

Температурные магнитные фазовые переходы при конкуренции одно- и межоионной магнитных анизотропий

© В.М. Калита, В.М. Локтев*

Институт физики Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина

* Институт теоретической физики Национальной академии наук Украины,
03143 Киев, Украина

E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 28 августа 2004 г.)

Описаны температурные фазовые переходы в одноосной ферромагнитной системе спинов с $S = 1$ и конкурирующими одночастичными и двухчастичными анизотропными взаимодействиями. Показано, что в случае одноионной анизотропии легкоплоскостного типа, преобладающей над двухчастичной анизотропией легкоосного типа, переход из парамагнитного состояния в ферромагнитное, намагниченное перпендикулярно оси, происходит в виде магнитного фазового перехода второго рода типа смещения. Если же, наоборот, двухчастичная анизотропия преобладает над одночастичной, то переход в ферромагнитное состояние, намагниченное вдоль оси, будет происходить также непрерывно, но в виде фазового перехода типа беспорядок–порядок. При конкуренции одночастичной и двухчастичной анизотропий второго порядка возможен и ориентационный фазовый переход первого рода с изменением ориентации намагниченности, направленной либо вдоль оси, либо перпендикулярно ей.

Работа частично поддержана грантом Министерства образования и науки Украины (Ф7/514-2001).

1. Введение

Ориентационные магнитные фазовые переходы (ФП) происходят как под действием магнитного поля, так и при изменении температуры. Хорошо известен переход Морина в гематите $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, где при понижении температуры наблюдается ФП от легкоосной ориентации спинов ионов Fe^{3+} , когда они лежат вдоль оси симметрии одноосного кристалла, к легкоплоскостной их ориентации, когда спины лежат перпендикулярно к ставшей трудной оси кристалла [1,2]. Именно такого вида ориентационный ФП будет обсуждаться в настоящей работе. С феноменологической точки зрения его можно объяснить, полагая, что при некоторой температуре T_M , называемой температурой Морина, происходит изменение знака константы анизотропии.

Механизм ориентационного магнитного ФП будет иным, если анизотропия представлена суммой анизотропий разного порядка, константы которых имеют разные знаки. При учете различий в температурной зависимости этих констант [3] можно получить, что в одном температурном интервале преобладающими являются слагаемые анизотропии одного порядка, а в другом — слагаемые анизотропии другого порядка.

Однако подобный феноменологический подход не учитывает различия в типах и механизмах формирования анизотропии. В монографии [4] подробно обсуждаются два принципиально разных по своей природе механизма анизотропных взаимодействий: анизотропия межспиновых взаимодействий и одночастичная (одноионная) анизотропия (ОА), обязанная своим происхождением совместному действию кристаллического поля, в котором находятся магнитные ионы, и спин-орбитальной связи. В [4] указано, что термодинамические средние произ-

ведения проекций спиновых операторов двух соседних ионов и термодинамические средние от проекций спиновых операторов такого же порядка, но определенные на одном ионе, при изменении температуры ведут себя по разному. Это позволяет предположить, что даже в модели анизотропных взаимодействий только второго порядка (но при аккуратном учете различия между действиями межоионной и одноионной анизотропий) возникает возможность для осуществления ориентационного ФП. Причем сразу отметим, что с точки зрения феноменологии такое изменение ориентации намагниченности аналогично ситуации, когда оно вызвано сменой знака константы анизотропии.

Вопрос о конкуренции анизотропий интересен и по другой причине. В [5] показано, что в одноосном ферромагнетике (ФМ) с легкоплоскостной ОА переход из парамагнитного (синглетного) состояния в намагниченное должен быть отнесен к магнитному ФП типа смещения. Главное отличие такого ФП от обычных фазовых переходов типа порядок–беспорядок заключается в том, что намагничивание появляется благодаря поляризации невырожденных ионных состояний, которая в точке ФП возникает спонтанно.

Отметим, что легкоплоскостные магнетики с целым спином и ОА являются типично ван-флековскими системами [6]: в них ионные состояния не имеют проекций спина в легкой плоскости, поэтому упорядочение с ориентацией намагниченности в этой плоскости возможно только за счет магнитного „подмешивания“ (поляризации) основного состояния ионов. Если наряду с ОА легкоплоскостного типа рассмотреть анизотропию межоионную, но конкурирующего легкоосного типа, которая по величине превосходит ОА, то в этом случае переход из парамагнитной фазы в ФМ фазу будет протекать

как переход типа беспорядок–порядок с ориентацией намагниченности вдоль легкой оси. И это понятно, так как в направлении оси проекции спина одноионных состояний не равны нулю, а имеют свои предельные значения.

Следовательно, в зависимости от соотношения между величинами констант ОА легкоплоскостного типа и меж-ионной анизотропии легкоосного типа при их конкуренции можно ожидать изменения типа ФП: при переходе из парамагнитной фазы в ФМ состояние он будет происходить либо как ФП типа порядок–беспорядок, либо как магнитный ФП типа смещения. Следует ожидать еще и ориентационного ФП — уже в ФМ состоянии при температуре, которую далее будем обозначать T_{LO-LP} .

Нужно отметить, что задача влияния конкуренции одноионной и межионной анизотропий на намагничивание известна и ранее рассматривалась, но только в изинговском приближении [7,8]. Однако в этом приближении (т. е. без учета изотропного обмена) с ОА легкоплоскостного типа и конкурирующей межионной анизотропией легкоосного типа невозможно образование порядка с ориентацией спинов в легкой плоскости. В то же время для задач, решаемых в [7,8], изинговское приближение является вполне оправданным.

При малых величинах ОА ее проявление можно описать [9], используя квазиклассическое приближение, когда среднее от оператора ОА заменяют соответствующей комбинацией, построенной из спиновых средних. Но в квазиклассическом приближении конкуренция анизотропии сводится лишь к конкуренции величин их констант, поэтому оговоренного выше температурного различия в действии межионной и одноионной анизотропий возникнуть уже не может. В результате, невзирая на то, что часто используются гамильтонианы, содержащие два типа анизотропий (а этого в случае описания конкретных магнетиков требуют данные экспериментов), обозначенные выше проблемы, связанные с конкуренцией анизотропий, до сих пор, насколько нам известно, не рассматривались.

Рассмотрим далее простейшую модель ориентационных температурных ФП в исходно легкоосном ФМ со спинами ионов с $S = 1$. Она включает изотропные обменные взаимодействия, а также два типа — меж-ионный и одноионный — конкурирующих между собой анизотропных взаимодействий второго порядка.

2. Модельный гамильтониан и его основное состояние

В соответствии с указанным выше запишем исходный модельный гамильтониан анизотропного ФМ

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \mathbf{S}_{\mathbf{n}} \mathbf{S}_{\mathbf{m}} - \frac{\Delta J}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} S_{\mathbf{n}}^Z S_{\mathbf{m}}^Z + D \sum_{\mathbf{n}} (S_{\mathbf{n}}^Z)^2, \quad (1)$$

где \mathbf{n}, \mathbf{m} — векторы, задающие позиции спинов, а „легкой оси“ отвечает координатная ось Z . Первое слагаемое

в (1) описывает изотропный обмен, а второе и третье характеризуют меж-ионную и одноионную анизотропии; соответственно ОА предполагается легкоплоскостного типа, а меж-ионная — легкоосного, (т. е. оба параметра анизотропий в (1) положительны: $\Delta J > 0, D > 0$).

Анализ основного состояния системы (1) проведем в среднеполевом приближении, используя вариационный принцип. В пренебрежении действием межспиновых флуктуаций запишем выражение для энергии E_{gr} основного состояния в расчете на один магнитный ион

$$E_{gr} = -\frac{1}{2} J z s^2 - \frac{1}{2} \Delta J z (s^Z)^2 + D Q^{ZZ}, \quad (2)$$

где s — среднее значение спина ионов в основном состоянии; z — число ближайших соседей, которое изменит (пропорционально) константы парных взаимодействий, поэтому дальше оно будет считаться включенным в J и ΔJ ; и введены квантово-механические средние значения от квадратов Z -проекции операторов спинов, которые в литературе принято называть компонентами квадрупольного спинового момента Q^{ZZ} [10–12].

Зададим для спинов собственные системы координат ξ, η, ζ — такие, чтобы направление среднего спина было ориентировано вдоль оси ζ , а ось ξ лежала в плоскости $Z\xi$. Тогда в собственной системе координат волновая функция основного спинового состояния, как это показано в [13], будет иметь вид

$$\psi_{\mathbf{n}}^{(0)} = \cos \phi |1\rangle_{\mathbf{n}} + \sin \phi |-1\rangle_{\mathbf{n}}, \quad (3)$$

где $|\pm 1\rangle, |0\rangle$ — собственные функции оператора $S_{\mathbf{n}}^{\xi}$ в бра-кет-представлении. С помощью (3) рассчитаем средние значения спина и компонент квадрупольного момента

$$s_0 = \cos 2\phi, \quad Q_0^{\xi\xi} = 1, \quad Q_0^{\zeta\zeta} = \frac{1}{2} (1 + \sin 2\phi), \quad (4)$$

где индекс „0“ означает усреднение по функции (3).

Энергия (2) с использованием (4) приобретает вид

$$E_{gr} = -\frac{1}{2} J \cos^2 2\phi - \frac{1}{2} \Delta J \cos^2 2\phi \cos^2 \theta + D \left[\cos^2 \theta + \frac{\sin^2 \theta}{2} (1 + \sin 2\phi) \right], \quad (5)$$

где θ — угол между спинами и кристаллографической осью Z , или между осью ξ и Z . Отметим, что выбор волновых функций в общем виде в кристаллографической, а не собственной системе координат будет содержать параметры однородного вращения векторов $|\pm 1\rangle_{\mathbf{n}}$ и $|0\rangle_{\mathbf{n}}$ в гильбертовом пространстве, что приводит к сложно интерпретируемой связи между наблюдаемыми и искомыми (вариационными) параметрами.

В используемом нами подходе ориентация спинов в разных фазах в зависимости от величин параметров гамильтониана при $T = 0$ определяется из уравнений, которые следуют из минимизации энергии (5) по ϕ и θ

$$\cos 2\phi [2(J + \Delta J \cos^2 \theta) \sin 2\phi + D \sin^2 \theta] = 0, \quad (6)$$

$$\cos \theta \sin \theta [\Delta J \cos^2 2\phi - D(1 - \sin 2\phi)] = 0. \quad (7)$$

Проанализируем решения этой системы уравнений. Первому из них отвечают равенства $\sin \theta = 0$, $\sin 2\phi = 0$. В этом случае проекции спинов ионов направлены вдоль оси Z , их величины максимальны и равны $s_0 = S = 1$. В этом состоянии энергия (2) определяется выражением

$$E_{\text{gr}}^{(\text{LO})} = -\frac{1}{2}(J + \Delta J) + D. \quad (8)$$

Во втором решении $\cos \theta = 0$, а $\sin 2\phi = -D/2J$. Оно отвечает случаю, когда спины ориентированы перпендикулярно оси Z . Величины проекций спинов для этого решения имеют значения, меньшие предельного $S = 1$, а именно $s_0 = \sqrt{1 - (D/2J)^2}$ [9–13]. Энергия этого состояния не зависит от ΔJ и определяется выражением, существенно отличающимся от (8),

$$E_{\text{gr}}^{(\text{LP})} = \frac{1}{2}(-J + D) - \frac{D^2}{8J}. \quad (9)$$

Возможно еще одно, третье, решение, для которого $\cos 2\phi = 0$. Сокращение величин проекций спинов в этом состоянии максимально: $s_0 = 0$. Это ван-флековское синглетное (парамагнитное) состояние, не имеющее конечной намагниченности [6], в некоторых работах его называют квадрупольным спиновым состоянием [10–12], так как в нем $Q^{\xi\xi} - Q^m \neq 0$, причем эта разность имеет предельное значение; в работе [14] это состояние названо нематическим спиновым состоянием. На наш взгляд, все же более предпочтительнее говорить о ван-флековском синглетном магнетике. Область значений параметров гамильтониана (1), в которой реализуется синглетное состояние, в данной работе не рассматривается.

Как видно из (8), для продольной ориентации намагниченности энергия основного состояния определяется линейной комбинацией параметров модели и соответствует квазиклассическому приближению. Ввиду происходящего квантового сокращения величины проекции спина энергия основного состояния для легкоплоскостного случая не соответствует квазиклассическому приближению. Это выражается в том, что (9) содержит два слагаемых с D , которые вносят в энергию $E_{\text{gr}}^{(\text{LP})}$ вклады с разными знаками, и одно из слагаемых квадратично зависит от величины параметра ОА. Если $T = 0$, то реализующаяся структура соответствует более низкому значению энергий (8) и (9), однако поведение системы может значительно усложниться при $T \neq 0$, когда ее равновесные состояния определяются уже свободной энергией.

3. Свободная энергия одноосного ферромагнетика

Определение термодинамически равновесных состояний модельной системы (1) при $T \neq 0$ требует учета заселенностей всех одноионных состояний. Если при

$T = 0$ ось квантования выбиралась вдоль проекций спинов в основном состоянии ионов, то теперь ось собственной системы координат удобнее направить вдоль намагниченности ФМ. Согласно [13], при таком способе введения систем координат в одноосном ФМ волновая функция основного состояния будет иметь вид (3), а функции одноионных возбужденных состояний примут вид

$$\psi_{\mathbf{n}}^{(1)} = |0\rangle_{\mathbf{n}}; \quad \psi_{\mathbf{n}}^{(2)} = -\sin \phi |1\rangle_{\mathbf{n}} + \cos \phi |-1\rangle_{\mathbf{n}}. \quad (10)$$

С помощью (3) и (10) легко найти величины, относящиеся к одноионным состояниям: парциальные значения проекций спина на ось квантования $s^{(0)} = -s^{(2)} = \cos 2\phi$, $s^{(1)} = 0$; парциальные средние оператора $(S^{\xi})^2$ постоянны и равны 1, 0, 1; соответственно средние оператора $(S^{\xi})^2$ равны $(1 + \sin 2\phi)/2$, 1 и $(1 - \sin 2\phi)/2$.

Запишем выражения для термодинамических средних: модуля среднего спина (средней намагниченности \mathbf{m}) и оператора $\langle S^Z \rangle_T^2$

$$m = 2\Delta p \cos 2\phi, \quad (11)$$

$$\langle S^Z \rangle_T^2 = 2p \cos^2 \theta + (1 - p + \Delta p \sin 2\phi) \sin^2 \theta, \quad (12)$$

где $\Delta p = (p^{(0)} - p^{(2)})/2$, $p = (p^{(0)} + p^{(2)})/2$, а $p^{(0)}$, $p^{(2)}$ — вероятности заполнения состояний с ненулевыми значениями проекций спина на ось квантования (10).

Согласно определению, свободная энергия $F = E - TS_{\text{en}}$, где E — внутренняя энергия, а S_{en} — энтропия, которая в пренебрежении межзельными корреляциями является конфигурационной.

Внутреннюю энергию системы (1) в расчете на одну частицу представим в виде

$$E = -\frac{1}{2}J\mathbf{m}^2 - \frac{1}{2}\Delta J(m^Z)^2 + D\langle S^Z \rangle_T^2, \quad (13)$$

а выражение для энтропии стандартно

$$S_{\text{en}} = -\sum_{j=0,1,2} p^{(j)} \ln p^{(j)}, \quad (14)$$

где $p^{(j)}$ — вероятности одноионных состояний (10), удовлетворяющие очевидному условию $\sum_{j=0,1,2} p^{(j)} = 1$.

С учетом принятых в (11) и (12) обозначений выражение для энтропии запишем в виде

$$S_{\text{en}} = -(p + \Delta p) \ln(p + \Delta p) - (p - \Delta p) \ln(p - \Delta p) - (1 - 2p) \ln(1 - 2p). \quad (15)$$

В результате окончательное выражение для свободной энергии системы (1) принимает вид

$$F = -2(J + \Delta J \cos^2 \theta)(\Delta p)^2 \cos^2 2\phi + D[2p \cos^2 \theta + (1 - p + \Delta p \sin 2\phi) \sin^2 \theta] + T[(p + \Delta p) \ln(p + \Delta p) - (p - \Delta p) \ln(p - \Delta p) - (1 - 2p) \ln(1 - 2p)]. \quad (16)$$

Термодинамически равновесные состояния отвечают минимуму свободной энергии (16). При этом вариационными являются четыре параметра: угол ϕ , определяющий величину поляризации одноионных состояний, угол θ , задающий направление для средней намагниченности, p и Δp , определяющие заселенности поляризованных состояний. Дифференцируя (16) по ним и приравнивая соответствующие производные нулю, получим уравнения состояния

$$\frac{\partial F}{\partial \phi} = 2 \cos 2\phi [4(J + \Delta J \cos^2 \theta) \Delta p \sin 2\phi + D \sin^2 \theta] \Delta p = 0, \quad (17)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = 2 \cos \theta \sin \theta [2\Delta J (\Delta p)^2 \cos^2 2\phi + D(1 - 3p + \Delta p \sin 2\phi)] = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta p} = -4(J + \Delta J \cos^2 \theta) \Delta p \sin^2 2\phi + D \sin 2\phi \sin^2 \theta + T \ln \frac{p + \Delta p}{p - \Delta p} = 0, \quad (19)$$

$$\frac{\partial F}{\partial p} = D(2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + T \ln \frac{p^2 - (\Delta p)^2}{(1 - 2p)^2} = 0. \quad (20)$$

Таким образом, в отличие от результатов работ [4,7,8], полученное выражение для свободной энергии (16), а также уравнения состояния (17), (18) позволяют проследить за поляризацией ионных состояний в синглетных магнетиках.

4. Фазовые переходы при $T \neq 0$

При конечных температурах, как и при $T = 0$, состоянию с намагниченностью, направленной вдоль оси Z , отвечает решение с $\sin \theta = 0$, $\sin 2\phi = 0$, а величины Δp и p определяются из уравнений

$$-4(J + \Delta J) \Delta p + T \ln \frac{p + \Delta p}{p - \Delta p} = 0, \quad (21)$$

$$2D + T \ln \frac{p^2 - (\Delta p)^2}{(1 - 2p)^2} = 0. \quad (22)$$

При этих условиях поляризация спинов предельна — проекции спинов одноионных состояний равны ± 1 . Намагниченность направлена вдоль легкой оси, и ее величина определяется только разностью вероятностей заселения уровней: $m = 2\Delta p$. Это означает, что при ФП из парамагнитной фазы в ФМ состояние с ориентацией намагниченности вдоль легкой оси спонтанно возникающее обменное поле приводит лишь к изменению заселенности одноионных уровней. Такой переход относится к ФП типа беспорядок—порядок.

В парамагнитной фазе заселенность нижнего синглетного состояния с отсутствующей проекцией спина больше заселенностей одноионных состояний с предельными

проекциями спина на ось. В точке ФП происходит спонтанное расщепление дублета, тогда как энергия синглета остается неизменной, причем вблизи $T_C^{(LO)}$ синглетное состояние по-прежнему будет для иона основным. Лишь по мере удаления от $T_C^{(LO)}$ происходит пересечение одноионных уровней.

В легкоплоскостном ФМ состоянии $\cos \theta = 0$, $\sin 2\phi = -D/(4J\Delta p)$, а величины p и Δp удовлетворяют уравнениям

$$-4J\Delta p + T \ln \frac{p + \Delta p}{p - \Delta p} = 0, \quad (23)$$

$$-D + T \ln \frac{p^2 - (\Delta p)^2}{(1 - 2p)^2} = 0. \quad (24)$$

В этой фазе проекции спинов не равны максимальным и определяются из соотношения $s = \cos 2\phi = \sqrt{1 - D^2/(4J\Delta p)^2}$. При возрастании температуры величина Δp уменьшается, вследствие чего происходит уменьшение поляризации одноионных состояний. ФП в парамагнитное состояние происходит при температуре, при которой поляризация отсутствует во всех одноионных состояниях. Таким образом, при $T = T_C^{(LP)}$ величины проекций спинов всех одноионных состояний становятся равными нулю: $s(T_C^{(LP)}) = 0$. Заметим, что теперь ось квантования лежит в легкой плоскости, и в отличие от случая легкоосного ФМ следует говорить о проекциях спина на ось квантования, которая перпендикулярна оси кристалла.

Как видно, образование легкоплоскостного ФМ состояния связано со спонтанным возникновением обменного поля, перпендикулярного оси кристалла, которое поляризует вдоль себя одноионные состояния. Поэтому переход из парамагнитной фазы в легкоплоскостную ФМ фазу относится к магнитному ФП типа смещения [5]. При этом поляризуется нижайший ионный уровень, и в легкоплоскостном ФМ состоянии пересечения одноионных уровней не происходит.

Возникающая поляризация изменяет выражение для намагниченности. В легкоплоскостной ФМ фазе намагниченность определяется выражением $m = 2\sqrt{\Delta p^2 - D^2}/(4J)^2$, где Δp удовлетворяет уравнениям (23) и (24).

Температура перехода $T_C^{(LO)}$ из парамагнитной фазы в легкоосную ФМ фазу находится из трансцендентного уравнения

$$2T_C^{(LO)} - 2(J + \Delta J) + T_C^{(LO)} \exp(D/T_C^{(LO)}) = 0, \quad (25)$$

а температура перехода $T_C^{(LP)}$ из парамагнитного состояния в легкоплоскостную ФМ фазу определяется несколько проще [4]

$$T_C^{(LP)} = \frac{D}{\ln(1 + D/J) - \ln(1 - D/2J)}. \quad (26)$$

ФП из парамагнитного в легкоосное ФМ состояние происходит, если $T_C^{(LO)} > T_C^{(LP)}$. В противном случае

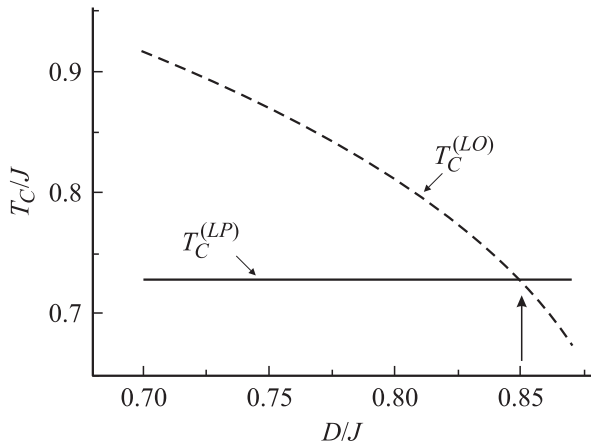


Рис. 1. Графики зависимости критических температур $T_C^{(LP)}$ и $T_C^{(LO)}$ перехода из парамагнитного в легкоплоскостное или в легкоосное ферромагнитное состояние от величины отношения констант одноионной анизотропии и обмена (D/J).

будет происходить переход из парамагнитной фазы в легкоосную ФМ фазу. Однако не очевидно, что при выполнении неравенства $T_C^{(LO)} > T_C^{(LP)}$ легкоосная ФМ фаза останется устойчивой при $T \rightarrow 0$.

Действительно, при малых константах анизотропии $D/J \ll 1$ и $\Delta J/J \ll 1$ выражения для критических температур приобретают вид

$$T_C^{(LO)} = \frac{2}{3}J \left(1 + \frac{\Delta J}{J} - \frac{D}{2J} - \frac{3D^2}{8J^2} \right), \quad (27)$$

$$T_C^{(LP)} = \frac{2}{3}J \left(1 + \frac{D}{4J} - \frac{3D^2}{16J^2} \right). \quad (28)$$

При этом $T_C^{(LO)} > T_C^{(LP)}$, если $\Delta J > \frac{3}{4}D \left(1 + \frac{D}{4J} \right)$. Однако из выражений (8), (9) для энергий основного состояния следует, что легкоосная ФМ фаза будет устойчивой при большей величине константы межионной анизотропии, если $\Delta J > D \left(1 + \frac{D}{4J} \right)$. Таким образом, получаем, что в интервале

$$\frac{3}{4} + \frac{3D}{16J} < \frac{\Delta J}{D} < 1 + \frac{D}{4J} \quad (29)$$

значений константы межионной анизотропии критическая температура перехода в легкоосную ФМ фазу больше температуры перехода в легкоплоскостную ФМ фазу, но в основном состоянии устойчивой будет последняя. Это означает, что, если константы анизотропии удовлетворяют неравенствам (29), при некоторой конечной температуре T_{LO-LP} будет происходить ориентационный ФП из легкоосной ФМ фазы в легкоплоскостную ФМ фазу. Поскольку аналитический расчет этой температуры очень сложен, далее в качестве примера величина T_{LO-LP} будет определена для некоторых фиксированных (и не малых) констант анизотропии.

Сначала на рис. 1 приведем зависимости $T_C^{(LO)}$ и $T_C^{(LP)}$ от величины константы ОА. Кривая для $T_C^{(LP)}$ обозначена

сплошной линией. Как видно, величина $T_C^{(LP)}$ вблизи значения $D/J \sim 0.8$ практически остается неизменной. Это требует некоторых пояснений. В случае изотропного ФМ $T_C = 2J/3$. Появление ОА с $D > 0$ приводит сначала к возрастанию $T_C^{(LP)}$, что видно также из (28), причем возрастание незначительное (до $T_C^{(LP)} \sim 0.728J$) и наблюдается до величин $D/J \sim 0.8$. Далее при возрастании D/J величина $T_C^{(LP)}$ начинает уменьшаться: сначала медленно (как и возрастала), а затем при $D/2J \rightarrow 2$ $T_C^{(LP)}$ быстро устремляется к нулю. Все это связано с логарифмическим характером зависимости (26). На рис. 1 график $T_C^{(LP)}$ относится к области максимума и приведен для достаточно малого интервала изменения величины D/J , поэтому изменения $T_C^{(LP)}$ практически не видны.

Штриховой линией на рис. 1 приведена температура перехода $T_C^{(LO)}$ в легкоосную ФМ фазу. Величина параметра межионной анизотропии взята равной $\Delta J/J = 0.9$. До значений $D/J \approx 0.85$ $T_C^{(LO)} > T_C^{(LP)}$, а дальше знак неравенства изменяется на противоположный.

На рис. 2 приведена энергия основного состояния в зависимости от величины константы ОА при $\Delta J = 0.9J$. Как и на рис. 1, кривая энергии основного состояния легкоплоскостной ФМ фазы при $T = 0$ обозначена сплошной линией. Штриховой линией обозначен ход энергии легкоосной ФМ фазы. Видно, что эта фаза имеет энергию основного состояния меньшую, чем энергия легкоплоскостной фазы, если $D/J < 0.75$, а в интервале $0.75 < D/J < 0.85$ легкоосная фаза уже неустойчива.

Величину T_{LO-LP} будем определять из условия равенства свободных энергий обеих ФМ фаз в точке ФП. Температурные зависимости свободных энергий для этих фаз получим, подставляя в (16) решения уравнений (21)–(24). На рис. 3 приведены кривые свободных энергий в интервале температур их пересечения. Пара-

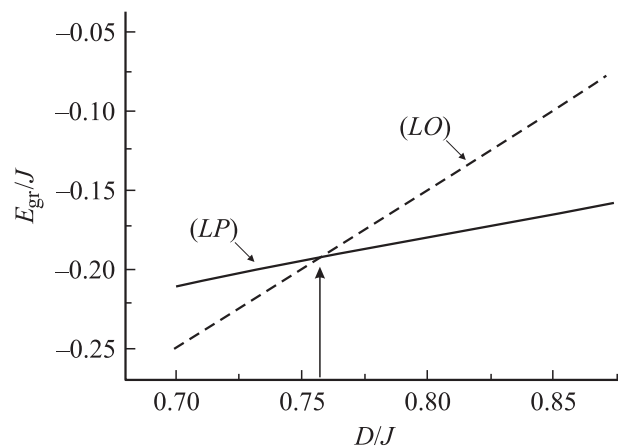


Рис. 2. Зависимости энергий основного состояния ферромагнетика (E_{gr}/J) от величины отношения констант одноионной анизотропии и обмена (D/J) для двух ориентаций намагниченности: сплошная линия отвечает намагниченности, лежащей в плоскости, а штриховая — намагниченности, направленной вдоль оси.

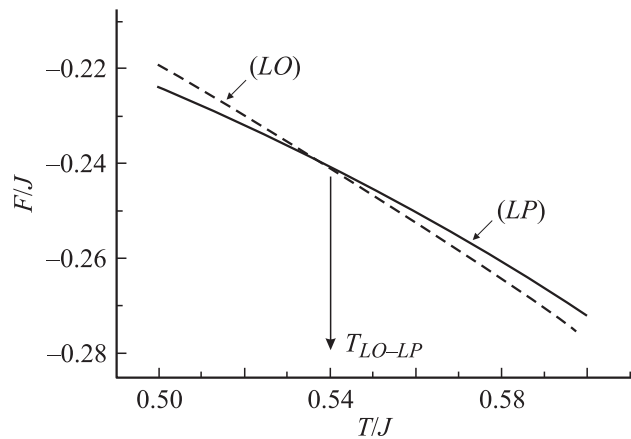


Рис. 3. Кривые зависимостей свободных энергий (F/J) от температуры (T/J) для легкоосной и легкоплоскостной ферромагнитных фаз.

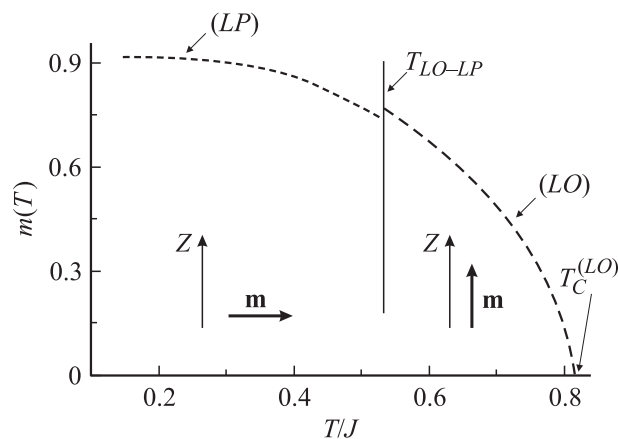


Рис. 4. Температурная зависимость намагниченности $m(T)$ при ориентационном фазовом переходе.

метры модели приняты равными $\Delta J = 0.9J$, а $D = 0.8J$. Зависимость свободной энергии легкоосной фазы на рис. 3 изображена штриховой линией, а энергия легкоплоскостной фазы — сплошной линией. Эти кривые пересекаются при $T_{LO-LP} \approx 0.54J$. При $T < T_{LO-LP}$ легкоосная фаза имеет большее значение свободной энергии состояния, когда намагниченность направлена перпендикулярно оси Z . При $T > T_{LO-LP}$, наоборот, свободная энергия легкоосной ФМ фазы ниже, чем свободная энергия легкоплоскостной фазы. Итак, для приведенных значений параметров модели в точке $T_C^{(LO)} = 0.825J$ происходит ФП второго рода типа беспорядок–порядок из парамагнитной фазы в легкоосную ФМ фазу, а при $T_{LO-LP} = 0.54J$ происходит уже ориентационный ФП из легкоосной ФМ фазы в легкоплоскостную фазу. Этот ориентационный переход относится к типу порядок–порядок.

Поскольку в рассмотренном примере ориентационного ФП температура T_{LO-LP} много меньше величины $T_C^{(LO)}$, то, несмотря на переориентацию вектора намагни-

ченности, его абсолютная величина изменится незначительно. На рис. 4 приведены температурные зависимости намагниченности ФМ в обеих фазах: параметры модели взяты такими же, как и на рис. 3. Штриховой кривой показана температурная зависимость высокотемпературной легкоосной фазы. Для этого состояния намагниченность направлена вдоль оси Z . Пунктиром дана температурная зависимость намагниченности в легкоплоскостной фазе после ориентационного ФП. Из рис. 4 видно, что изменение величины вектора (его длины) в точке ФП весьма мало. В принципе это понятно, ибо изменение свободных энергий обеих фаз вблизи T_{LO-LP} также незначительно и составляет проценты.

5. Заключение

Таким образом, показано, что в магнитной системе с конкурирующими легкоплоскостной ОА и межионной легкоосной анизотропией возможны два типа ФП в упорядоченное ФМ состоянии. Магнитный ФП типа порядок–беспорядок происходит, когда легкоосная анизотропия превосходит одноионную. В этом случае в направлении возникновения спонтанной намагниченности, совпадающем с осью анизотропии, одноионные спиновые состояния имеют предельные величины проекций спина. Когда ОА превосходит межионную, спонтанная намагниченность будет ориентирована в плоскости. В парамагнитном состоянии в этом направлении одноионные спиновые состояния неполяризованы (все значения проекций спина ионных состояний равны нулю), поэтому намагничивание будет возникать спонтанно, если в точке перехода зарождается поляризация одноионных состояний. Этот переход в ФМ состояние с намагниченностью, перпендикулярной оси анизотропии, относится к магнитным ФП типа смещения.

Показано также, что в ФМ взаимное действие двух конкурирующих анизотропных взаимодействий разной природы, а именно межионной и одноионной анизотропий, может по мере изменения температуры привести к ориентационному ФП первого рода из легкоосной ФМ фазы в легкоплоскостную ФМ фазу. При этом обе анизотропии модели имеют второй порядок, а параметры, характеризующие их, постоянны и не зависят от температуры. Взаимная компенсация анизотропий в точке ФП вызвана различием в температурных зависимостях их вкладов в свободную энергию. С точки зрения феноменологического подхода рассмотренный ориентационный ФП в одноосном ФМ можно интерпретировать как происходящий в связи с изменением при некоторой температуре знака константы анизотропии второго порядка. Поэтому рассмотренный ориентационный ФП имеет все черты перехода Морина. Однако нужно заметить, что при конкуренции двух типов анизотропий в легкоосной ФМ фазе реализуется обычное упорядочение, а в легкоплоскостной ФМ фазе происходят квантовые процессы поляризации одноионных состояний.

Авторы благодарят С.М. Рябченко и участников руководимого им семинара за критическое обсуждение результатов и полезные замечания.

Список литературы

- [1] В.И. Ожогин. ЖЭТФ **54**, 1, 96 (1968).
- [2] В.И. Ожогин. ЖЭТФ **55**, 5, 1735 (1968).
- [3] К.П. Белов, М.А. Белянчикова, Р.З. Левитин, С.А. Никитин. Редкоземельные ферромагнетики и антиферромагнетики. Наука, М. (1965).
- [4] А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. Наука, М. (1985).
- [5] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФТТ **45**, 8, 1450 (2003).
- [6] J.H. Van Vleck. Theory of electric and magnetic susceptibilities. Oxford Univ. (1932).
- [7] H.W. Sapiel. Physica **32**, 5, 966 (1966); **33**, 2, 295 (1967).
- [8] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths. Phys. Rev. A **4**, 1071 (1971).
- [9] V.S. Ostrovskii, E. Petrov. Phys. Stat. Sol. (b) **71**, 369 (1975).
- [10] Ф.П. Онуфриева. ЖЭТФ **89**, 12, 2270 (1985).
- [11] Ю.Н. Мицай, А.Н. Майорова, Ю.А. Фридман. ФТТ **34**, 1, 66 (1992).
- [12] В.В. Вальков, Г.Н. Мацулева. Препринт ИФ СО АН СССР № 645Ф (1987).
- [13] В.М. Локтев, В.С. Островский. ФНТ **20**, 10, 983 (1994).
- [14] А.Ф. Андреев, И.А. Гришук. ЖЭТФ **87**, 8, 467 (1984).