объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

3527/82 2/VIII-82

P17-82-220

Х.Конвент, Н.М.Плакида

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА В МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛЕ $KMnF_3$

Направлено в журнал "Acta Physica Polonica"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей работе [1] нами была сформулирована микроскопическая модель для описания структурных и магнитных фазовых переходов в кристаллах фторида калия-марганца ($KMnF_3$). В этой модели учитываются лишь те нормальные колебания решетки, которые приводят к мягким модам симметрии R_{25} и M_3, связанным с вращением октаэдров MnF_6, и взаимодействие их с деформацией решетки и спиновой подсистемой. В настоящей работе будет вычислена свободная энергия модели в приближении самосогласованных фононов [2] и молекулярного поля для магнитной подсистемы. Эти приближения позволяют исследовать структурные переходы, обусловленные мягкими модами R_{25} и M_3, и антиферромагнитный переход в спиновой подсистеме. В отличие от феноменологического подхода [3], параметры микроскопической модели имеют вполне определенный физический смысл и могут быть использованы для вычисления подгоночных параметров в феноменологической теории. В результате удается сделать определенные предсказания о взаимодействии структурных и магнитных фазовых переходов в $KMnF_3$.

В следующем разделе получен микроскопический гамильтониан модели с учетом конденсации мод R_{25} и M_3 и антиферромагнитного упорядочения в спиновой системе. В разделе 3 вычисляется свободная энергия и находится уравнение для параметров порядка в общем случае. Более детальный анализ структурных и магнитных фазовых переходов будет проведен в следующей работе.

2. ПАРАМЕТРЫ ПОРЯДКА И ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ

Как показывает симметрийный анализ [3] /см. также обсуждени в работе [1]/, структурный переход при T_R=188,6 К, обусловленный конденсацией моды R_{25}, характеризуется трехмерным представлением однолучевой звезды волнового вектора q_R =/1/2, 1/2, 1/2/, а второй переход при T_M=91,5 К, обусловленный модой M_3, описывается одномерным неприводимым представлением трехлучевой звезды волнового вектора q_M с лучами

$$q_M^{(1)} = (0, 1/2, 1/2)\ ,\quad q_M^{(2)} = (1/2, 0, 1/2),\quad q_M^{(3)} = (1/2, 1/2, 0)\ . \qquad /1/$$

Следовательно, оба структурных перехода характеризуются трехкомпонентными параметрами порядка, которые можно связать со статическими смещениями - поворотом октаэдров MnF_6. Согласно[1] они описываются локальной нормальной координатой $R_\lambda(\ell)$, среднее значение которой ниже температур фазовых переходов:

$$\langle R_\lambda(\ell)\rangle = A_\lambda e^{i\vec{q}_R\vec{\ell}} + C_\lambda e^{i\vec{q}_R^{(\lambda)}\vec{\ell}} , \qquad /2/$$

и описывают эти статические смещения.

Вводя фурье-разложение для координаты:

$$R_\lambda(\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}}\Sigma\, e^{i\vec{q}\vec{\ell}} R_\lambda(q) , \qquad /3/$$

где ℓ - вектор примитивной ячейки кубической фазы, для параметров порядка A_λ и C_λ получаем представление

$$A_\lambda = \frac{1}{\sqrt{N}}\langle R_\lambda(q_R)\rangle , \quad C_\lambda = \frac{1}{\sqrt{N}}\langle R_\lambda(q_M^{(\lambda)})\rangle . \qquad /4/$$

Антиферромагнитный переход при T_N=88,3 К характеризуется трехмерным неприводимым представлением звезды q_R, которое определяет параметр порядка B_λ согласно соотношению

$$\langle S_\lambda(\ell)\rangle = B_\lambda e^{i\vec{q}_R\vec{\ell}} , \quad B_\lambda = \frac{1}{\sqrt{N}}\langle S_\lambda(q_R)\rangle , \qquad /5/$$

где введено фурье-разложение оператора $S_\lambda(\ell)$ аналогично /3/. Подставим теперь в гамильтониан модели /формулы /12/-/27/ в[1]/ фурье-разложения для $R_\lambda(\ell)$ и $S_\lambda(\ell)$, выделяя в них зависимость от параметров порядка A_λ, C_λ и B_λ согласно определениям /4/, /5/:

$$R_\lambda(q) = \sqrt{N}A_\lambda\Delta(\vec{q}-\vec{q}_R) + \sqrt{N}\,C_\lambda\cdot\Delta(\vec{q}-\vec{q}_M^{(\lambda)}) + r_\lambda(q) ,$$

$$S_\lambda(q) = \sqrt{N}B_\lambda\Delta(\vec{q}-\vec{q}_R) + S'_\lambda(q) . \qquad /6/$$

Выпишем для этого сначала полный гамильтониан модели в фурье-представлении /3/ с учетом только вкладов однородной деформации $e_{\alpha\beta}$. Согласно /12/ в[1] для гамильтониана решеточных колебаний получаем

$$H_R = \sum_{q,\lambda}\frac{1}{2I_\lambda(q)}P_\lambda(q)P_\lambda(-q) + \frac{1}{2}\sum_{q,\lambda\mu}v_{\lambda\mu}(q)R_\lambda(q)R_\lambda(-q) +$$

$$+\frac{1}{4N}\sum_{\substack{q_1\dots q_4\\ \lambda\mu}}\Gamma_{\lambda\mu}(q_1,q_2,q_3,q_4)R_\lambda(q_1)R_\lambda(q_2)R_\mu(q_3)R_\mu(q_4), \qquad /7/$$

где момент инерции $I_\lambda(q) = (1/4)\,[2+\cos q_\lambda a - \sum_\mu \cos q_\mu a]$; μ=1,2,3; a - постоянная решетки; $P_\lambda(q) = I_\lambda(q)\dot{R}_\lambda(q)$; $v_{\lambda\mu}(q)$ - гармоническая матрица силовых постоянных, которая определяет параметры модели:

$$v_{\lambda\mu}(q_R) = \delta_{\lambda\mu}\cdot\omega_R^2 , \quad \omega_R^2 < 0 ,$$

$$v_{\lambda\lambda}(q_M^{(\lambda)}) = \omega_M^2 < 0 , \qquad /8/$$

и дисперсию мод R_{25} и M_3. Ангармоническое взаимодействие определяется функцией

$$\Gamma_{\lambda\mu}(q_1,q_2,q_3,q_4) = \Delta(\vec{q}_1+\vec{q}_2+\vec{q}_3+\vec{q}_4)\ \times$$

$$\times\frac{1}{N}\sum_\ell\Gamma_{\lambda\mu}(q)\,e^{-i\vec{q}\vec{\ell}}(1-e^{i\vec{q}_1\vec{\ell}})(1-e^{i\vec{q}_2\vec{\ell}})(1-e^{i\vec{q}_3\vec{\ell}})(1-e^{i\vec{q}_4\vec{\ell}}) , \qquad /9/$$

где

$$\Gamma_{\lambda\mu}(q) = \frac{1}{16}[\Gamma_1\cdot\delta_{\lambda\mu}\sum_{\alpha\neq\lambda}\cos q_\alpha a + 2\Gamma_2\cdot(1-\delta_{\lambda\mu})\cos q_\delta a] . \qquad /9a/$$

Здесь и далее λ, μ, α, β пробегают значения 1,2,3, а индекс $\delta\neq\lambda$, $\delta\neq\mu$ в членах с $\lambda\neq\mu$. Γ_1 и Γ_2 - параметры модели, характеризующие локальное ангармоническое взаимодействие при колебаниях ионов в плоскости грани куба /см. /15/ в[1]/.

Взаимодействие колебаний с однородной деформацией $e_{\alpha\beta}$ описывается формулой /см. /23/ в[1]/

$$H_{R-e} = \sum_\lambda e_{\lambda\lambda}\sum_q\{g_{12}R_\lambda(q)R_\lambda(-q)\sum_{\mu\neq\lambda}\gamma_\mu(q) +$$

$$+\sum_{\mu\neq\lambda}R_\mu(q)R_\mu(-q)[g_{13}\gamma_\lambda(q) + g_{11}\gamma_\delta(q)]\} - \qquad /10/$$

$$-2g_{66}\sum_{\lambda\neq\mu}\Sigma\ e_{\lambda\mu}\sum_q R_\lambda(q)R_\mu(-q)\gamma_\delta(q) ,$$

где g_{12}, g_{13}, g_{11} и g_{66} - параметры модели, характеризующие взаимодействие, и функция

$$\gamma_\lambda(q) = \frac{1}{2}(1-\cos q_\lambda a) . \qquad /10a/$$

Энергия однородной деформации кристалла /см /35/ в[1]/ имеет вид

$$\frac{1}{N}E_e = \frac{1}{2}c_{11}\sum_\lambda e_{\lambda\lambda}^2 + \frac{1}{2}c_{12}\sum_{\lambda\neq\mu}e_{\lambda\lambda}e_{\mu\mu} + c_{44}\sum_{\lambda\neq\mu}e_{\lambda\mu}^2 , \qquad /11/$$

где c_{11}, c_{12}, c_{44} - модули упругости в кубической фазе.

Спиновая система описывается изотропным гамильтонианом Гейзенберга /см. /7/ в[1]/:

$$H_S = \frac{1}{2}\sum_{q,\alpha} \mathcal{J}(q) S_\alpha(q) S_\alpha(-q), \qquad /12/$$

где предполагается, что $\mathcal{J}(q_R) < 0$. Спин-фононное взаимодействие /25/ в[1] в фурье-представлении имеет вид

$$H_{S-R} = \frac{1}{N}\sum_{q_1 \ldots q_4} \Delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \times$$

$$\times \{ \sum_\lambda S_{\lambda\lambda}(q_1, q_2) R_\lambda(q_3) R_\lambda(q_4) k_{12} \sum_{\mu \neq \lambda} d_\mu(q_3, q_4) + \qquad /13/$$

$$+ \sum_{\lambda \neq \mu} S_{\lambda\lambda}(q_1, q_2) R_\mu(q_3) R_\mu(q_4) [k_{13} d_\lambda(q_3, q_4) + k_{11} d_\delta(q_3, q_4)] -$$

$$- 2k_{66} \sum_{\lambda \neq \mu} S_{\lambda\mu}(q_1, q_2) R_\lambda(q_3) R_\mu(q_4) d_\delta(q_3, q_4) \},$$

где k_{12}, k_{13}, k_{11} и k_{66} - параметры модели,

$$d_\lambda(q, q') = \frac{1}{4}[\exp(iq_\lambda a) - 1][\exp(iq'_\lambda a) - 1]. \qquad /13а/$$

Магнитострикционное взаимодействие в кубической фазе определяется двумя инвариантами:

$$H_{S-e} = -\frac{b_1}{2}\sum_{q\lambda} S_{\lambda\lambda}(q, -q)[2e_{\lambda\lambda} - \sum_{\mu \neq \lambda} e_{\mu\mu}] -$$

$$- \frac{b_2}{2}\sum_q \sum_{\lambda \neq \mu} e_{\lambda\mu} S_{\lambda\mu}(q, -q). \qquad /14/$$

Здесь и в /13/ введено симметризованное произведение операторов:

$$S_{\lambda\mu}(q, q') = \frac{1}{2}[S_\lambda(q) S_\mu(q') + S_\mu(q') S_\lambda(q)]. \qquad /14а/$$

Подставляя теперь в гамильтониан /7/, /10/-/14/ представление /6/, выделим в нем статистическую часть, зависящую от параметров порядка и деформации:

$$E_0 = E_R(A_\lambda, C_\lambda, e_{\alpha\beta}) + E_e(e_{\alpha\beta}) + E_S(B_\alpha, e_{\alpha\beta}) +$$

$$+ E_{RS}(A_\lambda, C_\lambda, B_\alpha), \qquad /15/$$

где отдельные члены имеют следующий вид:

$$\frac{1}{N}E_R = \frac{1}{2}\omega_R^2 \sum_\lambda A_\lambda^2 + \frac{1}{2}\omega_M^2 \sum_\lambda C_\lambda^2 -$$

$$+\frac{\Gamma_1}{2}\sum_\lambda (A_\lambda^4 + C_\lambda^4 + 6A_\lambda^2 C_\lambda^2) +$$

$$+\frac{\Gamma_2}{2}\sum_{\lambda \neq \mu}(A_\lambda^2 A_\mu^2 + C_\lambda^2 C_\mu^2 + 2A_\lambda^2 C_\mu^2) + 2g_{12}\sum_\lambda e_{\lambda\lambda}(A_\lambda^2 + C_\lambda^2) + \qquad /15а/$$

$$+ (g_{11} + g_{13})\sum_{\lambda \neq \mu} e_{\mu\mu}(A_\lambda^2 + C_\lambda^2) - 2g_{66}\sum_{\lambda \neq \mu} e_{\lambda\mu} A_\lambda A_\mu,$$

$$\frac{1}{N}E_S = \frac{1}{2}\mathcal{J}(q_R)\sum_\lambda B_\lambda^2 - \qquad /15б/$$

$$- \frac{b_1}{2}\sum_\lambda B_\lambda^2 [2e_{\lambda\lambda} - \sum_{\mu \neq \lambda} e_{\mu\mu}] - \frac{b_2}{2}\sum_{\lambda \neq \mu} B_\lambda B_\mu e_{\lambda\mu},$$

$$\frac{1}{N}E_{RS} = 2k_{12}\sum_\lambda B_\lambda^2 (A_\lambda^2 + C_\lambda^2) + (k_{11} + k_{13})\sum_{\lambda \neq \mu} B_\lambda^2 (A_\mu^2 + C_\mu^2) - \qquad /15в/$$

$$- 2k_{66}\sum_{\lambda \neq \mu} B_\lambda B_\mu A_\lambda A_\mu,$$

и E_e определяется формулой /11/.

3. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ

Для определения свободной энергии системы воспользуемся вариационным методом Боголюбова. Для этого введем пробный гамильтониан системы, описывающий фононные флуктуации $r_\lambda(q)$ в приближении самосогласованных фононов и спиновую систему в приближении молекулярного поля:

$$H_0 = H_{0R} + H_{0S}, \qquad /16/$$

$$H_{0R} = \frac{1}{2}\sum_{q\lambda}\frac{1}{I_\lambda(q)} P_\lambda(q) P_\lambda(-q) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{q \\ \lambda,\mu}} \phi_{\lambda\mu}(q) r_\lambda(q) r_\mu(-q), \qquad /16а/$$

$$H_{0S} = \sum_{\ell\alpha} h_\alpha e^{i\vec{q}_R \vec{\ell}} S_\alpha(\ell) = \sqrt{N}\sum_\alpha h_\alpha S_\alpha(q_R). \qquad /16б/$$

Вариационные параметры $\phi_{\lambda\mu}(q)$ и h_α находятся из условий стационарности пробной свободной энергии:

$$F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \qquad /17/$$

$$F_0 = -T \ln \mathrm{Sp} \exp\left(-\frac{H_0}{T}\right) = F_{0R} + F_{0S}, \qquad /17a/$$

где <...> - статистическое усреднение с гамильтонианом /16/. Вариационные уравнения можно записать в виде

$$\frac{\delta F_1}{\delta h_\alpha} = 0, \qquad \frac{\delta F_1}{\delta \phi_{\lambda\mu}(q)} = 0 \qquad /18/$$

или в виде эквивалентных им условий стационарности свободной энергии

$$\frac{\delta F_1}{\delta B_\alpha} = 0, \qquad \frac{\delta F_1}{\delta D_{\lambda\mu}(q)} = 0, \qquad /18a/$$

где введена корреляционная функция флуктуаций

$$D_{\lambda\mu}(q) = \langle r_\lambda(q) r_\mu(-q) \rangle_0 .$$

Пробный гармонический гамильтониан /16а/ определяет частоту самосогласованных фононов:

$$\Omega_\lambda^2(q) = \sum_{\alpha\beta} e_\lambda^\alpha(q)\, \phi_{\alpha\beta}(q)\, e_\lambda^\beta(q), \qquad /19/$$

где $e_\lambda^\alpha(q) = w_\lambda^\alpha(q)/I_\lambda(q)$; $w_\lambda^\alpha(q)$ - полный и ортонормированный базис векторов поляризаций, диагонализирующий матрицу $\phi_{\alpha\beta}(q)$. В этом представлении получаем

$$F_{0R} = T \sum_{q\lambda} \ln\left(2\,\mathrm{sh}\frac{\Omega_\lambda(q)}{2T}\right), \qquad /20/$$

$$D_{\alpha\beta}(q) = \sum_\lambda e_\lambda^\alpha(q)\, e_\lambda^\beta(q) \frac{1}{2\Omega_\lambda(q)} \mathrm{cth}\frac{\Omega_\lambda(q)}{2T}. \qquad /21/$$

Нетрудно проверить, что второе уравнение в /18/ приводит к выражению /21/.

Свободная энергия спиновой системы в приближении молекулярного поля имеет стандартный вид:

$$F_{0S} = -NT \ln \psi\left(\frac{S \cdot h}{T}\right), \qquad /22/$$

где $h = (h_1^2 + h_2^2 + h_3^2)^{1/2}$ и функция

$$\psi_S(x) = \mathrm{sh}\left(\frac{2S+1}{2S} \cdot x\right) / \mathrm{sh}\left(\frac{1}{2S} \cdot x\right). \qquad /22a/$$

Среднее значение для гамильтониана модели в приближении среднего поля /16/ легко вычисляется и приводит к выражению

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = E_0 - N \sum_\alpha h_\alpha B_\alpha + V_4(D_{\lambda\mu}) + \qquad /23/$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{q\lambda\mu} [v_{\lambda\mu}(q) + L_{\lambda\mu}(q) - \phi_{\lambda\mu}(q)] D_{\lambda\mu}(q),$$

где статистическая энергия E_0 определена в /15/. Флуктуационные члены равны

$$V_4(D_{\lambda\mu}) = 4 \sum_{q\lambda\mu} [\Gamma_{\lambda\mu}(0) - \Gamma_{\lambda\mu}(q)] \times$$

$$\times [(A_\lambda^2 + C_\lambda^2) D_{\mu\mu}(q) + 2(A_\lambda A_\mu + C_\lambda^2 \delta_{\lambda\mu}) D_{\lambda\mu}(q)] + \qquad /24/$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\lambda\mu} \sum_{qq'} \Gamma_{\lambda\mu}(q,q') [D_{\lambda\lambda}(q) \cdot D_{\mu\mu}(q) + 2 D_{\lambda\mu}(q) D_{\lambda\mu}(q')],$$

где

$$\Gamma_{\lambda\mu}(q,q') = \Gamma_{\lambda\mu}(0) - \Gamma_{\lambda\mu}(q) + \Gamma_{\lambda\mu}(\vec{q} - \vec{q}') - \Gamma_{\lambda\mu}(q') \qquad /24a/$$

и матрица $L_{\lambda\mu}(q)$ определяется соотношением

$$\frac{1}{2} L_{\lambda\lambda}(q) = (g_{12} e_{\lambda\lambda} + k_{12} B_\lambda^2) \sum_{\mu \neq \lambda} \gamma_\mu(q) +$$

$$+ \sum_{\mu \neq \lambda} (g_{13} e_{\mu\mu} + k_{13} B_\mu^2) \gamma_\mu(q) + \qquad /25a/$$

$$+ \sum_{\mu \neq \lambda} (g_{11} e_{\mu\mu} + k_{11} B_\mu^2) \gamma_\delta(q).$$

$$\frac{1}{2} L_{\lambda \neq \mu}(q) = -2\gamma_\delta(q) (g_{66} e_{\lambda\mu} + k_{66} B_\lambda B_\mu). \qquad /25б/$$

Пользуясь теперь условиями стационарности /18а/, находим выражение для вариационных параметров молекулярного поля:

$$h_\alpha = \frac{1}{N} \frac{\delta \langle H \rangle_0}{\delta B_\alpha} = J(q_R) B_\alpha - b_1 B_\alpha [2 e_{\alpha\alpha} - \sum_{\beta \neq \alpha} e_{\beta\beta}] -$$

$$- b_2 \sum_{\beta \neq \alpha} B_\beta e_{\alpha\beta} + 2 B_\alpha k_{12} [2(A_\alpha^2 + B_\alpha^2) + \sum_{\beta \neq \alpha} D_{\alpha\alpha}^{(\beta)}(T)] + \qquad /26/$$

$$+ 2 B_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} [(k_{11} + k_{13})(A_\beta^2 + C_\beta^2) + k_{13} D_{\beta\beta}^{(\alpha)}(T) + k_{11} D_{\beta\beta}^{(\delta)}(T)] -$$

$$- 4 k_{66} \sum_{\beta \neq \alpha} B_\beta [A_\alpha A_\beta + D_{\alpha\beta}^{(\delta)}(T)],$$

и динамической матрицы:

$$\phi_{\lambda\mu}(q) = 2 \frac{\delta \langle H_0 \rangle_0}{\delta D_{\lambda\mu}(q)} = v_{\lambda\mu}(q) + L_{\lambda\mu}(q) +$$

$$+ 8 \delta_{\lambda\mu} \sum_\nu [\Gamma_{\lambda\nu}(0) - \Gamma_{\lambda\nu}(q)] (A_\nu^2 + C_\nu^2) +$$

$$+16\cdot[\Gamma_{\lambda\mu}(0)-\Gamma_{\lambda\mu}(q)](A_\lambda A_\mu+\delta_{\lambda\mu}C_\lambda^2)+$$

$$+\delta_{\lambda\mu}\cdot\frac{4}{N}\sum_{q'\nu}\Gamma_{\lambda\nu}(q,q')\,D_{\nu\nu}(q')+ \qquad /27/$$

$$+\frac{8}{N}\sum_{q'}\Gamma_{\lambda\mu}(q,q')\,D_{\lambda\mu}(q').$$

В /26/ и далее используются следующие корреляционные функции:

$$D^{(\alpha)}_{\lambda\mu}(T)=\frac{1}{N}\sum_q \gamma_\alpha(q)D_{\lambda\mu}(q). \qquad /28/$$

Уравнение для намагниченности получается из первого уравнения /18/:

$$B_\alpha=-\frac{1}{N}\,\frac{\partial F_{0S}}{\partial h_\alpha}=-\frac{h_\alpha}{h}S\cdot\mathcal{B}_S\left(\frac{S\cdot h}{T}\right), \qquad /29/$$

где введена функция Бриллюэна:

$$\mathcal{B}_S(x)=\frac{d}{dx}\ln\psi_S(x)=\frac{2S+1}{2S}\,\mathrm{cth}\left(\frac{2S+1}{2S}\cdot x\right)-\frac{1}{2S}\,\mathrm{cth}\left(\frac{x}{2S}\right). \qquad /29а/$$

Совместное решение уравнений /29/, /26/ позволяет вычислить $B_\alpha(T)$ при заданных значениях A_λ, C_λ и $e_{\alpha\beta}$.

4. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

Получим уравнения для равновесных значений параметров порядка A_λ, C_λ и деформации $e_{\alpha\beta}$, пользуясь условием минимума для свободной энергии /17/:

$$\frac{\partial F_1}{\partial A_\lambda}=\frac{\partial F_1}{\partial C_\lambda}=\frac{\partial F_1}{\partial e_{\alpha\beta}}=0. \qquad /30/$$

Учитывая, что F_{0R} /20/ и F_{0S} /22/ явно от A_λ, C_λ и $e_{\alpha\beta}$ не зависят, а неявная зависимость согласно условиям /18/ вклада не дает, для равновесных значений получаем следующие уравнения:

а/ $\partial\langle H\rangle_0/\partial A_\lambda=0$
или

$$A_\lambda\{\omega_R^2+\Gamma_1\cdot[2(A_\lambda^2+C_\lambda^2)+3\sum_{\alpha\neq\lambda}D^{(\alpha)}_{\lambda\lambda}(T)]+4\Gamma_1 C_\lambda^2+$$

$$+2\Gamma_2\sum_{\mu\neq\lambda}[A_\mu^2+C_\mu^2+D^{(\delta)}_{\mu\mu}(T)]+4(g_{12}e_{\lambda\lambda}+k_{12}B_\lambda^2)+$$

$$+2\sum_{\mu\neq\lambda}[(g_{11}+g_{13})e_{\mu\mu}+(k_{11}+k_{13})B_\mu^2]\}+ \qquad /31/$$

$$+4\Gamma_2\sum_{\mu\neq\lambda}A_\mu D^{(\delta)}_{\lambda\mu}(T)-4\sum_{\lambda\neq\mu}A_\mu[g_{66}e_{\lambda\mu}+k_{66}B_\lambda B_\mu]=0;$$

б/ $\partial\langle H\rangle_0/\partial C_\lambda=0$
или

$$C_\lambda\{\omega_M^2+\Gamma_1[2(A_\lambda^2+C_\lambda^2)+3\sum_{\alpha\neq\lambda}D^{(\alpha)}_{\lambda\lambda}(T)]+4\Gamma_1 A_\lambda^2+$$

$$+2\Gamma_2\sum_{\mu\neq\lambda}[C_\mu^2+A_\mu^2+D^{(\delta)}_{\mu\mu}(T)]+4(g_{12}e_{\lambda\lambda}+k_{12}B_\lambda^2)+ \qquad /32/$$

$$+2\sum_{\mu\neq\lambda}[(g_{11}+g_{13})e_{\mu\mu}+(k_{11}+k_{13})B_\mu^2]\}=0;$$

в/ $\partial\langle H\rangle_0/\partial e_{\alpha\beta}=0$
или

$$c_{11}e_{\alpha\alpha}+c_{12}\sum_{\beta\neq\alpha}e_{\beta\beta}=d_\alpha(T), \qquad /33/$$

где неоднородный член

$$d_\alpha(T)=b_1[B_\alpha^2-\frac{1}{2}\sum B_\beta^2]-g_{12}[2(A_\alpha^2+C_\alpha^2)+\sum_{\beta\neq\alpha}D^{(\beta)}_{\alpha\alpha}(T)]-$$

$$-\sum_{\beta\neq\alpha}[(g_{11}+g_{13})(A_\beta^2+C_\beta^2)+g_{11}D^{(\delta)}_{\beta\beta}(T)+g_{13}D^{(\alpha)}_{\beta\beta}(T)]. \qquad /33а/$$

Для $\alpha\neq\beta$ получаем

$$c_{44}e_{\alpha\beta}=g_{66}[A_\alpha A_\beta+D^{(\delta)}_{\alpha\beta}(T)]+\frac{1}{4}b_2\cdot B_\alpha B_\beta. \qquad /34/$$

Решение системы уравнений /33/ может быть записано в общем виде:

$$e_{\alpha\alpha}=\frac{1}{c_\ell}d_\alpha(T)+\frac{c_{12}}{c_\ell\cdot c_t}\cdot[2d_\alpha(T)-\sum_{\beta\neq\alpha}d_\beta(T)], \qquad /35/$$

где введены коэффициенты жесткости $c_\ell=c_{11}+2c_{12}$ и $c_t=c_{11}-c_{12}$. В формулах /31/, /32/, /33а/ и /34/ использовано обозначение $D^{(\alpha)}_{\lambda\mu}(T)$ /28/ для корреляционных функций, которые вычисляются самосогласованным образом из уравнения /21/ с учетом определения частот фононов /19/ и пробной матрицы /27/. Учитывая трехкратное вырождение частоты фононов в точках R и M, для мягких мод R_{25} и M_3 получаем следующие выражения:

$$\Omega_\lambda^2(q_R) = \phi_{\lambda\lambda}(q_R) = \omega_R^2 + 4\cdot(g_{12}e_{\lambda\lambda} + k_{12}B_\lambda^2) +$$

$$+ 2\sum_{\beta\neq\lambda}[(g_{11}+g_{13})e_{\beta\beta} + (k_{11}+k_{13})B_\beta^2] + \qquad /36/$$

$$+ 3\Gamma_1[2(A_\lambda^2+C_\lambda^2) + \sum_{\alpha\neq\lambda}\dot{D}_{\lambda\lambda}^{(\alpha)}(T)] + 2\Gamma_2\sum_{\nu\neq\lambda}[A_\nu^2 + C_\nu^2 + D_{\nu\nu}^{(\delta)}(T)],$$

$$\Omega_\lambda^2(q_M^{(\lambda)}) = \phi_{\lambda\lambda}(q_M^{(\lambda)}) = \omega_M^2 - \omega_R^2 + \Omega_\lambda^2(q_R). \qquad /37/$$

Следовательно, в рамках изучаемой микроскопической модели находим, что разность частот для моды M_3 и R_{25} постоянна:

$$\Omega_\lambda^2(q_M^{(\lambda)}) - \Omega_\lambda^2(q_R) = |\omega_R^2| - |\omega_M^2| > 0, \qquad /38/$$

и должна быть положительной для описания последовательности фазовых переходов $T_R > T_M$. Аналогично, учитывая /31/ и /32/, уравнение для параметра порядка C_λ при тетрагональном искажении может быть записано в виде

$$C_\lambda^2 = A_\lambda^2 + \frac{1}{4\Gamma_1}(|\omega_R^2| - |\omega_M^2|) > A_\lambda^2. \qquad /39/$$

Соотношения /38/ и /39/ показывают, что в рамках принятой модели переход из фазы $R(A_\lambda \neq 0)$ в фазу $M(C_\lambda \neq 0)$ может быть переходом только первого рода. При этом возможно как появление "смешанной" фазы $R+M\,(A_\lambda \neq 0$ и $C_\lambda \neq 0)$, так и чистой фазы M $(A_\lambda = 0,\ C_\lambda \neq 0)$ /см. [4, 5] /. Для выяснения этого вопроса, а также определения температуры перехода T_M в фазу M, необходимо провести сравнение свободных энергий этих фаз. Экспериментальные данные о роде фазового перехода в точке M неоднозначны: в работе [6] наблюдался скачок параметра порядка, а в [7] был зафиксирован непрерывный переход из фазы R в M.

Физическая причина полученных соотношений /38/ и /39/ лежит в характере приближений, сделанных при формулировке модели в [1]. При учете только локального ангармонического взаимодействия /см. /2/ в [1] / не принимается во внимание взаимодействие смещений ионов F в различных примитивных ячейках /вдоль оси вращения октаэдров MnF_6 /. Поэтому константы ангармонизма /6а/ для мод R_{25} и M_3, которые отличаются лишь фазой угла поворота октаэдров вдоль оси вращения, оказываются равными

$$\Gamma_{\lambda\mu}(q_R) = \Gamma_{\lambda\mu}(q_M^{(\lambda)}). \qquad /40/$$

/Напомним, что поворот вокруг оси λ для моды M_3 связан с лучом звезды $q_M^{(\lambda)}$ /см. /1//. Аналогичное локальное приближение для спин-фононного взаимодействия /см. /25/ в [1] /, когда учитывается только смещения ближайших к магнитному иону Mn

ионов F, также дает равенство констант спин-фононного взаимодействия /13а/:

$$d_\lambda(q_R, q_R) = d_\lambda(q_M^{(\lambda)}, q_M^{(\lambda)}). \qquad /41/$$

Соотношения /40/ и /41/ приводят к рассмотренной выше симметрии уравнений для частот мягких мод /38/ и параметров порядка /39/. Дальнейшее уточнение модели: учет взаимодействия с ионами в следующих примитивных ячейках, не должен существенно изменить полученные результаты для $KMnF_3$, так как в случае фторидов достаточно хорошие результаты дает точечная модель ионов /см. [8] /, и поэтому слабым кулоновским взаимодействием при смещении ионов F в соседних примитивных ячейках можно вполне пренебречь по сравнению с сильным короткодействующим отталкиванием в приближении ближайших соседей. Важным, однако, может оказаться кубическое ангармоническое взаимодействие смещений ионов F и K типа $R_\lambda^2 X_\lambda$, где X_λ - смещение ионов K.

Более подробный анализ структурных ФП и возможных типов магнитного упорядочения при антиферромагнитном переходе будет проведен в следующей работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-82-219, Дубна, 1982.
2. Plakida N.M. Phys.Letters A, 1970, 32, p. 134;
   Boccara N. phys.stat.sol. b, 1971, 43, p. K11;
   Plakida N.M., Siklos T. Acta Phys.Hung., 1978, 45, p. 37;
   Gillis N.S. In: Dynamical Properties of Solids (ed.
   (Eds. Horton G.K., Maradudin A.A.). North Holland, Amsterdam, 1975, v.2, p. 107;
   Плакида Н.М. В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля /под ред. Н.Н.Боголюбова/. "Наука", М., 1975, с. 205.
3. Изюмов Ю.А., Кассан-оглы Ф.А., Найш В.Е. ФММ, 1981, 51, с. 500.
4. Aleksandrov K.S. Ferroelectrics, 1978, 20, p. 61.
5. Александров К.С. и др. Фазовые переходы в кристаллах голоидных соединений ABX_3."Наука",Новосибирск, 1981, гл.2.
6. Shirane G., Minkiewicz V.J., Linz A. Solid State Commun. 1970, 8, p. 1941.
7. Hidaka M. et al. Solid State Commun., 1975, 16, p. 1121.
8. Rousseau M., Nouet J., Almairac R. J.Physique, 1977, 38, p. 1423.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 марта 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги,
если они не были заказаны ранее.

Д1,2-9224	IV Международный семинар по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1975.	3 р. 60 к.
Д-9920	Труды Международной конференции по избранным вопросам структуры ядра. Дубна, 1976.	3 р. 50 к.
Д9-10500	Труды II Симпозиума по коллективным методам ускорения. Дубна, 1976.	2 р. 50 к.
Д2-10533	Труды X Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Баку, 1976.	3 р. 50 к.
Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Конвент Х., Плакида Н.М. Свободная энергия и уравнения для параметров порядка в микроскопической модели структурных и магнитных фазовых переходов в кристалле $KMnF_3$ — Р17-82-220

На основе предложенной ранее модели исследуются структурные переходы, обусловленные модами R_{25} и M_3, и антиферромагнитный переход в кристалле $KMnF_3$. Вычислена свободная энергия модели в приближении самосогласованных фононов для решеточной подсистемы и молекулярного поля для спиновой подсистемы. Получена самосогласованная система уравнений для параметров порядка и деформаций.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Konwent H., Plakida N.M. Free Energy and Equations for Order Parameters in a Microscopic Theory of Structural and Magnetic Phase Transitions in $KMnF_3$ Crystal — P17-82-220

In the framework of the theory developed by the authors, the structural phase transitions induced by R_{25} and M_3 modes and the antiferromagnetic transitions in $KMnF_3$ crystal are investigated. The free energy of the model is evaluated in the selfconsistent phonon approximation for the lattice subsystem and in the molecular field approximation for the magnetic subsystem. The selfconsistent system of equations for the order parameters is derived and discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.