

Квантовые фазовые переходы и фазовая $H-T$ диаграмма ван-Флековского многоподрешеточного антиферромагнетика

В.М. Калита¹, В.М. Локтев²

¹*Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев, 03028, Украина*

²*Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины
ул. Метрологическая, 14-б, г. Киев, 03143, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua*

Статья поступила в редакцию 29 ноября 2004 г., после переработки 21 августа 2005 г.

Рассмотрено магнитное упорядочение ван-Флековского легкоплоскостного магнетика с большой одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» и антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами, когда основным состоянием ионов с целым спином является синглет, а антиферромагнитная фаза реализуется только во внешнем магнитном поле. При этом получено, что фазовое превращение синглетной (парамагнитной) фазы в антиферромагнитную является квантовым фазовым переходом, относящимся к магнитным фазовым переходам типа смещения. Показано, что к такому превращению применима теория фазовых переходов Ландау, в которой параметром порядка служит поляризация синглетного состояния. Отмечены нестандартные проявления парапроцесса, который приводит к превращению магнитного фазового перехода типа смещения II рода в переход I рода. Построена фазовая диаграмма, которая отличается от фазовых диаграмм классических антиферромагнетиков; на ней антиферромагнитная фаза окружена только парамагнитной фазой.

Розглянуто магнітне впорядкування ван-Флеківського легкоплощинного магнетика з великою одноіонною анізотропією типу «легка площина» і антиферомагнітною обмінною взаємодією між спінами, коли основним станом іонів з цілим спіном є синглет, а антиферомагнітна фаза реалізується тільки у зовнішньому магнітному полі. При цьому отримано, що фазове перетворення синглетної (парамагнітної) фазы в антиферомагнітну є квантовим фазовим переходом, що відноситься до магнітних фазових переходів типу зміщення. Показано, що до такого перетворення є застосовною теорія фазових переходів Ландау, в якій параметром порядку є поляризація синглетного стану. Відмічено нестандартні прояви парапроцесу, який приводить до перетворення магнітного фазового переходу типу зміщення II роду в перехід I роду. Побудовано фазову діаграму, яка відрізняється від фазових діаграм класичних антиферомагнетиків; на ній антиферомагнітна фаза оточена тільки парамагнітною фазою.

PACS: 75.10.-b

Ключевые слова: синглетный магнетик, магнитный фазовый переход типа смещения, одноионная анизотропия, квантовый фазовый переход, спиновая поляризация

1. Введение

Классические (или, другими словами, слабоанизотропные [1]) антиферромагнетики при температурах T , меньших температуры Нееля T_N , находятся в спонтанно упорядоченном состоянии [2,3]. Соответствующее дальнейшее магнитное упорядочение при по-

нижении температуры возникает, как правило, путем фазовых переходов типа беспорядок — порядок. При таких фазовых переходах происходит изменение спектра как одноионных, так и коллективных состояний кристалла. В неупорядоченной фазе одноионные уровни вырождены, коллективные моды

отсутствуют (либо являются диффузионными) и появляются после фазового перехода.

При помещении антиферромагнетиков во внешнее магнитное поле в них, как известно, могут происходить ориентационные фазовые переходы, если под действием магнитного поля изменяются направления векторов средних намагниченностей подрешеток. При ориентационных фазовых переходах изменение величин намагниченностей и их зависимость от поля не являются принципиальными. Описание различных видов движения и переориентации намагниченности при сохранении ее модуля составляет предмет феноменологической, или квазиклассической, теории магнетизма [4,5].

Однако, например, в [6,7] при описании антиферромагнетиков с большой одноионной анизотропией получена несвойственная классическим антиферромагнетикам последовательность фазовых переходов, о чем говорилось в [8]. Согласно этим работам, при введении магнитного поля подрешетки сначала намагничиваются вдоль поля, затем, после фазового перехода, намагниченности подрешеток отворачиваются от направления, заданного полем, образуя антиферромагнитную фазу. В более сильных полях (путем еще одного фазового перехода) намагниченности подрешеток схлопываются к магнитному полю. Исходя из таких представлений речь идет о последовательности двух ориентационных фазовых переходов. Более детальному обсуждению этих фазовых переходов и посвящена настоящая работа.

Нетипичное поведение в магнитном поле характерно для легкоплоскостных магнетиков с большой одноионной анизотропией [1,9–11]. Например, в таких магнетиках с $S = 1$, когда одноионная анизотропия достаточно велика, ион, несмотря на действие обменного взаимодействия, может оказаться в синглетном основном состоянии (ван-флековский парамагнетик). При этом, как показано в [10], переход в магнитоупорядоченное состояние происходит без изменения одноионного спектра: его состояния во всех фазах остаются невырожденными. В парамагнитной фазе основное состояние каждого иона является синглетным, с отсутствующей в нем спиновой поляризацией, а в антиферромагнитной фазе (ниже T_N) под действием обмена и, что существенно, внешнего магнитного поля появляется спонтанная спиновая поляризация синглета. Фазовый переход, приводящий к магнитной поляризации при сохранении структуры одноионного спектра, суть следствие конкуренции различных по своей природе взаимодействий: одноионной анизотропии, стабилизирующей синглетное основное состояние ионов, и обмена, который, наоборот, способствует магнитному упорядочению. По этой причине оно в подобных

системах возникает не в виде фазового перехода типа порядок—беспорядок, а происходит путем (по современной терминологии [11]) магнитного фазового перехода типа порядок—порядок, который был нами квалифицирован как «магнитный фазовый переход типа смещения» [9–11]. При этом, разумеется, речь идет лишь об аналогии — никакого реального смещения ионов в координатном пространстве, как в сегнетоэлектриках, не происходит.

Напомним, что если одноионная анизотропия типа «легкая плоскость» превосходит обменное взаимодействие, то в отсутствие магнитного поля спонтанное упорядочение в системах с целым спином не возникает при всех температурах. При введении магнитного поля, направленного вдоль трудной оси (т.е. перпендикулярно легкой плоскости), в такой системе возможны два фазовых перехода [9,11]. Сначала осуществляется магнитный фазовый переход типа смещения из парамагнитной фазы в магнитоупорядоченную. Затем, в очень больших магнитных полях, происходит уже ориентационный фазовый переход в фазу с коллинеарной ориентацией спинов.

Отмеченная последовательность индуцированных магнитным полем превращений наблюдается в некоторых гексагональных антиферромагнетиках типа ABX_3 , где A — ион щелочного металла, B — ион переходного металла, X — галогенид (см. обзоры [12–15]). При обсуждении экспериментально наблюдаемой в этих антиферромагнетиках, индуцированной магнитным полем антиферромагнитной фазы, открытым остается вопрос о роде перехода. Неясными являются также и поведение температурных и полевых зависимостей намагниченностей подрешеток.

В антиферромагнетиках $CsFeBr_3$ или $CsFeCl_3$ величина псевдоспина иона Fe_{2+} $S = 1$. Константа одноионной анизотропии в этих кристаллах по данным [16–18] $D \approx (20-30)$ К, тогда как константа обмена для пары ближайших ионов из соседних плоскостей $J_{ch} \approx (3-5)$ К, а между ближайшими ионами в плоскостях, соответственно, $J_{pl} \approx (0,3-0,4)$ К. При $D \gg J_{ch} + J_{pl}$ из трех возможных одноионных состояний с проекциями спина $S_z = \pm 1$ и 0 ближайшим оказывается последнее.

В работах [10,11] было показано, что для описания магнитного фазового перехода типа смещения применим термодинамический подход со спиновой поляризацией синглетного состояния как параметром порядка. Ниже на основе теории Ландау проанализированы полевые и температурные зависимости параметра порядка в системах типа $CsFeBr_3$ при фазовых переходах в антиферромагнитное состояние, а также фазовая H - T диаграмма этих соединений.

2. Свободная энергия ван-флековского антиферромагнетика в продольном поле

Ограничимся рассмотрением билинейных изотропных обменных взаимодействий, одноионной анизотропии и зеемановского вклада. В этом случае простейший модельный гамильтониан системы со структурой CsFeBr₃ может быть представлен в виде

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

где α, β — номера магнитных подрешеток, полное количество которых в данном случае равно 6-ти, причем $\alpha \neq \beta$, \mathbf{n}, \mathbf{m} — векторы, задающие ячейки, $h = \mu_B g H_Z$ — магнитное поле, которое определено в энергетических единицах, константа одноионной анизотропии $D > 0$; $H_Z \parallel C_3$.

В кристаллах рассматриваемого семейства обменное взаимодействие анизотропно в пространстве. Так, константа J_{pl} заметно отличается по величине от константы J_{ch} в направлении «трудной» оси. При этом параметр J_{ch} стремится установить антиферромагнитную ориентацию спинов в соседних плоскостях, а J_{pl} ориентирует ближайшие в легкой плоскости спины под углом $2\pi/3$ (структура Локтева). Тем самым в гексагональном антиферромагнетиках с конечным значением среднего спина на узле устанавливается шестиподрешеточная структура. Однако в рассматриваемых ван-флековских системах это не так, и вследствие условия $D \gg J_{\text{ch}}$, J_{pl} нижайшим в ионах и, соответственно, в кристалле оказывается немагнитное состояние.

Для описания индуцированного продольным полем фазового перехода при $T \neq 0$ из синглетного состояния в антиферромагнитное необходимо учитывать заселенности всех микросостояний ионов. Их учет важен и в случае классического магнетика, где они определяют парапроцесс. Здесь формально происходят те же явления, но в ван-флековском магнетике важна роль магнитного поля, поскольку оно поляризует основное состояние.

Для определения ионных состояний ранее в [1] использовался одночастичный гамильтониан (ср. с (1)):

$$H_0 = -\mathbf{h}_{\text{exch}}^{(\alpha)} \mathbf{S}_{\mathbf{n}\alpha} + D(S_{\mathbf{n}\alpha}^Z)^2 - h S_{\mathbf{n}\alpha}^Z, \quad (2)$$

где $\mathbf{h}_{\text{exch}}^{(\alpha)}$ — среднее поле, действующее на спин \mathbf{n}_{α} -го иона. Собственные состояния гамильтониана (2) определим, вводя локальные системы координат. Оси квантования, обозначаемые ниже ζ_{α} , направим вдоль спиновых проекций, относящихся к основному состоянию ионов. Можно показать [1], что во введенных таким способом собственных сис-

темах координат собственные состояния ионов описываются волновыми функциями:

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}^{(0)} &= \cos \varphi_{\alpha} |1\rangle + \sin \varphi_{\alpha} |-1\rangle, \\ \Psi_{\alpha}^{(1)} &= \cos \gamma_{\alpha} |0\rangle - \sin \gamma_{\alpha} \sin \varphi_{\alpha} |1\rangle + \sin \gamma_{\alpha} \cos \varphi_{\alpha} |-1\rangle, \\ \Psi_{\alpha}^{(2)} &= -\sin \gamma_{\alpha} |0\rangle - \cos \gamma_{\alpha} \sin \varphi_{\alpha} |1\rangle + \cos \gamma_{\alpha} \cos \varphi_{\alpha} |-1\rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\gamma_{\alpha}, \varphi_{\alpha}$ — параметры вращения базисных векторов в гильбертовом пространстве.

Из выражений (3) легко находим, что парциальные проекции спина на собственную ось квантования в каждом из состояний (3) принимают значения

$$\begin{aligned} s_{\alpha}^{(0)} &= \cos 2\varphi_{\alpha}, \quad s_{\alpha}^{(1)} = -\sin^2 \gamma_{\alpha} \cos 2\varphi_{\alpha}, \\ s_{\alpha}^{(2)} &= -\cos^2 \gamma_{\alpha} \cos 2\varphi_{\alpha}; \end{aligned}$$

при этом средние оператора $(S_{\alpha}^{\zeta})^2$ постоянны и равны: 1, $\sin^2 \gamma_{\alpha}$, $\cos^2 \gamma_{\alpha}$ соответственно. Оси, вдоль которых направлены поперечные составляющие спина, обозначим ξ_{α} , они лежат в плоскости $Z\zeta_{\alpha}$, причем величины этих проекций спина равны:

$$s_{\alpha}^{\xi(1)} = -s_{\alpha}^{\xi(2)} = \sin 2\gamma_{\alpha} (\cos \varphi_{\alpha} - \sin \varphi_{\alpha}) / \sqrt{2}.$$

Средние для оператора $(S_{\alpha}^{\xi})^2$ имеют вид

$$\begin{aligned} &(1 + \sin 2\varphi_{\alpha})/2, \quad (1 + \cos^2 \gamma_{\alpha} - \sin^2 \gamma_{\alpha} \sin 2\varphi_{\alpha})/2 \\ &\text{и } (1 + \sin^2 \gamma_{\alpha} - \cos^2 \gamma_{\alpha} \sin 2\varphi_{\alpha})/2. \end{aligned}$$

В состояниях $\Psi_{\alpha}^{(1)}$ и $\Psi_{\alpha}^{(2)}$ отличными от нуля будут и недиагональные компоненты оператора квадратурных компонент $s_{\alpha}^{\xi} s_{\alpha}^{\zeta} + s_{\alpha}^{\zeta} s_{\alpha}^{\xi}$; при этом они равны: $\pm \sin 2\gamma_{\alpha} (\cos \varphi_{\alpha} + \sin \varphi_{\alpha}) / \sqrt{2}$, где верхний знак отвечает состоянию $\Psi_{\alpha}^{(1)}$, а нижний — $\Psi_{\alpha}^{(2)}$.

Согласно определению, свободная энергия $F = E - TS_{\text{en}}$, где E — внутренняя энергия, а S_{en} — энтропия. В методе самосогласованного поля энтропия является конфигурационной и определяется суммой $S_{\text{en}} = \sum_{\alpha} S_{\text{en}}^{(\alpha)}$ энтропий подрешеток. Внут-

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

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} J_{\alpha\beta} z_{\alpha\beta} \mathbf{m}_{\alpha} \mathbf{m}_{\beta} + D \sum_{\alpha} \overline{(S_{\alpha}^Z)^2} - h \sum_{\alpha} m_{\alpha}^Z, \quad (4)$$

где \mathbf{m}_{α} — вектор средней намагниченности подрешетки, составляющий угол θ_{α} с \mathbf{h} , $z_{\alpha\beta}$ — число ближайших соседей, а выражение для энтропии α -ой подрешетки стандартно:

$$S_{\text{en}}^{(\alpha)} = - \sum_{j=0,1,2} p_{\alpha}^{(j)} \ln p_{\alpha}^{(j)}, \quad (5)$$

где $p_\alpha^{(j)}$ – вероятности одноионных состояний (3), удовлетворяющие очевидному условию $\sum_{j=0,1,2} p_\alpha^{(j)} = 1$.

Теперь можно привести окончательное выражение для свободной энергии антиферромагнетика с $S = 1$ и одноионной анизотропией легкоплоскостного типа в продольном магнитном поле:

$$\begin{aligned}
 F = & [9J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + 6J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)][(p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma)^2 \cos^2 2\varphi + \frac{1}{2}(p_1 - p_2)^2 \sin^2 2\gamma \times \\
 & \times (1 - \sin 2\varphi)] + 6D[\cos^2 \theta(p_0 + p_1 \sin^2 \gamma + p_2 \cos^2 \gamma) + \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{2}}(p_2 - p_1) \sin 2\gamma (\sin \varphi + \cos \varphi) + \frac{1}{2} \sin^2 \theta \times \\
 & \times (1 + p_0 \sin 2\varphi + p_1 \cos^2 \gamma + p_2 \sin^2 \gamma - p_1 \sin^2 \gamma \sin 2\varphi - p_2 \cos^2 \gamma \sin 2\varphi)] - 6h[\cos \theta \times \\
 & \times (p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma) \cos 2\varphi - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2) \sin 2\gamma (\cos \varphi - \sin \varphi)] + 6T\{p_0 \ln p_0 + p_1 \ln p_1 + p_2 \ln p_2\},
 \end{aligned} \tag{6}$$

где в силу эквивалентности подрешеток для случая $\mathbf{h} \parallel C_3$ был опущен их индекс. Выражение (6) отличается от традиционного представления F , в том числе и в работах [19–21], так как позволяет проследить (см. ниже) за процессом поляризации одноионных состояний. Кроме этого, оно обобщает вид свободной энергии, приведенной в [11], на случай учета базиса (3).

3. Фазовые состояния ван-флековского антиферромагнетика в продольном магнитном поле

Заметим, что выражение (6), в котором вариационными теперь являются параметры γ , φ , θ , p_0 , p_1 и p_2 , не для всех состояний позволяет получить точное решение. И это понятно, поскольку даже квантовая задача определения одноионного спектра в магнитном поле при $T = 0$ приводит к необходимости решать кубическое уравнение [1].

Однако из (6) видно, что параметры γ , φ , θ входят только в выражение (4), поэтому минимизация свободной энергии по ним эквивалентна минимизации внутренней энергии:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial \gamma} = & 2(p_2 - p_1) \sin 2\gamma [9J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + 6J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)][(p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma) \times \\
 & \times \cos^2 2\varphi + (p_2 - p_1)^2 \cos 2\gamma (1 - \sin 2\varphi)] + 6D(p_2 - p_1)[\sqrt{2} \sin 2\theta \cos 2\gamma (\sin \varphi + \cos \varphi) - \cos^2 \theta \sin 2\gamma + \\
 & + \frac{1}{2} \sin 2\gamma \sin^2 \theta (1 + \sin 2\varphi)] - 6h(p_2 - p_1)[\cos \theta \sin 2\gamma \cos 2\varphi + \sqrt{2} \sin \theta \cos 2\gamma (\cos \varphi - \sin \varphi)] = 0,
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial \varphi} = & -\cos 2\varphi [9J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + 6J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)] \times \\
 & \times [4(p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma)^2 \sin 2\varphi + (p_1 - p_2)^2 \sin^2 2\gamma] + \\
 & + 6D[\frac{\sin 2\theta}{\sqrt{2}}(p_2 - p_1) \sin 2\gamma (\cos \varphi - \sin \varphi) + \sin^2 \theta \cos 2\varphi (p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma)] + \\
 & + 6h[2 \cos \theta \sin 2\varphi (p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma) - \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2) \sin 2\gamma (\sin \varphi + \cos \varphi)] = 0,
 \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial \theta} = & -3 \sin 2\theta (9J_{pl} + 4J_{ch})[(p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma)^2 \cos^2 2\varphi + \frac{1}{2}(p_1 - p_2)^2 \sin^2 2\gamma (1 - \sin 2\varphi)] + \\
 & + 6D[\sqrt{2} \cos 2\theta (p_2 - p_1) \sin 2\gamma (\sin \varphi + \cos \varphi) - \sin 2\theta (p_0 + p_1 \sin^2 \gamma + p_2 \cos^2 \gamma) + \\
 & + \frac{1}{2} \sin 2\theta (1 + p_0 \sin 2\varphi + p_1 \cos^2 \gamma + p_2 \sin^2 \gamma - p_1 \sin^2 \gamma \sin 2\varphi - p_2 \cos^2 \gamma \sin 2\varphi)] + \\
 & + 6h[\sin \theta (p_0 - p_1 \sin^2 \gamma - p_2 \cos^2 \gamma) \cos 2\varphi + \frac{\cos \theta}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2) \sin 2\gamma (\cos \varphi - \sin \varphi)] = 0.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Независимо от значений p_j уравнения (7)–(9) имеют решение $\cos\gamma = \cos\varphi = \cos\theta = 1$, в котором

$$\psi_\alpha^{(0)} = |0\rangle; \quad \psi_\alpha^{(1)} = |1\rangle; \quad \psi_\alpha^{(2)} = |-1\rangle, \quad (10)$$

а собственная ось $\zeta_\alpha \parallel C_3$. Решению (10) отвечает парамагнитная фаза; в ней в малых полях основным состоянием ионов является $\psi_\alpha^{(0)} = |0\rangle$. При $T = 0$ энергия парамагнитной фазы $E = 0$.

В больших магнитных полях основное состояние иона в этой фазе будет поляризованным; оно описывается функцией $\psi_\alpha^{(0)} = |1\rangle$. Энергия парамагнитной фазы при $T = 0$ в случае больших магнитных полей $E = 6(3J_{pl} + J_{ch}) + 6D - 6h$, откуда следует, что в малых полях всегда выгодно синглетное неполяризованное состояние иона, если обмен и одноионная анизотропия положительны.

Заметим, что той же самой парамагнитной фазе при $\mathbf{h} \parallel C_3$ отвечает еще одно решение системы (7)–(9), в котором $\cos 2\gamma = \cos 2\varphi = \cos\theta = 0$, или $\gamma = -\varphi = \theta/2 = \pi/4$, когда собственная ось $\zeta_\alpha \perp C_3$, а волновые функции имеют вид (ср. (3))

$$\begin{aligned} \psi_\alpha^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle); \quad \psi_\alpha^{(1)} = \frac{1}{2}(\sqrt{2}|0\rangle + |1\rangle + |-1\rangle); \\ \psi_\alpha^{(2)} &= -\frac{1}{2}(\sqrt{2}|0\rangle - |1\rangle - |-1\rangle). \end{aligned} \quad (11)$$

Состояния из триплета (11) имеют такие же самые проекции спина на ось C_3 , как и в (10).

При $h = 0$ уравнения (7)–(9) имеют решение $\cos\gamma = 1$, $\cos\theta = 0$, а величина φ определяется из уравнения

$$\cos 2\varphi(p_0 - p_2)[J_{\text{exch}}(p_0 - p_2)\sin 2\varphi + D] = 0, \quad (12)$$

где $J_{\text{exch}} = 6J_{pl} + 4J_{ch}$. Решая уравнение (12), получаем, что возможны два варианта, когда либо $\sin 2\varphi = 1$, либо

$$\sin 2\varphi = -\frac{D}{J_{\text{exch}}(p_0 - p_2)}. \quad (13)$$

Решению (13) отвечает антиферромагнитное состояние, в котором спины подрешеток ориентированы в легкой плоскости ($\theta = \pi/2$) и составляют между собой угол $2\pi/3$; при этом спины, относящиеся к разным плоскостям, антипараллельны. Величина поляризации основного состояния ионов в такой фазе зависит от температуры:

$$s_0(T) = \sqrt{1 - \frac{D^2}{J_{\text{exch}}^2(p_0 - p_2)^2}}. \quad (14)$$

Отметим, что такое антиферромагнитное состояние реализуется при $D < J_{\text{exch}}$. В этой фазе (при $h = 0$) ионные состояния расщеплены обменным взаимо-

действием, а волновые функции состояний имеют вид (ср. [1])

$$\begin{aligned} \psi_\alpha^{(0)} &= \cos\varphi_\alpha|1\rangle + \sin\varphi_\alpha|-1\rangle; \quad \psi_\alpha^{(1)} = |0\rangle; \\ \psi_\alpha^{(2)} &= -\sin\varphi|1\rangle + \cos\varphi|-1\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Введение магнитного поля $\mathbf{h} \parallel C_3$ вызывает скос спинов всех подрешеток антиферромагнетика, так что $\theta \neq \pi/2$.

Если величина одноионной анизотропии превосходит параметры обменного взаимодействия, т.е. $D > J_{\text{exch}}$, то в малых полях реализуется парамагнитная фаза с нижайшим немагнитным ионным состоянием. Отметим, что дальше рассматривается случай $(D - J_{\text{exch}})/D \ll 1$. Волновые функции ионов в этой фазе могут быть представлены в виде (10) или (11). При возрастании магнитного поля, начиная с некоторого критического его значения (h_k), происходит переход из парамагнитной фазы в магнитоупорядоченную. Спиновая конфигурация последней имеет вид, подобный описанному выше антиферромагнитному состоянию со скошенными к магнитному полю спинами, которая в [6,7,9,11] определена как многоподрешеточная угловая (oblique) фаза.

В полях, близких к критическому, но бóльших его ($h \geq h_k$), спиновая поляризация основного состояния ионов мала, скос спинов к магнитному полю также будет мал [9]. Поэтому, когда $h \rightarrow h_k$, то $\gamma \rightarrow 0$.

В такой ситуации фазовый переход в состояние, описываемое функциями (3) и отвечающее условию $\gamma \rightarrow 0$ при $h \geq h_k$ и $h \rightarrow h_k$, осуществить из состояний, отвечающих наборам (10) или (11), непрерывным образом невозможно, так как либо угол φ , либо угол γ при $h = h_k$ должен испытать скачок. Подобный характер изменения собственных ионных состояний свидетельствует о том, что соответствующий фазовый переход также будет протекать скачкообразно, или, другими словами, является фазовым переходом I рода. Недавно о наблюдении такого перехода в металлическом соединении $ZrZn_2$ сообщалось в [22], где фазовый переход индуцировался давлением, которое в ван-Флекковском случае также может играть поляризующую роль. Однако изучение подобного фазового перехода выходит за рамки настоящей работы.

Важно, что при $T = 0$, когда заселенность возбужденных уровней не учитывается, фазовый переход из парамагнитной фазы в антиферромагнитную фазу оказывается непрерывным, а угол φ от значения $-\pi/4$ в синглетном состоянии к другим значениям в антиферромагнитном состоянии изменяется

плавно. Тем самым парапроцесс изменяет род фазового перехода со II при $T = 0$ на I при $T \neq 0$.

4. Особенности неколлинеарной антиферромагнитной фазы

Аналитическое описание антиферромагнитной фазы в силу сложности системы (7)–(9) провести не удастся. Учтем, однако, что при $h \geq h_k$ и $h \rightarrow h_k$ параметр γ (см. (3)) также стремится к нулю, поэтому в области $h \approx h_k$ указанным перемешиванием можно пренебречь. В этом приближении выражение (6) приобретает вид

$$F = 9J_{pl}(\Delta p)^2 \cos^2 2\varphi (3 \cos^2 \theta - 1) + 6J_{ch}(\Delta p)^2 \times \\ \times \cos^2 2\varphi (2 \cos^2 \theta - 1) + 6D(p \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \times \\ \times (1 - \frac{p}{2} + \frac{\Delta p}{2} \sin 2\varphi) - 6h\Delta p \cos 2\varphi \cos \theta + \\ + 6T \left\{ \frac{p + \Delta p}{2} \ln \frac{p + \Delta p}{2} + \right. \\ \left. + \frac{p - \Delta p}{2} \ln \frac{p - \Delta p}{2} + (1 - p) \ln(1 - p) \right\}; \\ \Delta p = p^{(0)} - p^{(2)}, \quad p = p^{(0)} + p^{(2)}. \quad (16)$$

Спиновые проекции одноионных состояний в базисе (15) зависят лишь от угла φ : $s^{(0)} = -s^{(2)} = \cos 2\varphi$, $s^{(2)} = 0$, а намагниченности (см. (4)) подрешеток $m = \Delta p \cos 2\varphi$. В итоге, получаем, что переход из синглетной фазы в антиферромагнитную полностью обусловлен поляризацией.

Используя теперь (16), запишем уравнения состояния:

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi} = 6\{-\cos 2\varphi \sin 2\varphi [6J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + \\ 4J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)](\Delta p)^2 + D\Delta p \sin^2 \theta \cos 2\varphi + \\ + 2h\Delta p \sin 2\varphi \cos \theta\} = 0; \quad (17)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = 6\{-\cos \theta [(9J_{pl} + 4J_{ch}) \cos^2 2\varphi (\Delta p)^2 + \\ + 2D(\frac{3}{2}p - 1 - \frac{\Delta p}{2} \sin 2\varphi)] + h\Delta p \cos 2\varphi\} \sin \theta = 0; \quad (18)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \Delta p} = 3\{2\Delta p [3J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + 2J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)] + \\ + D \sin^2 \theta \sin 2\varphi - 2h \cos 2\varphi \cos \theta + T \ln \frac{p + \Delta p}{p - \Delta p}\} = 0; \quad (19)$$

$$\frac{\partial F}{\partial p} = 6[D(\cos^2 \theta - \frac{\sin^2 \theta}{2}) + \frac{T}{2} \ln \frac{p^2 - (\Delta p)^2}{4(1-p)^2}] = 0. \quad (20)$$

В достаточно малых полях парамагнитной фазе отвечает решение с $\cos \theta = \cos 2\varphi = 1$, а p и Δp определяются из уравнений (19) и (20). При $h \ll D$ равновесная свободная энергия этой фазы имеет вид

$$F_{PM} = -T \ln(1 + 2e^{-D/T} \text{ch}(h/T)). \quad (21)$$

Второе решение системы (17)–(20) отвечает угловой фазе. Обсудим его свойства в предположении, что поляризация мала, или $s \ll 1$, что имеет место в магнитном поле, близком к критическому. В этой области обмен не будет оказывать существенного влияния на заселенности уровней, поэтому из (19) и (20) находим:

$$p = \frac{2 + \Delta p}{3}; \quad \Delta p = \frac{1 - e^{-D/T}}{1 + 2e^{-D/T}}. \quad (22)$$

Уравнения (17) и (18) позволяют при этом определить полевые зависимости для спиновой поляризации $s = \cos 2\varphi$ основного состояния ионов в угловой фазе, а также угол скоса намагниченностей подрешеток. В рамках использованных выше приближений эти уравнения преобразуются к виду

$$\cos 2\varphi \sin 2\varphi [6J_{pl}(3 \cos^2 \theta - 1) + 4J_{ch}(2 \cos^2 \theta - 1)] \times \\ \times (\Delta p(T))^2 - D\Delta p(T) \sin^2 \theta \cos 2\varphi - \\ - 2h\Delta p(T) \sin 2\varphi \cos \theta = 0; \quad (23)$$

$$\cos \theta \sin \theta [(9J_{pl} + 4J_{ch})(\Delta p(T))^2 \cos^2 2\varphi + \\ + D\Delta p(T)(1 - \sin 2\varphi)] - h\Delta p(T) \cos 2\varphi \sin \theta = 0. \quad (24)$$

Расцепление системы (17)–(20) на две независимые пары уравнений позволяет представить свободную энергию угловой фазы в виде суммы одночастичной составляющей, а также вклада от полевой поляризации основного синглета:

$$F_{OP} = -T \ln(1 + 2e^{-D/T}) + \Delta F(h). \quad (25)$$

Выражение для $\Delta F(h)$ при $s \ll 1$ имеет асимптотику:

$$\Delta F = \frac{3}{2} [D(T) - J_{\text{exch}}(T) - \frac{h^2 \Delta p(T)}{D}] s^2 + \frac{3}{8} D(T) s^4, \quad (26)$$

при записи которой введены обозначения: $D(T) = D\Delta p(T)$ и $J_{\text{exch}}(T) = J_{\text{exch}}(\Delta p(T))^2$. При-

равнивая нулю коэффициент при s^2 в (26), найдем выражение для поля

$$h_{OP}(T) = D\sqrt{1 - \frac{J_{\text{exch}}}{D} \Delta p(T)}, \quad (27)$$

ограничивающего устойчивость угловой фазы.

Напомним, что при $T = 0$ поле $h_{OP}(0) = D\sqrt{1 - J_{\text{exch}}/D}$ отвечает точке фазового перехода II рода из парамагнитной фазы в угловую фазу.

Минимизируя теперь (26), приходим к выражению для поляризации основного состояния иона:

$$s(T, h) = 2\frac{\sqrt{h_{OP}(T)}}{D}\sqrt{h - h_{OP}(T)}. \quad (28)$$

Поскольку фазовый переход из парамагнитной фазы в угловую фазу при $T \neq 0$ протекает скачкообразно, то магнитное поле этого фазового перехода $h_{\kappa}(T) > h_{OP}(T)$, что будет также получено ниже из обязательного в точке перехода условия равенства свободных энергий (21) и (25) обеих фаз. Исходя из этого спиновая поляризация будет иметь корневую зависимость (28), но такое поведение ограничено областью $h > h_{\kappa}(T)$. По этой причине наименьшим значением величины поляризации в угловой фазе будет значение $s_{\text{min}} = s(h_{\kappa}(T))$. Нужно, однако, иметь в виду, что причиной неплавного перехода из синглетной фазы в угловую фазу является парапроцесс, вследствие чего разность $h_{\kappa}(T) - h_{OP}(T)$ при $T \rightarrow 0$ будет асимптотически малой.

Используя уравнение (17), можно определить полевую зависимость $\theta(h)$ при $h \rightarrow 0$:

$$\cos \theta(h) = \frac{h_{OP}^{3/2}(T)}{D^2}\sqrt{h - h_{OP}(T)}. \quad (29)$$

По ней, а также выражению (28) находим среднюю намагниченность $m^Z(h, T)$ системы в угловой фазе. Она равна сумме векторов намагниченностей подрешеток и направлена вдоль «трудной» оси. В расчете на один магнитный ион

$$m^Z(h, T) = 2\frac{h_{OP}^2(T)}{D^3}\Delta p(T)[h - h_{OP}(T)]. \quad (30)$$

Из (30) прямо следует достаточно неожиданный результат: магнитная восприимчивость в этой фазе ($h > h_{OP}$) не зависит от поля:

$$\chi_{OP} = \chi_{\parallel}(T, h > h_{OP}) = 2\frac{h_{OP}^2(T)}{D^3}\Delta p(T). \quad (31)$$

Такое поведение восприимчивости наблюдалось в работе [23]. В интервале магнитных полей (4–6) Тл $\leq H \leq (10–11)$ Тл при $T \leq 2,5$ К восприимчивость CsFeCl_3 и RbFeCl_3 действительно демонстрирует независимые от величины h значения.

Итак, выражения (28)–(31) описывают намагничивание индуцированной антиферромагнитной фазы, которое в экспериментах, как правило, производят при $T = \text{const}$. Используемый подход, тем не менее, позволяет описать ее поведение при изменении температуры, когда, наоборот, $h = \text{const}$.

Значение критической температуры T_{cr}^{PM-AFM} потери устойчивости угловой фазы также может быть определено из равенства нулю коэффициента при s^2 в (26). Тем самым имеем:

$$D^2 - DJ_{\text{exch}}\Delta p(T_{\text{cr}}^{PM-AFM}) - h^2 = 0. \quad (32)$$

Как видно из (32), величина T_{cr}^{PM-AFM} оказывается зависящей от поля.

В теории фазовых переходов Ландау принято, что в окрестности критической температуры выражение для свободной энергии имеет стандартный вид:

$$\Delta F = \eta(h)(T - T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h))s^2 + \frac{3}{8}D[T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h)]s^4, \quad (33)$$

где $\eta(h)$ — производная по T от коэффициента при s^2 в (26), рассчитанная в точке $T = T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h)$. При минимизации (33) по s приходим к температурному поведению поляризации:

$$s(T, h) = 2\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{\eta(h)}{D[T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h)]}(T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h) - T)}. \quad (34)$$

Ввиду того, что фазовый переход из парамагнитной фазы в угловую фазу при $T \neq 0$ является переходом I рода, справедливо неравенство $T_{\kappa}(h) < T_{\text{cr}}^{PM-AFM}(h)$. Следовательно, зависимость (34) будет ограничена областью $T < T_{\kappa}(h)$. Наименьшее значение спиновой поляризации s_{min} в угловой фазе при изменении температуры будет определяться равенством $s_{\text{min}} = s(T_{\kappa}(h))$.

В результате из проведенного анализа следует, что фазовый переход из парамагнитной фазы в угловую фазу при $T \neq 0$ происходит скачкообразно. В то же время полевая и температурная зависимости намагниченности имеют критическое поведение, подобное тому, что наблюдается при фазовом переходе II рода. Возможно, именно по этой причине сведения о роде этого фазового перехода противоречивы (см. [23–27]).

5. Построение фазовой $H-T$ диаграммы

Фазовая $H-T$ диаграмма антиферромагнетика с большой одноионной анизотропией легкоплоскостного типа обсуждалась в [6,7], где для описания упо-

рядоченных состояний использованы уравнения самосогласования, записанные для средних намагниченностей подрешеток. Этот подход не позволяет проследить за поляризацией основного ионного состояния. Подход, развитый выше, устраняет этот недостаток.

Определим сначала температурную зависимость для магнитного поля ориентационного фазового перехода из угловой фазы в парамагнитную. Для этого продифференцируем уравнение (18) по θ :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} = 6\{-\cos 2\theta[(9J_{pl} + 4J_{ch}) \cos^2 2\varphi(\Delta p)^2 +] + 2D(\frac{3}{2}p - 1 - \frac{\Delta p}{2} \sin 2\varphi)] + h\Delta p \cos 2\varphi \cos \theta\}. \quad (35)$$

Подставим в (35) предельные для поляризации и направления значения $\cos \varphi = \cos \theta = 1$, отвечающие ориентационному фазовому переходу из угловой фазы в парамагнитную. После этого приравняем (35) нулю, откуда найдем уравнение для критического поля $h_{cr}(T)$ этого фазового перехода:

$$(9J_{pl} + 4J_{ch})\Delta p^2(T) - D(2 - 3p(T)) - h_{cr}(T)\Delta p(T) = 0. \quad (36)$$

Для определения p и Δp в точке перехода необходимо рассмотреть и уравнения состояния (19) и (20), которые имеют вид

$$2\Delta p[6J_{pl} + 2J_{ch}] - 2h_{cr} + T \ln \frac{p + \Delta p}{p - \Delta p} = 0; \quad (37)$$

$$D + \frac{T}{2} \ln \frac{p^2 - (\Delta p)^2}{4(1 - p)^2} = 0. \quad (38)$$

Как следует из (36), при $T = 0$ величина поля этого фазового перехода описывается простым равенством:

$$h_{cr}(0) = 9J_{pl} + 4J_{ch} + D. \quad (39)$$

Из системы (36)–(38) находим, что в точке $h = h_{cr}(T)$ заселенности уровней при повышении T уменьшаются и при низких температурах ($T \rightarrow 0$) описываются выражениями

$$p = 1 - e^{-(3J_{pl} + 2J_{ch})/T}, \quad (40)$$

$$\Delta p = 1 - e^{-(3J_{pl} + 2J_{ch})/T} [1 + e^{-(3J_{pl} + 2J_{ch} + 2D)/T}]. \quad (41)$$

Используя (40) и (41), при $T \rightarrow 0$ получим:

$$h_{cr}(T) = h_{cr}(0) - (9J_{pl} + 4J_{ch} + 2D)e^{-(3J_{pl} + 2J_{ch})/T}. \quad (42)$$

Видно, что величина магнитного поля ориентационного фазового перехода из угловой фазы в парамагнитную фазу с ростом T уменьшается.

Теперь опишем фазовый переход из парамагнитной фазы в угловую, который происходит в области $h < h_{cr}(T)$. Выше показано, что в малых полях устойчивость угловой фазы ограничена полем $h_{OP}(T)$. Подставляя в (27) заселенности одноионных уровней в угловой фазе (22), приходим к выражению

$$h_{OP}(T) = D \sqrt{1 - \frac{J_{exch}}{D} \frac{1 - e^{-D/T}}{1 + 2e^{-D/T}}} \approx h_{OP}(0) \left(1 + \frac{3}{2} \frac{J_{exch} D}{h_{OP}^2(0)} e^{-D/T}\right), \quad (43)$$

из которого следует рост $h_{OP}(T)$ с увеличением T .

Величину $h_k(T)$ фазового перехода типа смещения из парамагнитной фазы в угловую фазу определим из равенства $F_{PM} = F_{OP}$, которое с учетом (21), (25), (28)–(31) приводит к уравнению

$$T \ln(1 + 2e^{-D/T} \text{ch}(h_k/T)) = T \ln(1 + 2e^{-D/T}) + \frac{1}{2} \chi_{OP}(T) [h_k - h_{OP}(T)]^2. \quad (44)$$

Из (44) имеем, что $h_k(T) > h_{OP}(T)$. Параметр порядка (спиновая поляризация) испытывает в поле $h_k(T)$ скачок от $s = 0$ (при $h < h_k$) до $s > s_{\min} = s(h_k(T))$ (при $h > h_k$), поэтому это фазовый переход I рода.

Поле $h_k(T)$ должно быть найдено из уравнения (44), решить которое точно не представляется возможным. Поэтому рассмотрим случай $D/T \gg 1$, допускающий упрощение. Для него запишем:

$$e^{-D/T} \text{ch}(h_k(T)/T) = e^{-D/T} + \frac{1}{4T} \chi_{OP}(T) [h_k(T) - h_{OP}(T)]^2. \quad (45)$$

Если $h_k \ll T$, то выражение (45) становится еще проще:

$$\frac{h_k^2(T)}{T} e^{-D/T} = \frac{1}{2} \chi_{OP}(T) [h_k(T) - h_{OP}(T)]^2. \quad (46)$$

Из (46) можно получить

$$h_k(T) = h_{OP}(T) \left(1 + \sqrt{\frac{2}{T \chi_{OP}(T)}} e^{-D/2T}\right). \quad (47)$$

Формула (47) показывает, что $h_k(T) > h_{OP}(T)$, по сути, эти поля отличаются слабо, а их разность определяется снова-таки температурным парапроцессом.

Полученные температурные зависимости полей фазовых переходов из парамагнитной фазы в угловую и из угловой фазы в парамагнитную позволяют

построить фазовую $H-T$ диаграмму исследуемого ван-флековского антиферромагнетика. Она приведена на рис. 1. Сплошной линией изображена зависимость $h_{cr}(T)$, отвечающая ориентационному фазовому переходу II рода из угловой фазы в парамагнитную, когда спины подрешеток схлопываются к полю. Пунктирной линией обозначено поведение $h_k(T)$, которое отвечает магнитному фазовому переходу типа смещения I рода из парамагнитной фазы в угловую.

Как вытекает из (42) и (47), при повышении T поле $h_{cr}(T)$ уменьшается, а поле $h_k(T)$, наоборот, возрастает, откуда следует пересечение соответствующих кривых. На рис. 1 точка A расположена на пересечении кривых $h_{cr}(T)$ и $h_k(T)$, где $h_{cr}(T) = h_k(T)$. Таким образом, из приведенной на рис. 1 фазовой диаграммы следует, что угловая фаза оказывается окруженной парамагнитной и ограниченной интервалом полей $h_k(T) < h < h_{cr}(T)$. По температуре область существования угловой фазы определяется неравенством $T < T_{max}$, где T_{max} — температура, которой отвечает точка A .

Согласно (42) и (47), поля $h_{cr}(T)$ и $h_k(T)$ имеют экспоненциальную температурную зависимость, которая получена для низких температур. В точке A условие малости T может не выполняться. Кроме этого, заселенности уровней в поле $h_{cr}(T)$ (42) зависят от обменных взаимодействий, а при определении $h_k(T)$ влиянием обмена на заселенности было проигнорировано. Поэтому при $T \cong T_{max}$ используемое приближение может нарушаться.

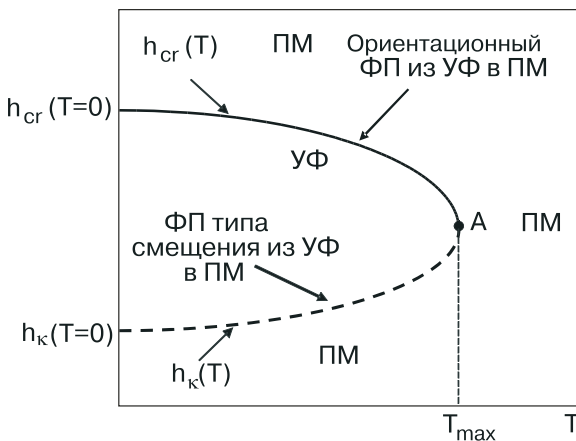


Рис. 1. Фазовая $H-T$ диаграмма синглетного антиферромагнетика. Пунктирной линией обозначено поле магнитного фазового перехода (ФП) типа смещения I рода из парамагнитной фазы (ПМ) в угловую (УФ), а сплошной — поле ориентационного фазового перехода II рода из угловой фазы в парамагнитную.

Положение точки A , как говорилось, определяется равенством критических полей. Заметим, однако, что на рис. 1 в точке пересечения кривые $h_{cr}(T)$ и $h_k(T)$ проведены таким образом, что обе зависимости испытывают особенность, т.е. $(dh_{cr}/dT)_{T=T_{max}} = -\infty$, $(dh_k/dT)_{T=T_{max}} = \infty$. Проверить выполнение этих соотношений аналитически, дифференцируя $h_{cr}(T)$ и $h_k(T)$, в виду сложности рассматриваемой системы не удалось. Но дифференцируя по T уравнение (36), получаем:

$$\frac{dh_{cr}(T)}{dT} = \frac{1}{\Delta p(T)} \left\{ 3D \frac{dp(T)}{dT} + [2(9J_{pl} + 4J_{ch})\Delta p(T) - h_{cr}(T)] \frac{d\Delta p(T)}{dT} \right\}. \quad (48)$$

Нетрудно увидеть из (48), что эта производная в точке A ($T = T_{max}$) стремится к бесконечности, если к бесконечности стремятся в этой точке производные заселенностей одноионных состояний. Такое поведение может быть связано с обращением в нуль в точке A величины $\Delta p(T)$. В самом деле, точка A отвечает условиям, когда одноионные состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ становятся вырожденными. Если в парамагнитной фазе, расположенной под угловой фазой, основным является ионное состояние с $s^Z = 0$, то в парамагнитной фазе, лежащей выше угловой, таковым оказывается состояние с $s^Z = 1$. По мере приближения к точке A энергии этих состояний сближаются, становясь в ней равными. При изменении h в области $T > T_{max}$ (см. рис. 1) упомянутая перестройка спектра происходит в виде квантового кроссовера, при котором магнитная восприимчивость остается функцией магнитного поля. В итоге, можно утверждать, что полученная выше фазовая $H-T$ диаграмма удовлетворительно соответствует экспериментально наблюдаемым в $CsFeBr_3$ [16] и других кристаллах этого семейства.

На рис. 2 приведена намагниченность $m^Z(h)$ при магнитном фазовом переходе типа смещения из парамагнитной фазы в угловую. Сплошной линией обозначена линейная зависимость $m^Z(h)$ при $T = 0$ К. Очевидно, что при $T = 0$ К в синглетном состоянии намагниченность отсутствует. При $T \neq 0$ К ход полевой зависимости на рис. 2 обозначен пунктирной линией. В угловой фазе она по-прежнему линейна по h . Но поскольку магнитная восприимчивость в угловой фазе зависит от температуры и при ее повышении последняя уменьшается, то в угловой фазе при $T \neq 0$ К уменьшается наклон линейного хода $m^Z(h)$. В парамагнитной фазе зависимость $m^Z(h)$ нелинейна. В точке h_k наблюдается скачок намагничивания, связанный с тем, что здесь происходит магнитный фазовый переход типа смещения I рода. На рис. 2

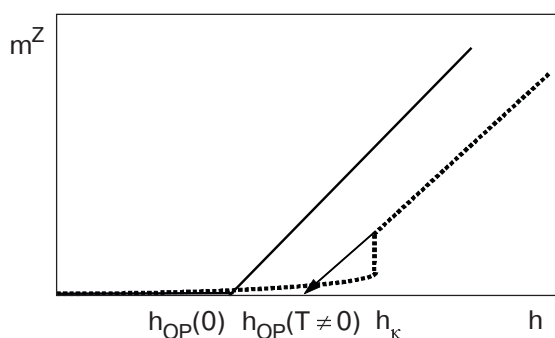


Рис. 2. Графики зависимости намагниченности $m^Z(h)$ при $T = 0$ К (сплошная линия) и при $T \neq 0$ К (пунктирная линия). Стрелкой показано положение поля h_{OP} при $T \neq 0$ К.

стрелка, являющаяся продолжением линейного участка полевой зависимости $m^Z(h)$ в угловой фазе при $T \neq 0$ К, указывает положение на координатной оси поля h_{OP} .

6. Заключение

Исходя из проведенного описания магнитных фазовых переходов тройных галогенидах типа CsFeBr_3 показано, что их поведение отличается от классических антиферромагнетиков. Во-первых, в них антиферромагнитная фаза индуцируется магнитным полем, а фазовый переход в нее связан с поляризацией основного синглета.

Соответствующий магнитный фазовый переход типа смещения при $T \neq 0$ К является переходом I рода, тогда как при $T = 0$ К — II рода. К изменению рода этого фазового перехода приводит учет парапроцесса. Если в классических антиферромагнетиках парапроцесс при низких температурах практически не проявляется, то в синглетных магнетиках его роль оказывается существенной.

Важно, что для описания такого фазового перехода применима теория Ландау, причем параметром порядка является величина спиновой поляризации ионов. Из этого следует, что температурные зависимости поляризации имеют корневой вид, который наблюдается в эксперименте. Ранее для описания таких фазовых переходов применялась теория о появлении спинового бозе-конденсата [28].

В больших полях происходит ориентационный фазовый переход II рода в парамагнитную фазу с коллинеарной ориентацией спинов. В результате угловая фаза на фазовой H - T диаграмме оказывается окруженной парамагнитной фазой.

Мы признательны С.М. Рябченко и участникам руководимого им семинара за стимулирующую дискуссию и полезные критические замечания.

1. В.М. Локтев, В.С. Островский, *ФНТ* **20**, 983 (1994).
2. А.С. Боровик-Романов, *Антиферромагнетизм*, в кн.: Итоги науки, Изд-во АН СССР, Москва (1962).
3. К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин, *Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках*, Наука, Москва (1979).
4. Е.А. Туров, *Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов*, Изд-во АН СССР, Москва (1963).
5. А.И. Ахизер, В.Г. Барьяхтар, С.В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, Москва (1967).
6. Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко, *ФТТ* **26**, 1249 (1984).
7. Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко, *ФНТ* **11**, 730 (1985).
8. Е.В. Розенфельд, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 60 (1976).
9. В.М. Калита, И.М. Иванова, В.М. Локтев, *ФНТ* **28**, 667 (2002).
10. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФТТ* **45**, 1450 (2003).
11. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ЖЭТФ* **125**, 1149 (2004).
12. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1999).
13. Р.С. Гехт, *УФН* **159**, 261 (1989).
14. M.F. Collins and O.A. Petrenko, *Can. J. Phys.* **75**, 605 (1997).
15. Б.С. Думеш, *УФН* **170**, 403 (2000).
16. Y. Tanaka, H. Tanaka, and T. Ono, *E-print Archives: Preprint cond-mat/0104287* (2001).
17. B. Dörner, D. Visser, U. Stiegenberger, K. Kakurai, and M. Steiner, *Z. Phys.* **B72**, 487 (1988).
18. A. Harrison and D. Visser, *Condens. Matter* **4**, 6977 (1992).
19. А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах*, Наука, Москва (1985).
20. Ф.П. Онуфриева, *ЖЭТФ* **89**, 2270 (1985).
21. Ю.Н. Мищай, А.Н. Майорова, Ю.А. Фридман, *ФТТ* **34**, 66 (1992).
22. M. Uhlarz, C. Pfleiderer, and S.M. Hayden, *E-print Archives: Preprint cond-mat/0408424* (2004).
23. T. Haseda, N. Wada, M. Hata, and K. Amaya, *Physica* **B108**, 841 (1991).
24. H. Kawamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 1299 (1992).
25. H. Kawamura, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 4707 (1998).
26. H. Kadowaki, S.M. Shapiro, T. Inami, and Y. Ajiro, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 2640 (1988).
27. Y. Ajiro, T. Nakashima, Y. Uno, H. Kadowaki, M. Mekata, and N. Achiwa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 2648 (1988).
28. T. Nikuni, M. Osikawa, A. Oosawa, and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).

Quantum phase transitions and phase $H-T$
diagram of Van-Vleck multi-sublattice
antiferromagnet

V.M. Kalita and V.M. Loktev

Magnetic ordering of a Van-Vleck easy-plane magnet with a strong single-ion anisotropy and antiferromagnetic exchange interaction between integer spins, when the ground ionic state is a spin singlet and the antiferromagnetic phase exists in a magnetic field only due to polarization is considered. The corresponding phase transformation of the singlet (paramagnetic) phase to the antiferromagnetic one should be referred to as a quantum phase transition or a magnetic phase transition of displacement type. It is shown that the latter can be described in the

framework of the Landau theory of phase transition where the order parameter is a polarization of the singlet state. Unusual features are noted in the paraprocess which usually smoothes the critical behavior of phase transitions but in the case of the Van-Vleck magnet under consideration results in that the quantum transition of the II kind becomes the I one. A phase diagram which fundamentally differs from such diagrams of classical antiferromagnets is plotted; it shows that the antiferromagnetic phase exists only inside the paramagnetic phase.

Keywords: singlet magnet, displacement type magnetic phase transition, single-ion anisotropy, quantum phase transition, spin polarization