

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Б 191

P17-88-844

А.А.Бакасов, В.И.Юкалов

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ  
СПИНОВЫХ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЙ —  
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ  
И ОБЩИЕ СВОЙСТВА

Направлено в журнал "Physica A"

1988

## I. Цели работы и основные соотношения

В предыдущей работе<sup>/I/</sup> с целью построения микроскопической теории спонтанных спиновых переориентаций была предложена и точно решена модель анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальнедействием. В этой же работе был проведен обзор и дан сравнительный анализ как основных экспериментальных фактов, так и известных теорий, касающихся описания спонтанных спиновых переориентаций. Совокупность этих экспериментальных и теоретических результатов определила выбор упомянутой модели в качестве основной.

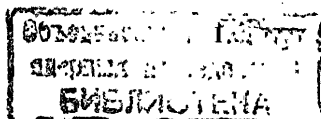
Формальное решение основной модели выявило, что в рассматриваемой системе возможны 15 ветвей термодинамического потенциала, каждая из которых может описывать устойчивые состояния. Однако эти состояния могут быть энергетически метастабильны друг относительно друга в зависимости от температуры системы. Поэтому в данной работе мы проведем анализ, позволяющий при заданной температуре выделить ту ветвь свободной энергии, которой соответствуют абсолютно стабильные термодинамические состояния. Будут также вычислены точки переориентаций и определены критические индексы как для этих точек, так и для точки Кюри. Вместе с определением рода фазовых переходов будут вычислены значения основных физических величин в точках переходов.

Приведем теперь сводку основных соотношений, полученных в предыдущей работе и необходимых для настоящей.

Основная модель определяется заданием четырех констант, характеризующих вещество: константы  $A \in ]-\infty, \infty[$ , устанавливающей соотношение между прямым и обменным взаимодействием электронов, и трех констант анизотропного обменного взаимодействия  $J_c$ ,  $c = 1, 2, 3$ , удовлетворяющих условию

$$J_3 > J_2 > J_1 > 0. \quad (I)$$

Как было строго показано (раздел 2 работы<sup>/I/</sup>), гомофазный анизотропный ферромагнетик Гейзенберга с дальнедействием имеет четыре чистые фазы и не претерпевает переориентационных переходов. Полный гамильтониан основной модели гетерофазного анизотропного ферромагнетика Гейзенберга с дальнедействием однозначно определяется согласно общей теории<sup>/2-5/</sup> на основе точного решения исходной гомофазной модели. Он имеет вид (см. раздел 3 и формулы (32)-(34) работы<sup>/I/</sup>)



$$H = H_0 \otimes \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 \otimes \hat{1}_3 + \hat{1}_0 \otimes H_1 \otimes \hat{1}_2 \otimes \hat{1}_3 + \\ + \hat{1}_0 \otimes \hat{1}_1 \otimes H_2 \otimes \hat{1}_3 + \hat{1}_0 \otimes \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 \otimes H_3. \quad (2)$$

Здесь индексы  $i = 1, 2, 3$  нумеруют вклады трех чистых ферромагнитных фаз с направлениями намагниченности по оси  $Ox, Oy, Oz$  соответственно, а нулевой индекс отвечает парамагнитной фазе. Следовательно,  $H_i, i = 1, 2, 3$ , — энергетические вклады ферромагнитных фаз, а  $H_0$  — парамагнитной. Для этих величин мы приведем выражения, полученные после перехода к априксимирующему гамильтониану [6], который точно определяет плотность свободной энергии системы в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$ .

Итак, пусть  $S_i$  — оператор  $i$ -той компоненты удельного спина системы,  $\xi_i$  — его среднее значение по каноническому распределению с полным гамильтонианом системы (2),  $W_i$  — вероятность  $i$ -той фазы ферромагнитного состояния ( $i = 1, 2, 3$ ),  $W_0$  — вероятность парамагнитного состояния (определение величин  $W$  как вероятностей или концентраций фаз и соответствующую строгую теорию см. в работах [2-5]),  $N$  — полное число частиц в системе. Тогда (см. подразделы 3.1.1 и 3.1.2 из работы [1])

$$H_i = N W_i^2 \left( \frac{A}{2} \hat{1}_i - J_i (2S_i - \xi_i \hat{1}_i) \xi_i \right), \quad (3)$$

$$H_0 = N W_0^2 \frac{A}{2} \hat{1}_0. \quad (4)$$

Формальное выражение плотности свободной энергии, вычисленной по гамильтониану (2) — (4), выглядит следующим образом (подраздел 3.1.2 в работе [1]):

$$f = W_0^2 \frac{A}{2} - \theta \ln 2 + \sum_{i=1}^3 \left\{ W_i^2 \left( \frac{A}{2} + J_i \xi_i^2 \right) - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left( \frac{W_i J_i \xi_i}{\theta} \right) \right\}. \quad (5)$$

Однако следует помнить, что системы уравнений, определяющие величины  $W_\nu, \nu = 0, 1, 2, 3$ , и  $\xi_i, i = 1, 2, 3$ , различны для разных ветвей  $f$ . Это учитывается следующим образом (подразделы 3.1.3 и 3.1.4 в работе [1]). Пусть физически наблюдаемая размерность параметра порядка  $\xi$  равна  $d$ , т.е. отлична от нуля  $d$  из трех вероятностей  $W_1, W_2, W_3$  ферромагнитной фазы. Это означает, что возможны гетерофазные состояния не только с полным смешиванием всех ферромагнитных фаз, когда  $d = 3$ , но и

состояния с  $d = 2$  или же с  $d = 1$ . Соберем номера ферромагнитных фаз с отличной от нуля вероятностью во множество, обозначаемое  $\{i\}$ . Очевидно, что  $\{i\}$  — это любое подмножество множества  $\{1, 2, 3\}$ . Тогда в зависимости от того, участвует ли в гетерофазном состоянии парамагнитное состояние, получаем два различных набора уравнений. Именно, если  $W_0 \neq 0$  во всем интервале температур, то

$$W_0 = \frac{1}{1 + \sum_{i \in \{i\}} \frac{1}{A - 2J_i \xi_i^2}}, \\ W_i = \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2} W_0, \quad i \in \{i\}, \quad W_j = 0, \quad j \notin \{i\}, \quad (6)$$

а если парамагнитная фаза не дает вклада в гетерофазное состояние, то

$$W_0 = 0, \\ W_i = \frac{1}{A - 2J_i \xi_i^2} \cdot \frac{1}{\sum_{j \in \{i\}} \frac{1}{A - 2J_j \xi_j^2}}, \quad i \in \{i\}, \quad (7)$$

$$W_j = 0, \quad j \notin \{i\}.$$

Уравнения для среднего удельного спина системы формально всегда одинаковы:

$$\xi_i = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \frac{W_i J_i \xi_i}{\theta} \right), \quad i \in \{i\}, \\ \xi_j = 0, \quad j \notin \{i\}, \quad (8)$$

но для различных ветвей плотности свободной энергии системы входящие в (8) функции  $W_i$  определяются различными уравнениями вида (6) или (7).

Отметим, что, как было показано (подраздел 3.1.5 работы [1]), при условии  $A > J_3/2$  имеют место неравенства

$$W_i \geq W_{i'}, \quad \xi_i \geq \xi_{i'}, \quad i > i', \quad i, i' \in \{i\}. \quad (9)$$

Введем следующую функцию:

$$J(\{i\}) = \max_{i \in \{i\}} J_i, \quad \{i\} \neq \{\emptyset\}. \quad (10)$$

Тогда температуры Кюри для различных ветвей имеют вид

$$\theta^c(\{i\}) = \frac{J(\{i\})}{2} \frac{1}{(1+d)^2}, \quad W_0 \neq 0, \quad (11)$$

$$\theta^c(\{i\}) = \frac{J(\{i\})}{2d^2}, \quad W_0 \equiv 0. \quad (I2)$$

Из вида плотности свободной энергии (5) получаем следующее выражение для удельной теплоемкости:

$$C = -2 \sum_{\{i\}} W_i^2 J_c \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta}. \quad (I3)$$

В заключение данного раздела отметим, что согласно классификации, введенной в предыдущей работе /I/, ветвь свободной энергии с максимальным смешиванием всех четырех фаз именуется ветвью № I, а ветвь, описывающая гомофазный магнетик с намагниченностью вдоль оси  $Oz$ , именуется ветвью № I5. Другие подробности содержатся в подразделе 3.1.3 работы /IV/.

## 2. Абсолютно стабильные состояния

### 2.1. Выбор абсолютно стабильных ветвей решения

Среди пятнадцати ветвей свободной энергии (5) при данных значениях констант, характеризующих вещество, и при данной температуре наиболее стабильной будет ветвь с наименьшим значением плотности свободной энергии. При этом теплоемкость (I3) должна быть неотрицательна, а вероятности фаз должны иметь физический смысл, т.е.

$$0 \leq W_\nu \leq 1, \quad \nu = 0, 1, 2, 3. \quad (I4)$$

Также должно выполняться условие выпуклости свободной энергии по параметрам  $W_i, i \in \{i\}$  /3,4/:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial W_i^2} \geq 0, \quad i \in \{i\}. \quad (I5)$$

Из неравенств для констант магнитной анизотропии (I) следует, что достаточными условиями для выполнения соотношений (I4) будут два неравенства, которые определяются из (6) и (7):

$$A > \frac{J_3}{2}, \quad (I6)$$

$$A \leq 0. \quad (I7)$$

В указанных интервалах изменения параметра  $A$  гарантируется выполнение неравенств (I4). Условия (I5), как можно показать прямым вычислением, при этом также выполняются.

В интервале  $0 < A \leq \frac{J_3}{2}$  возможны нефизические значения величин  $W_\nu, \nu = 0, 1, 2, 3$ . В этом случае получить какую-либо аналитическую информацию из выражений (6) - (7) и уравнений для компонент удельного спина (8) представляется достаточно затруднительным, следовательно, необходим численный анализ. К тому же требуется сравнить значения различных ветвей плотности свободной энергии при фиксированной температуре с целью отбора абсолютно стабильной ветви, а это снова можно сделать для всего интервала температур лишь численно.

Аналитически можно провести сравнение только для нуля температуры. Нельзя сделать это в критических точках ветвей, поскольку, как это следует из (II) и (I2), в общем случае эти критические точки разные и сравнение теряет смысл.

Проведем сравнение значений плотности свободной энергии различных ветвей в нуле температур. Сохраняя нумерацию ветвей, введенную в подразделе 3.1.3 работы /I/, вычислим сначала значения вероятностей. При  $\theta = 0$  для ветвей № I - № 7 получаем следующие значения вероятностей, считая, что выполняется одно из неравенств (I6) или (I7):

$$W_0(\theta=0) = \frac{1}{1 + \sum_{\{i\}} \frac{A}{A - J_i/2}}, \quad (I8)$$

$$W_i(\theta=0) = \frac{A}{A - J_i/2} W_0(\theta=0), \quad i \in \{i\}.$$

Плотность свободной энергии для этих ветвей принимает следующие значения:

$$f(\theta=0) = \frac{A}{2} \frac{1}{1 + \sum_{\{i\}} \frac{A}{A - J_i/2}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{A} + \sum_{\{i\}} \frac{1}{A - J_i/2}}. \quad (I9)$$

Для ветвей № 9 - № I5 вероятности равны

$$W_0 \equiv 0,$$

$$W_i(\theta=0) = \frac{1}{A - J_i/2} \frac{1}{\sum_{\{i\}} \frac{1}{A - J_i/2}}, \quad i \in \{i\}, \quad (I10)$$

а значения плотностей свободной энергии следующие:

$$f(\theta=0) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sum_{\{i\}} \frac{1}{A - J_i/2}}. \quad (I11)$$

Пусть теперь параметр  $A$  удовлетворяет неравенству (I6). Это означает, что интенсивность разупорядочивающего спина системы прямо-

го кулоновского взаимодействия достаточно велика по сравнению с интенсивностью упорядочивающего спины обменного взаимодействия, характеризуемого обменными интегралами  $J_i$ . Как можно видеть из выражений (19) и (21), наличие достаточно сильного разупорядочивания приводит к тому, что энергетически наиболее выгодными уже при нуле температуры становятся состояния с максимальным смешиванием всех фаз системы, а именно: наименьшей среди всех пятнадцати ветвей плотности свободной энергии системы становится в этом случае ветвь № I. При этом неравенства (15) также выполняются.

В этом случае, когда в системе упорядочивающее обменное взаимодействие доминирует над разупорядочивающим прямым кулоновским взаимодействием, мы можем считать, что имеет место неравенство (17). Теперь мы можем видеть, что в этом случае наименьшее значение в нуле температуры имеет плотность свободной энергии для ветви № I5, т.е. системе уже выгоднее состояния, когда спины упорядочены только в направлении с наибольшей константой анизотропии  $J_3$  - вдоль оси  $Oz$ .

Можно ожидать, что для значений  $A$  из рассмотренных интервалов,  $A > \frac{J_3}{2}$  и  $A \leq 0$ , вышеуказанная ситуация сохраняется не только для нуля температур, но и для всех температур выше нуля. И численный анализ подтверждает это. Действительно, во всем интервале температур, если  $A > \frac{J_3}{2}$ , то абсолютно минимальной являлась ветвь № I - состояния с максимальным смешиванием всех четырех фаз и температурой Кюри  $\theta^c = J_3/32$ , а если  $A < 0$ , то абсолютно минимальной является ветвь № I5 - состояния чистой ферромагнитной фазы с намагниченностью вдоль оси  $Oz$  и температурой Кюри  $\theta^c = J_3/2$ .

Рассмотрим промежуточную область значений

$$0 < A \leq \frac{J_3}{2}. \quad (22)$$

Если слева от этой области реализуется ветвь № I5, а справа - ветвь № I, то можно ожидать, что в этой области одна ветвь переходит в другую. Численный анализ показал, что переход происходит непосредственно из ветви № I5 в ветвь № I при увеличении значений  $A$  без переходов на какие-либо промежуточные ветви.

Отдельным является вопрос о термодинамической устойчивости состояний, для которых вычисляемые значения плотности свободной энергии найдены минимальными. Аналитическое рассмотрение, которое будет приведено в подразделе 3.2 данной работы, показывает, что ветвь минимальных значений плотности свободной энергии не всегда термодинамически устойчива. Последнее можно видеть, в частности, по знаку теплоемкости. Так, выясняется, что помимо интервала (22) выделенной является

также область

$$\frac{J_3}{2} < A \leq \frac{9J_3}{4}, \quad (23)$$

где ниже некоторой температуры  $\theta_0$  реализуется ветвь № I5 с ненулевой намагниченностью, а выше - ветвь № I с нулевой намагниченностью (см. в дальнейшем формулы (45) и (48) и их обсуждение).

Как видно, найти аналитическое решение уравнений (6)-(8), являющихся необходимыми условиями минимума свободной энергии (5), представляется весьма затруднительным. Однако и численный анализ, основанный на минимизации функции (5) по  $W_i$  и  $\xi_i$  при фиксированных величинах  $\theta, A, J_i$ , не позволяет рассчитать все желаемые величины, например теплоемкость (13), в которую входят производные  $\partial \xi_i / \partial \theta$ , ведущие себя сингулярно вблизи точек фазовых переходов.

Для численной минимизации функции (5) использована программная система MINUIT [7], предназначенная для поиска абсолютного минимума функций достаточно общего вида, зависящих от многих переменных (в использованной версии программы - до 150 переменных). Расчеты показали, что функция (5) является скачкообразно изменяющейся со множеством локальных минимумов и оврагов. Такой характер поведения функции (5) требовал очень больших объемов вычислений и большого количества их качественных проверок, а также сделал невозможным вычисление производных  $\partial \xi_i / \partial \theta$  с какой-либо приемлемой точностью в достаточном количестве точек по параметрам  $\theta, A, J_1, J_2, J_3$  и переменным  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, W_1, W_2, W_3$ .

Тем не менее объем полученной достоверной численной информации позволил вместе с точным аналитическим решением построить термодинамику анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальнедействием.

Свободная энергия (5) минимизировалась по параметрам  $\xi_i$  и  $W_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) с учетом условия нормировки вероятностей  $W_0 = 1 - \sum_{i=1}^3 W_i$  в области физического изменения параметров:  $0 \leq \xi_i \leq 1/2, 0 \leq W_i \leq 1$ . Значения I5 различных ветвей плотности свободной энергии затем сравнивались. Параметры  $\theta, A, J_1, J_2$  изменялись в единицах  $J_3$ , т.е. полагалось  $J_3 = 1$ . Обменные интегралы  $J_1$  и  $J_2$  принимали значения от нуля до единицы с сохранением неравенств (1). Температура  $\theta$  также варьировалась от нуля до единицы, что было вполне достаточно, так как наибольшая из критических температур согласно (12) равна в этих единицах 1/2 (см. также формулу (49) и поясняющий текст в подразделе 3.1.6 работы [1]). Параметр  $A$  принимал следующие значения:  $-10^0, -10^3, -10, -1,$

-  $5 \times 10^{-1}$ ,  $-10^{-1}$ ,  $-10^3$ , 0, затем в интервале  $0 < A \leq 0,5$  с шагом  $10^{-2}$  и далее 0,5001, 0,75, 1, 10,  $10^3$ ,  $10^6$ . При каждом фиксированном наборе параметров  $\theta$ ,  $A$ ,  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$  неоднократно менялись при минимизации стартовые значения  $\xi_i^{0r}$  и  $w_i^0$  ( $i=1, 2, 3$ ), пока с достоверностью не находились абсолютный минимум.

Итак, в зависимости от значения параметра  $A$  баланса прямого и обменного взаимодействий абсолютно стабильными являются либо ветвь № 15 - гомофазные состояния с одноосным намагничиванием, либо ветвь № 1 - состояния с максимальным смешиванием фаз, отвечающие спонтанным спиновым переориентациям.

Перейдем к получению замкнутых систем уравнений для термодинамических величин, характеризующих абсолютно стабильные ветви.

### 2.2. Уравнения для состояний с одноосным упорядочением (ветвь № 15)

В интервале  $A \leq 0$ , а также в промежуточном интервале (22) и интервале фазового перехода I-го рода (23) при температурах, когда абсолютно стабильны одноосные состояния, свободная энергия системы имеет вид

$$f(\text{№.15}) = J_3 \xi_3^2 - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left( \frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right) + \frac{A}{2} - 3\theta \ln 2. \quad (24)$$

Параметр порядка однокомпонентен  $\vec{\xi} = \{0, 0, \xi_3\}$ , где  $\xi_3$  удовлетворяет стандартному уравнению (график зависимости  $\xi_3$  от  $\theta$  изображен на рис. 1).

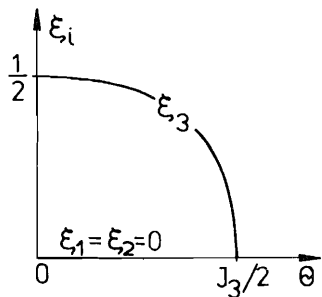


Рис. 1  
Средний удельный спин, ветви № 15 решения гетерофазной модели при  $A \leq 0$ . Система гомофазна.

$$\xi_3 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right), \quad (25)$$

откуда получаем значение критической температуры  $\theta^c = \frac{J_3}{2}$ . В системе нет переориентационных переходов, фазовый переход происходит один

раз. Род перехода - второй. Теплоемкость имеет вид

$$C(\text{№.15}) = \left( \frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right)^2 (1 - 4 \xi_3^2) / \sum_{h=0}^{\infty} \frac{2(2 \xi_3^2)^{2h+2}}{(2h+1)(2h+3)}. \quad (26)$$

Зависимости вероятностей и теплоемкости от температуры показаны на рисунках 2 и 3. Критические индексы имеют обычные для теории среднего поля значения.

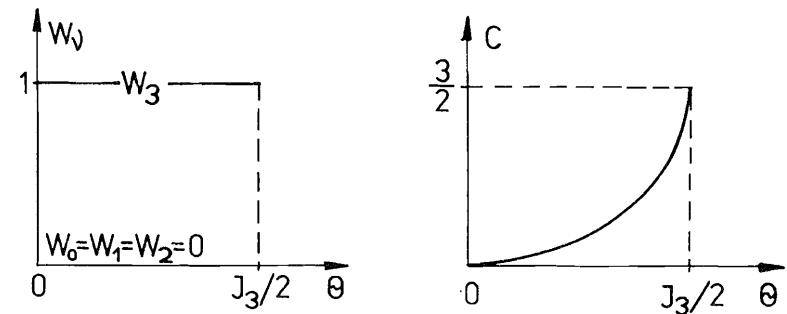


Рис. 2, 3

Вероятности фаз и теплоемкость ветви № 15 решения гетерофазной модели при  $A \leq 0$ . Система гомофазна.

### 2.3. Уравнения для состояний с наибольшим смешиванием фаз (ветвь № 1)

При  $A > \frac{J_3}{2}$ , а также для температур, когда абсолютно стабильны состояния с максимальным смешиванием в промежуточном интервале по параметру  $A$  (22), реализуется ветвь № 1. Плотность свободной энергии, в этом случае представляется выражением

$$f(\text{№.1}) = w_0^2 \frac{A}{2} - \theta \ln 2 + \sum_{i=1}^3 \left\{ w_i^2 \left( \frac{A + J_i \xi_i^2}{2} \right) - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left( \frac{w_i J_i \xi_i}{\theta} \right) \right\}, \quad (27)$$

в котором все величины  $W_\nu$ ,  $\nu = 0, 1, 2, 3$ , отличны от нуля и определяются через компоненты удельного спина посредством соотношений

$$W_0 = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^3 \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2}}, \quad (28)$$

$$W_i = \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2} W_0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Параметр порядка трехкомпонентен:  $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3\}$ , и имеют место уравнения

$$\xi_i = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \frac{W_i^2 J_i \xi_i}{2} \right), \quad i = 1, 2, 3, \quad (29)$$

а общее выражение для теплоемкости имеет вид

$$C(\text{No.1}) = \sum_{i=1}^3 C_i(\text{No.1}) = -2 \sum_{i=1}^3 J_i W_i^2 \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta}. \quad (30)$$

Для нахождения производных в (30) продифференцируем по  $\theta$  уравнения (29), что дает

$$\frac{\partial W_i}{\partial \theta} = \frac{W_i}{2\theta} + \left( \frac{\theta}{J_i W_i \xi_i (1 - 4\xi_i^2)} - \frac{W_i}{2\xi_i} \right), \quad (31)$$

а затем, чтобы избавиться от производной в левой части (31), продифференцируем (28). Получим

$$\frac{\partial W_i}{\partial \theta} = \frac{4}{A - 2J_i \xi_i^2} \sum_{k=1}^3 (\delta_{ik} W_i J_i \xi_i - W_k^2 J_k \xi_k) \frac{\partial \xi_k}{\partial \theta}. \quad (32)$$

Уравнения (32) и (31) вместе с уравнениями (28) и (29) дают неоднородную систему линейных уравнений относительно  $\frac{\partial \xi_k}{\partial \theta}$ , коэффициенты которой суть функции от  $W_i$ ,  $\xi_i$  и  $\theta$ :

$$\sum_{j=1}^3 (T_{ij} - \delta_{ij} U_j) \frac{\partial \xi_j}{\partial \theta} = \frac{W_i}{2\theta}, \quad (33)$$

где

$$T_{ij} = \frac{\partial W_i}{\partial \xi_j} = \frac{4}{A - 2J_i \xi_i^2} (\delta_{ij} W_i J_i \xi_i - W_j^2 J_j \xi_j),$$

$$U_j = \frac{\theta}{W_j J_j \xi_j (1 - 4\xi_j^2)} - \frac{W_j}{2\xi_j}.$$

С помощью системы уравнений (33) замыкается точное решение модельной задачи с гамильтонианом (2)-(4), поскольку мы имеем точные урав-

нения, позволяющие определить все термодинамические характеристики рассматриваемой модели. Для полноты приведем выражение для энтропии системы в данной ветви:

$$S(\text{No.1}) = C_k 2 + \sum_{i=1}^3 \left[ -2W_i^2 \xi_i \frac{J_i}{\theta} + \ln 2 \operatorname{ch} \left( \frac{W_i^2 J_i \xi_i}{\theta} \right) \right]. \quad (34)$$

### 3. Общие свойства

#### 3.1. Вычисление точек спонтанных спиновых переориентаций (ветвь № I)

Поскольку параметр порядка для этой ветви трехкомпонентен, то в системе должны происходить спиновые переориентации при изменении температуры. Назовем точками переориентаций также значения температуры  $\theta_i^?$ , когда  $i$ -я компонента удельного спина  $\xi$  становится равной нулю. Очевидно, что точка переориентации для третьей компоненты  $\xi_3$  совпадает с критической точкой (9):  $\theta_3^? = \theta^c = J_3/32$ .

Выясним характер поведения свободной энергии и ее производных в окрестности точек переориентаций. Рассмотрим уравнения для компонента спина (29). В окрестности точки  $\theta_i^?$  соответствующая компонента спина  $\xi_i$  становится малой и может служить переменной для степенного разложения величин, зависящих от нее. Имея в виду такие разложения, представим вероятности (28) в несколько иной форме. Введем следующие величины, которые, как видно, не зависят от  $\xi_i$  с данным номером  $i$ :

$$B_i = 1 + \sum_{k \neq i} \frac{A}{A - 2J_k \xi_k^2}, \quad (35)$$

$$\gamma_i = \frac{2B_i J_i}{A(1 + B_i)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Тогда вероятности  $W_i$  тождественно представляются в форме ряда по  $\xi_i$  с коэффициентами, не зависящими от данной компоненты удельного спина  $\xi_i$ :

$$W_i = \frac{1}{1 + B_i} \left( 1 + \sum_{h=1}^{\infty} (\gamma_i \xi_i^2)^h \right), \quad i = 1, 2, 3. \quad (36)$$

Величины  $B_i$  и  $\gamma_i$  зависят от температуры через другие компоненты  $\xi_j$ ,  $j \neq i$ .

Введем относительные температуры

$$\Sigma_i^? = \frac{\theta - \theta_i^?}{\theta_i^?}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (37)$$

Тогда из уравнений (29) можно получить следующие разложения:

$$\bar{\Sigma}_i^2 = \frac{\theta - \theta_i^2}{\theta_i^2} = \xi_i^2 \left( 2\bar{\gamma}_i - \frac{4}{3} \right) + \xi_i^4 \left( 3\bar{\gamma}_i^2 - 8\bar{\gamma}_i + 2\frac{2}{15} \right) + \dots \quad (38)$$

Входящие в эти разложения не зависящие от температуры коэффициенты  $\bar{\gamma}_i$  определяются следующим образом. Если  $\eta_2$  и  $\eta_3$  - решения уравнений

$$\eta_2 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \left( \frac{A}{A - 2J_2 \eta_2^2} \right)^2 \frac{2J_2 \eta_2}{J_1} \right), \quad (39)$$

$$\eta_3 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \left( \frac{A}{A - 2J_3 \eta_3^2} \right)^2 \frac{2J_3 \eta_3}{J_1} \right),$$

то тогда

$$\bar{\gamma}_1 = \frac{2 \bar{B}_1 J_1}{A(1 + \bar{B}_1)},$$

$$\bar{B}_1 = 1 + \frac{A}{A - 2J_2 \eta_2^2} + \frac{A}{A - 2J_3 \eta_3^2}. \quad (40)$$

Если  $\zeta$  - решение уравнения

$$\zeta = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left( \left( \frac{A}{A - 2J_3 \zeta^2} \right)^2 \frac{2J_3 \zeta}{J_2} \right), \quad (41)$$

то тогда

$$\bar{\gamma}_2 = \frac{2 \bar{B}_2 J_2}{A(1 + \bar{B}_2)},$$

$$\bar{B}_2 = 2 + \frac{A}{A - 2J_3 \zeta^2}. \quad (42)$$

Наконец,  $\bar{B}_3 = 3$  и

$$\bar{\gamma}_3 = \frac{3J_3}{2A}. \quad (43)$$

Как видно из (29), температуры переориентаций даются одной общей формулой:

$$\theta_i^2 = \frac{J_i}{2} \frac{1}{(1 + \bar{B}_i)^2} = \frac{J_i}{2} W_i^2 (\theta = \theta_i^2) = \frac{J_i}{2} W_0^2 (\theta = \theta_i^2). \quad (44)$$

Таким образом, мы выяснили, что коэффициенты  $\bar{\gamma}_i$  и  $\bar{B}_i$  зависят только от констант гамильтониана.

Поскольку вероятности  $W_i (\theta = \theta_i^2)$  могут иметь в интерва-

ле  $0 < A \leq \frac{J_3}{2}$  и нефизические значения, то точка переориентации для какой-либо компоненты может в этой ситуации и не существовать. Это означает либо, что по данной компоненте имеет место переход I-го рода, либо, что для абсолютно стабильного решения эта компонента тождественно равна нулю для всех температур.

Из разложения (38) следует, что вблизи точки переориентации  $\theta_i^2$  критическое поведение соответствующей компоненты удельного спина имеет двоякий характер в зависимости от значений параметров гамильтониана:

$$\xi_i \sim \sqrt{\frac{\Sigma_i^2}{2\bar{\gamma}_i - \frac{4}{3}}}, \quad \bar{\gamma}_i \neq \frac{2}{3}, \quad (45)$$

$$\xi_i \sim 0,857 (-\Sigma_i^2)^{\frac{1}{4}}, \quad \bar{\gamma}_i = \frac{2}{3}.$$

Как видно из (45), если  $\bar{\gamma}_i < \frac{2}{3}$ , то компонента  $\xi_i$  отлична от нуля ниже точки переориентации, а если  $\bar{\gamma}_i > \frac{2}{3}$ , то поведение компоненты удельного спина  $\xi_i$  в некотором смысле аномально - она равна нулю ниже точки переориентации  $\theta_i^2$ , а в некотором интервале температур выше неё - отлична от нуля. Но, конечно, модуль удельного спина с повышением температуры убывает.

### 3.2. Критические индексы (ветвь № I)

Намагниченность анизотропного гетерофазного ферромагнетика с учетом физического смысла вероятностей фаз  $W_i$  (подробнее см. подраздел 3.1.1 работы [1] и общую теорию в [2 - 5]) следует определить как вектор с компонентами:

$$\vec{M} = \{W_1 \xi_1, W_2 \xi_2, W_3 \xi_3\}. \quad (46)$$

Критический индекс  $\beta_i$  для компонент намагниченности:

$$\beta_i = \lim_{\Sigma_i^2 \rightarrow 0} [c_n M_i / c_n |\Sigma_i^2|], \quad (47)$$

можно вычислить, используя выражение (36) для вероятности  $W_i$ , которая непрерывна в  $\theta_i^2$  и равна  $1/(1 + \bar{B}_i)$ , вместе с температурной зависимостью (45), что дает



$$M_i \sim \frac{1}{1+B_i} (2\bar{\delta}_i - \frac{4}{3})^{-\frac{1}{2}} \Sigma_i^{\frac{1}{2}}, \quad \bar{\delta}_i > \frac{2}{3},$$

$$M_i \sim \frac{1}{1+B_i} (\frac{4}{3} - 2\bar{\delta}_i)^{-\frac{1}{2}} (-\Sigma_i^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \bar{\delta}_i < \frac{2}{3},$$

$$M_i \sim \frac{3J_i - A}{3J_i} \cdot 0,857 (-\Sigma_i^2)^{\frac{1}{4}}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \quad (48)$$

Заметим, что последний случай в (48) реализуется, если помимо условия  $\bar{\delta}_i = 2/3$  выполняется еще и условие положительности вероятности  $w_i(\theta = \theta_i^?) = \frac{3J_i - A}{3J_i}$ , которое сводится к неравенству  $A < 3J_i$ .

Таким образом, критический индекс  $\beta_i$  для компоненты намагниченности  $M_i$  может принимать два значения:

$$\beta_i = \frac{1}{2}, \quad \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3},$$

$$\beta_i = \frac{1}{4}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \quad (49)$$

Заметим, что из (48), так же как и из (45), следует anomальное поведение намагниченности - её компоненты, пропорциональные  $\xi_1$ ,  $\xi_2$  и  $\xi_3$  возрастают справа от точки Кюри при  $\bar{\delta}_i > 2/3$ . Поскольку согласно (43)  $\bar{\delta}_3 = 3J_3/2A$ , то из неравенства  $\bar{\delta}_3 > 2/3$  и неравенства  $A > J_3/2$  имеем следующее условие anomального возрастания всех компонент намагниченности:

$$\frac{J_3}{2} < A \leq \frac{9J_3}{4}.$$

Это условие уже упоминалось в подразделе 2.1 - формула (23). Anomальное возрастание всех компонент намагниченности ведет к нестабильности системы, поскольку теплоемкость (13) становится отрицательной. Следовательно, условие (23) есть условие существования фазового перехода I-го рода. Слева от точки Кюри намагниченность в этом случае нулевая, поэтому ветвь № I не реализуется, а реализуется ветвь № I5. Anomальное поведение отдельных компонент намагниченности возможно при условии (22):  $0 < A \leq \frac{J_3}{2}$ .

Чтобы вычислить критический индекс  $\alpha_i$  для теплоемкости, определяемый как

$$\alpha_i = - \lim_{\Sigma_i^2 \rightarrow 0} [ \ln c / \ln |\Sigma_i^2| ], \quad (50)$$

заметим, что согласно (37) и (45) производные  $\partial \xi_i / \partial \theta$ , входящие в (30), вблизи соответствующих точек переориентаций  $\theta_i^?$  ведут себя

следующим образом:

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} \sim \frac{1}{2\theta_i^?} \frac{1}{\sqrt{(2\bar{\delta}_i - \frac{4}{3}) \Sigma_i^2}}, \quad \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3},$$

$$\frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} \sim - \frac{0,214 (-\Sigma_i^2)^{-\frac{3}{4}}}{\theta_i^?}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \quad (51)$$

Далее, вблизи  $\theta_i^?$  компоненты удельного спина  $\xi_j$ ,  $j \neq i$ , и вероятности  $w_j$ ,  $j \neq i$ , непрерывны. Поэтому поведение теплоемкости в окрестности  $\theta_i^?$ , как это видно из (30), может утратить непрерывный характер только за счет слагаемого

$$C_i(Nb.1) = - 2J_i w_i^2 \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta}. \quad (52)$$

Вычислим согласно (52) предельные значения теплоемкости слева и справа от  $\theta_i^?$ , а затем их разность

$$\Delta C(Nb.1) \Big|_{\theta = \theta_i^?} = \Delta C_i = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ C_i(Nb.1) \Big|_{\theta = \theta_i^? - \varepsilon} - C_i(Nb.1) \Big|_{\theta = \theta_i^? + \varepsilon} \right\}. \quad (53)$$

Применяя формулы (44), (45) и (51), получаем, что в зависимости от параметров гамильтониана в точке  $\theta_i^?$  скачок теплоемкости имеет одно из двух следующих значений:

$$\Delta C(Nb.1) \Big|_{\theta = \theta_i^?} = \Delta C_i = \frac{1}{|\bar{\delta}_i - \frac{2}{3}|}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3},$$

$$\Delta C(Nb.1) \Big|_{\theta = \theta_i^?} = \Delta C_i(\Sigma_i^2) \approx 0,366 (-\Sigma_i^2)^{-\frac{1}{2}}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \quad (54)$$

Тогда критический индекс  $\alpha_i$  для теплоемкости в точке  $\theta_i^?$  равен

$$\alpha_i = 0, \quad \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3},$$

$$\alpha_i = \frac{1}{2}, \quad \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \quad (55)$$

Заметим, что при всех значениях параметров гамильтониана, допускающих данный анализ поведения намагниченности и теплоемкости в точке  $\theta = \theta_i^?$ , выполняется соотношение

$$\alpha_i + 2\beta_i = 1, \quad i = 1, 2, 3. \quad (56)$$

Подробное исследование термодинамических характеристик во всем интервале температур будет проведено в последующей работе.

Литература

1. Бакасов А.А., Юкалов В.И. Препринт ОИЯИ P17-88-788, Дубна, 1988.
2. Yukalov V.I. Phys. Rev., 1985, v. 32B, No 1, p. 436-446.
3. Yukalov V.I. Physica, 1986, v. 136A, No 2-3, p. 575-587.
4. Yukalov V.I. Physica, 1987, v. 141A, No 2-3, p. 352-374.
5. Yukalov V.I. Phys. Lett., 1987, v. 125A, No 2-3, p. 95-100.
6. Боголюбов Н.Н. (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. М.:Наука, 1974.
7. James F., Roos M. MINUIT Long-write up, CERN Computer Center Program Library, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел  
8 декабря 1988 года.

Бакасов А.А., Юкалов В.И.

P17-88-844

Микроскопическая теория спиновых  
переориентаций - термодинамическая  
устойчивость и общие свойства

Анализируется устойчивость термодинамических состояний для предложенной ранее авторами гетерофазной модели со спиновыми переориентациями. Определяются точки переориентаций и точки Кюри и находятся критические индексы в этих точках.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод М.И.Потапова

Bakasov A.A., Yukalov V.I.

P17-88-844

Microscopic Theory of Spin Reorientations -  
Thermodynamic Stability and General  
Properties

Stability of thermodynamic states is analysed for the heterophase model with spin reorientations, earlier proposed by the authors. Reorientation points and Curie points are determined and the critical indices are found in these points.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988