Фазовые переходы по материальным константам и температуре в интерметаллических соединениях типа терфенол-Д

© Ю.А. Фридман, Ф.Н. Клевец, А.П. Войтенко

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского,
Симферополь, Украина

E-mail: Frid@tnu.crimea.ua

(Поступила в Редакцию 1 сентября 2009 г.
В окончательной редакции 11 ноября 2009 г.)

Рассмотрена модель магнитных и магнитоупругих свойств интерметаллических соединений, учитывающих влияние „гигантской“ магнитоупругой связи и биквадратичного обменного взаимодействия. В рамках предложенной модели изучены фазовые переходы по материальным константам и по температуре. Показано, что в рассматриваемой системе возможна реализация как ферромагнитной, так и квадрупольной фазы. При этом фазовый переход между ними является переходом первого рода и протекает через промежуточное — квадрупольно-ферромагнитное — состояние. Получены зависимости температуры фазового перехода от констант гейзенберговского и биквадратичного обменов для соединений типа терфенол-Д.

Авторы признательны Министерству образования и науки Украины за финансовую поддержку (проект № 269/09).

1. Введение

В настоящее время исследования систем с большим влиянием магнитоупругого взаимодействия являются весьма актуальными. Это связано с возможностью широкого применения таких систем для производства мощных приводов малых перемещений (например, адаптивная оптика крупных телескопов-рефлекторов), источников звука огромной мощности, сверхмощных ультразвуковых излучателей и т. п. К таким системам относятся сплавы лантаноидов тербия и диспрозия с железом или кобальтом [1].

Известно, что анизотропная магнитострикция редкоземельных металлов Tb, Dy, их сплавов и ферритов-гранатов при низких температурах превышает анизотропную магнитострикцию Fe, Co, Ni и их сплавов в десятки, сотни и даже тысячи раз. Так, гигантская магнитострикция была обнаружена в интерметаллических соединениях $TbFe_2$, $DyFe_2$; она реализуется не только при низких температурах, но и при температурах выше комнатной [1].

Гигантская магнитострикция и родственные ей магнитострикционные эффекты, проявляющиеся в редкоземельных магнетиках, привлекают внимание инженеров с точки зрения конструирования новых приборов и технических устройств. К редкоземельным материалам привлечено и внимание технологов в связи с возможностью создания новых эффективных материалов с инварными свойствами.

Для получения высоких значений магнитострикции в интерметаллических соединениях при небольших полях и комнатной температуре необходимо минимизировать константу одноионной анизотропии. В [2] экспериментально установлено, что уменьшение константы одноионной анизотропии вследствие ее компенсации не только в подрешетке редкоземельного металла, но и в подрешетке $3d$-переходного металла позволяет достичь высоких значений магнитострикционной восприимчивости в соединении $Tb_{0.35}Dy_{0.45}Er_{0.2}Fe_{0.7}Co_{1.3}$ в области комнатной температуры. Смешанное интерметаллическое соединение $Tb_xDy_{1-x}Fe_x$ (терфенол-Д) обладает пониженной одноионной анизотропией, так как $TbFe_2$ и $DyFe_2$ имеют разные знаки констант анизотропии с сохранением высокой магнитострикции [1]. Экспериментально установлено, что уменьшение константы одноионной анизотропии позволяет достичь высоких значений магнитострикционной восприимчивости в соединениях типа терфенол-Д [2]. В [3] показано, что замещение железа кобальтом уменьшает магнитную анизотропию $3d$-подрешетки, поскольку одноионные константы анизотропии железа и кобальта имеют противоположные знаки. С повышением температур большее значение приобретает компенсация одноионной анизотропии $3d$- и $4f$-подрешеток.

Большое разнообразие магнитных структур, наблюдаемое в разных соединениях RT_2X_2 (R — редкоземельный элемент, T — переходный металл, X — Ge, Si) при различных температурах, можно объяснить, предполагая, что локализованные магнитные моменты подвержены влиянию билинейного и биквадратичного взаимодействий [4]. Необходимость учета биквадратичного обменного взаимодействия можно пояснить следующим образом. Обменный гамильтониан Гейзенберга имеет общий характер, так как он построен на основе выражения, составленного из операторов атомных спинов и инвариантного относительно спиновых вращения. Именно такой инвариантностью обладает исходный гамильтониан, включающий энергию кулоновского взаимодействия электронов. В случае $S = \frac{1}{2}$ не существует других инвариантов, составленных из операторов спинов двух атомов. Если же $S > \frac{1}{2}$, то независимыми инвариантами являются

$$(\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'}); (\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'})^2; \ldots (\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'})^{2S},$$

где S — величина спина магнитного иона. Все эти выражения необходимо учитывать при феноменологическом построении гамильтониана. На этот факт впервые обратил внимание Шредингер в 1940 г.

Для магнитоупорядоченных систем с $S = 1$ в обменном гамильтониане возникает слагаемое, пропорциональное $(\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'})^2$. Природа возникновения этого обменного взаимодействия может быть различной: сверхобмен через немагнитные атомы [5] либо сильное спин-орбитальное взаимодействие [6]. Поскольку в нашей работе исследуются магнитные свойства интерметаллических соединений, содержащих ионы редкоземельных металлов Dy и Tb, обладающих большим спин-орбитальным взаимодействием [7], естественно предположить, что в таких соединениях существенную роль играет обменное взаимодействие высшего порядка по спиновым операторам [6–8].

Учет обменного взаимодействия высшего порядка по спиновым операторам может привести к реализации упорядоченных состояний — квадрупольных фаз, которые характеризуются тензорными параметрами порядка [7,8]. Формирование квадрупольных фазовых состояний является одним из ярких примеров проявления квантовости негейзенберговских магнетиков. Так, экспериментальные исследования по определению величины биквадратичного обмена показали, что в магнетиках со значительным обменным взаимодействием высших порядков по спиновым операторам может реализовываться квантовый квадрупольный порядок, когда в основном состоянии кристалла все средние проекции спинов равны нулю, а кооперативное упорядочение происходит не по магнитному моменту, а по квадрупольному [7–9].

Магнитоупругое взаимодействие является слабым по сравнению с энергиями обменного взаимодействия и одноионной анизотропии. Его влияние подавляется магнитной анизотропией, поскольку природа одноионной анизотропии и магнитоупругого взаимодействия одна и та же (спин-орбитальное взаимодействие). Но в магнетиках с очень малой магнитной анизотропией учет магнитоупругого взаимодействия может иметь решающее значение, так как одноионная анизотропия практически скомпенсирована. Учет магнитоупругого взаимодействия в магнитоупорядоченных системах приводит к гибридизации упругих и магнитных возбуждений, т.е. к возникновению магнитоупругих волн. При этом существенно меняются как статические, так и динамические свойства системы, что проявляется в возникновении магнитоупругой щели в спектре квазимагнонов, а также в сильной деформации квазиакустической ветви, закон дисперсии которой изменяется с линейного на квадратичный. Экспериментально этот эффект проявляется как уменьшение скорости звука в окрестности фазового перехода [10].

В ряде работ [2,11,12] исследовалось влияние магнитного поля на поведение интерметаллических соединений. Так, в [2] показано, что высокое значение магнитострикции можно получить в сравнительно слабых магнитных полях. Однако, насколько нам известно, исследование влияния высших спиновых инвариантов на фазовые состояния интерметаллических соединений не проводилось.

В связи с этим представляет интерес изучение влияния „гигантского“ магнитоупругого взаимодействия на фазовые состояния и динамические свойства негейзенберговского изотропного ферромагнетика без учета влияния внешнего магнитного поля.

2. Фазовые переходы по материальным константам

В качестве исследуемой системы рассмотрим изотропный трехмерный негейзенберговский ферромагнетик, занимающий все пространство. Кроме биквадратичного обменного взаимодействия, влияние которого характерно для редкоземельных металлов и сплавов, учтем также магнитоупругое и упругое взаимодействия, которые существенны в рассматриваемой системе. Для упрощения дальнейших вычислений предположим, что спин магнитного иона равен единице. Кроме того, — это минимальное значение спина, при котором может возникнуть биквадратичное обменное взаимодействие. Гамильтониан такой системы можно представить в виде

$$\mathscr{H} = -\frac{1}{2}\sum_{n,n'} J(n-n')\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'} - \frac{1}{2}\sum_{n,n'} K(n-n')(\mathbf{S}_n\mathbf{S}_{n'})^2$$
$$+ D_1 \sum_{n,i=x,y,z} u_{ii}(n)(S_n^i)^2 + 2D_2 \sum_{n,i\neq j} u_{ij}(n)(S_n^i S_n^j + S_n^j S_n^i)$$
$$+ \frac{C_{11}}{2}\sum_{n.i=x,y,z} u_{ii}^2 + C_{12}\sum_{n,i\neq j} u_{ii}(n)u_{jj}(n) + 2C_{44}\sum_{n,i\neq j} u_{ij}^2(n), \quad (1)$$

где $J(n-n')$, $K(n-n') > 0$ — константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, u_{ij} — симметричная часть компонент тензора деформаций, $(i, j = x, y, z)$, D_1, D_2 — константы магнитоупругой связи, C_{11}, C_{12}, C_{44} — упругие модули. Третье и четвертое слагаемые в гамильтониане (1) описывают магнитоупругую энергию, а последние три слагаемых описывают упругую энергию системы.

Для описания рассматриваемой модели удобно использовать диаграммную технику для операторов Хаббарда [13]. Диаграммная техника для операторов Хаббарда является математическим формализмом, который позволяет точно учесть влияние магнитоупругого взаимодействия путем включения его в одноузельный гамильтониан. Данный метод позволяет работать при любых температурах, вплоть до флуктуационной области, и при произвольных соотношениях материальных констант [13].

Выделяя в обменной части гамильтониана (1) среднее поле $\langle S_n^z \rangle$, связанное с упорядочением магнитного момента, а также дополнительные поля $\langle O_n^p \rangle \equiv q_2^p$

$(p = 0, 2)$, определяемые квадрупольными моментами, получим одноузельный гамильтониан

$$\mathscr{H}_0(n) = -\bar{H}S_n^z - B_2^0 O_n^0 - B_2^2 O_n^2$$
$$+ D_1\left[u_{xx}(n)(S_n^x)^2 + u_{yy}(n)(S_n^y)^2 + u_{zz}(n)(S_n^z)^2\right]$$
$$+ 2D_2\left[u_{xy}(n)(S_n^x S_n^y + S_n^y S_n^x) + u_{xz}(n)(S_n^x S_n^z + S_n^z S_n^x)\right.$$
$$\left.+ u_{yz}(n)(S_n^y S_n^z + S_n^z S_n^y)\right], \quad (2)$$

где

$$O_n^0 = 3(S_n^z)^2 - S(S+1), \quad O_n^2 = \frac{1}{2}[(S_n^+)^2 + (S_n^-)^2],$$

$$B_2^0 = \frac{1}{6}K_0 q_2^0, \quad B_2^2 = \frac{1}{2}K_0 q_2^2, \quad \bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2}\right)\langle S^z\rangle,$$

J_0, K_0 — нулевые Фурье-компоненты гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий соответственно.

Решая с гамильтонианом (2) одноузельную задачу, найдем энергетические уровни магнитного иона:

$$E_1 = -B_2^0 + \frac{1}{2}D_1(u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)} + 2u_{zz}^{(0)}) - \chi,$$
$$E_0 = 2B_2^0 + D_1(u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)}),$$
$$E_{-1} = -B_2^0 + \frac{1}{2}D_1(u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)} + 2u_{zz}^{(0)}) + \chi \quad (3)$$

и собственные функции гамильтониана (2):

$$\Psi(1) = \cos\psi|1\rangle + \sin\psi|-1\rangle, \quad \Psi(0) = |0\rangle,$$
$$\Psi(-1) = -\sin\psi|1\rangle + \cos\psi|-1\rangle,$$

где

$$\chi = \sqrt{\bar{H}^2 + \left(B_2^2 - \frac{1}{2}D_1(u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)})\right)^2},$$
$$\sin\psi = \sqrt{\frac{\chi - \bar{H}}{2\chi}}, \quad \cos\psi = \sqrt{\frac{\chi + \bar{H}}{2\chi}}.$$

Спонтанные деформации $u_{ij}^{(0)}$, входящие в выражение (3), определяются из условия минимума плотности свободной энергии и при низких температурах имеют вид

$$u_{xx}^{(0)} = D_1\frac{-\frac{1}{2}[C_{11} - 2C_{12}] - \frac{B_2^2}{2\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2}}[C_{11} + 2C_{12}]}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]},$$
$$u_{yy}^{(0)} = D_1\frac{-\frac{1}{2}[C_{11} - 2C_{12}] + \frac{B_2^2}{2\sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2)^2}}[C_{11} + 2C_{12}]}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]},$$
$$u_{zz}^{(0)} = -D_1\frac{C_{11}}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]},$$
$$u_{ij}^{(0)} = 0 \quad (i \neq j). \quad (4)$$

В представлении операторов Хаббарда $X_n^{M'M} \equiv |\Psi_n(M')> \Psi_n(M)|$ [10], описывающих переход магнитного иона из состояния $|M\rangle$ в состояние $|M'\rangle$, одноузельный гамильтониан (2) диагонален. Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда определена следующим образом:

$$S_n^+ = \sqrt{2}\left[\sin\psi(X_n^{01} - X_n^{-10}) + \cos\psi(X_n^{0-1} + X_n^{10})\right],$$
$$S_n^- = (S_n^+)^+,$$
$$S_n^z = \cos 2\psi(H_n^1 - H_n^{-1}) - \sin 2\psi(X_n^{1-1} + X_n^{-11}). \quad (5)$$

Параметры порядка рассматриваемой системы имеют вид

$$\langle S_n^z\rangle = \cos 2\psi, \ q_2^0 = \langle Q_{2n}^0\rangle = 1, \ q_2^2 = \langle Q_{2n}^2\rangle = \sin 2\psi. \quad (6)$$

Рассмотрим поведение параметров порядка при различных соотношениях материальных констант. Предположим, что в системе преобладает гейзенберговское обменное взаимодействие, т.е. $J_0 > K_0$. При этом $\cos 2\psi = 1$, $\sin 2\psi = 0$. Следовательно, параметры порядка принимают вид

$$\langle S^z\rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0,$$

т.е. в системе реализуется ферромагнитная фаза [7]. Нижайшим энергетическим уровнем является E_1, а волновая функция основного состояния имеет вид $\Psi(1) = |1\rangle$. Спонтанные деформации в ферромагнитной фазе имеют вид

$$u_{xx}^{(0)} = u_{yy}^{(0)} = -\frac{1}{2}\frac{D_1[C_{11} - 2C_{12}]}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]},$$
$$u_{zz}^{(0)} = -D_1\frac{C_{11}}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]}.$$

Предположим теперь, что в системе преобладает биквадратичное обменное взаимодействие, т.е. $K_0 > J_0$. При этом $\cos 2\psi = 0$, $\sin 2\psi = 1$. Следовательно, параметры порядка имеют следующие значения:

$$\langle S^z\rangle = 0, \quad q_2^0 = q_2^2 = 1,$$

т.е. в системе реализуется квадрупольная фаза [8]. Нижайшим энергетическим уровнем в квадрупольной фазе также является E_1, а спонтанные деформации представляются в виде

$$u_{xx}^{(0)} = u_{zz}^{(0)} = \frac{-D_1 C_{11}}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]},$$
$$u_{yy}^{(0)} = \frac{2D_1 C_{12}}{[C_{11} - C_{12}][C_{11} + 2C_{12}]}.$$

Такая связь между спонтанными деформациями в квадрупольной фазе приводит к вырождению возбужденных энергетических уровней магнитного иона $E_0 = E_{-1}$. При этой связи основное состояние описывается волновой функцией $\Psi(1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle)$.

Нашей задачей является исследование фазовых состояний рассматриваемой системы. Для этого определим спектры элементарных возбуждений системы. Хорошо известно, что спектры элементарных возбуждений определяются полюсами функции Грина [14]. Дисперсионное уравнение, определяющее спектры связанных магнитоупругих волн, аналогично уравнению Ларкина (с учетом магнитоупругой связи), справедливо во всем температурном интервале существования магнитоупорядоченного состояния и при произвольных соотношениях материальных констант. Решение дисперсионного уравнения связанных магнитоупругих волн позволяет получить спектры гибридизованных элементарных возбуждений [15].

Для упрощения математических вычислений будем рассматривать нашу систему в следующей геометрии: волновой вектор $\mathbf{k}$ параллелен оси OX ($\mathbf{k}\|OX$), а компоненты вектора поляризации квазифононов следующие: e_l^x, e_τ^y, e_t^z.

В случае реализации ферромагнитной фазы ($J_0 > K_0$) спектр τ-поляризованных квазифононов остается линейным по волновому вектору k, а спектр t-поляризованных квазифононов имеет следующий вид:

$$\omega_1^2(k) = \omega_t^2(k)\frac{\alpha k^2 + \frac{b_0}{2} - 4a_0}{\alpha k^2 + \frac{b_0}{2}}, \tag{7}$$

где $\alpha = J_0 R_0^2$, R_0 — радиус обменного взаимодействия, $a_0 = \frac{D_2^2}{2C_{44}}$, $b_0 = \frac{D_1^2}{C_{11}-C_{12}}$ — параметры магнитоупругой связи. Как следует из (7), при условии $\alpha k^2 \ll a_0$, b_0 скорость t-поляризованных квазифононов перенормируется, а их спектр остается линейным по волновому вектору

$$\omega_1^2(k) \approx \omega_t^2(k)\left(1 - \frac{8a_0}{b_0}\right). \tag{8}$$

Спектр l-поляризованных квазифононов в ферромагнитной фазе имеет вид

$$\omega_2^2(k) \approx \omega_l^2(k)\frac{\xi k^2 + 2(J_0 - K_0) - a_0^{(l)}}{\xi k^2 + 2(J_0 - K_0)}, \tag{9}$$

где $\xi = K_0\tilde{R}_0^2$, $\tilde{R}_0$ — радиус биквадратичного обменного взаимодействия, $a_0^{(l)} = \frac{D_1^2}{C_{44}}$. Легко видеть, что спектр продольно поляризованных квазифононов в длинноволновом пределе ($\xi k^2 \ll a_0^{(l)}$) размягчается при

$$K_0^{\mathrm{FM}} = J_0 - \frac{a_0^{(l)}}{2} \tag{10}$$

и принимает вид

$$\omega_2^2(k) \approx \omega_l^2(k)\,\frac{\xi k^2}{a_0^{(l)}}.$$

Спектр продольных квазимагнонов имеет вид

$$\varepsilon_\|(k) = \xi k^2 + 2(J_0 - K_0). \tag{11}$$

В спектре квазимагнонов (11) в точке фазового перехода, определяемой (10), появляется магнитоупругая щель, причем величина этой щели обусловлена только магнитоупругим взаимодействием

$$\varepsilon_\|(0) = a_0^l. \tag{12}$$

Так как магнитоупругая щель в спектре квазимагнонов (12) не может обратиться в нуль, фазовый переход идет по квазифононной ветви возбуждений и точка фазового перехода определяется выражением (10).

Спектр поперечных квазимагнонов имеет вид

$$\varepsilon_\perp(k) = \alpha k^2 + \frac{b_0}{2}. \tag{13}$$

Как видно из выражения (13), учет магнитоупругого взаимодействия приводит к тому, что в спектре квазимагнонов появляется магнитоупругая щель, которая не обращается в нуль.

В случае реализации в рассматриваемой системе квадрупольной фазы ($K_0 > J_0$) спектры квазифононов остаются линейными по волновому вектору

$$\omega_1^2(k) = \omega_l^2(k), \quad \omega_2^2(k) = \omega_\tau^2(k), \quad \omega_3^2(k) = \omega_t^2(k).$$

В квадрупольной фазе происходит вырождение возбужденных энергетических уровней магнитного иона, поэтому спектры квазимагнонов совпадают:

$$\varepsilon_\|(k) = \varepsilon_\perp(k) = \sqrt{[2K_0 - 2J_0 + b_0][b_0 + \xi k^2]}. \tag{14}$$

Из условия обращения в нуль щели в спектре квазимагнонов получим величину „поля“, при котором происходит фазовый переход из квадрупольной фазы,

$$K_0^{\mathrm{QU}} = J_0 - \frac{b_0}{2}. \tag{15}$$

Сравнивая выражения (10) и (15), видим, что точки фазовых переходов, которым соответствуют значения констант биквадратичного обменного взаимодействия K_0^{FM} и K_0^{QU}, отличаются друг от друга. Следовательно, фазовый переход из ферромагнитной фазы в квадрупольную фазу является переходом первого рода. Полученные значения K_0^{FM} и K_0^{QU} соответствуют линиям устойчивости ферромагнитной и квадрупольной фаз соответственно.

Можно предположить, что фазовый переход между ферромагнитной и квадрупольной фазами протекает через квадрупольно-ферромагнитное состояние. Квадрупольно-ферромагнитная фаза является смешанным состоянием, в котором реализуются одновременно и ферромагнитная и квадрупольная фазы. В квадрупольно-ферромагнитной фазе относительный вклад ферромагнитных и квадрупольных составляющих в параметры порядка меняется в зависимости от величины материальных констант. Область существования квадрупольно-ферромагнитой фазы: $\Delta K = K_0^{\mathrm{FM}} - K_0^{\mathrm{QU}} = \frac{b_0}{2} - \frac{a_0^{(l)}}{2} > 0$.

3. Фазовые переходы по температуре

Представляет интерес исследовать влияние магнитоупругого взаимодействия на температурные фазовые переходы в негейзенберговском магнетике со скомпенсированной магнитной анизотропией.

Как было показано выше, в системе может реализовываться дальний магнитный порядок как ферромагнитного, так и квадрупольного типа. Предположим, что при низких температурах в системе реализуется ферромагнитная фаза. С ростом температуры параметр порядка $\langle S_n^z \rangle$ уменьшается и при $T = T_{\text{FM}}$ обращается в нуль, при этом система переходит в квадрупольную фазу. Дальнейшее увеличение температуры приводит к изменению квадрупольных параметров порядка (q_2^0, q_2^2), которые при температуре $T = T_Q$ обращаются в нуль, и система переходит в парамагнитное состояние.

Для оценки температуры фазового перехода воспользуемся методом бозонизации хаббардовских операторов [16]. Основная идея метода заключается в построении бозевского аналога гамильтониана (1). Первый этап заключается в приведении гамильтониана к диагональному виду и представлению спиновых операторов через операторы Хаббарда. Далее хаббардовским операторам X_n^α ставятся в соответствие псевдохаббардовские операторы $\tilde{X}_n^\alpha$, которые связаны с бозевскими операторами следующими соотношениями:

$$\tilde{X}_n^{10} = (1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n) a_n, \quad \tilde{X}_n^{01} = a_n^+,$$
$$\tilde{X}_n^{1-1} = (1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n) b_n, \quad \tilde{X}_n^{-11} = b_n^+,$$
$$\tilde{X}_n^{0-1} = a_n^+ b_n, \quad \tilde{X}_n^{-10} = b_n^+ a_n, \quad \tilde{H}_n^0 = a_n^+ a_n,$$
$$\tilde{H}_n^{-1} = b_n^+ b_n, \quad \tilde{H}_n^1 = 1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n. \tag{16}$$

Здесь a — Бозе-операторы, соответствующие переходу иона из состояния E_1 в состояние E_0; b соответствует переходу из состояния E_1 в состояние E_{-1}.

Операторы Хаббарда, а следовательно, и гамильтониан (1) не могут быть выражены ни через какие комбинации бозевских операторов. В то же время можно построить бозевский аналог гамильтониана (1), т.е. оператор, действующий в бесконечномерном гильбертовом пространстве, причем определенная часть его матричных элементов оказывается равной матричным элементам гамильтониана (1).

Перепишем гамильтониан (1) в ферромагнитной фазе через бозевские операторы, ограничиваясь квадратичными членами по операторам рождения и уничтожения квазичастиц, и диагонализуем полученный гамильтониан стандартным $u{-}v$-преобразованием Боголюбова

$$H^{(2)} = E_0 + \sum_k \varepsilon_\alpha(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k \varepsilon_\beta(k) \beta_k^+ \beta_k. \tag{17}$$

Легко показать, что спектры α- и β-квазичастиц $(\varepsilon_{\alpha,\beta}(k))$ совпадают с выражениями (11) и (13).

Для определения температуры фазового перехода из ферромагнитной фазы в квадрупольную рассмотрим

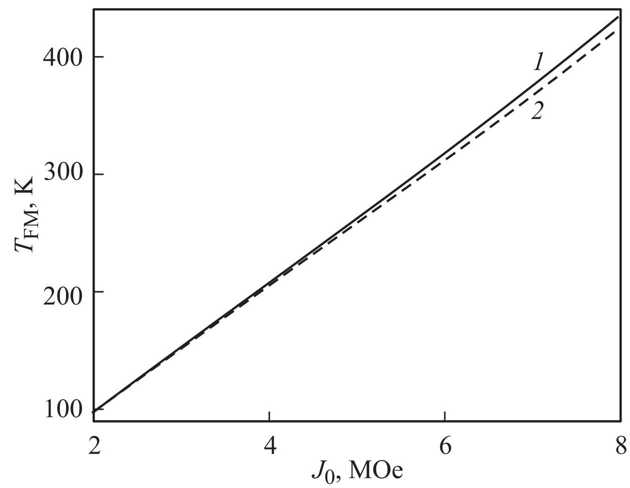

Рис. 1. Зависимость температуры фазового перехода T_{FM} от величины константы гейзенберговского обменного взаимодействия J_0 при значениях параметра магнитоупругой связи $b_0 = 1500$ (*1*) и 150 Oe (*2*).

среднее значение намагниченности $\langle S_n^z \rangle$. Учитывая связь спиновых операторов с операторами Хаббарда (5) и переходя к псевдохаббардовским операторам посредством (16), найдем среднее значение намагниченности

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_n 1 - \langle a_n^+ a_n \rangle - 2 \langle b_n^+ b_n \rangle. \tag{18}$$

Выражение (18) можно представить следующим образом:

$$\langle S_n^z \rangle = 1 - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{(u_{k_\alpha}^2 + v_{k_\alpha}^2) k^2 dk}{\left[\exp\left(\frac{\varepsilon_\alpha(k)}{T}\right) - 1\right]} - \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{(u_{k_\beta}^2 + v_{k_\beta}^2) k^2 dk}{\left[\exp\left(\frac{\varepsilon_\beta(k)}{T}\right) - 1\right]}, \tag{19}$$

где $(u_k^2 + v_k^2) \propto \frac{1}{\varepsilon(k)}$. Температуру фазового перехода T_{FM} определим из условия $\langle S_n^z \rangle = 0$. Численное решение уравнения (19) позволяет определить температуру перехода из ферромагнитной фазы T_{FM}. На рис. 1 показана зависимость температуры T_{FM} от величины константы билинейного обменного взаимодействия при различных значениях параметра магнитоупругого взаимодействия b_0 (150 и 1500 Oe).

Как видно из рис. 1, влияние магнитоупругого взаимодействия в ферромагнитной фазе увеличивается с ростом гейзенберговского обменного взаимодействия. Это влияние становится заметным только при больших значениях обменного взаимодействия. Данную теоретическую зависимость можно использовать для определения значения константы обменного взаимодействия, зная значения температуры T_{FM} для исследуемой системы.

Аналогично найдем температуру перехода из квадрупольной фазы в парамагнитную. Для этого перепишем гамильтониан (1) через бозевские операторы в

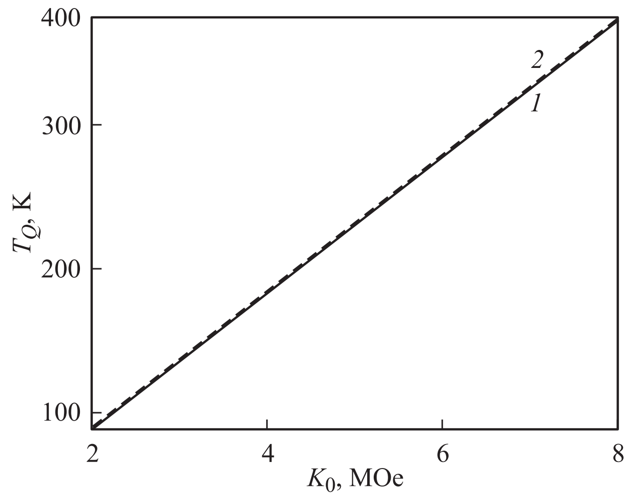

Рис. 2. Зависимость температуры фазового перехода T_Q от величины константы биквадратичного обменного взаимодействия K_0 при значениях параметра магнитоупругой связи $b_0 = 1500$ (*1*) и 150 Oe (*2*).

квадрупольной фазе. Полученный гамильтониан будет иметь вид (17), а спектры α- и β-квазичастиц $(\varepsilon_{\alpha,\beta}(k))$ совпадают с выражением (14).

Для определения температуры T_Q перехода из квадрупольной фазы рассмотрим тензорный параметр порядка q_2^0:

$$q_2^0 = \langle O_{2n}^0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_n 1 - 3\langle a_n^+ a_n \rangle. \qquad (20)$$

Выражение (20) можно переписать следующим образом:

$$q_2^0 = 1 - \frac{3}{2\pi^2} \int\limits_0^\infty \frac{(u_k^2 + v_k^2)k^2 dk}{\left[\exp\left(\frac{\varepsilon_\alpha(k)}{T}\right) - 1\right]}. \qquad (21)$$

Исчезновению квадрупольного упорядочения соответствует значение параметра порядка $q_2^0 = 0$, когда система переходит в парамагнитное состояние. Численное решение полученного уравнения позволяет определить температуру перехода из квадрупольной фазы T_Q. График зависимости температуры перехода T_Q от величины константы биквадратичного обменного взаимодействия при различных значениях параметра магнитоупругого взаимодействия b_0 (150 и 1500 Oe) представлен на рис. 2.

Как видно из рис. 2, в квадрупольной фазе параметр магнитоупругого взаимодействия практически не влияет на температуру фазового перехода. Можно предположить, что слабая зависимость температуры перехода из квадрупольной фазы от параметра магнитоупругого взаимодействия связана с тем, что данный фазовый переход протекает по квазимагнонной ветви возбуждений (14). Как видно из спектра (14), параметр магнитоупругой связи входит в данное выражение как аддитивная добавка к энергетической щели $(K_0 - J_0) > b_0$.

Данная теоретическая зависимость может использоваться для определения константы биквадратичного обменного взаимодействия для интерметаллических соединений.

4. Заключение

В настоящей работе исследованы фазовые состояния трехмерного негейзенберговского изотропного ферромагнетика. В рамках предложенной модели изучены фазовые переходы как по материальным константам, так и по температуре. Проведенные исследования показали, что в зависимости от соотношения материальных констант в системах со скомпенсированной одноионной анизотропией реализуется дальний магнитный порядок ферромагнитого и квадрупольного типа.

Фазовый переход из ферромагнитной фазы протекает по квазифононной ветви возбуждений. На линии устойчивости ферромагнитной фазы мягкой модой становится продольно поляризованная квазифононная ветвь возбуждений, которая взаимодействует с высокочастотной квазимагнонной ветвью. Учет магнитоупругого взаимодействия приводит к появлению магнитоупругой щели в высокочастотном спектре квазимагнонов. Спектры поперечно-поляризованых квазифононов не претерпевают существенных изменений в точке фазового перехода. Необходимо отметить, что в стандартных моделях с учетом только гейзенберговского обменного взаимодействия в точке фазового перехода размягчается поперечно-поляризованная квазиупругая ветвь возбуждений [10]. Такое необычное поведение квазифононов связано с влиянием биквадратичного обменного взаимодействия.

Фазовый переход из квадрупольной фазы протекает по квазимагнонной ветви возбуждений. При этом имеет место вырождение энергетических уровней и спектры высокочастотных и низкочастотных квазимагнонов совпадают.

Таким образом, рассматривая фазовые переходы из ферромагнитной фазы и из квадрупольной фазы, мы получили различные значения „полей“ фазовых переходов. Данный результат указывает на то, что в системе имеет место фазовый переход первого рода, который протекает через смешанное квадрупольно-ферромагнитное состояние, а найденные значения „полей“ фазовых переходов являются линиями устойчивости соответствующих фаз. Как видно из полученных значений точек фазового перехода, реализация квадрупольно-ферромагнитной фазы связана с учетом влияния магнитоупругого взаимодействия и область существования квадрупольно-ферромагнитного состояния определяется величиной параметров магнитоупругого взаимодействия $\frac{b_0}{2} - \frac{a_0^{(l)}}{2}$.

Исследование влияния магнитоупругого взаимодействия на температурные фазовые переходы показало, что температура перехода из ферромагнитной фазы растет при увеличении параметра магнитоупругого взаимодействия. Эта зависимость становится более очевидной при высоких значениях гейзенберговского обменного взаимодействия. Температура фазового перехода из квадрупольной фазы незначительно зависит от параметра магнитоупругого взаимодействия. Такое различие связано с тем, что фазовый переход из ферромагнитной фазы идет по квазифононной ветви возбуждений, при этом размягчается спектр квазифононов. Это указывает на существенное влияние магнитоупругого взаимодействия в ферромагнитной фазе. В квадрупольной фазе влияние упругой подсистемы на магнитную сводится к статической перенормировке щели в квазимагнонном спектре.

Список литературы

[1] К.П. Белов, В.И. Соколов. ЖЭТФ **48**, 979 (1965).
[2] И.С. Терёшина, С.А. Никитин, Г.А. Политова, А.А. Опаленко, Е.А. Терёшина, И.В. Телегина. ФТТ **51**, 85 (2009).
[3] С.А. Никитин, Т.И. Иванова, Н.Ю. Панкратов, Ю.Г. Пастушенков, К.П. Скоков. ФТТ **47**, 501 (2005).
[4] V. Massidda. J. Magn. Magn. Mater. **320**, 851 (2008).
[5] R. Anderson. Solid State Phys. **14**, 99 (1965).
[6] R. Elliot, M. Thorpe. J. Appl. Phys. **39**, 802 (1968).
[7] Э.Л. Нагаев. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. Наука, М. (1988). 231 с.
[8] H.H. Chen, P.M. Levy. Phys. Rev. B **7**, 4267 (1973).
[9] B.C. Frazer, G. Shirane, D.E. Cox, P.J. Brown. Phys. Rev. **140**, A 2139 (1965).
[10] Е.А. Туров, В.Г. Шавров. УФН **140**, 429 (1983).
[11] P.B. Terent'ev, N.V. Mushnikov, V.S. Gaviko, L.A. Shreder, E.V. Rosenfeld. J. Magn. Magn. Mater. **320**, 836 (2008).
[12] G. Xinchun, D. Xufeng, O. Jinping. J. Magn. Magn. Mater. **321**, 2742 (2009).
[13] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
[14] В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский. Функции Грина в теории магнетизма. Наук. думка, Киев (1984). 336 с.
[15] Ю.Н. Мицай, Ю.А. Фридман. ТМФ **81**, 263 (1989).
[16] В.В. Вальков, Т.А. Валькова. Препринт ИФ СО АН СССР, № 667Ф. Красноярск (1990). 40 с.