[10] Волков Б. А., Копаев Ю. В., Русинов А. И. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 5. С. 1899—1914.
[11] Волков Б. А., Русинов А. И., Тимеров Р. Х. // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. № 3. С. 1130—1141.
[12] Волков Б. А., Тугушев В. В. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 5. С. 2104—2116.
[13] Копаев Ю. В., Мокеров В. Г. // ДАН СССР. 1982. Т. 264. № 6. С. 1370—1374.
[14] Idlis B. G., Kopaev Yu. V. // Sol. St. Comm. 1983. V. 45. N 3. P. 301—304.
[15] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., 1962. 443 с.
[16] Rice T. M. // Phys. Rev. B. 1970. V 2. N 9. P. 3619—3630.
[17] Ахиезер И. А., Баранник Е. А. // ФММ. 1984. Т. 57. № 4. С. 658—670.
[18] Psaltakis G. C. // Sol. St. Comm. 1984. V. 51. N 7. P. 535—538.

Харьковский государственный
университет им. А. М. Горького
Харьков

Поступило в Редакцию
26 декабря 1988 г.
В окончательной редакции
25 апреля 1989 г.