Особенности спинового упорядочения в изинговском антиферромагнетике с одноионной анизотропией типа „легкая плоскость“

© В.М. Калита, Г.Ю. Лаванов*, В.М. Локтев**

Национальный технический университет Украины „Киевский политехнический институт“,
03056 Киев, Украина
* Институт физики Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина
** Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Национальной академии наук Украины,
03143 Киев, Украина

E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 3 июля 2007 г.)

Проведен термодинамический анализ спинового упорядочения в изинговском антиферромагнетике с легкоплоскостной одноионной анизотропией. Проанализированы решения уравнений состояния и построена фазовая диаграмма. Показано, что при возрастании константы одноионной анизотропии по мере усиления конкуренции между одноионной анизотропией и обменным взаимодействием происходит изменение рода перехода от непрерывного к скачкообразному. Это вызвано изменением заселенностей ионных состояний, происходящим под действием одноионной анизотропии, и вымораживанием ионных состояний с ненулевой проекцией спина. Также при возрастании величины одноионной анизотропии изменяется тип фазового перехода между парамагнитным и антиферромагнитным состояниями с перехода типа порядок–беспорядок к переходу типа порядок–порядок.

PACS: 75.10.-b, 75.30.Gw, 75.50.Ee

1. Введение

Изучение магнетиков с большой одноионной анизотропией (ОА), сравнимой с обменным взаимодействием (ОВ), представляет большой интерес, особенно в случае, когда такая анизотропия конкурирует с ОВ. По своему влиянию ОА отличается от многоионной анизотропии обменной или дипольной природы [1,2], обычно описываемых в квазиклассическом подходе. При этом ОА играет важную роль не только при рассмотрении спиновой динамики (см. обзор [3] и цитируемую в нем литературу), но и при фазовых переходах (ФП) в магнитоупорядоченные состояния, а также при индуцировании последних магнитным полем [4,5].

Конкуренция ОА легкоплоскостного типа и изотропного ОВ, например, в одноосных магнетиках со спином $S = 1$ на узле приводит к тому, что переход в магнитоупорядоченное состояние происходит как квантовый ФП, являющийся ФП типа смещения, осуществляемый за счет спонтанного возникновения направленной в легкой плоскости спиновой (магнитной) поляризации ван-флековских одноионных состояний [6–8].

Далее рассматривается предельный случай, когда несмотря на наличие ОА легкоплоскостного типа поляризации одноионных состояний при ФП не происходит. Такая ситуация возможна, например, при конкуренции ОА легкоплоскостного типа с анизотропным ОВ легкоосного типа. В магнетике же со спином $S = 1$ ионов и ОА легкоплоскостного типа с анизотропным ОВ легкоосного типа основным ионным состоянием оказывается синглет, а магнитное упорядочение связано с расщеплением вышележащего дублета под действием обменного поля, направленного вдоль оси. Фактически рассматривается вопрос об упорядочении изинговского магнетика с ОА, конкурирующей с ОВ. В реальных магнетиках всегда присутствует ОВ, содержащее спиновые проекции, перпендикулярные оси квантования. Тем не менее имеются магнетики с $S = 1$ и ОА типа „легкая плоскость“ [9–14], где ОВ столь анизотропно, что может считаться одноосным. Таким образом, в отличие от случая, рассмотренного в [6–8], в настоящей работе будут изучены термодинамические особенности магнитного упорядочения при конкуренции только анизотропных (одно- и двуионных) взаимодействий.

Отметим еще одну особенность действия ОА легкоплоскостного типа, касающуюся изинговского антиферромагнетика (АФМ). В нем магнитное поле **h**, ориентированное вдоль направления намагничивания, вызывает метамагнитный ФП между АФМ- и ферромагнитным состояниями. Однако, как было показано в экспериментах [13,14], в изинговских системах с легкоплоскостным типом ОА метамагнитный ФП происходит в несколько этапов, а в намагничивании соответственно наблюдаются несколько плато. В работе [15] была дана трактовка такому ступенчатому метамагнитному переходу, однако она касалась лишь температуры $T = 0$; тем самым осталась вне рассмотрения фазовая $h{-}T$-диаграмма системы. Необходимо отметить, что даже в случае изинговского АФМ с $S = 1/2$ на узле, когда ОА отсутствует в принципе, построение $h{-}T$-диаграммы является весьма нетривиальной задачей [16]. Поэтому прежде чем приступать к анализу фазовой диаграммы изинговского АФМ с легкоплоскостной ОА, следует изучить термодинамические особенности установления в нем упорядочения при отсутствии магнитного поля.

Ранее формирование ферромагнитного порядка в модели с изинговским обменом и с легкоплоскостной ОА для систем с $S=1$ на узле обсуждалось в [17,18]. Однако, невзирая на кажущуюся простоту, исследуемая модель обладает весьма специфическими особенностями. Так, при упомянутом типе ОА уравнение состояния имеет два решения с ненулевой намагниченностью. Или, что еще более интересно, при значительном возрастании константы легкоплоскостной ОА, конкурирующей с анизотропным ОВ легкоосного типа, ФП из парамагнитного (ПМ) состояния в упорядоченное происходит как фазовый переход первого рода. Отмеченные особенности вызваны ОА легкоплоскостного типа, за счет которой основным одноионным состоянием является немагнитный синглет [19]. При возрастании константы ОА происходит увеличение заселенности этого синглета и уменьшение заселенности вышележащего дублета. Поэтому возникновение спонтанного поля, расщепляющего дублет, происходит при более низкой температуре. Но понижение температуры сжимает в свою очередь заселенность дублета. В результате при конкуренции анизотропных ОА и ОВ (особенно когда их величины сопоставимы) в модели возникает сильная обратная связь, которая и может привести к изменению рода ФП. Представляется интересным проанализировать, как эти особенности модели согласуются с термодинамической теорией ФП Ландау.

2. Гамильтониан и основное состояние изинговского АФМ

Модельный гамильтониан описанного выше АФМ можно записать в виде

$$H=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{n}_\alpha,\mathbf{m}_\beta\\(\alpha\neq\beta)}} I_{\mathbf{n}_\alpha,\mathbf{m}_\beta} S^Z_{\mathbf{n}_\alpha} S^Z_{\mathbf{m}_\beta}+D\sum_{\mathbf{n}_\alpha}(S^Z_{\mathbf{n}_\alpha})^2, \tag{1}$$

где первая сумма отвечает изинговскому ОВ, а вторая — ОА, $\alpha,\beta=1,2$ — номера АФМ-подрешеток, а $\mathbf{n}$, $\mathbf{m}$ номеруют ячейки; $S^Z_{\mathbf{n}_\alpha}$ — Z-я проекция оператора спина; $I_{\mathbf{n}_1,\mathbf{m}_2}$ — константа межподрешеточного обмена, поэтому $I_{\mathbf{n}_1,\mathbf{m}_2}>0$; $D>0$ — константа ОА легкоплоскостного типа, Z — координатная ось, направленная вдоль кристаллографической оси, являющейся и осью квантования.

Согласно приближению среднего поля, одноионный гамильтониан спинов подрешеток сводится к выражению

$$H_{\alpha\mathbf{n}}=-Is_\beta S^Z_{\alpha\mathbf{n}}+D(S^Z_{\alpha\mathbf{n}})^2, \tag{2}$$

где Is_β — обменное поле, с которым спины одной подрешетки действуют на $\mathbf{n}$-й спин другой подрешетки, $s_\beta=s$ — модуль среднего значения Z-й проекции спина, а $I=\sum_{\mathbf{m}_{\beta(\neq\alpha)}} I_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta}$ и учитывает в том числе и суммирование по ближайшим соседям. В (2) также учтено, что в АФМ спины подрешеток направлены противоположно.

Согласно (2), состояния ионов и их энергии соответственно записываются в виде

$$\psi^{(0)}_{\mathbf{n}_\alpha}=|1\rangle,\quad \psi^{(1)}_{\mathbf{n}_\alpha}=|0\rangle,\quad \psi^{(2)}_{\mathbf{n}_\alpha}=|-1\rangle, \tag{3}$$

$$\varepsilon_0=-Is+D,\quad \varepsilon_1=0,\quad \varepsilon_2=+Is+D. \tag{4}$$

При $T\neq0$ величина s зависит от температуры, но при $T=0$ его величина должна быть равна проекции спина одного из состояний (3). Поэтому при $T=0$ энергия основного состояния спина в АФМ-состоянии будет равна $\varepsilon_0=-I+D$ и ее величина должна быть меньше энергии первого возбужденного состояния из (4). Тем самым (см. (4)) граница устойчивости АФМ-фазы определяется условием $D/I<1$.

Однако энергия взаимодействия системы в приближении самосогласованного поля в расчете на одну ячейку (она содержит два спина) может быть записана в виде

$$E=-Is_1s_2+D(Q_1+Q_2), \tag{5}$$

где Q_1 и Q_2 — термодинамические средние квадрупольных спиновых моментов [2,20–22].

Если $T=0$, компоненты квадрупольного момента в АФМ-состоянии $Q_1=Q_2=1$, а в ван-флековском состоянии — $Q_1=Q_2=0$. Таким образом, получаем, что при $T=0$ АФМ-состояние будет равновесным, если его энергия отрицательна, т.е. при $D<I/2$. Если $T\neq0$, равенство энергий основного и первого возбужденного состояний определяет точку кроссовера. Из (4) имеем, что кроссовер происходит при температуре, когда средняя проекция спина подрешетки

$$s=\frac{D}{I}. \tag{6}$$

3. Свободная энергия и уравнения состояния

Запишем выражение для свободной энергии Гиббса в виде $F=E-T\sigma_{\text{en}}$, где σ_{en} — энтропия системы, которая при использовании одноионного приближения (2) записывается как

$$\sigma_{\text{en}}=\sum_{\alpha,j} p^{(j)}_\alpha \ln p^{(j)}_\alpha, \tag{7}$$

где $p^{(j)}_\alpha$ — вероятности состояний (3), которые линейно связаны со средними: $p^{(0)}_\alpha-p^{(2)}_\alpha=s_\alpha=s$, $p^{(0)}_\alpha+p^{(2)}_\alpha=Q_\alpha=Q$, причем $\sum_j p^{(j)}_\alpha=1$.

При определении выражения для F явно учтем эквивалентность спиновых состояний обеих подрешеток. Таким образом, в расчете на один ион находим следующее выражение для свободной энергии:

$$F = -\frac{1}{2}Is^2 + DQ + T\left[\frac{Q+s}{2}\ln\frac{Q+s}{2} + \frac{Q-s}{2}\ln\frac{Q-s}{2} + (1-Q)\ln(1-Q)\right]. \quad (8)$$

Из условий минимума (8) следуют выражения для уравнений состояния:

$$\frac{\partial F}{\partial s} = -Is + \frac{T}{2}\left(\ln\frac{Q+s}{2} - \frac{1}{2}\ln\frac{Q-s}{2}\right) = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial F}{\partial Q} = D + T\left[\frac{1}{2}\ln\frac{Q+s}{2} + \frac{1}{2}\ln\frac{Q-s}{2} - \ln(1-Q)\right] = 0. \quad (10)$$

Второе уравнение позволяет найти связь

$$Q(s) = \frac{\xi - k}{\xi - 1}, \quad (11)$$

где $\xi = 4\exp(-D/T)$, $k = \sqrt{s^2(1-\xi)+\xi}$.

Свободная энергия (8) отвечает ее определению согласно методу Горского–Брэгга–Вильямса [23]. В ней линейный по квадрупольному параметру порядка вклад от ОА не может привести к кооперативным эффектам и вызвать ФП. Параметром порядка, ответственным за ФП в магнитоупорядоченное состояние, является средняя величина проекции спина подрешетки. Поэтому свободную энергию можно записать в виде функционала, зависящего лишь от s. Выражение для $F(s)$ нетрудно найти, используя приближение среднего поля. Однако необходимо учесть, что свободная энергия, определенная как логарифм статсуммы [24], рассчитанной по состояниям одночастичного гамильтониана (2), относится к приближенному расчету для случая равновесия. Здесь же $F(s)$ является функцией параметра порядка, который не отвечает равновесию. Поэтому для ее расчета используем подход, предложенный Леонтовичем [25] и основанный на том, что уравнение согласования определяет эффективное поле, в котором возникающее значение s параметра порядка было бы равновесным, а неравновесность определялась работой этого поля. В итоге было получено выражение для $F(s)$, которое имеет вид

$$F(s) = \frac{-I}{2}s^2 + D\frac{\xi-k}{\xi-1} + T\left\{\frac{1}{2}\left(\frac{\xi-k}{\xi-1}+s\right)\times\ln\frac{1}{2}\left(\frac{\xi-k}{\xi-1}+s\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\xi-k}{\xi-1}-s\right)\ln\frac{1}{2}\left(\frac{\xi-k}{\xi-1}-s\right) + \left(1-\frac{\xi-k}{\xi-1}\right)\ln\left(1-\frac{\xi-k}{\xi-1}\right)\right\}. \quad (12)$$

Заметим, что $F(s)$ в виде (12) может быть получена с помощью энергии (8) путем подстановки в нее величины $Q(s)$, определенной из (10). Таким образом, свободная энергия (12) соответствует приближению Горского–Брэгга–Вильямса и приближению среднего поля.

Окончательное выражение для уравнения состояния имеет вид

$$-Is + \frac{T}{2}\ln\left(1 + \frac{2s(\xi-1)}{\xi - k - s(\xi-1)}\right) = 0. \quad (13)$$

Решения этого трансцендентного уравнения будем осуществлять численно. При этом оговорим, что практически для всех значений D переход между ПМ- и АФМ-состояниями происходит непрерывно, кроме узкой области $D \to I/2$ со скачкообразным ФП.

4. Описание перехода второго рода

Проанализируем поведение системы (1) в зависимости от безразмерной величины отношения D/I. На рис. 1 приведены зависимости для $s(T)$ при $D/I = 0.35$ и 0.45, полученные из уравнения (13). Устойчивое решение определяется физическим условием $s(T\to 0)\to 1$. Из кривых видно, что, как говорилось, АФМ-состояние при повышении T непрерывно переходит в ПМ-состояние. ОА, увеличивая заселенность немагнитного синглета, приводит к уменьшению температуры T_{tr} перехода. Но в отличие от энтропии, также препятствующей установлению магнитного порядка, ОА, увеличивая заселенность немагнитного синглета, приводит к упорядоченности ПМ-фазы. Поэтому уменьшение T_{tr} является следствием конкуренции взаимодействий ОА и анизотропного ОВ, а не возрастающей степени беспорядка.

Из рис. 1 видно, что кроме устойчивых решений уравнение (13) дает еще и неустойчивые решения, которые появляются ниже точки перехода при $T \ll T_{\mathrm{tr}}$. При увеличении $D > 0$ температура возникновения неустойчивого решения возрастает и приближается к T_{tr}. Заметим, что при $D < 0$ существует только одно решение и каких-либо дополнительных решений не возникает.

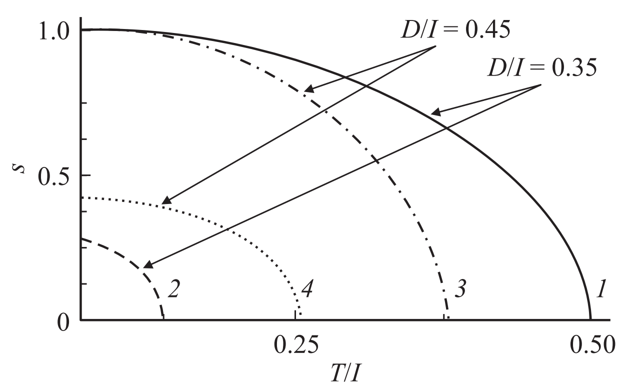

Рис. 1. Температурные зависимости для среднего спина подрешетки $s(T)$ при $D/I = 0.35$ (*1, 2*) и 0.45 (*3, 4*). *1, 3* — устойчивые решения, *2, 4* — неустойчивые.

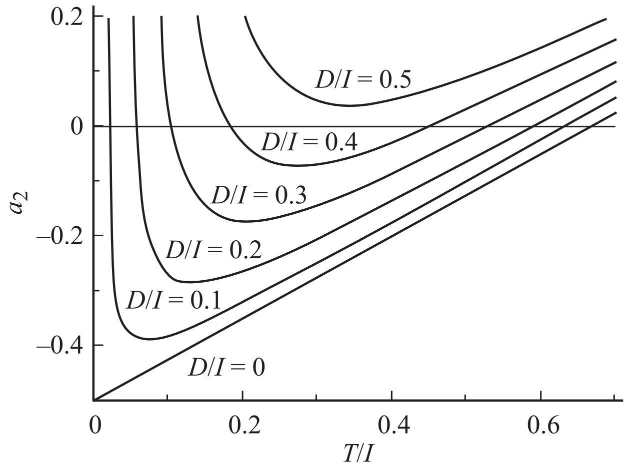

Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента $a_2(T)$ при разных значениях D/I.

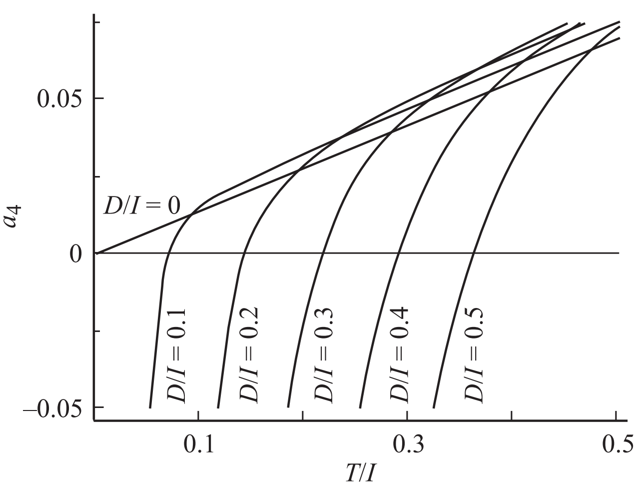

Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента $a_4(T)$ при разных значениях D/I.

Для неустойчивого решения $s(T \to 0) = D/I$ и в нем нет кроссовера при $T \neq 0$. Это решение возникает при низких T, когда заселенность синглета основного состояния большая, а расщепление ионного дублета обменным полем является недостаточным, чтобы основное состояние было поляризованным. Энергия этого решения отвечает максимуму $F(s)$.

Проанализируем полученные решения в рамках феноменологической теории ФП. При малом s свободную энергию (12) можно представить в виде степенного ряда с четными степенями

$$F(T, s) = F(T, s = 0) + \sum_i a_{2j} s^{2j}, \qquad (14)$$

коэффициенты которого $a_{2j} = \partial^{2j} F(T, s)/\partial s^{2j}$.

При $D = 0$ коэффициент $a_2(T)$ линейно зависит от T и только в точке перехода изменяет знак, а остальные коэффициенты с $j > 1$ прямо пропорциональны T и не изменяют своего знака. Это видно из рис. 2 и 3, на которых показаны зависимости для $a_2(T)$ и $a_4(T)$ при разных значениях D/I. ОА приводит к изменению температурных зависимостей $a_2(T)$ и $a_4(T)$.

Из кривых, приведенных на рис. 2, видно, что коэффициент $a_2(T)$ может дважды изменять свой знак, или, наоборот, не изменять его, оставаясь положительным. При этом устойчивость ПМ-фазы определяется условием $a_2(T) > 0$. Первый раз $a_2(T)$ обращается в нуль при $T = T_{\mathrm{tr}}$ и при ФП из ПМ- в АФМ-состояние изменяет свой знак с положительного на отрицательный, а коэффициент $a_4(T)$ при $T = T_{\mathrm{tr}}$ положительный. Эти знаки коэффициентов $a_{2j}(T)$ отвечают, как известно [26], условиям теории Ландау ФП второго рода.

Неустойчивые решения, образующиеся при низких T, также возникают в точке, когда коэффициент $a_2(T) = 0$, но для них, как видно из рис. 2, знак $a_2(T)$ при понижении T, наоборот, изменяется с отрицательного на положительный, а знак $a_4(T)$ в этой области отрицательный. При таких коэффициентах потенциала Ландау (14) система неустойчива.

Итак, ОА приводит к сильной температурной зависимости коэффициентов $a_2(T)$ в (14). Несмотря на это возникновение устойчивого и неустойчивого решений уравнение состояния (13) с теорией ФП Ландау. Из рис. 2 также следует, что при увеличении отношения D/I происходит сближение точек, в которых $a_2(T) = 0$, и начиная с некоторого значения D/I коэффициент $a_2(T)$ сохраняет положительный знак. В этом случае ПМ-фаза устойчива при всех T вплоть до $T \to 0$, и переход к АФМ-состоянию будет скачкообразным.

5. Описание перехода первого рода

На рис. 4 приведено решение уравнения состояния (13) при $D/I = 0.47$, когда $a_2(T) > 0$. Для этого решения (имеющего вид „языка") средняя проекция спина подрешетки имеет только конечные значения, которые

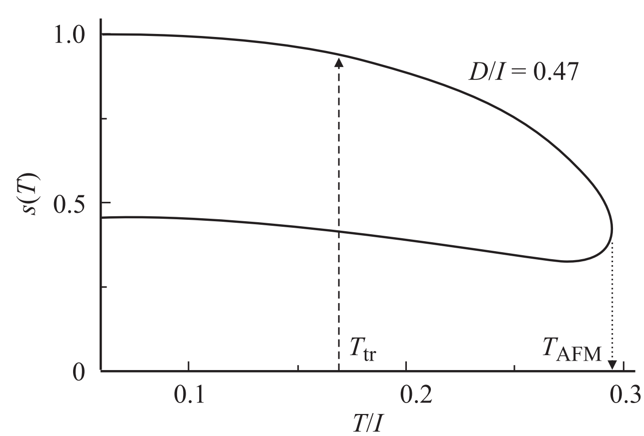

Рис. 4. Решение уравнения состояния (13) при $D/I = 0.47$. Стрелкой обозначен скачок подрешеточной намагниченности в точке ФП $T = T_{\mathrm{tr}}$.

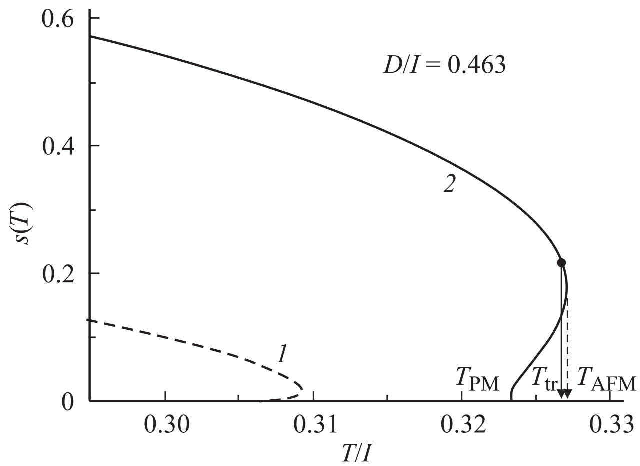

Рис. 5. Решения уравнения состояния при $D/I = 0.463$. *1* — неустойчивое (низкотемпературное) решение, *2* — высокотемпературное решение.

во всей области T не стремятся к нулю. Непрерывно перейти от этого решения к ПМ с $s = 0$ невозможно, поэтому ФП между этими состояниями может быть только первого рода. Анализ $F(s)$ для этого решения показывает, что его верхняя часть устойчива и для нее $s \to 1$ при $T \to 0$. Нижняя часть решения при $T \to 0$ имеет s, описываемое (6), и эта ветка неустойчива. Граница устойчивости АФМ-состояния отвечает максимальной температуре с ненулевым значением s, она на рис. 5 обозначена T_{AFM}. Граница устойчивости ПМ-фазы равна $T_{\mathrm{PM}} = 0$. Точка ФП (ее также обозначим T_{tr}) между ПМ- и АФМ-фазами найдена из равенства свободных энергий этих состояний. В точке ФП происходит скачок средней проекции спина подрешетки от $s = 0$ к $s \neq 0$, который на рис. 4 изображен стрелкой. Величина скачка близка к предельному значению ($s = 1$), и поэтому для описания такого ФП неприменимо разложение $F(s)$ в виде (14).

Точка, в которой $a_2(T) = 0$ имеет только одно решение и касается оси T на рис. 2, определяется двумя трансцендентными уравнениями: одно уравнение для T, а второе — для D:

$$\frac{I - T_0}{T_0} = \frac{1}{2}\, e^{\frac{I}{I - T_0}}, \qquad \frac{2I}{D_0} = e^{\frac{I + D_0}{D_0}}. \qquad (15)$$

Из (15) имеем $D_0/I = 0.463$, $T_0/I = 0.316$. Однако точка D_0, T_0 не является трикритической. В ней четвертая производная свободной энергии, определенная при $s = 0$, отрицательна. Это означает, что ФП первого рода существует при $D < D_0$ и $T > T_0$.

Положение трикритической точки найдем при одновременном равенстве нулю коэффициентов $a_2(T_{\mathrm{cr}}) = 0$ и $a_4(T_{\mathrm{cr}}) = 0$, из которых $T_{\mathrm{cr}} = I/3$, $D_{\mathrm{cr}} = (I/3)\ln 4$.

В интервале $D_{\mathrm{cr}} < D < D_0$ коэффициент a_4 проходит нуль при большей T, чем коэффициент a_2, при этом $a_6 > 0$. Такое поведение отвечает переходу первого рода вблизи трикритической точки. Теперь в отличие от случая, рассмотренного на рис. 4, снова для описания ФП можно применять теорию Ландау [26].

На рис. 5 приведено решение уравнения состояния для D из интервала значений $D_{\mathrm{cr}} < D < D_0$. Как и выше, имеем неустойчивое (низкотемпературное) решение. Высокотемпературное решение непрерывно стремится к $s = 0$. Однако в области T, когда $s \to 0$, на зависимости $s(T)$ имеется неоднозначность, когда одной температуре отвечают два решения с $s \neq 0$. Это приводит к первому роду перехода между ПМ- и АФМ-состояниями. Точка ФП определена из пересечения кривых температурных зависимостей свободных энергий этих фаз (на рис. 5 этот переход обозначен стрелкой).

Поведение системы при $D_{\mathrm{cr}} < D < D_0$ можно описать, используя разложение (14), ограничиваясь в нем слагаемыми до шестой степени. Результаты, полученные с использованием потенциала Ландау для описания ФП в этой области значений D, качественно согласуются с результатами, приведенным на рис. 5. Имеются, однако, и количественные расхождения, которые все более ощутимы при удалении от точки ФП. Отметим также, что при $D_{\mathrm{cr}} < D < D_0$ величина T_{tr} мало отличается от T_{AFM}. В частности, для случая, показанного на рис. 5, такое отличие оставляет лишь $\sim 1\%$.

6. Фазовая диаграмма

На основании проведенного рассмотрения построена фазовая диаграмма модели (1). На ней (рис. 6) приведены зависимости $T_{\mathrm{tr}}(D)$ ФП между ПМ- и АФМ-состояниями в зависимости от величины константы ОА, границы устойчивости парамагнитной $T_{\mathrm{PM}}(D)$ и антиферромагнитной $T_{\mathrm{AFM}}(D)$ фаз, а также определенная с помощью соотношения (6) зависимость для величины точки кроссовера $T_{\mathrm{cross}}(D)$. Видно, что возрастание D приводит к уменьшению температуры перехода второго рода между этими состояниями. При этом зависимость $T_{\mathrm{cross}}(D)$ для кроссовера лежит ниже $T_{\mathrm{tr}}(D)$. Устойчивость АФМ-фазы изменяется непрерывно и при $T \to 0$ ограничена значением $D/I \to 1$, что согласуется с результатами, полученными выше при анализе основного состояния системы при $T = 0$.

Зависимость $T_{\mathrm{PM}}(D)$, ограничивающая область устойчивости ПМ-состояния, определяется равенством $a_2(T) = 0$ при $s = 0$. В рассматриваемой модели это выражение можно представить аналитически зависимостью $D = D(T_{\mathrm{PM}})$, которая имеет вид

$$D = \frac{T_{\mathrm{PM}}}{I} \ln \frac{2(I - T_{\mathrm{PM}})}{T_{\mathrm{PM}}}. \qquad (16)$$

На рис. 6 ход $T_{\mathrm{PM}}(D)$ был определен с помощью (16). В области ФП второго рода зависимости $T_{\mathrm{PM}}(D)$ и $T_{\mathrm{tr}}(D)$ совпадают, а при ФП первого рода они идут по-разному.

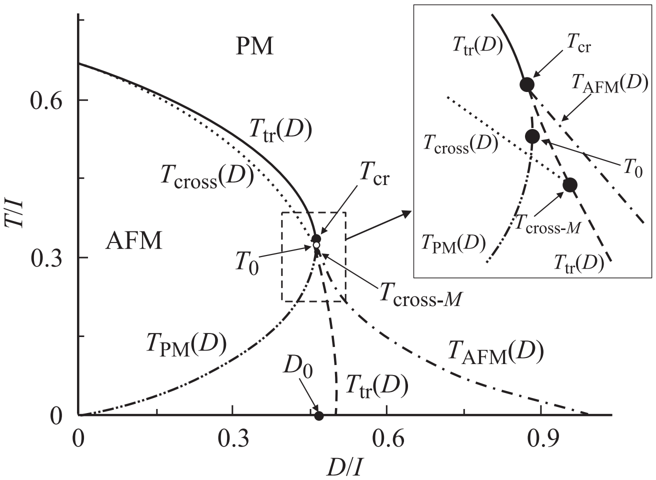

Рис. 6. Фазовая диаграмма изинговского АФМ с легкоплоскостной ОА. Зависимость температуры ФП $T_{\rm tr}(D)$ обозначена сплошной линией при переходе второго рода и штриховой при переходе первого рода, линия кроссовера $T_{\rm cross}(D)$ обозначена пунктиром. Линии устойчивости $T_{\rm AFM}(D)$ и $T_{\rm PM}(D)$ обозначены штрихпунктиром и двойным штрихпунктиром соответственно. На вставке показан вид фазовой диаграммы вблизи трикритической точки.

ФП из ПМ- в АФМ-состояние происходит за счет расщепления ионных дублетов спонтанно возникающим при $T = T_{\rm tr}$ обменным полем. В ПМ- и АФМ-фазах при $T < T_{\rm tr}$ основным состоянием ионов является немагнитный синглет. И лишь при $T < T_{\rm cross}$ основное состояние иона становится спин-поляризованным. Таким образом, когда $T_{\rm cross} < T_{\rm tr}$ ФП между ПМ- и АФМ-состояниями относится не к ФП типа порядок–порядок, а к обычным магнитным ФП типа порядок–беспорядок.

Начиная с трикритической точки, переход между ПМ- АФМ-состояниями происходит как переход первого рода (его кривая $T_{\rm tr}(D)$ обозначена штриховой линией). На вставке показано, что в точке $T_{\text{cross-}M}$ кривая $T_{\rm cross}(D)$ пересекает кривую $T_{\rm tr}(D)$ и при больших D кроссовера не будет. При таких больших D основное ионное состояние в точке $T = T_{\rm tr}$ имеет предельную спиновую поляризацию и происходящий по T переход протекает аналогично ФП при $T = 0$, если изменяется величина D. Следовательно, с исчезновением кроссовера при $T < T_{\text{cross-}M}$ ФП между ПМ- и АФМ-состояниями является квантовым ФП и относится, согласно [6–8], к магнитным ФП типа смещения, или к ФП типа порядок–порядок.

7. Заключение

Из работы следует, что для модели Изинга с положительной ОА и спином на узле $S = 1$ конкуренция анизотропного легкоосного ОВ и ОА легкоплоскостного типа не сводится к конкуренции взаимодействий, стремящихся изменить направления параметра порядка, как при ориентационыx ФП. Напротив, в исследуемой системе проявляется влияние трех разных по своему характеру процессов: возникновение магнитного порядка за счет ОВ; установление немагнитного порядка за счет ОА, приводящей к возрастанию заселенности немагнитного синглета; возникновение беспорядка за счет энтропии. В результате ОА коэффициенты потенциала Ландау испытывают сильную температурную зависимость, которая приводит к появлению неустойчивых решений и к изменению рода ФП. Но несмотря на это, теория Ландау применима к описанию ФП второго рода, а также ФП первого рода, но только вблизи трикритической точки, т.е. когда речь идет о ФП первого рода, близком к переходу второго рода. В области, удаленной от трикритической точки, когда скачок параметра порядка почти равен его предельному значению, потенциал Ландау для описания ФП первого рода от ПМ- к АФМ-состоянию неприменим. В этом случае ПМ-фаза устойчива при всех T вплоть до $T \to 0$. И если $T_{\rm cross} < T_{\rm tr}$, то переход между ПМ- и АФМ-состояниями является уже квантовым ФП. В этом случае теория Ландау также неприменима.

Принято считать, что к первому роду ФП из ПМ- в ферромагнитное или АФМ-состояния приводят, например, взаимодействия магнитной подсистемы кристалла с его упругой подсистемой, которое по своей сути модифицируют ОВ, эффективно приводя к так называемым негейзенберговским ОВ, изменяющим знак a_4 потенциала Ландау [27]. Как было показано выше, в изинговском магнетике к первому роду ФП между упорядоченным и неупорядоченным состояниями может привести сильная ОА, вымораживающая ионные состояния с ненулевой проекцией спина.

Список литературы

[1] А.Ф. Андреев, В.И. Марченко. УФН **130**, 39 (1980).
[2] В.Г. Барьяхтар, А.А. Галкин, А.Н. Богданов, В.Т. Телепа. ЖЭТФ **79**, 226 (1980).
[3] В.М. Локтев, В.С. Островский. ФНТ **20**, 983 (1994).
[4] Р.С. Гехт. УФН **159**, 261 (1989).
[5] Б.С. Думеш. УФН **170**, 403 (2000).
[6] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФТТ **45**, 1450 (2003).
[7] В.М. Калита, В.М. Локтев. ЖЭТФ **125**, 1149 (2004).
[8] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФНТ **32**, 158 (2006).
[9] R.E. Greeney, C.P. Landee, J.H. Zhang, W.M. Reiff. Phys. Rev. B **39**, 12 201 (1989).
[10] M. Orendac, E. Cizmar, A. Orendacova, J. Cernak, A. Feher, M.W. Meisel, K.A. Abbout, S. Zvyagin, M. Sieling, T. Rieth, B. Luti. Phys. Rev. B **61**, 3223 (2000).
[11] E. Aydiner, C. Akyüz. cond-mat/0501111 (2005).
[12] Y. Narumi, M. Hagiwara, M. Kohno, K. Kindo. Phys. Rev. Let. **86**, 324 (2001).
[13] Y. Narumi, M. Hagiwara, R. Sato, K. Kindo, H. Nakano, M. Takahashi. Physica **246** B, 509 (1998).
[14] T. Sakai, N. Okazaki, K. Okamoto, K. Kindo, Y. Narumi, Y. Hosokoshi, K. Kato, K. Inoue, T. Goto. Phys. Stat. Sol. (b) **236**, 429 (2003).

[15] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФНТ **31**, 815 (2005).
[16] В.Г. Барьяхтар, И.М. Витебский, Д.А. Яблонский. ФТТ **19**, 2135 (1977).
[17] H.W. Capiel. Physica **33**, 295 (1967).
[18] M. Blume, V.J. Emery. Phys. Rev. A **4**, 1071 (1971).
[19] А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин. А.И. Попов. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. Наука, М. (1985). 296 с.
[20] Ф.П. Онуфриева. ЖЭТФ **89**, 2270 (1985).
[21] В.В. Вальков, Г.Н. Мацулева, С.Г. Овчинников. ФТТ **31**, 60 (1989).
[22] Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Б.Л. Эйнгорн. ФНТ **29**, 744 (2003).
[23] Р. Браут. Фазовые переходы. Мир, М. (1967). 288 с.
[24] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975). 528 с.
[25] М.А. Леонтович. ЖЭТФ **8**, 844 (1938).
[26] Ю.М. Гуфан. Структурные фазовые переходы. Наука, М. (1982) 304 с.
[27] С.Д. Вонсовский. Магнетизм. Наука, М. (1971). 1032 с.