

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Б 19

P17-88-788

А.А.Бакасов, В.И.Юкалов

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПИНОВЫХ
ПЕРЕОРИЕНТАЦИЙ - ГЕТЕРОФАЗНЫЙ ПОДХОД
И ОСНОВНАЯ МОДЕЛЬ

Направлено в журнал "Physica A"

1988

I. Введение

В этой и двух последующих работах будет построена микроскопическая теория спонтанных спиновых переориентаций. Она является микроскопической, а не феноменологической, поскольку основана на точном решении анизотропной гетерофазной модели Гейзенберга.

Построение микроскопической теории спонтанных спиновых переориентаций в рамках достаточно реалистичной, точно решаемой модели является актуальной задачей. Последнее обусловлено тем, что существующие теории этого явления (см., например, /I/) носят феноменологический характер. Достижения феноменологической теории бесспорны (см. подраздел I.2), но ориентироваться в накопленном ей обширном материале удобнее с помощью точно решаемых моделей, которые проясляют границы применимости и взаимную совместность используемых физических аппроксимаций.

Принципиальным моментом развиваемой нами теории является предположение о гетерофазном (или полифазном) характере спонтанных спиновых переориентаций. Если обратиться к эксперименту (см. подраздел I.I), становится ясно, что это отражает одну из основных характерных черт исследуемого явления.

Микроскопическая теория гетерофазных состояний интенсивно развивалась в последнее десятилетие. Первые работы появились в 1976 году /2,3/. Строгий математический статус теории гетерофазных состояний приобрела в работах /4-7/. Для описания спонтанных спиновых переориен-

таций формализм теории гетерофазных состояний следует применить к конкретной микроскопической модели магнетика. В качестве основной модели была выбрана модель анизотропного ферромагнетика Гейзенберга со взаимодействием бесконечного радиуса. Опуская здесь подробности, обсуждаемые в разделе I.3, отметим два обстоятельства, продиктовавшие такой выбор. Во-первых, рассмотренная нами гетерофазная модель, по всей видимости, является пока единственной точно решенной моделью, описывающей широкую совокупность различных спонтанных спиновых переориентаций, и поэтому при выборе исходной модели естественным было требование ее решаемости в рамках известных методов. Во-вторых, результаты точного решения этой гетерофазной модели можно, при желании, легко сравнить с результатами феноменологической теории /I/, базирующейся на разложении Ландау, поскольку в области критической точки модель Гейзенберга со взаимодействием бесконечного радиуса и теория Ландау для ферромагнетиков эквивалентны /8/.

Точно решаемых моделей, описывающих спиновые системы, не так много /9,10/. Особенность нашей модели, как будет далее показано, состоит в том, что она адекватно описывает основные свойства спиновых переориентационных переходов, не связанные с влиянием фононов.

I.I. Экспериментальный статус явления

Спонтанные спиновые переориентации, или изменение не только величины, но и направления намагниченности образца в нулевом внешнем поле при изменении температуры, исследуются экспериментально уже в течение длительного времени. Об экспериментальном наблюдении этого явления упоминалось еще в /II/. Число работ, посвященных исследованию спонтанных спиновых переориентаций, особенно возросло в связи с изучением ферромагнетиков и антиферромагнетиков. Достаточно полный для своего времени обзор имеется в книге /I/. Выделим главные, с нашей точки зрения, физические особенности процессов спонтанных спиновых переориентаций и приведем в качестве иллюстраций некоторые типичные экспериментальные работы.

а) Состояния вещества, в которых наблюдаются спонтанные спиновые переориентации, являются гетерофазными, поскольку представляют смесь различных фаз, наблюдаемых с помощью магнитооптического эффекта Фарадея, методами ЯМР, нейтронграфии и мессбауэровской спектроскопии.

б) Число спинов, эффективно участвующих в той или иной фазе, т.е. концентрация этой фазы, является экспериментально наблюдаемой величиной. Основным методом определения концентраций фаз - ЯМР. Считается, что интенсивность пиков в спектре ЯМР пропорциональна квадрату концентраций фаз. Определение концентраций фаз также возможно

на основе рентгеноскопических и нейтронографических исследований с последующей машинной обработкой.

в) Температурные интервалы, в которых происходят спонтанные спиновые переориентации и сосуществуют различные фазы, являются достаточно большими – они составляют от единиц до десятков градусов. Это устанавливается всеми вышеперечисленными методами.

г) В экспериментах наблюдается нуклеация – явление возникновения зародышей новой фазы в объеме магнетика. Достаточно наглядным способом наблюдения является магнитооптический эффект Фарадея.

д) Наблюдаются аномалии теплоемкости и других восприимчивостей, не совпадающие с известными в рамках уже существующих теорий точками фазовых переходов. К вышеперечисленным методам при наблюдении таких аномалий добавляются калориметрические и акустические методы.

е) Наблюдается смена рода фазового перехода при изменении констант взаимодействия. Изменение величин констант взаимодействия достигается в эксперименте, например, введением примесей.

Вышеуказанные свойства были установлены в целом ряде экспериментов. Так, в ^{/12/} при повышении температуры в иттрий-железистых гранатах с примесью четырехвалентного рутения упорядоченная фаза с направлением намагниченности $[100]$ сменялась смесью фаз с направлениями намагниченностей $[111]$ и $[100]$ соответственно. В сплавах $PtFe_{1-x}$, как было установлено в ^{/13/}, по мере повышения температуры вектор намагниченности эволюционировал от направления $[001]$ к $[110]$ и далее к $[111]$, причем эта переориентация сопровождалась появлением зародышей фаз с новым направлением намагниченности. Кроме того, с увеличением содержания Fe в сплаве род фазового перехода изменялся. В работах ^{/14,15/} спонтанные спиновые переориентации и появление зародышей новых фаз наблюдались визуально. В $DyFeO_3$ ^{/14/} при понижении температуры увеличивались число и размеры доменов с намагниченностями, направления которых были неколлинеарны направлению намагниченности при более высоких температурах. В $ErFeO_3$ ^{/15/} с понижением температуры исчезали области размагничивания, причем интервал сосуществования упорядоченной и разупорядоченной фаз составил около 5 К (83 – 88 К). В тербий – иттриевых ферритах – гранатах, имеющих кубическую структуру, при повышении температуры происходила плавная смена фазы с направлением намагниченности по оси $[100]$ фазой с намагниченностью по оси $[111]$, причем для одного из образцов ^{/16/} интервал сосуществования этих фаз составил 22 К. В сплаве $Tb_{0.4}Y_{0.9}Fe_5O_2$ ^{/17/} наблюдали изменение направления намагниченности в следующем порядке: $[100] \rightarrow [100] + [111] \rightarrow [111]$, причем смешанное состояние существовало в интервале температур от 106 К до 111 К.

По спектру ЯМР для этого вещества оценивались концентрации фаз. В ^{/18/} установлено, что в ферромагнетиках типа $FeSi$ существуют гетерофазные состояния, в которые дают вклад фазы с различными направлениями намагниченности. По характеристикам спектра ЯМР было установлено сосуществование ферромагнитного и немагнитного Co в сплавах $CoTi_{1-x}Al_x$ и $CoTi_{1-y}Ga_y$, а также оценены соответствующие концентрации ^{/19/}. Сосуществование фаз с антипараллельной ориентацией спинов было установлено ^{/20/} в веществах типа $Ni_{1-x}M_x$ ($M = Cu, Cr, V, Mn$). Спиновые переориентации наблюдались в $Nd_2Co_{14}B$ и $Nd_2Fe_{14}B$ ^{/21,22/}. Значительное количество различных экспериментальных данных о гетерофазных состояниях в EuO приведено в недавней работе ^{/23/}.

Из экспериментов, в которых наблюдали аномалии восприимчивостей, можно упомянуть следующие. Так, в экспериментах со сплавом $MnAs_{1-x}P_x$ ^{/24/} наблюдали несколько пиков теплоемкости, причем один из них был заметно больше других. В экспериментах с биметаллическими сплавами аналогичная картина имела место при измерении магнитной теплоемкости ^{/25/}, однако на этот раз в области очень низких температур. Аномалии теплоемкости наблюдались также в антиферромагнетике DyH_2 ^{/26/} и в ферромагнетике EuB_6 ^{/27/}. Установлено также, что сосуществование различных магнитных фаз приводит к аномалиям вероятности эффекта Мёссбауэра ^{/28/}.

1.2. Феноменологические теории

Главной особенностью спонтанных спиновых переориентаций с точки зрения общей теории фазовых переходов и критических явлений нам кажется то, что они происходят на больших температурных интервалах, достигающих, как мы уже упоминали в I.1, десятков градусов. Поэтому методы, рассматривающие только гомофазные микроскопические модели и ориентированные на исследование узкого температурного интервала вблизи критической точки, для полного описания спонтанных спиновых переориентаций в большом интервале температур кажутся нам недостаточными. Последнее утверждение, по-видимому, применимо и к таким апробированным теориям, как метод ренормгруппы ^{/29/} и разложение термодинамического потенциала по Ландау ^{/30/}. Не ясно, например, как в рамках этих теорий самосогласованным образом рассчитывать во всем интервале температур такую важную характеристику, как концентрации сосуществующих фаз, а следовательно, и термодинамику системы в целом.

С другой стороны, очень удобной для описания спонтанных спиновых переориентаций является теория среднего поля, дающая такие же критические показатели, как и теория Ландау, однако имеющая то важное преимущество, что она, в принципе, применима вдали от критической точ-

ки. В последнем случае теория среднего поля должна быть самосогласованной, т.е. не должна содержать подгоночных параметров, зависящих от температуры, иначе она будет эквивалентна по степени строгости феноменологической теории.

Подчеркнем здесь, что известные нам теории спонтанных спиновых переориентаций несамосогласованы. Разберем простой, но типичный пример /31, I/. Анизотропную часть термодинамического потенциала представляют в виде разложения по компонентам вектора намагниченности \vec{M} , что в случае кристалла ромбической симметрии с точностью до членов четвертой степени дает

$$\varphi_{an} \approx \sum_{i=1}^3 (a_i M_i^2 + b_i M_i^4) + \sum_{i \neq j} c_{ij} M_i^2 M_j^2.$$

Рассматривая переориентации в плоскости XZ и вводя полярный угол: $M_x = \sin \theta$, $M_z = \cos \theta$, получим выражение

$$\varphi_{an} \approx K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_0,$$

где изменение констант анизотропии K_1 , K_2 и K_0 с температурой и приводит к спиновым переориентациям. Термодинамический потенциал φ_{an} минимизируют по углу θ , но константы анизотропии приходится фитировать по эксперименту во всем исследуемом интервале температур. Но даже если и забыть, что такая теория содержит несколько неизвестных и невчисляемых в ее рамках функций температуры, то все равно экстраполяция результатов такой теории на температуры, далекие от критической, может быть некорректной по следующей причине. Разложение φ_{an} по степеням намагниченности с отбрасыванием всех членов, кроме конечного их числа, справедливо только при малых $|\vec{M}|$, а при произвольных значениях $|\vec{M}|$ вид φ_{an} уже неизвестен. Тем не менее во многих работах, посвященных теории спонтанных спиновых переориентаций, вышеуказанная экстраполяция проводилась явно или неявно. Поэтому, как нам кажется, нельзя считать полученные таким образом результаты вполне самосогласованными.

Для описания спонтанных спиновых переориентаций привлекались различные анизотропные обобщения основной модели теории магнетизма — модели Гейзенберга. В низших порядках по степеням спиновых операторов анизотропная часть гамильтониана может быть записана для одноосного ферромагнетика в виде /32-34/:

$$H_{an}^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2} I_{an}^{(1)}(f_1, f_2) S_{f_1}^z S_{f_2}^z,$$

а для ферромагнетика с кубической симметрией как

$$H_{an}^{(2)} = -\frac{1}{4} \sum_{f_1, f_2, f_3, f_4} \sum_{d_1 \neq d_2} I_{an}^{(2)}(f_1, f_2, f_3, f_4) S_{f_1}^{d_1} S_{f_2}^{d_2} S_{f_3}^{d_1} S_{f_4}^{d_2},$$

где $I_{an}^{(1)}(f_1, f_2)$ и $I_{an}^{(2)}(f_1, f_2, f_3, f_4)$ — интегралы магнитокристаллографической анизотропии. Частным случаем взаимодействий $H_{an}^{(1)}$ и $H_{an}^{(2)}$ является одноионная анизотропия. С помощью таких моделей можно описывать и анизотропию кубических кристаллов /34/. Отметим здесь следующее. Как правило, при описании спин-переориентационных переходов на основе вышеприведенных гамильтонианов постулируют зависимость констант связи от температуры. Это, как нам кажется, нивелирует первоначальные достоинства таких моделей, так как теория становится феноменологической.

Теория с анизотропным гамильтонианом Гейзенберга бесконечного радиуса взаимодействия имеет точное решение. Это точное решение не содержит описания спонтанных спиновых переориентаций (см. подраздел 2.2), если рассматривается только гомофазная модель. Поэтому естественным шагом является обобщение такой модели на случай гетерофазных систем с сохранением ее точно решаемого характера.

1.3. Цели работы и исходная гомофазная модель

Целью настоящей работы является развитие формализма, пригодного для описания спонтанных спиновых переориентаций и основанного на точном решении микроскопической модели. Справедливость полученных выражений в этом случае уже не будет ограничена окрестностью критической точки. Модель не должна содержать феноменологических подгоночных параметров, зависящих от температуры, — все величины в ней должны вычисляться самосогласованно.

Кроме того, нами не будут рассматриваться системы с пространственно неоднородной структурой, фиксирующей локализацию доменов.

В подразделах 1.1 и 1.2 приведены аргументы в пользу того, что модель должна быть гетерофазной. Чем отличается гетерофазная модель, предназначенная для описания равновесных гетерофазных состояний, от своего гомофазного прототипа? Дадим короткое качественное пояснение.

Вообще говоря, гетерофазные состояния носят флуктуативный динамический характер /4-7/. Рассматривая такие состояния, как эргодические, мы можем заменить усреднение по времени наблюдения равновесной системы усреднением по ансамблю с эффективным квантовым гамильтонианом /4-7, 35, 36/. В силу того, что в системе нет выделенных областей, флуктуативное возникновение макроскопической области с другим типом

симметрии равновероятно по всему объему системы. Следовательно, вклад гетерофазных флуктуаций в термодинамику системы будет выражаться через некоторые усредненные по всему объему глобальные характеристики. Как было показано /2, 4-7, 35-37/, такими характеристиками являются отнесенные объемы или концентрации различных фаз.

В силу однородности системы границы между областями локализации различных фаз не могут быть устойчивыми и вместе с фазовооднородными областями должны флуктуировать по всему объему. Сказанное иллюстрируется рисунком I. Показано, как усредняется несколько экземпляров системы с различной локализацией короткоживущих фазовооднородных областей. Результатом является эффективная размазанная картина, на которой границ уже не видно. Ясно также, что энергия флуктуирующих границ при таком описании учитывается через концентрации фаз. Последовательное и строгое изложение этих положений можно найти в /4-7/, а некоторые приложения - в /38-42/.

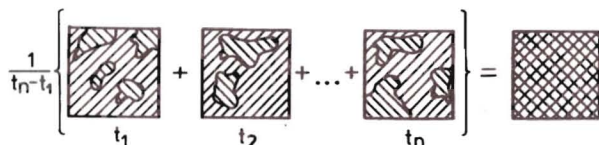


Рис. I

По времени наблюдения системы $\Delta t = t_n - t_1$ усредняется некоторое число n экземпляров системы. На итоговой картине уже не видно границ короткоживущих гетерофазных флуктуаций, однако ясно, что вклад в термодинамику системы они дают.

Гетерофазное обобщение изотропной модели Гейзенберга с дальним действием подробно рассмотрено в /39, 40/. Первым этапом построения гетерофазной модели должен быть выбор исходной гомофазной модели. Пусть такая модель описывается гамильтонианом

$$H_{hom} = H_0 - \sum_{f_1, f_2} \sum_{i \neq j}^3 J_{ij}(f_1, f_2) S^i(f_1) S^j(f_2)$$

с тензором обменного взаимодействия $J_{ij}(f_1, f_2)$, удовлетворяющим условиям

$$J_{ij}(f_1, f_2) = J_{ij}(|f_1 - f_2|) > 0, \quad i, j = 1, 2, 3;$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} J_{ij}(f_1, f_2) = 0;$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{f_1, f_2} J_{ij}(f_1, f_2) < \infty.$$

Как было строго показано в /42/, такой гамильтониан эквивалентен гамильтониану взаимодействия бесконечного радиуса, который, в свою очередь, описывает термодинамику спина в среднем поле специального вида /43/. В подразделе 2.1 переход к гамильтониану с дальним действием будет осуществлен формально более простой процедурой.

I.4. Резюме и анонс

Логика расположения материала в этой и в двух последующих работах такова. Точная термодинамика анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга - наша конечная цель - излагается во второй работе и завершается в третьей работе. Полученное решение описывает, по крайней мере, шесть типов ферромагнетиков, из которых четыре претерпевают спонтанную спиновую переориентацию. Применимость результатов не ограничена каким-либо температурным интервалом, в котором можно рассчитывать наблюдаемые в экспериментах характеристики, включая концентрации фаз. Получены шесть новых точек фазовых переходов, непосредственно связанных со спонтанными спиновыми переориентациями и отличных от точки Кюри. Это позволяет описать anomalous поведение теплоемкости и объяснить явление смены рода перехода, оставаясь в рамках чисто спинового формализма. Показана возможность скачкообразной нуклеации. Эти и другие результаты подробно обсуждаются в заключительной части третьей работы.

Итак, часть второй работы, а также третья работа полностью посвящены качественному обсуждению физического содержания полученного точного решения. Подготовительная часть, относящаяся к построению гетерофазной модели и ее решению, содержится в настоящей работе. В части 2 настоящей работы проанализирована гомофазная модель. Показано, что она не описывает спонтанные спиновые переориентации и физически эквивалентна модели Изинга с дальним действием. Однако ее точное решение позволяет выявить чистые фазы системы. В части 3 настоящей работы найдены все возможные термодинамические состояния гетерофазной модели. Рассчитаны критические температуры, критические индексы, получены точные уравнения для удельного спина, концентраций фаз, теплоемкости.

Во второй работе точное решение модели анизотропного гетерофазного ферромагнетика, начатое в настоящей работе, завершается нахождением абсолютно стабильных состояний. Далее во второй работе, а также в третьей, анализируется термодинамика спонтанных спиновых переориентаций.

2. Чистые фазы гомофазной модели

Необходимым условием построения гетерофазной модели спонтанных спиновых переориентаций является знание чистых фаз, дающих вклад в

термодинамику такой модели. Для выделения чистых фаз недостаточно знать только абсолютно стабильные решения гомофазной модели потому, что в гетерофазной модели критерий неустойчивости состояний одной чистой фазы относительно состояний другой чистой фазы не применим — смешанное состояние может оказаться термодинамически выгоднее. Следовательно, нужно выделить и метастабильные состояния гомофазной модели.

Другим вопросом при рассмотрении гомофазной модели является возможность описания спонтанных спиновых переориентаций в рамках одной только гомофазной теории. Однако, как выясняется (см. подраздел 2.2), гомофазная теория не описывает спонтанные спиновые переориентации.

2.1. Решение гомофазной анизотропной модели Гейзенберга с дальним действием

Рассмотрим анизотропный ферромагнетик, представляя его как спиновую систему, описываемую гамильтонианом Гейзенберга [32-34]:

$$H = N \frac{A}{2} \hat{\Pi} - \sum_{g, g'=1}^N \sum_{i=1}^3 J_i(g, g') S_i(g) S_i(g'), \quad (1)$$

где $S_i(g)$ — оператор спина $1/2$, отнесенный к узлу g , $J_i(g, g')$ — обменный интеграл для i -тых компонент спинов в узлах g и g' , N — число узлов в системе. Константа A характеризует соотношение между прямым и обменным электростатическим взаимодействием электронов. В этом подразделе будем ее опускать, сдвигая шкалу отсчета энергии системы на $N \frac{A}{2}$.

Напомним также, что спиновые операторы $S_i(g)$ допускают известное представление через операторы рождения и уничтожения электронов с определенным значением проекции спина на ось квантования [32]:

$$\begin{aligned} S_1(g) + i S_2(g) &= a^+(g, \uparrow) a(g, \downarrow), \\ S_3(g) &= a^+(g, \uparrow) a(g, \downarrow) - \frac{1}{2} \hat{\Pi}(g), \end{aligned} \quad (2)$$

причем имеет место нормировка

$$\sum_{g=1}^N \langle a^+(g, \uparrow) a(g, \downarrow) \rangle \equiv \sum_{g=1}^N n(g) = N. \quad (3)$$

Соотношения (2) и (3) будут использованы при пояснении перехода к эффективному гамильтониану, описывающему гетерофазную модель Гейзенберга.

Как было показано [44, 45], дальнее действие в системе можно уста-

новить, полагая обменный интеграл равным

$$J_i(g, g') = \frac{J_i}{N}, \quad J_i > 0. \quad (4)$$

Тогда гамильтониан системы записывается в виде

$$H = -N \sum_{i=1}^3 J_i S_i S_i, \quad (5)$$

где $S_i = \frac{1}{N} \sum_{g=1}^N S_i(g)$ и член $N \frac{A}{2} \hat{\Pi}$ уже опущен. В рамках техники, изложенной в [43], можно показать, что гамильтониан

$$H = -N \sum_{i=1}^3 J_i (2S_i - \xi_i \hat{\Pi}) \xi_i \quad (6)$$

где

$$\xi_i = \text{Tr} \{ S_i \exp(-\frac{H}{\theta}) \} / \text{Tr} \{ \exp(-\frac{H}{\theta}) \} \quad (7)$$

является термодинамически эквивалентным гамильтониану (5), поскольку свободные энергии, вычисленные по этим гамильтонианам, совпадают в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$.

С целью сохранения общности при вычислении статистической суммы можно полагать, что спиновые операторы квантованы по произвольной оси, задаваемой поворотом, отсчитываемым от оси Oz . Такой поворот характеризуется матрицей $R_{ik} \in SO(3)$ [46]. Следовательно, операторы спина можно представить в форме [34]:

$$S_i = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 R_{ik} \sigma_k, \quad (8)$$

где σ_k — матрицы Паули [46], а матрица R_{ik} ортогональна:

$$\sum_{k=1}^3 R_{ik} R_{kj}^T = \delta_{ij}. \quad (9)$$

Поскольку имеет место соотношение

$$\exp(\vec{\sigma}, \vec{D}) = \text{ch} |\vec{D}| \hat{\Pi} + \frac{(\vec{\sigma}, \vec{D})}{|\vec{D}|} \text{sh} |\vec{D}|,$$

то, записывая

$$-\frac{H}{\theta} = \frac{N}{\theta} \sum_{i=1}^3 J_i \xi_i^2 \hat{\Pi} + N(\vec{\sigma}, \vec{D}),$$

где $D_i = \frac{1}{\theta} \sum_{k=1}^3 R_{ik}^T J_k \xi_k$, и используя (9), получаем следующее выражение для статистической суммы:

$$\mathcal{Z} = 2 \exp \left\{ \frac{N}{\theta} \sum_{i=1}^3 J_i \xi_i^2 \right\} \cdot \text{ch} \left(\frac{1}{\theta} \sqrt{\sum_{k=1}^3 \left(\sum_{i=1}^3 R_{ki}^T J_i \xi_i \right)^2} \right). \quad (10)$$

Входящие в (10) величины ξ_i , как это видно из (7), удовлетворяют системе уравнений:

$$\xi_i = \frac{J_i \xi_i}{2\sqrt{\sum_{k=1}^3 J_k^2 \xi_k^2}} \operatorname{th} \left(\frac{1}{\theta} \sqrt{\sum_{k=1}^3 J_k^2 \xi_k^2} \right), \quad i=1,2,3. \quad (\text{II})$$

Эта система допускает только три нетривиальных решения вида

$$\xi_i = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{J_i \xi_i}{\theta} \right); \quad \xi_j = 0; \quad i \neq j; \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (\text{I2})$$

Это означает, что в анизотропном гомофазном ферромагнетике, описываемом гамильтонианом Гейзенберга с дальнедействием (5), может быть отличной от нуля только одна компонента удельного спина, в то время как две другие равны нулю во всем интервале температур (см. рис. 2).

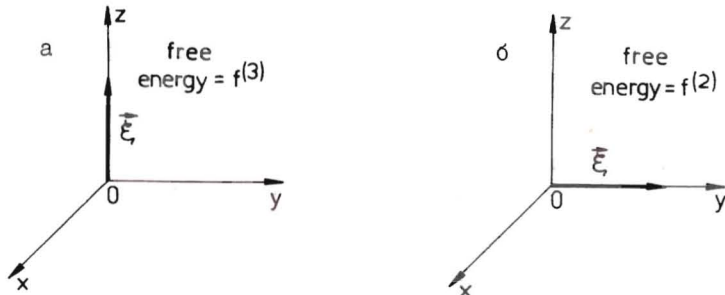


Рис. 2

Пространственная ориентация вектора намагниченности в гомофазной системе, определяемая тремя нетривиальными решениями системы уравнений (II). Случаи "а", "б" и "в" характеризуют направления намагниченности в трех чистых ферромагнитных фазах системы.

Три решения (I2) дают соответственно три ветви плотности свободной энергии:

$$f^{(i)} = J_i \xi_i^2 - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{J_i \xi_i}{\theta} \right), \quad i=1,2,3. \quad (\text{I3})$$

Каждая из этих ветвей описывает состояния системы с не равной нулю соответствующей компонентой удельного спина ξ_i . Критические температуры равны

$$\theta_c^{(i)} = \frac{J_i}{2}, \quad (\text{I4})$$

а плотности свободной энергии имеют в этих точках пределы, лежащие на прямой $f^{(i)} = -\theta \ln 2$:

$$\lim_{\xi_i \rightarrow 0} f^{(i)} = -\theta_c^{(i)} \ln 2. \quad (\text{I5})$$

При нуле температуры имеем

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} f^{(i)} = -\frac{J_i}{4}. \quad (\text{I6})$$

Энтропия, вычисленная для i -й ветви решения (I2) уравнений (II), равна

$$S^{(i)} = -\frac{2J_i \xi_i}{\theta} + \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{J_i \xi_i}{\theta} \right), \quad (\text{I7})$$

а соответствующая этой ветви теплоемкость имеет вид

$$C^{(i)} = -2J_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} = \left(\frac{J_i \xi_i}{\theta} \right)^2 (1 - 4\xi_i^2) / \left(1 - \frac{J_i}{2\theta} (1 - 4\xi_i^2) \right). \quad (\text{I8})$$

Разлагая знаменатель последнего выражения в положительно определенный ряд по ξ_i^2 :

$$1 - \frac{J_i}{2\theta} (1 - 4\xi_i^2) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2\xi_i)^{2m+2}}{(2m+1)(2m+3)},$$

видим, что в ферромагнитной фазе, когда $\xi_i \neq 0$, теплоемкость положительна, а в критической точке она претерпевает скачок от значения $3/2$ слева от $\theta_c^{(i)}$ до нуля справа от нее.

Расчет критических индексов для намагниченности и теплоемкости системы приводит к обычным в теории среднего поля значениям.

Отметим, что абсолютно стабильные состояния для гомофазной модели, описываемой гамильтонианом (I), были также указаны в [47].

2.2. Чистые фазы системы и невозможность переориентационных переходов в гомофазной модели

Выясним важный вопрос о возможности переориентационных переходов в гомофазном анизотропном ферромагнетике Гейзенберга. В случае такого перехода при некоторой температуре в ферромагнитной фазе были бы рав-

ны плотности свободной энергии двух различных ветвей решения (12):

$$f^{(i)} = f^{(j)}, \quad i \neq j. \quad (19)$$

Зафиксируем анизотропию взаимодействия

$$J_3 > J_2 > J_1 > 0 \quad (20)$$

и рассмотрим следующую функцию параметра J , считая температуру фиксированной:

$$f = J \xi^2(J) - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{J \xi(J)}{\theta} \right), \quad (21)$$

где $\xi = \xi(J)$ в силу соотношения $\xi = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{J \xi}{\theta} \right)$. Производная функции (21) при $\xi \neq 0$ всегда отрицательна:

$$\frac{\partial f}{\partial J} = -\xi^2(J) < 0.$$

Следовательно, функция $f(J)$ монотонно убывает с ростом J , и для температур, при которых $\xi_i \neq 0$, $i = 1, 2, 3$, из неравенств (20) получаем другие неравенства:

$$f^{(3)} < f^{(2)} < f^{(1)}, \quad (22)$$

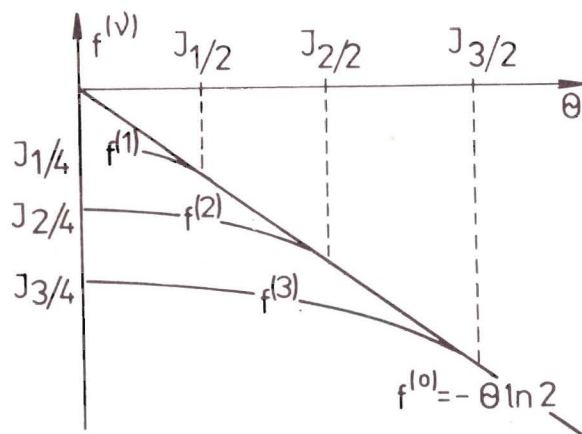


Рис. 3

Показаны плотности свободных энергий чистых фаз гомофазной системы. Абсолютно стабильными являются состояния ветви $f^{(3)}$ с намагниченностью, изображенной на рис. 2а. Метастабильными являются состояния ветвей $f^{(1)}$ и $f^{(2)}$. Функции $f^{(1)}$, $f^{(2)}$ и $f^{(3)}$ не пересекаются — переориентационных переходов в гомофазной системе нет.

т.е. в гомофазной системе нет переориентационных переходов. Графики функций $f^{(i)}$ показаны на рис. 3.

Абсолютно стабильной является ветвь $f^{(3)}$. Ветви $f^{(1)}$ и $f^{(2)}$ метастабильны относительно нее в интервалах температур $[0, J_1/2]$ и $[0, J_2/2]$ соответственно, а плотность свободной энергии парамагнитной фазы $f^{(0)} = -\theta \ln 2$ метастабильна в интервале $[0, J_3/2]$. Таким образом, гомофазный анизотропный ферромагнетик Гейзенберга эквивалентен одноосному ферромагнетик Кюри-Вейса с намагниченностью вдоль оси Oz .

Поскольку в гамильтониане (5) снята симметрия относительно группы пространственных вращений $S_0(3)$, то при выделении чистых фаз в рассматриваемой системе мы должны учитывать ориентацию векторного параметра порядка $\vec{\xi}$. Совокупность ферромагнитных состояний системы, когда $|\vec{\xi}| \neq 0$, естественным образом распадается на три различные ферромагнитные фазы, в каждой из которых отлична от нуля лишь одна из компонент параметра порядка (рис. 2). Поскольку при этом абсолютно стабильными являются состояния, принадлежащие одной ферромагнитной фазе, а именно, с $\xi_3 \neq 0$ (рис. 3), гомофазный анизотропный ферромагнетик Гейзенберга не претерпевает спонтанных спиновых переориентаций. В этом смысле физика, содержащаяся в гомофазной модели, неожиданно оказывается довольно скудной. Вместе с тем ясно, что можно исключить в термодинамику системы две другие ферромагнитные фазы, отказавшись от условия гомофазности рассматриваемых состояний. Для гетерофазных состояний ферромагнетика, т.е. для состояний, в которых сосуществуют в некотором интервале температур макроскопические области, соответствующие различным по симметрии фазам системы, критерий относительной метастабильности рассматриваемых фаз не имеет места, так как плотность свободной энергии системы аддитивно выражается через плотности свободных энергий сосуществующих фаз, включая и парамагнитную фазу [4-7].

3. Гетерофазная модель

Можно ожидать, и это будет показано ниже, что гетерофазные состояния будут описывать пространственные эволюции спонтанной намагниченности системы с изменением температуры. Действительно, намагниченность образца в состоянии, в котором сосуществуют фазы с различной ориентацией спонтанной намагниченности и парамагнитная фаза, будет равна сумме намагниченностей фаз. Следовательно, направление полной намагниченности может быть достаточно произвольным.

3.1. Термодинамические состояния, описываемые моделью анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальним взаимодействием

Здесь мы дадим упорядоченное перечисление всех термодинамических состояний, которые возможны в выбранной гетерофазной модели. Для этого в 3.1.1 будет дано краткое описание гетерофазного формализма, который использован в нашей работе, вместе с достаточно полной библиографией. Далее, в 3.1.2, будет сформулирована гетерофазная модель и дано ее формальное решение, а в подразделе 3.1.3 будет дана существенно используемая в дальнейшем классификация возможных гетерофазных состояний. В заключение данного раздела и данной работы будет рассмотрено для различных классов состояний поведение удельного спина и вычислены температуры Кюри.

3.1.1. Гетерофазные состояния

Общая феноменологическая теория гетерофазных состояний рассматривалась еще Френкелем [48], а из работ, в которых учитывалось влияние гетерофазных состояний на эффекты спонтанных спиновых переориентаций, выделим [16], где применялось феноменологическое разложение Ландау, а также книгу [1]. Обзор различных феноменологических подходов для описания гетерофазных состояний содержится в [38]. Микроскопическая теория гетерофазных состояний была развита в [2-7, 35-37]. Было, в частности, показано, что если в исследуемой системе возможно сосуществование n чистых фаз, то полное гильбертово пространство состояний представляется в виде тензорного произведения n подпространств, в каждом из которых выделяют состояния, отвечающие соответствующей чистой фазе. Следовательно, для рассматриваемой нами модели такое представление имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3, \quad (23)$$

где \mathcal{H}_0 - пространство парамагнитных состояний, в которых $|\vec{\xi}| = 0$ при всех температурах, а \mathcal{H}_i - пространства таких состояний, для которых может быть отличной от нуля только i -я компонента удельного спина ($i=1, 2, 3$). Структура пространства (23) определяется из вышеизложенного решения гомофазной модели Гейзенберга с дальним взаимодействием, в котором возможны три ферромагнитные фазы со взаимно перпендикулярными ориентациями параметров порядка и парамагнитная фаза, т.е. всего четыре чистые фазы.

Представление операторов, наблюдаемых на пространстве (23), имеет вид [17]:

$$A = \bigoplus_{\nu} A_{\nu}(N_{\nu}), \quad \nu = 0, 1, 2, 3, \quad (24)$$

где

$$A_{\nu}(N_{\nu}) = \mathcal{T}_{\nu}[A(N_{\nu})] \quad (25)$$

является представлением оператора $A(N_{\nu})$ на пространстве \mathcal{H}_{ν} .

При построении представления гамильтониана рассматриваемой нами системы (5) в каждом из подпространств \mathcal{H}_{ν} следует учитывать, что гетерофазные флуктуации в реальных системах носят динамический характер [4, 5, 36]. Следовательно, в рамках эргодического подхода при отсутствии в объеме системы физически выделенных областей вклад от каждой макроскопически локализованной области, соответствующей какой-либо чистой фазе, будет выражаться через некоторые глобальные, усредненные по всей системе характеристики. Было строго показано, что такими характеристиками являются концентрации частиц в каждой из чистых фаз системы [4-7, 35-37], которые в термодинамическом пределе совпадают с фазовыми вероятностями.

Поясним вышесказанное простым примером. Рассмотрим представление операторов, фигурирующих в формулах (2)-(3), в пространстве \mathcal{H}_{ν} . Согласно (25) имеем

$$a_{\nu}(q, \uparrow) = \mathcal{T}_{\nu}[a(q, \uparrow)], \quad a_{\nu}(q, \downarrow) = \mathcal{T}_{\nu}[a(q, \downarrow)]. \quad (26)$$

Но нормировать эти операторы мы теперь должны не на полное число N спинов в системе, а на число N_{ν} спинов, условно отнесенных к ν -й фазе:

$$\sum_{\{q, \nu\}} \langle a_{\nu}^{\uparrow}(q, \uparrow) a_{\nu}(q, \downarrow) \rangle = N_{\nu}, \quad (27)$$

где суммирование ведется только по спином, принадлежащим к ν -й фазе.

При этом должно выполняться условие сохранения полного числа частиц в системе:

$$\sum_{\nu=0}^3 N_{\nu} = N. \quad (28)$$

Введем концентрации частиц в ν -й фазе: $w_{\nu} = \frac{N_{\nu}}{N}$. Ясно, что величины w_{ν} являются функциями внешних параметров, в нашем случае они зависят от температуры. Поскольку w_{ν} описывают долю соответствующей фазы во всем объеме системы [36, 4-7], то их можно называть вероятностями чистых фаз. Для того чтобы вычислять наблюдаемые с помощью операторов, относящихся ко всей системе, необходимо сделать формальную замену:

$$\sum_{\{q, \nu\}} \dots \rightarrow \frac{N_{\nu}}{N} \sum_{\nu} \dots = w_{\nu} \sum_{\nu} \dots, \quad (29)$$

строгое обоснование которой дано в работах [4-7].

При этом согласно (27)

$$N_{\nu} = w_{\nu} \sum_{\mathcal{G}} \langle a_{\nu}^{\dagger}(\mathcal{G}, \uparrow) a_{\nu}(\mathcal{G}, \downarrow) \rangle. \quad (30)$$

Из (28) следует нормировка для полной вероятности:

$$\sum_{\nu=0}^3 w_{\nu} = 1. \quad (31)$$

Введенные таким образом вероятности являются естественными параметрами системы, характеризующими ее гетерофазные состояния.

3.1.2. Представление гамильтониана и свободная энергия анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальним действием

Теперь, зная соотношения перенормировки (29)–(30), мы можем записать гамильтониан гетерофазного ферромагнетика. Для этого в гамильтониане (5)–(6) нужно формально перенормировать операторы спина и их средние с учетом (29)–(30). Строгое обоснование этой процедуры в рамках микроскопической теории дано в [36, 4–7].

Таким образом, представление гамильтониана (5) в подпространствах \mathcal{H}_i , $i = 1, 2, 3$, с ненулевым параметром порядка имеет вид

$$H_i = N w_i^2 \left(\frac{A}{2} \hat{\Pi}_i - J_i (2S_i - \xi_i \hat{\Pi}_i) \xi_i \right). \quad (32)$$

В подпространстве парамагнитных состояний \mathcal{H}_0 представление гамильтониана (5) следует выбрать в виде

$$H_0 = N w_0^2 \frac{A}{2} \hat{\Pi}_0. \quad (33)$$

Очевидно, что параметр разупорядочивания A опускать уже нельзя, так как он входит в гамильтониан с множителем w_0^2 , который является функцией параметров внешней среды. Множитель w_0^2 появляется в этом члене ввиду его четырехфермионного происхождения и соотношений (29)–(30).

Полный гамильтониан, описывающий гетерофазные состояния анизотропного ферромагнетика Гейзенберга с дальним действием, имеет вид

$$H = H_0 \otimes \hat{\Pi}_1 \otimes \hat{\Pi}_2 \otimes \hat{\Pi}_3 + \hat{\Pi}_0 \otimes H_1 \otimes \hat{\Pi}_2 \otimes \hat{\Pi}_3 + \hat{\Pi}_0 \otimes \hat{\Pi}_1 \otimes H_2 \otimes \hat{\Pi}_3 + \hat{\Pi}_0 \otimes \hat{\Pi}_1 \otimes \hat{\Pi}_2 \otimes H_3. \quad (34)$$

Плотность свободной энергии в термодинамическом пределе

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[\text{Tr} \exp \left(- \frac{H}{\theta} \right) \right]$$

равна сумме соответствующих каждой ветви вкладов:

$$f = w_0^2 \frac{A}{2} - \theta \ln 2 + \sum_{i=1}^3 \left\{ w_i^2 \left(\frac{A}{2} + J_i \xi_i^2 \right) - \theta \ln 2 \text{ch} \left(\frac{w_i^2 J_i \xi_i}{\theta} \right) \right\}. \quad (35)$$

3.1.3. Возможные термодинамические состояния

Свободная энергия (35), вычисленная по аппроксимирующему гамильтониану (32)–(34), должна быть минимальна по параметрам w_i и ξ_i , где $i = 1, 2, 3$. Минимизируя по w_i , внутри куба $\{0 \leq w_i \leq 1\}$ имеем уравнения, получающиеся из условия

$$\frac{\partial f}{\partial w_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (36)$$

Соотношения (36) эквивалентны условиям равновесия сосуществующих фаз [4–7].

Однако на границе куба $\{0 \leq w_i \leq 1\}$, когда $w_{\nu} \equiv 0$ для какого-либо набора значений индекса ν , необходимое условие экстремума свободной энергии уже не имеет места и необходимо отдельное исследование. Сразу же заметим, что случай $w_{\nu} \equiv 1$ не является самостоятельным, поскольку в силу (31) он сводится к граничным условиям вида $w_{\alpha} \equiv 0$, где $\alpha \neq \nu$, и пробегает три других значения из множества $\{0, 1, 2, 3\}$.

Как легко видеть, в зависимости от граничных условий, налагаемых на концентрации спинов в чистых фазах, т.е. в зависимости от того, какие именно чистые фазы смешиваются в гетерофазном состоянии, плотность свободной энергии системы может иметь пятнадцать различных ветвей. Их можно классифицировать следующим образом.

Соберем в одно множество, которое будем обозначать через $\{i\}$, значения латинского индекса i , нумерующего те ферромагнитные фазы ($i = 1, 2, 3$), для которых соответствующая вероятность w_i не равна тождественно нулю: $\{i\} = \{i: w_i \neq 0\}$. Необходимые условия экстремума будут при этом иметь вид

$$\frac{\partial f}{\partial w_i} = 0, \quad i \in \{i\}, \quad w_j \equiv 0, \quad j \notin \{i\}. \quad (37)$$

В отличие от (36) в (37) минимизируется плотность свободной энергии, описывающая в общем случае гетерофазные состояния не только с полным смешиванием всех четырех чистых фаз, но и с неполным смешиванием.

Таким образом, величины w_i и $w_0 = 1 - \sum_{i=1}^3 w_i$ не являются феноменологическими подгоночными параметрами гамильтониана, а определяются самосогласованным образом из решения микроскопической модельной задачи во всем интервале температур, а не только в окрестности критической точки.

Возможны следующие различные ситуации в зависимости от граничных условий на вероятности фаз. Перечислим их:

$$\text{No. 1. } w_0 \neq 0, \quad w_i \neq 0, \quad \{i\} = \{1, 2, 3\}.$$

- № 2. $w_0 \neq 0, w_1 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{2, 3\}$.
 № 3. $w_0 \neq 0, w_2 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{1, 3\}$.
 № 4. $w_0 \neq 0, w_3 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{1, 2\}$.
 № 5. $w_0 \neq 0, w_1 \equiv w_2 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{3\}$.
 № 6. $w_0 \neq 0, w_1 \equiv w_3 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{2\}$.
 № 7. $w_0 \neq 0, w_2 \equiv w_3 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{i\}$.
 № 8. $w_0 \equiv 1, w_1 \equiv w_2 \equiv w_3 \equiv 0, \{i\} = \{\emptyset\}$.
 № 9. $w_0 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{1, 2, 3\}$.
 № 10. $w_0 \equiv 0, w_1 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{2, 3\}$.
 № 11. $w_0 \equiv 0, w_2 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{1, 3\}$.
 № 12. $w_0 \equiv 0, w_3 \equiv 0, w_i \neq 0, \{i\} = \{1, 2\}$.
 № 13. $w_0 \equiv 0, w_1 \equiv 1, w_2 \equiv w_3 \equiv 0, \{i\} = \{i\}$.
 № 14. $w_0 \equiv 0, w_2 \equiv 1, w_1 \equiv w_3 \equiv 0, \{i\} = \{2\}$.
 № 15. $w_0 \equiv 0, w_3 \equiv 1, w_1 \equiv w_2 \equiv 0, \{i\} = \{3\}$.

Видно, что граничные условия полностью определяются заданием условия на величину w_0 и множества $\{i\}$. Ветвь № 1 описывает гетерофазные состояния с полным смешиванием, ветви № 2 – № 7 – состояния с неполным смешиванием ферромагнитных фаз при участии парамагнитной фазы, ветви № 9 – № 12 – состояния с неполным смешиванием ферромагнитных фаз без участия парамагнитной фазы, ветвь № 8 – чистые парамагнитные состояния, а ветви № 13 – № 15 описывают состояния, соответствующие чистым ферромагнитным фазам с намагниченностями вдоль осей Ox, Oy, Oz соответственно. Кроме того, заметим, что для ветвей № 9 – № 12 вероятность одной из ферромагнитных фаз линейно зависит от других, и это надо учитывать при дифференцировании в (37).

Для ветвей № 1 – № 7 плотности свободной энергии, т.е., когда $w_0 \neq 0$, выражения для вероятностей, имеют вид

$$w_0 = \frac{1}{1 + \sum_{\{i\}} \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2}}, \quad (38)$$

$$w_i = \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2} w_0, \quad i \in \{i\},$$

в чем можно убедиться, используя соотношения (37) и (31). Для состояний без участия парамагнитной фазы (ветви № 9 – № 12) соответ-

ствующие выражения равны

$$w_0 \equiv 0,$$

$$w_i = \frac{1}{A - 2J_i \xi_i^2} \cdot \frac{1}{\sum_{\{i\}} \frac{1}{A - 2J_i \xi_i^2}}, \quad i \in \{i\}. \quad (39)$$

3.1.4. Уравнения для удельного спина

Найдем теперь неизвестные в уравнениях (38) и (39) величины ξ_i . Для всех ветвей, кроме восьмой, уравнения для компонент удельного спина получаются стандартным образом [43] из условия минимальности свободной энергии по ξ_i : $\frac{\partial f}{\partial \xi_i} = 0, i \in \{i\}$. Эти уравнения имеют одинаковую форму:

$$\xi_i = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{w_i^2 J_i \xi_i}{\theta} \right), \quad i \in \{i\}, \quad (40)$$

$$\xi_j \equiv 0, \quad j \notin \{i\},$$

но надо помнить, что для каждой из ветвей в этих уравнениях стоят соответствующие, различные по числу смешиваемых фаз, выражения для вероятностей, имеющие вид (38) или (39).

3.1.5. Критические температуры

Перейдем к расчету критических температур для различных ветвей плотности свободной энергии, определяя их из условия $|\xi_i| = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2} \rightarrow 0$. Предварительно обозначим через d число ферромагнитных фаз, дающих вклад в данное гетерофазное состояние. Очевидно, что d есть физически наблюдаемая размерность параметра порядка. Ясно также, что d равно числу элементов во множестве $\{i\}$. Введем следующую функцию, зависящую от того, какие элементы содержатся во множестве $\{i\}$, обозначив ее как $J(\{i\})$:

$$d=1: \quad J(\{i\}) = \begin{cases} J_1, & \{i\} = \{1\}, \\ J_2, & \{i\} = \{2\}, \\ J_3, & \{i\} = \{3\}, \end{cases}$$

$$d=2: \quad J(\{i\}) = \begin{cases} J_2, & \{i\} = \{1, 2\}, \\ J_3, & \{i\} = \{1, 3\}, \{2, 3\}, \end{cases} \quad (41)$$

$$d=3: \quad J(\{i\}) = J_3, \quad \{i\} = \{1, 2, 3\}.$$

Сначала вычислим значения вероятностей в критических точках. Рассмотрим ветви No 1 - No 7, когда $w_0 \neq 0$. Тогда выражения для вероятностей имеют вид (38). Устремляя модуль среднего спина к нулю в уравнениях (38), можно легко получить значения вероятностей в критических точках, которые, как и следовало ожидать, становятся в этих точках (разных для разных ветвей) равными:

$$w_i^c = w_0^c = \frac{1}{1+d}, \quad i \in \{i\}; \quad w_j \equiv 0, \quad j \notin \{i\}. \quad (42)$$

Здесь d , как и определено выше, физически наблюдаемая размерность параметра порядка.

Вычисление критических температур удобно проводить в сферических координатах в пространстве удельного спина, обозначая $\xi = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2}$,

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \xi \cos \psi \sin \varphi, \\ \xi_2 &= \xi \sin \psi \sin \varphi, \\ \xi_3 &= \xi \cos \varphi, \\ 0 &\leq \varphi \leq \pi, \quad 0 \leq \psi < 2\pi, \end{aligned} \quad (43)$$

где φ и ψ - соответственно полярный и азимутальный углы. Полагая $\xi \rightarrow 0$ и комбинируя уравнения (40), получаем для сферических углов уравнения, задающие координатные оси:

$$\begin{aligned} O_x: \quad \sin \varphi &= 0, \\ O_y: \quad \cos \varphi &= 0, \quad \cos \psi = 0, \\ O_x: \quad \cos \varphi &= 0, \quad \sin \psi = 0. \end{aligned}$$

Следовательно, размагничивание системы происходит вдоль одной из координатных осей, поэтому в окрестности ниже критической точки система всегда двухфазна или однофазна, поскольку остается отличной от нуля только одна из компонент ξ_i . Покажем, что это та компонента ξ_i , с которой ассоциирован наибольший из обменных интегралов J_i для данного множества $\{i\}$. В том, что это так, можно убедиться следующим образом. Считая одну из величин J_i переменной, а остальные $J_{i'}, i' \neq i, i', i' \in \{i\}$, - константами, вычислим производную $\frac{\partial w_i}{\partial J_i}$. Получим

$$\frac{\partial w_i}{\partial J_i} = - \left(\sum_{j \neq i, j \in \{i\}} \frac{A}{A - 2J_j \xi_j^2} + 1 \right) \frac{\partial w_0}{\partial J_i} > 0, \quad (44)$$

так как из (38) следует, что $\frac{\partial w_0}{\partial J_i} < 0$. Кроме того, предполагается, что $A/(A - 2J_i \xi_i^2) > 0$. Тогда в уравнениях (40) наибольший коэффициент при ξ_i в аргументе гиперболического тангенса там, где

наибольшая константа J_i . Известно, что уравнение вида $x = th(\alpha x)$ имеет тем большее по модулю решения, чем больше величина α , откуда и следует, что последней исчезает компонента ξ_i , связанная с наибольшей для данного множества $\{i\}$ константой J_i . Возвращаясь к функции (41), видим, что ее значение как раз и равно такому наибольшему J_i .

Из сказанного следует, что если $A > \frac{J_3}{2}$, то в силу (20) имеют место неравенства

$$w_i \geq w_{i'}, \quad \xi_i \geq \xi_{i'}, \quad i > i', \quad i, i' \in \{i\}. \quad (45)$$

Критические температуры теперь легко вычисляются. Для ветвей No. 1 - No. 7 их значение равно

$$\theta^c(\{i\}) = \frac{J(\{i\})}{2} \frac{1}{(1+d)^2}, \quad w_0 \neq 0. \quad (46)$$

К примеру, для ветви No. 3 имеем $\{i\} = 1, 3$, $d = 2$, и, пользуясь функцией (41), получаем $\theta^c(\{1, 3\}) = J_3/18$.

Для ветвей No. 9 - No. 15, т.е., когда $w_0 \equiv 0$, аналогично предыдущему, получаем

$$\begin{aligned} w_i^c &= \frac{1}{d}, \quad i \in \{i\}; \quad w_j \equiv 0, \quad j \notin \{i\}; \\ \theta^c(\{i\}) &= \frac{J(\{i\})}{2d^2}, \quad w_0 \equiv 0, \end{aligned} \quad (47)$$

где функция $J(\{i\})$ определена согласно (41).

3.1.6. Наибольшая и наименьшая критические температуры

Формулы (46)-(47) показывают, что чем выше наблюдаемая размерность параметра порядка, тем ниже критическая температура, а участие парамагнитной фазы в образовании гетерофазного состояния приводит к еще большему понижению критической температуры. Самая низкая критическая температура у ветви No 1:

$$\theta^c(\text{No } 1) = \theta^c(\{1, 2, 3\}) \Big|_{w_0 \neq 0} = \frac{J_3}{32}, \quad (48)$$

а самая высокая у ветви No. 15, реализуемой в гомофазной модели:

$$\theta^c(\text{No } 15) = \theta^c(\{3\}) \Big|_{w_0 \equiv 0} = \frac{J_3}{2}, \quad (49)$$

т.е. критическая температура состояния с максимальным смешиванием фаз в 16 раз меньше значения обычного для гомофазной теории среднего поля.

Приведем также следующие полезные выражения. Энтропия системы равна

$$S = \sum_{\{i\}} \left\{ -2w_i^2 \xi_i^2 \frac{J_i}{\theta} + \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{w_i^2 J_i \xi_i}{\theta} \right) \right\} + (4-d) \ln 2, \quad (50)$$

а теплоемкость имеет вид

$$C = -2 \sum_{\{i\}} w_i^2 J_i \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta}. \quad (51)$$

В следующей (второй) работе, помимо других результатов, для входящих в последнее выражение производных $\partial \xi_i / \partial \theta$ будут получены аналитические уравнения, замыкающие точное решение задачи с гамма-тонианом (32)–(34). Ввиду того, что эти уравнения достаточно громоздки, их вывод будет дан только для абсолютно стабильных ветвей решения.

Авторы признательны А.С. Шумовскому за обсуждение некоторых аспектов работы. Один из авторов (А.А.Б) благодарит С.В. Вонсовского за полезные дискуссии.

Литература

1. К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева, Р.З. Левитин. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. М.: Наука, 1979.
2. В.И. Юкалов. ТМФ, 1976, т. 26, № 3, 403–413.
3. В.И. Юкалов. ТМФ, 1976, т. 28, № 1, 92–103.
4. V.I. Yukalov. Phys. Rev., 1985, v. 32B, No 1, 436–446.
5. V.I. Yukalov. Physica, 1986, v. 136A, No 2–3, 575–587.
6. V.I. Yukalov. Physica, 1987, v. 141A, No 2–3, 352–374.
7. V.I. Yukalov. Phys. Lett., 1987, v. 125A, No 2–3, 95–100.
8. Г.Стэнли. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973.
9. Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985.
10. F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys., 1982, v. 54, No 1, 235–268.
11. Р. Бозорт. Ферромагнетизм. М.: Изд. иностр. литературы, 1956.
12. G. Balestrino, F. Scarinci, A. Ticiaron. J. Magn. Magn. Mat., 1984, v. 44, No 3, 249–253.
13. M. Pardavi-Horvath, L.I. Vinokurova, V.Yu. Ivanov. J. Magn. Magn. Mat., 1984, v. 41, No 1–3, 349–351.
14. А.И. Беляева, Ю.Н. Стельмахов, В.А. Потакова. ФТТ, 1977, т. 19, вып. 10, 3124–3125.

15. А.И. Беляева, М.М. Котлярский, Ю.Н. Стельмахов. ФТТ, 1977, т. 18, вып. 8, 2229–2231.
16. К.П. Белов, А.К. Звездин, Р.З. Левитин, А.С. Маркосян, Б.В. Милль, А.А. Мухин, А.П. Петров. ЖЭТФ, 1975, т. 68, вып. 3, 1189–1202.
17. В.А. Бородин, В.Д. Дорошев, В.А. Ключан, Н.М. Ковтун, А.Г. Титова. ФТТ, 1976, т. 18, вып. 7, 1852–1860.
18. S.Sh. Shilstein, V.A. Somenkov. J. Magn. Magn. Mat., 1984, v. 42, No 2, 193–197.
19. K. Endo, K. Ooiwa, A. Shing, M. Date, K. Hiramoto. J. Magn. Magn. Mat., 1983, v. 31–34, No 1, 75–76.
20. T. Sasaki, M. Date, K. Okudo. J. Magn. Magn. Mat., 1983, v. 31–34, No 1, 63–64.
21. S. Hirose, T. Tokuhana, H. Yamamoto, S. Fujimura, M. Sagawa, H. Yamauchi. J. Appl. Phys., 1981, v. 61, 3571.
22. D. Givord, H.S. Li, R. Perrier de la Bathie. Solid State Commun., 1984, v. 51, 857.
23. A.S. Borukhovich, V.G. Bamburov, A.A. Sidorov. J. Magn. Magn. Mat., 1988, v. 73, No 1, 106–114.
24. J. Ihlemann, K. Bärner. J. Magn. Magn. Mat., 1984, v. 46, No 1–9, 40–48.
25. G. Mennenga, L.J. de Jongh, W.J. Huiskamp, E. Sinn, A. Lambrecht, R. Burriel, R.L. Carlin. J. Magn. Magn. Mat., 1984, v. 44, No 1–2, 77–78.
26. J.M. Friedt, G. K. Shenoy, B.D. Dunlap, D.J. Westlake, A.T. Aldred. Phys. Rev., 1979, v. 20B, No 1, 251–256.
27. Z. Fisk, D. C. Jonston, B. Cornut, S. von Molnar, S. Oseraff, R. Calvo. J. Appl. Phys., 1979, v. 50, No 3 (II), 1911–1913.
28. S.V. Sinitsin, A.N. Spirin, M.N. Uspensky. Hyp. Int., 1986, v. 29, 1369.
29. К. Вильсон, Дж. Когут. Ренормализационная группа и \mathcal{E} -разложение. М.: Мир, 1975.
30. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, том 5(I), М.: Наука, 1976.
31. И.Е. Дзялошинский. ЖЭТФ, 1957, т. 33, вып. (6) 12, 1454–1456.
32. Н.Н. Боголюбов. Избранные труды, том 2. Киев, Наукова думка, 1970.
33. Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов. ЖЭТФ, 1949, т. 19, вып. 3, 256–268.
34. С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.

35. V.I. Yukalov. Phys. Lett., 1981, v. 81A, No. 5, 249-251.
36. V.I. Yukalov. Physica, 1981, v. 108A, No 2-3, 402-416.
37. V.I. Yukalov. Phys. Lett., 1981, v. 81A, No 8, 433-435.
38. А.С. Шумовский, В.И. Юкалов. ЭЧАЯ, 1985, т. 16, вып. 6, 1274-1329.
39. А.С. Шумовский, В.И. Юкалов. ДАН СССР, 1980, т. 252, № 3, 581-583.
40. A.S. Shumovsky, V.I. Yukalov. Physica, 1982, v. 110A, No 3, 518-534.
41. A.S. Shumovsky, V.I. Yukalov. Chem. Phys. Lett., 1985, v. 117, 617.
42. P.A. Pearce, C.J. Thompson. Comm. Math. Phys., 1975, v. 41, 191.
43. Н.Н. Боголюбов (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. М.: Наука, 1974.
44. K. Huzimi. Proc. Int. Conf. Theor. Phys., 53I. Tokyo, 1953, (ed. H. Yukawa).
45. H.N.V. Temperley. Proc. Phys. Soc., 1954, v. 67A, 233.
46. Гельфанд И.М., Минлос Р.А., Шаширо З.Я. Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения. М.: Физматгиз, 1958.
47. R. Gilmore. J. Math. Phys., 1984, v. 25, No 7, 2336-2338.
48. Я.И. Френкель. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 ноября 1988 года.

Бакасов А.А., Юкалов В.И.

P17-88-788

Микроскопическая теория спиновых
переориентаций - гетерофазный подход
и основная модель

Предлагается новый подход к описанию магнитных переориентационных переходов. В данном подходе, в отличие от известных, удалось совместить последовательную микроскопическую формулировку задачи с учетом возникновения в магнетике гетерофазных состояний, представляющих собой смесь фаз с разными направлениями намагниченности. Развиваемая теория иллюстрируется точно решаемой моделью, являющейся гетерофазным обобщением анизотропной модели Гейзенберга с дальнодействием.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод М.И.Потапова

Bakasov A.A., Yukalov V.I.

P17-88-788

Microscopic Theory of Spin Reorientations -
Heterophase Approach and Basic Model

A new approach to description of magnetic reorientation transitions is proposed. Unlike others, this approach allows the consequent microscopic formulation of the problem to be combined with taking into account heterophase states which occur in magnetics and are a mixture of phases with different directions of magnetization. The proposed theory is illustrated by an exactly solved model which is a heterophase generalization of the anisotropic Heisenberg model with long-range interaction.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988