

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНИЗОТРОПНЫХ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ МАГНЕТИКАХ С ТЕНЗОРНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА

*В. В. Вальков, Б. В. Федосеев*

Исследовано влияние одноионной анизотропии (ОА) ромбической симметрии на температурную эволюцию негейзенберговского магнетика с биквадратным обменом (БО). Использование представления гамильтониана системы через операторы Хаббарда, а также унитарного преобразования группы  $SU(3)$  в атомном представлении позволило в простом виде получить классификацию возможных решений уравнений самосогласования, определяющих поведение тензорного параметра порядка. Для случая, когда БО превосходит гейзенберговский обмен, определена область параметров ОА, внутри которой температурная эволюция системы характеризуется скачкообразным изменением параметров ромбической решетки. За пределами этой области (большие значения параметров ОА) температурное изменение параметров решетки является плавным. При малых параметрах ОА аналитически вычислены зависимости скачков параметров порядка при ФП 1-го рода. Определена зависимость трикритической точки от параметров гамильтониана при переходе от парафазы как в квадрупольную, так и в ферромагнитную фазы. Изучена зависимость температуры Кюри от интенсивности БО и величин констант ОА.

Известно, что наличием сильного взаимодействия магнитоактивных ионов с деформационным полем решетки объясняются многие структурные фазовые переходы в соединениях на основе редкоземельных элементов [1-3]. В качестве примеров можно привести редкоземельные фосфаты, ванадаты и арсенаты с общей формулой  $ReVO_4$ , где  $Re$  — редкоземельный ион ( $Tb^{3+}$ ,  $Tm^{3+}$ ,  $Dy^{3+}$ , ...), а  $V=P$ ,  $V$  или  $As$ . Эти соединения кристаллизуются в тетрагональной структуре циркона, и при понижении температуры в них наблюдается кристаллографическое искажение с понижением симметрии решетки до ромбической или моноклинной. Часть соединений этого класса, например  $TbAsO_4$ , при дальнейшем охлаждении испытывает второй фазовый переход с возникновением антиферромагнитного упорядочения. В работе [4] последовательность фазовых переходов в  $TbPO_4$  и  $TmAsO_4$  была теоретически описана в рамках модели спинового гамильтониана, включающего в себя квадрупольное взаимодействие между редкоземельными ионами. При этом имеется в виду, что значительный вклад в результирующую константу квадрупольного взаимодействия дает механизм магнитоупругой связи (модель Родбелла—Бина [5]).

В кубических интерметаллических соединениях  $TmZn$ ,  $TmCd$  [6, 7],  $CeAg$  [8] наблюдались фазовые переходы, для объяснения которых также потребовалось учесть взаимодействие высших мультиполей. В отличие от редкоземельных фосфатов, арсенатов и ванадатов эти соединения в парафазе обладают кубической решеткой со структурой  $CsCl$ . Магнитоупругая связь невелика, и характер структурных искажений при фазовых переходах в  $TmZn$  и  $TmCd$  не носит ярко выраженного ян-теллеровского поведения, как это имеет место в  $ReVO_4$ . В  $TmCd$  при температуре  $T=T_Q=3.16$  К происходит фазовый переход (ФП) с возникновением квадрупольного упорядочения. В  $TmZn$   $T_Q=8.55$  К, а при  $T=T_D=8.12$  К происходит второй ФП в ферромагнитную фазу.

Низкие температуры, при которых происходит ФП (в  $\text{TbPO}_4$   $T_Q = 3.5$  К [4]), означают, что эффективные взаимодействия, возникающие между редкоземельными ионами, относительно невелики. В этих условиях особую роль начинают играть эффекты кристаллического поля, действие которого проявляется в нескольких направлениях. Во-первых, происходит расщепление нижнего мультиплета на ряд уровней в соответствии с разложением неприводимого представления группы вращений по неприводимым представлениям точечной группы симметрии парамагнитной фазы. При этом часто реализуется ситуация, когда три нижних уровня отделены от остальных уровней на величину энергии, много большей, чем температура фазового перехода. Так, в  $\text{TbPO}_4$  такими тремя уровнями ионов  $\text{Tb}^{3+}$  являются дублет  $\Gamma_5$  и синглет  $\Gamma_1$  тетрагональной точечной группы. Для интерметаллидов  $\text{TmZn}$  и  $\text{TmCd}$  в кристаллическом поле кубической симметрии мультиплет  $^3H_6$  иона  $\text{Tm}^{3+}$  расщепляется так, что нижним уровнем является триплет  $\Gamma_5^{(1)}$ . При этом верхние состояния расположены по энергии существенно больше, чем  $T_Q$ . Сказанное выше означает, что описание ФП можно осуществить на основе эффективного спинового гамильтониана с величиной спина  $S=1$ . Естественно, что при построении такого эффективного спинового гамильтониана (например, с помощью операторной формы теории возмущений) мы получим гамильтониан, который наряду с взаимодействием дипольных моментов будет содержать взаимодействия высших мультиполей, что приведет к необходимости введения тензорного параметра порядка для полного описания фазовых переходов в системе. Во-вторых, наличие в системе ромбических искажений может существенно повлиять на характер температурной эволюции системы, поскольку возможные энергии одноионной анизотропии (ОА) и парных взаимодействий сравнимы по величине. Рассмотрению термодинамических свойств таких систем и посвящена данная работа. Исследовано влияние ОА на характер ФП в магнетиках с биквадратным обменом (БО). Все вычисления проведены в приближении анизотропного молекулярного поля, точно учитывающего ОА [9]. Показано, что ОА может привести к смене характера фазового перехода. Определены области параметров ОА, когда температурная эволюция негейзенберговского магнетика характеризуется скачкообразным изменением параметра порядка. Исследовано влияние ОА на температуру ферромагнитного перехода при различных величинах БО.

## 1. Гамильтониан системы и уравнения самосогласования

Учитывая статические искажения кристаллической решетки, запишем гамильтониан системы с квадрупольным взаимодействием в виде следующей суммы:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\nu + \mathcal{H}_{\text{м}} + \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_\Gamma + \mathcal{H}_{\text{кв}}, \quad (1)$$

где первое слагаемое представляет собой энергию упругих деформаций, второе описывает взаимодействие магнитоактивных ионов с деформационным полем решетки,  $\mathcal{H}_A$  — оператор энергии ОА,  $\mathcal{H}_\Gamma$  — гейзенберговский гамильтониан,  $\mathcal{H}_{\text{кв}}$  описывает квадрупольное взаимодействие без учета магнитоупругой связи. Конкретный вид слагаемых  $\mathcal{H}$  зависит от симметрии рассматриваемого магнетика в парамагнитной фазе. Основываясь на конкретной симметрии кристалла в парафазе (например, кубической), можно в гамильтониане со структурой типа (1) учесть члены  $\mathcal{H}_\nu$  и  $\mathcal{H}_{\text{м}}$ , что приведет к перенормировке констант квадрупольного взаимодействия [6] (механизм Родбелла—Бина [5]). При этом следует помнить, что возникновение отличного от нуля любого из средних компонент тензорного параметра порядка

$$q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle, \quad q_2^2 = \langle O_2^2 \rangle, \quad (2)$$

где компоненты оператора квадрупольного момента  $O_{2f}^0$  и  $O_{2f}^2$  связаны со спиновыми операторами следующим образом:

$$O_{2f}^0 = 3(S_{\vec{f}}) - S(S+1), \quad O_{2f}^2 = (S_{\vec{f}})^2 - (S_{\vec{f}}^y)^2 = \frac{1}{2} [(S_{\vec{f}}^x)^2 + (S_{\vec{f}}^z)^2],$$

из-за наличия магнитоупругой связи в системе приведет к искажению кристаллической решетки. Так, если в системе отлично от нуля только  $q_2^0$ , то симметрия решетки будет тетрагональной. При  $q_2^0 \neq 0$  и  $q_2^2 \neq 0$  решетка становится ромбической.

Из сказанного следует, что для решения поставленной задачи нам достаточно ограничиться рассмотрением следующего модельного гамильтониана:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{fg} [I_{fg}(S_f S_g) + K_{fg}(S_f S_g)^2] - \sum_{fg} [B_{2f}^0 O_{2f}^0 + B_{2f}^2 O_{2f}^2], \quad (3)$$

где первое слагаемое соответствует учету гейзенберговского и биквадратного обменных взаимодействий соответственно, а второе слагаемое — учету ОА в наиболее общей для  $S=1$  форме. Прежде чем выписать в явном виде уравнения самосогласования, отметим, что в отсутствие внешнего магнитного поля  $H$  спонтанный магнитный момент  $\sigma$ , если он отличен от нуля, может быть ориентирован только вдоль одной из осей системы координат. Если  $B_{2f}^2 > 0$ , то, как нетрудно убедиться, намагниченность системы может ориентироваться либо вдоль оси  $Oz$ , либо вдоль оси  $Ox$ . При  $B_{2f}^2 < 0$  намагниченность ориентируется либо вдоль оси  $Oz$ , либо вдоль оси  $Oy$ . Видно, что достаточно ограничиться исследованием случая  $B_{2f}^2 \geq 0$ .

Для записи уравнений самосогласования в удобной для классификации возможных решений форме целесообразно записать гамильтониан (3) в представлении операторов Хаббарда. С этой целью введем собственные состояния оператора  $S^z$

$$S^z |n\rangle = (S - n) |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2 \quad (4)$$

и построим операторы Хаббарда  $X^{nm} = |n\rangle \langle m|$ . Тогда, выразив спиновые и квадрупольные операторы через  $X^{nm}$ , нетрудно получить вид гамильтониана (3) в терминах  $X$ -операторов. После этого совершим унитарное преобразование [10]

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}(a) = U(a) \mathcal{H} U^\dagger(a), \quad (5)$$

где

$$U(a) = \prod_f \exp [a (X_f^{02} - X_f^{20})]. \quad (6)$$

Законы преобразования для операторов Хаббарда приведены в [10].

Потребовав, чтобы в приближении молекулярного поля одноионный гамильтониан  $\mathcal{H}_0$  имел диагональный вид, находим уравнение на угол  $a$

$$[(I_0 - K_0)(N_0 - N_2) \sin 2a - B_2^0] \cos 2a = 0. \quad (7)$$

При этом одноионный гамильтониан записывается в виде

$$\mathcal{H}_0 = E_0 + \sum_f (\varepsilon_{10} X_f^{11} + \varepsilon_{20} X_f^{22}), \quad (8)$$

где

$$E_0/N = -\frac{3}{4} K_0 - B_2^0 - B_2^2 \sin 2a + \frac{3}{4} K_0 N_1 - \frac{1}{2} [(I_0 - \frac{1}{2} K_0) \cos^2 2a + \frac{1}{2} K_0 \sin 2a] \times \\ \times [1 - (N_1 + 2N_2)^2]. \quad (9)$$

Энергии  $\varepsilon_{10}$  и  $\varepsilon_{20}$  определяются выражениями

$$\varepsilon_{10} = (I_0 - \frac{1}{2} K_0) \sigma \cos 2a + K_1 q_2^2 \sin 2a + B_2^0 + B_2^2 \sin 2a, \\ \varepsilon_{20} = 2(I_0 - \frac{1}{2} K_0) \sigma \cos 2a + K_1 q_2^2 \sin 2a + 2B_2^2 \sin 2a. \quad (10)$$

Средние значения компонент параметра порядка равны

$$\sigma = (N_0 - N_2) \cos 2\alpha, \quad q_2^0 = 1 - 3N_1, \quad q_3^0 = (N_0 - N_2) \sin 2\alpha, \\ N_i = \langle X^{ii} \rangle = \frac{\exp(-\varepsilon_{i0}/T)}{\sum_{j=0}^2 [\exp(-\varepsilon_{j0}/T)]}, \quad \varepsilon_{00} = 0. \quad (11)$$

Уравнение (7) и приведенные выше выражения позволяют исследовать ФП в рассматриваемом магнетике. Характер температурной эволюции системы зависит от симметрии парамагнитной фазы. В изотропном пределе ( $B_2^0 = -B_3^0 = 0$ ) результаты исследований приведены в работе [11].

Рассмотрение температурного поведения анизотропного негейзенберговского магнетика начнем со случая, когда парафаза обладает тетрагональной симметрией.

## 2. Одноосный магнетик ( $B_2^0 = 0$ )

В этом случае уравнение (7) приобретает более простой вид

$$(I_0 - K_0)(N_0 - N_2) \sin 2\alpha \cos 2\alpha = 0. \quad (12)$$

Для  $K_0 \neq I_0$  возможны три типа решений, описывающих три качественно различных состояния исследуемого магнетика

$$A) N_0 = N_2, \quad B) \cos 2\alpha = 0, \quad B) \sin 2\alpha = 0. \quad (13)$$

В каком из состояний при данной температуре находится система, определяется из анализа свободной энергии. Не останавливаясь на деталях исследований, приведем окончательные выводы.

Если  $K_0 > I_0$ , то могут реализовываться только решения типа «А» и «Б». При отрицательных  $B_2^0$  (анизотропия типа «легкая плоскость») стабильному решению соответствует только решение типа «А», когда  $\sigma = 0$ ,  $q_3^0 = 0$ . Отличной от нуля компонентой параметра порядка является  $q_2^0$ . Уравнение самосогласования для  $q_2^0$  может быть записано в виде

$$3B_2^0 + \frac{1}{2}K_0q_2^0 = T \ln [(1 + q_2^0/2)/(1 - q_2^0)]. \quad (14)$$

Видно, что при  $B_2^0 \neq 0$ ,  $q_2^0 \neq 0$ . Физически это обусловлено тем, что слагаемое гамильтониана  $B_2^0 O_{2f}^0$  играет роль внешнего квадрупольного поля, индуцирующего  $q_2^0$ .

Для отрицательных  $B_2^0$  при  $T=0$ ,  $q_2^0 = -2$ . Увеличение температуры приводит к плавному уменьшению  $|q_2^0|$ , если

$$3B_2^0 < (3B_2^0)_{\text{крит}} = -K_0(2 - 3 \ln 2)/8 \approx -0.0099K_0.$$

В области  $(3B_2^0)_{\text{крит}} < 3B_2^0 < 0$  изменение  $q_2^0$  приобретает при температуре  $T_{\bar{q}}$  скачкообразный характер.  $T_{\bar{q}}$  плавно увеличивается от значения  $T_{\bar{q}} = -K_0/4 \ln 2 \approx 0.361 K_0$  для  $B_2^0 = 0$  [11] до значения  $T_{\bar{q}} = 3K_0/8 = 0.375 K_0$  при  $3B_2^0 = (3B_2^0)_{\text{крит}}$ . Отметим, что в любом случае при  $B_2^0 < 0$  и  $K_0 > I_0$  система находится в тетрагональной фазе.

Более интересное поведение имеет место для случая легкоосной анизотропии ( $B_2^0 > 0$ ). При  $T=0$ , как было показано в работе [12], основному состоянию системы соответствует квадрупольная фаза с  $q_2^0 = q_3^0 = 1$ . Состоянию системы, когда  $q_2^0, q_3^0 \neq 0$ , соответствует решение типа «Б». В этом случае  $\sigma = 0$ , а уравнение самосогласования для нахождения  $q_2^0$  и  $q_3^0$  записывается следующим образом:

$$6B_2^0 + K_0q_2^0 = T \ln \left[ \frac{\left( \left( 1 + \frac{1}{2}q_2^0 \right)^2 - \left( \frac{3}{2}q_3^0 \right)^2 \right)}{(1 - q_2^0)^2} \right], \\ K_0q_3^0 = T \ln \left[ \frac{\left( 1 + \frac{1}{2}q_2^0 + \frac{3}{2}q_3^0 \right)}{\left( 1 + \frac{1}{2}q_2^0 - \frac{3}{2}q_3^0 \right)} \right], \quad (15)$$

Характер изменения системы при увеличении  $T$  зависит от значения  $B_2^0$ . В области

$$0 < 3B_2^0 < (3B_2^0)'_{\text{крит}} = \frac{K_0}{6} \left( \frac{7}{3} \ln \frac{7}{4} - 1 \right) \approx 0.051K_0 \quad (16)$$

увеличение температуры приводит к ФП 1-го рода из ромбической фазы в тетрагональную. В точке перехода, когда  $T = T_Q$ , происходит скачкообразное изменение  $q_2^0$  от конечного значения до нуля. Параметр же  $q_2^0$  остается конечным и при  $T > T_Q$ . Увеличение  $B_2^0$  приводит к быстрому уменьшению скачков  $\Delta q_2^0$  и  $\Delta q_2^2$  в точке перехода. При  $B_2^0 = (B_2^0)'_{\text{крит}}$  ФП становится плавным. В трикритической точке

$$q_2^0 = 1/3, \quad T_Q = 7K_0/18. \quad (17)$$

В области  $B_2^0 > (B_2^0)'_{\text{крит}}$  переход системы из ромбической фазы (квадрупольное упорядочение  $q_2^0 \neq 0, q_2^2 \neq 0$ ) в тетрагональную фазу с  $q_2^0 \neq 0, q_2^2 = 0$

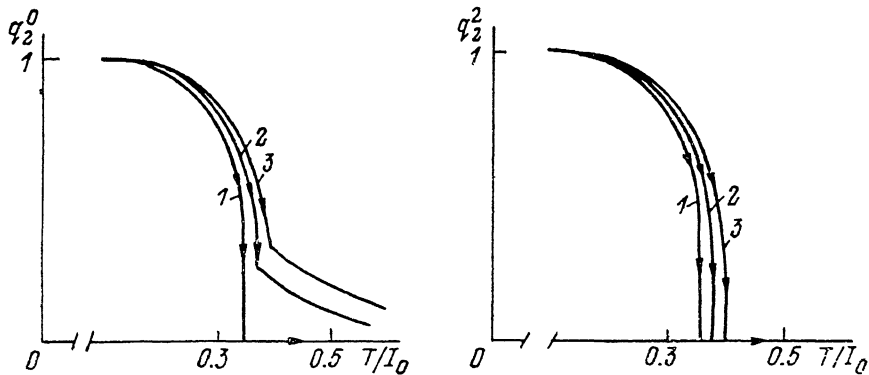


Рис. 1. Температурная эволюция компонент квадрупольного момента ( $B_2^2 = 0$ ):  $B_2^0 = 0$  (1)  $0 < B_2^0 < (B_2^0)'_{\text{крит}}$  (2),  $(B_2^0)'_{\text{крит}} < B_2^0$  (3).

происходит путем ФП 2-го рода. При этом температура  $T_Q$  этого перехода находится из уравнения

$$T_Q = K_0 / (2 + \exp[-3 + (K_0 - 3B_2^0)/T_Q]). \quad (18)$$

Видно, что при  $3B_2^0 \geq K_0$   $T_Q \approx K_0/2$ .

Изменение  $q_2^0$  и  $q_2^2$  для  $K_0 > I_0$  и  $B_2^0 > 0$  при изменении  $T$  показано на рис. 1.

Обсудим температурное поведение системы при  $K_0 < I_0$ . Если  $T = 0$ , то магнетик может находиться в трех состояниях в зависимости от величины  $B_2^0$  [12]. При положительных  $B_2^0$  мы имеем легкоосный ферромагнетик. Температурное изменение в феррофазе описывается решением типа «В»

$$\sin 2\alpha = 0, \quad q_2^2 = 0, \quad \sigma \neq 0, \quad q_2^0 \neq 0.$$

Уравнения самосогласования в этом случае принимают вид

$$\begin{aligned} 6B_2^0 + K_0 q_2^0 &= T \ln \left[ \left( \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 \right)^2 - \left( \frac{3}{2} \sigma \right)^2 \right) / (1 - q_2^0)^2 \right], \\ 2 \left( I_0 - \frac{1}{2} K_0 \right) \sigma &= T \ln \left[ \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 + \frac{3}{2} \sigma \right) / \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 - \frac{3}{2} \sigma \right) \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

В изотропном пределе, как показано в [11], в области  $0 < K_0 < 2I_0/3$  при повышении температуры имеет место ФП 2-го рода из ферромагнитного состояния ( $\sigma \neq 0$ ) в парамагнитное ( $\sigma = 0$ ). При этом в феррофазе одновременно с  $\sigma$  отлично от нуля и  $q_2^0$ . Зависимость температуры Кюри  $T_c$  от  $K_0$  имеет линейный вид  $T_c = 2I_0/3 - K_0/2$ . При  $K_0 = 2I_0/3$  происходит смена

характера ФП со второго рода на первый, так что в области  $2I_0/3 < K_0 < I_0$  переход в феррофазу сопровождается скачком намагниченности в точке перехода.

Включение одноосной анизотропии приводит к изменению как самой точки перехода  $T_c$ , так и положения трикритической точки. Заметим, что для трикритической точки

$$\begin{aligned} q_2^0 &= (3K_0 - 2I_0)/(2I_0 + K_0), \\ T_c &= (2I_0 - K_0)(2I_0 + 5K_0)/6(2I_0 + K_0), \\ 6B_2^0 + K_0 \left[ \frac{3K_0 - 2I_0}{2I_0 + K_0} \right] &= \frac{2I_0 - K_0}{3} \left( \frac{2I_0 + 5K_0}{2I_0 + K_0} \right) \ln \left( \frac{2I_0 + 5K_0}{4(2I_0 - K_0)} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

В области малых  $B_2^0$ :  $(K_0)_{\text{крит}} \approx 2I_0/3 + 8B_2^0$ . Увеличение  $B_2^0$  приводит к возрастанию того критического значения  $K_0$ , начиная с которого ФП из ферромагнитного состояния в парафазу становится первого рода. Поскольку

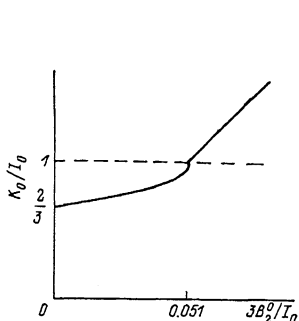


Рис. 2. Диаграмма характера ФП легкого магнетика с биквадратным обменом.

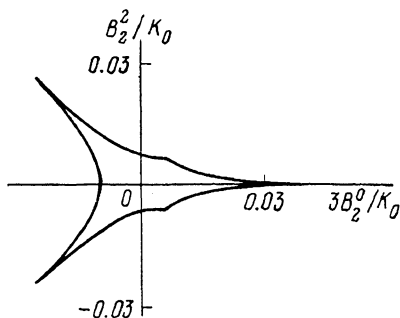


Рис. 3. Область существования скачкообразного температурного поведения  $q_2^0$  и  $q_2^1$  при  $K_0 > I_0$ .

же феррофаза соответствует стабильному состоянию лишь при  $K_0 < I_0$ , то очевидно, что начиная с некоторого значения  $B_2^0$  область существования ФП 1-го рода в феррофазу исчезнет.

На рис. 2 зависимость  $(K_0)_{\text{крит}}$  от  $B_2^0$  показана сплошной линией. Ниже этой линии ФП в упорядоченное состояние осуществляется как ФП 2-го рода. При этом для области параметров, лежащей ниже штриховой линии, упорядоченной фазой является феррофаза, тогда как при  $K_0 > I_0$  реализуется квадрупольное упорядочение.

В заключение этого раздела заметим, что при  $B_2^0 > (B_2^0)_{\text{крит}}$  переход в феррофазу происходит при температуре  $T_c$ , удовлетворяющей уравнению

$$T_c = (2I_0 - K_0) / \{2 + \exp[-3/(2I_0 + K_0) + (K_0 - 3B_2^0)/T_c]\}. \quad (21)$$

При этом, как и в случае ФП 1-го рода, ромбических искажений решетка не испытывает ( $q_2^2 = 0$ ), поскольку изменение параметров решетки осуществляется в пределах тетрагональной сингонии.

### 3. Двухосный магнетик ( $B_2^2 \neq 0$ )

Если  $B_2^2 \neq 0$ , то уравнение (7) допускает существование двух классов решений

$$\cos 2\alpha = 0, \quad (I_0 - K_0)(N_0 - N_2) \sin 2\alpha = B_2^2.$$

Очевидно, что второй тип решений возможен лишь при  $|B_2^2| \leq |I_0 - K_0|$ . Напомним, что нам достаточно ограничиться исследованием случая  $B_2^2 > 0$ .

Из анализа следует, что в области  $B_2^2 > I_0 - K_0$  температурная эволюция системы осуществляется в рамках решения  $\cos 2\alpha = 0$  ( $\sigma = 0$ ). Уравнения самосогласования в этом случае имеют вид

$$6B_2^0 + K_0 q_2^0 = T \ln \left[ \left( \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 \right)^2 - (3q_2^0/2)^2 \right) / (1 - q_2^0)^2 \right],$$

$$2B_2^0 + K_0 q_2^0 = T \ln \left[ \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 + \frac{3}{2} q_2^0 \right) / \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 - \frac{3}{2} q_2^0 \right) \right]. \quad (22)$$

Очевидно, что для рассматриваемого двухосного магнетика  $q_2^0$  и  $q_3^0$  всегда отличны от нуля, так что при любых температурах решетка является ромбической. При изменении температуры происходят дополнительные искажения. Ясно также и то, что существует область параметров  $B_2^0$  и  $B_3^0$ , в пределах которой уменьшение температуры приведет к скачкообразному изменению параметров ромбической решетки вследствие скачкообразного изменения  $q_2^0$  и  $q_3^0$ . При этом слева от точки перехода

$$q_2^0 = 1/2 + \delta, \quad q_3^0 = 1/2 + \epsilon,$$

где

$$\delta = \left( \frac{3B_3^0}{K_0} \right) \left( \frac{\ln 2}{3 - 2 \ln 2} \right) \left( \frac{9 - 8 \ln 2}{4 \ln 2 - 3} \right) + \left( \frac{B_2^0}{K_0} \right) \left( \frac{\ln 2}{3 - 2 \ln 2} \right) \left( \frac{15 - 8 \ln 2}{4 \ln 2 - 3} \right),$$

$$\epsilon = \left( \frac{3B_2^0}{K_0} \right) \left( \frac{\ln 2}{3 - 2 \ln 2} \right) \left( \frac{8 \ln 2 - 3}{4 \ln 2 - 3} \right) + \left( \frac{B_3^0}{K_0} \right) \left( \frac{\ln 2}{3 - 2 \ln 2} \right) \left( \frac{27 - 24 \ln 2}{4 \ln 2 - 3} \right). \quad (23)$$

Справа от точки перехода

$$q_2^0 = \left( \frac{8 \ln 2}{3 - 4 \ln 2} \right) \left( \frac{B_3^0}{K_0} \right), \quad q_3^0 = \left( \frac{8 \ln 2}{3 - 4 \ln 2} \right) \left( \frac{3B_2^0}{K_0} \right). \quad (24)$$

Эти выражения справедливы в области малых  $B_2^0$  и  $B_3^0$ . Конкретные ограничения на область применимости следуют из требования  $\epsilon, \delta \ll 1$ . В этом случае температура, при которой происходит скачкообразное изменение параметров  $q_2^0$  и  $q_3^0$ , определяется выражением

$$T_Q(B_2^0, B_3^0) = T_Q(0, 0) [1 + 6(B_2^0 + B_3^0)/K_0], \quad (25)$$

где

$$T_Q(0, 0) = K_0/4 \ln 2.$$

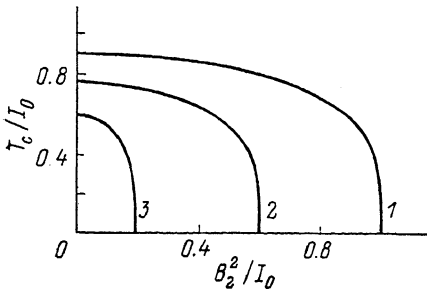


Рис. 4. Зависимость температуры перехода в ферромагнитную фазу от величины  $B_2^0$  ( $B_3^0 = 0.4 I_0$ ).  $K_0 = 0$  (1),  $0.4 I_0$  (2),  $0.8 I_0$  (3).

На рис. 3 показана область, внутри которой происходит скачкообразное изменение параметра порядка. За пределами этой области  $q_2^0$  и  $q_3^0$ , а значит, и параметры решетки изменяются непрерывно.

Если  $B_2^0 < (I_0 - K_0)$  и  $B_3^0 > 0$ , то при  $T \rightarrow 0$ ,  $\sigma \neq 0$  [12]. В этом случае температурная эволюция осуществляется в рамках второго класса решений

$$(I_0 - K_0)(N_0 - N_2) \sin 2\alpha = B_3^0.$$

При  $T < T_c$  введем приведенный параметр порядка  $p$

$$p = \sqrt{\sigma^2 + (q_2^0)^2} = N_0 - N_2. \quad (26)$$

Используя связь компонент параметра порядка с числами заполнения, находим

$$q_2^0 = (\lg 2\alpha) \sigma = B_3^0 / (I_0 - K_0). \quad (27)$$

Таким образом, в феррофазе  $q_2^0$  не зависит от температуры и определяется только параметрами системы. С учетом этого обстоятельства находим уравнения самосогласования для  $q_2^0$  и  $p$

$$6B_2^0 + K_0 q_2^0 = T \ln \left[ \left( \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 \right)^2 - \left( \frac{3}{2} p \right)^2 \right) / (1 - q_2^0)^2 \right],$$

$$2 \left( I_0 - \frac{1}{2} K_0 \right) p = T \ln \left[ \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 + \frac{3}{2} p \right) / \left( 1 + \frac{1}{2} q_2^0 - \frac{3}{2} p \right) \right]. \quad (28)$$

Формально эти уравнения тождественны уравнениям (19) с точностью до замены  $\sigma$  на  $p$ . Это означает, что температурное поведение  $q_2^0$  и  $p$  в области  $\sigma > 0$  эквивалентно поведению  $q_2^0$  и  $\sigma$  для легкоосного случая. Отличие состоит в том, что  $T_c$  определяется из условия, что в точке перехода  $p$  становится равным  $B_2^0 / (I_0 - K_0)$ . В предположении, что ФП из феррофазы в парафазу ( $\sigma = 0$ ) является ФП 2-го рода, находим уравнение для  $T_c$ .

$$\frac{B_2^0}{(I_0 - K_0)} = \frac{2 \operatorname{sh}(\eta/T_c)}{2 \operatorname{ch}(\eta/T_c) + \exp \left\{ -\frac{3}{2} \frac{K_0}{T_c} \frac{B_2^0}{(I_0 - K_0)} \operatorname{cth}(\eta/T_c) + \frac{(K_0 - 3B_2^0)}{T_c} \right\}}, \quad (29)$$

где

$$\eta = [(I_0 - 1/2 K_0) B_2^0] / (I_0 - K_0).$$

Из решения этого уравнения найдена зависимость температуры ФП от величины ромбической компоненты ОА (рис. 4) для различных значений БО. После фазового перехода поведение системы описывается рассмотренным выше классом решений  $\cos 2\alpha = 0$  (см. уравнения (22)).

Подведем основные качественные итоги исследования. Прежде всего отметим тот факт, что ОА сильным образом влияет на характер перехода в квадрупольную или ферромагнитную фазу. Если в изотропном пределе ФП был 1-го рода, то уже при достаточно малых значениях констант ОА, составляющих по порядку величины  $\approx 10^{-2}$  от характерных энергий парных взаимодействий, ФП становится ФП 2-го рода. Эта тенденция сохраняется и для изоморфного ФП, когда при малых значениях констант ОА ромбической симметрии температурное поведение компонент  $q_2^0$  и  $q_3^0$  квадрупольного момента (а значит, и параметров ромбической решетки) носит скачкообразный характер, тогда как при больших значениях  $B_2^0$  и  $B_3^0$  изменение параметров решетки плавное.

Полученные в работе аналитические выражения для характерных точек фазовых диаграмм, а также графические зависимости температуры перехода в упорядоченное состояние необходимы при обработке экспериментальных данных с целью определения энергии кристаллического поля, параметров гейзенберговского и квадрупольного взаимодействий в соединениях на основе редкоземельных элементов. Не останавливаясь здесь на конкретных веществах, в которых взаимодействие высших мультипольных моментов играет принципиальную роль в формировании физических свойств, отметим, что многочисленные примеры такого рода систем содержатся в [2, 3]. Там же говорилось и о необходимости исследования роли анизотропии в термодинамике негейзенберговских магнетиков.

Обсудим используемое в работе приближение анизотропного молекулярного поля (АМП). Как известно, оно соответствует первому члену ряда теории возмущений по обратному объему межузельных взаимодействий  $R_0^{-3}$ . Если квадрупольное взаимодействие между магнитоактивными ионами формируется в основном за счет сильной магнитоупругой связи, то приближение АМП оправдывается тем, что статические искажения решетки приводят к большому радиусу парных взаимодействий. В этом случае результаты по переходу системы в квадрупольно-упорядоченную фазу справедливы не только в качественном, но и в количественном отношении. Что же касается ФП в феррофазу, то полученные результаты носят, естественно, качественный характер. Однако, как уже известно для более простых систем с тензорным взаимодействием [13], выход за рамки приближения среднего поля не приводит к принципиальным изменениям результатов. Важно, что в задачах с большой энергией ОА перво-степенное значение приобретает корректный учет сильных одноузельных



корреляций. Но в приближении АМП это достигается автоматически, поскольку гамма-тонны ОА включаются в нулевой гамма-тонн задачи и тем самым ОА учитывается точно. В совокуности отмеченные обстоятельства и позволяют при рассмотрении термодинамических свойств не-гейзенберговских магнетиков с сильными эффектами кристаллического поля ограничиться приближением АМП.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Звездин А. К., Матвеев В. М., Мухин А. А., Попов А. И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М., 1985. 294 с.
- [2] Нагаев Э. Л. // УФН. 1982. Т. 136. С. 61—101.
- [3] Нагаев Э. Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М., 1988. 232 с.
- [4] Sivadiere J. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 2004—2015.
- [5] Bean C. P., Rodbell D. S. // Phys. Rev. 1962. V. 126. N 1. P. 104—116.
- [6] Morin P., Schmitt D. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. P. 4424—4428.
- [7] Morin P., Rouchy J., Schmitt O. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 10. P. 5401—5413.
- [8] Morin P. // JMMM. 1988. V. 71. N 2. P. 151—164.
- [9] Дружинин С. С., Запасский С. П., Повышев В. М. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 1. С. 23—29.
- [10] Вальков В. В. // ТМФ. 1988. Т. 76. № 1. С. 143—153.
- [11] Nauciel-Bloch M., Sharma G., Gastets A. // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 11. P. 4603—4609.
- [12] Вальков В. В., Мацулева Г. Н., Овчинников С. Г. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 6. № 6. С. 60—68.
- [13] Онуфриева Ф. П. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 3. С. 899—920.

Институт физики им. Л. В. Киренского  
СО АН СССР  
Красноярск

Поступило в Редакцию  
23 мая 1990 г.