

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

88-924
6' 19

P17-88-924

А.А.Бакасов, В.И.Юкалов

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ
СПИНОВЫХ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЙ –
ТЕРМОДИНАМИКА И ЯВЛЕНИЕ НУКЛЕАЦИИ

Направлено в журнал "Physica A"

1988

I. Цели работы и основные соотношения

Теперь, на основе результатов, полученных в предыдущих работах /I,2/, мы готовы дать достаточно полное описание термодинамики основной модели, задаваемой гамильтонианом

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

$$H_0 = N W_0^2 \frac{A}{2} \hat{I}_0, \quad (2)$$

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

где A - параметр соотношения прямого и обратного взаимодействия электронов, J_i - обменные интегралы, удовлетворяющие неравенствам

$$J_3 > J_2 > J_1 > 0, \quad (4)$$

N - число спинов в системе, S_i ($i=1,2,3$) - операторы i -ой компоненты спина $1/2$, ξ_i ($i=1,2,3$) - средние значения операторов S_i по каноническому распределению с гамильтонианом (I)-(3), W_i ($i=0,1,2,3$) - вероятности парамагнитной и трех ферромагнитных фаз системы (подробное описание модели см. в подразделе 3.1.2 работы /I/).

Как было показано /2/, истинным термодинамическим потенциалом системы в зависимости от значений параметров гамильтониана A , J_1 , J_2 , J_3 и температуры θ будет либо ветвь No.1 свободной энергии, описывающая состояния с максимальным смешиванием всех четырех фаз системы, либо ветвь No.15, описывающая состояния гомофазного одноосного ферромагнетика с намагниченностью вдоль оси Oz (более подробно классификацию различных ветвей плотности свободной энергии системы с гамильтонианом (I) - (3) см. в подразделе 3.1.3 работы /I/).

Ветвь No.15 характеризуется плотностью свободной энергии /I,2/

$$f(\text{No.15}) = J_3 \xi_3^2 - \theta \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right) + \frac{A}{2} - 3\theta \ln 2, \quad (5)$$

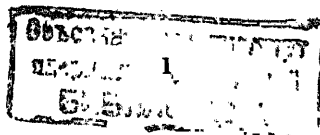
где ξ_3 - решение уравнения

$$\xi_3 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right), \quad (6)$$

а теплоёмкость имеет вид

$$C(\text{No.15}) = \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right)^2 (1 - 4 \xi_3^2) / \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2 (2 \xi_3^2)^{2n+2}}{(2n+1)(2n+3)}. \quad (7)$$

Плотность свободной энергии для ветви No.1 есть /I,2/



$$f(N_{b.1}) = W_0^2 \frac{A}{2} - \alpha c_1 2 + \sum_{i=1}^3 \left\{ W_i^2 \left(\frac{A}{2} + J_i \xi_i^2 \right) - \alpha c_i 2 c h_2 \left(\frac{W_i^2 J_i \xi_i}{\theta} \right) \right\}, \quad (8)$$

где вероятности W_i , $i = 0, 1, 2, 3$, и компоненты среднего спина ξ_i , $i = 1, 2, 3$, описываются уравнениями

$$W_0 = \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^3 \frac{A}{A - 2J_k \xi_k^2}}, \quad (9)$$

$$W_i = \frac{A}{A - 2J_i \xi_i^2} W_0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (10)$$

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

II выражения для удельной теплоемкости данной ветви

$$C(N_{b.1}) = \sum_{i=1}^3 C_i(N_{b.1}) = -2 \sum_{i=1}^3 J_i W_i^2 \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} \quad (11)$$

получит приближенно $\partial \xi_i / \partial \theta$, для которых в подразделе 2.3 работы [2] была получена система уравнений, замыкающая точное решение равновесной задачи с модельным гамильтонианом (I)-(3).

Определим точку переориентации $\theta_i^?$, $i = 1, 2, 3$ как значение температуры, при которой обращается в ноль i -я компонента удельного среднего спина ξ_i . Для относительной температуры $\bar{\xi}_i^?$ в окрестности точки $\theta_i^?$ справедливо разложение (см. подраздел 3.1 работы [2]):

$$\bar{\xi}_i^? \approx \frac{\theta - \theta_i^?}{\theta_i^?} \approx \xi_i^2 \left(2\bar{\delta}_i - \frac{4}{3} \right) + \xi_i^4 \left(3\bar{\delta}_i^2 - 8\bar{\delta}_i + 2\frac{2}{15} \right). \quad (12)$$

Входящие в это разложение величины $\bar{\delta}_i$ определяются следующим образом. Пусть числа η_2 и η_3 - решения уравнений:

$$\eta_2 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\left(\frac{A}{A - 2J_2 \eta_2^2} \right)^2 \frac{2J_2 \eta_2}{J_1} \right), \quad (13)$$

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

Тогда

$$\bar{\delta}_1 = \frac{2\bar{B}_1 J_1}{A(1 + \bar{B}_1)}, \quad (14)$$

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

Далее, пусть ζ - решение уравнения

$$\zeta = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\left(\frac{A}{A - 2J_3 \zeta^2} \right)^2 \frac{2J_3 \zeta}{J_2} \right), \quad (15)$$

тогда

$$\bar{\delta}_2 = \frac{2\bar{B}_2 J_2}{A(1 + \bar{B}_2)}, \quad \text{где } \bar{B}_2 = 2 + \frac{A}{A - 2J_3 \zeta^2}. \quad (16)$$

Наконец, $\bar{B}_3 = 3$, и

$$\bar{\delta}_3 = \frac{3J_3}{2A}. \quad (17)$$

Критическое поведение соответствующей компоненты удельного спина вблизи $\theta_i^?$, а также изменение теплоемкости в точке переориентации $\theta_i^?$, имеют двоякий характер

$$\begin{cases} \xi_i \sim \sqrt{\frac{\bar{\xi}_i^?}{2\bar{\delta}_i - \frac{4}{3}}}, & \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3}, \\ \xi_i \sim 0,857 (-\bar{\xi}_i^?)^{1/4}, & \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}, \end{cases} \quad (18)$$

$$\begin{cases} \Delta C(N_{b.1}) = \Delta C_i(N_{b.1}) = \frac{1}{|\bar{\delta}_i - \frac{2}{3}|}, & \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3}, \\ \Delta C(N_{b.1}) = \Delta C_i(N_{b.1}) \approx 0,366 (-\bar{\xi}_i^?)^{-1/2}, & \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}. \end{cases} \quad (19)$$

Критические индексы для теплоемкости α_i и намагниченности β_i равны

$$\begin{cases} \alpha_i = 0, \beta_i = \frac{1}{2}, & \bar{\delta}_i \neq \frac{2}{3}, \\ \alpha_i = \frac{1}{2}, \beta_i = \frac{1}{4}, & \bar{\delta}_i = \frac{2}{3}, \quad i = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (20)$$

Для облегчения ориентации в излагаемом далее материале приводится таблица I. Она устроена следующим образом.

В первой горизонтальной графе приводятся значения параметра баланса прямого и обменного взаимодействия A . Как видно, есть четыре области значений этого параметра, в каждой из которых термодинамика имеет свои принципиальные особенности. В следующей графе указан под-

раздел данной или предыдущей работы, в котором рассмотрена термодинамика для данного интервала изменения параметра A .

В третьей графе указан номер абсолютно стабильной ветви. Если между этими ветвями происходит переход, то этот переход указан стрелкой, направление которой указывает возрастание температуры. Пометки "ферро" - или "пара" - указывают, отлично ли от нуля значение параметра порядка при переходе с ветви на ветвь.

В четвертой графе цифрой указан род фазового перехода, направление стрелок указывает возрастание температуры. В пятой графе содержатся сведения о направлениях переориентаций. Ноль означает парамагнитное состояние, стрелка указывает возрастание температуры.

Таблица I

Значение A	$-\infty < A \leq 0$	$0 < A \leq \frac{J_3}{2}$	$\frac{J_3}{2} < A \leq \frac{9J_3}{4}$	$\frac{9J_3}{4} < A < \infty$
Подраздел, работа	2.2, /2/ работа	2.3.3 - 2.3.5 данная работа	2.2, данная работа	2.1, данная работа
Ветви абсолютно стабильных состояний	No.15	Ферро-No.15 \rightarrow Ферро-No.1	Ферро-No.15 \rightarrow пара No.1	No.1
Последовательность и род фазовых переходов	$\rightarrow 2 \rightarrow$	$\theta_n < \theta_i^2 \rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow$		
		$\theta_1^2 < \theta_n' < \theta_2^2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow$	$\rightarrow 1 \rightarrow$	$\rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow$
		$\theta_i^2 < \theta_n' \rightarrow 1 \rightarrow 1 \rightarrow$		
Последовательность спонтанных переориентаций	$\rightarrow [001] \rightarrow 0 \rightarrow$	$\theta_n < \theta_i^2 \rightarrow [001] \rightarrow [101] \rightarrow [111] \rightarrow 0 \rightarrow$		$\rightarrow [111] \rightarrow$ $\rightarrow [011] \rightarrow$ $\rightarrow [001] \rightarrow$ $\rightarrow 0 \rightarrow$
		$\theta_1^2 < \theta_n' < \theta_2^2 \rightarrow [001] \rightarrow [101] \rightarrow [111] \rightarrow 0 \rightarrow$	$\rightarrow [001] \rightarrow 0 \rightarrow$	
		$\theta_i^2 < \theta_n' \rightarrow [001] \rightarrow [111] \rightarrow 0 \rightarrow$		
Примечания	—	Непрерывная и скачкообразная нуклеация, аномальные переориентации	—	—

Как видно из таблицы I, если классифицировать ферромагнетики по количеству, роду и последовательности фазовых переходов, которые они могут претерпевать, то данная модель описывает по крайней мере шесть типов ферромагнетиков. Возможное существование в рамках данной модели других типов ферромагнетиков обсуждается в конце подраздела 2.3.2 данной работы. Мы же далее рассмотрим те шесть типов ферромагнетиков, для которых достоверно установлено, что они описываются точным решением модельной задачи с гамильтонианом (I-3).

2. Термодинамика анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальним действием

2.1. Ферромагнетики с непрерывной переориентацией спинов, претерпевающие три фазовых перехода 2-го рода ($9J_3/4 < A < \infty$)

В этом интервале изменения параметра A абсолютно стабильной при всех температурах является ветвь No.1 плотности свободной энергии. Эта ветвь описывает состояния со смешиванием всех четырех фаз.

В системе есть переориентации. С повышением температуры вектор намагниченности непрерывным образом эволюционирует от направления [III] к [0II], и далее к [00I] с последующим переходом системы в парамагнитное состояние. Переориентации происходят в интервале температуры $0 \leq \theta \leq \theta^c(\text{No.1}) = \theta_3^2 = J_3/32$ (вычисление температур Кюри см. в подразделе 3.1.5 работы /I/). Поведение компонент удельного спина в зависимости от температуры отображено на рис. I. В точках

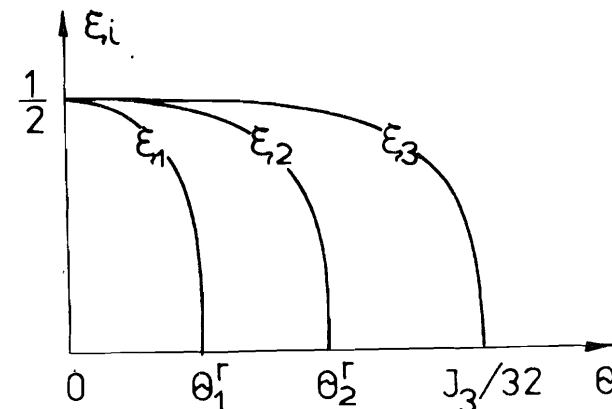


Рис. I.

Поведение компонент спина в системе с $A > \frac{9J_3}{4}$. Происходит плавные переориентации. Например, при $A = 1,3$; $J_1 = 0,3$; $J_2 = 0,6$; $J_3 = 1,0$ численные решения дает $\theta_1^2 = 0,198$; $\theta_2^2 = 0,449$. Аналитические выражения для θ_1^2 и θ_2^2 приводятся в 3.2.4.

исчезновения компонент спинов, т.е. в точках переориентаций θ_i^2 , $i = 1, 2, 3$, происходят фазовые переходы второго рода. Вероятности ферромагнитных фаз, так же как и компоненты спинов, монотонно убывают с ростом температуры. В точках переориентаций θ_i^2 они совпадают с вероятностью парамагнитной фазы (см. рис. 2). Теплоемкость испытывает в точках переориентаций θ_i^2 отрицательные перепады. Величины перепадов, как это следует из (19), равны $|\bar{\gamma}_i - 2/3|^{-1}$, $\bar{\gamma}_i < 2/3$ (см. рис. 3). Поскольку $\bar{\gamma}_i < 2/3$, то из (20) следует,

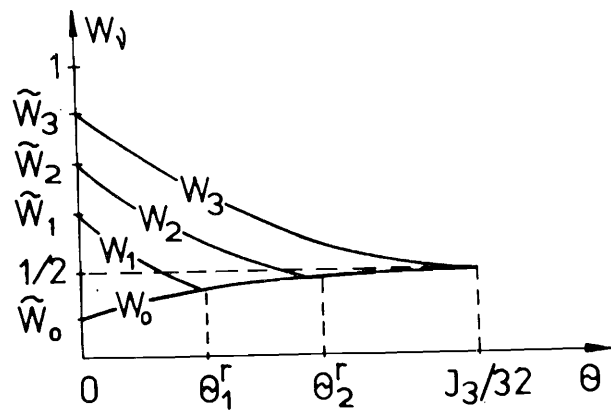


Рис. 2.

Температурная зависимость вероятностей фаз в системе с $A > \frac{9J_3}{4}$. В нуле температуры значения вероятностей равны $\tilde{W}_0 = (1 + \sum_{k=1}^3 \frac{A}{kA - J_k/2})^{-1}$, $\tilde{W}_i = \frac{A}{A - J_i/2} \tilde{W}_0$.

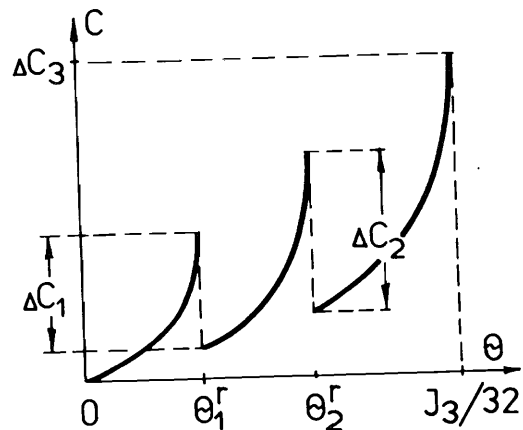


Рис. 3.

Температурная зависимость теплоемкости в системе с $A > 9J_3/4$. Значение ΔC_3 равно $(3J_3/2A - 2/3)^{-1}$, а вообще $\Delta C_i = (\bar{\gamma}_i - 2/3)^{-1}$ из формулы (19).

что для точек переориентаций получаются обычные для теории среднего поля значения критических индексов теплоемкости $\alpha_i = 0$ и намагнитченности $\beta_i = 1/2$. Формулы для различных термодинамических величин для данного интервала значений A можно найти в подразделе 2.3 работы [2].

2.2. Одноосные ферромагнетики, претерпевающие один фазовый переход I-го рода ($J_3/2 < A \leq 9J_3/4$)

Для ферромагнетиков этого типа интенсивность разупорядочивающего взаимодействия уже не столь велика, чтобы обязательно инициировать появление гетерофазных состояний.

Численный анализ позволил достоверно установить, что при некоторой температуре θ_0 происходит фазовый переход из ферромагнитного состояния ветви No.15 в парамагнитное состояние ветви No.1, которое характеризуется значениями вероятностей $w_0 = w_1 = w_2 = w_3 = 1/4$. Следовательно, для таких ферромагнетиков истинный термодинамический потенциал переходит в точке θ_0 с ветви No.15 на ветвь No.1 с нулевым параметром порядка. Действительно, ни одна из компонент ξ_i не может быть отлична от нуля правее точки θ_0 , так как при $J_3/2 < A < 9J_3/4$ все величины $\bar{\gamma}_i > 2/3$ и все компоненты спинов ξ_i должны были бы, согласно (18), возрастать. Тогда теплоемкость (II) была бы отрицательной, следовательно, состояния с $|\xi_i| \neq 0$ были бы правее θ_0 нестабильны.

Итак, точка θ_0 определяется из равенства

$$f(\text{No.15})|_{\xi_3 \neq 0} = f(\text{No.1})|_{\xi_i = 0} \quad (21)$$

или

$$J_3 \xi_3^2 - \theta_0 \ln 4 \operatorname{ch} \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta_0} \right) + \frac{3A}{8} = 0, \quad (22)$$

где $\xi_3 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta_0} \right)$.

Зависимость θ_0 от A изображена на рис. 4. Как и следовало ожидать, в крайних точках интервала по переменной A значение θ_0 совпадает с соответствующими точками Кюри: при $A = 0$ - с точкой Кюри ветви No.15 $\theta^c = J_3/2$, а при $A = 9J_3/4$ - с точкой Кюри ветви No.1 $\theta^c = J_3/32$.

В системе нет переориентаций; фазовый переход I-го рода. Зависимость величин ξ_i , w_i и теплоемкости C от температуры изображены на рисунках 5-7. Ферромагнитные состояния всегда гомофазны.

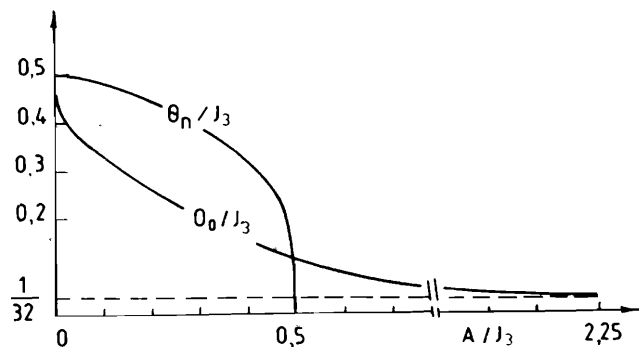


Рис. 4.

Зависимости температуры непрерывной нуклеации θ_n и температуры фазового перехода I-го рода θ_0 , определяемой условием (21), от параметра баланса прямого и обратного взаимодействий A . Пунктиром показано значение θ^c (№.1).

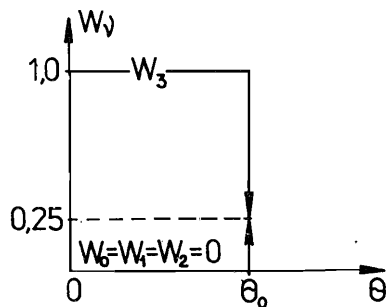
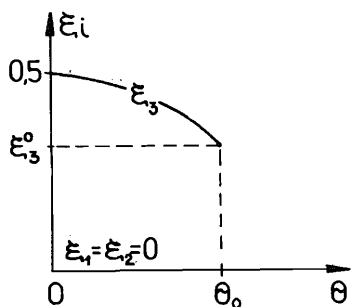
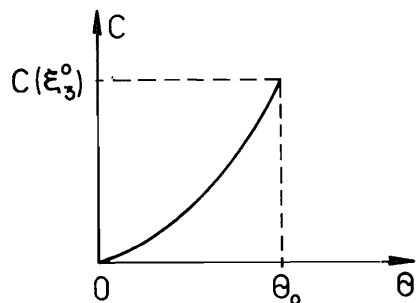


Рис. 5-7

Средний удельный спин, вероятности и теплоемкость для систем с $J_3/2 < A \leq 9J_3/4$.

Имеет место один фазовый переход I-го рода; точка θ_0 и значение $\xi_{3,3}^0 = \xi_3(\theta_0)$ определяются из уравнений (21)-(22). Значение $C(\xi_3^0)$ дается подстановкой ξ_3^0 в (7). В точке θ_0 все вероятности скачкообразно становятся равными 0,25.



2.3. Ферромагнетики с нуклеацией ($0 < A \leq J_3/2$)

2.3.1. Коротко о нуклеации

В этой части работы будут рассмотрены гетерофазные ферромагнетики, в которых интенсивность прямого разупорядочивающего взаимодействия такова, что параметр A принимает значения из области $0 < A \leq J_3/2$. Это ферромагнетики со сложной, но в то же время очень интересной термодинамикой.

Главной отличительной особенностью этих ферромагнетиков является то, что они могут претерпевать специфический фазовый переход, присущий только гетерофазным системам, — нуклеацию. Явление заключается в том, что при изменении внешних параметров система может переходить из состояния с одним набором фаз в состояние с другим набором фаз, например, из гомофазного в гетерофазное состояние [3,4]. Такой переход происходит, когда в объеме гомофазной системы появляются зародыши или ядра другой фазы (или других фаз), откуда и название — нуклеация.

Обозначим температуру нуклеации через θ_n . Как нами было уже показано в подразделе 3.1.3 работы [1], рассматриваемая модель содержит 15 различных ветвей термодинамических состояний. Для каких из этих ветвей происходит нуклеация? Другим интересным вопросом является возможность нуклеации из одного гетерофазного состояния в другое гетерофазное состояние с большим числом смешиваемых чистых фаз.

Как было показано в подразделе 2.1 работы [2], в рассматриваемой нами модели анизотропного гетерофазного ферромагнетика реализуется либо ветвь №.15 — состояния чистой ферромагнитной фазы с намагниченностью вдоль оси Oz , либо ветвь №.1 — состояния со смешиванием трех ферромагнитных фаз со взаимно перпендикулярными направлениями намагниченности и парамагнитной фазы. Следовательно, нуклеация происходит при повышении температуры из чистого одноосного ферромагнитного состояния в состояние с максимальным смешиванием всех четырех возможных чистых фаз.

Тогда точка нуклеации θ_n определяется условием равенства в ней соответствующих ветвей плотности свободной энергии:

$$f(\text{№.15}) \Big|_{\theta=\theta_n} = f(\text{№.1}) \Big|_{\theta=\theta_n} \quad (23)$$

или

$$J_3 \xi_3^2 - \theta_n \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{J_3 \xi_3}{\theta} \right) + \frac{A}{2} - 2\theta_n \ln 2 = \\ = W_0^2 \frac{A}{2} + \sum_{i=1}^3 \left\{ W_i^2 \left(\frac{A}{2} + J_i \xi_i^2 \right) - \theta_n \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{W_i J_i \xi_i}{\theta_n} \right) \right\}. \quad (24)$$

Предположим, что нуклеация происходит непрерывным образом. В этом случае можно достаточно просто получить для θ_n аналитическое выражение, исходя из формул (9) и (10) для вероятностей и компонент удельного спина состояний ветви №.1 с максимальным смешиванием фаз. В самом деле, считая, что мы подходим к точке нуклеации из области более высоких температур, устремим вероятность W_3 к единице. В силу нормировки суммы вероятностей на единицу, это влечет за собой предельные переходы $W_0 \rightarrow 0$, $W_1 \rightarrow 0$, $W_2 \rightarrow 0$. Эта формальная процедура соответствует непрерывному переходу системы из гетерофазной ветви №.1 в гомофазную ветвь №.15. Легко видеть, что предельный переход $W_3 \rightarrow 1$ осуществляется, если $\xi_3 \rightarrow \sqrt{A/RJ_3}$:

$$\lim_{\xi_3 \rightarrow \sqrt{A/RJ_3}} W_3 = \lim_{\xi_3 \rightarrow \sqrt{A/RJ_3}} \left\{ \frac{A}{A - 2J_3 \xi_3^2} \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^3 \frac{A}{A - 2J_k \xi_k^2}} \right\} = 1. \quad (25)$$

Следовательно, при непрерывном переходе в точке нуклеации θ_n компонента удельного спина ξ_3 строго фиксирована по величине константами гамильтониана:

$$\xi_3(\theta = \theta_n) = \sqrt{\frac{A}{2J_3}}. \quad (26)$$

Отсюда и из (10) уже легко получить, что

$$\theta_n = \frac{J_3}{2} \cdot \frac{\sqrt{\frac{2A}{J_3}}}{\operatorname{arctanh}\left(\sqrt{\frac{2A}{J_3}}\right)}. \quad (27)$$

График зависимости θ_n от A при $J_3 = 1$ приведен на рисунке 4 вместе со значениями $\theta^c(\text{№.1})$ и θ_0 .

2.3.2. Аномальные переориентации

Другой особенностью ферромагнетиков с нуклеацией является то, что с ростом температуры одна или две компоненты удельного спина могут возрастать. Такое поведение аномально, если рассматривать только эти компоненты, но становится понятным, если принять во внимание третью компоненту спина. Эта оставшаяся компонента зависит от температуры таким образом, что ее убывание обеспечивает положительность теплоемкости (II).

Ясно, что для чисто одноосных ферромагнетиков такое явление невозможно, так как одноосные ферромагнетики имеют однокомпонентную намагниченность, в то время как для ферромагнетика с трехкомпонентным пара-

метром порядка аномальное возрастание одной или двух компонент удельного спина будет просто означать поворот удельного спина в пространстве.

Таким образом, если при $9J_3/4 < A < \infty$ с ростом температуры наблюдаются повороты в последовательности $[\text{III}] \rightarrow [\text{OII}] \rightarrow [\text{OOI}]$, то в ферромагнетиках с нуклеацией возможна переориентация в обратном направлении: $[\text{OOI}] \rightarrow [\text{IOI}] \rightarrow [\text{III}]$, а также типа $[\text{OOI}] \rightarrow [\text{III}]$.

Как уже было отмечено в подразделах 3.1 и 3.2 работы [2], аномальные переориентации возможны, если величины δ_1 и δ_2 , определенные согласно (I3)-(I4) и (I5)-(I6), будут строго больше 2/3.

Достаточно очевидно, что рост двух компонент удельного спина с ростом температуры ведет к потере системой термодинамической устойчивости. В самом деле, если аномальная переориентация имеет место, то

$$\frac{\partial \xi_1}{\partial \theta} > 0, \quad \frac{\partial \xi_2}{\partial \theta} > 0, \quad \frac{\partial \xi_3}{\partial \theta} < 0. \quad (28)$$

Производные $\partial \xi_i / \partial \theta$ входят в теплоемкость (II)

$$C(\text{№.1}) = -2 \left(J_1 W_1^2 \xi_1^2 \frac{\partial \xi_1}{\partial \theta} + J_2 W_2^2 \xi_2^2 \frac{\partial \xi_2}{\partial \theta} + J_3 \xi_3 W_3^2 \frac{\partial \xi_3}{\partial \theta} \right).$$

В процессе аномальной переориентации первый и второй члены в этой сумме отрицательны и растут по модулю, третий член положителен, но по модулю убывает. При достижении некоторой точки θ_0' теплоемкость (II), наконец, становится отрицательной - система теряет устойчивость и переходит в парамагнитную фазу ветви №.1. Род перехода при этом - первый, поскольку удельный спин, имеющий конечные значения компонент, скачком становится равным нулю.

Итак, аномальные переориентации происходят при $0 < A \leq \frac{J_3}{2}$ в области температур, которая слева ограничена точкой нуклеации θ_n , а справа - точкой θ_0' фазового перехода первого рода, определяемой из условия:

$$C(\text{№.1}) \Big|_{\theta = \theta_0'} = \left(-2 \sum_{i=1}^3 J_i W_i^2 \xi_i^2 \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} \right) \Big|_{\theta = \theta_0'} = 0. \quad (29)$$

К сожалению, приходится еще раз констатировать, что существующее программное обеспечение [5] не позволяет с достаточной для наших целей точностью производить минимизацию функций многих переменных, имеющих сложный рельеф, как это имеет место для свободной энергии (8) при условиях (9) и (10). Численный анализ позволил надежно установить наличие нуклеации в точке θ_n и переход в парамагнитную фа-

зу после аномальных переориентаций. Эта информация позволяет утверждать, что при $\bar{\gamma}_i > \frac{2}{3}$, $i=1,2$ аномальное возрастание одной или двух компонент удельного спина после нуклеации должно приводить к потере устойчивости в силу ограниченности сверху величин ξ_1 и ξ_2 и конечности положительных производных $\partial \xi_1 / \partial \theta$ и $\partial \xi_2 / \partial \theta$. Поэтому, несмотря на то, что мы не вычислили значения θ_0' как функцию параметров A, J_1, J_2, J_3 , можно утверждать, что для рассматриваемой модели существование точки фазового перехода первого рода θ_0' установлено.

Далее, численный анализ также показал, что реализуются такие наборы J_1, J_2, J_3 и A при $0 < A \leq J_3/2$, когда существуют температуры переориентаций $\theta_1^?$ и $\theta_2^?$. Причем соотношение между этими температурами и температурой нуклеации θ_n может быть самым разным.

Рассмотрим далее три наиболее интересных, по нашему мнению, случая. Подчеркнем, что мы не рассматриваем другие случаи, которые могут также иметь место, например, когда температуры $\theta_1^?$ и $\theta_2^?$ не существуют (в этой ситуации соответствующие вероятности принимают нефизические значения).

2.3.3. Ферромагнетики с непрерывной нуклеацией, претерпевающие три фазовых перехода 2-го рода и один фазовый переход 1-го рода

Рассмотрим ферромагнетики с нуклеацией, для которых константы гамильтонианов вида (1)-(3) могут быть выбраны таким образом, что температуры $\theta_n, \theta_0', \theta_1^?$ и $\theta_2^?$ существуют и удовлетворяют условию:

$$\theta_n < \theta_1^? < \theta_2^? < \theta_0'. \quad (30)$$

При повышении температуры от нуля до точки нуклеации θ_n абсолютно стабильной является ветвь No.15, соответствующая состояниям чистой ферромагнитной фазы с намагниченностью вдоль оси Oz. Плотность свободной энергии, удельный средний спин и теплоемкость описываются формулами (5)-(7) соответственно. В точке непрерывной нуклеации $\theta_n = \frac{J_3}{2} \left(\frac{\sqrt{2A}}{J_3} / \operatorname{arctanh} \left(\frac{\sqrt{2A}}{J_3} \right) \right)$ абсолютно стабильными, как показывает численный анализ, становятся состояния, соответствующие максимальному смешиванию всех четырех фаз, - реализуется ветвь No.1.

Значение удельного спина в точке непрерывной нуклеации равно $\xi_{33}(\theta = \theta_n) = \xi_{33}^{(n)} = \sqrt{\frac{A}{2J_3}}$ и совпадает с предельными значениями ξ_{33} справа и слева от θ_n . Однако функция $\xi_{33} = \xi_{33}(\theta)$ имеет в точке θ_n излом. Чтобы убедиться в этом, необходимо вычислить производные $\partial \xi_{33} / \partial \theta$ справа и слева от θ_n . Слева от θ_n функция

$\xi_{33} = \xi_{33}(\theta)$ есть решение уравнения (6). Дифференцируя это соотношение как неявную функцию, получаем

$$\left. \frac{\partial \xi_{33}}{\partial \theta} \right|_{\theta = \theta_n - 0} = - \frac{\left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \operatorname{arctanh} \left(\frac{\sqrt{2A}}{J_3} \right)}{2\theta_n (1 - \delta)}, \quad (31)$$

где

$$\delta = \left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \frac{\operatorname{arctanh} \left(\frac{\sqrt{2A}}{J_3} \right)}{\frac{\sqrt{2A}}{J_3}}. \quad (32)$$

Для того, чтобы вычислить производную $\partial \xi_{33} / \partial \theta$ справа от θ_n , необходимо пользоваться уже уравнением (10) для удельного спина в состояниях, отвечающих максимальному смешиванию четырех фаз (ветвь No.1). В это уравнение входит вероятность W_3 , которая в интервале температур $\theta_n \leq \theta \leq \theta_1^?$ имеет, согласно (9), вид

$$W_3 = \frac{A}{A - 2J_3 \xi_{33}^2} \cdot \frac{1}{3 + \frac{A}{A - 2J_3 \xi_{33}^2}} = \frac{A}{4A - 6J_3 \xi_{33}^2}. \quad (33)$$

Следовательно, в этом интервале температур

$$\frac{\partial W_3}{\partial \xi_{33}} = W_3^2 \cdot \frac{12J_3 \xi_{33}}{A}. \quad (34)$$

С учетом (34) из (10) легко получить, что

$$\left. \frac{\partial \xi_{33}}{\partial \theta} \right|_{\theta = \theta_n + 0} = - \frac{\left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \operatorname{arctanh} \left(\frac{\sqrt{2A}}{J_3} \right)}{2\theta_n (1 - 13\delta)}, \quad (35)$$

где δ определено согласно (32).

Как видно из (31) и (35), производные $\partial \xi_{33} / \partial \theta$ слева и справа от θ_n не равны друг другу. На рисунке 8 излом функции $\xi_{33} = \xi_{33}(\theta)$ в точке θ_n изображен схематически. Таким образом, если температуры $\theta_n, \theta_1^?, \theta_2^?, \theta_0'$ удовлетворяют условию (30), то в точке нуклеации θ_n имеет место фазовый переход 2-го рода.

При дальнейшем повышении температуры от точки θ_n вероятность W_3 начинает убывать от единицы, а значения вероятностей $W_0 = W_1 = W_2$ начинают возрастать от нуля (рис. 9), т.е. переход в гетерофазное состояние уже произошел. В этом интервале температур $\theta_n \leq \theta < \theta_1^?$ компоненты ξ_1 и ξ_2 все еще равны нулю, так как, согласно (18), они станут возрастать лишь правее точек переориентаций $\theta_1^?$ и $\theta_2^?$ (см. рис. 8).

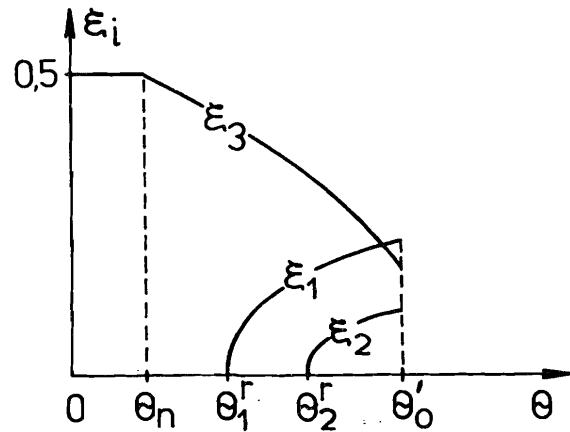


Рис. 8.

Температурная зависимость компонент среднего удельного спина при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n < \theta_0^?$. Например, при $A = 0,495$, $J_1 = 0,3$, $J_2 = 0,6$, $J_3 = 1,0$ численный расчет дает $\theta_n \approx 10^{-5}$, $\theta_1^? \approx 5 \cdot 10^{-4}$, $\theta_2^? \approx 10^{-3}$.

Теплоемкость в точке θ_n испытывает, как будет сейчас показано, положительный скачок. Слева от θ_n теплоемкости вычисляется по формуле (7):

$$C_- = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} C(\text{No.15}) \Big|_{\theta = \theta_n - \epsilon} = -2J_3 \xi_3 \frac{\partial \xi_3}{\partial \theta} \Big|_{\theta = \theta_n - 0}, \quad (36)$$

где $\xi_3 = \xi_3(\theta)$ определяется уравнением (6), а производная - выражением (31).

Справа от θ_n уже имеем из (II)

$$C_+ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} C(\text{No.1}) \Big|_{\theta = \theta_n + \epsilon} = -2J_3 W_3^2 \xi_3 \frac{\partial \xi_3}{\partial \theta} \Big|_{\theta = \theta_n + 0}, \quad (37)$$

где $\xi_3 = \xi_3(\theta)$ определяется уравнением (10), а производная - из (35). Слагаемые, связанные с ξ_1 и ξ_2 , вклад в (II) и, соответственно, в (37) в этой ситуации не дают, так как компоненты удельного спина ξ_1 и ξ_2 в температурном интервале $\theta_n \leq \theta \leq \theta_1^?$ равны нулю. Вероятность W_3 непрерывна и равна в θ_n единице. Поэтому скачок теплоемкости в θ_n определяется только раз-

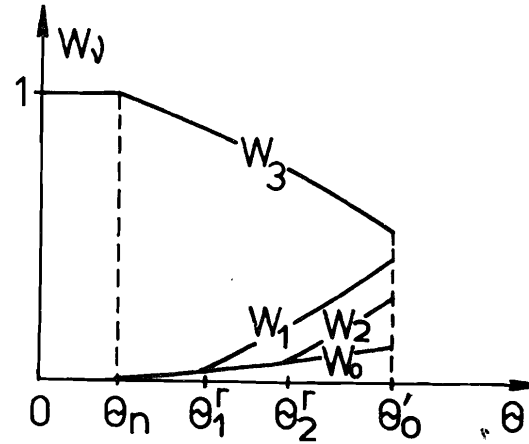


Рис. 9.

Температурная зависимость вероятностей фаз при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n < \theta_0^?$.

ностью значений $\partial \xi_3 / \partial \theta$ справа и слева от θ_n . Вычисление дает

$$C_- = C(\text{No.15}) \Big|_{\theta = \theta_n - 0} = \frac{J_3}{\theta_n} \left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \frac{\text{arth}(\sqrt{2A/J_3})}{(1-\delta)}, \quad (38)$$

$$C_+ = C(\text{No.1}) \Big|_{\theta = \theta_n + 0} = \frac{J_3}{\theta_n} \left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \frac{\text{arth}(\sqrt{2A/J_3})}{(1-13\delta)}, \quad (39)$$

где величина δ определена согласно (32). Требуя, чтобы теплоемкости были положительны, получаем из (39) следующее неравенство:

$$\delta \leq 1/13, \quad (40)$$

или в развернутом виде

$$0 \leq \left(1 - \frac{2A}{J_3}\right) \frac{\text{arth}(\sqrt{2A/J_3})}{\sqrt{2A/J_3}} \leq 1/13. \quad (41)$$

График функции $\delta - 1/13$ приведен на рисунке 10, где по оси абсцисс отложена величина $\sqrt{2A/J_3}$. Эта функция монотонно убывает с ростом $\sqrt{2A/J_3}$ и проходит через ноль при $(2A/J_3) \approx 0,96$. Следовательно, рассматриваемая термодинамическая картина имеет место в

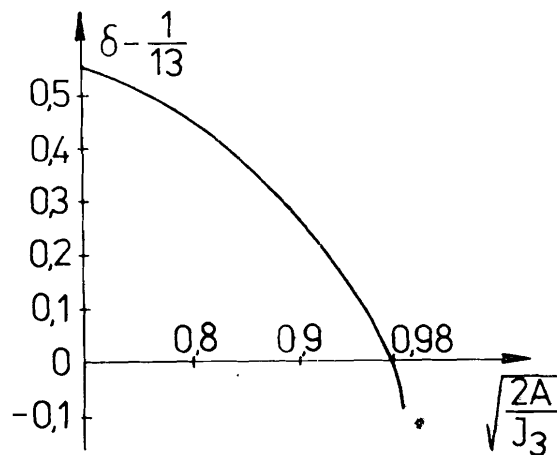


Рис. 10.

График функций $\delta - 1/13$. Видно, что условие $\delta < 1/13$ выполняется при $\sqrt{\frac{2A}{J_3}} > 0,98$.

в следующем, довольно узком, интервале значений A :

$$0,96 \cdot \frac{J_3}{2} \lesssim A \leq \frac{J_3}{2}. \quad (42)$$

В этом интервале значений A теплоемкости (38) и (39) положительны. Условие (30) для температур, как показывает численный анализ, выполняется по крайней мере при нескольких значениях A из интервала (42).

Относительный скачок теплоемкости легко вычисляется из формул (38) и (39), он равен:

$$\Delta = \frac{c_+ - c_-}{c_+ + c_-} = \frac{6\delta}{1 - 7\delta} > 0. \quad (43)$$

Заметив, что Δ есть монотонно возрастающая функция δ в интервале $0 \leq \delta \leq 1/13$, получим из (43), что в этом интервале

$$\Delta \lesssim 0,91. \quad (44)$$

Следовательно, при $\delta \approx 1/13$ скачок теплоемкости в точке нуклеации θ_n довольно большой.

Итак, в точке нуклеации θ_n при условиях (30) теплоемкость заметно возрастает, функция $\xi_3 = \xi_3(\theta)$ имеет заметный излом и начинает убывать быстрее, становятся отличны от нуля вероятности $W_0 = W_1 = W_2$, род фазового перехода - второй.

При дальнейшем повышении температуры, в точке $\theta_1^?$, становится отличной от нуля и начинает аномально возрастать компонента удельного спина ξ_1 . Согласно (9), вероятность W_1 в этой точке

становится больше, чем $W_0 = W_2$. Теплоемкость, согласно (19), испытывает отрицательный перепад на величину $\Delta C_1 = (2/3 - \delta_1)^{-1}$, где $\delta_1 > 2/3$ вычисляется из формул (13)-(14). Род фазового перехода - второй.

В точке $\theta_2^?$ аномальные переориентации вступают в заключительную стадию. Компонента удельного спина ξ_2 становится отличной от нуля и возрастает с ростом температуры. Вероятность W_2 , как это видно из (9), становится больше, чем W_0 . Теплоемкость испытывает, согласно (19), отрицательный перепад, равный $\Delta C_2 = (2/3 - \delta_2)^{-1}$, где $\delta_2 > 2/3$ вычисляется из формул (15)-(16). Род фазового перехода - второй.

Наконец, в точке θ_0' теплоемкость, продолжая убывать с ростом температуры (см. подраздел 2.3.2), становится равной нулю. Гетерофазные состояния с неравной нулю намагниченностью становятся нестабильными. Как показывает численный анализ, система переходит в парамагнитное состояние ветви No.1 со свободной энергией (8), где $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = 0$ и $W_0 = W_1 = W_2 = W_3 = 1/4$. Поскольку слева от θ_0' вероятности и компоненты удельного спина имели конечные значения, то переход в парамагнитное состояние происходит скачком. Род фазового перехода - первый.

Температурные зависимости компонент удельного спина, вероятностей и теплоемкости изображены на рисунках 8, 9, 11.

Таким образом, в этом подразделе рассмотрены ферромагнетики с непрерывной нуклеацией и плавным началом аномальных переориентаций. В этих ферромагнетиках нуклеация является фазовым переходом второго

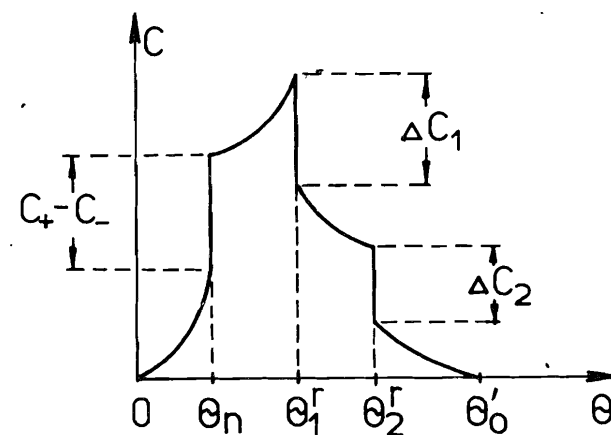


Рис. 11.

Температурная зависимость теплоемкости при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n < \theta_1^?$. Аналитические выражения для C_+ и C_- даются формулами (38) и (39), $\Delta C_2 = (\delta_2 - \frac{2}{3})^{-1}$ по формуле (19).

рода. В двух последующих подразделах будут рассмотрены ферромагнетики, в которых аномальные переориентации начинаются скачком, а нуклеация является фазовым переходом первого рода.

2.3.4. Ферромагнетики со скачкообразной нуклеацией, претерпевающие один фазовый переход второго рода и два фазовых перехода первого рода

В подразделе 2.3.1 помимо определения точки нуклеации согласно (23-24) налагалось дополнительное требование непрерывного изменения компонент удельного спина и вероятностей фаз. Благодаря этому предположению было получено простое аналитическое выражение (27) для точки непрерывной нуклеации θ_n . В подразделе 2.3.3 был рассмотрен пример, когда такая ситуация реализуется. Возникает вопрос, всегда ли нуклеация имеет непрерывный в упомянутом смысле характер, или она возможна как фазовый переход I-го рода? Ответ следующий - возможна скачкообразная нуклеация.

В самом деле, пусть в некоторой точке θ_n' имеет место равенство (23)-(24), т.е. свободные энергии одноосных состояний ветви No.15 и состояний с максимальным смешиванием всех четырех фаз (ветвь No.1) в этой точке пересекаются (см. рис. I2a), в отличие от предыдущего случая непрерывной нуклеации (см. рис. I2б).

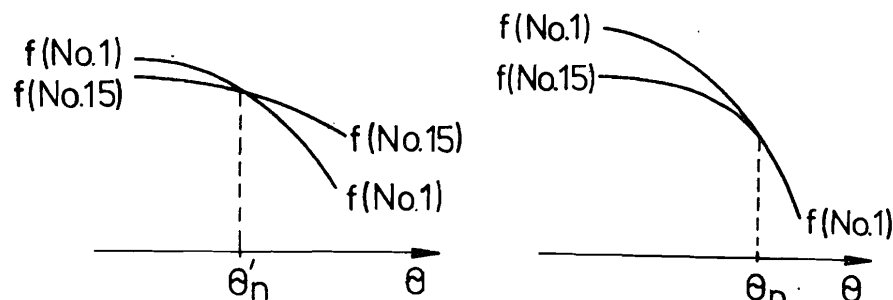


Рис. I2a-I2б

Показаны пересечение (а) и касание (б) ветвей No.1 и No.15 плотности свободной энергии гетерофазной системы. В первом случае фазовый переход I-го рода, а во втором - 2-го.

Пусть также существуют точки $\theta_1^?$ и $\theta_2^?$ и выполняется условие:

$$\theta_1^? < \theta_n' < \theta_2^? < \theta_0' \quad (45)$$

Как показывает численный расчет, существует по крайней мере несколько наборов значений констант гамильтониана J_1, J_2, J_3 и A из интервала $0 < A \leq J_3/R$, при которых имеет место условие (45).

Покажем теперь, что условие (45) исключает непрерывную нуклеацию.

При повышении температуры и прохождении точки переориентации $\theta_1^?$ в системе не происходит фазового перехода, поскольку состояния с отличной от нуля компонентой удельного спина ξ_1 метастабильны, а абсолютно стабильны в этом температурном интервале, $\theta < \theta_n'$, одноосные состояния с отличной от нуля компонентой ξ_3 (ветвь No.15). При достижении температуры нуклеации θ_n' абсолютно стабильной становится уже ветвь No.1 - состояния со смешиванием всех четырех фаз. Компонента ξ_1 уже может быть отличной от нуля. Но поскольку точки $\theta_1^?$ и θ_n' разделяет конечный интервал температур, то справа от точки θ_n' компонента удельного спина ξ_1 должна иметь, согласно уравнению (10) и выражению для вероятности (9), конечное, отличное от нуля значение. Следовательно, при прохождении точки нуклеации θ_n' компонента удельного спина ξ_1 скачком возрастает до значения, определяемого системой уравнений:

$$\begin{aligned} \xi_2 &= 0, \\ W_2 = W_0 &= \frac{1}{2 + \frac{A}{A - 2J_1\xi_1^2} + \frac{A}{A - 2J_2\xi_2^2}}, \\ W_1 &= \frac{A}{A - 2J_1\xi_1^2} W_0, \\ W_3 &= \frac{A}{A - 2J_3\xi_3^2} W_0, \\ \xi_1 &= \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{W_1^2 J_1 \xi_1}{\theta} \right), \\ \xi_3 &= \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{W_3^2 J_3 \xi_3}{\theta} \right). \end{aligned} \quad (46)$$

Так как компоненты удельного спина ξ_1 и ξ_3 , а также вероятности W_0, W_1 и W_3 в области своих физических значений непрерывно и нетривиально зависят друг от друга, то скачок значения ξ_1 приводит к скачкообразному изменению всех остальных величин.

Таким образом, мы выяснили, что при условии (45) нуклеация представляет собой фазовый переход I-го рода. Штрих в обозначении θ_n' подчеркивает именно эту особенность, в отличие от точки непрерывной нуклеации θ_n , определяемой выражением (27).

Численное решение показывает, что значение ξ_{33} в точке θ_n' уменьшается так же, как и значение W_3 , а значения W_1 и $W_3 = W_2$ возрастают вместе с ξ_{31} (см. рисунки I3 и I4)

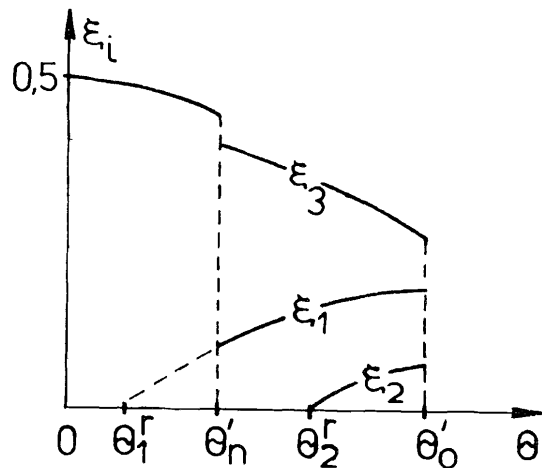
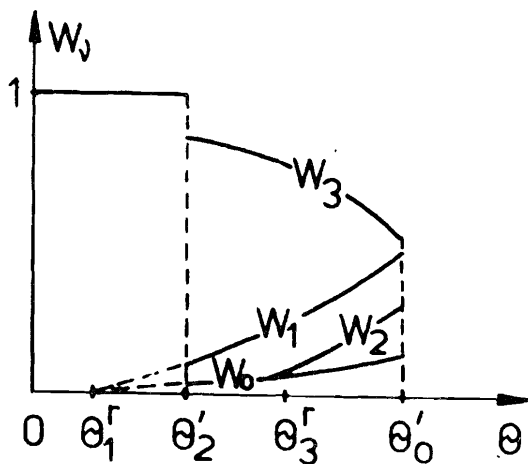


Рис. I3.

Температурная зависимость компонента среднего удельного спина при аномальных переориентациях в системах с $\theta_1^2 < \theta_n' < \theta_2^2$.

Рис. I4. Температурная зависимость вероятностей фаз при аномальных переориентациях в системах с $\theta_1^2 < \theta_n' < \theta_2^2$.



Фазовый переход I-го рода в точке θ_n' имеет ту особенность, что теплоемкость имеет в этой точке отрицательный, но конечный перепад значений. Это связано с тем, что плотности свободных энергий ветвей No.1 и No.15 как функции температур в этой точке аналитичны. Однако истинная плотность свободной энергии, выбираемая из условия ее минимальности, в этой точке имеет излом. В самом деле, для этой функции, равной

$$f = \begin{cases} f(\text{No.15}), & \theta < \theta_n' \\ f(\text{No.1}), & \theta > \theta_n' \end{cases} \quad (47)$$

все производные справа и слева от θ_n' , включая и вторую производную, непрерывны. Это и приводит к конечной разности этих производных в θ_n' (см. рис. I2a).

Подчеркнем, что геометрическое различие между точками θ_n и θ_n' заключается в том, что точка θ_n для ветвей No.15 и No.1 есть точка их касания, а точка θ_n' - точка их пересечения (см. рис. I2a и I2б).

При дальнейшем повышении температуры, после достижения точки переориентации θ_2^2 , поведение системы полностью аналогично описанному в разделе 2.3.3 для температурного интервала $\theta \geq \theta_2^2$ (см. рисунки I3-I5). Ферромагнетики, для которых имеет место условие (45), претерпевают сначала нуклеацию I-го рода, а затем фазовые переходы 2-го и I-го рода, связанные с аномальной переориентацией и потерей устойчивости.

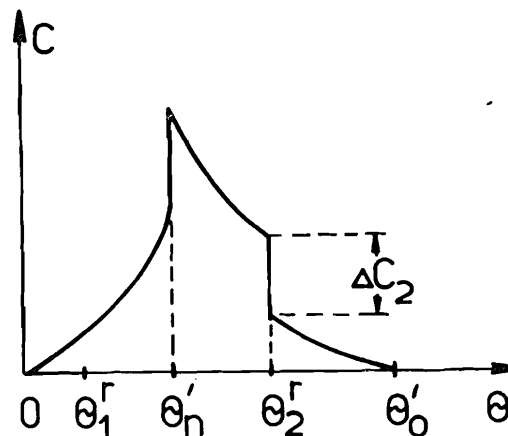


Рис. I5.

Температурная зависимость теплоемкости при аномальных переориентациях в системах с $\theta_1^2 < \theta_n' < \theta_2^2$. Для скачка в точке θ_n' аналитическое выражение получить не удалось, а $\Delta C_2 = (\theta_2^2 - 2/3)^{-1}$.

2.3.5. Ферромагнетики со скачкообразной нуклеацией, претерпевающие два фазовых перехода I-го рода

Рассмотрим теперь ситуацию, когда существуют точки θ_1^2 и θ_2^2 , и выполняется условие

$$\theta_1^2, \theta_2^2 < \theta_n' < \theta_0' \quad (48)$$

В этом случае при повышении температуры от нуля и прохождении точек θ_1^2 и θ_2^2 в системе не происходят фазовые переходы. В интервале температур $\theta_1^2, \theta_2^2 \leq \theta < \theta_n'$ абсолютно стабильна ветвь No.15, а ветвь No.1, для которой имеют смысл точки θ_1^2 и θ_2^2 , - метастабильна.

При достижении точки θ_n' ветвь No.1 становится абсолютно стабильной. Очевидно, что значения ξ_1 и ξ_2 , а также W_1 ,

W_2 и W_0 скачком возрастают, а значения ξ_3 и W_3 скачкообразно уменьшаются (см. рисунки I6 и I7). Теплоемкость имеет отрицательный перепад (см. рис. I8).

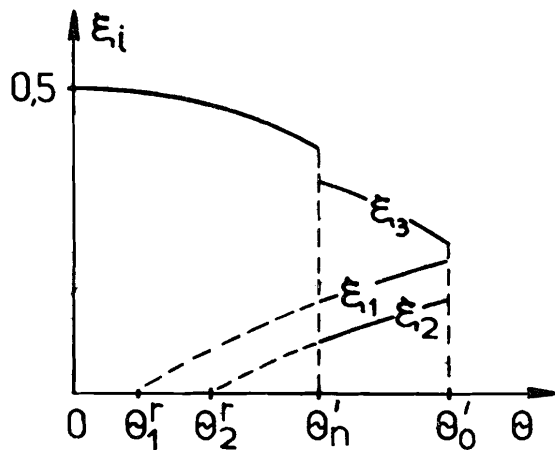


Рис. I6.

Температурная зависимость компонент среднего удельного спина при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n' > \theta_1^2, \theta_2^2$.

В точке θ_0' система, ввиду аномального роста компонент ξ_1 и ξ_2 , теряет термодинамическую устойчивость.

Таким образом, ферромагнетики с константами взаимодействия, удовлетворяющими условию (48), испытывают сначала нуклеацию I-го рода, а затем фазовый переход I-го рода, связанный с потерей термодинамической устойчивости.

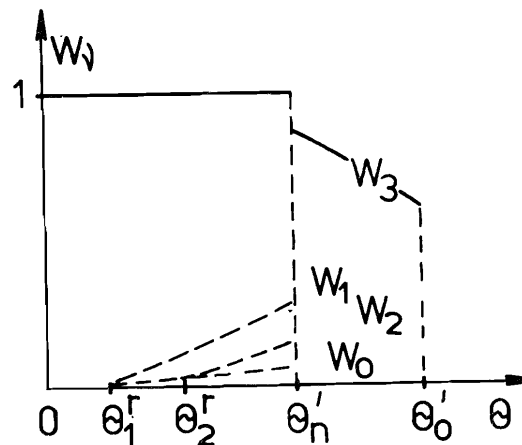
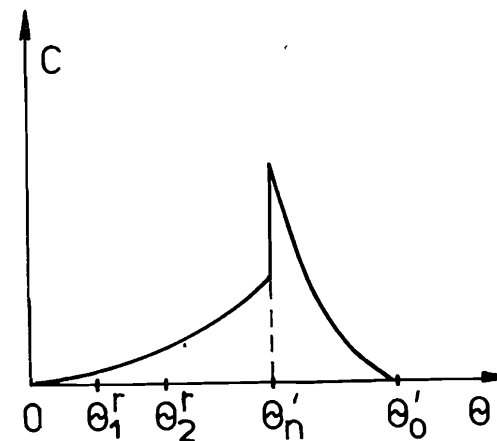


Рис. I7.

Температурная зависимость вероятностей фаз при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n' > \theta_1^2, \theta_2^2$.

Рис. I8.

Температурная зависимость теплоемкости при аномальных переориентациях в системах с $\theta_n' > \theta_1^2, \theta_2^2$. Для скачка в точке θ_n' аналитическое выражение получить не удалось.



3. Заключение

Подведем итоги двух предыдущих /1,2/ и данной работы.

Нами сформулирована и точно решена модель анизотропного гетерофазного ферромагнетика Гейзенберга с дальнедействием. Основанная на этом точном решении термодинамика описывает трехмерные спонтанные спиновые переориентации и содержит большинство известных в эксперименте и феноменологических теориях эффектов, характеризующих это явление. Таким образом, несмотря на простоту исходной формулировки, модельное микроскопическое описание оказалось достаточно полным. Эта первая попытка построения микроскопической теории спонтанных спиновых переориентаций оказалась успешной, на наш взгляд, ввиду систематического использования предположения о гетерофазном характере процессов спонтанной переориентации.

Для построения гетерофазной модели необходимо было решить гомофазную задачу. Было показано, что в гомофазных системах спонтанные спиновые переориентации невозможны. Кроме того, были найдены чистые фазы системы и соответствующие им метастабильные состояния.

В гетерофазной модели, как выяснилось, содержится 15 различных, по типу смешиваемых фаз, ветвей термодинамических состояний. Эти ветви были классифицированы, найдены абсолютно стабильные состояния. Для всех ветвей найдены температуры Кюри. Оказалось, что чем выше наблюдаемая размерность параметра порядка, тем ниже температура Кюри. Вблизи точки Кюри из трех ферромагнитных фаз остается только одна, характеризующая наибольшим обменным интегралом.

Получены значения температур переориентаций, при которых исчезают соответствующие компоненты намагниченностей. В том случае, если эти температуры существуют, в них возможны фазовые переходы I-го и 2-го рода. В работе рассмотрены фазовые переходы 2-го рода в точках переориентаций, рассчитаны критические индексы и скачки теплоемкостей. Род перехода в этих точках может меняться в зависимости от значений микроскопических параметров гамильтониана. Соответственно изменяются значения критических индексов.

Подробно исследована нуклеация. Показано, что она может происходить скачком. Нуклеация такого типа происходит в момент скачкообразной переориентации спинов. Таким образом, наша теория описывает как непрерывные, так и скачкообразные спонтанные переориентации спинов. Дан также полный точный расчет для нуклеации непрерывного типа, происходящий как фазовый переход 2-го рода. Отличительной чертой этого эффекта является заметный положительный скачок теплоемкости, а также появление отличной от нуля концентрации других ферромаг-

Таблица 2.

Фазовый переход	Условие определения	Другая информация
Точка Кюри для гомофазной системы $\theta^c(Nb.15)$.	$\lim_{\xi_3 \rightarrow 0} \theta(\xi_3) = \theta^c(Nb.15)$	Параметр порядка однокомпонентен: $\xi = \{0, 0, \xi_3\}$, предельный переход осуществляется по уравнению (6).
Точка Кюри для гетерофазной системы $\theta^c(Nb.1)$, совпадает с θ_3^c .	$\lim_{\xi \rightarrow 0} \theta(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \theta^c(Nb.1)$ $= \lim_{\xi_3 \rightarrow 0} \theta(0, 0, \xi_3) = \theta^c(Nb.1)$	Параметр порядка трехкомпонентен, но в окрестности точки $\theta^c(Nb.1)$ однокомпонентен. Предельный переход по разложению (38) из работы /2/ при $i=3$.
Точки переориентаций 2-го рода θ_1^c и θ_2^c .	$\lim_{\xi_i \rightarrow 0} \theta(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \theta_i^c$	Предельные переходы осуществляются по разложению (38) из работы /2/ при $i=1$ и $i=2$ соответственно.
Точка скачкообразной нуклеации θ_n' .	$f(Nb.15) _{\theta=\theta_n'} = f(Nb.1) _{\theta=\theta_n'}$ причем $\xi(\theta_n') \neq 0$	Значение θ_n' всегда выше по крайней мере одного из значений θ_1^c или θ_2^c .
Точка непрерывной нуклеации θ_n .	К условию для θ_n' добавляется условие непрерывности. Предельный переход $w_3 \rightarrow 1$ $\theta_n = \frac{J_2}{2} \sqrt{\frac{2A}{J_3}} / \text{arctg} \left(\sqrt{\frac{2A}{J_3}} \right)$	Значение θ_n всегда меньше, чем оба значения θ_1^c и θ_2^c .
Точка фазового перехода I-го рода в парамагнитное состояние из гомофазного ферромагнитного состояния, θ_0 .	$f(Nb.15) = f(Nb.1)$ $\xi_3 \neq 0$ $\theta = \theta_0$	Такой фазовый переход осуществляется, когда все величины θ_i^c , определяемые в (14)-(17), больше 2/3.
Точка фазового перехода I-го рода в парамагнитное состояние из гетерофазного ферромагнитного состояния, θ_0' .	$\left(\sum_{i=1}^3 J_i w_i^2 \xi_i \frac{\partial \xi_i}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0'} = 0$	В точке θ_0' система теряет термодинамическую устойчивость ввиду аномального возрастания компонента ξ_1 и ξ_2 с ростом температуры.

нитных фаз при равенстве нулю связанных с этими фазами компонент спинов.

При наличии нуклеации компоненты намагниченности, связанные с появившимися ферромагнитными фазами, аномально возрастают с ростом температуры. Это ведет к потере термодинамической устойчивости системы и фазовому переходу I-го рода.

На основе точного решения описаны ферромагнетики шести типов. Легко видеть, что это не все возможные типы. Например, не описаны ферромагнетики, для которых точки переориентаций являются точками фазовых переходов I-го рода. Для анализа таких переходов основным является численное моделирование, что, как было показано, весьма затруднительно.

Перспективы предложенной микроскопической теории представляются нам достаточно ясными. Сейчас, на основе очень простой микроскопической модели, показана принципиальная возможность построения точной термодинамики спонтанных спиновых переориентаций. Качественное согласие с наблюдаемой экспериментальной картиной может перейти в количественное, если в основу гетерофазной модели положить взаимодействие более реалистического типа, нежели рассмотренное в работе. С другой стороны, и данная гетерофазная модель может дать количественное согласие с отдельными экспериментами.

Для облегчения качественного сравнения с экспериментом приводится таблица 2. В ней содержится сводка видов фазовых переходов, описанных в нашей работе. Приведены обозначения температур и отличительные особенности. Полезно использовать эту таблицу совместно с таблицей I.

Авторы искренне признательны М И Потапову и Н И Тихомировой за существенную помощь в подготовке рукописей этой и двух предыдущих работ.

Литература

1. Бакасов А.А., Юкалов В.И. Preprint JINR P17-88-788, Dubna, 1988.
2. Бакасов А.А., Юкалов В.И. Preprint JINR P17-88-844, Dubna, 1988.
3. Юкалов В.И. В кн.: Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики, с. 437, ОИЯИ Д17-И1490, Дубна, 1978.
4. Щумовский А.С., Юкалов В.И. Chem. Phys. Letters, 1985, v. 117, p. 617.
5. James F., Roos M. MINUIT, Long-write up, CERN Computer Center Program Library, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1988 года.

Бакасов А.А., Юкалов В.И.
Микроскопическая теория спиновых
переориентаций - термодинамика
и явление нуклеации

P17-88-924

Исследуется поведение основных термодинамических характеристик для гетерофазной модели магнитных переориентационных переходов, предложенной авторами. Рассматривается явление нуклеации и показывается, что она может происходить как непрерывным образом, так и скачкообразно. Предлагается классификация магнетиков в зависимости от последовательности происходящих в них фазовых переходов.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Bakasov A.A., Yukalov V.I.
Microscopic Theory of Spin Reorientations -
Thermodynamics and Nucleation Phenomenon

P17-88-924

Behaviour of the main thermodynamic characteristics for the heterophase model of magnetic reorientation transitions proposed by the authors is investigated. The nucleation phenomenon is considered, which is shown to be able to develop both continuously and stepwise. Classification of magnetism based on the phase transition sequence in them is proposed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988