

Фазовые переходы в ферромагнетике с анизотропным биквадратичным обменным взаимодействием

Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Ф.Н. Клевец

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского
пр. Вернадского, 4, г. Симферополь, 95007, Украина
E-mail:frid@tnu.crimea.ua

Статья поступила в редакцию 30 июня 2005 г., после переработки 28 сентября 2005 г.

Исследованы фазовые состояния негейзенберговского ферромагнетика с анизотропией как гейзенберговского, так и биквадратичного взаимодействий. Предельными случаями рассматриваемой модели являются XY -модель с биквадратичным взаимодействием и трехкомпонентный негейзенберговский ферромагнетик. Исследованы фазовые переходы как по материальным константам, так и по температуре для 2D- и 3D-магнетика. Построены фазовые диаграммы системы при различных соотношениях параметров системы. Показано, что в данной модели мягкой модой являются квазимагнитные, а не квазипружинные возбуждения.

Досліджено фазові стани негейзенбергівського феромагнетика з анізотропією як гейзенбергівської, так і біквадратичної взаємодії. Границями випадками розглянутої моделі є XY -модель з біквадратичною взаємодією і трьохкомпонентний негейзенбергівський феромагнетик. Досліджено фазові переходи як по матеріальним константам, так і по температурі для 2D- і 3D-магнетика. Побудовано фазові діаграми системи при різних співвідношеннях параметрів системи. Показано, що в даній моделі м'якою модою є квазімагнітні, а не квазіпружинні збудження.

PACS: 75.10.—b, 75.30.Kz, 75.30.Ds, 75.30.Gw

Ключевые слова: негейзенберговский ферромагнетик, фазовые переходы, XY -модель, квадрупольная фаза

Введение

Последние три десятилетия развития физики твердого тела характеризуются тем, что основными объектами исследований все в большей степени становятся не массивные кристаллы, а сверхтонкие пленки, многослойные тонкопленочные системы, нити и кристаллиты малого размера. Эти объекты обладают не только уникальными электрическими свойствами, но и крайне интересными магнитными. Интерес к этим объектам обусловлен и прикладными задачами, и целым рядом фундаментальных проблем, связанных с низкой пространственной раз мерностью.

Хорошо известно, что магнитные свойства двумерных систем принципиально отличаются от свойств трехмерных систем. Так, согласно теореме Мермина–Вагнера, при любых температурах, отличных от нуля, в двумерных изотропных систе-

мах невозможен дальний магнитный порядок [1]. Однако учет различного рода релятивистских взаимодействий, таких как одноионная анизотропия, магнитодипольное или магнитоупругое взаимодействие, приводят к нарушению симметрии, а следовательно, к возникновению дальнего магнитного порядка [2–4].

Одной из наиболее популярных моделей в теории низкоразмерных магнетиков является так называемая XY -модель. С помощью этой модели можно описать, например, трехкомпонентные системы со слабым межплоскостным взаимодействием. К таким системам относятся K_2CuF_4 , $(CH_3NH_3)_2CuCl_4$, $BaCo_2(AsO_4)_2$ и ряд других веществ [5]. Учитывая в гамильтониане орторомбическую анизотропию, можно исследовать свойства некоторых магнитных веществ типа $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ [6–8]. В изотропной XY -модели спонтанная намагниченность отсутствует, что связано с реализацией в системе вихревой

структурой, разрушающей дальний магнитный порядок [9,10]. Как уже отмечалось ранее, дальний магнитный порядок в двумерном гейзенберговском магнетике стабилизируется релятивистскими взаимодействиями.

Модель с определенными выше свойствами описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} J(n-n') (S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y).$$

Однако этот гамильтониан является точным только в случае, когда спин магнитного иона равен $1/2$. В случае, если спин магнитного иона $S \geq 1$, существует еще $2S$ инвариантов вида $(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n'})^{2S}$. Магнетики, свойства которых определяются высшими по спиновым переменным инвариантами, называются негейзенберговскими. К числу наиболее интересных систем этого класса принадлежат магнетики, в гамильтониане которых обмен высших порядков по спину (биквадратичный обмен) сравним с билинейным гейзенберговским обменом. Установлено [11–13], что если величина биквадратичного обменного взаимодействия одного порядка с билинейной величиной обмена, то, во-первых, может изменяться род фазовых переходов (со второго на первый); во-вторых, упорядоченная фаза характеризуется дальним порядком как по $\langle S^z \rangle$, так и по $q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1)$. При этом в некоторых случаях основному состоянию будет соответство-

вать упорядоченное состояние по q_2^0 при $\langle S^z \rangle = 0$. Такое упорядоченное состояние называется квадропольным упорядочением.

Очевидно, что более сложные модели должны характеризоваться и необычными свойствами. Так, в магнетиках с регулярной кристаллической решеткой обнаружены магнитные структуры, принципиально невозможные в модели Гейзенберга [14]. К их числу относится, например, склоненная двухподрешеточная структура (этот скос оказывается гигантским по сравнению с эффектами релятивистской природы, например, в антиферромагнетиках или в кристаллах другой симметрии). Другое интересное свойство таких магнетиков — их магнитный полиморфизм. Наибольшее число фаз (четырнадцать) наблюдалось в CeBi [14]. В числе других необычных свойств, к которым может приводить обмен высших порядков по спину, можно указать метамагнетизм (приводящий к скачкообразному росту намагниченности в магнитном поле) изотропных антиферромагнетиков [14].

В связи с этим представляет интерес исследование XY-модели с биквадратичным обменным взаимодействием.

Модель

Рассмотрим модель, описываемую гамильтонианом

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} J(n-n') [S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y + \Delta S_n^z S_{n'}^z] - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') \left[\frac{\Delta}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + \right. \\ & + O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy} + \Delta (O_{2n}^{xz} O_{2n'}^{xz} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz}) \Big] + \Delta \beta \sum_n (S_n^z)^2 + v \sum_n \left\{ u_{xx} (S_n^x)^2 + \right. \\ & + u_{yy} (S_n^y)^2 + u_{xy} O_{2n}^{xy} + \Delta_1 [u_{zz} (S_n^z)^2 + u_{xz} O_{2n}^{xz} + u_{yz} O_{2n}^{yz}] \Big\} + \frac{E}{2(1-\sigma^2)} \int \left\{ u_{xx}^2 + u_{yy}^2 + \right. \\ & \left. + 2\sigma u_{xx} u_{yy} + 2(1-\sigma) u_{xy}^2 + \Delta_1 [u_{zz}^2 + 2\sigma (u_{xx} u_{zz} + u_{yy} u_{zz}) + 2(1-\sigma) (u_{xz}^2 + u_{yz}^2)] \right\} dr. \end{aligned} \quad (1)$$

В гамильтониане (1) введены следующие обозначения: $J > 0$, $K > 0$ — константы гейзенберговского и биквадратичного обменов соответственно; S_n^i — i -я компонента спинового оператора в узле n ; O_{2n}^p — операторы Стивенса, связанные со спиновыми операторами следующим образом: $O_{2n}^0 = 3(S_n^z)^2 - S(S+1)$, $O_{2n}^2 = (S_n^x)^2 - (S_n^y)^2$, $O_{2n}^{ij} = S_n^i S_n^j + S_n^j S_n^i$; $\beta > 0$ — константа одноионной анизотропии; v — константа магнитоупругой связи; u_{ij} — симметричная часть тензора деформаций; E — модуль Юнга; σ — коэффициент Пуассона. Безразмерные параметры Δ и Δ_1 могут меняться в пределах от нуля до единицы и определяют наличие (либо отсутствие) обменной анизотропии и анизотропии упругой подсистемы соответственно.

Необходимо отметить, что выбор знака константы одноионной анизотропии β свидетельствует о наличии анизотропии типа «легкая плоскость» (XOY — базисная плоскость). Кроме того, если параметры $\Delta = \Delta_1 = 0$, то гамильтониан описывает изотропную XY-модель с биквадратичным обменным взаимодействием и «плоским» упругим и магнитоупругим взаимодействиями. Под «плоским» упругим и магнитоупругим взаимодействиями мы

подразумеваем, что упругие деформации действуют только в плоскости XOY , т.е. отличны от нуля только компоненты тензора деформаций u_{xx}, u_{yy}, u_{xy} , а компоненты $u_{zi} = 0$ ($i = x, y, z$).

Если же параметры $\Delta = \Delta_1 = 1$, то гамильтониан (1) описывает гейзенберговский ферромагнетик с биквадратичным обменным взаимодействием и одноионной анизотропией типа «легкая плоскость». Кроме того, в этом случае упругое и магнитоупругое взаимодействия являются изотропными.

Отметим также, что второе слагаемое в гамильтониане (1) эквивалентно (при $\Delta = 1$) оператору вида

$$-\frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') (\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n'})^2.$$

В данной работе рассмотрим случай, когда спин магнитного иона равен единице. Этот случай представляется нам наиболее интересным, поскольку для малых значений спина магнитного иона наиболее ярко проявляются квантовые эффекты. Хотя предлагаемая ниже схема справедлива и для $S > 1$.

Точный учет одноионной анизотропии и магнитоупругого взаимодействия удается провести, используя диаграммную технику для операторов Хаббарда [15,16]. Эти операторы строятся на базисе состояний, определяемых одноионным гамильтонианом, включающим в себя эффекты самосогласованного поля. Поскольку в модели мы рассматриваем одноионную анизотропию типа «легкая плоскость», то магнитный момент системы лежит в плоскости XOY (базисная плоскость). Для простоты вычислений будем считать, что он направлен параллельно оси OX .

Выделяя в обменной части гамильтониана (1) самосогласованное поле $\langle S^x \rangle$, связанное с упорядочением магнитного момента, и дополнительные поля q_2^p ($p = 0, 2$), определяемые квадрупольными моментами, для одноузельного гамильтониана получим следующее выражение:

$$\mathcal{H}_0 = -\bar{H}S^x - \Delta B_2^0 O_2^0 - B_2^2 O_2^2 + \zeta(S^z)^2 + v[(S^x)^2 u_{xx} + (S^y)^2 u_{yy} + \Delta_1 (S^z)^2 u_{zz}], \quad (2)$$

где $\bar{H} = J_0 \langle S^x \rangle$; $\zeta = \Delta \beta$; $B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0$; $B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2$; $q_2^p = \langle O_2^p \rangle$; J_0, K_0 — нулевые фурье-компоненты гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий соответственно.

Как следует из симметрии задачи, отличных от нуля средних значений операторов O_2^t ($t = xy, zx, zy$) не возникает.

На базисе собственных векторов оператора S^x построим операторы Хаббарда

$$X^{M'M} = |\Psi(M')\rangle\langle\Psi(M)|, \quad (3)$$

которые описывают переход магнитного иона из состояния M в состояние M' [15,16]. Собственные векторы оператора S^x строятся как разложение по собственным векторам оператора $S^z(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle)$ и имеют вид

$$|\pm\tilde{1}\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle, \quad |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle).$$

В базисе операторов Хаббарда (3) одноузельный гамильтониан (2) принимает вид

$$\mathcal{H}_0 = \sum_M \varepsilon_M H^M + V_{1-1}(X^{1-1} + X^{-11}), \quad (4)$$

где $H^M \equiv X^{MM}$ — диагональные операторы Хаббарда;

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1-1} &= \mp \bar{H} + \frac{K_0}{2} \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \frac{\zeta}{2} + \\ &\quad + \frac{v}{2} (2u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)} + \Delta_1 u_{zz}^{(0)}) ; \\ \varepsilon_0 &= -K_0 \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \zeta + v(u_{yy}^{(0)} + \Delta_1 u_{zz}^{(0)}) ; \\ V_{1-1} &= \frac{K_0}{2} (\Delta q_2^0 + q_2^2) + \frac{\zeta}{2} - \frac{v}{2} (u_{yy}^{(0)} - \Delta_1 u_{zz}^{(0)}) ; \end{aligned}$$

$u_{ii}^{(0)}$ — спонтанные деформации, явный вид которых определяется из условия минимума свободной энергии системы.

Гамильтониан (4) не является диагональным, поэтому, проводя обобщенное $u-v$ преобразование [17], получаем:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_M E_M H^M, \quad (5)$$

где E_M — энергетические уровни магнитного иона:

$$\begin{aligned} E_{1-1} &= \mp \bar{H} \cos 2\varphi + \frac{K_0}{2} \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \frac{\zeta}{2} + \\ &\quad + \frac{v}{2} (2u_{xx}^{(0)} + u_{yy}^{(0)} + \Delta_1 u_{zz}^{(0)}) \mp \\ &\quad \mp \left[\frac{K_0}{2} (\Delta q_2^0 + q_2^2) - \frac{\zeta}{2} + \frac{v}{2} (u_{yy}^{(0)} - \Delta_1 u_{zz}^{(0)}) \right] \sin 2\varphi ; \\ E_0 &= -K_0 \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \zeta + v(u_{yy}^{(0)} + \Delta_1 u_{zz}^{(0)}), \end{aligned} \quad (6)$$

а собственные векторы гамильтониана (5) имеют вид:

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \cos \varphi |\tilde{1}\rangle + \sin \varphi |\tilde{-1}\rangle, \quad |\Psi(0)\rangle = |\tilde{0}\rangle, \\ |\Psi(-\tilde{1})\rangle &= -\sin \varphi |\tilde{1}\rangle + \cos \varphi |\tilde{-1}\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Уравнение на параметр $u-v$ преобразования φ имеет вид

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{K_0(\Delta q_2^0 + q_2^2) - \zeta + v(u_{yy}^{(0)} - \Delta_1 u_{zz}^{(0)})}{2H}. \quad (8)$$

При этом спиновые операторы связаны с операторами Хаббарда следующим образом:

$$\begin{aligned} S^+ &= \sin 2\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right)(H^1 - H^{-1}) + \cos 2\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right) \times \\ &\times (X^{1-1} + X^{-11}) + \cos\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right)(X^{01} - X^{10}) + \\ &+ \sin\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right)(X^{-10} - X^{0-1}), \quad S^- = (S^+)^+, \\ S^z &= \sin\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right)(X^{01} + X^{10}) + \\ &+ \cos\left(\varphi + \frac{\pi}{4}\right)(X^{-10} + X^{0-1}). \end{aligned} \quad (9)$$

Далее (если это не будет оговорено отдельно) будем рассматривать низкотемпературный предел, т.е. предполагается, что $T \ll T_C$, T_C — температура Кюри. В этом случае, как следует из (6), нижайшим энергетическим уровнем является E_1 . Тогда плотность свободной энергии приближенно равна

$$F \approx F_{\text{el}} + E_1,$$

а комбинации спонтанных деформаций, необходимые нам для дальнейших вычислений, имеют вид:

$$\begin{aligned} u_{yy}^{(0)} - \Delta_1 u_{zz}^{(0)} &= \frac{v(1+\sigma)}{2E(1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2)} \times \\ &\times [(1-2\sigma)(\Delta_1-1) + \sin 2\varphi [1 + \Delta_1(1+2\sigma-4\sigma^2)]], \\ 2u_{xx}^{(0)} - u_{yy}^{(0)} - \Delta_1 u_{zz}^{(0)} &= -\frac{v(1+\sigma)}{2E(1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2)} [3 + \\ &+ (1+2\sigma)\sin 2\varphi - \Delta_1[1-2\sigma+4\sigma^2+(1+2\sigma)\sin 2\varphi]]. \end{aligned}$$

Используя связь спиновых операторов с операторами Хаббарда (9) и учитывая, что нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , можно получить явные выражения для параметров порядка системы при различных значениях параметра унитарного преобразования φ , а следовательно, при различных соотношениях между материальными константами (см. (8)). В системе могут реализовываться следующие различные спиновые состояния.

1. Ферромагнитное состояние (ФМ), в котором параметры порядка имеют вид

$$\langle S^x \rangle = \cos 2\varphi, \quad q_2^0 = \frac{3 \sin 2\varphi - 1}{2}, \quad q_2^2 = \frac{\sin 2\varphi + 1}{2}.$$

Эту фазу мы назовем ΦM_x -фазой.

2. При $\varphi = \pi/4$ параметры порядка равны

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

т.е. в этом случае в системе реализуется квадрупольная фаза, названная нами KU_1 -фазой, в которой $\langle (S^x)^2 \rangle = 0$, $\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1$.

3. Наконец, возможна ситуация, когда $\varphi = -\pi/4$. В этом случае

$$\langle S^x \rangle = 0, \quad q_2^0 = -2, \quad q_2^2 = 0,$$

а квадраты средних от спиновых операторов имеют вид

$$\langle (S^z)^2 \rangle = 0, \quad \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

Это состояние также является квадрупольным. Мы назовем его KU_2 -фазой.

Дисперсионное уравнение связанных магнитоупругих волн

Нашей задачей является исследование фазовых состояний рассматриваемой системы, как следствие — построение фазовой диаграммы. Выполнение этой задачи требует определения линий фазовых переходов, которые можно найти из спектров элементарных возбуждений системы.

Как уже отмечалось, учет магнитоупрого взаимодействия приводит к гибридизации упругих и магнитных возбуждений и возникновению связанный магнитоупругой волны [18].

Компоненты тензора деформаций представим в виде суммы двух слагаемых: $u_{ij} = u_{ij}^{(0)} + u_{ij}^{(1)}$. Первое слагаемое определяет спонтанные деформации магнитоупорядоченного кристалла, обусловленные наличием магнитоупрого взаимодействия. Именно с этим слагаемым мы провели вычисления энергетических уровней магнитного иона, определяемых формулами (6).

Второе слагаемое в выделенной нами части тензора деформации $u_{ij}^{(1)}$ является динамическим и обусловлено колебаниями кристаллической решетки. После квантования колебаний решетки по стандартной схеме [19] в одноузельном гамильтониане (2) выделяем слагаемое, которое содержит как фононные операторы, так и хаббардовские. Эту часть гамильтониана назовем гамильтонианом трансформаций, поскольку он описывает процессы превращения фононов в магноны и наоборот.

Гамильтониан трансформаций можно представить в виде

$$\mathcal{H}_{\text{tr}} = \sum_n \left\{ \sum_M \mathcal{P}_M H_n^M + \sum_\alpha \mathcal{P}_\alpha X_n^\alpha \right\}, \quad (11)$$

$$\text{где } \mathcal{P}_{M(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,\lambda} (b_{q,\lambda} + b_{-q,\lambda}^+) T_n^{M(\alpha)}(q,\lambda); \alpha =$$

корневые векторы, определяемые алгеброй операторов Хаббарда [15,16]; $H_n^M \equiv X_n^{MM'}$; $b_{q,\lambda}$ ($b_{q,\lambda}^+$) — операторы уничтожения (рождения) фононов, которые связаны с динамической частью тензора деформаций $u_{ij}^{(1)}$ соотношением

$$u_{ij}^{(1)} = \frac{i}{2} \sum_{q,\lambda} \frac{\exp(iqn)}{\sqrt{2mN\omega_\lambda(q)}} (b_{q,\lambda} + b_{-q,\lambda}^+) \times \\ \times [e_\lambda^i(q)q_j + e_\lambda^j(q)q_i].$$

Здесь $e_\lambda(q)$ — единичный вектор λ -поляризованных фононов, $\lambda = (l, t, \tau)$; m — масса магнитного иона; N — число узлов в кристаллической решетке; $\omega_\lambda(q) = c_\lambda q$ — закон дисперсии невзаимодействующих фононов; c_λ — скорость λ -поляризованного звука.

Амплитуды трансформаций $T^{M(\alpha)}(q,\lambda)$ имеют достаточно громоздкий вид, поэтому приводить их не будем.

Хорошо известно, что спектр элементарных возбуждений системы определяется полюсами функции Грина [20]:

$$G^{\alpha\alpha'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_n^\alpha(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где \hat{T} — оператор Вика, $\tilde{X}_n^\alpha(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau} X_n^\alpha e^{-\mathcal{H}\tau}$ — оператор Хаббарда в представлении взаимодействия. Усреднение проводится с полным гамильтонианом системы.

Дисперсионное уравнение, определяющее спектры связанных магнитоупругих волн, аналогично уравнению Ларкина (с учетом магнитоупругой связи) и имеет вид

$$\det \|x_{ij}\| = 0, \quad (12)$$

где

$$x_{ij} = \delta_{ij} + G_0^\alpha(\omega) b(\alpha) B_i^+(\alpha) A_{pj} B_p(-\alpha) + \\ + \Phi^0(k, \lambda, \lambda') T^{-\alpha}(k, \lambda) G_o^\alpha(\omega) b(\alpha) \times \\ \times T^\beta(-k, \lambda') G_0^\beta(\omega) b(\beta) B_i^+(\alpha) A_{pj} B_p(-\beta);$$

$$\Phi^0(k, \lambda, \lambda') = \frac{D_\lambda(k, \omega)}{1 - Q_{\lambda\lambda'} D_\lambda(k, \omega)};$$

$$Q_{\lambda\lambda'} = T^\alpha(-k, \lambda) G_0^\alpha(\omega) T^{-\alpha}(k, \lambda'); b(\alpha) = \langle \alpha \mathbf{H} \rangle_0$$

— концевые множители; $D_\lambda(k, \omega) = 2\omega_\lambda(k) \times [\omega^2 - \omega_\lambda^2(k)]^{-1}$ — функция Грина свободного λ -поляризованного фонона; $G_0^\alpha(\omega) = [\omega + (\alpha \mathbf{E})]^{-1}$ — нулевая функция Грина.

Спектры элементарных возбуждений в ΦM_x -фазе

Проанализируем решения дисперсионного уравнения (12) предполагая, что система находится в ΦM_x -фазе. Как уже отмечалось ранее, параметры порядка в этом состоянии имеют вид:

$$\langle S^x \rangle = \cos 2\varphi, \quad q_2^0 = \frac{3 \sin 2\varphi - 1}{2}, \quad q_2^2 = \frac{\sin 2\varphi + 1}{2}.$$

При низких температурах среднее значение намагниченности (на один узел) должно быть близко к величине спина в узле. Так как рассматривается система с $S = 1$, то $\cos 2\varphi \approx 1$, а для средних значений квадратов спиновых операторов имеем

$$\langle (S^x)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{1}{2}.$$

Используя это условие и уравнение (8) на параметр φ , можно получить критерий на материальные константы существования ΦM_x -фазы:

$$J_0 - \frac{K_0}{4} (1 + 3\Delta) - \frac{a_0 [1 + \Delta_1 (1 + 2\sigma - 4\sigma^2)]}{2(1 + \sigma - 2\Delta_1 \sigma^2)} > 0. \quad (13)$$

Таким образом, если материальные константы удовлетворяют условию (13), то система находится в ΦM_x -фазе.

Рассмотрим спектры элементарных возбуждений в этом состоянии. Как уже отмечалось ранее, учет магнитоупругого взаимодействия приводит к гибридизации упругих и магнитных возбуждений, т.е. к возникновению магнитоупругой волны. Эту гибридизованную волну можно представить как совокупность квазимагнитных и квазиупругих возбуждений (квазимагнонов и квазифононов соответственно). При дальнейших вычислениях будем считать, что волновой вектор \mathbf{k} параллелен оси OY . В такой геометрии отличными от нуля компонентами единичного вектора поляризации являются $e_t^x, e_\tau^z, e_\tau^y$.

При произвольных значениях параметров Δ и Δ_1 ($0 \leq \Delta \leq 1, 0 \leq \Delta_1 \leq 1$) спектры квазимагнонов (в длинноволновом пределе) имеют вид

$$\varepsilon_1^2(k) = 2\Omega_{11}(k)\Omega_{12}(k); \quad \varepsilon_2^2(k) = \Omega_{21}(k)\Omega_{22}(k), \quad (14)$$

а спектры квазифононов равны

$$\begin{aligned} \omega_1^2(k) &= \omega_l^2(k) \left\{ 1 + \frac{a_0(1-\sigma) \cos 2\varphi}{\Omega_{12}(k)} \right\}, \\ \omega_2^2(k) &= \omega_\tau^2(k) \left\{ 1 + \frac{a_0 \Delta}{\Omega_{11}(k)} \right\}, \\ \omega_3^2(k) &= \omega_t^2(k) \left\{ 1 + \frac{a_0(1+\sin 2\varphi)}{\Omega_{22}(k)} \right\}, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned}\Omega_{11}(k) &= J_0 - \Delta K_0 + \Delta \gamma k^2, \\ \Omega_{12}(k) &= [2\alpha \sin^2 2\varphi + \frac{1+3\Delta}{2} \gamma \cos^2 2\varphi] k^2 + [2J_0 - \frac{K_0}{2}(1+3\Delta)] \cos 2\varphi, \\ \Omega_{21}(k) &= \Delta [\alpha(1+\sin 2\varphi) + \gamma(1-\sin 2\varphi)] k^2 + (1-\Delta)(J_0 + \frac{3}{4}K_0) - \frac{\zeta}{2} + \\ &+ \tilde{a}_0 [3 - \Delta_1(1 - 2\sigma + 4\sigma^2)] + [\tilde{a}(1+2\sigma)(1-\Delta_1) - \Delta J_0 + \frac{K_0}{4}(3+\Delta)] \sin 2\varphi, \\ \Omega_{22}(k) &= [\alpha(1-\sin 2\varphi) + \gamma(1+\sin 2\varphi)] k^2 - \frac{K_0}{4}(1-\Delta) - \frac{\zeta}{2} + \\ &+ \tilde{a} [3 - \Delta_1(1 - 2\sigma + 4\sigma^2)] + [\tilde{a}(1+2\sigma)(1-\Delta_1) - \Delta J_0 + \frac{K_0}{4}(3+\Delta)] \sin 2\varphi,\end{aligned}$$

$\alpha = J_0 R_0^2$, $\gamma = K_0 \tilde{R}_0^2$, R_0 , \tilde{R}_0 — радиусы билинейного и биквадратичного взаимодействий соответственно; $\tilde{a} = a_0/(1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2)$, $a_0 = v^2(1+\sigma)/2E$.

Из выражений (14) и (15) следует, что мягкой модой в ФМ_x -фазе является квазимагнитная ветвь $\varepsilon_1(k)$, которая размягчается при следующих значениях материальных констант:

$$J_0^{(1)} = \frac{K_0(1+\Delta)}{2} - \frac{\zeta}{2} + \frac{a_0(\Delta_1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2)}{1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2}; \quad (16)$$

$$J_0^{(2)} = \Delta K_0 + \frac{\zeta}{2} + \frac{a_0(1-\sigma)(1+2\Delta_1\sigma^2)}{1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2}. \quad (17)$$

Хорошо известно, что спектры квазичастиц размягчаются либо на линиях устойчивости (фазовый переход I рода), либо на линиях перехода (фазовый переход II рода). Таким образом, выражения (16) и (17) определяют линии фазовых переходов в квадрупольные фазы.

Вторая квазимагнитная ветвь $\varepsilon_2(k)$ остается щелевой, а спектры квазифононов остаются линейными по волновому вектору, изменяются лишь скорости соответствующих квазиакустических мод. Это свидетельствует о слабом взаимодействии упругой и магнитной подсистем в окрестности линий фазовых переходов в квадрупольные фазы, которое сводится к статической перенормировке щели в квазимагнитных спектрах.

Рассмотрим спектры квазичастиц в предельных случаях: при $\Delta = \Delta_1 = 0$ и $\Delta = \Delta_1 = 1$.

При $\Delta = \Delta_1 = 0$ исследуемая система соответствует изотропной XY-модели с биквадратичным обменным взаимодействием и «плоским» магнитоупругим взаимодействием. При этом в системе не реализуется КУ_2 -фаза. Мягкой же модой остается квазимагнитная ветвь $\varepsilon_1(k)$. В этом случае в системе проис-

ходит фазовый переход ФМ_x – КУ_1 -фаза. Линия этого фазового перехода, как видно из (16), равна

$$J_0^{(1)} = \frac{K_0}{2} + \frac{a_0\sigma}{1+\sigma}. \quad (18)$$

Фазовая диаграмма для XY-модели с биквадратичным взаимодействием приведена на рис. 1.

Если же параметры таковы, что $\Delta = \Delta_1 = 1$, то в этом случае в системе не реализуется КУ_1 -фаза, а линия фазового перехода из ФМ_x в КУ_2 -фазу определяется из формулы (17) и имеет вид

$$J_0^{(2)} = K_0 + \frac{\zeta}{2} + \frac{a_0(1-\sigma)(1+2\sigma^2)}{1+\sigma-2\sigma^2}. \quad (19)$$

Фазовая диаграмма для такой системы приведена на рис. 2.

Необходимо отметить, что в работах [21,22] исследованы фазовые переходы в изотропных по обменным взаимодействиям негейзенберговских ферромагнетиках. Результаты настоящей работы отличаются от результатов работ [21,22] в том смысле, что фазовый переход ФМ_x – КУ_2 -фаза идет по квазимагнитной ветви возбуждений, в то время как в изотропной модели фазовый переход ФМ_x – КУ_1 -фаза происходит по квазиакустической ветви возбуждений. Причина этого различия состоит в наличии как одноионной анизотропии типа «легкая плоскость», так и обменной анизотропии. Наличие этих типов взаимодействия не только меняет ветвь возбуждений, отвечающую за фазовый

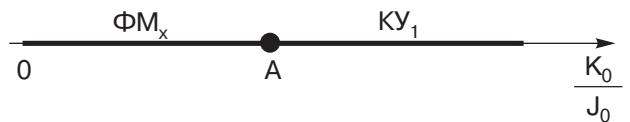


Рис. 1. Фазовая диаграмма XY-модели с биквадратичным взаимодействием. Точка A определяется (18).

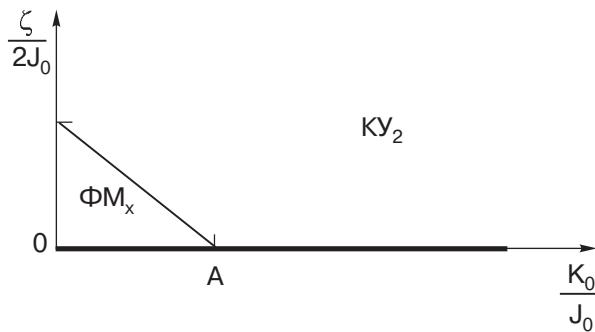


Рис. 2. Фазовая диаграмма негейзенберговского анизотропного ферромагнетика при $\Delta = \Delta_1 = 1$. Точка A определяется (19).

переход, но и фазу, в которую переходит система из ФМ-фазы (KU_2 -фаза вместо KU_1 -фазы).

В рассматриваемом случае параметр обобщенного $u-v$ преобразования φ таков, что

$$\sin 2\varphi = -\frac{\zeta}{2(J_0 - K_0 - a_0)}.$$

Если же система изотропна, как в [21], то $\sin 2\varphi = 0$. Это приводит к иному виду собственных функций одноузельного гамильтониана, а следовательно, иной связи спиновых операторов с операторами Хаббарда и т.д. Таким образом, одноионная анизотропия играет существенную роль в динамике негейзенберговских магнетиков.

Как видно на рис. 2 и следует из выражений (14) и (15), в окрестности точки A взаимодействие упругой и магнитной подсистем становится существенным и не сводится только к статической перенормировке спектров квазимагнонов. В этой точке ($\zeta = 0$) мягкой модой становится τ -поляризованная квазифононная ветвь возбуждений и фазовый переход FM_x-KU_2 -фаза происходит в точке

$$J_0 = K_0 + a_0 \quad (20)$$

в полном соответствии с работой [21], за исключением того, что в [21] фазовый переход происходит из ФМ-фазы в KU_1 -фазу.

Спектры элементарных возбуждений в KU -фазах

Теперь рассмотрим решения дисперсионного уравнения (12) в случае, когда неравенство (13) имеет противоположный знак. При таком соотношении материальных констант в системе реализуются квадрупольные фазы.

Рассмотрим KU_1 -фазу. В этом случае параметр обобщенного $u-v$ преобразования $\varphi = \pi/4$, а параметры порядка системы имеют вид

$$\langle S^x \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 1.$$

Как следует из уравнения (12), спектр квазифононов в этой фазе остается линейным по волновому вектору, а спектры квазимагнонов имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= [2\alpha k^2 - 2J_0 + K_0(1 + \Delta) + \xi + \\ &\quad + 4\tilde{a}(\sigma + \Delta_1 - 2\Delta_1\sigma^2)] \times \\ &\quad \times [2\Delta\gamma k^2 + K_0(1 - \Delta) + \xi + 4\tilde{a}(\sigma + \Delta_1 - 2\Delta_1\sigma^2)], \\ \varepsilon_2^2(k) &= 4(\gamma k^2 + a_0)(\Delta\alpha k^2 + K_0 - J_0\Delta + a_0). \end{aligned} \quad (21)$$

Фазовый переход KU_1-FM_x -фаза идет по квазимагнитной ветви $\varepsilon_1(k)$ и происходит при следующем соотношении материальных констант:

$$J_0^{(1)} = \frac{K_0}{2}(1 + \Delta) - \frac{\xi}{2} + \frac{a_0(\Delta_1 + \sigma - 2\Delta_1\sigma^2)}{1 + \sigma - 2\Delta_1\sigma^2}. \quad (22)$$

Сравнивая выражения (16) и (22), видим, что фазовые переходы FM_x-KU_1 -фаза и KU_1-FM_x -фаза происходят при одинаковых значениях материальных констант. Это свидетельствует о том, что данный фазовый переход — переход второго рода.

Рассмотрим теперь KU_2 -фазу. В этой фазе

$$\varphi = -\frac{\pi}{4}; \langle S^x \rangle = 0, q_2^0 = -2, q_2^2 = 0.$$

Используя соответствующие выражения для параметров порядка, формулы (6) и выражения для спонтанных деформаций, легко показать, что в KU_2 -фазе происходит вырождение возбужденных энергетических уровней магнитного иона ($E_0 = E_{-1}$). Это приводит к тому, что спектры квазимагнонов совпадают:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \varepsilon_2^2(k) = \\ &= 4[\alpha k^2 - J_0 + \Delta K_0 - \frac{\xi}{2} + 2\tilde{a}(1 - \sigma)(1 + 2\Delta_1\sigma)] \times \\ &\quad \times [\Delta\gamma k^2 - \frac{\xi}{2} + 2\tilde{a}(1 - \sigma)(1 + 2\Delta_1\sigma)], \end{aligned} \quad (23)$$

а спектры квазифононов, как и ранее, линейны по волновому вектору.

Из (23) следует, что линия перехода KU_2-FM_x -фаза имеет вид

$$J_0^{(2)} = K_0 + \frac{\xi}{2} + \frac{a_0(1 - \sigma)(1 + 2\sigma^2)}{1 + \sigma - 2\sigma^2}. \quad (24)$$

Легко видеть, что выражение (24) совпадает с формулой (17), описывающей линию перехода FM_x-KU_2 -фаза. Этот факт также свидетельствует о том, что данный фазовый переход — переход второго рода.

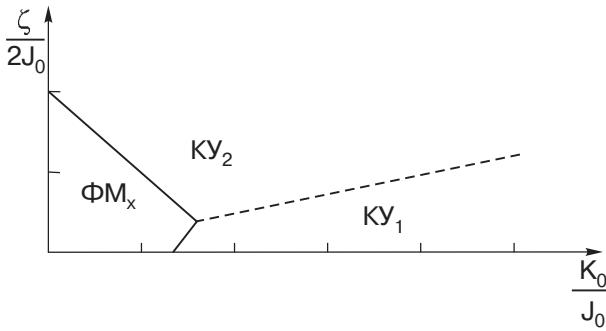


Рис. 3. Фазовая диаграмма негейзенберговского ферромагнетика с анизотропным обменным взаимодействием ($\Delta = 0,5$).

Линия же фазового перехода КУ₁–КУ₂-фаза определяется из условия равенства свободных энергий в соответствующих фазах и имеет вид

$$\frac{K_0}{2}(1-\Delta) - \zeta - \frac{a_0(1-\Delta_1)(1-2\sigma)}{1+\sigma-2\Delta_1\sigma^2} = 0. \quad (25)$$

Фазовый переход КУ₁–КУ₂-фаза является переходом первого рода.

Используя соотношения (16), (17), а также (22), (24) и (25), можно построить фазовую диаграмму исследуемой системы. Так, при $\Delta = \Delta_1 = 0,5$ фазовая диаграмма имеет вид, приведенный на рис. 3. Легко видеть, что по мере приближения параметров Δ и Δ_1 к единице область существования КУ₁-фазы уменьшается, и при $\Delta = \Delta_1 = 1$ эта фаза становится энергетически невыгодной.

Фазовые переходы по температуре

В предыдущих разделах мы рассмотрели фазовые переходы по материальным константам. Однако в рассматриваемой системе возможны и фазовые переходы по температуре.

Необходимо отметить, что температура перехода существенно зависит от размерности системы. Поэтому исследуем фазовые переходы по температуре для трехмерной и двумерной модели негейзенберговского ферромагнетика с анизотропным биквадратичным взаимодействием.

Как было показано выше, в системе может реализоваться дальний магнитный порядок как ферромагнитного, так и квадрупольного типа. Предположим, что при низких температурах в системе реализуется ферромагнитная фаза. С ростом температуры параметр порядка в ферромагнитной фазе $\langle S^x \rangle$ уменьшается и при $T = T_C$ обращается в нуль, при этом система переходит в квадрупольную фазу. Дальнейшее увеличение температуры приводит уже к изменению параметров порядка в квадрупольной фазе (q_2^0 и q_2^2), которые при температуре $T = T_q$ об-

ращаются в нуль, и система переходит в парамагнитное состояние. Найдем эти температуры, воспользовавшись методом бозонизации хаббардовских операторов [23–25]. Основная идея метода заключается в построении бозевского аналога гамильтониана (1). На первом этапе проводится в диагонализация одноузельного гамильтониана и представление спиновых операторов через операторы Хаббарда. Далее хаббардовским операторам X_n^α ставятся в соответствие псевдохаббардовские операторы \tilde{X}_n^α , которые связаны с бозевскими операторами рождения и уничтожения следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_n^1 &= 1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n; \quad \tilde{H}_n^0 = a_n^+ a_n; \quad \tilde{H}_n^{-1} = b_n^+ b_n; \\ \tilde{X}_n^{10} &= (1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n) a_n; \quad \tilde{X}_n^{01} = a_n^+; \\ X_n^{1-1} &= (1 - a_n^+ a_n - b_n^+ b_n) b_n; \\ \tilde{X}_n^{-11} &= b_n^+; \quad \tilde{X}_n^{0-1} = a_n^+ b_n; \quad \tilde{X}_n^{-10} = b_n^+ a_n. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь a — бозе-операторы, соответствующие переходу иона из состояния E_1 в состояние E_0 и наоборот, а b соответствуют переходу из состояния E_1 в состояние E_{-1} и наоборот.

Переписывая гамильтониан (1) в ФМ_x-фазе через бозевские операторы и ограничиваясь квадратичными членами по операторам рождения и уничтожения квазичастиц, получаем:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} = \sum_k & \left[A_k a_k^+ a_k + B_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}) + \right. \\ & \left. + \tilde{A}_k b_k^+ b_k + \tilde{B}_k (b_k^+ b_{-k}^+ + b_k b_{-k}) \right], \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} A_k &= E_0 - E_1 - \frac{J_k}{2} [1 + \Delta - (1 - \Delta) \sin 2\varphi] - \\ &- \frac{K_k}{2} [1 + \Delta + (1 - \Delta) \sin 2\varphi]; \\ B_k &= \frac{J_k}{2} [1 - \Delta - (1 + \Delta) \sin 2\varphi]; \\ \tilde{A}_k &= E_{-1} - E_1 - J_k \sin^2 2\varphi - \\ &- \frac{K_k \cos^2 2\varphi}{4} (1 + 3\Delta) - \Delta K_k; \\ \tilde{B}_k &= -J_k \sin^2 2\varphi - \frac{K_k \cos^2 2\varphi}{4} (1 + 3\Delta) + \Delta K_k, \end{aligned} \quad (28)$$

где $J_k = J_0 \gamma_k$; $K_k = K_0 \gamma_k$; $\gamma_k = (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)/3$ — для 3D-системы, и $\gamma_k = (\cos k_x + \cos k_y)/2$ — для 2D-системы.

Диагонализуя полученный гамильтониан стандартным $u-v$ преобразованием Боголюбова [26], получаем:

$$\mathcal{H}^{(2)} = \sum_k \varepsilon_\alpha(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k \varepsilon_\beta(k) \beta_k^+ \beta_k, \quad (29)$$

где спектры α - и β -квазичастиц ($\varepsilon_{\alpha,\beta}(k)$) совпадают со спектрами квазимагнонов (14) в FM_x -фазе.

Для определения температуры T_C перехода из ферромагнитной фазы в квадрупольную фазу рассмотрим параметр порядка $\langle S^x \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle S^x \rangle &= \frac{1}{2N} \sum_n \langle S_n^+ + S_n^- \rangle = \\ &= \frac{\cos 2\varphi}{N} \sum_n \langle 1 - a_n^+ a_n - 2b_n^+ b_n \rangle \end{aligned} \quad (30)$$

Поскольку при фазовом переходе из ферромагнитной фазы в квадрупольную размягчается спектр квазимагнонов $\varepsilon_\beta(k)$, в (30) можно ограничиться лишь учетом первого и третьего слагаемых и переписать это выражение следующим образом:

$$\langle S^x \rangle = \cos 2\varphi \left[1 - \frac{2}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp(\varepsilon_\beta(k)/T) - 1} \right] - S(0), \quad (31)$$

где n – размерность системы ($n = 2$ для 2D-системы ($\Delta_1 = 0$) или $n = 3$ для 3D-системы ($\Delta_1 > 0$));

$$u_k = \sqrt{\frac{\tilde{A}_k + \varepsilon_\beta(k)}{2\varepsilon_\beta(k)}}, \quad v_k = -\frac{\tilde{B}_k}{|\tilde{B}_k|} \sqrt{\frac{\tilde{A}_k - \varepsilon_\beta(k)}{2\varepsilon_\beta(k)}} -$$

параметры $u-v$ преобразования (\tilde{A}_k определяется (28)); $S(0)$ – нулевые колебания, которые определяются следующим выражением:

$$S(0) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} v_k^2 d^n k.$$

Приравняв интеграл (31) к нулю (условие фазового перехода по температуре из ферромагнитной фазы в квадрупольную), можно найти температуру перехода T_C . На рис. 4 показаны зависимости температуры перехода от величины параметра обменной анизотропии Δ , полученные при численном интегрировании (31) для характерных значений материальных констант [27, 28] ($J_0 = 4000$ кЭ, $\beta = 0,005\Delta_0$, $a_0 = 7,5 \cdot 10^{-7} J_0$, $\sigma = 0,3$).

Как видно на рис. 4, температура фазового перехода в 3D-системе меньше, чем в 2D-системе при данных значениях материальных констант. С увеличением константы биквадратичного обменного взаимодействия K_0 зазор между кривыми 1 и 2 уменьшается. Причем при определенном соотношении между J_0 и K_0 возможно пересечение этих кривых. Например, для $K_0 = 0,5J_0$ температура фазо-

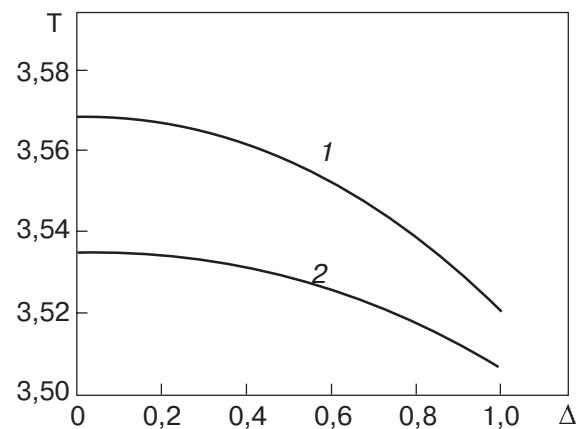


Рис. 4. Зависимость температуры фазового перехода из FM_x -фазы в КУ-фазу от параметра Δ . Температура измеряется в единицах билинейного обмена; $K_0 = 0,25J_0$. Кривая 1 соответствует 2D-системе ($\Delta_1 = 0$), кривая 2 – 3D-системе ($\Delta_1 = 1$).

вого перехода для 2D-системы больше, чем для 3D-системы при $\Delta < 0,56$, и меньше при $\Delta > 0,56$. Возможно, это связано с тем, что при таком соотношении между обменными константами уже нельзя утверждать, что в системе реализуется FM_x -фаза, так как спектры элементарных возбуждений, которые используются для расчета T_C , получены при условии, что $J_0 \gg K_0$.

Действуя аналогичным образом, найдем температуру перехода из КУ₁-фазы в парамагнитную фазу. Для этого перепишем гамильтониан (1) через бозевские операторы в КУ₁-фазе. Полученный гамильтониан будет иметь вид (27), однако коэффициенты при бозевских операторах будут уже другие:

$$\begin{aligned} A_k &= E_0 - E_1 - \Delta J_k - K_k; \quad B_k = -\Delta J_k + K_k; \\ \tilde{A}_k &= E_{-1} - E_1 - J_k - \Delta K_k; \quad \tilde{B}_k = -J_k + \Delta K_k. \end{aligned} \quad (32)$$

Чтобы найти температуру T_{q_1} фазового перехода из КУ₁-фазы в парамагнитную фазу рассмотрим параметр порядка q_2^0 ,

$$q_2^0 = \frac{1}{N} \sum_n \langle 3(S_n^z)^2 - 2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle 1 - 3b_n^+ b_n \rangle. \quad (33)$$

Уравнение (33) можно переписать следующим образом:

$$q_2^0 = 1 - \frac{3}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp(\varepsilon_\beta(k)/T) - 1} - q(0), \quad (34)$$

где \tilde{A}_k определяется (32); $\varepsilon_\beta(k)$ – спектр квазимагнонов в КУ₁-фазе (21); $q(0)$ – нулевые колебания.

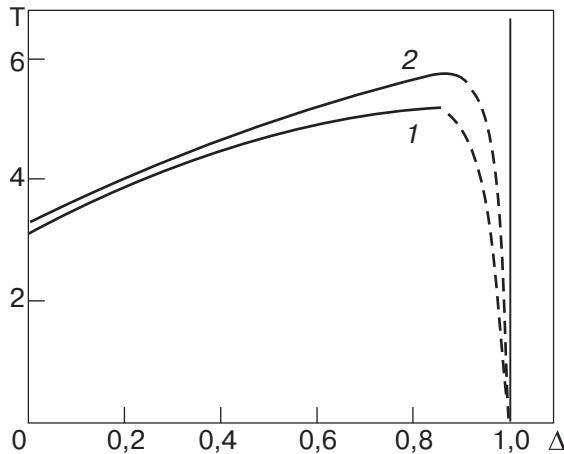


Рис. 5. Зависимость температуры фазового перехода из КУ₁-фазы в парамагнитную фазу от параметра Δ . Температура измеряется в единицах билинейного обмена; $K_0 = 2,5J_0$. Кривая 1 соответствует 2D-системе ($\Delta_1 = 0$), кривая 2 – 3D-системе ($\Delta_1 = 1$).

Приравнивая (34) к нулю и численно решая получившееся уравнение, найдем T_{q_1} . Графики зависимости температуры перехода T_{q_1} от величины параметра обменной анизотропии Δ показаны на рис. 5. При приближении значения Δ к единице происходит обрыв температурной кривой, так как КУ₁-фаза не реализуется при $\Delta = 1$. В этой точке система переходит из КУ₁-фазы в КУ₂-фазу, которая будет рассмотрена ниже.

Теперь найдем температуру T_{q_2} перехода из КУ₂-фазы в парамагнитную фазу. Переписывая (1) через бозевские операторы в КУ₂-фазе, получаем (27), где коэффициенты при бозевских операторах имеют вид

$$A_k = E_0 - E_1 - J_k - \Delta K_k; \quad B_k = J_k - \Delta K_k; \quad (35)$$

$$\tilde{A}_k = E_{-1} - E_1 - J_k - \Delta K_k; \quad \tilde{B}_k = -J_k + \Delta K_k.$$

Параметр порядка q_2^0 в КУ₂-фазе имеет вид:

$$q_2^0 = \frac{1}{N} \sum_n \langle 3(S_n^z)^2 - 2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle 6b_n^+ b_n - 2 \rangle. \quad (36)$$

Здесь мы учли тот факт, что в КУ₂-фазе $\langle a_n^+ a_n \rangle = \langle b_n^+ b_n \rangle$, поскольку энергетические уровни вырождены ($E_0 = E_{-1}$). Уравнение (36) можно переписать следующим образом:

$$q_2^0 = -2 + \frac{6}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp(\varepsilon_\beta(k)/T) - 1} - q(0), \quad (37)$$

где \tilde{A}_k определяется (35); $\varepsilon_\beta(k)$ – спектр квазимагнитонов в КУ₂-фазе (23).

Графики зависимости температуры перехода T_{q_2} от величины параметра обменной анизотропии Δ по-

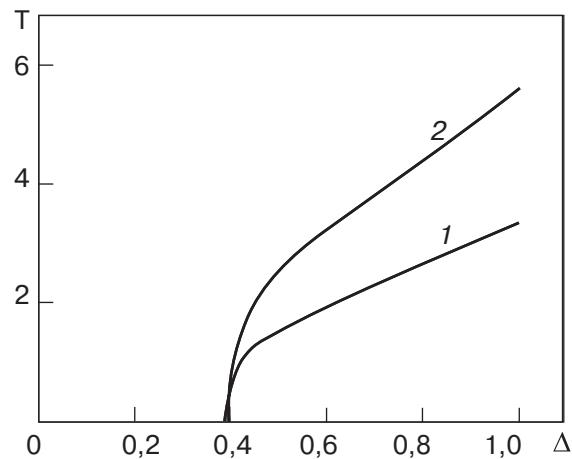


Рис. 6. Зависимость температуры фазового перехода из КУ₂-фазы в парамагнитную фазу от параметра Δ . Температура измеряется в единицах билинейного обмена; $K_0 = 2,5J_0$. Кривая 1 соответствует 2D-системе ($\Delta_1 = 0$), кривая 2 – 3D-системе ($\Delta_1 = 1$).

казаны на рис. 6. Зависимость температуры перехода получена для $\Delta \geq 0,4$, поскольку КУ₂-фаза может реализоваться только при таких значениях параметра обменной анизотропии. Для всех $\Delta < 0,4$ фазовый переход по температуре всегда происходит из ферромагнитной фазы в КУ₁-фазу. Более того, анализ рис. 4 и 5 показывает, что даже для $\Delta > 0,4$ фазовый переход из ферромагнитной фазы в КУ₂-фазу может произойти только для $\Delta \sim 1$.

Заключение

Проведенные исследования позволяют утверждать, что анизотропное обменное взаимодействие в негейзенберговских магнетиках приводит к существенным изменениям в динамике ферромагнетика. Так, в отличие от изотропных (по обменному взаимодействию) негейзенберговских магнетиков [21, 22, 25, 29], в которых мягкой модой является квазиупругая ветвь возбуждений, в данном случае фазовые переходы протекают по квазимагнитной ветви. Учет же магнитоупругого взаимодействия приводит к статической перенормировке энергетической щели в спектре квазимагнитных возбуждений. Лишь в изотропном трехкомпонентном случае ($\Delta = 1, \zeta = 0$) мягкой модой становится квазифононная ветвь возбуждений, что соответствует результатам работ [21, 22]. В XY-модели ($\Delta = 0$) мягкой модой остается квазимагнитная ветвь.

Необходимо отметить, что хотя магнитоупругое взаимодействие и не приводит в данном случае к существенным изменениям в динамике системы, тем не менее это взаимодействие приводит к стабилизации дальнего порядка (как ферромагнитного, так и

квадрупольного) в двумерном негейзенберговском ферромагнетике.

Показано, что в изотропном по обменным взаимодействиям негейзенберговском магнетике может реализоваться только КУ₂-фаза, что, по-видимому, связано с наличием в системе легкоплоскостной одноионной анизотропии. Как только параметр Δ становится меньше единицы, в системе реализуется КУ₁-фаза, причем КУ₂-фаза может реализоваться в этом случае только при наличии достаточно большой одноионной анизотропии. При этом фазовый переход из ФМ_x-фазы как в КУ₁-фазу, так и в КУ₂-фазу, является фазовым переходом второго рода при любом значении Δ , а фазовый переход КУ₁–КУ₂-фаза – первого рода. Эти результаты хорошо согласуются с результатами работ [21,22,31],

Получены зависимости от параметра Δ температур фазовых переходов из ФМ_x-фазы в квадрупольные фазы и из квадрупольных фаз в парамагнитную фазу. Сравнение температур фазовых переходов из КУ₁-фазы в парафазу с ранее полученными численными результатами для трехмерной биквадратичной XY-модели [30] приведено в таблице.

Таблица. Сравнение температур фазового перехода КУ₁-фаза – парамагнитная фаза

K_0/J_0	T_{q1}/J_0 (результаты [30])	T_{q1}/J_0 (наши результаты, $J_0 = 6400$ кЭ)
10	11,1	11,33
5	5,625	5,612
3,33	3,88	3,662

Как видно из таблицы, наши результаты хорошо согласуются с результатами работы [30]. Однако необходимо отметить, что при том же отношении K_0/J_0 , но другом значении J_0 эти результаты могут существенно отличаться. Возможно, это различие связано с различными методиками расчета температуры перехода: в [30] температура перехода находилась путем анализа температурных кривых теплопроводности и магнитной восприимчивости, полученных при численном моделировании методом Монте–Карло; мы же вычисляли критическую температуру, пользуясь спектрами квазимагнонов. Окончательно определить, какой из этих методов более правильный, можно было бы, используя реальные экспериментальные данные по количественному определению значений обменных констант. К сожалению, нам такие эксперименты не известны, и в расчетах мы пользовались численными оценками материальных констант, сделанными на основе общих предположений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Украины (проект № 235-03). Клевец Ф.Н. благодарит за финансовую помощь Верховный Совет Автономной Республики Крым. Авторы также выражают благодарность за поддержку Swiss S.F. (SCOPES Project).

1. N.D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
2. С.В. Малеев, *ЖЭТФ* **70**, 2344 (1976).
3. Б.А. Иванов, Е.В. Тартаковская, *Письма в ЖЭТФ* **10**, 792 (1998).
4. Yu.N. Mitsay, Yu.A. Fridman, D. Spirin, C. Alexeyev, and M. Kochmanski, *Physica* **B292**, 83 (2000).
5. Б.А. Иванов, А.К. Колежук, *ФНТ* **21**, 986 (1995).
6. M. Cieplak, *Phys. Rev. B* **15**, 5310 (1977).
7. W. Figueiredo and S.R Salinas, *Physica* **B124**, 259 (1984).
8. Ma Yu-qiang and W. Figueiredo, *Phys. Rev. B* **55**, 5604 (1997).
9. В.Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970).
10. J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
11. Э.А. Завадский, В.И. Вальков, *Магнитные фазовые переходы*, Наукова думка, Киев (1980).
12. В. Матвеев, *ЖЭТФ* **65**, 1626 (1973).
13. M. Nauciel-Bloch, G. Sarma, and A. Costets, *Phys. Rev.* **5**, 4603 (1972).
14. Э.Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Наука, Москва (1988).
15. Р.О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
16. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, С.Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **88**, 550 (1985).
17. В.В. Вальков, *ТМФ* **76**, 321 (1988).
18. Е.А. Туров, В.Г. Шавров, *УФН* **140**, 429 (1983).
19. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*. Часть 1. Наука, Москва (1976).
20. Ю.А. Изюмов, Ф.А. Кассан-Оглы, Б.Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, Москва (1974).
21. Yu.A. Fridman, Ph.N. Klevets, and O.V. Kozhevnikova, *J. Magn. Magn. Mater.* **264**, 111 (2003).
22. Ю.А. Фридман, Д.В. Спирин, *ФНТ* **26**, 664 (2000).
23. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, *Применение индевиантной метрики при переходе от атомного к бозевскому (бозевско-фермьевскому) представлению квантовых гамильтонианов*, Красноярск (1990). (Препр./ИФ СО АН СССР; № 644Ф).
24. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, *Применение индевиантной метрики для бозанизации SU(3)-гамильтонианов и квантовая теория спиновых нематиков*, Красноярск (1990). (Препр./ИФ СО АН СССР; № 667Ф).
25. Yu.A. Fridman, D.V. Spirin, C.N. Alexeyev, and D.A. Matiunin, *Eur. Phys. J.* **B26**, 185 (2002).
26. В.Г. Баряхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наукова думка, Киев (1984).

27. R.P. Erickson and D.L. Mills, *Phys. Rev.* **B46**, 861 (1992).
28. Е.А. Туров, А.А. Луговой, В.Д. Бучельников, Ю.А. Кузавко, В.Г. Шавров, О.В. Ян, *ФММ* **66**, 12 (1988).
29. Ю.Н. Мицай, А.Н. Майорова, Ю.А. Фридман, *ФТТ* **34**, 66 (1992).
30. H. Nagata, M. Žukovič, and T. Idogaki, *Magn. Magn. Mater.* **234**, 320 (2001).
31. Ю.Н. Мицай, Ю.А. Фридман, О.В. Кожемяко, О.А. Космачев, *ФНТ* **25**, 690 (1999).

The phase transitions in ferromagnets with
anisotropic biquadratic exchange interaction

Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, and F.N. Klevets

The phase states of the non-Heisenberg ferro-
magnetic with the anisotropy of both, the Hei-

senberg, and the biquadratic interactions, were investigated. The limiting cases of the considered system are the *XY*-model with the biquadratic interaction and the three-component non-Heisenberg ferromagnetic. The phase transitions on both, the material constants, and temperature for *2D*- and *3D*-magnets, were investigated. The phase diagrams of the system at various relations between the system parameters were built. It was shown that the soft-mode of the system under consideration is the quasimagnon excitations, but not the quasiphonon ones.

Keywords: non-Heisenberg ferromagnetic, phase transitions, *XY*-model, quadrupolar phase