

Фазовая диаграмма модели Изинга ($S = 1$) с легкоплоскостной анизотропией В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. А. Логинов, Ю. В. Переверзев

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: pereverzev@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 9 апреля 1998 г.

В приближении среднего поля в переменных температура, поле, анизотропия найдены поверхности потери устойчивости и равновесия парамагнитных и антиферромагнитных состояний. Определены характерные температуры, при которых меняется топология сечений фазовой диаграммы.

У наближенні середнього поля в змінних температура, поле, анізотропія знайдено поверхні втрати стійкості і рівноваги парамагнітних і антиферомагнітних станів. Визначено характерні температури, за яких змінюється топологія перерізу фазової діаграми.

PACS: 75.10.Jm

1. Введение

В статье изучается фазовая диаграмма изинговского антиферромагнетика со спином $S = 1$ в каждом узле решетки, обладающего одноионной анизотропией типа нормальная к изинговской оси легкая плоскость, и находящегося в магнитном поле \mathbf{H} , параллельном этой оси. Такая модель с точки зрения магнитных систем является экзотической, так как обычно изинговская анизотропия спин-спиновых взаимодействий связана с сильной одноионной анизотропией типа легкая ось. Однако она может возникнуть как эквивалентная модель для некоторых структурных фазовых переходов. А именно, если активная в рассматриваемом переходе координата имеет эффективный кристаллический потенциал с тремя минимумами, то классический конфигурационный интеграл состояний в первом приближении при низких температурах может сводиться к статистической сумме модели Изинга ($S = 1$). Это справедливо, если минимумы мало отличаются по энергии и достаточно глубоки, чтобы все они могли быть аппроксимированы квадратичными потенциалами в существенной для рассматриваемого перехода области температур. Тогда при одинаковых

упругих постоянных потенциальных ям получается статистическая сумма модели Изинга, а при различных — последняя модифицируется дополнительными весовыми множителями, определяемыми отношением упругих постоянных. Ограничимся этими наводящими соображениями о возможном происхождении изучаемой модели. Ее поведение оказывается достаточно своеобразным, поэтому изучаемая задача представляет и самостоятельный интерес с точки зрения «зоологии» фазовых диаграмм. Связь такой модели с экспериментально наблюдавшимся [1] структурным фазовым переходом, индуцированным магнитным полем, основана на соображениях, изложенных в [2], и более подробно будет обсуждаться в отдельной работе.

Исследование модели проводится в рамках приближения среднего поля.

2. Формулировка уравнений

Рассматриваемая модель задается гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum J_{fg} S_f^z S_g^z - H \sum S_f^z + D \sum (S_f^z)^2, \quad (1)$$

где $J_{fg} > 0$ — параметр обменного взаимодействия; H — магнитное поле (в энергетических единицах); $D > 0$ — константа одноионной анизотропии; S_f^z — z -проекция спина в узле f , $S_f^z = 0, 1, -1$. Суммирование проводится по ближайшим парам узлов трехмерной решетки с $2N$ узлами.

Модельная свободная энергия [2] в приближении молекулярного поля в классе двухподрешеточных структур (предполагается, что ближайшие соседи одного узла не могут быть ближайшими соседями между собой) имеет вид

$$F_{\text{mod}} = NJ_0 f, \quad J_0 = \sum_g J_{fg},$$

$$f = \sigma_1 \varphi(x_1) + \sigma_2 \varphi(x_2) + \varphi(x_1) \varphi(x_2) - t [\ln Z(x_1) + \ln Z(x_2)], \quad (2)$$

$$Z(x) = q + \text{ch } x, \quad \varphi(x) = \frac{\partial \ln Z}{\partial x} = \frac{\text{sh } x}{q + \text{ch } x},$$

$$x_i = (\sigma_i - h)/t \quad (i = 1, 2), \quad q = \frac{1}{2} \exp(d/t),$$

где $t = T/J_0$, $h = H/J_0$, $d = D/J_0$, а $\sigma_{1,2}$ — параметры самосогласования. Значения σ определяются из условий минимума f . Условия стационарности f по σ выражаются уравнениями

$$\sigma_1 + \varphi(x_2) = 0, \quad \sigma_2 + \varphi(x_1) = 0 \quad (3)$$

и совпадают с условиями самосогласования

$$\sigma_1 = \langle S_1^z \rangle, \quad \sigma_2 = \langle S_2^z \rangle, \quad (4)$$

где усреднение $\langle \rangle$ ведется по гиббсовскому состоянию с гамильтонианом молекулярного поля

$$\hat{H}_m = -J_0 \sigma_1 \sigma_2 + (J_0 \sigma_2 - H) S_1^z + (J_0 \sigma_1 - H) S_2^z + D[(S_1^z)^2 + (S_2^z)^2]. \quad (5)$$

Необходимое условие потери устойчивости

$$\det \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma_i \partial \sigma_j} \right\|_{i, j=1, 2} = 0 \quad (6)$$

сводится к выражению

$$\varphi'(x_1) \varphi'(x_2) = t^2 \quad (7)$$

и совместно с уравнениями (3) определяет границы существования и устойчивости всех локальных минимумов модельной свободной энергии. Заметим, что в рассматриваемом случае

благодаря тождественно выполняющемуся неравенству $\varphi'(x) > 0$ необходимое условие устойчивости $\varphi'(x_1) \varphi'(x_2) < t^2$ является также и достаточным, поскольку в стационарных точках $\partial^2 f / \partial \sigma_1^2 = t^{-1} \varphi'(x_1)$.

Уравнения (3) имеют парамагнитные ($\sigma_1 = \sigma_2$) и антиферромагнитные (АФМ, $\sigma_1 \neq \sigma_2$) решения. Их удобно описывать параметром порядка l_0 (параметр антиферромагнетизма) и средним спином m_0 :

$$\sigma_1 = m_0 + l_0, \quad \sigma_2 = m_0 - l_0. \quad (8)$$

Уравнения стационарности (3) запишем в этих переменных отдельно для парафазного ($l_0 = 0$) и АФМ ($l_0 \neq 0$) решений. Для $l_0 = 0$ получим

$$m_0 = -\varphi(m), \quad m = (m_0 - h)/t. \quad (9)$$

В силу монотонности функции φ парафазное решение, очевидно, всегда существует и единственно. Для АФМ решений уравнения (3) имеют вид

$$t = \xi [q \text{ch } m + \text{ch } l] / \Delta, \quad \xi = \text{sh } l / l, \quad l = l_0 / t, \quad (10)$$

$$h = -mt - \text{sh } m [q \text{ch } l + \text{ch } m] / \Delta, \quad (11)$$

$$\Delta = [q \text{ch } l + \text{ch } m]^2 - (q^2 - 1) \text{sh}^2 l. \quad (12)$$

Условие (7) в этих переменных приобретает вид: для парафазных решений

$$(q \text{ch } m + 1) Z^{-2}(m) = t; \quad (13)$$

для АФМ решений

$$\text{ch } m = [(1 - q^{-2})(\xi^2 - 1)^{-1}]^{1/2} \text{sh } l - q^{-1} \text{ch } l. \quad (14)$$

Мы не приводим здесь стандартных уравнений равновесия фаз, которые также необходимы для построения фазовой диаграммы в областях существования нескольких устойчивых стационарных решений.

Полное аналитическое исследование уравнений (3), (7) или (9)–(14) (и условий равновесия фаз) провести не удастся, поэтому в настоящей работе используется комбинация численных методов с аналитическими в различных предельных случаях.

Исследуем фазовую диаграмму в пространстве управляющих параметров (h, t, d) . Поскольку плоскость $h = 0$ есть плоскость симметрии, будем считать, что $h > 0$. В дальнейшем будем явно указывать только состояния с $l > 0$ ($\sigma_1 > \sigma_2$), так как если (l, m) является решением уравнений стационарности, то и $(-l, m)$ — тоже решение.

С учетом этого $0 \leq \sigma_1 \leq 1$ и $-1 \leq \sigma_2 \leq \min(h_1(t), 0) \simeq (1-t) \ln t$ (заметим, что $\sigma_2 \leq 0$ при $h \leq \sigma_1$).

Наиболее важным элементом фазовой диаграммы является поверхность потери устойчивости парафазного состояния (ПС), с описания которой мы и начинаем изложение результатов.

3. Поверхность потери устойчивости парафазных состояний

Граница области устойчивости ПС в пространстве управляющих параметров (h, t, d) описывается уравнениями

$$h = h_i(t, d), \quad i = 1, 2, \quad (15)$$

где

$$h_i(t, d) = d + t \ln \left[\frac{y_i + (y_i^2 - 4t^2/q^2)^{1/2}}{4t} \right] + \frac{(y_i^2 - 4t^2/q^2)^{1/2}}{y_i + 2t},$$

$$y_{1,2} = 1 - 2t \pm (1 - 4t + 4t/q^2)^{1/2}.$$

Эти, а также исходные уравнения (9),(13), позволяют описать вид рассматриваемой поверхности. Ее проекцией на плоскость (t, d) является область

$$1 - q^{-2} \leq (4t)^{-1} \quad \text{при} \quad d \geq \frac{1}{3} \ln 4, \quad t \leq 1/3, \quad (16)$$

$$1 + q \geq t^{-1} \quad \text{при} \quad 0 \leq d \leq \frac{1}{3} \ln 4, \quad t \geq 1/3. \quad (17)$$

Граница этой области (примыкающей к оси d) представлена на рис. 1 линией САG. Линия СА соответствует равенству в (17), а AG – равенству в (16), причем последняя имеет асимптоту $t = 1/4$. Вся линия ОАС также описывается равенством в (17) (при изменении t в интервале $(0, 2/3)$), и является линией пересечения поверхности (15) с плоскостью (t, d) . В точках под линией ОАС поле h_2 не определено. Для этих точек область неустойчивости ПС описывается неравенством $h < h_1$. Часть плоскости (t, d) , ограниченная линией ОАG, дважды покрывается поверхностью (15). Здесь область неустойчивых ПС лежит в интервале полей $h_2 < h < h_1$. С плоскостью (t, h) поверхность (15) пересекается по линии СF, описываемой уравнением $h = h_1(t, 0)$. При $t \rightarrow 0$ ее асимптотика имеет вид

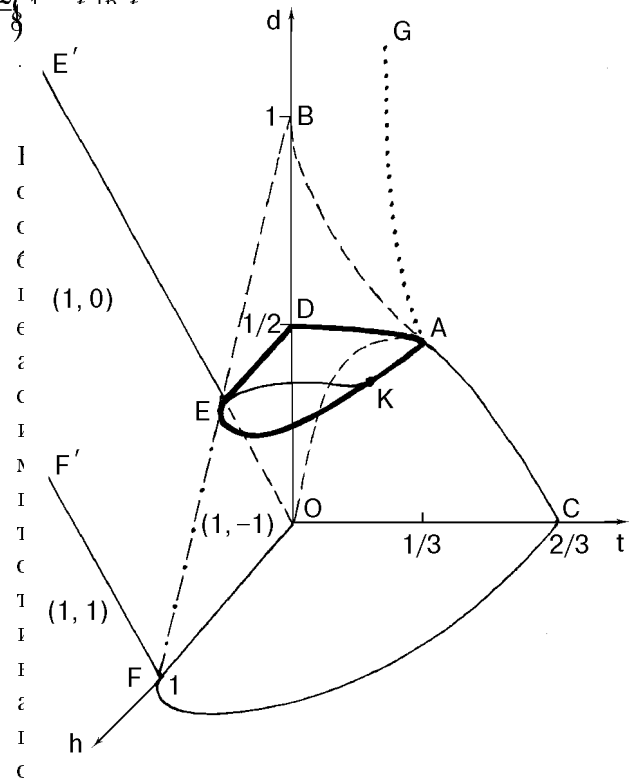


Рис. 1. Схема фазовой диаграммы в переменных (t, h, d) . Тонкая KE и жирная AKE линии – пространственные, остальные лежат в координатных плоскостях (КП). Тонкие линии – пересечения поверхности ФП2 с КП и с поверхностью ФП1, пунктирная линия AG – проекция поверхности ФП2 на плоскость $h = 0$. Штриховые линии – пересечения поверхностей потери устойчивости с КП. Штрих-пунктир – линия расхождимости $\partial m / \partial h$.

Р
и
 $t \rightarrow 0$
такова:

$$h_1(t, d) \simeq d + 1 - t \ln t, \quad h_2(t, d) \simeq d + t \ln t. \quad (19)$$

Отсюда видно, что поверхность (15) соприкасается с плоскостью $t = 0$ по двум параллельным прямым $h = d$ и $h = d + 1$ (ОЕЕ' и FF' соответственно). Область неустойчивости ПС в этой плоскости лежит между указанными прямыми и уходит на бесконечность. Другие сечения поверхности (15) плоскостями $t = \text{const}$ приведены на рис. 2. Они выглядят следующим образом. При изменении t в интервале $(0, 1/4)$ это по-прежнему две уходящие на бесконечность линии ОЕ' и FF' (рис. 2,а), которые при $t \rightarrow 1/4$ сближаются при больших h . При $t > 1/4$ это уже одна кривая OF (рис. 2,б,в), ограничивающая конечную область неустойчивости ПС. При $t > 2/3$ точек потери устойчивости нет.

Теперь необходимо выяснить, существуют ли устойчивые АФМ решения, отличные от АФМ

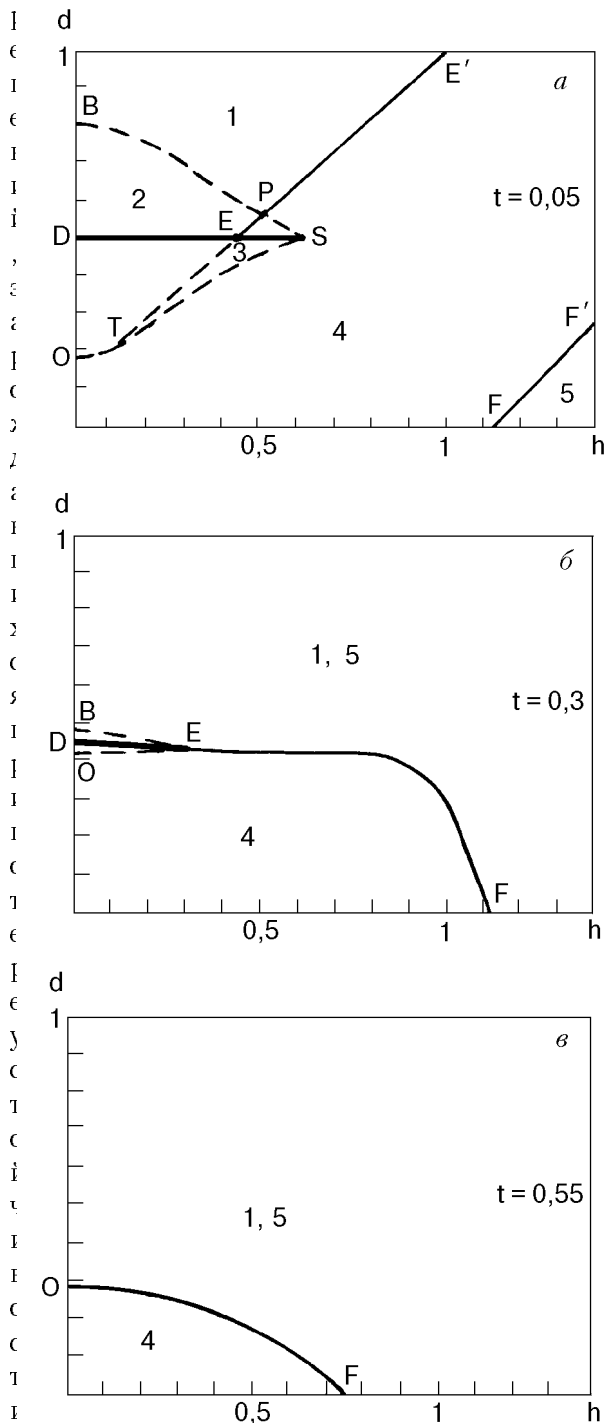


Рис. 2. Температурные сечения фазовой диаграммы при $t = 0,05$ (а); $0,3$ (б), $0,55$ (в): ФП2 — тонкие линии, ФП1 — жирная линия, потеря устойчивости — штриховые линии.

азы. С этим связана возможность фазовых переходов первого рода (ФП1). Как известно [4], один общий механизм таких переходов связан с вырождением основного состояния при некоторых значениях управляющих параметров. При этом, если выполнено условие устойчивости Пайерлса [4], то такие значения параметров

обязательно лежат на краю поверхности ФП1, существующей при достаточно малых $t > 0$ (условие Пайерлса означает, что энергия локальных возмущений над основным состоянием растет не медленнее, чем число граничных узлов возбуждения). Поэтому имеет смысл исследовать фазовую диаграмму сначала в области низких температур.

4. Область низких температур

Опишем сначала фазовую диаграмму при $t = 0$, полученную в результате исследования основных состояний гамильтониана молекулярного поля (5). Она должна соответствовать фазовой диаграмме, построенной по свободной энергии, при $t \rightarrow 0$.

В области $h < d$ плоскости $t = 0$ (выше луча OE' , рис. 1) состояние $(S_1^z, S_2^z) = (0,0)$ является основным самосогласованным состоянием для гамильтониана (5) (условие устойчивости состояния при $t = 0$). В области $h + d < 1$ (под линией BF на рис. 1) основным самосогласованным состоянием является $(1,-1)$. Таким образом, внутри треугольника $БEO$ существуют два устойчивых состояния, причем на отрезке DE прямой $d = 1/2$ их энергии совпадают. Следовательно, на этом отрезке происходит ФП1 из АФМ состояния $(1,-1)$, равновесного при $d < 1/2$, в ПС $(0,0)$, равновесное при $d > 1/2$.

В части плоскости, ограниченной линией $E'EFF'$ ($0 < h < d + 1$ и $h + d > 1$), единственным устойчивым состоянием является $(1,0)$, а в области $h > d + 1$ (под линией FF') таким же является ПС $(1,1)$. Линии потери устойчивости EE' , EF , FF' являются и линиями равновесия для смежных пар состояний. Это существенно отличает их от линии ФП1 DE , хотя здесь также скачком изменяются равновесные состояния. Линии FF' и OE' соответствуют предельному ($t \rightarrow 0$) выражению для поверхности потери устойчивости ПС (19).

Полезно сопоставить эти результаты с анализом основных состояний точного гамильтониана (1) и условия Пайерлса, упомянутого выше. Во всех внутренних точках описанных выше областей основные состояния гамильтониана (1) совпадают с равновесными состояниями, полученными методом молекулярного поля. На линии DE также имеется двукратное вырождение основного состояния, причем условие устойчивости Пайерлса здесь выполняется. Это гарантирует при достаточно низких температурах наличие поверхности ФП1,

выходящей из отрезка DE. Что же касается линии E'EFF', то нетрудно убедиться, что на ней существует бесконечное множество основных состояний. Например, исходя из состояния (1,-1) на EF можно любое число узлов с $S^z = -1$ перевести в состояние с $S^z = 0$ так, чтобы встречались только соседства, характерные для сосуществующих фаз — (1,0) и (1,-1). Таким путем на этой линии можно построить, в частности, периодические основные состояния с произвольными периодом и относительной концентрацией сосуществующих фаз. В описанной ситуации условие Пауэрса нарушается и линии EE' и FF' продолжают в область $t > 0$ как поверхности непрерывного ФП2, как это следует из (19). Линия же EF не имеет продолжения в область $t > 0$ (это будет видно из дальнейшего описания множества всех возможных состояний) и остается изолированной особой линией фазовой диаграммы при $t = 0$. Она реально проявляется как линия, при приближении к которой из области $t > 0$ восприимчивость $\partial m / \partial h$ расходится (например, если приближаться к линии EF по поверхности $d + h$ то можно показать, что $\partial m / \partial h \sim 1/(8t)$ при $t \rightarrow 0$).

Теперь рассмотрим фазовую диаграмму при малых t . Для ПС поверхность потери устойчивости описана выше формулами (19), поэтому остается описать поведение АФМ решений. Рассмотрим асимптотику фазовой диаграммы при $t/d \rightarrow 0$. Область существования АФМ решений ограничена поверхностями потери устойчивости, которые определяются системой уравнений (10), (11), (14). На этой поверхности при $t \rightarrow 0$ обязательно $l_0 \rightarrow d$. Учитывая это, опустим в уравнениях поверхности быстро убывающие слагаемые типа $t^{-1} \exp(-d/t)$ или $t^{-1} \exp(-l/t)$ (это можно сделать, если d не стремиться к нулю при $t \rightarrow 0$). Тогда уравнения (10), (11), (14) можно представить в виде

$$d = l_0 - t \ln r, \quad (20)$$

$$r = (l_0 - 0,5)t^{-1} + [(l_0 - 0,5)^2 t^{-2} + 1]^{1/2}.$$

$$m_0 = t [(l - r)^2 - 1]^{1/2}, \quad (21)$$

$$h = m_0 + t \ln (l - r + m_0/t). \quad (22)$$

Формулы (20)–(22) дают l_0 -параметрическое представление сечений поверхности потери устойчивости плоскостями $t = \text{const} \ll d$ (l_0 меняется в интервале $(0,5 - 0,5\sqrt{1 - 4t}; 0,5 + 0,5\sqrt{1 - 4t})$). Они являются равномерными

асимптотическими при $t \rightarrow 0$ приближениями точных уравнений во всей области значений управляющих параметров h, d , кроме малой окрестности точек с $d = 0$. Последнее ограничение приводит к тому, что решения, соответствующие значениям l_0 в окрестности нижней границы допустимого интервала его изменения, не являются корректными и требуют учета отброшенных слагаемых. Заметим, однако, что и в окрестности таких точек формулы правильно передают предельное сечение поверхности ($t = 0$).

Вычисление производных $\partial d / \partial l_0, \partial h / \partial l_0$ показывает, что сечения рассматриваемой поверхности плоскостями $t = \text{const}$ состоят из двух ветвей. Одна из них соответствует значениям $l_0 < 0,5$ и описывается монотонно возрастающей функцией $d_1(h)$ с равной нулю производной в точке с $l_0 = 0,5$. Вторая соответствует $l_0 > 0,5$ и описывается монотонно убывающей функцией $d_2(h)$, также имеющей нулевую производную в точке с $l_0 = 0,5$. На рис. 2,а представлено сечение фазовой диаграммы плоскостью $t = 0,05$; функциям $d_{1,2}$ соответствуют линии TS и BS (линия d_1 при малых значениях l_0 построена по точным уравнениям и точка T соответствует $l_0 = 0$). Эти линии образуют «клюв» ($l_0 = 0,5$) с координатами (h, d) и намагниченностью, равными

$$h = \sqrt{1/4 - t} + t \ln [0,5 t^{-1} - 1 + 0,5 t^{-1} \sqrt{1 - 4t}] \approx \\ \approx 0,5 + t \ln (1/t), \quad d = 0,5, \quad (23)$$

$$m_0 = \sqrt{1/4 - t} \approx 0,5 - t. \quad (24)$$

Из сравнения с (19) видим, что «клюв», а следовательно, и обе поверхности потери устойчивости АФМ решений заходят внутрь области неустойчивости парафазы. Используя (20)–(22), можно убедиться, что предельное положение линий d_1, d_2 при $t = 0$ совпадает с отрезками OE и VE соответственно на рис. 1. При этом для низких температур линия d_1 лежит полностью в области неустойчивости парафазного решения, как изображено на рис. 2,а. Для отрезка EF на рис. 1, как и говорилось выше, отсутствует продолжение в область $t \neq 0$.

Как уже отмечалось, для точек с малыми d рассматриваемая поверхность при фиксированной (хотя и малой) температуре плохо описывается формулами (20)–(22). На самом деле линия d_1 заканчивается в некоторой точке T (рис. 2,а), которая лежит на линии потери устойчивости

парафазного решения ОЕ'. В этой точке АФМ и парафазное состояние сливаются («слияние линий»). Условие того, что поверхности потери устойчивости ПФ и АФМ решений сливаются по некоторой линии (линия трикритических точек, сечением которой является точка Т на рис. 2,а), а также уравнения этой линии можно получить, качественно исследуя уравнения стационарности.

Такой анализ позволяет следующим образом интерпретировать сечение фазовой диаграммы, соответствующей низким температурам (рис. 2,а). В области 1, расположенной выше кривой ВРЕ', существует только одно устойчивое, парафазное, решение. В области 2, ограниченной кривой ВРТО, существуют два устойчивых решения — ПФ и АФМ. Область 3, ограниченная «треугольником» ТSP, соответствует двум устойчивым АФМ решениям, одно из которых зарождается на участке ТР линии потери устойчивости парафазы и теряет устойчивость на линии TS. Условием зарождения АФМ минимумов на поверхности потери устойчивости парафазы (не связанным с малостью температуры) является неравенство

$$3[\varphi''(x)]^2 - 2t\varphi'''(x) \geq 0, \quad x = (\sigma - h)/t. \quad (25)$$

Равенство в (25) и уравнения (3), (13) (в последнем $m = x$) являются уравнениями линии трикритических точек. Из них можно получить связь между намагниченностью σ и температурой

$$\begin{aligned} \sigma^6 - 2\sigma^4(1 - 2t) + \sigma^2(1 - 4t + 5t^2) - \\ - 2t^2(1/3 - t) = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

и выражения для поля и анизотропии

$$h = \sigma - 0,5t \ln [(t + \sigma^2 - \sigma)(t + \sigma^2 + \sigma)^{-1}], \quad (27)$$

$$d = t \ln \{2(1 - t - \sigma^2)[(t + \sigma^2)^2 - \sigma^2]^{-1/2}\}. \quad (28)$$

При малых t единственное решение, удовлетворяющее системе (3), (13), (26), соответствует тому корню уравнения (26), который стремится к нулю при $t \rightarrow 0$. Для малых t это дает координаты (d, h) точки Т

$$\begin{aligned} \sigma \approx \sqrt{2/3} t, \quad d \approx t \ln(t^{-1}) + 0,5t \ln 12, \\ h \approx t [\sqrt{2/3} + \ln(\sqrt{3} + \sqrt{2})]. \end{aligned} \quad (29)$$

Она отделяет на линии потери устойчивости парафазы участок ОТ, на котором не происходит зарождение АФМ решений. К трикритической линии мы вернемся при обсуждении более высоких температур, а сейчас закончим описание

структуры низкотемпературного сечения фазовой диаграммы (рис. 2,а). В уже описанных областях 2, 3 сосуществуют по два минимума, и поэтому в каждой из них проходит линия равновесия — линия ФП1. Мы знаем две точки этой линии: при $h = 0$ можно получить асимптоику для параметра d при $t \rightarrow 0$ (см. разд. 5), а второй точкой является «клюв». Промежуточные точки были получены численно, и соответствующая им линия — жирная линия DS. В области 4, ограниченной линиями ОТСРЕ' и FF', существует единственный АФМ минимум, а в области 5 имеется только парафазное решение.

Итак, в низкотемпературном сечении фазовой диаграммы (рис. 2,а) имеется линия ФП1 — DES, ответвляющаяся от нее из точки Е линия ФП2 — EE', а также линия ФП2 — FF'. При этом на отрезке DE происходит ФП1 из АФМ фазы в парафазу (при движении снизу вверх), а на отрезке ES реализуется ФП1 между АФМ состояниями (заканчивающийся в точке S критическим состоянием).

5. Общая структура фазовой диаграммы

Рассмотрим сначала сечение диаграммы плоскостью $h = 0$ (оно изображено на рис. 1). Линия потери устойчивости парафазы ОАС описана в разд. 3. Качественное исследование уравнений (3) приводит к выводу о слиянии с ней линии ВА потери устойчивости АФМ фазы в трикритической точке А с координатами

$$t = 1/3, \quad d = \frac{1}{3} \ln 4 \approx 0,462. \quad (30)$$

Эта точка является точкой пересечения описанной ранее линии трикритических точек с плоскостью $h = 0$. Линия равновесия сосуществующих в области «треугольника» ОАВ фаз соединяет точку А с точкой $d = 1/2, t = 0$ (линия АД) и описывается вблизи точек D и А асимптотическими формулами:

при $t \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} d \approx 0,5 - (1 - t) \exp(-0,5t^{-1}), \\ \sigma = 1 - \exp(-0,5t^{-1}); \end{aligned} \quad (31)$$

при $t \rightarrow 1/3$

$$\begin{aligned} d \approx \frac{1}{3} \ln 4 + \left(\frac{3}{2} - \ln 4\right) \left(\frac{1}{3} - t\right) + \frac{27}{32} \left(\frac{1}{3} - t\right)^2, \\ \sigma^2 \approx \frac{15}{2} \left(\frac{1}{3} - t\right). \end{aligned} \quad (32)$$

Для сравнения отметим, что зависимости $d(t)$ вблизи точки А для линий потери устойчивости АФМ и ПФ решений (АВ и АО линии) отличаются от (32) только коэффициентом у последнего слагаемого, который в этих случаях равен $9/4$ и $-27/8$ соответственно.

Мы видим, что $t = 1/3$ является одной из тех точек, в которых меняется топология температурных сечений фазовой диаграммы.

Другой характерной температурой является температура, при которой происходит слияние трикритической точки Т с критической S (рис. 2,а). Такую точку мы будем называть вырожденной критической. При этой температуре область 3 стягивается в точку и исчезает с дальнейшим ростом температуры. С точки зрения состояний в области 3 при этом происходит слияние двух АФМ минимумов и ПС максимума. Соответствующие уравнения можно получить из следующих соображений.

Используя второе из уравнений (3), выразим свободную энергию (2) как функцию только параметра σ_1 , $f_1(\sigma_1) = f(\sigma_1, \sigma_2(\sigma_1))$. Из замечания, следующего после формулы (7), и выражения для второй производной функции f_1 в ее стационарных точках

$$f_1'' = t^{-1}\varphi'(x_1)[1 - t^{-2}\varphi'(x_1)\varphi'(x_2)] \quad (33)$$

следует, что локальным минимумам функции f_1 соответствуют локальные минимумы модельной свободной энергии f , и наоборот. Поэтому, приравнявая нулю первые последовательные производные функции f_1 , последовательно получаем уравнения стационарности, поверхности потери устойчивости, линии критических, трикритических точек и, наконец, вырожденной критической точки. При этом равенство нулю третьей, пятой и седьмой производных есть следствие предыдущих уравнений, если $l_0 = 0$. Для критических точек получается система, состоящая из (3), (7) и равенства $f_1''' = 0$:

$$(\varphi'(x_1))^3(\varphi''(x_2))^2 = (\varphi'(x_2))^3(\varphi''(x_1))^2. \quad (34)$$

Для трикритических точек снова получается система (26)–(28), а для вырожденной критической точки к ней добавляется равенство нулю шестой производной. С учетом других уравнений системы оно имеет вид

$$2t\varphi^{(5)} - 15\varphi^{(4)}\varphi^{(2)} + \frac{40}{3}(\varphi^{(3)})^2 = 0, \quad (35)$$

$$\varphi^{(k)} \equiv \partial^k \varphi / \partial x^k.$$

Система (26)–(28), (35) однозначно решается и дает следующие параметры вырожденной критической точки К (рис. 1):

$$t_k = \frac{62}{225} \approx 0,276,$$

$$h_k = \frac{2\sqrt{2}}{225} - \frac{31}{225} \ln \left[\frac{(7 - 3\sqrt{2})^2}{31} \right] \approx 0,382,$$

$$d_k = \frac{31}{225} \ln 31 \approx 0,473, \quad \sigma_k = \frac{2\sqrt{2}}{15} \approx 0,189. \quad (36)$$

Таким образом, отрезок КА линии трикритических точек лежит на краю поверхности ФП1, а остальная часть этой линии (не изображенная на рис. 1 линия, соединяющая точки О и К) лежит под этой поверхностью в области метастабильных состояний (точка Т на рис. 2,а).

Последовательность температур, при которых происходят изменения топологии температурных сечений фазовой диаграммы:

$$0 < 0,25 < t_k < 1/3 < 2/3. \quad (37)$$

При $t = 0$ фазовая диаграмма, приведенная на рис. 1, описана в разд. 4. Первая перестройка происходит при появлении ненулевой температуры. Линия ОЕ (рис. 1) расщепляется, и в температурных сечениях появляется «треугольная» область ТРС (рис. 2,а), в которой реализуются два АФМ минимума. С ростом t эта область сначала расширяется, а затем стягивается в точку при температуре t_k . Структура сечения в интервале $(0; 0,25)$ представлена на рис. 2,а и описана в том же разд. 4. В интервале $(0,25; t_k)$ еще сохраняется ФП1 внутри АФМ фазы, но линия потери устойчивости ПФ становится связной, а область АФМ состояний — ограниченной. Мы не приводим соответствующего рисунка, так как его легко себе представить, но трудно изобразить в таком масштабе, чтобы обе отмеченные особенности были видны визуально — отрезок SE очень мал, а слияние линий ОЕ и FF' происходит очень далеко. В интервале температур $(t_k, 1/3)$ критическая точка внутри АФМ фазы отсутствует и линия ФП1, проходя трикритическую точку, превращается в линию ФП2. Типичное сечение представлено на рис. 2,б для $t = 0,3$. В интервале $(1/3, 2/3)$ имеется только линия ФП2 (рис. 2,в), которая с ростом температуры стягивается к началу координат и при $t > 2/3$ реализуется только парафазное решение.

В итоге общая картина фазовой диаграммы может быть понята из совокупности предст-

авленных рисунков. Поверхность ФП1 представляет собой почти горизонтальный кусок поверхности, ограниченный жирной линией АКЕД на рис. 1 (AD — линия пересечения ее с плоскостью $h = 0$, сама же поверхность симметрично продолжается в область $h < 0$). Из тонкой линии на этой поверхности, соединяющей точки К и Е, выходит поверхность ФП2. (На рис. 2, a точкам этой линии соответствует точка Е, а поверхности ФП2 — линия EE' .) Остальными «опорными» элементами поверхности ФП2 являются дуги АК, АС, СF, FF', EE'. Линия критических точек (жирная линия ЕК) накрыта сверху этой поверхностью и находится внутри нее, в области неустойчивости ПС.

6. Заключение

Исследована общая структура фазовой диаграммы рассматриваемой модели Изинга. На рис. 1 качественно показаны ее основные элементы. На рис. 2 представлены результаты численного расчета температурных сечений фазовой диаграммы. Описанная геометрическая структура диаграммы, а также найденные асимптотические формулы в различных предельных случаях и значения ряда характерных параметров позволяют надежно реализовать численные расчеты различных элементов фазовой диаграммы. Отметим одну особенность поверхности ФП1 — по параметру анизотропии d она сосредоточена в очень малой окрестности его значения, равного $1/2$. Отклонение (вниз) составляет менее $0,03$. Если иметь в виду прямую интерпретацию

рассматриваемой модели, то, учитывая ограниченные возможности управления параметром d , наблюдение такого перехода в эксперименте является проблематичным. Однако, как было указано во введении, эта модель эквивалентна некоторой модели структурного фазового перехода, индуцируемого магнитным полем, а в этом случае параметр d в широких пределах управляется тем же полем. Отметим еще один наблюдаемый элемент фазовой диаграммы — отрезок EF (рис. 1, $t = 0$), при приближении к которому из области $t > 0$ расходится восприимчивость $\partial m / \partial h$ (это аналогично переходам Лифшица в электронных системах [5]).

1. В. И. Кутько, М. И. Кобец, В. А. Пашенко, Е. Н. Хацько, *ФНТ* **21**, 441 (1995).
2. Ю. В. Переверзев, *ФНТ* **22**, 289 (1996).
3. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1965).
4. Я. Г. Синай, *Теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1980).
5. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).

Phase diagram of Ising model ($S = 1$) with easy-plane anisotropy at magnetic field

A. A. Loginov and Yu. V. Pereverzev

The loss stability and equilibrium surfaces of paramagnetic and antiferromagnetic states are found within the average field approximation in variable temperature, field, anisotropy coordinates. Characteristic temperatures at which the topology of phase diagram sections is changed are estimated.