О магнитных фазовых переходах типа смещения при спиновом упорядочении в магнетиках с сильной одноионной анизотропией

 В.М. Калита, В.М. Локтев*

Институт физики Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина
* Институт теоретической физики Национальной академии наук Украины,
03143 Киев, Украина
E-mail: vloktev@bitp.kiev.ua

(Поступила в Редакцию 30 октября 2002 г.
В окончательной редакции 20 января 2003 г.)

Показано, что магнитное упорядочение в магнетиках с целой величиной спинов ионов и достаточно большой величиной одноионной анизотропии типа легкая плоскость происходит в виде магнитного фазового перехода типа смещения. Параметром порядка при таких переходах является величина магнитной поляризации ионных состояний, которая возникает в точке фазового перехода спонтанным образом. Возникновение магнитоупорядоченного состояния в таких магнетиках происходит в результате конкуренции обменного взаимодействия и одноионной анизотропии.

Работа частично поддержана грантами 1.4.1ВЦ/95 и 0102U002332 НАН Украины.

Как известно, в магнетиках с анизотропией типа „легкая плоскость“ (ЛП) одноионная анизотропия (ОА) наряду с межионной оказывает ориентирующее воздействие на спины, но в то же время в отличие от последней препятствует установлению в системе магнитного порядка [1]. При этом влияние ОА, которая есть ни что иное как следствие наличия в системе кристаллического поля, действующего через спин-орбитальное взаимодействие на спины, подобно разупорядочению, вызываемому энтропией [2]. Роль ОА особенно возрастает в тех случаях, когда основное состояние переходных ионов в кубическом поле оказывается вырожденным („незамороженное“ орбитальное движение) либо в редкоземельных магнетиках. Для систем с целым спином нередко реализуются условия (см. [1]), когда нижайшими становятся относительно близкие три уровня, что позволяет проводить их описание с использованием простой спиновой модели с эффективным одноузельным спином S, равным 1. Ему соответствует простейший вид ОА, представляемый слагаемыми второй степени от операторов спиновых проекций. При этом в редкоземельных магнетиках параметры анизотропии бывают столь велики, что зачастую сравнимы с параметрами обменного взаимодействия (ОВ); такое обстоятельство приводило к тому, что в ранних работах анизотропные взаимодействия задавались в изинговском виде [3,4].

Несмотря на наличие ОВ при достаточно большой величине ЛП ОА в спиновых системах с целым S ненамагниченное состояние с отсутствующей средней ионной намагниченностью [1,5] реализуется не в силу равной заселенности всех спиновых состояний, а из-за того, что нижайшим оказывается синглетное (ван-флековское) состояние. Однако если даже в исходном состоянии такого синглетного магнетика намагниченность отсутствует, то под действием внешнего магнитного поля, ориентированного вдоль трудной оси, можно осуществить фазовый переход (ФП) из парамагнитного (ПМ) состояния в магнитоупорядоченное. В случае изинговских межспиновых взаимодействий и большой величины ОА этот ФП происходит как ФП I-го рода [1]. Если же между ионами реализуются изотропные межспиновые взаимодействия гейзенберговского типа, то такой ФП под действием магнитного поля будет II-го рода [2,6–8]. Как показано в [2], при достижении полем некоторого критического значения каждый ион поляризуется, а кристалл в целом становится намагниченным. Такой переход протекает непрерывно, и в [2] он был отнесен к „магнитному ФП типа смещения“. При этом в рассматриваемых магнитных системах никакого смещения самих ионов (магнитоупругость не учитывается) не происходит. Интерес же к подобным магнитным ФП вызван тем, что в настоящее время имеется немалое число магнетиков, ФП в которых могут быть отнесены к этому типу [9].

Термин „магнитный ФП типа смещения“ введен и использован в [2] с целью подчеркнуть, что рассматриваемый магнитный ФП не может быть отнесен к типу порядок–беспорядок. Принципиальное различие между такими типами переходов состоит в том, что во всех системах (магнитных и немагнитных), испытывающих ФП типа смещения, ионы характеризуются одноминимумным потенциалом, а в системах с ФП типа порядок–беспорядок — потенциалом по крайней мере с двумя минимумами.

Следует заметить, что возникновение магнитной структуры происходит при установлении в системе магнитного порядка с отличным от нуля средним значением магнитного момента иона [10]. В соответствии с современными представлениями формирование магнитной структуры в большинстве магнетиков протекает, как правило, путем магнитного ФП типа порядок–беспорядок [11]. На то, что ее установление может происходить именно таким образом, впервые было указано Ландау [12]. При этом спектр ПМ ионов, образующих решетку, перестраивается, состояния с противоположными направлениями спиновых проекций в точке ФП (и выше нее) становятся равновероятными, а система в целом переходит в неупорядоченное состояние.

Попытка отнесения перехода из синглетного состояния в ФМ к магнитному ФП типа смещения подразумевала, что к такому ФП, являющемуся по сути переходом типа порядок–беспорядок, неприменима терминология, используемая в [10,11]. Действительно, рассмотренный в [2] магнитополевой ФП отвечал случаю $T = 0$, в то время как при появлении магнитной структуры и формировании магнитоупорядоченного состояния в [10,11] речь идет о спонтанном, а не индуцированном внешнем полем понижении симметрии благодаря одновременному возникновению у ионов в точке Кюри (и ниже нее) магнитного момента. Как будет видно далее, такой переход в изотропном ФМ сопровождается существенной перестройкой одноионного спинового спектра и относится к ФП типа порядок–беспорядок. В связи с этим для доказательства принципиальной обоснованности использования понятия магнитного ФП типа смещения в анизотропных магнетиках необходимо рассмотреть возможность возникновения у ПМ ионов спонтанной намагниченности при понижении температуры, если их спектр сохраняет в процессе перехода свою исходную структуру, а средняя намагниченность кристалла формируется вследствие поляризации ионных состояний спонтанно возникающим обменным полем. Напомним, что при магнитных ФП типа порядок–беспорядок у ионов в ПМ состоянии проекции спина отличны от нуля, но из-за равновероятности атомных состояний среднее значение намагниченности иона и кристалла в целом равно нулю.

Магнитный ФП типа порядок–беспорядок из ПМ в ФМ (либо АФМ) состояние происходит как результат конкуренции ОВ, устанавливающих порядок, и энтропии, которая стремится к максимальному беспорядку в системе. При магнитном ФП типа смещения в точке T_C переход в магнитоупорядоченное состояние происходит иначе, как результат конкуренции двух типов взаимодействия: обменного и анизотропного.

Далее в качестве примера магнитного ФП типа смещения будет построена теория ФМ с изотропным ОВ между ближайшими спинами с $S = 1$ и ОА типа ЛП. ПП в этом случае служит поляризация ионных состояний.

Заметим, что ранее в [1,5,7–9] при описании магнитных ФП в таком ФМ обычным образом использовалось приближение среднего поля со средней намагниченностью в качестве ПП. Этот подход, однако, не позволяет выделить различия между магнитными ФП типа смещения и типа порядок–беспорядок.

1. Гамильтониан

Простейший гамильтониан рассматриваемой модельной ФМ системы может быть записан в виде

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\mathbf{n},\boldsymbol{\rho}} S_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}} + D\sum_{\mathbf{n}} \left(S_{\mathbf{n}}^{Y}\right)^2, \qquad (1)$$

где $J > 0$ — параметр ОВ между ближайшими спинами, а $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}$ вектора, задающие их позиции. Константа ОА положительна, $D > 0$, что отвечает ЛП типу анизотропии, а ось Y направлена вдоль трудной оси.

В магнитоупорядоченном состоянии при отсутствующем внешнем магнитном поле вектор среднего магнитного момента каждого из ионов будет лежать в ЛП. Направим ось Z вдоль вектора средней намагниченности, а ось X — перпендикулярно осям Z и Y. Далее, используя приближение среднего поля, запишем одноионный гамильтониан

$$H_0 = -h_{\text{ex}} S^Z + D\Big(2 - \left(S^Z\right)^2 - \left(S^X\right)^2\Big). \qquad (2)$$

Здесь h_{ex} — среднее (обменное) поле, действующее на спин иона и равное $h_{\text{ex}} = Jzs$, где s — среднее термодинамическое значение спина иона, $\mathbf{s} \parallel Z$, а z — число ближайших соседей.

Спектр гамильтониана (2) хорошо известен [13]; его собственные значения энергии имеют вид

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2}D - \sqrt{h_{\text{ex}}^2 + \frac{1}{4}D^2}, \quad \varepsilon_1 = D,$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2}D + \sqrt{h_{\text{ex}}^2 + \frac{1}{4}D^2}. \qquad (3)$$

Нижайшая энергия ε_0 соответствует основному состоянию; ε_1, ε_2 — возбужденным, причем, как следует из (3), всегда $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$. Значения проекций спина на ось Z в каждом из состояний соответственно равны

$$s_0 = \frac{h_{\text{ex}}}{\sqrt{h_{\text{ex}}^2 + D^2/4}}, \quad s_1 = 0, \quad s_2 = -s_0. \qquad (4)$$

Из (4) видно, что величины найденных проекций спина зависят от среднего поля h_{ex} или среднего значения спина $s = s(T)$, а через последнее — от температуры.

Интересно сравнить поведение одноионного спектра в случае обменного ФМ, когда $D = 0$ (выражения (3) и (4) допускают предельный переход $D \to 0$), и для ФМ с ОА типа ЛП, когда $D \to 2Jz$. При $T < T_C$ в первом случае $h_{\text{ex}} \neq 0$, расположение трех уровней эквидистантно и значения спиновых проекций равны: $s_0 = -s_2 = 1$, $s_1 = 0$. По достижении температурой критической точки ($T = T_C$) поле ОВ $h_{\text{ex}} = 0$, и у иона будет один трехкратно вырожденный уровень с энергией, равной нулю. В ПМ ($T > T_C$) состоянии внешнее поле $\mathbf{h} \perp Y$ снимает такое вырождение, но независимо от величины h (даже при $h \to 0$) проекции спина в каждом из состояний сохраняют свои значения, как и в ФМ состоянии. Таким образом, при $D = 0$ ФП между ФМ и ПМ состояниями происходит как переход типа порядок–беспорядок.

В анизотропном ФМ при немалых D (в частности, $D \to 2Jz$) величины проекций спина уже при $T = 0$ много меньше предельного значения $s_0(T=0) = \sqrt{1 - D^2/4J^2z^2} \ll 1$, т.е. $|2Jz - D| \ll D$ [1,2,5,7,9,13]. В этом случае во всем температурном интервале существования ФМ состояния (в том числе и при $T \to T_C$) имеет место неравенство $h_{\text{ex}} \ll D$. Трехуровневый спектр иона сохраняет квазидвухуровневую структуру: основной и два возбужденных уровня с близкими значениями энергии (величина расщепления между последними задается отношением $(h_{\text{ex}}/D)^2 \ll 1$), которые отделены от нижайшего на энергию $\sim D$. Величины проекций спина при $T \neq 0$, разумеется, меньше $s_0(T=0)$. С ростом T они только уменьшаются, а в точке ФП и во всем интервале температур в ПМ состоянии значения проекций спина во всех одноионных состояниях (включая и расщепление) равны нулю. В ПМ состоянии при введении внешнего поля дублет расщепляется, и если поле направлено в ЛП, то основное состояние понижает энергию. Когда же $\mathbf{h} \parallel Y$, расщепление уровней происходит без изменения энергии основного состояния. Это связано с тем, что магнитное поле, ориентированное вдоль трудной оси, не поляризует основного состояния ионов, оставляя его неизменным. Поле $\mathbf{h} \perp Y$ поляризует основное состояние иона. В частности, в ПМ состоянии величины проекций спина, наведенного этим полем, имеют тем большие значения, чем больше поле; когда же $h \to 0$, величины этих проекций обращаются в нуль.

Как того требует теория магнитных ФП, возникновение и ориентация среднего магнитного момента в ЛП будут определяться таким бесконечно малым полем [14]. Поэтому совершенно очевидно, что если основным ионным состоянием в ПМ фазе является синглет, заселенность которого всегда больше заселенности уровней вышележащего дублета, то отсутствие спонтанной намагниченности возможно только при $s_0 = 0$, Тем самым приходим к заключению, что в рассматриваемом анизотропном магнетике ПП при ФП из ФМ в ПМ состояние служит не величина полного среднего спина иона, а парциальная проекция спина в основном состоянии иона, которая и обращается в нуль в точке ФП. В отсутствии $\mathbf{h}$ возникновение спонтанной намагниченности в таком магнетике связано с процессом коллективной спонтанной поляризации одноионных состояний, которая самосогласованно провоцируется обменным полем. Теория, позволяющая учесть эти обстоятельства, может быть построена с использованием метода Горского–Брэгга–Вильямса [15].

2. Свободная энергия и уравнения состояния

Согласно определению, свободная энергия $F = E - TS_{\text{en}}$, где E — внутренняя энергия, а S_{en} — энтропия, которая в методе среднего поля является конфигурационной. Внутренняя энергия системы (1) в расчете на одну частицу записывается в виде

$$E = -\frac{Jz}{2} s^2 + D\left(2 - Q_{ZZ} - Q_{XX}\right), \qquad (5)$$

где Q_{ZZ}, Q_{XX} — связанные со спиновыми квадрупольными моментами ионов [13] термодинамические средние операторов $(S^Z)^2$, $(S^X)^2$. Выражение для энтропии стандартно

$$S_{\text{en}} = -\sum_{j=0,1,2,} p_j \ln p_j, \qquad (6)$$

где p_j — вероятности одноионных состояний (3), так что $\sum\limits_{j=0,1,2} p_j = 1$.

Используя отвечающие энергиям (3) собственные функции

$$\psi_0 = \cos\phi|\,1\rangle + \sin\phi|-1\rangle, \quad \psi_1 = |\,0\rangle,$$
$$\psi_2 = -\sin\phi|\,1\rangle + \cos\phi|-1\rangle \qquad (7)$$

гамильтониана (2), где $|\pm 1\rangle$ и $|0\rangle$ — собственные функции оператора S^Z, рассчитаем проекции спинового момента, а также и средние от операторов $(S^Z)^2$ и $(S^X)^2$. Из выражений (7) легко находим, что проекции спина в каждом из состояний принимают значения $s_0 = -s_2 = \cos 2\phi$, $s_1 = 0$; при этом парциальные средние оператора $(S^Z)^2$ постоянны и равны 1, 0, 1, а средние оператора $(S^X)^2$ равны $(1/2)(1 + \sin 2\phi)$, 1, $(1/2)(1 - \sin 2\phi)$ соответственно. Теперь согласно определению можно записать выражения для термодинамических средних s, Q_{ZZ}, Q_{XX}; имеем

$$s \equiv s(T) = \cos 2\phi \cdot p_0 - \cos 2\phi \cdot p_2$$
$$\equiv \cos 2\phi \cdot \Delta p, \quad \Delta p > 0, \qquad (8)$$

$$Q_{ZZ} = p, \qquad (9)$$

$$Q_{XX} = \frac{1}{2}(1 + \sin 2\phi)p_0 + p_1 + \frac{1}{2}(1 - \sin 2\phi)p_2$$
$$\equiv 1 - \frac{p}{2} + \frac{\Delta p}{2}\sin 2\phi, \qquad (10)$$

где введены переменные $p_0 + p_2 = p$, $p_0 - p_2 = \Delta p$. В них выражение (6) приобретет вид

$$S_{\text{en}} = -\frac{p + \Delta p}{2}\ln\frac{p + \Delta p}{2} - \frac{p - \Delta p}{2}\ln\frac{p - \Delta p}{2}$$
$$-(1 - p)\ln(1 - p). \qquad (11)$$

Окончательное выражение для свободной энергии ФМ с $S = 1$ и с ОА типа ЛП следует из (5) и (11) с учетом (8)–(10)

$$F = -\frac{1}{2}Jz(\Delta p)^2\cos^2 2\phi + D\left(1 - \frac{p}{2} - \frac{\Delta p}{2}\sin 2\phi\right)$$
$$+ T\left\{\frac{p + \Delta p}{2}\ln\frac{p + \Delta p}{2} + \frac{p - \Delta p}{2}\ln\frac{p - \Delta p}{2}\right.$$
$$\left. + (1 - p)\ln(1 - p)\right\}. \qquad (12)$$

Искомое равновесное состояние отвечает минимуму свободной энергии (12). При этом вариационными являются параметры ϕ, p и Δp. Минимизируя F по ним, получим уравнения состояния

$$2Jz\,(\Delta p)^2 \cos 2\phi \sin 2\phi - D\Delta p \cos 2\phi = 0, \tag{13}$$

$$-Jz\Delta p \cos^2 2\phi - \frac{D}{2}\sin 2\phi + \frac{T}{2}\ln\frac{p+\Delta p}{p-\Delta p} = 0, \tag{14}$$

$$-D + T\ln\frac{p^2-(\Delta p)^2}{4(1-p)^2} = 0. \tag{15}$$

Заметим, что варьирование F по углу ϕ (см. (7)) эквивалентно его нахождению с использованием нерациональной в данном конкретном случае (да и для $T \neq 0$ вообще) процедуры самосогласования [16], поскольку, как уже отмечалось, величина $s(T)$, определенная (8), не является ПП. Для ФМ состояния из (13) следует, что

$$\sin 2\phi = \frac{D}{2Jz\Delta p}. \tag{16}$$

Видно, что разность Δp существенным образом определяет $s_0(T)$ (4). В самом деле, с ростом T величина Δp уменьшается, и тем самым правая часть в уравнении (16) может достичь своего предельно допустимого значения $\sin 2\phi = 1$, которому соответствует достижение значения $\cos 2\phi = 0$. С другой стороны, величина проекции спина в основном состоянии равна

$$s_0(T) \equiv s_0 = \sqrt{1 - \frac{D^2}{4J^2z^2(\Delta p)^2}}. \tag{17}$$

Таким образом, полученная формула свидетельствует, что с ростом T парциальная проекция спина, отвечающая основному ионному состоянию, ведет себя так, что $s_0(T_C) = 0$. Температура T_C, начиная с которой выполняется соотношение $s_0 = 0$, есть температура магнитного ФП. В ней, как будет показано далее, магнитная восприимчивость ПМ фазы обращается в бесконечность, а сам ФП протекает непрерывно в виде ФП II-го рода.

Важно, что в точке ФП происходит не расщепление исходно вырожденных состояний и формирование намагниченности, а спонтанная (благодаря ОВ) поляризация ионных невырожденных состояний. При этом изменяется величина проекции спина основного состояния иона. Именно такой ФП из ПМ в ФМ состояние следует, по нашему мнению, относить к магнитному ФП типа смещения. Будучи невырожденным, ПМ состояние синглетного магнетика упорядочено, в нем $\Delta p \neq 0$, а $s_0 = 0$.

Величину T_C легко найти из уравнений (14) и (15) при условии (см. (16)), что $\sin 2\phi = 1$

$$T_C = \frac{D}{\ln\left(1+\frac{D}{Jz}\right) - \ln\left(1-\frac{D}{2Jz}\right)}. \tag{18}$$

В случае $D = 0$ из (18) находим, что для системы спинов с $S = 1$ $T_c = 2Jz/3$ [17]. При малых $D/Jz \ll 1$ преобладающим все еще является ориентирующее действие анизотропии, и поэтому, как следует из (18),

$$T_C = \frac{2}{3}Jz\left(1 + \frac{D}{4Jz}\right), \tag{19}$$

т.е. T_C растет, тогда как при значительном возрастании анизотропии, когда $D/2Jz \to 1$, T_C уменьшается вплоть до нуля (8) [1].

В области $T > T_C$ реализуется ПМ состояние с равной нулю намагниченностью. В нем всегда $\Delta p \neq 0$, но степень его упорядоченности зависит от температуры

$$\Delta p(T) = \frac{1 - e^{-\frac{D}{T}}}{1 + 2e^{-\frac{D}{T}}}. \tag{20}$$

В итоге, как видно из (20), полный беспорядок ($\Delta p \to 0$) реализуется в ПМ состоянии лишь при температурах, когда $D \ll T$. Если же $D \sim T$, то система в ПМ состоянии имеет высокую степень упорядоченности, обязанную достаточно большому различию в заселенности одноионных состояний. Поэтому если $T_C \sim D$, то ФП в ФМ состояние происходит как переход типа порядок–беспорядок.

3. Свободная энергия в случае предельно малого обменного поля

Обменное поле в анизотропном магнетике уменьшается не только по мере приближения температуры к точке ФП (при $T \to T_C$), но и в случае, когда величина анизотропии близка к ОВ. Так, если $D \leq 2Jz$, то при $T = 0$ величина $s_0 \ll 1$. Рассмотрим сначала этот случай, для чего из выражений (3), используя приближение $h_{\text{ex}}/D \ll 1$, запишем

$$\varepsilon_0 = -\frac{h_{\text{ex}}^2}{D}, \quad \varepsilon_1 = D, \quad \varepsilon_2 = D + \frac{h_{\text{ex}}^2}{D}. \tag{21}$$

Поскольку в предположении $h_{\text{ex}}/D \ll 1$ энергии $\varepsilon_{1,2} - \varepsilon_0 \approx D$, будем считать $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2$. Это в свою очередь означает, что можно пренебречь влиянием ОВ на заселенности этих уровней. В этом приближении заселенности уровней, а также вероятности $p(T)$, $\Delta p(T)$ во всем интервале температур (в том числе при $T < T_C$), будут в соответствии с выражением (20) определяться только величиной D/T. В результате единственной неизвестной (с неопределенной зависимостью от T) становится величина s_0, которая тем самым оказывается единственным ПП в данной задаче. Приняв при этом условие $s_0 \to 0$ и ограничиваясь разложением до 4-й степени, имеем

$$F = \frac{1}{4}\left[D\Delta p(T) - 2Jz\left(\Delta p(T)\right)^2\right] s_0^2 + \frac{1}{16} D\Delta p(T) s_0^4. \tag{22}$$

Заметим, что в принятом приближении коэффициент, стоящий в выражении (22) перед s_0^2, обращается в нуль при температуре T_C (18), полученной из точного решения.

Если представить выражение (22) в виде

$$F = \frac{1}{4}\Big[D(T) - 2J(T)z\Big]s_0^2 + \frac{1}{16}D(T)s_0^4, \qquad (23)$$

где введены обозначения $D(T) = D\Delta p(T)$ и $J(T) = J\big(\Delta p(T)\big)^2$, то из него следует, что свободная энергия оказывается совпадающей с разложением энергии основного состояния ЛП ФМ при $T = 0$ [2]. Температурно-зависимые параметры $J(T)$, $D(T)$ в (23) можно при этом рассматривать как эффективные, учитывающие заселенность уровней, причем ОВ пропорционально второй, а ОА — первой степени $\Delta p(T)$. Такой характер зависимости величин эффективных ОВ и ОА от T вполне понятен, ибо первым представлено двухчастичное взаимодействие, а вторая по своей природе одночастична.

Используя теперь для F приближенное выражение (23), определим температурное поведение статической магнитной восприимчивости (СМВ) χ в ПМ фазе для случая, когда $\mathbf{h} \perp Y$. Тогда при $h \to 0$ величина $\chi = \partial s/\partial h_{h\to 0}$. Наличие поля h учитывается в гамильтониане (1) зеемановским слагаемым, приводящем к тому, что из энергии (5) необходимо вычесть произведение hs. Соответственно в выражениях (12) и (23) для F вычитается произведение $h\Delta p\cos 2\phi$. В уравнениях состояния (13) и (14) также появится по одному слагаемому, связанному с таким ее изменением. Теперь уравнение состояния для энергии (23) переходит в следующее:

$$\frac{1}{2}\Big[D(T) - 2J(T)z\Big]s_0 + \frac{1}{4}D(T)s_0^3 - h\Delta p = 0. \qquad (24)$$

Исходя из (8), выражение для величины χ будет записано в виде двух составляющих

$$\chi = s_0\left.\frac{\partial \Delta p}{\partial h}\right|_{h\to 0} + \Delta p\left.\frac{\partial s_0}{\partial h}\right|_{h\to 0}. \qquad (25)$$

Первая из них в (25) связана с изменением заселенности уровней вследствие введения h при постоянной T, так как состояния с проекцией спина вдоль поля энергетически более выгодны, чем состояния с противоположной или отсутствующей проекциями. Именно такой вклад определяет СМВ при $h \to 0$ в изотропных ФМ, в ПМ фазе которых спиновые проекции равны числам ($s_0 = S$, $s_1 = S - 1$ и т.д.), а следовательно, второе слагаемое отсутствует в принципе.

Вторая составляющая в (25) обусловлена процессом поляризации магнитным полем одноионных состояний. В ФМ с ОА типа ЛП этот вклад возникает благодаря возникающей величине s_0 (при заданном Δp). Заметим, что, как было показано выше, в ПМ фазе $s_0 = 0$, поэтому вклад в χ от первого слагаемого здесь отсутствует. Таким образом, намагничивание в ПМ фазе ЛП ФМ происходит вследствие поляризации ионных состояний внешним магнитным полем.

Дифференцируя (24) по h, определим производную $\partial s_0/\partial h$. Проведя необходимые вычисления с учетом температурной зависимости (20) для Δp, приходим к СМВ в виде

$$\chi = 2\,\frac{1 - e^{-\frac{D}{T}}}{D - 2Jz + 2(D + Jz)\,e^{-\frac{D}{T}}}. \qquad (26)$$

Несмотря на приближенное выражение для энергии (22), знаменатель выражения (26) в точке ФП при $T = T_C$ (см. (18)) обращается в нуль, а величина $\chi \to \infty$. Из (26) также следует, что температурный ход СМВ по мере приближения к T_C отклоняется от закона Кюри–Вейсса. Такое отличие обязано сохраняющейся упорядоченности в меру $\Delta p \neq 0$ (см. (20)) ПМ состояния, а также температурной зависимости производной $\partial s_0(T)/\partial h$, определяющей поляризацию ионов под действием $\mathbf{h}$.

При высоких T, когда $D/T \ll 1$ и в ПМ состоянии реализуется полный беспорядок ($\Delta p(T) \to 0$), температурный ход СМВ будет таким же, как и в изотропном ФМ, ПМ состояние которого всегда полностью разупорядочено, а именно

$$\chi = \frac{2}{3}\,\frac{1}{T - T_\theta}, \qquad (27)$$

где $T_\theta = 2/3(Jz + D)$ — ПМ температура Кюри. Для всех значений параметров ОА и ОВ $T_\theta \neq T_C$, причем $T_C < T_\theta$; другими словами, не выполняется квазиклассическое приближение, согласно которому термодинамические средние от спиновых операторов второй степени можно заменять квадратами соответствующих термодинамических средних. Для систем с ФП типа порядок–беспорядок такое приближение сохраняет свою пригодность.

Таким образом, в случае сильно анизотропного ФМ с ЛП типом ОА можно использовать приближенное выражение (23) для описания ФП в ФМ состояние с температурно зависимыми ОВ и ОА.

Разложение F по s_0 всегда имеет место (без ограничения на величины отношения D/Jz, лишь бы $D/2Jz < 1$) вблизи точки ФП, когда $T \to T_C$. В этом случае в магнитоупорядоченном состоянии малое обменное поле также не может существенным образом влиять на заселенности уровней, величины которых будут определяться только отношением D/T. Учитывая, однако, что такое приближение выполняется для малого интервала температур ΔT вблизи точки T_C, температуру в разложении F представим в виде $T = T_C - \Delta T$. Теперь выражение для F можно записать подобно термодинамическому потенциалу Ландау

$$F = \frac{1}{2}\,\alpha\cdot\Delta T s_0^2 + \frac{1}{16}D\Delta p(T_C)s_0^4, \qquad (28)$$

где использован параметр

$$\alpha = \frac{1}{2}\Big[4Jz\Delta p(T_C) - D\Big]\partial\Delta p/\partial T_{T=T_C}.$$

Минимизируя (28) по s_0, определим зависимость $s_0(T)$ в ФМ состоянии вблизи точки ФП. При $T < T_C$ проекция спина зависит от температуры стандартным для ФП II-го рода образом

$$s_0(T) = 2\sqrt{\frac{|\alpha|}{D\Delta p(T_C)}\Delta T}. \qquad (29)$$

Согласно (8) среднее термодинамическое значение спина в ФМ состоянии представляется в виде произведения двух параметров порядка, $s = s_0\Delta p$. В ПМ состоянии вплоть до точки ФП основным состоянием иона будет синглет и $\Delta p(T > T_C) \neq 0$. Поэтому величина среднего спина $s(T) = 0$, если $s_0(T > T_C) = 0$. Несмотря на то что среднее термодинамическое значение спина зависит от s_0, видно, что его температурный ход $s(T)$ вблизи ФП имеет то же критическое поведение

$$s(T) = 2\sqrt{\frac{|\alpha|\Delta p(T_C)}{D}\Delta T}. \qquad (30)$$

Это согласуется с феноменологической теорией фазовых переходов II-го рода, когда потенциал Ландау может быть представлен функционалом, в котором ПП служит средний спин (либо средняя намагниченность). Но тогда при использовании теории с таким ПП [5], учитывающей только изменение симметрии, магнитные ФП из ПМ в ФМ типа смещения и типа порядок–беспорядок будут описываться одинаково; другими словами, при феноменологическом подходе эти ФП неразличимы.

Заметим, что выражение (23) получено в одноионном приближении среднего поля и является справедливым, в том числе для неравенства $D/2Jz \ll 1$. В этом случае, как отмечалось, $D/T_C \ll 1$ и величина $\Delta p(T_C) \to 0$. При таких условиях необходимо учитывать флуктуации, интенсивность которых сильно возрастает по мере приближения к точке ФП [15,17]. Возникающие флуктуационные поля существенно изменят спектр ионных состояний, так что он не будет соответствовать спектру, полученному в одноионном приближении. Флуктуации также окажут влияние и на поляризацию ионных состояний. Поэтому выражение (23) будет справедливым лишь когда отношение $D/2Jz$ не мало и когда интервал $T - T_C$ (по крайней мере, в магнитоупорядоченной фазе) перекрывает флуктуационную область. Это замечание не относится к первому случаю, когда $D \to 2Jz$.

Из проведенных расчетов следует, что ФП системы ионов с $S = 1$ и ОА типа ЛП в ФМ состояние происходит в результате спонтанного возникновения отличной от нуля проекции спина у невырожденного состояния магнитного иона. Критический характер такой поляризации обусловлен конкуренцией ОВ и ОА.

Возникновение у ионов в таких магнетиках магнитного момента и переход в ФМ состояние нельзя отнести к наиболее распространенным магнитным ФП типа порядок–беспорядок. Из полученных результатов следует, что описанный ФП между ПМ и ФМ состояниями, происходящий при изменении температуры и в отсутствие внешнего магнитного поля, может быть отнесен к магнитным ФП типа смещения.

Мы признательны С.М. Рябченко, обратившему наше внимание на аналогию между процессом магнитного упорядочения в магнетиках с сильной ОА и процессом упорядочения в ферроэлектриках типа смещения.

Список литературы

[1] А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов. Редкоземельные ионы в магнитноупорядоченных кристаллах. Наука, М. (1985).

[2] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФНТ **28**, 1254 (2002).

[3] H.W. Capiel. Physica **32**, 966 (1966); **33**, 295 (1967).

[4] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths. Phys. Rev. **A4**, 1071 (1971).

[5] Э.Л. Нагаев. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. Наука, М. (1988).

[6] Ф.П. Онуфриева. ЖЭТФ **89**, 2270 (1985).

[7] Ю.Н. Мицай, А.Н. Майорова, Ю.А. Фридман. ФТТ **34**, 66 (1992).

[8] В.В. Вальков, Г.Н. Мацулева. Приперинт ИФ СО АН СССР № 645Ф (1987).

[9] M.F. Collins, O.A. Petrenko. Can. J. Phys. **75**, 605 (1997).

[10] В.Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов. В кн.: Физика твердого тела: Энциклопедический словарь. Т. 1. Наук. думка, Киев (1996). С. 488.

[11] В.А. Львов. В кн.: Физика твердого тела: Энциклопедический словарь. Т. 1. Наук. думка, Киев (1996). С. 496.

[12] Л.Д. Ландау. Собрание трудов. Т. 1. Наука, М. (1967). С. 234.

[13] В.М. Локтев, В.С. Островский. ФНТ **20**, 983 (1994).

[14] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1988).

[15] Р. Браут. Фазовые переходы. Мир, М. (1967).

[16] В.М. Калита, В.М. Локтев. ФНТ **28**, 667 (2002).

[17] Дж. Смарт. Эффективное поле в теории магнетизма. Мир, М. (1968).