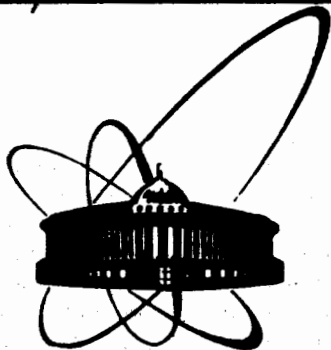


4446/82

20/ix-82



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-82-439

Х.Конвент, Н.М.Плакида

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
КРИСТАЛЛА KMnF_3

Направлено в журнал "Acta Physica Polonica"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах^{/1-3/} нами была сформулирована микроскопическая модель, описывающая последовательность структурных и магнитных фазовых переходов /ФП/ в кристалле $KMnF_3$. На основе самосогласованной системы уравнений для параметров порядка структурных и магнитных ФП и деформаций, полученных в работе^{/2/}, в работе^{/3/} были рассмотрены структурные переходы, связанные с мягкими модами симметрии R_{25} и M_3 /переходы в точках R и M зоны Бриллюэна/. В настоящей работе, следуя результатам^{/1-3/}, мы рассмотрим магнитные переходы и влияние на них структурных переходов.

В кристалле $KMnF_3$, который считается гейзенберговским антиферромагнетиком /АФ/ с эффективным спином $S = 5/2$ /для обзора магнитных свойств см., например,^{/1/}, и цитированную там литературу/, наблюдаются два магнитных ФП: 1/ при температуре $T_{N1} = 88,5$ K происходит переход 2-го рода из парамагнитной фазы /П/ в антиферромагнитную фазу /АФ/ типа G, с возникновением намагниченности подрешеток вдоль тетрагональной оси /т.е. вдоль направления параметра порядка структурного перехода/, 2/ при температуре $T_2 = 81,5$ K происходит ФП 1-го рода, в результате которого магнитные моменты подрешеток ложатся в базисную плоскость тетрагональной ячейки /фаза $A\Phi_2$ или $A\Phi_3$ /. В этой фазе при учете небольшого отклонения намагниченностей подрешеток от направлений кристаллографических осей, появляется слабый ферромагнетизм /СФ/.

Появление двух магнитных ФП является следствием взаимодействия спиновой подсистемы с мягкими модами, индуцирующими структурные ФП. В рамках предложенной нами модели можно описать переходы в фазу $A\Phi_1$ и $A\Phi_2$ /или $A\Phi_3$ /. Описание перехода в фазу СФ требует некоторого обобщения модели и будет рассмотрено в отдельной работе.

Переходы в фазу $A\Phi_1$ и $A\Phi_2$ или / $A\Phi_3$ / можно описать в рамках феноменологической теории^{/4/}, основанной на разложении свободной энергии по параметрам порядка, в котором коэффициенты разложения считаются подгоночными параметрами. Такое же разложение можно получить, при определенных приближениях, и в рамках нашей теории, причем коэффициенты разложения выражаются через микроскопические параметры модели. Это позволяет сопоставить микроскопический и феноменологический подходы, что будет также рассмотрено в настоящей работе.

В разделе 2 получена система уравнений для магнитного параметра порядка с учетом влияния структурных переходов в точках R и M, позволяющая проанализировать типы магнитного упорядочения и температурную зависимость намагниченности. В разделе 3 рассматриваются приближения, приводящие к результатам феноменологической теории. В частности, коэффициенты феноменологической свободной энергии выражаются через микропараметры модели, для разных частных случаев влияния структурных ФП на магнитные ФП. Приводятся результаты исследования приближенной свободной энергии. Раздел 4 содержит краткое обсуждение результатов работы.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Будем исходить из системы уравнений для параметров порядка структурных ФП в точках R и M / A_λ и C_λ /, деформаций ($e_{\lambda\mu}$), молекулярного поля (h_λ) и параметров порядка магнитных ФП (B_λ), полученных в работе^{/3/}/уравнения /5/-/11/ из^{/3/}/. Так как магнитные переходы происходят при температурах более низких, чем структурные переходы ($T_2 < T_{N1} < T_M < T_R$), следует рассмотреть переходы в фазе R + M, когда

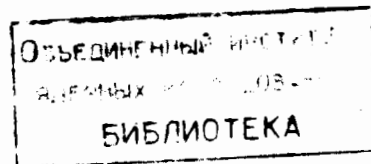
$$A_1 \neq 0, \quad C_1 \neq 0, \quad A_2 = A_3 = 0, \quad C_2 = C_3 = 0. \quad /1/$$

В этом случае тетрагонального искажения кристалла недиагональные компоненты тензора деформации равны нулю, $e_{\lambda\mu} = 0$, а отличные от нуля $e_{\lambda\lambda} = e_\lambda \neq 0$, и, вообще говоря, из-за магнитострикции, $e_1 \neq e_2 \neq e_3$. Пренебрегая перенормировкой фононного спектра, можно предположить для корреляционных функций локальных нормальных координат

$$D_2(T) = D_3(T) \quad /2/$$

/см. /3/ и /30/-/32/ из работы^{/3/}/. При этих предположениях система уравнений /5/-/11/ из^{/3/} принимает вид

$$\begin{aligned} \omega_R^2 + 2\Gamma_1 [A_1^2 + 3C_1^2 + 3D_1(T)] + 4\Gamma_2 D_2(T) + \\ + 2[(a+4\beta)e_1 + (a-2\beta)(e_2 + e_3)] + \\ + 2[2k_{12}B_1^2 + (k_{11} + k_{13})(B_2^2 + B_3^2)] = 0, \end{aligned} \quad /3/$$



$$\omega_M^2 + 2\Gamma_1 [C_1^2 + 3A_1^2 + 3D_1(T)] + 4\Gamma_2 D_2(T) + 2[(a+4\beta)e_1 + (a-2\beta)(e_2 + e_3)] + 2[2k_{12}B_1^2 + (k_{11} + k_{13})(B_2^2 + B_3^2)] = 0, \quad /4/$$

$$e_1 = \frac{b_1}{2c_t} [3B_1^2 - \sum_{\mu=1}^3 B_\mu^2] - (\frac{a}{c_l} + \frac{4\beta}{c_t}) [A_1^2 + C_1^2 + D_1(T)] - 2(\frac{a}{c_l} - \frac{2\beta}{c_t}) D_2(T), \quad /5a/$$

$$e_{\lambda \neq 1} = \frac{b_\lambda}{2c_t} [3B_\lambda^2 - \sum_{\mu=1}^3 B_\mu^2] - (\frac{a}{c_l} - \frac{2\beta}{c_t}) [A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + D_1(T)] - 2(\frac{a}{c_l} + \frac{4\beta}{c_t}) D_2(T), \quad /5b/$$

$$h_1 = B_1 \{ J(q_R) - b_1 [3e_1 - \sum_{\mu=1}^3 e_\mu] + 4k_{12} [A_1^2 + C_1^2 + D_1(T)] + 4(k_{11} + k_{13}) D_2(T) \}, \quad /6a/$$

$$h_{\lambda \neq 1} = B_\lambda \{ J(q_R) - b_\lambda [3e_\lambda - \sum_{\mu=1}^3 e_\mu] + 2(k_{11} + k_{12}) [A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + D_1(T)] + 2(2k_{12} + k_{11} + k_{13}) D_2(T) \}, \quad /6b/$$

$$B_\lambda = -\frac{h_\lambda}{h} S \cdot \mathcal{B}_S(\frac{S \cdot h}{T}), \quad h = \{ \sum_{\mu=1}^3 h_\mu^2 \}^{1/2}, \quad /7/$$

$$\mathcal{B}_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \operatorname{cth}(\frac{2S+1}{2S} \cdot x) - \frac{1}{2S} \operatorname{cth}(\frac{x}{2S}).$$

Параметры порядка A_λ и C_λ входят в уравнения /5/ и /6/ в виде комбинации $A_\lambda^2 + C_\lambda^2$. Складывая уравнения /3/ и /4/ и исключая при помощи /5/ упругие деформации, для $A_\lambda^2 + C_\lambda^2$ получаем уравнение:

$$6\tilde{\Gamma}_1 (A_\lambda^2 + C_\lambda^2) = |\omega_R^2| + |\omega_M^2| - 12\tilde{\Gamma}_1 D_1(T) - 8\tilde{\Gamma}_2 D_2(T) - 2p_1 B_1^2 - 2p_2 (B_2^2 + B_3^2), \quad /8/$$

где мы учли, что $\omega_R^2 < 0$ и $\omega_M^2 < 0$ и использовали введенные в работе /3/ обозначения

$$\tilde{\Gamma}_1 = \Gamma_1 - \frac{a^2}{c_l} - \frac{8\beta^2}{c_t}, \quad \tilde{\Gamma}_2 = \Gamma_2 - \frac{3a^2}{c_l} + \frac{12\beta^2}{c_t}, \quad /9/$$

$$c_l = c_{11} + 2c_{12}, \quad c_t = c_{11} - c_{22}.$$

а также ввели коэффициенты:

$$p_1 = 4(k_{12} + \frac{3b_1\beta}{c_t}), \quad p_2 = 2(k_{11} + k_{13} - \frac{3b_1\beta}{c_t}). \quad /10/$$

Исключение деформаций из выражений для компонент молекулярного поля /6а,б/ приводит к следующим результатам:

$$h_1 = B_1 \cdot \{ J(q_R) - \frac{3b_1^2}{2c_t} [3B_1^2 - \sum_{\mu=1}^3 B_\mu^2] + p_1 (A_1^2 + C_1^2) + p_1 D_1(T) + 2p_2 D_2(T) \}, \quad /11a/$$

$$h_{\lambda \neq 1} = B_\lambda \{ J(q_R) - \frac{3b_\lambda^2}{2c_t} [3B_\lambda^2 - \sum_{\mu=1}^3 B_\mu^2] + p_2 (A_\lambda^2 + C_\lambda^2) + p_2 D_1(T) + (p_1 + p_2) D_2(T) \}. \quad /11b/$$

Отметим, что в этих выражениях члены, содержащие корреляционные функции $D_1(T)$ и $D_2(T)$, определяют температурную перенормировку обменного взаимодействия и возникают как результат спин-фононного взаимодействия даже в отсутствие структурных ФП ($A_\lambda = C_\lambda = 0$).

Исключая из выражений /11а,б/ параметры A_λ и C_λ при помощи уравнения /8/ и учитывая, что, согласно определению, $J(q_R) < 0$ для h_λ , получаем следующие формулы:

$$h_\lambda = -B_\lambda \cdot K_\lambda, \quad \lambda = 1, 2, 3, \quad /12/$$

где

$$K_1 = I_1(T) + \phi_1(B) \equiv I_1(T) + a_1 B_1^2 + a_2 (B_2^2 + B_3^2), \quad /13/$$

$$K_2 = I_2(T) + \phi_2(B) \equiv I_2(T) + a_2 B^2 + a_3 B_2^2 + a_4 B_3^2,$$

$$K_3 = I_2(T) + \phi_3(B) \equiv I_2(T) + a_2 B_1^2 + a_4 B_2^2 + a_3 B_3^2.$$

$$I_1(T) = |J(q_R)| - \frac{p_1}{6\Gamma_1} \cdot (|\omega_R^2| + |\omega_M^2|) + p_1 \cdot D_1(T) - 2(p_2 - \frac{2}{3} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} p_1) D_2(T), \quad /14/$$

$$I_2(T) = |J(q_R)| - \frac{p_2}{6\Gamma_1} \cdot (|\omega_R^2| + |\omega_M^2|) + p_2 \cdot D_1(T) - (p_1 + p_2 - \frac{4}{3} \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} p_2) D_2(T), \quad /15/$$

$$a_1 = \frac{p_1^2}{6\Gamma_1} + \frac{3b_1^2}{c_t}, \quad a_2 = \frac{p_1 p_2}{6\Gamma_1} - \frac{3b_1^2}{2c_t}, \quad /16/$$

$$a_3 = \frac{p_2^2}{6\Gamma_1} + \frac{3b_1^2}{c_t}, \quad a_4 = \frac{p_2^2}{6\Gamma_1} - \frac{3b_1^2}{2c_t}.$$

Выражения /12/-/16/ вместе с уравнением /7/, связывающим V_λ и h_λ , определяют тип магнитного упорядочения и температурную зависимость намагниченности подрешеток $V_\lambda(T)$. $I_i(T)$ ($i=1,2$) имеют смысл эффективных обменных интегралов. Так как обменное взаимодействие в кристалле $KMnF_3$ много больше, чем спин-фононное взаимодействие, то вклад $|J(q_R)|$ в $I_i(T)$ является определяющим и можно считать, что $I_i(T) > 0$. Из формул /12/-/16/ следует, что в результате взаимодействия спинов с мягкими модами и эффектов магнитострикции появляется эффективная анизотропия обменного взаимодействия: обменное взаимодействие спинов вдоль оси тетрагонального искажения $I_1(T)$, и в направлении, перпендикулярном к этой оси, $I_2(T)$, вообще говоря, различны. Дополнительно к обменной анизотропии появляется эффективная анизотропия одноионного типа, связанная с функциями $\phi_\lambda(B)$ /см. /13// и описываемая константами a_1, a_2, a_3 и a_4 /16/. Из /16/ следует, что $a_1 > 0$ и $a_3 > 0$. Знак a_2 и a_4 зависит от соотношения между спин-фононным взаимодействием и магнитострикцией.

Из указанных выше свойств магнитной анизотропии и уравнений /12/-/16/ вытекает, что возможны следующие типы магнитного упорядочения:

- а/ фаза $A\Phi_1$: $V_1 \neq 0, V_2 = V_3 = 0$,
- б/ фаза $A\Phi_2$: $V_1 = V_2 = 0, V_3 \neq 0$ или $V_1 = V_3 = 0, V_2 \neq 0$,
- в/ фаза $A\Phi_3$: $V_1 = 0, V_2 = V_3 \neq 0$.

В фазе $A\Phi_1$ молекулярное поле имеет одну отличную от нуля компоненту:

$$h_1 = -V_1 \cdot \{I_1(T) + a_1 B_1^2\}, \quad h_2 = h_3 = 0. \quad /17/$$

Намагниченность подрешеток направлена вдоль тетрагональной оси

$$B_1 = -\frac{h_1}{h} \cdot B, \quad B = |B_1|, \quad h = |h_1|, \quad /18/$$

а ее абсолютное значение B является решением уравнения

$$B = S \cdot \mathcal{B}_S \left(\frac{S \{I_1(T)B + a_1 B^3\}}{T} \right). \quad /19/$$

Фазовый переход из парамагнитной фазы /П/ в фазу $A\Phi_1$ является переходом 2-го рода и происходит при температуре T_{N1} , определяемой из уравнения

$$1 = S \cdot \frac{d}{dB} \mathcal{B}_S \left(\frac{S \{I_1(T)B + a_1 B^3\}}{T} \right) \Big|_{\substack{B=0 \\ T=T_{N1}}} \quad /20a/$$

т.е.

$$T_{N1} = \frac{1}{3} I_1(T_{N1}) S(S+1). \quad /20б/$$

В фазе $A\Phi_2$ молекулярное поле имеет тоже одну отличную от нуля компоненту:

$$h_1 = h_2 = 0, \quad h_3 = -V_3 \{I_2(T) + a_3 B_3^2\}. \quad /21/$$

Намагниченность подрешеток направлена перпендикулярно тетрагональной оси

$$B_3 = -\frac{h_3}{h} B, \quad B = |B_3|, \quad h = |h_3|, \quad /22/$$

а ее абсолютное значение определяется из уравнения

$$B = S \cdot \mathcal{B}_S \left(\frac{S \{I_2(T)B + a_3 B^3\}}{T} \right), \quad /23/$$

которое имеет ненулевые решения при температурах $T < T_{N2}$, где T_{N2} определяется аналогично /20а/ и является решением уравнения

$$T_{N2} = \frac{1}{3} I_2(T_{N2}) \cdot S(S+1). \quad /24/$$

T_{N2} можно считать температурой затравочного фазового перехода 2-го рода. Фактический переход из фазы $A\Phi_1$ в фазу $A\Phi_2$ может быть только переходом 1-го рода, температура которого T_2 определяется из условия равенства свободных энергий фаз $A\Phi_1$ и $A\Phi_2$. Она будет вычислена в некотором приближении в дальнейшем.

В фазе $A\Phi_3$ молекулярное поле имеет две отличные от нуля компоненты:

$$h_1 = 0, \quad h_2 = h_3 = -B_2 \{ I_2(T) + (a_3 + a_4) B_2^2 \}, \quad /25/$$

а намагниченность подрешеток направлена по диагонали базисной плоскости:

$$B_2 = -\frac{h_2}{h} B, \quad B_3 = -\frac{h_3}{h} B, \quad /26/$$

$$B^2 = B_2^2 + B_3^2 = 2B_2^2, \quad h^2 = h_2^2 + h_3^2 = 2h_2^2,$$

где B определяется из уравнения:

$$B = S \cdot \mathfrak{B}_S \left(\frac{S [I_2(T)B + (a_3 + a_4) B^3 / 2]}{T} \right), \quad /27/$$

которое имеет решения $B \neq 0$ при $T < T_{N2}$, где T_{N2} является также решением уравнения /24/, т.е. температуры затравочных ФП 2-го рода в фазы $A\Phi_2$ и $A\Phi_3$ совпадают. Переход из $A\Phi_1$ в $A\Phi_3$ является переходом 1-го рода и происходит при температуре T_3 , определяемой из условия равенства свободных энергий фаз $A\Phi_1$ и $A\Phi_3$. В кристалле $KMnF_3$ реализуются, по-видимому, фазы $A\Phi_1$ и $A\Phi_2$, фаза $A\Phi_3$ не появляется^{/5/}.

Определение температур T_{N1} и T_{N2} /ср. /20/ и /24//, а также исследование температурной зависимости намагниченности подрешеток $B(T)$ в разных фазах /уравнения /19/, /23/ и /27//, требуют вычисления температурной зависимости эффективных обменных интегралов $I_i(T)$ /ср. /14/ и /15//, которая осуществляется через корреляционные функции $D_\lambda(T)$ /ср. /3/ и /3'/ /. Для вычисления последних нужно определить самосогласованным образом спектр частот мягких мод $\Omega_\alpha(q)$, что может быть проведено только численным образом. Поэтому для предварительных оценок целесообразно рассмотреть более грубое приближение, которое приводит к тем же результатам, что и феноменологическая теория. Эта задача представляет и самостоятельный интерес, т.к. позволяет выразить коэффициенты разложения свободной энергии в феноменологической теории через микроскопические параметры модели. Это приближение рассматривается в следующем разделе.

3. СОПОСТАВЛЕНИЕ С ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕОРИЕЙ

Будем исходить из уравнения /7/ для B_λ и общих выражений для компонент молекулярного поля h_λ /12/, /13/. Подставляя в /7/ разложение в ряд функции Бриллюэна

$$\mathfrak{B}_S(x) = \frac{(2S+1)^2 - 1}{(2S)^2} \cdot \frac{x}{3} - \frac{(2S+1)^4 - 1}{(2S)^4} \cdot \frac{x^3}{45} + \dots \quad /28/$$

и оставляя члены, содержащие B_λ , в степени не выше третьей, получаем следующую систему уравнений:

$$B_\lambda \cdot \left\{ 1 - \frac{1}{3T} S(S+1) [I_\lambda(T) + \phi_\lambda(B)] + I_\lambda(T) \mu(S) \cdot \left[\frac{S(S+1)}{3T} \right]^3 [I_1^2(T) B_1^2 + I_2^2(T) (B_2^2 + B_3^2)] \right\} = 0, \quad /29/$$

где $\lambda = 1, 2, 3$ и

$$\mu(S) = \frac{3}{20} \cdot \frac{(2S+1)^2 + 1}{S^2(S+1)^2} \quad /30/$$

и следует учесть, что $I_3(T) = I_2(T)$.

Приближенные уравнения /29/ определяют поведение намагниченности подрешеток B_λ только в окрестности температур ФП T_{Ni} ($i = 1, 2$). При переходе к феноменологической теории их область применимости экстраполируется на весь интервал температур и, кроме того, делаются дополнительные приближения. В коэффициентах при B_λ^3 пренебрегается перенормировкой обменных интегралов, $I_i(T) \rightarrow |J(q_R)|$ и их температурной зависимостью $T \rightarrow T_m$, где

$$T_m = \frac{1}{3} |J(q_R)| S(S+1) \quad /31/$$

- затравочная температура магнитного ФП 2-го рода в приближении молекулярного поля. Дальнейшие приближения относятся к вычислению обменных интегралов $I_i(T)$ и коэффициентов при B_λ . Прежде чем рассмотреть их, запишем систему уравнений /29/ с учетом принятых приближений в виде:

$$\begin{aligned} B_1 \{ a_1(T) + \beta_1 B_1^2 + \gamma_1 (B_2^2 + B_3^2) \} &= 0, \\ B_2 \{ a_2(T) + \gamma_1 B_1^2 + \beta_2 B_2^2 + \gamma_2 B_3^2 \} &= 0, \\ B_3 \{ a_2(T) + \gamma_1 B_1^2 + \gamma_2 B_2^2 + \beta_2 B_3^2 \} &= 0, \end{aligned} \quad /32/$$

где мы умножили обе стороны уравнений на $|J(q_R)|$, воспользовались определениями /13/ и /31/ и ввели обозначения

$$a_i(T) = |J(q_R)| \left[1 - \frac{1}{3} S(S+1) \frac{I_i(T)}{T} \right], \quad i = 1, 2, \quad /33/$$

$$\beta_1 = \beta_0 - a_1, \quad \gamma_1 = \beta_0 - a_2, \quad /34/$$

$$\beta_2 = \beta_0 - a_3, \quad \gamma_2 = \beta_0 - a_4, \\ \beta_0 = \mu(S) |J(q_R)| = \frac{3}{20} \cdot \frac{(2S+1)^2 + 1}{S^2(S+1)^2} |J(q_R)|. \quad /35/$$

Перейдем теперь к приближенному вычислению эффективных обменных интегралов $I_i(T)$ /14/, /15/. Рассмотрим случай, когда учитывается влияние двух структурных ФП в точках R и M на магнитные ФП. Для сопоставления с феноменологической теорией, в выражениях для компонент молекулярного поля h_λ /11а,б/ следует отбросить флуктуационные члены, пропорциональные $D_\lambda(T)$. Они приводят к температурной перенормировке обменного взаимодействия, не связанной со структурными переходами. При этом, однако, сохраняется зависимость h_λ от параметров порядка A_λ и C_λ . Это приближение приводит к следующему выражению для обменных интегралов /14/, /15/:

$$I_i(T) \approx |J(q_R)| - \frac{p_i}{6\tilde{\Gamma}_1} (|\omega_R^2| + |\omega_M^2|) + \\ + 2p_i D_f(T) + \frac{4}{3} \frac{\tilde{\Gamma}_2}{\tilde{\Gamma}_1} p_i D_2(T), \quad i=1,2. \quad /36/$$

Для корреляционных функций $D_\lambda(T)$, которые будем считать изотропными, примем высокотемпературное приближение /ср. /17/ из /3/ /:

$$D_1(T) \approx D_2(T) \approx \frac{T}{\Omega_0^2}, \quad /37/$$

где Ω_0 - характеристическая частота для моды R_{25} . Согласно данным работы /6/, в кристалле $KMnF_3$: $|\omega_M^2| \approx |\omega_R^2|$. Для температуры T_R первого структурного ФП имеем следующую оценку /ср. /19/ из /3/ /:

$$T_R = \frac{|\omega_R^2| \Omega_0^2}{2(3\tilde{\Gamma}_1 + 2\tilde{\Gamma}_2)}. \quad /38/$$

Принимая во внимание /37/ и /38/, для $I_i(T)$ получаем

$$I_i(T) \approx |J(q_R)| + \frac{p_i}{3\tilde{\Gamma}_1} \cdot r_A(T - T_R), \quad /39/$$

где

$$r_A = \frac{|\omega_R^2|}{T_R}. \quad /40/$$

Отметим, что здесь T_R - температура структурного ФП, вычисленная с учетом взаимодействия мягкой моды R_{25} с упругими деформациями кристалла.

Полученную оценку обменных интегралов $I_i(T)$ используем для вычисления температур T_{Ni} ($i=1,2$), определенных аналогично /20/ и /24/: $T_{Ni} = [(1/3)S(S+1)] I_i(T_{Ni})$. Несложные вычисления приводят к результату:

$$T_{Ni} = T_m - \frac{p_i \cdot r_A (T_R - T_m)}{3\tilde{\Gamma}_1 r_B - p_i \cdot r_A}, \quad /41/$$

где

$$r_B = \frac{|J(q_R)|}{T_m}. \quad /42/$$

Учитывая /39/ и /41/, мы можем вычислить коэффициенты $a_i(T)$ /33/, а также принимая во внимание определения a_j /16/, выписать в явном виде коэффициенты β_i и γ_i . В итоге получаем:

$$a_i(T) = [r_B - \frac{p_i}{3\tilde{\Gamma}_1} r_A] (T - T_{Ni}), \quad i=1,2. \quad /43/$$

$$\beta_1 = v_1 - \frac{p_1^2}{3\tilde{\Gamma}_1}, \quad \gamma_1 = v_2 - \frac{p_1 p_2}{3\tilde{\Gamma}_1}, \\ \beta_2 = v_1 - \frac{p_2^2}{3\tilde{\Gamma}_1}, \quad \gamma_2 = v_2 - \frac{p_2^2}{3\tilde{\Gamma}_1}, \quad /44/$$

где

$$v_1 = \beta_0 - \frac{3b_1^2}{c_t} = \frac{3}{20} \cdot \frac{(2S+1)^2 + 1}{S^2(S+1)^2} |J(q_R)| - \frac{3b_1^2}{c_t} \\ v_2 = \beta_0 + \frac{3b_1^2}{2c_t} = \frac{3}{20} \cdot \frac{(2S+1)^2 + 1}{S^2(S+1)^2} |J(q_R)| + \frac{3b_1^2}{2c_t}, \quad /45/$$

остальные параметры определены в /9/ и /10/.

Таким образом, мы получили приближенную систему уравнений /32/ для определения типов магнитного упорядочения и температурной зависимости намагнитченности подрешеток, в которой коэффициенты $a_i(T)$, β_i и γ_i выражены через микропараметры модели. Эта система имеет тот же вид, что и аналогичная система уравнений феноменологической теории /4/. Поэтому, сопоставляя их, можем выразить феноменологические коэффициенты через микропараметры модели. Уравнения /32/ являются условиями стационарности $\partial F / \partial V_\lambda = 0$ свободной энергии F вида /4/:

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2} a_1(T) \cdot B_1^2 + \frac{1}{2} a_2(T) (B_2^2 + B_3^2) +$$

$$+ \frac{1}{4} \beta_1 B_1^4 + \frac{1}{4} \beta_2 (B_2^4 + B_3^4) + \frac{1}{2} \gamma_1 B_1^2 (B_2^2 + B_3^2) +$$

$$+ \frac{1}{2} \gamma_2 B_2^2 \cdot B_3^2. \quad /46/$$

Заметим, что подобное выражение можно получить в рассматриваемом приближении, если из общей формулы для свободной энергии, полученной в работе /3/ /см. /48/ из /3/ /, исключить параметры порядка структурных ФП ($A_1 \neq 0, A_2 = A_3 = 0, C_1 \neq 0, C_2 = C_3 = 0$) и деформации. При этом $F_0(T)$ имеет смысл свободной энергии парамагнитной фазы и для частного случая будет определено в дальнейшем.

Таким образом, мы вывели свободную энергию в виде, который используется при описании магнитных ФП в рамках феноменологической теории /формулы /40/-/46//. Выражение для свободной энергии /46/ с учетом определения коэффициентов /40/-/45/ учитывает взаимодействие параметра порядка магнитного ФП с параметрами порядка структурных ФП в точках R и M, происходящих при температурах, выше температур магнитных ФП: $T_R > T_M > T_{Ni}$, при этом учитываются также эффекты взаимодействия мягких мод R_{25} и M_3 с упругими деформациями кристалла, приводящие к перенормировке констант ангармонического взаимодействия Γ_1 и $\tilde{\Gamma}_2$ /см. /9//. Заметим, что учет магнитострикции является существенным, так как в нашем случае она является источником кубической магнитной анизотропии: затравочные константы магнитной анизотропии /45/ с учетом магнитострикции $v_1 \neq v_2$, а без ее учета $v_1 = \beta_0 = v_2$.

Кроме этого наиболее общего случая (I), рассмотрим еще два более простых приближения: (II) — учитывается взаимодействие магнитного ФП только с одним структурным ФП в точке R с включением взаимодействия моды R_{25} с упругими деформациями, и (III) — с пренебрежением последних. Представим только результаты исследования случаев (II) и (III), которое приводит к небольшим изменениям формул /39/, /41/, /43/ и /44/ для случая (I). В случае (II) в этих формулах следует произвести замену: $3\Gamma_1 \rightarrow 2\Gamma_0 \equiv 2[\Gamma_1 - (3a^2/c\ell) - (24\beta^2/c_1)]$, а в случае (III): $3\Gamma_1 \rightarrow 2\Gamma_1$ и дополнительно заменить $p_1 \rightarrow p_1^{(0)} \equiv 4k_{12}$, $p_2 \rightarrow p_2^{(0)} \equiv 2(k_{11} + k_{13})$, $T_R \rightarrow T_R^0 = [\omega_R^2 \Omega_0^2 / 2(3\Gamma_1 + 2\Gamma_2)]$ /см. /10/ и /38//, т.е. пренебречь перенормировкой, связанной с взаимодействием моды R_{25} с упругими деформациями. Результаты вычислений коэффициентов $a_i(T)$, β_i , γ_i и температур T_{Ni} , определяющих свободную энергию /46/, для случаев (I) — (III) представлены в табл.1.

Таблица 1

| | I | II | III |
|-----------------------------|--|--|--|
| $a_i(T) = a_i'(T - T_{Ni})$ | $\left[\tau_B - \frac{p_i \tau_A}{3\Gamma_1} \right] (T - T_{Ni})$ | $\left[\tau_B - \frac{p_i \tau_A}{2\Gamma_0} \right] (T - T_{Ni})$ | $\left[\tau_B - \frac{p_i \tau_A^{(0)}}{2\Gamma_1} \right] (T - T_{Ni}^{(0)})$ |
| T_{Ni} | $T_M - \frac{p_i \tau_A (T_R - T_M)}{3\Gamma_1 \tau_B - p_i \tau_A}$ | $T_M - \frac{p_i \tau_A (T_R - T_M)}{2\Gamma_0 \tau_B - p_i \tau_A}$ | $T_M - \frac{p_i \tau_A^{(0)} (T_R - T_M)}{2\Gamma_1 \tau_B - p_i \tau_A^{(0)}}$ |
| β_1 | $\nu_1 - \frac{p_1^2}{3\Gamma_1}$ | $\nu_1 - \frac{p_1^2}{2\Gamma_0}$ | $\nu_1 - \frac{p_1^{(0)2}}{2\Gamma_1}$ |
| β_2 | $\nu_1 - \frac{p_2^2}{3\Gamma_1}$ | $\nu_1 - \frac{p_2^2}{2\Gamma_0}$ | $\nu_1 - \frac{p_2^{(0)2}}{2\Gamma_1}$ |
| γ_1 | $\nu_2 - \frac{p_1 p_2}{3\Gamma_1}$ | $\nu_2 - \frac{p_1 p_2}{2\Gamma_0}$ | $\nu_2 - \frac{p_1^{(0)} p_2^{(0)}}{2\Gamma_1}$ |
| γ_2 | $\nu_2 - \frac{p_2^2}{3\Gamma_1}$ | $\nu_2 - \frac{p_2^2}{2\Gamma_0}$ | $\nu_2 - \frac{p_2^{(0)2}}{2\Gamma_1}$ |

В случае (III) мы можем вывести полную свободную энергию системы в виде, который рассматривается в рамках феноменологической теории^{/4/}. С этой целью используем разложение свободной энергии по параметру A_λ , полученное нами в работе^{/3/} /формула /48/ из^{/3/} /, в котором дополнительно проведем разложение магнитной части свободной энергии /формулы /22/, /23/ и /29/ из^{/2/} / по параметрам B_λ , пренебрегая при этом взаимодействием мягкой моды с упругими деформациями, но учитывая магнитострикцию. Принимая во внимание те же приближения, что и при выводе /46/, получаем

$$\begin{aligned}
 F = & \frac{1}{2} \cdot \frac{|\omega_R^2|}{T_R^0} \cdot (T - T_R^0) (A_1^2 + A_2^2 + A_3^2) + \frac{1}{2} \Gamma_1 \cdot (A_1^4 + A_2^4 + A_3^4) + \\
 & + \Gamma_2 \cdot (A_1^2 A_2^2 + A_2^2 A_3^2 + A_3^2 A_1^2) + \frac{1}{2} \cdot \frac{|J(q_R)|}{T_m} (T - T_m) (B_1^2 + B_2^2 + B_3^2) + \\
 & + \frac{1}{4} v_1 (B_1^4 + B_2^4 + B_3^4) + \frac{1}{2} v_2 (B_1^2 B_2^2 + B_2^2 B_3^2 + B_3^2 B_1^2) + \\
 & + 2k_{12} (A_1^2 B_1^2 + A_2^2 B_2^2 + A_3^2 B_3^2) + (k_{11} + k_{13}) [A_1^2 (B_2^2 + B_3^2) + \\
 & + A_2^2 (B_3^2 + B_1^2) + A_3^2 (B_1^2 + B_2^2)] - 2k_{66} [A_1 A_2 B_1 B_2 + A_2 A_3 B_2 B_3 + \\
 & + A_3 A_1 B_3 B_1].
 \end{aligned} \quad /47/$$

где коэффициенты v_1 и v_2 определены в /45/.

Отметим, что связь коэффициентов разложения свободной энергии /47/ с коэффициентами разложения свободной энергии в феноменологической теории^{/4/} следующая:

$$\begin{aligned}
 2\Gamma_1 = u_1 + u_5, \quad 2\Gamma_2 = u_1, \quad v_1 = u_2 + u_6, \\
 v_2 = u_2, \quad 4k_{12} = u_3 + u_4 + u_7, \\
 2(k_{11} + k_{13}) = u_3, \quad -4k_{66} = u_4, \\
 \frac{|\omega_R^2|}{T_R^0} = \gamma_A \rightarrow 1, \quad \frac{|J(q_R)|}{T_m} = \gamma_B \rightarrow 1.
 \end{aligned} \quad /48/$$

Если из свободной энергии /47/, в случае, когда $A_1 \neq 0$, $A_2 = A_3 = 0$, исключить при помощи условия $(\partial F / \partial A_1) = 0$ параметр порядка A_1 , то получим выражение /46/ с коэффициентами $\alpha_1(T)$, β_1 и γ_1 , представленными в колонке III табл.1, и допол-

нительно

$$F_0(T) = - \frac{1}{4} \frac{[\gamma_A (T - T_R^0)]^2}{2\Gamma_1}, \quad /49/$$

где γ_A определено в /40/.

Таким образом, нам удалось для случая, когда учитывается влияние только одного структурного перехода в точке R на магнитные ФП и не учитывается взаимодействие моды R_{25} с упругими деформациями, восстановить полную свободную энергию системы в виде /47/, а также свободную энергию в виде /46/, достаточном для исследования магнитных ФП. Для исследования /46/ можно применить стандартные методы. Основные результаты этого исследования приведены в табл.2.

Сделаем еще несколько дополнительных замечаний. В точке перехода 1-го рода T_2 из фазы $A\Phi_1$ в фазу $A\Phi_2$ происходит скачок намагниченности:

$$\frac{B_3^2(T_2)}{B_1^2(T_2)} = \left(\frac{\beta_1}{\beta_2}\right)^{1/2}. \quad /50/$$

Скачок намагниченности при переходе $A\Phi_1 \rightarrow A\Phi_3$ при температуре T_3 равен

$$\frac{B_2^2(T_3) + B_3^2(T_3)}{B_1^2(T_3)} = \left(\frac{2\beta_1}{\beta_2 + \gamma_2}\right)^{1/2}. \quad /51/$$

Рассмотрим также более подробно поведение параметра порядка структурного ФП $A_1(T)$ в окрестности температур магнитных ФП T_{N1} , T_2 и T_3 , для случая (II) /результаты для случая (III) получаются заменой $\Gamma_0 \rightarrow \Gamma_1$, $T \rightarrow T_R^0$ /. Применяя оценки для корреляционных функций в виде /37/ и /38/, для $A_1^2(T)$ получаем следующее выражение:

$$A_1^2(T) = \frac{|\omega_R^2|}{2\Gamma_0 T_R} \cdot (T_R - T) - \frac{p_1}{2\Gamma_0} B_1^2 - \frac{p_2}{2\Gamma_0} (B_2^2 + B_3^2). \quad /52/$$

Учитывая это выражение и данные табл.2, замечаем, что при температуре T_{N1} , $A_1^2(T)$ является непрерывной функцией, но ее производная претерпевает разрыв

$$\left(\frac{dA_1^2(T)}{dT}\right)_{T_{N1}^+} - \left(\frac{dA_1^2(T)}{dT}\right)_{T_{N1}^-} = \frac{\alpha_1'}{\beta_1}, \quad /53/$$

т.е. $A_1(T)$ имеет излом при $T = T_{N1}$. Подобным же методом можно показать, что при температурах T_2 и T_3 $A_1^2(T)$ претерпевает

Таблица 2

| а, в | Тип перехода и температура перехода | Свободная энергия фазы | Температурная зависимость B^2 | Условия устойчивости фазы |
|---|---|--|---|--|
| $B_1 = B_2 = B_3 = 0$ | | $F_1(T)$ | | $\alpha_1 > 0, \alpha_2 > 0$ |
| $A\varphi_1$ $B_1 \neq 0, B_2 = B_3 = 0$ | $T \rightarrow A\varphi_1$ 2-го рода T_{N1} | $F_0(T) - \frac{1}{4} \frac{\alpha_1^2}{\beta_1} (T - T_{N1})^2$ | $B_1^2 = \frac{\alpha_1}{\beta_1} (T_{N1} - T)$ | $\alpha_1 < 0$ $\alpha_2 - \beta_1 \frac{\alpha_1}{\beta_1} > 0$ |
| $A\varphi_2$ $B_1 = B_2 = 0, B_3 \neq 0$ | $A\varphi_1 \rightarrow A\varphi_2$ I-го рода $T_2 = \frac{T_{N1} - (\alpha_2/\alpha_1)(\beta_1/\beta_2)^{1/2} T_{N2}}{1 - (\alpha_2/\alpha_1)(\beta_1/\beta_2)^{1/2}}$ | $F_0(T) - \frac{1}{4} \frac{\alpha_2^2}{\beta_2} (T - T_{N2})^2$ | $B_3^2 = \frac{\alpha_2}{\beta_2} (T_{N2} - T)$ | $\alpha_2 < 0, \alpha_1 - \beta_2 \frac{\alpha_2}{\beta_2} > 0$ $\alpha_1 - \beta_2 \frac{\alpha_2}{\beta_2} > 0$ |
| $A\varphi_3$ $B_1 = 0, B_2 = B_3 \neq 0$ | $A\varphi_1 \rightarrow A\varphi_3$ I-го рода $T_3 = \frac{T_{N1} - (\alpha_2/\alpha_1)(2\beta_1/\beta_2\beta_3)^{1/2} T_{N2}}{1 - (\alpha_2/\alpha_1)(2\beta_1/\beta_2\beta_3)^{1/2}}$ | $F_0(T) - \frac{1}{2} \frac{\alpha_2^2}{(\beta_2 + \beta_3)} (T - T_{N2})^2$ | $B_2^2 = B_3^2 = \frac{\alpha_2}{\beta_2 + \beta_3} (T_{N2} - T)$ | $\alpha_1 - \frac{2\beta_1\alpha_2}{\beta_2 + \beta_3} > 0$ $\alpha_2 - \frac{(\beta_2 + \beta_3)\alpha_2}{\beta_2 + \beta_3} > 0$ $\left[\alpha_2 - \frac{(\beta_2 + \beta_3)\alpha_2}{\beta_2 + \beta_3} \right]^2 > \left[\frac{2\beta_2\alpha_2}{\beta_2 + \beta_3} \right]^2$ |

скачок, равный, соответственно,

$$A_1^2(T_2 - 0) - A_1^2(T_2 + 0) = \frac{(\alpha_2'/2\Gamma_0)[p_2 - p_1(\beta_2/\beta_1)^{1/2}](T_{N1} - T_{N2})}{1 - (\alpha_2'/\alpha_1')(\beta_1/\beta_2)^{1/2}} \quad /54/$$

$$A_1^2(T_3 - 0) - A_1^2(T_3 + 0) = \frac{[2\alpha_2'/2\Gamma_0(\beta_2 + \beta_3)][p_2 - p_1(\beta_2 + \beta_3/2\beta_1)^{1/2}](T_{N1} - T_{N2})}{1 - (\alpha_2'/\alpha_1')(2\beta_1/\beta_2 + \beta_3)^{1/2}} \quad /55/$$

Наши исследования подтверждают основные результаты феноменологической теории^{/4/}. Отметим, однако, что имеются различия в некоторых формулах и выводах. В частности, не совпадают формулы для температуры ФП 1-го рода из фазы $A\varphi_1$ в фазу $A\varphi_2$ / T_2 из табл.2 и T_1 /16/ из^{/4/} / и для величины скачка $A_1^2(T)$ при температуре T_2 /ср. /53/, /54/ и /19/, /20/ из^{/4/} /. В отличие от^{/4/}, из наших исследований следует, что фазы $A\varphi_1$ и $A\varphi_3$ имеют общую область устойчивости.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Развитая в настоящей работе микроскопическая теория магнитных ФП в кристалле $KMnF_3$ позволяет при решении самосогласованной системы уравнений /3/-/7/ определить основные характеристики ФП в фазы $A\varphi_1$ и $A\varphi_2$ /или $A\varphi_3$ /. Исследование слабого ферромагнетизма в фазах $A\varphi_2$ /или $A\varphi_3$ / требует некоторого обобщения модели. В более простых приближениях (I)-(III) /см.табл.1/, которые соответствуют феноменологическому описанию ФП, удается получить замкнутую систему уравнений для параметра порядка магнитных ФП и вычислить свободную энергию в виде /46/ или /47/, совпадающем с результатами феноменологической теории^{/4/}. Основные результаты исследования магнитных ФП в этих приближениях (I)-(III) представлены в табл.1 и 2, содержащих, в отличие от феноменологической теории^{/4/}, лишь небольшое число параметров микроскопической модели. Дальнейший анализ полученных результатов, сопоставление их с экспериментальными данными и определение модельных параметров, а также более последовательное численное решение исходной самосогласованной системы уравнений /3/-/7/ предполагается провести в отдельной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-82-219, Дубна, 1982.
2. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-82-220, Дубна, 1982.
3. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-82-438, Дубна, 1982.
4. Изюмов Ю.А., Кассан-оглы Ф.А., Найш В.Е. ФММ, 1981, 51, с.500.
5. Hidaka M. J.Phys.Soc.Jap., 1975, 39, p.103.
6. Rousseau M., Nouet J., Almairac R. J.Phys., 1977, 38, p.1423.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июня 1982 года.

Конвент Х., Плакида Н.М. Р17-82-439
Магнитные фазовые переходы в микроскопической модели
кристалла KMnF_3

На основе развитой ранее авторами микроскопической теории рассмотрены антиферромагнитные фазовые переходы в кристалле KMnF_3 с учетом влияния на них структурных переходов, связанных с модами R_{25} и M_3 , и деформации решетки. В определенных приближениях получено выражение для свободной энергии в виде, принятом в феноменологической теории. Проведен анализ возможных типов антиферромагнитных фаз и их основных характеристик.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982.

Конвент Н., Плакида Н.М. Р17-82-439
Magnetic Phase Transitions in a Microscopic Model of KMnF_3
Crystal

The antiferromagnetic phase transitions in KMnF_3 crystals are considered in the framework of the theory recently developed by the present authors. The influence of the structural phase transitions, induced by the soft mode of symmetry R_{25} and M_3 and of the elastic strains on the antiferromagnetic phase transitions is discussed. By the use of appropriate approximations the expression for the free energy in the form accepted in a phenomenological theory is derived. The analysis of possible types of antiferromagnetic ordering and its principal characteristics is presented.

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.