объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-88-545

В.И.Юкалов

СПИН-ФОНОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Направлено в журнал "Physica A"

1988

I. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе продолжено исследование свойств ферромагнетиков с флуктуационными парамагнитными зародышами. Рассмотрение ведется в рамках общего подхода[1-5], развитого для описания систем с гетерофазными флуктуациями. В предыдущих работах[6-8], касающихся магнетиков, изучались модели ферромагнетиков с парамагнитными флуктуациями в случае жесткой решетки, без учета фононных степеней свободы.

Полезно подчеркнуть, что модели гетерофазных ферромагнетиков обладают свойствами, которые подтверждаются многими экспериментами. Например, было теоретически продемонстрировано[8], что намагниченность некоторых метастабильных ферромагнетиков имеет максимум ниже критической точки. Такие максимумы слева от критической точки были действительно обнаружены экспериментально[9] в аморфных сплавах $Dy_{57}Co_{43}$, $Dy_{57}Fe_{43}$, $Er_{57}Co_{43}$ и $Er_{57}Fe_{43}$, полученных быстрым охлаждением из расплава. Эти максимумы смягчаются при приложении внешнего магнитного поля и совсем исчезают, когда поле достигает некоторого критического значения. Существование критического магнитного поля, разрушающего гетерофазные состояния, было предсказано теоретически[6]. Учет парамагнитных флуктуаций в магнетиках позволяет также объяснить наблюдаемые аномалии теплоемкости, имеющей максимум ниже критической точки[10]. В дополнение к калориметрическим имеются и другие эксперименты, подтверждающие, что некоторые вещества представляют собой гетерофазные смеси. Так, рассеяние нейтронов[11,12] дает возможность визуализировать не только конфигурационную структуру, что можно сделать и при помощи рентгеновских лучей[13], но также и магнитную структуру. Сузуки и Харада[14], используя рассеяние нейтронов, исследовали локальное упорядочение в неупорядоченном сплаве Au_4Mn. Этот сплав демонстрирует ферромагнитное поведение, но с намагниченностью, которая при низких температурах составляет около половины намагниченности упорядоченного состояния. Было обнаружено[14], что снижение намагниченности в разупорядоченном состоянии обязано присутствию неферромагнитных атомов Mn, в противоположность полному отсутствию таких атомов в упорядоченном состоянии. Эффект Мёссбауэра также дает чрезвычайно полную информацию о наличии гетерофазной примеси в магнетиках. Например, эксперименты со сплавом $MnAu_2$, который антиферромагнитен во внешних магнитных полях вплоть до критического поля, после чего сплав становится ферромагнитным, показали, что в обоих состояниях, и антиферромагнитном, и ферромагнитном, у этого сплава имеются парамагнитные мёссбауэровские спектры везде ниже точки перехода. Мёссбауэровское исследование, проведенное для $Zn_{0.3}Ni_{0.7}Fe_2O_4$ и $Zn_{0.5}Ni_{0.5}Fe_2O_4$, доказало[16], что в этих веществах парамагнитная фаза сосуществует с магнитной ниже температуры Нееля T_N до температуры $0{,}9 \cdot T_N$. Имеется целый ряд других экспериментов, подтверждающих наличие парамагнитных флуктуаций в магнетиках[17,18]. Все это делает необходимым учет таких флуктуаций для описания реальных веществ. А так как изучение вероятности эффекта Мёссбауэра[19-21] дает дополнительную ясную информацию о существовании гетерофазных состояний и в то же время тесно связано с фононными свойствами, необходимо иметь адекватное описание фононных спектров гетерофазных магнетиков. Спин-фононным взаимодействиям посвящена обширная литература. Обзор этих вопросов можно найти, например, в дополнении к книге Тябликова[22]. Однако вся эта литература касается только магнетиков без гетерофазных флуктуаций.

В настоящей статье рассмотрена ситуация, когда для ферромагнетика со спин-фононным взаимодействием учитываются также и парамагнитные флуктуации. ~~Некоторые предварительные результаты, касающиеся это~~го вопроса, и основанные на очень грубых приближениях, были анонсированы ранее[23,24].

2. СПИН-ФОНОННЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Согласно общему подходу[1-5], двухфазная смесь описывается эффективным гамильтонианом $H = H_1 \oplus H_2$, определенным на стандартном расслоенном пространстве[25] $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_2$ с базами расслоения $\mathcal{F}_p$ ($p = 1,2$), имеющими соответствующие свойства симметрии[26]. Для случая ферро-парамагнитной смеси[6-8] $\mathcal{F}_1$ – это так называемое пространство ферромагнитных состояний, а $\mathcal{F}_2$ – пространство парамагнитных состояний. Эти подпространства, если отсутствует внешнее поле, удобно различать, используя граничные условия

$$\langle \vec{S}_{f1} \rangle \equiv \langle \vec{S}_f \rangle_1 \neq 0 \ , \quad \langle \vec{S}_{f2} \rangle \equiv \langle \vec{S}_f \rangle_2 = 0 \ ,$$

где $\vec{S}_f$ – спиновый оператор, ассоциированный с узлом решетки, которому отвечает решеточный вектор $\vec{f} = \{f_\alpha\}$ ($\alpha = 1,2,3$); среднее $\langle \cdot \rangle_p$ ($p = 1,2$) означает статистическое среднее с соответствующим

гамильтонианом H_p. Число узлов считается равным числу частиц N. Среднее число частиц ферромагнитной фазы – N_1, а парамагнитной – N_2. Концентрация фазы p – это $w_p = N_p / N$ ($p = 1,2$), её можно также назвать вероятностью фазы, так как она имеет свойства вероятности:

$$0 \le w_p \le 1 \ , \quad w_1 + w_2 = 1 \ .$$

Уравнения на фазовые вероятности получаются при минимизации термодинамического потенциала

$$y = -\frac{1}{N} \ln \mathrm{Tr}\, e^{-H/\Theta} \ ,$$

то есть из уравнения

$$\frac{\partial y}{\partial w} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial w} \right\rangle = 0 \qquad (w \equiv w_1 \ , \ w_2 \equiv 1 - w) \ .$$

Для открытых систем w_p может быть задана конкретными функциями внешних параметров[27].

Далее для упрощения обозначений у величин, относящихся к первой (ферромагнитной) фазе, будет опускаться индекс $p = 1$, там, где это не приводит к недоразумениям. Так, в качестве гамильтониана ферромагнитной фазы имеем[6-8]

$$H_1 = \frac{w}{2m} \sum_f \vec{P}_f^{\,2} + \frac{w^2}{2} \sum_{fg} A(\vec{R}_f - \vec{R}_g) - w^2 \sum_{fg} I(\vec{R}_f - \vec{R}_g) \vec{S}_f \vec{S}_g \ , \qquad (1)$$

где первое слагаемое соответствует кинетической энергии. Гамильтониан парамагнитной фазы аналогичен (1), поэтому он здесь не выписан. Вследствие тепловых флуктуаций координата иона $\vec{R}_f$ отклоняется от положения равновесия $\vec{f}$. Вводя обозначение

$$\vec{R}_f - \vec{R}_g = \vec{f} - \vec{g} + \vec{u}_{fg} \ ,$$

разложим потенциалы взаимодействий в (1) по степеням $\vec{u}_{fg}$ до квадратичного слагаемого включительно. Это дает

$$H_1 = E + H_{ph} + H_{sp} + H_{sp-ph} \ , \qquad (2)$$

где неоператорная часть

$$E = \frac{w^2}{2} N A \ , \quad A \equiv \sum_f A(\vec{f})$$

зависит от температуры и других термодинамических параметров через вероятность w и поэтому не может быть отброшена как в случае чистого ферромагнетика, когда $w \equiv 1$. Везде ниже решетка считается идеальной, а межчастичные взаимодействия симметричными:

$$A(\vec{f}) = A(-\vec{f}) \ , \quad I(\vec{f}) = I(-\vec{f}) \ .$$

Фононный гамильтониан в (2) имеет вид

$$H_{ph} = \frac{w}{2m} \sum_f \vec{P}_f^{\,2} + \frac{w^2}{4} \sum_{fg} \sum_{\alpha\beta} A_{fg}^{\alpha\beta} u_{fg}^{\alpha} u_{fg}^{\beta} \ , \qquad (3)$$

где $A_{fg}^{\alpha\beta} \equiv \partial^2 A(\vec f-\vec g)/\partial f_\alpha \partial f_\beta$.

Третье слагаемое в (2) - это спиновый гамильтониан

$$H_{sp} = -w^2 \sum_{fg} I(\vec f-\vec g)\,\vec S_f \vec S_g , \qquad (4)$$

а последнее слагаемое в (2) описывает спин-фононное взаимодействие

$$H_{sp-ph} = -w^2\sum_{fg}\left(\sum_\alpha I^\alpha_{fg} u^\alpha_{fg} + \frac12\sum_{\alpha\beta} I^{\alpha\beta}_{fg} u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\right)\vec S_f\vec S_g , \qquad (5)$$

в котором

$$I^\alpha_{fg} \equiv \frac{\partial I(\vec f-\vec g)}{\partial f_\alpha}, \quad I^{\alpha\beta}_{fg} \equiv \frac{\partial^2 I(\vec f-\vec g)}{\partial f_\alpha \partial f_\beta}.$$

Обычно/22/ выражения, аналогичные (3) и (5), получаются при разложении по степеням $(\vec R_f - \vec f)$, однако при этом нарушается трансляционная симметрия, тогда как в нашем случае трансляционная симметрия гамильтониана сохраняется.

Для того чтобы рассматриваемую проблему можно было решить, необходимо упростить входящее в (5) операторное произведение $u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg} S_{fg}$, в котором $S_{fg} \equiv \vec S_f \vec S_g$. Используем следующее расцепление:

$$u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg} S_{fg} = \langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle S_{fg} + u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\langle S_{fg}\rangle + \left(\langle u^\alpha_{fg}\rangle u^\beta_{fg} + u^\alpha_{fg}\langle u^\beta_{fg}\rangle\right) S_{fg} - \langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle\langle S_{fg}\rangle - \langle u^\alpha_{fg}\rangle\langle u^\beta_{fg} S_{fg}\rangle - \langle u^\beta_{fg}\rangle\langle u^\alpha_{fg} S_{fg}\rangle . \qquad (6)$$

Подставляя (6) в (5), вместо (2) имеем

$$H_1 = E' + H'_{ph} + H'_{sp} + H'_{sp-ph} . \qquad (7)$$

Неоператорное слагаемое в (7) равно

$$E' = \frac{w^2}{2}\left[NA + \sum_{fg}\sum_{\alpha\beta} I^{\alpha\beta}_{fg}\left(\langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle\langle S_{fg}\rangle + 2\langle u^\alpha_{fg}\rangle\langle u^\beta_{fg} S_{fg}\rangle\right)\right].$$

В качестве фононного гамильтониана получаем

$$H'_{ph} = \frac{w}{2m}\sum_f \vec P_f^{\,2} + \frac{w^2}{2}\sum_{fg}\sum_{\alpha\beta}\Phi^{\alpha\beta}_{fg} u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg} , \qquad (8)$$

где введено обозначение перенормированной динамической матрицы

$$\Phi^{\alpha\beta}_{fg} = \frac12 A^{\alpha\beta}_{fg} - I^{\alpha\beta}_{fg}\langle S_{fg}\rangle$$

и учтено свойство $I^{\alpha\beta}_{fg} = I^{\beta\alpha}_{fg}$. Спиновая часть

$$H'_{sp} = -w^2\sum_{fg} J_{fg} S_{fg} \qquad (9)$$

содержит перенормированный обменный интеграл

$$J_{fg} = I(\vec f-\vec g) + \frac12\sum_{\alpha\beta} I^{\alpha\beta}_{fg}\langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle .$$

Последнее слагаемое гамильтониана (7) описывает спин-фононное взаимодействие

$$H'_{sp-ph} = -w^2\sum_{fg}\sum_\alpha K^\alpha_{fg} u^\alpha_{fg} S_{fg} \qquad (10)$$

с перенормированным потенциалом

$$K^\alpha_{fg} = I^\alpha_{fg} + \sum_\beta I^{\alpha\beta}_{fg}\langle u^\beta_{fg}\rangle .$$

Все перенормировки в (8), (9) и (10) включают усреднения с гамильтонианом (7), поэтому ясно, что вероятность ферромагнитной фазы w входит в этот гамильтониан весьма замысловатым образом. То же самое можно сказать и о вероятности парамагнитной фазы w_2, входящей в гамильтониан H_2 так же, как w входит в H_1.

3. ФОНОННЫЙ СПЕКТР

Фононный спектр определяется из уравнения на собственные значения

$$w\sum_g\sum_\beta \Phi^{\alpha\beta}_{fg}\, e^{-i\vec k(\vec f-\vec g)} e^\beta_{kj} = m\,\omega^2_{kj}\, e^\alpha_{kj} , \qquad (11)$$

в котором собственные векторы $\vec e_{kj}$ - это векторы поляризации с волновым вектором $\vec k$ и номером ветви j. Для собственных значений и векторов выбираем симметричные решения, когда $\omega_{kj}=\omega_{-kj}$, $\vec e_{kj} = \vec e_{-kj}$. Левая сторона (11) содержит w, что позволяет, переходя к представлению вторичного квантования

$$\vec P_f = -i\sqrt{\frac{m}{2N}}\sum_{kj}\vec e_{kj}\sqrt{\omega_{kj}}\,(b_{kj} - b^+_{-kj})\,e^{i\vec k\vec f} ,$$

$$\vec u_{fg} = \frac{1}{\sqrt{2mN}}\sum_{kj}\frac{\vec e_{kj}}{\sqrt{\omega_{kj}}}\,(b_{kj}+b^+_{-kj})\,e^{i\vec k(\vec f-\vec g)} ,$$

получить обычную форму для фононного гамильтониана

$$H'_{ph} = w\sum_{kj}\omega_{kj}\left(b^+_{kj}b_{kj}+\frac12\right) , \qquad (12)$$

отличающуюся от стандартной только фактором w. Здесь и далее используются условия ортогональности

$$\vec e_{ki}\,\vec e_{kj} = \delta_{ij} , \quad \sum_j e^\alpha_{kj}e^\beta_{kj} = \delta_{\alpha\beta} .$$

Спин-фононный гамильтониан (10) преобразуется к виду

$$H'_{sp-ph} = -\frac{w^2}{\sqrt{N}} \sum_{fg} \sum_{k_j} B^{k_j}_{fg} \left(b_{k_j} + b^+_{-k_j} \right) S_{fg} , \tag{13}$$

в котором функция

$$B^{k_j}_{fg} = \sum_\alpha K^\alpha_{fg} \frac{e^\alpha_{k_j}}{\sqrt{2m\omega_{k_j}}} e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})}$$

обладает свойствами $\left(B^{k_j}_{fg} \right)^* = B^{-k_j}_{fg} = -B^{k_j}_{-f-g} = -B^{k_j}_{fg}$.

Гамильтониан (13) переписывается в форме

$$H'_{sp-ph} = -w\sqrt{N} \sum_{k_j} P_{k_j} \left(b_{k_j} + b^+_{-k_j} \right) , \tag{14}$$

где

$$P_{k_j} = \frac{w}{N} \sum_{fg} B^{k_j}_{fg} S_{fg} , \quad P^+_{k_j} = P_{-k_j} .$$

Теперь сумму гамильтонианов (12) и (13) можно диагонализовать посредством канонического преобразования /28,29/

$$\tilde{b}_{k_j} = b_{k_j} - \frac{\sqrt{N}}{\omega_{k_j}} P_{k_j} , \tag{15}$$

в котором $\tilde{b}_{k_j}$ имеет смысл оператора одетого фонона. Преобразование (15) дает

$$H'_{ph} + H'_{sp-ph} = \tilde{H}_{ph} + H''_{sp} , \tag{16}$$

где

$$\tilde{H}_{ph} = w \sum_{k_j} \omega_{k_j} \left(\tilde{b}^+_{k_j} \tilde{b}_{k_j} + \frac{1}{2} \right) \tag{17}$$

– это гамильтониан одетых фононов, а

$$H''_{sp} = -w \sum_{k_j} \frac{N}{\omega_{k_j}} P^+_{k_j} P_{k_j} \tag{18}$$

– четырехспиновое взаимодействие, полученное ранее с помощью преобразования, аналогичного (15), в работе /30/. Несложно проверить, что

$$\langle \tilde{b}_{k_j} \rangle = 0 = \langle \tilde{b}_{k_j} \tilde{b}_{k_j} \rangle , \tag{19}$$

тогда как неодетые фононы конденсируются:

$$\left\langle \frac{b^+_{k_j}}{\sqrt{N}} \right\rangle = \frac{w}{N} \sum_{fg} \left(B^{k_j}_{fg} / \omega_{k_j} \right) \langle S_{fg} \rangle . \tag{20}$$

Корреляционная функция $\langle S_{fg} \rangle$, строго говоря, отлична от нуля при всех температурах, но точка Кюри играет для фононов роль эффективной точки конденсации, поскольку как раз вблизи этой точки и ниже ее корреляционная функция $\langle S_{fg} \rangle$ становится заметно отличной от нуля, а значит, и выражение (20).

Вспоминая, что мы имеем дело с ферро-парамагнитной смесью, необходимо признать, что появляются два типа фононов, ферро- и парамагнитные. Свойства этих фононов, строго говоря, различны, например, у них различаются спектры и векторы поляризации. А так как конденсация неодетых фононов, согласно (20), происходит тоже по-разному, то решеточная структура ферро- и парамагнитной фаз также неодинакова.

Благодаря разделению в выражении (16) фононных и спиновых переменных, средние, входящие в операторное преобразование (6) и в перенормированные взаимодействия J_{fg} и K^α_{fg}, можно упростить, беря след по фононным переменным. При этом получаем

$$\langle \tilde{b}^+_{k_j} \tilde{b}_{k_j} \rangle = \left(e^{\omega_{k_j}/\Theta} - 1 \right)^{-1} \equiv n_{k_j} ,$$

$$\langle b^+_{k_j} b_{k_j} \rangle = n_{k_j} + \frac{N}{\omega^2_{k_j}} \langle P^+_{k_j} P_{k_j} \rangle ,$$

$$\langle b_{-k_j} b_{k_j} \rangle = \langle b^+_{k_j} b^+_{-k_j} \rangle = \frac{N}{\omega^2_{k_j}} \langle P^+_{k_j} P_{k_j} \rangle ,$$

что дает

$$\langle u^\alpha_{fg} \rangle = \sqrt{\frac{2}{m}} \sum_{k_j} \frac{e^\alpha_{k_j}}{\omega^{3/2}_{k_j}} \langle P^+_{k_j} \rangle e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})} ,$$

$$\langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg} \rangle = \sum_{k_j} \frac{e^\alpha_{k_j} e^\beta_{k_j}}{mN\omega_{k_j}} \left(n_{k_j} + \frac{1}{2} + \frac{2N}{\omega^2_{k_j}} \langle P^+_{k_j} P_{k_j} \rangle \right) ,$$

$$\langle \vec{P}^2_f \rangle = \frac{m}{N} \sum_{k_j} \omega_{k_j} \left(n_{k_j} + \frac{1}{2} \right) = \frac{m}{2N} \sum_{k_j} \omega_{k_j} \coth \frac{\omega_{k_j}}{2\Theta} ,$$

$$\langle u^\alpha_{fg} S_{fg} \rangle = \sqrt{\frac{2}{m}} \sum_{k_j} \frac{e^\alpha_{k_j}}{\omega^{3/2}_{k_j}} e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})} \langle P_{k_j} S_{fg} \rangle .$$

Для того чтобы рассчитать эти средние до конца, необходимо уметь вычислять двухспиновые и четырехспиновые корреляторы, для чего, в свою очередь, нужны дальнейшие предположения относительно поведения спиновых переменных.

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ТЕР ХААРА

Одно из лучших приближений для спиновых гамильтонианов, справедливое в широкой области температур и для обеих фаз, ферро- и парамагнитной, – это приближение Тер Хаара /31-33/, смысл которого состоит в расцеплении

$$S_{fg} S_{f'g'} = \langle S_{fg} \rangle S_{f'g'} + S_{fg} \langle S_{f'g'} \rangle - \langle S_{fg} \rangle \langle S_{f'g'} \rangle . \tag{21}$$

При этом четырехспиновый коррелятор факторизуется:

$$< S_{fg}^{\prime} S_{f'g'}^{\prime} > = < S_{fg} > < S_{f'g'} > \quad , \tag{22}$$

вследствие чего

$$< P_{k_j}^{+} P_{k_j} > = |\pi_{k_j}|^2 \quad , \tag{23}$$

где

$$\pi_{k_j} \equiv < P_{k_j} > = \frac{w}{N} \sum_{fg} B_{fg}^{k_j} < S_{fg}^{\prime} > . \tag{24}$$

В результате расцепления (21) гамильтониан (18) приобретает вид

$$H_{sp}^{''} = - w \sum_{k_j} \frac{N}{\omega_{k_j}} \left(P_{k_j}^{+} \pi_{k_j} + \pi_{k_j}^{*} P_{k_j} - |\pi_{k_j}|^2 \right). \tag{25}$$

Сумма гамильтонианов (9) и (25) дает

$$H_{sp}^{'} + H_{sp}^{''} = \tilde{H}_{sp} + w \sum_{k_j} \frac{N}{\omega_{k_j}} |\pi_{k_j}|^2 , \tag{26}$$

где эффективный спиновый гамильтониан

$$\tilde{H}_{sp} = - w^2 \sum_{fg} \tilde{J}_{fg} S_{fg}^{\prime} \tag{27}$$

содержит еще раз перенормированное обменное взаимодействие

$$\tilde{J}_{fg} = J_{fg} : \sum_{k_j} \frac{2 \pi_{k_j}}{\omega_{k_j}} (B_{fg}^{k_j})^{*} . \tag{28}$$

Собирая вместе все неоператорные слагаемые

$$\tilde{E} = E' + w \sum_{k_j} \frac{N}{\omega_{k_j}} |\pi_{k_j}|^2 , \tag{29}$$

для гамильтониана (2) получаем

$$H_1 = \tilde{E} + \tilde{H}_{ph} + \tilde{H}_{sp} \quad , \tag{30}$$

куда входят (29), (17) и (27).

Для гамильтониана парамагнитной фазы проделываются точно такие же процедуры, в результате чего H_2 принимает, в приближении Тер Хаара, ту же операторную форму, что и (30), где w надо заменить на $w_2 = 1 - w$, а вычисляя коррелятор $< S_{fg}^{\prime} >_2$ надо проводить усреднение по волновым функциям парамагнитного пространства состояний $\mathcal{F}_2$.

Если уравнение движения для $< S_{fg}^{\prime} >_p$ имеет несколько решений, то выбор правильных решений, описывающих соответствующие фазы, можно осуществлять с помощью принципа ослабления корреляций Боголюбова[34]

$$< S_{fg}^{\prime} >_p = < \vec{S}_f \vec{S}_g >_p \simeq < \vec{S}_f >_p < \vec{S}_g >_p \qquad (|\vec{f} - \vec{g}| \to \infty) ,$$

в котором, согласно свойствам симметрии соответствующих пространств, $< \vec{S}_f >_1 \neq 0 , \; < \vec{S}_f >_2 \equiv 0$.

5. СРЕДНЕЕ ПОЛЕ

Наиболее очевидно различие между ферромагнитной и парамагнитной фазами проявляется в приближении среднего поля, когда

$$< S_{fg}^{\prime} >_1 = C^2 \quad , \quad < S_{fg}^{\prime} >_2 = 0 , \tag{31}$$

Здесь

$$C = | < \vec{S}_f >_1 | . \tag{32}$$

Это приближение широко используется для магнитных систем; имеются ферромагнетики, например $HoRh_4B_4$, для которых приближение среднего поля дает прекрасное согласие с экспериментом во всей области температур[35], и даже вблизи критической температуры.

Гамильтониан (27) в приближении среднего поля принимает вид

$$\tilde{H}_{sp} = - w^2 \tilde{J} \sum_{f} (2 \vec{S}_f \vec{C} - C^2) , \tag{33}$$

где

$$\tilde{J} \equiv \sum_{f} \tilde{J}_{fg} . \tag{34}$$

Эффективные динамические матрицы для ферромагнитных и парамагнитных фононов, соответственно, равны

$$\Phi_{fg1}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} A_{fg}^{\alpha\beta} - I_{fg}^{\alpha\beta} C^2 \quad , \quad \Phi_{fg2}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} A_{fg}^{\alpha\beta} . \tag{35}$$

Для средних (24) и (23) в случае ферромагнитной фазы имеем

$$< P_{k_j} >_1 = \frac{w C^2}{\sqrt{2m}} \sum_{f} \sum_{\alpha} K_{f01}^{\alpha} \frac{e_{k_j}^{\alpha}}{\sqrt{\omega_{k_j}}} e^{i \vec{k} \vec{f}} ,$$

$$< P_{k_j}^{+} P_{k_j} >_1 = \frac{w^2}{2m} C^4 \sum_{fg} \sum_{\alpha\beta} \frac{e_{k_j}^{\alpha} e_{k_j}^{\beta}}{\omega_{k_j}} K_{f01}^{\alpha} K_{g01}^{\beta} e^{i \vec{k} (\vec{f} - \vec{g})} .$$

Такие же средние для парамагнитной фазы тождественно равны нулю.

Несложно заметить, что переход от ферромагнитной к парамагнитной фазе во всех формулах можно осуществить посредством замены $C \to 0$. Значение $C_2 \equiv 0$ – это одно из возможных решений уравнения (32),

$$C = S B_S (2 w^2 \tilde{J} S C / \Theta) , \tag{36}$$

здесь S – спин, B_S – функция Бриллюэна. Ферромагнитной фазе отвечает нетривиальное решение уравнения.

Исследуем ситуацию вблизи температуры Кюри, когда $\mathcal{C} \to 0$, $w \to 1/2$. Тогда эффективный обменный интеграл (34) становится равным

$$\tilde{J} \simeq J + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta} I_{fg}^{\alpha\beta} \langle u_{fg}^{\alpha} u_{fg}^{\beta}\rangle_1 , \tag{37}$$

где

$$J \equiv \sum_f I(\vec f - \vec g), \quad \langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle_1 \simeq \sum_{kj} \frac{e^\alpha_{kj} e^\beta_{kj}}{2mN\omega_{kj1}} \coth\frac{\omega_{kj1}}{2\Theta} .$$

Критическая температура определяется уравнением

$$\Theta_c = \frac{S(S+1)}{6}\left(J + \sum_{kj}\frac{I''_{kj}}{4mN\omega_{kj1}}\coth\frac{\omega_{kj1}}{2\Theta_c}\right), \tag{38}$$

в котором

$$I''_{kj} = \sum_f\sum_{\alpha\beta} I^{\alpha\beta}_{fg} e^\alpha_{kj} e^\beta_{kj} . \tag{39}$$

Для фононного спектра, согласно (II), имеем

$$\omega^2_{kjp} = \frac{w}{m}\sum_g\sum_{\alpha\beta}\Phi^{\alpha\beta}_{0gp} e^\alpha_{kj} e^\beta_{kj} e^{i\vec k\vec g} . \tag{40}$$

Различие между ферромагнитным и парамагнитным фононными спектрами, обусловленное отличием друг от друга динамических матриц $\Phi^{\alpha\beta}_{fgp}$ (p = I,2), задаваемых равенствами (35), становится все меньше, когда система приближается к точке Кюри, в которой оба спектра сливаются:

$$\omega^2_{kj1} = \frac{1}{4m}\sum_g\sum_{\alpha\beta}A^{\alpha\beta}_{fg} e^\alpha_{kj} e^\beta_{kj} e^{i\vec k\vec g} = \omega^2_{kj2} \quad (\Theta = \Theta_c) .$$

Именно этот спектр следует подставить в (38).

Критическая температура чистого ферромагнетика, когда $w \equiv 1$, в приближении среднего поля задается уравнением

$$T_c = \frac{2S(S+1)}{3}\left(J + \sum_{kj}\frac{I''_{kj}}{mN\varepsilon_{kj}}\coth\frac{\varepsilon_{kj}}{2T_c}\right),$$

в котором спектр фононов чистой фазы $\varepsilon_{kj} = \omega_{kj1}\sqrt{2}$. Следовательно, точка Кюри гетерофазного ферромагнетика лежит ниже соответствующей точки чистого ферромагнетика: $\Theta_c < T_c$. Для более детального сравнения этих температур надо решить уравнения (38) и знать знак $I^{\alpha\beta}_{fg}$.

Производные I^α_{fg} и $I^{\alpha\beta}_{fg}$ от обменного интеграла $I(|\vec f - \vec g|)$ можно выразить через величины

$$I^{(1)}_{fg} \equiv \frac{\partial I(|\vec f-\vec g|)}{\partial|\vec f-\vec g|}, \quad I^{(2)}_{fg} \equiv \frac{\partial^2 I(|\vec f-\vec g|)}{\partial|\vec f-\vec g|^2} .$$

При этом

$$I^\alpha_{f0} = I^{(1)}_{f0}\frac{f_\alpha}{f}, \quad f \equiv |\vec f| ,$$

$$I^{\alpha\beta}_{f0} = I^{(2)}_{f0}\frac{f_\alpha f_\beta}{f^2} + I^{(1)}_{f0}\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{f_\alpha f_\beta}{f^2}\right) .$$

Если для обменного интеграла взять часто используемую [36] форму $I(f) = I(0)\exp(-f^2/2\sigma_0^2)$, тогда

$$\frac{f I^{(1)}_{f0}}{I(f)} = -\frac{f^2}{\sigma_0^2}, \quad \frac{f^2 I^{(2)}_{f0}}{I(f)} = \frac{f^2}{\sigma_0^2}\left(\frac{f^2}{\sigma_0^2} - 1\right) .$$

Отсюда следует, что $I^{(1)}_{f0}$ отрицательно, но $I^{(2)}_{f0}$ может быть и отрицательно, и положительно, в зависимости от расстояния f и радиуса сил σ_0.

6. СКОРОСТЬ ЗВУКА

Посмотрим, какими особенностями обладает скорость звука в случае сосуществования ферромагнитной и парамагнитной фаз.

Скорость звука j - й поляризации в p - й фазе определяется как

$$s_{jp} = \lim_{k\to0}\omega_{kjp}/k . \tag{41}$$

Отсюда, в соответствии с (40), имеем

$$s_{jp} = w_p^{1/2} c_{jp} , \tag{42}$$

где

$$c_{jp} = \lim_{k\to0}\left[-\frac{1}{2m}\sum_g\sum_{\alpha\beta}\Phi^{\alpha\beta}_{0gp}\frac{(\vec k\vec g)^2}{k^2}e^\alpha_{kj}e^\beta_{kj}\right]^{1/2} . \tag{43}$$

Динамическая матрица в общем случае имеет вид

$$\Phi^{\alpha\beta}_{fgp} = \frac12 A^{\alpha\beta}_{fg} - I^{\alpha\beta}_{fg}\langle S_f S_g\rangle_p , \tag{44}$$

а в приближении среднего поля (44) переходит в (35).

Эффективная скорость звука для j - й поляризации во всем образце может быть определена как

$$s_j = \lim_{k\to0}\frac1k\sum_p\frac{\partial}{\partial n_{kjp}}\langle\tilde H^p_{ph}\rangle . \tag{45}$$

Здесь $\tilde H^p_{ph}$ - гамильтониан одетых фононов (I7) для p - й фазы. Из определения (45) вытекает

$$s_j = w_1 s_{j1} + w_2 s_{j2} = w_1^{3/2}c_{j1} + w_2^{3/2}c_{j2} . \tag{46}$$

Для выяснения смысла (46) введем среднюю скорость звука следующим образом. Пусть длина пути, проходимого звуком,- это ℓ, а величины ℓ_1 и ℓ_2 – это длины путей в соответствующих фазах ($\ell = \ell_1 + \ell_2$), в которых звук проходит со скоростями c_{j1} и c_{j2} ; тогда средняя скорость звука равна

$$s_j' = c_{j1} c_{j2} / (w_1 c_{j1} + w_2 c_{j2}) , \tag{47}$$

где использована пропорциональность $\ell_p / \ell \sim w_p$, так чтобы в случае одинаковых скоростей звука

$$c_{j1} = c_{j2} = c_j \tag{48}$$

средняя скорость (47) совпадала с (48).

Очевидно, что скорости (46) и (47) неодинаковы. Различие между ними становится более явным в случае (48), когда

$$s_j = c_j (w_1^{3/2} + w_2^{3/2}) , \quad s_j' = c_j . \tag{49}$$

Отсюда следует, что $s_j < s_j'$ $(w \neq 0, 1)$. Это сравнение позволяет предложить следующую интерпретацию скоростей (46) и (47). При вычислении скорости s_j неявно принимается во внимание рассеяние звука на межфазных границах, тогда как в определении скорости s_j' никакие границы не учтены. Вот почему в случае (48) $s_j < s_j'$. Поэтому та скорость, которая реально меряется, – это именно (46), но не (47).

Необходимо отметить, что равенство (48) физически вполне осмысленно. Это связано с тем, что магнитострикционные взаимодействия $I_{fg}^{\alpha} a$, $I_{fg}^{\alpha\beta} a^2$ малы по сравнению с $A_{fg}^{\alpha\beta} a^2$, где a – расстояние между ближайшими соседями. Например, в результате измерения /37/ упругих постоянных Ni и сплава $Fe_x Ni_{1-x}$ было найдено, что $|I_{0a}^{\alpha}| a \sim \sim |I_{0a}^{\alpha\beta}| a^2 \sim 10^2 K$, тогда как $|A_{0a}^{\alpha\beta}| a^2 \sim 10^4 K$. Следовательно, вклад намагниченности в фононные характеристики имеет порядок $|I_{0a}^{\alpha} / A_{0a}^{\alpha\beta} a| \sim |I_{0a}^{\alpha\beta} / A_{0a}^{\alpha\beta}| \sim 10^{-2}$. Магнитострикционные эффекты малы также и для других магнитных веществ /38/ за исключением, может быть, лишь некоторых, как, например, $Fe_3 Pt$, для которого наблюдались /39,40/ значительные аномалии модулей Юнга.

Таким образом, скорости c_{jp} , определенные в (43), почти одинаковы для обеих фаз, ферромагнитной и парамагнитной. Вот почему равенство (48) приближенно выполняется при всех температурах, как выше, так и ниже точки фазового перехода.

При критической температуре, когда по определению

$$w_1 = w_2 = \frac{1}{2} , \quad < \vec{S}_f >_1 = < \vec{S}_f >_2 = 0 \quad (\Theta = \Theta_c) ,$$

эффективная скорость звука s_j минимальна: $s_j / c_j = 1/\sqrt{2} = 0{,}707$. Уменьшение скорости звука, вызванное рассеянием на межфазных границах, можно характеризовать коэффициентом

$$\delta s_j \equiv (s_j - s_j') / s_j' \cong w^{3/2} + (1-w)^{3/2} - 1 . \tag{50}$$

Когда система однофазна, то есть w равно или нулю, или единице, тогда никаких межфазных границ нет, соответственно $\delta s_j = 0$. Уменьшение скорости звука максимально в критической точке, что соответствует критическому рассеянию, когда $\delta s_j = -0{,}293$ $(\Theta = \Theta_c)$.

Проведенный анализ показывает, что само по себе наличие парамагнитных зародышей в ферромагнетике гораздо сильнее сказывается на фононных характеристиках, чем простой учет спин-фононного взаимодействия.

7. ФАЗОВЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ

Уравнение на фазовые вероятности получается в результате минимизации термодинамического потенциала $y = -\frac{1}{N} \ln \mathrm{Tr} \exp[-(H_1 \oplus H_2)/\Theta]$. Гамильтонианы H_p (p = I,2), которые надо сюда подставить, в приближении Тер Хаара имеют вид

$$H_p = \tilde{E}_p + \tilde{H}_{ph}^{p} + \tilde{H}_{sp}^{p} ; \tag{5I}$$

первое слагаемое в (5I) – это

$$\tilde{E}_p = F_p' + \sum_{kj} \frac{w_p^3}{N \omega_{kjp}} \left| \sum_{fg} B_{fgp}^{kj} < S_{fg}^{\alpha} >_p \right|^2 , \tag{52}$$

второе слагаемое – гамильтониан одетых фононов

$$\tilde{H}_{ph}^{p} = w_p \sum_{kj} \omega_{kjp} (\tilde{b}_{kj}^{+} \tilde{b}_{kj} + \frac{1}{2}) , \tag{53}$$

в котором спектр, определяемый равенством (40), зависит от типа фазы, третье слагаемое в (5I) – эффективный спиновый гамильтониан

$$\tilde{H}_{sp}^{p} = - w_p^2 \sum_{fg} \tilde{J}_{fgp} S_{fg} . \tag{54}$$

Так что в качестве термодинамического потенциала имеем

$$y = \frac{1}{N\Theta} (\tilde{E}_1 + \tilde{E}_2) + \frac{1}{N} \sum_{kj} \ln \left(2 \sinh \frac{\omega_{kjp}}{2\Theta} \right) - \frac{1}{N} \ln \mathrm{Tr} \exp\left[- \frac{1}{\Theta} (\tilde{H}_{sp}^{1} + \tilde{H}_{sp}^{2}) \right] . \tag{55}$$

Совершенно ясно, что уравнение $\partial y / \partial w = 0$, определяющее вероятность ферромагнитной фазы, выглядит исключительно сложно. Можно упростить это уравнение, полагая $A_{0a}^{\alpha\beta} \sim A(a) / a^2$ и беря $I(a) \sim 10^3 K$, что верно для большинства магнетиков. Тогда, привлекая оценки пункта 6, видим, что $I(a)/A(a) \sim 10^{-1}$. Учтем также, что $\langle u^\alpha_{fg}\rangle_p \sim \Delta\ell_p$, $\langle u^\alpha_{fg} u^\beta_{fg}\rangle_p \sim r_p^2 \delta_{\alpha\beta} + \Delta\ell_p^2$, где $\Delta\ell_p$ – изменение расстояния между ближайшими соседями вследствие магнитострикции, а r_p^2 – среднее квадратичное отклонение атома от узла. Для обычных твердых тел $r_p/a \sim 10^{-1}$, $\Delta\ell_p/a \sim 10^{-5}$. Прибегая снова к оценкам пункта 6, приходим к выводу, что

$$\frac{I^{\alpha\beta}_{oa}\langle u^\alpha_{oa} u^\beta_{oa}\rangle_p}{A(a)} \sim 10^{-4}, \qquad \frac{I^{\alpha\beta}_{oa}\langle u^\alpha_{oa}\rangle_p\langle u^\beta_{oa}\rangle_p}{A(a)} \sim 10^{-12},$$

$$\frac{I^{\alpha\beta}_{oa}\langle u^\alpha_{oa} u^\beta_{oa}\rangle_p}{I(a)} \sim 10^{-3}, \qquad \frac{(I^\alpha_{oa})^2}{A(a)A^{\alpha\beta}_{oa}} \sim 10^{-4}.$$

Поэтому в выражениях (51)-(55) можно опустить слагаемые, содержащие I^α_{fg} и $I^{\alpha\beta}_{fg}$. Это дает $\tilde E_p \simeq \frac12 w_p^2 NA$, $\tilde J_{fgp} \simeq I(\vec f - \vec g)$. Фононный спектр приобретает вид

$$\omega_{kjp} \simeq w_p^{1/2}\varepsilon_{kj} \quad \left(\varepsilon^2_{kj} \equiv \frac{1}{2m}\sum_g\sum_{\alpha\beta} A^{\alpha\beta}_{og} e^\alpha_{kj} e^\beta_{kj} e^{i\vec k\vec g}\right). \quad (56)$$

Дифференцируя (55) по w, получаем уравнение для вероятности ферромагнитной фазы

$$w = \frac{A + 2I_2 + \Lambda_2 - \Lambda_1}{2(A+I_1+I_2)}, \quad (57)$$

в котором

$$I_p \equiv -\frac1N\sum_{fg} I(\vec f-\vec g)\langle S_{fg}\rangle_p, \quad \Lambda_p \equiv \frac{3w_p^{1/2}}{4N}\sum_{kj}\varepsilon_{kj}\coth\frac{w_p^{1/2}\varepsilon_{kj}}{2\Theta}.$$

В приближении среднего поля $I_1 = -JC^2$, $I_2 = 0$, и (57) дает

$$w = \frac12(A + \Lambda_2 - \Lambda_1)/(A - JC^2), \quad (58)$$

здесь C задается уравнением (36).

Для качественного исследования поведения вероятности (58) воспользуемся приближением Эйнштейна для фононных переменных: $\varepsilon_{kj} = \omega_E$, $\frac1N\sum_{kj} 1 = 3$. В этом приближении

$$\Lambda_p = \frac94 w_p^{1/2}\omega_E \coth\frac{w_p^{3/2}\omega_E}{2\Theta}.$$

При низких температурах, когда $\frac12(1-w)^{3/2}\omega_E < \Theta < \frac12 w^{3/2}\omega_E$, получаем

$$\Lambda_1 \simeq \frac94 w^{1/2}\omega_E\left[1+2\exp\left(-\frac{w^{3/2}\omega_E}{\Theta}\right)\right], \quad \Lambda_2 \simeq \frac32\left[\frac{3\Theta}{1-w} + \frac{(1-w)^2\omega_E^2}{4\Theta}\right].$$

Поэтому (58) совместно с (36) дают

$$w \simeq 1 - \frac{\Theta}{\gamma}, \quad \Theta < \min\left\{\frac12\omega_E,\ 4\frac{\gamma^2}{\omega_E^2}\right\}, \quad (59)$$

где $\gamma \equiv \frac{1}{9}A + \frac12\omega_E - \frac49 JS^2 > 0$. Выражение (59) показывает, что при нулевой температуре вся система находится в чисто ферромагнитном состоянии.

При высоких температурах, когда $\Theta > \frac12 w^{3/2}\omega_E$, для обеих фаз $\Lambda_p \simeq 9\Theta/2w_p$. Подставляя в (36) разложение для функции Бриллюэна

$$B_S(x) \simeq \frac{S+1}{3S}x - \frac{(S+1)(2S^2+2S+1)}{90S^3}x^3 \quad (x \ll 1),$$

находим критическое поведение параметра порядка $C \simeq A_c(-\tau)^{1/2}$, где $\tau \equiv (\Theta-\Theta_c)/\Theta_c$. Вероятность ферромагнитной фазы слева от критической температуры ведет себя следующим образом:

$$w \simeq \frac12 + A_w(-\tau) \quad (\tau \to -0). \quad (60)$$

Явные выражения для критических амплитуд A_c и A_w довольно громоздки, поэтому они здесь не выписаны.

Существование парамагнитных зародышей в магнетиках, как было показано ранее [6-8], может изменить род перехода со второго на первый. Это дает возможность объяснить имеющиеся во многих магнетиках [41] переходы первого рода как результат гетерофазных флуктуаций. В модели [29] без этих флуктуаций смена рода перехода происходит лишь при нереалистично большом спин-фононном взаимодействии, когда безразмерная константа этого взаимодействия порядка единицы. Однако, как следует из приведенного выше рассмотрения, эта константа имеет порядок $(I^\alpha_{oa})^2/JA^{\alpha\beta}_{oa} \sim 10^{-3}$. Поэтому маловероятно, что в реальных магнетиках спин-фононное взаимодействие играет заметную роль, приводя к смене рода перехода.

8. ЭФФЕКТ МЁССБАУЭРА

В том случае, когда вещество представляет собой смесь двух фаз, вероятность эффекта Мёссбауэра имеет вид

$$f_M = w_1 f_{M1} + w_2 f_{M2}, \quad (51)$$

где парциальная вероятность эффекта для фазы p – это $f_{Mp} = \exp(-2W_p)$, $W_p = \frac12 q^2 r_p^2$, q – волновой вектор гамма-кванта, r_p^2 – среднее квадратичное отклонение атома для p – й фазы. Рассмотрим величину

$$x_p^2 = \frac13\sum_\alpha\langle u^\alpha_{fg} u^\alpha_{fg}\rangle_p. \quad (52)$$

Используя результаты пункта 3, получаем

$$x_p^2 = \frac{1}{6mN}\sum_{k_j}\frac{1}{\omega_{k_j p}}\left[\coth\frac{\omega_{k_j p}}{2\Theta} + \frac{4N}{\omega_{k_j p}^2}\langle P_{k_j}^+ P_{k_j}\rangle_p\right].$$

В приближении Тер Хаара (см. пункт 4) находим

$$x_p^2 = \frac{1}{6mN}\sum_{k_j}\frac{1}{\omega_{k_j p}}\coth\frac{\omega_{k_j p}}{2\Theta} + \Delta\ell_p^2, \qquad (53)$$

где магнитострикция дается выражением

$$\Delta\ell_p^2 = \frac13\sum_\alpha \left|\langle u^\alpha_{fg}\rangle_p\right|^2 = \frac{2w_p^2}{3mN^2}\sum_{k_j}\frac{1}{\omega_{k_j}}\left|\sum_{fg} B^{k_j}_{fgp}\langle S_{fg}\rangle_p\right|^2. \qquad (54)$$

Для получения более конкретных формул воспользуемся приближением Дебая:

$$\omega_{k_j p} \to \begin{cases} s_p k, & k \le k_D,\\ 0, & k > k_D,\end{cases} \qquad (k_D^3 \equiv 6\pi^2\rho), \qquad (55)$$

где $\rho \equiv N/V$ – средняя плотность частиц, изотропная скорость звука, в соответствии с (41)-(43), $s_p \equiv \frac13\sum_j s_{jp} = w_p^{1/2} c_p$, $c_p \equiv \frac13\sum_j c_{jp}$, кроме того, во всех выражениях надо сделать замену анизотропных величин на изотропные: $A^{\alpha\beta}_{fg} \to A''_{fg}$, $I^{\alpha}_{fg} \to I'_{fg}$, $I^{\alpha\beta}_{fg} \to I''_{fg}$. Эффективная температура Дебая для p – й фазы $\Theta_D = s_p k_D$. При переходе к к термодинамическому пределу делаем обычную замену $\frac1N\sum_k \to \frac1\rho\int\frac{d\vec k}{(2\pi)^3}$. Тогда для скорости звука p – й фазы находим

$$s_p^2 = w_p c_p^2 = \frac{w_p}{2m}\left(D + I''_p\right), \qquad (56)$$

а для магнитострикции (54) имеем

$$\Delta\ell_p^2 = u_p^2, \quad u_p \equiv \langle u^\alpha_{0g}\rangle_p = -I'_p/(D+4I''_p); \qquad (57)$$

здесь использованы обозначения

$$D \equiv -\frac12\sum_g A''_{0g} r_g^2, \quad r_g^2 \equiv \lim_{k\to0}(\vec k \vec g)^2/k^2,$$

$$I'_p \equiv \sum_g I'_{0g} r_g^2\langle S_{0g}\rangle_p, \quad I''_p = \sum_g I''_{0g} r_g^2 \langle S_{0g}\rangle_p.$$

Таким образом, эффективная дебаевская температура p – й фазы в случае смеси нескольких фаз равна

$$\Theta_p = w_p^{1/2} T_D \left(1 + I''_p/D\right)^{1/2}, \quad T_D \equiv (D/2m)^{1/2} k_D. \qquad (58)$$

Выражение, напоминающее (58), было получено Башкировым и Селютиным /42,43/, но для чистой ферромагнитной фазы и в приближении ближайших соседей.

Среднее квадратичное отклонение (53) в дебаевском приближении

$$x_p^2 = \frac{6\Theta}{m\Theta_p^3}\int_0^{\Theta_p/2\Theta}\omega\coth\omega\,d\omega + \Delta\ell_p^2 \equiv r_p^2 + \Delta\ell_p^2.$$

Как было показано выше, значение I''_p пренебрежимо мало по сравнению с D. Относительная магнитострикция $\Delta\ell_p/a \sim 10^{-5}$, тогда как относительное среднее отклонение $r_p/a \sim 10^{-1}$. Следовательно, $\Delta\ell_p^2/r_p^2 \sim 10^{-8}$. Принимая во внимание эти оценки, имеем

$$r_p^2 \cong x_p^2 \simeq \begin{cases} 3/4m\Theta_p, & 2\pi\Theta \ll \Theta_p,\\ (3\Theta/m\Theta_p^2)(1+\Theta_p^2/36\Theta^2), & 2\pi\Theta \gg \Theta_p,\end{cases}$$

причем эффективная дебаевская температура

$$\Theta_p \simeq w_p^{1/2} T_D. \qquad (59)$$

Из выражения (59) видно, что эффективная температура Дебая в области сосуществования, где $w_p < 1$, становится меньше, чем в чистой фазе в основном вследствие неоднородности системы, но не из-за появления дальнего магнитного порядка. Более того, само возникновение гетерофазных состояний с зародышами, имеющими разный магнитный порядок, как раз и обязано неоднородности в реальном пространстве. Эта неоднородность, провоцирующая формирование гетерофазных флуктуаций, может быть вызвана, например, локальными флуктуациями температуры и энтропии.

Смягчение температуры Дебая (59) в гетерофазной температурной области ведет к увеличению среднего квадратичного отклонения (53) и, вследствие этого, к уменьшению вероятности эффекта Мёссбауэра (51), которая является функцией фазовой концентрации w, $f_M = f_M(w)$. Изменение этой функции удобно характеризовать относительной величиной

$$\delta f_M(w) = \frac{f_M(w) - f_M(1)}{f_M(1)}. \qquad (60)$$

Минимум выражения (60) приходится на $w = 1/2$, то есть как раз на критическую температуру Θ_c, в которой

$$\delta f_M\left(\tfrac12\right) \simeq \begin{cases} 1 - f_M(1)^{0,24}, & \Theta_c < T_D/2\pi,\\ 1 - f_M(1), & \Theta_c > T_D/2\pi.\end{cases}$$

Вне гетерофазной области, то есть ниже той температуры, когда зародыши уже не наблюдаются, и выше верхней точки нуклеации /44,45/, где фазы являются практически чистыми, величина (60) равна нулю.

Сравним полученные результаты с экспериментами /46/ на гранатах $Y_3Fe_5O_{12}$ и $Y_3Fe_4Al_1O_{12}$. Их критические температуры – 548 K и 415 K, соответственно, а температуры Дебая для чистых состояний – 378 K (октаэдральная структура) или 343 K (тетраэдральная структура) для $Y_3Fe_5O_{12}$, и 467 K (октаэдральная структура) или 405 K (тетраэдральная структура) для $Y_3Fe_4Al_1O_{12}$. Полагая, как и в эксперименте /46/, вероятность эффекта Мёссбауэра чистых состояний вблизи температуры Кюри, равной $f_M(1) \approx f_M(0) \approx 0{,}7$, для величины (60) находим $\delta f_M(\frac{1}{2}) \approx 0{,}3$, что совпадает с экспериментальными данными /46/.

Для релятивистских тепловых сдвигов мёссбауэровских спектров

$$\delta_p = -\frac{1}{N}\sum_{kj}\frac{\omega_{kjp}}{4mc^2}\coth\frac{\omega_{kjp}}{2\Theta},$$

которые в дебаевском приближении имеют вид

$$\delta_p = -\frac{36\,\Theta^4}{mc^2\,\Theta_p^3}\int_0^{\Theta_p/2\Theta}\omega^3\coth\omega\,d\omega,$$

получаем

$$\delta_p \simeq \begin{cases} -9w_p^{1/2}\,T_D, & \Theta < T_D/2\pi, \\ -3\Theta/2mc^2, & \Theta > T_D/2\pi. \end{cases}$$

Для большинства магнетиков $T_D/2\pi\Theta_c \sim 10^{-1}$, а относительное изменение теплового сдвига в гетерофазной области, сравнительно с его значением для чистого состояния, не превышает 1%, в то время как точность эксперимента не выше 1%.

Практически такой же прогиб вероятности эффекта Мёссбауэра при температуре перехода наблюдался /47/ в сегнетоэлектрике $BaTiO_3$. Эта аномалия не нашла никакого достаточно разумного объяснения, как это следует из обсуждения в работах /48,49/. В нашем же подходе этот прогиб вероятности эффекта в точке перехода сегнетоэлектрика может быть объяснен абсолютно так же, как и в случае магнетиков. Причина этого прогиба точно та же - существование гетерофазных флуктуаций вблизи сегнетоэлектрического фазового перехода /50/. Относительная величина прогиба, измеренная для сегнетоэлектрика /47/, тоже одинакова: $\delta f_M(\frac{1}{2}) \approx 0{,}3$.

Автор с большим удовольствием и признательностью вспоминает очень полезные обсуждения с Д. Тер Хааром. Множество ценных замечаний А.М. Ахметели, Н.М. Плакиды, А.С. Шумовского и И.Р. Юхновского также помогли в работе. Мёссбауэровские эксперименты обсуждались с М.Н. Успенским, которому автор выражает глубокую благодарность.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юкалов В.И. - ТМФ, 1976, 26, с. 403.
2. Yukalov V.I. - Phys. Lett., 1981, A81, p. 249.
3. Yukalov V.I. - Physica, 1981, A108, p. 402.
4. Yukalov V.I. - Phys. Rev., 1985, B32, p. 436.
5. Yukalov V.I. - Physica, 1987, A141, p. 352.
6. Yukalov V.I. - Phys. Lett., 1981, A85, p. 68.
7. Yukalov V.I. - Comm. Oxford Univ., DTP 47-81, Oxford Univ., DTP 47-81, Oxford, 1981.
8. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. - Physica, 1982, A110, p. 518.
9. Apostolov A., Christov C., Mihov M., Mildarz T., Shumryev V. - Int. Conf. Magn., Kyoto, 1982, p. 137.
10. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. - Chem. Phys. Lett., 1981, 83, p.582.
11. Изюмов Ю.А., Озеров Р.Р. - Магнитная нейтронография. Наука, Москва, 1966.
12. Bacon G.E. - Neutron Diffraction, Clarendon, Oxford, 1975.
13. Batterman B., Cole H. - Rev. Mod. Phys., 1964, 36, p. 681.
14. Suzuki H., Harada J. - Int. Conf. Magn., Kyoto, 1982, p. 117.
15. Анфисов А.Б., Николаев В.И. - Письма ЖЭТФ, 1966, 4, с. 315.
16. Uen T.M., Tseng P.K. - Phys. Rev., 1982, B25, p. 1848.
17. Шумовский А.С., Юкалов В.И. - В кн.: Проблемы статистической механики. ОИЯИ Д17-81-758. Дубна, 1981, с. 238.
18. Yukalov V.I. - Physica, 1987, A144, p. 369.
19. Каган Ю.М., Маслов В.А. - ЖЭТФ, 1961, 41, с. 1296.
20. Каган Ю.М., Иосилевский Ю. - ЖЭТФ, 1963, 44, с. 284.
21. Иосилевский Ю. Каган Ю. - ЖЭТФ, 1964, 45, с. 2165.
22. Тябликов С.В. - Методы квантовой теории магнетизма. Наука, Москва, 1975.
23. Ахметели А.М., Шумовский А.С., Юкалов В.И. - В кн.: Проблемы статистической механики. ОИЯИ Д17-81-758, Дубна, 1981, с. 300.
24. Ахметели А.М., Шумовский А.С., Юкалов В.И. - В кн.: Тезисы докладов конференции по статистической физике, Львов, Изд-во АН УССР, Киев, 1982, с.11.
25. Yukalov V.I. - Phys. Lett., 1987, A125, p. 95.
26. Yukalov V.I. - Physica, 1982, A110, p. 247.
27. Шумовский А.С., Юкалов В.И., - ДАН СССР, 1980, 252, с. 581.
28. Kudryavtsev I.K., Shumovsky A.S. - Phys. Lett., 1978, A66, p.501.
29. Кудрявцев И.К., Шумовский А.С. - ТМФ, 1979, 41, с. 103.
30. Вакс В.Г., Ларкин А.И. - ЖЭТФ, 1965, 49, с. 975.
31. Ter Haar D. - Lectures on Selected Topics in Statistical Mechanics, Pergamon, Oxford, 1977.

32. Knapp R.H., Ter Haar D. - J. Stat. Phys., 1969, 1, p. 149.
33. Кнапп Р., Тер Хаар Д. - В кн.: Проблемы теоретической физики. Наука, Москва, 1969, с. 341.
34. Bogolubov N.N. - Lectures on Quantum Statistics, v. 2, Gordon and Breach, New York, 1970.
35. Ott H.R. et al. - Phys. Rev., 1982, B25, p. 477.
36. Dunlap B.D., Dash J.G. - Phys. Rev., 1967, 155, p. 460.
37. Alers G., Neighbours J., Sato H. - J. Phys. Chem. Sol., 1960,13,p.40.
38. Сычев В.В. - Сложные термодинамические системы. Энергия, Москва, 1977.
39. Wohlfarth E.P. - J. Phys., 1976, F6, p. L59.
40. Hausch G. - J. Phys., 1977, F7, p. L127.
41. Гражданкина Н.П. - УФН, 1968, 96, с. 291.
42. Башкиров Ш.Ш., Селютин Г.Я. - Уч. зап. КГУ, 1967, 127, с. 27.
43. Selyutin G.Y. - Phys. Stat. Sol., 1974, B64, p. 285.
44. Юкалов В.И. - В кн.: Проблемы статистической механики, ОИЯИ Д17-11490, Дубна, 1978, с. 437.
45. Юкалов В.И. - ОИЯИ Р17-87-127, Дубна, 1987.
46. Алексеев Л.А., Грузин П.Л., Успенский М.Н., Грязнов М.Р. - Письма ЖЭТФ, 1971, 14, с. 292.
47. Bhide V.G., Multani M.S. - Phys. Rev., 1965, 139, p. 1983.
48. Meissner G., Binder K. - Phys. Rev., 1975, B12, p. 3948.
49. Binder K., Meissner G., Mais H. - Phys. Rev., 1976, B13, p.4890.
50. Юкалов В.И. - ОИЯИ Р17-87-229, Дубна, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 июля 1988 года.

Юкалов В.И. Р17-88-545

Спин-фононные взаимодействия в гетерофазных ферромагнетиках

Исследовано совместное влияние гетерофазных флуктуаций и фононных возбуждений на решеточные и магнитные свойства ферромагнетиков. Для введения фононных переменных использована процедура, сохраняющая трансляционную симметрию. Спиновые переменные рассматриваются в приближении Тер Хаара и в приближении среднего поля. Находится перенормировка скорости звука, обусловленная как спин-фононной связью, так и гетерофазными флуктуациями. Численные оценки показывают, что последние играют решающую роль вблизи критической точки. Вычислена вероятность эффекта Мессбауэра и предложено объяснение аномального прогиба в точке перехода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод автора

Yukalov V.I. P17-88-545

Spin-Phonon Interactions in Heterophase Ferromagnets

The combined influence of heterophase fluctuations and phonon excitations on lattice and magnetic properties of ferromagnets is investigated. A new procedure for introducing phonon variables preserving the translational symmetry is developed. Spin variables are treated in the ter Haar approximation and in the mean-field approximation. The renormalization of the sound velocity due to both the spin-phonon coupling and heterophase fluctuations is obtained; the latter are found by numerical estimates to be more important near the critical point than the former. The Mössbauer-effect probability is calculated and its anomalous sagging near transition points is explained.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988