Физика низких температур, 2002, т. 28, № 12, с. 1244–1250

К теории магнитных фазовых переходов в магнетиках с большой одноионной анизотропией

В. М. Калита

Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев-28, 03028, Украина

В. М. Локтев

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 8 мая 2002 г, после переработки 30 июля 2002 г.

На примере системы с ферромагнитным обменным взаимодействием между ионами со спинами $S = 1$ показано, что для описания процессов упорядочения и намагничивания магнетиков с большой одноионной анизотропией применимы методы феноменологической теории, опирающейся на использование потенциала Ландау.

На прикладі системи з феромагнітною обмінною взаємодією між іонами зі спінами $S = 1$ показано, що для опису процесів впорядкування і намагнічування магнетиків з великою одноіонною анізотропією є застосовними методи феноменологічної теорії, що спирається на використання потенціала Ландау.

PACS: **75.10.–b**

Введение

Изучение магнетиков с большой величиной одноионной анизотропии вызывало и продолжает вызывать значительный интерес. Это связано с тем, что для них оказываются неприменимыми квазиклассические методы, развиваемые для слабо анизотропных магнетиков и основанные на феноменологической теории магнетизма [1]. В частности, в сильно анизотропных магнитных кристаллах, где анизотропия носит одноионный характер, величина одноузельной намагниченности формируется не только обменным полем, но и в существенной мере кристаллическим полем, константы которого и задают величину одноионной анизотропии. Если при этом одноионная анизотропия принадлежит к типу «легкая плоскость» (но не «легкая ось») либо имеет более общий — двухосный, кубический и т.д. характер и достаточно велика, то система, состоящая из парамагнитных ионов с целыми S, может оказаться в немагнитном (синглетном) состоянии. Однако введение магнитного поля, которое воздействует на спиновые подуровни иона вообще и кристалла в частности, может обеспечить переход из исходного немагнитного состояния кристалла в магнитное, а сама зависимость величины модуля средней одноузельной (и кристаллической) намагниченности от поля дает заметный вклад в восприимчивость кристалла в целом, что отражается на его статических и резонансных (динамических) свойствах [2].

В настоящем сообщении сделана попытка показать, что анизотропные «неклассические» магнетики в области индуцированного внешним магнитным полем перехода из немагнитного состояния в магнитное могут описываться потенциалом, аналогичным потенциалу Ландау, применяемым, как известно, для описания фазовых переходов по температуре из парамагнитного состояния в магнитное. Без ограничения общности рассмотрен простейший случай одноосного ферромагнетика со спином ионов $S = 1$, анизотропия которого имеет легкоплоскостной характер.

Как известно [1], в таком случае нормированная волновая функция основного состояния в собственной системе координат ξ, η, ζ, где осью квантования выбрана ось ζ, имеет вид

$$\Psi_{qr} = \sum_{M_\zeta=\pm1} C_{M_\zeta}|M_\zeta\rangle; \quad |C_1|^2 + |C_{-1}|^2 = 1, \quad (1)$$

где $|M_\zeta\rangle$ — собственные функции оператора S^ζ, а C_{M_ζ} — квантовомеханический вес функции $|M_\zeta\rangle$ в Ψ_{qr}. В соответствии с (1) средняя (квантовомеханическая) намагниченность иона определяется равенством

$$\langle\Psi_{qr}|S^\zeta|\Psi_{qr}\rangle \equiv s = |C_1|^2 - |C_{-1}|^2, \qquad (2)$$

из которого следует, что $s \neq 0$, когда $|C_1|^2 \neq \neq |C_{-1}|^2$. Этому случаю отвечает магнитное состояние, в котором средний спин (а следовательно, и средняя намагниченность) в основном состоянии может существенно отличаться от «номинального» значения $S = 1$. Если же вероятности реализации состояний $|\pm1\rangle$ окажутся равными, то $s = 0$ и основное состояние системы будет немагнитным. Как видим, функция основного состояния (1) допускает возможность превращения немагнитного состояния в магнитное.

Заметим, что приведенное в (2) вероятностное определение среднего спина по существу мало чем отличается от обычного определения среднего термодинамического, которое записывается как сумма наблюдаемых произведений микроскопических значений на вероятности их реализации (заселенности состояний). Отмеченное подобие носит условный характер, поскольку, вообще говоря, предусматривает разные процедуры расчетов. Учитывая, что в сильно анизотропных системах, допускающих существование немагнитного состояния и его превращение под действием внешнего магнитного поля в магнитное, имеется область значений параметров, где намагниченность мала, как и в термодинамических переходах, представляется уместным вопрос о применимости к этим системам методики общей теории фазовых переходов.

В приведенном выше случае легкоплоскостной системы разность (2) зависит от соотношения констант одноионной анизотропии и обмена. При этом действие этих констант имеет противоположный характер [1]: если обмен «восстанавливает» величину проекции спина, стремясь сделать его равным исходному значению $S = 1$, то анизотропия эту проекцию уменьшает вплоть до нуля. Из этого следует несколько формальное, но физически оправданное допущение, что действие одноионной анизотропии подобно разупорядывающему действию температуры — в обеих ситуациях имеется предельное значение $s = 0$, при котором система становится немагнитной. И если константа одноионной анизотропии, будучи характеристикой того или иного вещества, практически не изменяется, то изменения макроскопического состояния системы можно добиться с помощью внешнего магнитного поля. Тем самым соответствующие фазовые переходы даже при $T = 0$ К (а реально $T << T_{\rm cr}$, где $T_{\rm cr}$ — температура Кюри или Нееля) можно наблюдать экспериментально. Магнитное поле, как будет видно, может изменить C_{M_ζ} (см. (1)), сделав величину s конечной, что позволяет для малых s представить энергию основного состояния магнетика в виде разложения, подобного тому, что используется в теории фазовых переходов Ландау [3]. При этом параметром порядка является, разумеется, величина s.

Следует иметь в виду, что действие внешнего магнитного поля будет зависеть от его ориентации, поэтому ниже отдельно рассматриваются два различных его направления: параллельно и перпендикулярно «тяжелой» оси, каковой является исходная ось симметрии. Спиновые конфигурации такого ферромагнетика рассматривались в [4,5] (см. также [1]), а с учетом биквадратичного обмена — в [6–8]. В этих работах расчеты проводили с применением процедуры самосогласования [1], которая, однако, не позволяет определять устойчивости фаз. Для этих целей, как в квазиклассическом подходе, использовали выражения для энергии основного состояния, полученной квантовомеханически и имеющей, как будет показано, вид потенциала Ландау для обменного ферромагнетика в магнитном поле.

Модель

Вначале ограничимся учетом билинейного обменного взаимодействия, одноионной анизотропии и зеемановского слагаемого. В этом случае гамильтониан ферромагнетика имеет (в кристаллографической системе координат) стандартный вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2}\sum_{\mathbf{n},\boldsymbol{\rho}} \mathbf{S_n S_{n+\rho}} + D\sum_{\mathbf{n}} (S_{\mathbf{n}}^Z)^2 - h\sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}, \quad (3)$$

где J > 0 — обменное взаимодействие между ближайшими спинами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}$, $D > 0$ — константа магнитной анизонтропии типа «легкая» плоскость, а вектор напряженности магнитного поля $\mathbf{h}$ определен в энергетических единицах $\mathbf{h} = \mu_B g\mathbf{H}$ (μ_B — магнетон Бора, g — фактор) и ось $\mathbf{Z}$ направлена вдоль «тяжелой» оси.

Пренебрегая спиновыми флуктуациями и используя функцию (1), запишем энергию E_{qr} основного состояния в расчете на один спин:

$$E_{qr} = -\frac{1}{2} Jzs^2 + DQ - hs, \qquad (4)$$

где z — число ближайших соседей, s — вектор среднего спина, определенный в (2), а Q — среднее квантовомеханическое квадратов Z-х проекций операторов спинов (см. (3)), которые легко связать с компонентами квадрупольного спинового момента [1].

Если перейти к собственным осям так, чтобы угол между осью ζ квантования спина и осью Z был равен θ, а ось ξ лежала в плоскости $Z\zeta$, то в соответствии с (1) волновая функция каждого иона может быть представлена простой линейной комбинацией [9]:

$$\Psi_{qr} = \cos\varphi|1\rangle + \sin\varphi|-1\rangle, \qquad (5)$$

где угол φ (см. ниже) определяется из условия минимума энергии основного состояния.

Прямым вычислением с учетом явного вида функции (5) легко рассчитать, что в собственной системе координат отличны от нуля следующие компоненты проекций спина и спинового квадрупольного момента:

$$s = \cos 2\varphi; \;\; Q^{\zeta\zeta} = 1; \;\; Q^{\xi\xi} = \frac{1}{2}(1 + \sin 2\varphi);$$

$$Q^{\eta\eta} = \frac{1}{2}(1 - \sin 2\varphi), \qquad (6)$$

использование которых позволяет представить энергию (4) в виде

$$E_{qr} = -\frac{1}{2} Jz \cos^2 2\varphi + D\left[\cos^2\theta + \frac{\sin^2\theta}{2}(1 + \sin 2\varphi)\right] - (h_{\parallel}\cos\theta + h_{\perp}\sin\theta)\cos 2\varphi, \qquad (7)$$

где вектор $\mathbf{h}$ представлен разложением $\mathbf{h} = \mathbf{h}_{\parallel} + \mathbf{h}_{\perp}$, причем $\mathbf{h}_{\parallel} \parallel \mathbf{Z}$ и $\mathbf{h}_{\perp} \perp \mathbf{Z}$.

Выше указывалось, что спиновые конфигурации (в отличие от предложенной в [9] (см. также [1]) и использованной, например, в [5–8] процедуры самосогласования) удобнее находить обычным путем минимизации выражения (7) по неизвестным «геометрическому» углу и углу «смешивания» состояний φ*; в результате приходим к уравнениям

$$Jz\sin 4\varphi + D\sin^2\theta\cos 2\varphi + 2(h_{\parallel}\cos\theta + h_{\perp}\sin\theta)\sin 2\varphi = 0,$$

$$-D\sin 2\theta(1 - \sin 2\varphi) + 2(h_{\parallel}\sin\theta - h_{\perp}\cos\theta)\cos 2\varphi = 0. \qquad (8)$$

При произвольном направлении поля $\mathbf{h}$, или, что то же самое, произвольных $\mathbf{h}_{\parallel}$ и $\mathbf{h}_{\perp}$ решить систему (8) аналитически не удается. Однако можно однозначно утверждать, что величина среднего спина s при произвольной ориентации, кроме строго продольной вдоль трудной оси кристалла $\mathbf{h} \parallel \mathbf{Z}$, всегда отлична от нуля (ван-флековский механизм намагничивания).

Если внешнее поле отсутствует ($\mathbf{h} = 0$), то из (8) можно получить два решения — немагнитное с $s = 0$, которое реализуется при $D > 2Jz$, и магнитное при $D < 2Jz$, которому соответствует величина

$$s_0 = \sqrt{1 - (D/2Jz)^2}. \qquad (9)$$

Видно, что $s_0 < 1$ и достигает величины $s = 1$, только когда $D = 0$. Малая величина одноионной анизотропии приводит лишь к поправкам второго порядка по величине $D/2Jz$ [1].

Рассмотрим раздельно случаи $\mathbf{h} \perp \mathbf{Z}$, когда поле ориентировано в легкой плоскости, и $\mathbf{h} \parallel \mathbf{Z}$, когда поле ориентировано вдоль «тяжелой» оси.

Поперечное поле

Из уравнений (8) находим, что $\theta = \pi/2$, или, другими словами, среднее квантовомеханическое значение спина формируется и лежит в легкой плоскости вдоль направления $\mathbf{h}_{\perp}$. При этом, согласно (6), искомая величина $s = \cos 2\varphi$; предполагая ее малой, запишем энергию основного состояния (7) для этой ориентации поля в виде ряда по s:

$$E_{qr} = \frac{1}{4}(D - 2Jz)\, s^2 + \frac{D}{16}s^4 + \frac{D}{32}s^6 - h_{\perp}s. \qquad (10)$$

Минимизируя (10) по s, получаем уравнение состояния

$$\frac{1}{2}(D - 2Jz)\, s + \frac{D}{4}s^3 + \frac{3D}{16}s^5 - h_{\perp} = 0. \qquad (11)$$

Если $\mathbf{h}_{\perp} = 0$, то из (11) имеем выписанные выше решения: $s = 0$ для $D \ge 2Jz$ и $s_0 = \sqrt{2\,(2Jz/D - 1)}$ для обратного неравенства. Второе решение есть

* Заметим, что в классической теории фигурируют лишь пространственные углы, а число уравнений соответственно меньше.

не что иное, как решение (9) при условии, что $2Jz/D - 1 \to 0$.

Уже из (10) видно, что тип решения определяется знаком коэффициента при s^2 в (10), изменяющимся в точке $D = 2Jz$, в которой происходил бы фазовый переход (см. монографию [2] и цитированную в ней литературу), если бы величину D можно было изменять.

Для сравнения приведем выражение для потенциала Ландау, описывающего изотропный ферромагнетик с $S = 1$ во внешнем магнитном поле при конечной температуре $T \neq 0$. Тогда свободная энергия такого ферромагнетика $F = E - TS_{\text{en}}$, где E — внутренняя энергия, а S_{en} — энтропия, которая в методе среднего поля является конфигурационной и зависит только от параметра порядка. Неравновесная свободная энергия этого ферромагнетика может быть представлена в виде [10]

$$F(s) = -\frac{1}{2}Jzs^2 +$$

$$+ T\left(s\ln\frac{s + \sqrt{4-3s^2}}{2(1-s)} + \ln\frac{1+\sqrt{4-3s^2}}{1-s^2} \right) - hs, \tag{12}$$

где s — среднее термодинамическое значение спина, направление которого в случае обменного ферромагнетика всегда совпадает с $\mathbf{h}$. Разложив (12) в ряд по s, запишем потенциал Ландау

$$F(s) = \frac{3}{4}(T - \frac{2}{3}Jz)s^2 + \frac{3^2}{2^6}Ts^4 + \frac{3^2 \cdot 17}{2^9 \cdot 5}Ts^6 - hs. \tag{13}$$

Коэффициенты в (13), обусловленные энтропией, положительны и пропорциональны T. Сравнивая выражения (13) и (10), видим, что при $T = 0$ одноионная анизотропия D формально играет ту же роль, что и T. Более того, значение $D = 2Jz$ так же разделяет магнитное состояния, как температура Кюри $T_C = 2Jz/3$ — магнитоупорядоченную ($T < T_C$) и парамагнитную ($T > T_C$) фазы. Учитывая найденное сходство, можно говорить, что при $D > 2Jz$ при введении магнитного поля намагничивание сильно анизотропного ферромагнетика подобно намагничиванию изотропного ферромагнетика при $T > T_C$ и, наоборот, намагничивание при $D < 2Jz$ аналогично случаю $T < T_C$.

Используя (11), можно легко вычислить магнитную восприимчивость при $\mathbf{h}_\perp \to 0$:

$$\chi_{\perp,\perp} = \frac{\partial s}{\partial h_\perp}\Big|_{h_\perp \to 0} =$$

$$= \frac{2}{D - 2Jz + \frac{3}{2}Ds^2(0) + \frac{15}{8}Ds^4(0)}. \tag{14}$$

В выражении (14) величиной $s(0)$ в знаменателе обозначено среднее значение спина для случая $\mathbf{h}_\perp = 0$, которое равно либо нулю, либо (9) в зависимости от соотношения констант D и Jz. В частности, когда $D > 2Jz$, восприимчивость

$$\chi_{\perp,\perp} = \frac{2}{D - 2Jz} \tag{15}$$

является ван-флековской и вследствие синглетности основного состояния не зависит от внешнего поля.

Продольное поле

Этот случай более необычен. Действительно, из второго уравнения системы (8) найдем выражение для угла θ:

$$\cos\theta = \frac{h_\parallel \cos 2\varphi}{D(1 - \sin 2\varphi)}. \tag{16}$$

Далее из (16) и первого уравнения системы (8) следует, что для величин поля $h_\parallel \geq D$ реализуется состояние, характеризуемое $\cos\theta = 1$. При этом проекция среднего спина на направление внешнего поля равна предельной, т.е. $s = \cos 2\varphi = 1$.

Подставляя (16) в (7), запишем выражение для энергии основного состояния в полях, меньших величины одноионной анизотропии, или $h_\parallel < D$:

$$E_{qr} = -\frac{1}{2}Jzs^2 + \frac{1}{2}(D - \frac{h_\parallel^2}{D})(1 - \sqrt{1-s^2}). \tag{17}$$

Минимизацией (17) получаем те же два решения: синглетное с $s = 0$ и магнитное, в котором [5]

$$s = \frac{1}{2JzD}\sqrt{(2JzD)^2 - (D^2 - h_\parallel^2)^2}. \tag{18}$$

Эти решения переходят одно в другое в поле

$$h_{QP} = \sqrt{D(D - 2Jz)}. \tag{19}$$

Величина E_{qr} для найденного решения (18) имеет простой вид

$$E_{qr} = -\frac{(h_\parallel^2 - h_{QP}^2)^2}{8JzD^2}, \tag{20}$$

из которого видно ее обращение в нуль в точке $h_\parallel = h_{QP}$, где энергии магнитного и немагнитного основных состояний оказываются равными. Из этого следует, что переход из синглетного (неполярного) в магнитное (полярное) состояние происходит непрерывно. В области $h_{||} > h_{QP}$ энергия последнего отрицательна и меньше энергии синглетного состояния.

Проекцию спина на направление $\mathbf{h}_{||} \parallel \mathbf{Z}$ можно найти дифференцированием выражения (20):

$$s_{||} = \frac{h_{||}(h_{||}^2 - h_{QP}^2)}{2JzD^2}. \qquad (21)$$

Величина этой проекции по мере увеличения $h_{||}$ непрерывно возрастает, а ее производная, т. е. магнитная восприимчивость, нигде не обращается в нуль. Последнее означает, что вплоть до поля $h_{||} = D$ никаких превращений в системе не происходит, причем угловая фаза занимает конечный диапазон полей $h_{QP} \le h_{||} \le D$. В этом можно убедиться из анализа энергии (20).

Стабильность решения (18) обеспечивается отрицательным по знаку вкладом обменного взаимодействия в энергию (17). В отсутствие обменного взаимодействия угловая фаза в продольном поле не возникает. В этом случае будет происходить скачкообразный переход системы из немагнитного состояния в магнитное с максимальной $M_Z = 1$ величиной проекции на ось Z.

Рассмотрим анизотропную ферромагнитную систему, помещенную в продольное поле, в рамках феноменологической теории и разложим энергию (17) в ряд по величине s, считая ее малой:

$$E_{qr} = \frac{1}{2}\left(-Jz + \frac{1}{2}\left(D - \frac{h_{||}^2}{D}\right)\right)s^2 + \frac{1}{16}\left(D - \frac{h_{||}^2}{D}\right)s^4 + \frac{1}{32}\left(D - \frac{h_{||}^2}{D}\right)s^6. \qquad (22)$$

В отличие от (10) в последнем выражении нет слагаемого, содержащего первую степень s. Это свидетельствует о том, что при такой ориентации магнитного поля его воздействие носит критический характер. При этом оно «борется» с величиной D, что проявляется в (22) как уменьшение всех коэффициентов разложения, так как $h_{||} \ne 0$.

Проанализируем более подробно случай $D > 2Jz$, когда исходным до включения поля служит синглетное состояние. Тогда из (22) получаем, что в поле $h_{||} = h_{QP}$ коэффициент при s^2 становится равным нулю, а при дальнейшем росте $h_{||}$ он отрицателен. При этом остальные коэффициенты знаки не изменяют. В полном соответствии с теорией фазовых переходов Ландау в этой точке осуществляется индуцированный полем переход II рода из синглетного состояния в магнитное. Если считать, что $s \ll 1$, то приближенно

$$E_{qr} = \frac{h_{QP}}{2D}(h_{QP} - h_{||})s^2 + \frac{D}{16}s^4, \qquad (23)$$

откуда следует уравнение состояния

$$\frac{h_{QP}}{D}(h_{QP} - h_{||})s + \frac{D}{4}s^3 = 0. \qquad (24)$$

Из (24) видно, что решение $s = 0$ реализуется для полей $h_{||} \le h_{QP}$, а в больших полях

$$s = \frac{2\sqrt{h_{QP}}}{D}\sqrt{h_{||} - h_{QP}}. \qquad (25)$$

Такая же критическая зависимость была получена в работе [8] на основе решения уравнений самосогласования. Однако в [8] использовано разложение волновой функции (6) по параметру φ, который не является параметром порядка и наблюдаемой величиной, так как задает «вращение» собственных волновых функций спинового оператора S^{ζ} в гильбертовом пространстве.

Используя (16) и (25), можно определить проекции спина на «тяжелую» ось и на плоскость, когда $h_{||} > h_{QP}$ (но $h_{||} < D$):

$$s_{||} = 2\frac{h_{QP}^2}{D^3}(h_{||} - h_{QP}); \qquad (26)$$

$$s_{\perp} = 2\frac{\sqrt{h_{QP}}}{D}\left[1 - \frac{h_{QP}^3}{2D^4}(h_{||} - h_{QP})\right]\sqrt{h_{||} - h_{QP}}. \qquad (27)$$

Таким образом, в поле $h_{||} > h_{QP}$ исходно немагнитная система действительно находится в угловой ферромагнитной фазе. В ней отличны от нуля не только диагональные, но и недиагональные компоненты тензора магнитной восприимчивости: $\chi_{||,||} = \partial s_{||}/\partial h_{||}$ и $\chi_{\perp,||} = \partial s_{\perp}/\partial h_{||}$, которые в немагнитном состоянии равны нулю; в этой фазе они записываются в виде

$$\chi_{||,||} = \frac{2h_{QP}^2}{D^3}; \quad \chi_{\perp,||} = \frac{\sqrt{h_{QP}}}{D}\frac{1}{\sqrt{h_{||} - h_{QP}}} \qquad (28)$$

(из-за малости в $\chi_{\perp,||}$ опущен вклад, обусловленный вторым слагаемым в правой части (27)).

Как видим, продольная (вдоль поля) компонента тензора восприимчивости $\chi_{||,||}$ постоянна и не зависит от величины магнитного поля. Ее величина обратно пропорциональна третьей степени D и будет ощутимой лишь при большой величине h_{QP}. Поперечная же составляющая в точке магнитного фазового перехода обращается в бесконечность, как при фазовом переходе из парамагнитного в упорядоченное состояние. Это, в свою очередь, означает, что главным в рассматриваемом фазовом переходе является спонтанное возникновение проекции спина, ориентированной в легкой плоскости перпендикулярно полю. Отметим также, что эти особенности намагничивания под действием магнитного поля, полученные при анализе энергии (22), содержатся и в точном решении, однако их анализ не столь очевиден.

При $D < 2Jz$ решение с $s = 0$ неустойчиво, и для всех значений внешнего поля из интервала $h_{||} \in [0, D]$ реализуется только обычная угловая фаза с величиной спина

$$s = s_0 \left(1 + \frac{h_{||}^2}{D^2 s_0^2}\right). \qquad (29)$$

Для этого решения компоненты тензора магнитной восприимчивости равны

$$\chi_{||,||} = \frac{s_0^2}{2D}; \quad \chi_{\perp,||} = \frac{2h_{||}}{D^2 s_0^2}. \qquad (30)$$

Видим, что при $D < 2Jz$ продольная компонента тензора восприимчивости $\chi_{||,||}$ постоянна; при этом ее величина значительно превосходит приведенную в (28). Недиагональная компонента тензора восприимчивости (30) пропорциональна величине поля и обращается в нуль, когда $h_{||} \to 0$. Это означает, что в момент начала ввода магнитного поля основным фактором в намагничивании является поворот, а не изменение величины s, несмотря даже на то, что в предложенных условиях ($D \sim 2Jz$) величина $s_0 << 1$. Изменение же величины среднего спина под действием поля будет значительным, когда значения компонент тензора восприимчивости (30) будут сравнимы. Это произойдет в полях $h_{||} \sim (2Jz - D)^2 / D$.

Влияние негейзенберговских изотропных взаимодействий

Ограничимся рассмотрением негейзенберговских изотропных взаимодействий четвертой степени по спину, гамильтониан которых имеет вид

$$\mathcal{H}' = \Pi \sum_{\mathbf{n},\rho} (\mathbf{S}_\mathbf{n}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\rho})^2 +$$

$$+ \Lambda \sum_{\mathbf{n},\rho,\nu} (\mathbf{S}_\mathbf{n}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\nu})(\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\nu}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\rho}) +$$

$$+ P \sum_{\mathbf{n},\rho,\nu,\tau} (\mathbf{S}_\mathbf{n}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\rho})(\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\nu}\mathbf{S}_{\mathbf{n}+\tau}), \qquad (31)$$

где параметры Π, Λ, P относятся к двухспиновым (биквадратичным), трехспиновым и четырехспиновым взаимодействиям соответственно.

Негейзенберговские взаимодействия (31) изотропны и не зависят от ориентации системы координат. Их вклад в энергию основного состояния (4) в собственной системе координат запишем в виде [11]

$$E'_{qr} = -\frac{1}{2}\Pi s^2 + \Lambda s^2 Q^{\zeta\zeta} +$$

$$+ \Pi \left[(Q^{\zeta\zeta})^2 + (Q^{\eta\eta})^2 + (Q^{\xi\xi})^2 \right] + P s^4. \qquad (32)$$

Вообще говоря, параметры взаимодействия в (32) должны быть умножены на количество скалярных произведений, образованных ближайшими соседями. Соответствующая перенормировка в (32) не включена, поскольку принятый вид оператора (31) предполагает, что все негейзенберговские взаимодействия в нем описываются феноменологическими параметрами.

С учетом (6) выражение (32) запишем в виде

$$E'_{qr} = (\Lambda - \Pi)\, s^2 + P s^4. \qquad (33)$$

Учет энергии (33) приведет к изменению выражения разложения энергии основного состояния. Так, в продольном поле разложение по s энергии основного состояния (22) с учетом негейзенберговских взаимодействий имеет вид

$$E_{qr} = \left[-\frac{1}{2}Jz + \Lambda - \Pi + \frac{1}{4}\left(D - \frac{h_{||}^2}{D}\right) \right] s^2 +$$

$$+ \frac{1}{16}\left(D + P - \frac{h_{||}^2}{D} \right) s^4 + \frac{1}{32}\left(D - \frac{h_{||}^2}{D} \right) s^6. \qquad (34)$$

Видно, что параметры негейзенберговского взаимодействия (31) изменяют только коэффициенты разложения. При этом параметры биквадратичного и трехчастичного обменов входят в коэффициент при второй степени. Их учет приведет к изменению величины поля фазового перехода из синглетного состояния в магнитное, но на типе фазового перехода не скажется. Параметр четырехспинового обмена входит в коэффициент при четвертой степени. При значительной величине четырехспинового взаимодействия и условии $P < 0$ возможно, что коэффициент при четвертой степени в (34) при введении магнитного поля обратится в нуль и станет отрицательным раньше коэффициента при второй степени. Для таких значений параметра четырехспиновых взаимодействий фазовый переход из немагнитного состояния в угловую фазу будет проходить как фазовый переход I рода.

Заключение

Из проведенных расчетов следует достаточно неожиданный вывод, что описание фазовых переходов в магнитных полях в сильно анизотропных магнетиках, число которых в настоящее время нельзя считать малым (см., например, [12,13]), можно проводить в полном соответствии с феноменологической теорией фазовых переходов Ландау. При этом, как отмечено выше (см. также [12]), анизотропия играет роль «разупорядочивающего» фактора, а обмен и внешнее магнитное поле, наоборот, упорядочивающих. В окрестности переходов из синглетного состояния с отсутствующей намагниченностью в состояние с намагниченностью, не равной нулю, разложение энергии по параметру порядка имеет вид полностью аналогичный потенциалу Ландау, что позволяет легко установить род соответствующего фазового перехода. Важно, что в предложенном описании с самосогласованным учетом как дипольных, так и квадрупольных спиновых средних этот переход всегда является фазовым переходом второго рода, в то время как в отсутствие такого самосогласования переход может быть I рода [12,13]. Развиваемый подход позволяет также тривиальным образом учесть и негейзенберговские изотропные взаимодействия четвертой степени по спину. Обобщение предложенного рассмотрения на случай полуцелых спинов, анизотропных антиферромагнетиков и конечных температур будет сделано отдельно.

Мы благодарим проф. С. М. Рябченко за критическое обсуждение результатов и заметившего, в частности, что при отмеченном в работе сходстве между температурными и полевыми (в сильно анизотропных магнетиках) переходами между ними существует и существенное различие: если первые — это переходы типа порядок—беспорядок, то вторые — переходы порядок—порядок, т.е. аналогичны переходам типа смещения.

Работа выполнена в рамках проектов, принятых Фондом фундаментальных исследований Украины (гранты 02.07/0114 и 04.07/0114).

1. В. М. Локтев, В. С. Островский, *ФНТ* **20**, 983 (1994).
2. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1976).
4. Е. В. Розенфельд, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 60 (1976).
5. Ф. П. Онуфриева, *ЖЭТФ* **89**, 2270 (1985).
6. Ю. Н. Мицай, А. Н. Майорова, Ю. А. Фридман, *ФТТ* **34**, 66 (1992).
7. Ю. А. Фридман, О. В. Кожемяко, Б. Л. Эйнгорн, *ФНТ* **27**, 495 (2001).
8. В. В. Вальков, Г. Н. Мацулева, *Препринт ИФ СО АН СССР* №645Ф (1987).
9. В. М. Локтев, В. С. Островский, *УФЖ* **23**, 1708 (1978).
10. В. М. Калита, А. Ф. Лозенко, *ФНТ* **23**, 399 (1997).
11. В. М. Калита, *ФТТ* **33**, 1940 (1991).
12. А. К. Звездин, В. М. Матвеев, А. А. Мухин, А. И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах*, Наука, Москва (1985).
13. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Наука, Москва (1988).

On the theory of phase transitions in magnets with strong single-ion anisotropy

V. M. Kalita and V. M. Loktev

Using the system with a ferromagnetic exchange interaction between ions with spin $S=1$ as an example, it is shown that the phenomenological theory based on the Landau potential can be used for the description of the ordering and magnetization processes in magnets with strong single-ion anisotropy.