сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17 - 12801

Г.Конвент, Н.М.Плакида

МЯГКИЕ ФОНОНЫ И МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

1979

Конвент Г., Плакида Н.М. P17 - 12801

Мягкие фононы и магнитные фазовые переходы

Обсуждается взаимосвязь структурных и магнитных фазовых переходов, обусловленная взаимодействием мягких фононов со спиновой подсистемой. На основе модельного гамильтониана получены уравнения для параметров порядка структурного и магнитного фазовых переходов. Рассмотрена возможность магнитных переходов типа легкая ось - легкая плоскость, индуцированных структурным переходом, и появление слабого ферромагнетизма, наблюдаемого в $KMnF_3$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Konwent H., Plakida N.M. P17 - 12801

Soft Phonons and Magnetic Phase Transitions

A correlation between the structural and magnetic phase transitions due to the interaction of soft phonons with magnetic subsystem is discussed. On the basis of a model Hamiltonian equations for the order parameters of structural and magnetic phase transitions are derived. The possibility of magnetic transitions of the type easy axis-easy plane induced by the structural transition and the appearance of a weak ferromagnetism observed in $KMnF_3$ is considered.

The investigations has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание привлекает исследование магнитных кристаллов, обладающих структурными превращениями. Среди них известны кристаллы, в которых наблюдается взаимная корреляция структурных и магнитных переходов /сегнето-магнетики /1/, ян-теллеровские кристаллы /2/, ферро- и анти-ферромагнетики с последовательностью структурных переходов, например, $KMnF_3$ /3/ /. Эта корреляция может быть объяснена как эффект взаимодействия мягкой моды, описывающей структурный переход со спиновой подсистемой. Теоретические исследования в этом направлении имеют в основном феноменологический /напр., /4/ / или модельный /напр., /5/ / характер. В то же время существует теория структурных фазовых переходов, основанная на концепции локальных нормальных координат /6/, которая удовлетворительно описывает динамику решетки, и теория спин-фононного взаимодействия в сильно-ангармонических кристаллах /7/, в том числе испытывающих структурный переход.

Объединив эти два подхода, в настоящей работе мы предлагаем микроскопическую теорию для описания структурных и магнитных фазовых переходов с самосогласованным учетом их взаимного влияния. Стрикционное взаимодействие /взаимодействие с акустическими фононами/, играющее важную роль в определении характера магнитного и структурного фазовых переходов, в работе не рассматривается, хотя также может быть учтено в предложенной теории.

В следующем разделе вводится модельный гамильтониан для системы, обладающей структурным и магнитным фазовыми переходами. В разделе 3 на его основе рассмотрены одноосные ферро и антиферромагнетики. В разделе 4 обсуждается переход антиферромагнетик - слабый ферромагнетик, индуцированный структурным переходом, и предложено качественное объяснение подобного перехода в $KMnF_3$.

2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СПИНОВ С МЯГКИМИ ФОНОНАМИ

Рассматривая диэлектрический кристалл с магнитными атомами, будем предполагать, что потенциальная энергия решетки, обменное взаимодействие и параметры кристаллического поля зависят от мгновенных положений атомов. Представляя эти функции в виде разложения по смещениям атомов относительно некоторых равновесных положений, получим гамильтониан магнитного ангармонического кристалла со спин-фононным взаимодействием / см. /7/ /. Учитывая далее только наиболее важные для структурного перехода мягкие фононы, гамильтониан кристалла можем записать в модельном виде:

$$H = H_L + H_S + H_{LS} \qquad /1/$$

$$H_L = \frac{1}{2}\sum_{\ell\lambda\ell'\lambda'} P_\lambda(\ell)\theta^{-1}_{\lambda\lambda'}(\ell,\ell')P_{\lambda'}(\ell') +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\ell\lambda\ell'\lambda'} v_{\lambda\lambda'}(\ell,\ell')Q_\lambda(\ell)Q_{\lambda'}(\ell') + \qquad /2/$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{\ell_1\lambda_1\ldots\ell_4\lambda_4} \Gamma(\ell_1\lambda_1\ldots\ell_4\lambda_4)Q_{\lambda_1}(\ell_1)\ldots Q_{\lambda_4}(\ell_4),$$

где введены локальные нормальные координаты $Q_\lambda(\ell)$ и сопряженные им импульсы $P_\lambda(\ell)$ для нормальной моды λ, описывающие локальную дисторсию в ℓ-той элементарной ячейке. При этом параметры $\theta_{\lambda\lambda'}(\ell,\ell')$, $v_{\lambda\lambda'}(\ell,\ell')$ и $\Gamma(\ell_1\lambda_1\ldots\ell_4\lambda_4)$ служат для модельного описания структурного перехода /см. /8/ /.

Спиновый гамильтониан запишем в общем виде

$$H_s = \sum_{\ell\kappa\alpha} h^\alpha_\kappa S^\alpha_{\ell\kappa} + \sum_{\ell\kappa\alpha} K^\alpha_\kappa (S^\alpha_{\ell\kappa})^2 +$$

$$+\sum_{\ell\kappa\alpha}\sum_{\ell'\kappa'\beta} D^{\alpha\beta}_{\kappa\kappa'}(\ell,\ell')S^\alpha_{\ell\kappa}S^\beta_{\ell'\kappa'} + \qquad /3/$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\ell\kappa\alpha}\sum_{\ell'\kappa'} J_{\kappa\kappa'}(\ell,\ell')S^\alpha_{\ell\kappa}S^\alpha_{\ell'\kappa'},$$

где $S^\alpha_{\ell\kappa}$ - оператор спина магнитного атома сорта κ в ℓ-той элементарной ячейке, $\alpha = x, y, z$. $h^\alpha_\kappa = g_\kappa\mu_\kappa H_\alpha$ - зеемановская энергия, K^α_κ - параметры одноионной анизотропии, $D^{\alpha\beta}_{\kappa\kappa'}$ и $J_{\kappa\kappa'}$ - параметры анизотропного и изотропного обменного взаимодействия. Для простоты мы предполагаем, что кристалл не имеет кубической симметрии /например, тетрагональная структура/ и эффективный спин атома $S_\kappa \geq 1$, так что достаточно учесть только билинейные по спинам члены. Зависящие от локальных нормальных координат члены в магнитной энергии кристалла приводят к спин-фононному взаимодействию:

$$H_{LS} = \sum_{\ell\kappa\alpha} V^\alpha_{\ell\kappa}(S^\alpha_{\ell\kappa})^2 +$$

$$+\sum_{\ell\kappa\ell'\kappa'\alpha\beta} V^{\alpha\beta}_{\ell\kappa,\ell'\kappa'} S^\alpha_{\ell\kappa}S^\beta_{\ell'\kappa'}, \qquad /4/$$

где $V^\alpha_{\ell\kappa} = V^\alpha_{\ell\kappa}(\{Q_\lambda(\ell)\})$, $V^{\alpha\beta}_{\ell\kappa,\ell'\kappa'} = V^{\alpha\beta}_{\ell\kappa,\ell'\kappa'}[\{Q_\lambda(\ell), Q_\lambda(\ell')\}]$

- полиномы относительно переменных $Q_\lambda(\ell)$, явный вид которых определяется из условий симметрии для конкретной модели кристалла.

Гамильтониан /1-4/ имеет общий вид, удобный для описания различных структурных и магнитных фазовых переходов. Чтобы рассмотреть наиболее важные черты предложенной модели, достаточно изучить лишь некоторые частные случаи этого гамильтониана, которые приведены в последующих разделах.

3. ОДНООСНЫЕ ФЕРРО- И АНТИФЕРРОМАГНЕТИКИ

При структурном переходе, обусловленном неустойчивостью решетки по отношению к невырожденной мягкой оптической моде, описываемой однокомпонентной локальной нормальной координатой Q_ℓ, гамильтониан /2/ может быть записан в простой форме:

$$H_L = \sum_\ell \left\{\frac{1}{2M}P^2_\ell - \frac{A}{2}Q^2_\ell + \frac{B}{4}Q^4_\ell\right\} + \frac{1}{4}\sum_{\ell\ell'} \phi_{\ell\ell'}(Q_\ell - Q_{\ell'})^2, \qquad /5/$$

где M - эффективная масса для данной оптической моды, A, B и $\phi_{\ell\ell'} = \phi(\ell - \ell')$ - постоянные модели, определяющие характер структурного перехода. В случае перехода типа смещения ангармонизм мал и $\phi_0 = \sum_{\ell'} \phi(\ell - \ell') \gg A$ /8/.

При описании магнитного перехода ограничимся простой моделью одноосного ферро- или антиферромагнетика с гамильтонианом:

$$H_s = \sum_{\ell\kappa} h_\kappa S^z_{\ell\kappa} - \sum_{\ell\kappa} K_\kappa (S^z_{\ell\kappa})^2 + \qquad /6/$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\ell\kappa\ell'\kappa'} J_{\kappa\kappa'} (\ell - \ell') S^a_{\ell\kappa} S^a_{\ell'\kappa'} ,$$

где будем считать $K_\kappa > 0$. В спин-фононном взаимодействии /4/ в этом случае учтем только одноионный вклад:

$$H_{SL} = \sum_{\ell\kappa} \{ a_\kappa Q_\ell + \frac{1}{2} b_\kappa Q^2_\ell \} (S^z_{\ell\kappa})^2 , \qquad /7/$$

который позволяет в наиболее простом виде учесть взаимное влияние магнитной и фононной подсистем друг на друга.

Рассмотрим, прежде всего, уравнение для параметра порядка при структурном переходе, который определяется средним значением локальной нормальной координаты:

$$\eta = \langle Q_\ell \rangle , \quad Q_\ell = \eta + u_\ell , \qquad /8/$$

где

$$\langle P \rangle = \mathrm{Tr}\{ e^{-H/T} P \} / \mathrm{Tr}\{ e^{-H/T} \}$$

и $H = H_L + H_S + H_{SL}$ - полный гамильтониан /5/-/7/ системы. Из условия минимума свободной энергии получаем:

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = - T \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \mathrm{Tr}\{ e^{-H/T} \} = \langle \frac{\partial H}{\partial \eta} \rangle = 0 , \qquad /9/$$

что с учетом /5/-/7/ дает:

$$-A + B \langle (\eta + u_\ell)^3 \rangle + \sum_\kappa (a_\kappa + b_\kappa \eta) \langle (S^z_\kappa)^2 \rangle = 0 . \qquad /10/$$

Пренебрегая малым кубическим ангармонизмом

$$\langle u^3_\ell \rangle / \eta \langle u^2_\ell \rangle \sim (B/T)(T/\phi_0)^2 \le A/\phi_0 \ll 1$$

и переходя к безразмерным переменным

$$\xi = \sqrt{\frac{B}{A}}\, \eta , \quad y = \frac{B}{A} \langle u^2_\ell \rangle ,$$

$$\bar{a} = \frac{1}{A} \sqrt{\frac{B}{A}} \sum_\kappa a_\kappa \langle (S^z_\kappa)^2 \rangle , \quad \bar{b} = \frac{1}{A} \sum_\kappa b_\kappa \langle (S^z_\kappa)^2 \rangle , \qquad /11/$$

получаем уравнение для параметра порядка:

$$\xi^3 = (1 - \bar{b} - 3y) \xi - \bar{a} . \qquad /12/$$

Как видно, в случае $\bar{a} \ne 0$ всегда имеется ненулевое решение, $\xi \ne 0$, - ситуация аналогична поведению системы во внешнем поле величиной $a\xi$. Однако в случае $\bar{a} \ll 1$ существует область температур $T > T_0$, где $\xi \ll 1$, в то время как при $T \ll T_0$ $\xi \sim 1$, так что T_0 можно рассматривать как температуру структурного перехода. Для ее вычисления и определения температурной зависимости $\xi(T)$ необходимо рассмотреть динамику решетки этой модели.

Вводя функцию Грина от операторов смещений $D_{\ell\ell'}(t - t') = \langle\langle u_\ell(t); u_{\ell'}(t') \rangle\rangle$ и пользуясь стандартной процедурой составления цепочки уравнений, описанной для спин-фононных систем в /7/, получаем:

$$D_{\ell\ell'}(\omega) = \frac{1}{NA} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{\ell} - \vec{\ell}')} \frac{1}{\nu^2 - (\Delta + f_0 - f_q)} , \qquad /13/$$

где $\nu^2 = \omega^2 / (A/M)$, $f_q = \phi(q)/A = (1/A) \sum_{\ell'} \phi(\ell - \ell') e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{\ell} - \vec{\ell}')}$.

Щель в спектре мягкой оптической моды Δ определяется уравнением:

$$\Delta = 3(\xi^2 + y) - (1 - \bar{b}) . \qquad /14/$$

Последнее выражение было получено в низшем порядке самосогласованного фононного поля /см. /7,8//. Корреляционная функция смещений y в /12/ определяется уравнением:

$$y = \frac{B}{A} \int_0^\infty d\omega \, \mathrm{cth} \frac{\omega}{2T} [- \frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\, D_{\ell\ell} (\omega + i\epsilon)] = \qquad /15/$$

$$= \frac{B}{A} \frac{1}{NM} \sum_q \frac{1}{2\omega_q} \mathrm{cth} \frac{\omega_q}{2T} ,$$

где $\omega_q^2 = (A/M)(\Delta + f_0 - f_q)$. Решение самосогласованной системы уравнений /12/, /14/, /15/ позволяет определить температурную зависимость $\xi(T)$, $\Delta(T)$ и найти температуру T_0, соответствующую структурному переходу.

Для оценки констант спин-фононного взаимодействия $\bar{a}$ и $\bar{b}$ примем, что энергия кристаллического поля

$$KS^2 \sim (a\eta + \frac{1}{2}b\eta^2)S^2 \sim \epsilon J_0 S^2,$$

где $\epsilon = K/J_0$ - отношение энергии анизотропии к обменной энергии $J_0 = \sum_{\ell'} J(\vec{\ell} - \vec{\ell}')$. Учитывая также, что температура магнитного перехода $T_c \sim J_0 S^2$, а температура структурного перехода $T_0 \sim \phi_0(A/B)$/см., напр., /8/ /, получаем, согласно /11/, оценки:

$$\bar{a} \sim \bar{b} \sim \epsilon \frac{J_0 S^2}{A^2/B} \sim \epsilon \frac{T_c}{T_0} \cdot \frac{\phi_0}{A}. \qquad /16/$$

Так как для перехода типа смещения $\phi_0 \gg A$ /8/, то константы $\bar{a}$, , $\bar{b}$ могут быть малыми только для достаточно слабой анизотропии, $\epsilon \lesssim 10^{-2}$.

В этом случае при $T > T_0$, которая определяется уравнением

$$1 - \bar{b}(T_0) - 3\{y(T_0) + [\frac{1}{2}\bar{a}(T_0)]^{2/3}\} = 0, \qquad /17/$$

значения параметра порядка малы:

$$\xi(T) < \xi(T_0) = [4\bar{a}(T_0)]^{1/3}.$$

Щель в спектре фононов $\Delta(T)$ достигает своего минимального значения, $\Delta_{min}(T_1) = (3/2)[2\bar{a}(T_1)]^{2/3}$ при температуре T_1, определяемой из уравнения

$$1 - \bar{b}(T_1) - 3\{y(T_1) - [\frac{1}{2}\bar{a}(T_1)]^{2/3}\} = 0. \qquad /18/$$

Можно заметить, что $T_1 > T_0$, но при малых значениях $\bar{a}, \bar{b}$ эти температуры близки к $T_0^{(0)}$, вычисленной без учета спин-фононного взаимодействия /см. /17/, /18// при $\bar{a} = \bar{b} = 0$/.

Рассмотренное выше влияние магнитной подсистемы на структурный переход следует ожидать в случае $T_c > T_0$, когда параметры взаимодействия $\bar{a}$, $\bar{b}$ в магнитоупорядоченной фазе достаточно велики. В обратном случае, $T_c < T_0$, представ-

ляет интерес рассмотреть влияние структурного перехода на магнитную подсистему. Для описания магнитного фазового перехода в этом случае для системы с гамильтонианом /6/,/7/ воспользуемся приближением молекулярного поля /ПМП/, выбирая пробный гамильтониан в виде:

$$H_{SO} = \sum_{\ell\kappa} \{M_\kappa S^z_{\ell\kappa} - \tilde{K}_\kappa (S^z_{\ell\kappa})^2\}, \qquad /19/$$

где намагниченность подрешеток M_κ и эффективная константа анизотропии K_κ определяются на основе вариационного принципа Боголюбова /см. /7/ /:

$$\frac{\delta f}{\delta M_\kappa} = 0, \quad \frac{\delta f}{\delta \tilde{K}_\kappa} = 0. \qquad /20/$$

Пробная свободная энергия f при этом имеет вид:

$$f(T) = f_0(T) + \frac{1}{N}\langle H_S + H_{SL} - H_{SO}\rangle_0 .$$

Пользуясь /6/,/7/ и /19/, получаем:

$$f(T) = f_0(T) + \frac{1}{2}\sum_{\kappa\kappa'} J_{\kappa\kappa'} \langle S^z_\kappa\rangle\langle S^z_{\kappa'}\rangle + \sum_\kappa (h_\kappa - M_\kappa)\langle S^z_\kappa\rangle - \sum_\kappa (K_\kappa - \bar{V}_\kappa - \tilde{K}_\kappa)\langle (S^z_\kappa)^2\rangle, \qquad /21/$$

где

$$f_0(T) = -T\sum_\kappa \ln \Psi_{s\kappa}(\frac{M_\kappa}{T}, \frac{\tilde{K}_\kappa}{T}), \qquad /22/$$

$$\Psi_{s\kappa}(\alpha, \beta) = \sum_{m=-S_\kappa}^{S_\kappa} \exp\{-\alpha m + \beta m^2\}, \qquad /23/$$

$$J_{\kappa\kappa'} = \sum_{\ell'} J_{\kappa\kappa'}(\ell - \ell'), \qquad /24/$$

$$\bar{V}_\kappa = a_\kappa\langle Q_\ell\rangle + \frac{1}{2}b_\kappa\langle Q_\ell^2\rangle. \qquad /25/$$

Учет уравнений /20/-/23/ приводит к следующим выражениям для вариационных параметров:

$$M_\kappa = h_\kappa + \sum_{\kappa'} J_{\kappa\kappa'} \langle S^z_{\kappa'} \rangle , \qquad /26/$$

$$\tilde{K}_\kappa = K_\kappa - \bar{V}_\kappa . \qquad /27/$$

Намагниченность $\langle S^z_\kappa \rangle$ и средний квадрат спина $\langle (S^z_\kappa)^2 \rangle$ определяются выражениями

$$\langle S^z_\kappa \rangle = \frac{\partial f_0}{\partial M_\kappa}, \quad \langle (S^z_\kappa)^2 \rangle = \frac{\partial f_0}{\partial \tilde{K}_\kappa} . \qquad /28/$$

Как видно, мы приходим к обычным выражениям в ПМП, где константа анизотропии $\tilde{K}_\kappa$ зависит от температуры через параметр порядка $\eta = \langle Q_\ell \rangle$, согласно /25/, /27/. В результате возникает дополнительная температурная зависимость $\langle S^z_\kappa \rangle$ и $\langle (S^z_\kappa)^2 \rangle$ и перенормировка температуры магнитного фазового перехода.

Особый интерес представляет возможность изменения знака эффективной константы анизотропии $\tilde{K}_\kappa(T)$, вызванная температурной зависимостью параметра порядка $\eta(T)$ при структурном переходе. Это может привести к перестройке всей магнитной структуры. Для ферромагнетика изменение знака константы анизотропии приводит к переходу легкая ось $(\tilde{K}_\kappa > 0)$ - легкая плоскость $(\tilde{K}_\kappa < 0)$. Для антиферромагнетика последний переход может сопровождаться появлением слабого ферромагнетизма, если в базисной плоскости имеется дополнительное анизотропное взаимодействие. Обсудим этот вопрос более подробно.

4. СЛАБЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИЗМ

В ряде кристаллов, испытывающих структурные переходы, наблюдается чередование магнитных фазовых переходов. Например, в кристалле $KMnF_3$ происходит последовательно два структурных перехода при T_1=186 К и T_2= 91,5 К, которые описываются, соответственно, конденсацией мягких фононов в точке R /мода Γ_{25} / и в точке M / мода M_3 / зоны Бриллюэна /8/. При этом происходит поворот октаэдров MnF_6 относительно общей в обоих переходах тетрагональной оси в противоположных направлениях в соседних плоскостях /мода Γ_{25} / или в одинаковом направлении /мода M_3 /, соответственно /8/. В этом же кристалле наблюдаются два магнитных фазовых перехода: антиферромагнитный (AF) при T = = 88,3 К с осью AF вдоль тетрагональной оси и переход в слабый ферромагнетик (WF) в базисной плоскости при T_c =

= 81,5 К. Близость магнитных переходов ко второму структурному переходу позволяет предположить сильное влияние структурного перехода на характер магнитного упорядочения при AF переходе. Действительно, поворот октаэдров MnF_6 при структурных переходах связан с их деформацией и нарушением кубической симметрии / в области $T > T_1$ / кристаллического поля. Это искажение может быть описано как одноионное магнитокристаллическое поле анизотропии, зависящее от параметра порядка соответствующего структурного перехода. При этом в области $T_2 < T < T_1$ появляется одноосная анизотропия вдоль тетрагональной оси, а при $T < T_2$ дополнительно возникает несимметричное в базисной плоскости поле одноионной анизотропии.

Для качественного описания магнитных фазовых переходов в $KMnF_3$ при $T < T_2$ рассмотрим модель двухподрешеточного антиферромагнетика / κ =1,2/ с гамильтонианом /6/ и энергией спин-фононного взаимодействия в виде:

$$H_{SL} = \frac{1}{2} \sum_{\ell\kappa} b_\kappa Q^2_\ell (S^z_{\ell\kappa})^2 - \sum_{\ell\kappa} D_\kappa [(S^x_{\ell\kappa})^2 - (S^y_{\ell\kappa})^2], \qquad /29/$$

где можно принять $b_1 = b_2 = b$ и $D_1 = -D_2 = cQ_\ell$. Пользуясь далее ПМП, введем пробный гамильтониан в простом виде

$$H_{SO} = \sum_{\ell\kappa a} M^a_\kappa S^a_{\ell\kappa} . \qquad /30/$$

Для свободной энергии, аналогично /21/, получаем:

$$f(T) = f_0(T) + \frac{1}{2} \sum_{\kappa\kappa' a} J_{\kappa\kappa'} \langle S^a_\kappa \rangle_0 \langle S^a_{\kappa'} \rangle_0 + \\ + \sum_{\kappa a} (h^a_\kappa - M^a_\kappa) \langle S^a_\kappa \rangle_0 - \sum_\kappa \tilde{K}_\kappa \langle (S^z_\kappa)^2 \rangle_0 - \\ - \sum_\kappa \tilde{D}_\kappa [\langle (S^x_\kappa)^2 - (S^y_\kappa)^2 \rangle_0] , \qquad /31/$$

где

$$f_0(T) = -T \sum_\kappa \ln Tr[\exp\{ -\frac{1}{T} (\vec{M}_\kappa \vec{S}_\kappa) \}] \qquad /32/$$

и эффективные константы анизотропии равны:

$$\tilde{K}_\kappa = K_\kappa - \frac{1}{2} b_\kappa \langle Q_\ell^2 \rangle = K_\kappa - \frac{1}{2} b_\kappa (\eta^2 + \langle u_\ell^2 \rangle),$$

$$\tilde{D}_1 = -\tilde{D}_2 = \tilde{D}(T) = c\eta(T). \qquad /33/$$

Намагниченность подрешеток определяется вектором $\langle S_\kappa^\alpha \rangle = \partial f_0(T)/\partial M_\kappa^\alpha$, где молекулярное поле вычисляется из уравнений:

$$M_\kappa^\alpha = h_\kappa^\alpha + \sum_{\kappa'} J_{\kappa\kappa'} \langle S_{\kappa'}^\alpha \rangle_0 -$$

$$- \frac{\partial}{\partial \langle S_\kappa^\alpha \rangle} \{ \tilde{K}_\kappa \langle (S_\kappa^z)^2 \rangle_0 + \tilde{D}_\kappa [\langle (S_\kappa^x)^2 \rangle - \langle (S_\kappa^y)^2 \rangle] \}. \qquad /34/$$

Полный анализ полученной системы уравнений /31/-/34/ с учетом соответствующих уравнений для параметра порядка $\eta(T) = \langle Q_\ell \rangle$ и флуктуаций $\langle u_\ell^2 \rangle$, описывающих структурный переход, требует проведения численных расчетов. Для качественного анализа магнитной структуры для $T<T_N$ рассмотрим выражение для свободной энергии /31/ в пределе $T \ll T_N$. В этом случае можно пренебречь вкладом магнитных возбуждений /спиновых волн/ и рассмотреть энергию основного состояния:

$$\epsilon_0 = \lim_{T \to 0} f(T) = \frac{1}{N} \langle H_S + H_{SL} \rangle |_{T=0}. \qquad /35/$$

Вводя для удобства векторы:

$$\vec{m} = \frac{1}{2S} (\langle \vec{S}_1 \rangle + \langle \vec{S}_2 \rangle), \quad \vec{\ell} = \frac{1}{2S} (\langle \vec{S}_1 \rangle - \langle \vec{S}_2 \rangle), \qquad /36/$$

запишем энергию в виде:

$$\epsilon_0 = (A - B)(\vec{m})^2 + (A + B)(\vec{\ell})^2 -$$

$$- \beta (\ell_z^2 + m_z^2) - 2\gamma (\ell_x m_x - \ell_y m_y), \qquad /37/$$

где введены обозначения

$$A = (2S)^2 J_{12} > 0, \quad B = -(2S)^2 J_{11} > 0,$$

$$\beta = (2S)^2 2\tilde{K} = (2S)^2 2\{K - \frac{1}{2} b \eta^2\}, \qquad /38/$$

$$\gamma = (2S)^2 2\tilde{D} = (2S)^2 2c\eta$$

и было принято $K_1 = K_2 = K$. Учитывая далее условия нормировки векторов / при $T \ll T_N$ /:

$$\vec{\ell}^2 + \vec{m}^2 = 1, \qquad \vec{\ell} \cdot \vec{m} = 0$$

и вводя угловые переменные, определяющие направление векторов $\vec{\ell}$ и $\vec{m}$, нетрудно провести анализ возможных типов упорядочения, обеспечивающих минимальное значение энергии /37/ /см., напр./9,10//. Вычисления показывают, что при $\beta > 0$ реализуется состояние с вектором AF вдоль оси z и $|\vec{m}| = 0$; энергия этого состояния

$$\epsilon_0^{(z)} = -(A + B + \beta). \qquad /39/$$

В случае $\beta < 0$ более выгодным оказывается AF состояние с вектором $\vec{\ell}$ в плоскости xy:

$$\vec{\ell}_x = \vec{\ell}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} |\vec{\ell}|, \quad \ell_z = 0.$$

Присутствие поля анизотропии в базисной плоскости приводит к слабой неколинеарности векторов $\langle S_1 \rangle$ и $\langle S_2 \rangle$ и слабому ферромагнетизму:

$$|\vec{m}| \approx \frac{\gamma^2}{A} = \frac{(2S \cdot 2\tilde{D})^2}{J_{12}}, \quad |\vec{\ell}| = \sqrt{1 - |\vec{m}|^2}. \qquad /40/$$

Этому состоянию соответствует энергия

$$\epsilon^{(x,y)} = -(A + B + \frac{\gamma^2}{A}). \qquad /41/$$

Сравнивая /41/ с /39/, приходим к выводу, что при $\gamma^2/A > \beta$, или при значении параметра порядка

$$\eta^2(T) > \eta_c^2(T_c) = \frac{K}{2c^2/J_{12} + b/2} \qquad /42/$$

должен происходить фазовый переход /первого рода/ из состояния одноосного AF в состояние WF в базисной плоскости.

Таким образом, при определенном соотношении параметров модели, удовлетворяющих условию /42/, возможен переход AF-WF, индуцированный структурным фазовым переходом. Для количественного описания такого перехода в $KMnF_3$ в рамках принятой модели необходимо вычислить свободную энергию /31/, учитывая температурную зависимость векторов намагниченности $\vec{\ell}(T)$ и $\vec{m}(T)$ /36/ и параметра порядка $\eta(T)$ при соответствующем описании фазового перехода при T_2.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная в настоящей работе модель спин-фононной системы с гамильтонианом /1/-/4/,основанная на представлении локальной нормальной координаты Q_ℓ, позволяет достаточно просто рассмотреть взаимосвязь магнитных и структурных переходов, обусловленных мягкой модой. Характер этой связи существенно зависит от вида спин-фононного взаимодействия /4/ и его величины. В частности, линейные по Q_ℓ члены /см./7// приводят к эффективному внешнему полю для структурного перехода, влияние которого, однако,существенно лишь при значительной величине констант связи /16/.

Обратное влияние структурного перехода /при T_0 / на магнитный / при T_c / значительно, если $T_0 > T_c$ и $T_0 - T_c \ll T_c$. Поскольку в области температур $(T_0 - T) \ll T_0$ параметр порядка структурного фазового перехода $\eta(T)$ существенно зависит от температуры, то возможно значительное изменение характеристик магнитной подсистемы, например, констант анизотропии, определяющих тип магнитной структуры. В частности, модель спин-фононного взаимодействия /29/ позволяет качественно объяснить переход $AF \to WF$, наблюдаемый в $KMnF_3$. При проведении количественных расчетов для сопоставления их с экспериментом необходимо также учесть взаимодействие с акустическими фононами, описывающими деформацию решетки. Этот вопрос предполагается рассмотреть в отдельной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смоленский Г.А. и др. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики, Наука, Л., 1971, раздел ХУП.
2. Gehring G.A., Gehring K.A.,Rep.Prog.Phys.,1975,38,p.1.
3. Hidaka M. Y.Phys.Soc.Japan, 1975,39,p.103,180; Hidaka M., et al. Solid State Communications, 1975,16, p.1121; Yakubowski P.Acta Phys.Pol.,1978,A54, p.397.
4. Baryakhtar V.G.,Chupis I.E., Int.J.Magnetism,1974,p.337.
5. Иолин Е.М., Кащеев В.Н. ФТТ, 1979, 21, с. 851.
6. Thomas H. In: "Structural Phase Transitions and Soft Modes", eds. Samuelsen E.I., Anderson E., Feder J. Universiteitsforlaget, Oslo, 1971, p.171.

7. Plakida N.M., Konwent H. In: "Magnetism in Metals and Metallic Compounds" , eds.Lopuszanski Y.T., Pakalski A., Przystawa Y.A., Plenum Press, New York, 1976, p.543.
8. Stamenkovic S., et al.Phys.Rev.,1976,B14, p.5080.
9. Moriya T. In: "Magnetism", eds.Rado G.T., Suhl H. Acad.Press,N.Y., 1963, vol.1, pp.86-126.
10. Туров Е.А. Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов, Изд-во АН СССР, М., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 сентября 1979 года.