

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ЛЕГКОПЛОСКОСТНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКАХ ПРИ НАЛИЧИИ МЕХАНИЧЕСКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Ю. Н. Мицай, доктор физ.-мат наук, профессор,

Ю. А. Фридман, кандидат физ.-мат. наук, доцент, О. В. Кожемяко

Учет механических граничных условий играет важную роль в термодинамике магнетиков. Это обстоятельство весьма важно при интерпретации экспериментальных исследований, поскольку учет механических граничных условий в реальном эксперименте есть ничто иное как учет того или иного способа крепления исследуемого образца. Несмотря на всю важность этого вопроса, он изучен крайне недостаточно [1,2].

Учет механических граничных условий прежде всего сказывается на поведении спонтанных деформаций кристалла. Исследование спонтанных деформаций кристалла проведем, как обычно, включая в рассмотрение магнитоупругое (МУ) взаимодействие в системе, наряду с другими релятивистскими взаимодействиями. Для адекватного описания системы недостаточно учета МУ взаимодействия в линейном приближении. Необходимо учитывать так называемую вращательную инвариантную теорию МУ связи [2,3]. Предсказание нового механизма МУ связи есть один из результатов этой теории.

Качественно суть этого механизма можно представить следующим образом. При прохождении упругой волны через кристалл, элементарная ячейка не только изменяет свой объем, но испытывает сдвиговые деформации. В результате изменяется положение локальных осей магнитной анизотропии, пространственная ориентация которых определяет равновесное направление магнитного момента.

Таким образом, даже в отсутствии стандартной магнитоупругой связи, описываемой слагаемыми вида $\nu M^i M^k U_{ik}$, связь между магнитной и упругой подсистемами будет обеспечиваться за счет энергии одноионной анизотропии $\frac{\beta}{2} (\vec{n}\vec{M})^2$. Здесь введены следующие обозначения:

ν - константа МУ связи,

U_{ik} - симметричная часть тензора дисторсии,

M_i - плотность магнитного момента,

$\beta > 0$ - константа одноионной анизотропии,

\vec{l} - вектор, определяющий положение локальной оси анизотропии.

Как уже отмечалось выше, механические граничные условия существенно влияют на структуру спонтанных деформаций в магнитоупорядоченном кристалле. Последние определяют основные характеристики спектров МУ волн и типы фазовых переходов между магнитоупорядоченными фазами.

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ЛЕГКОПЛОСКОСТНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА ПРИ НАЛИЧИИ МЕХАНИЧЕСКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Рассмотрим простейшую ситуацию, в которой исследуемые эффекты проявляются наиболее наглядно, то есть область низких температур ($T \ll T_c$, где T_c - температура Кюри). Не теряя общности, для простоты вычислений будем считать спин магнитного иона $S=1$.

В качестве модельной системы рассмотрим легкоплоскостной ферромагнетик (ХОУ - базисная плоскость), помещенный в однородное магнитное поле H , параллельное оси ОZ.

Гамильтониан такой системы, с учетом вращательной инвариантности, можно представить в виде:

$$H = -H \sum_n S_n^z + \frac{\beta}{2} \sum_n (R_{zi}^{-1} S_n^i)^2 - \frac{1}{2} \sum_{n, n'} J(n - n') \vec{S}_n \vec{S}_{n'} + v \sum_n (R_{if}^{-1} S_n^f) (R_{jg}^{-1} S_n^g) \epsilon_{ij}(n) + \int dr \left\{ \frac{\lambda + \eta}{2} (\epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{yy}^2 + \epsilon_{zz}^2) + 2\eta (\epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2 + \epsilon_{yz}^2) + \lambda (\epsilon_{xx} \epsilon_{yy} + \epsilon_{xx} \epsilon_{zz} + \epsilon_{yy} \epsilon_{zz}) \right\} \quad (1)$$

В (1) введены следующие обозначения:

$J(n - n')$ - обменный интеграл,

S_n^α - спиновый оператор в узле n ,

λ, η - упругие модули кристалла,

\hat{R}_{ij} - оператор локальных поворотов, который можно представить в

следующем виде: $\hat{R}_{ij}^{-1} = \delta_{ij} - \omega_{ij} + \frac{1}{2} \omega_{ij}^2 + \frac{1}{2} (U_{ik} \omega_{kj} - \omega_{ik} U_{kj}) + O(U_{ij}^3)$

$\epsilon_{ij} = U_{ij} + \frac{1}{2} (U_{ik} - \omega_{ik}) (U_{kj} + \omega_{kj})$ - тензор конечных деформаций, а

$U_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$, $\omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$ - симметричная и антисимметричная

части тензора дисторсии $\frac{\partial U_i}{\partial x_j}$ соответственно.

Первые три слагаемые в (1) описывают магнитную подсистему, пятое - упругую, а четвертое - МУ связь. Предположим далее, что исследуемый образец жестко закреплен по плоскости ZOX

(см. рис 1). Такое закрепление образца соответствует следующим механическим граничным условиям:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = 0, \\ \varepsilon_{yy} = U_{yy} + \frac{1}{2}U_{yy}^2 + 2U_{yz}^2 \\ \varepsilon_{yz} = U_{yz}, \quad U_{yz} = -\omega_{yz} \end{aligned} \quad (2)$$

Дальнейшие вычисления будем проводить в рамках формализма операторов Хаббарда [4,5]. В терминах хаббардовских операторов удастся точно учесть энергию одноионной анитропии и энергию МУ связи.

Хаббардовские операторы строятся в базе волновых функций, являющихся решением одноионной задачи:

$$\mathbf{H}_0(n)\psi_n(M) = E_M\psi_n(M) \quad (3)$$

и имеют вид $X_n^{MM'} \equiv |\psi_n(M')\rangle\langle\psi_n(M)|$.

Эти операторы описывают переход магнитного иона из состояния M в состояние M' ($M = -1, 0, 1$).

Одноионный гамильтониан имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0(n) = & -(H\cos\Theta + J_0\langle S \rangle)S_n^z - \frac{1}{2}H(S_n^+ - S_n^-)\sin\Theta + \frac{\beta}{2}(S_n^z)^2\cos^2\Theta - \\ & - \frac{\beta}{8}\left\{(S_n^+)^2 + (S_n^-)^2 - S_n^+S_n^- - S_n^-S_n^+\right\}\sin^2\Theta + i\frac{\beta}{8}\left\{S_n^+S_n'^+ + S_n'^+S_n^- - S_n'^-S_n^+ + S_n^-S_n'^-\right\}\sin 2\Theta \end{aligned}$$

В (4) приняты следующие обозначения:

J_0 - нулевая фурье-компонента обменного интеграла.

Θ - угол между направлением магнитного поля и направлением магнитного момента.

Этот угол может быть отличным от нуля по двум причинам (см. рис. 2). Во-первых, сдвиговые деформации отклоняют ось анизотропии от направления существующего в недеформированном кристалле. Во-вторых, при уменьшении магнитного поля магнитный момент отклоняется от направления H в сторону легкой плоскости. Появление отличного от нуля Θ в стандартной теории спин-переориентационных фазовых переходов трактуется как фазовый переход и (при $\Theta \ll 1$) играет роль параметра порядка.

Далее будем считать, что $\Theta \ll 1$, т.е. мы находимся вблизи точки перехода угловая ($\Theta \neq 0$) - ФМ ($\Theta = 0$) фаза.

Решение уравнения (3) приводит к следующим результатам. Уровни энергии магнитного иона определяются формулами:

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \bar{H} + \frac{J_0 \langle S \rangle}{2} \cdot \frac{\frac{\beta}{2} - \bar{H}}{\frac{\beta}{2} - \bar{H}} \Theta^2$$

$$E_0 = \frac{\beta J_0^2 \langle S \rangle^2}{2(\bar{H}^2 - \frac{\beta^2}{4})} \Theta^2 \quad (4)$$

$$E_{-1} = \frac{\beta}{2} + \bar{H} - \frac{J_0 \langle S \rangle}{2} \cdot \frac{\frac{\beta}{2} + \bar{H}}{\frac{\beta}{2} + \bar{H}} \Theta^2$$

где $\bar{H} = H + J_0 \langle S \rangle$. С учетом вклада спонтанных деформаций в одноионный гамильтониан, перепишем модифицированную одноионную задачу следующим образом:

$$\tilde{H}_0(\mathbf{n}) \tilde{\psi}_n(M) = \tilde{E}_M \tilde{\psi}_n(M) \quad (5)$$

где:

$$\tilde{H}_0(\mathbf{n}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{n}) + \mathbf{H}_{My}(\mathbf{n}) + \mathbf{H}_{AMy}(\mathbf{n}),$$

$\mathbf{H}_{My}(\mathbf{n})$ - четвертое слагаемое в гамильтониане (1), а

$$\mathbf{H}_{AMy}(\mathbf{n}) = \frac{\beta}{2} (\mathbf{R}_{zi}^{-1} \mathbf{S}_n^i)^2 - \frac{\beta}{2} (\mathbf{S}_n^z)^2.$$

Последнее слагаемое описывает отклонение оси анизотропии от направления, существующего в недеформированном кристалле.

Окончательно, для уровней энергии магнитного иона с учетом спонтанных деформаций получены следующие результаты:

$$\tilde{E}_1 = \frac{\beta}{2} - \bar{H} + \frac{1}{2} \left(\nu U_{yy}^{(0)2} + \beta U_{yz}^{(0)2} + \frac{\bar{H} \frac{\beta}{2}}{\frac{\beta}{2} - \bar{H}} U_{yz}^{(0)2} \right) + \varepsilon_1^{(1)} + \varepsilon_2^{(1)} + \varepsilon_3^{(1)} + \varepsilon_4^{(1)};$$

$$\tilde{E}_0 = \nu U_{yy}^{(0)2} - \frac{\bar{H}^2 \frac{\beta}{2}}{\frac{\beta^2}{4} - \bar{H}^2} U_{yz}^{(0)2} + \varepsilon_1^{(0)} + \varepsilon_2^{(0)} + \varepsilon_3^{(0)} + \varepsilon_4^{(0)}; \quad (6)$$

$$\tilde{E}_{-1} = \frac{\beta}{2} + \bar{H} + \frac{1}{2} \left(\nu U_{yy}^{(0)2} + \beta U_{yz}^{(0)2} + \frac{\bar{H} \frac{\beta}{2}}{\bar{H} + \frac{\beta}{2}} U_{yz}^{(0)2} \right) + \varepsilon_1^{(-1)} + \varepsilon_2^{(-1)} + \varepsilon_3^{(-1)} + \varepsilon_4^{(-1)}$$

где:

$U_{ij}^{(0)}$ - спонтанные деформации,

$\varepsilon_n^{(M)}$ - поправки к энергетическим уровням по степеням угла.

Эти величины имеют громоздкий вид, поэтому в качестве примера приведем лишь некоторые из них:

$$\varepsilon_1^{(1)} = \Theta \frac{J_0 \langle S \rangle}{\bar{H} - \frac{\beta}{2}} U_{yz}^{(0)} \left\{ -\frac{\beta}{2} + \frac{\beta}{4} (U_{yz}^{(0)} + U_{yy}^{(0)}) \right\},$$

$$\varepsilon_2^{(1)} = \Theta^2 \left\{ \frac{H - \frac{\beta}{2} J_0 \langle S \rangle - \frac{\beta}{2} H}{2\bar{H} - \beta} + \nu U_{yy}^{(0)} B_1 + \frac{\beta}{4} U_{yz}^{(0)2} C_1 \right\} \quad (7)$$

$B_1 \approx 0, C_1 \approx 0.$

Поскольку мы исследуем низкотемпературный предел, то можем ограничиться учетом лишь нижайшего энергетического уровня. Как видно из (6), нижайшим уровнем в данном случае будет \tilde{E}_1 . Дальнейшие вычисления будем проводить в приближении $J_0 \gg \beta, \nu, H$.

Спонтанные деформации и угол отклонения намагниченности от направления магнитного поля определим из условия минимума плотности свободной энергии:

$$F = F_{\text{отд}} - T \ln Z \quad (8)$$

где:

$$F_{\text{отд}} = \frac{\lambda + \eta}{2} \varepsilon_{yy}^{(0)2} + 2\eta \varepsilon_{yz}^{(0)2} - \text{плотность упругой энергии,}$$

$$Z = \sum_M e^{-\tilde{E}_M / T} - \text{статистическая сумма.}$$

Поскольку \tilde{E}_1 - нижайший энергетический уровень, то $Z \approx e^{-\tilde{E}_1 / T}$. а (8) принимает вид:

$$F = \frac{1}{2} (\lambda + \eta) \varepsilon_{yy}^{(0)2} + 2\eta \varepsilon_{yz}^{(0)2} + \tilde{E}_1 \quad (9)$$

Подставляя (6) в (9) и минимизируя последнее выражение по U_{yy} и U_{yz} , получим систему уравнений относительно спонтанных деформаций. Решение этих уравнений следующее:

$$U_{yy}^{(0)} = -\frac{\nu}{2\eta} - \Theta^2 \frac{J_0^2 \langle S \rangle^2}{2(\bar{H} - \frac{\beta}{2})^2} \cdot \frac{(\frac{\beta}{2} - \nu)(\frac{\beta}{4} - \nu)}{\eta^2} \quad (10)$$

$$U_{yz}^{(0)} = \frac{\Theta J_0 \langle S \rangle}{2(\bar{H} - \frac{\beta}{2})} \cdot \frac{\frac{\beta}{2} - \nu}{\eta}$$

Подставляя явный вид спонтанных деформаций в (9), получим плотность свободной энергии, как функцию параметра порядка :

$$\begin{aligned}
 F = & \frac{\nu^2}{8\eta} + \Theta^2 \frac{J_0^2 \langle S \rangle^2}{(2\bar{H} - \frac{\beta}{2})^2} \frac{\beta - \nu}{\eta} \left\{ \frac{\beta}{4} \frac{\beta - \bar{H}}{\beta - \bar{H}} \frac{\beta - \nu}{\eta} - \frac{\beta}{2} + \nu - \frac{\nu\beta}{2\eta} \right\} + \Theta^2 (A_1 - \frac{\nu^2}{2\eta} B_1) + \\
 & + \Theta^3 \frac{J_0^3 \langle S \rangle^3}{(2\bar{H} - \frac{\beta}{2})^3} \frac{\beta}{\eta^2} \left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^2 + \Theta^4 (A_4 - \frac{\nu^2}{2\eta} B_4) + \Theta^4 \left\{ \frac{J_0 \langle S \rangle}{2\bar{H} - \beta} \frac{\beta - \nu}{\eta} \left(\frac{\beta}{4} C_1 - \nu B_1 \right) + \right. \\
 & \left. + \nu B_2 - \frac{\beta}{2} A_2 - \beta \frac{J_0^3 \langle S \rangle^3}{(2\bar{H} - \frac{\beta}{2})^3} \frac{(\beta - \nu)(\beta - 2\nu)}{\eta^2} \right\} \frac{J_0 \langle S \rangle}{2\bar{H} - \beta} \frac{\beta - \nu}{\eta}, \quad (11)
 \end{aligned}$$

где:

$$A_1 = \frac{H - \frac{\beta}{2}}{2}, \quad B_1 \approx 0, \quad C_1 \approx 0, \quad A_2 = B_2 \approx 1, \quad A_4 = \frac{\beta}{12}, \quad B_4 \approx 0$$

Как видно из (11) плотность свободной энергии отличается от стандартного вида наличием слагаемого, пропорционального Θ^3 . Это слагаемое появляется в связи с учетом вращательной инвариантности, а также наличием недиагональных спонтанных деформаций, являющихся следствием изучаемых нами механических граничных условий.

Если сравнить выражение (11) с соответствующим выражением для полностью свободного образца, или образца, зажатого со всех сторон [2], то легко заметить, что их принципиальное различие состоит в наличии этого слагаемого. Таким образом, очевидно, что учет соответствующих механических граничных условий приводит к изменению функциональной зависимости плотности свободной энергии.

Минимизируя (11) по можно достаточно легко получить зависимость от величины магнитного поля H , константы анизотропии и других материальных констант:

$$\begin{aligned}
 \Theta = & \frac{1}{4} \left\{ \frac{3}{16} \frac{\beta \left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^2}{\eta^2} - \left[8 \left(H - \frac{\beta}{2} \right) \frac{\left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^2}{\eta} \left(1 + \frac{\beta}{8\eta} \left(1 + \frac{\beta - \nu}{\eta} \right) \right) - \frac{\beta}{6} \right] + \right. \\
 & \left. + \frac{\beta - \nu}{\eta} \left[\left(\left(\frac{\beta - \nu}{2} \right) \left(\frac{\beta}{4\eta} - 1 \right) - \frac{\nu\beta}{2\eta} \right) 4 \frac{\left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^2}{\eta} \left(1 + \frac{\beta}{8\eta} \left(1 + \frac{\beta - 2\nu}{\eta} \right) \right) - \frac{\beta}{6} \right] + \right. \\
 & \left. + \frac{9}{256} \frac{\beta^2 \left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^3}{\eta^3} \right]^{1/2} \left\{ \frac{\left(\frac{\beta - \nu}{2} \right)^2}{\eta} \left[1 + \frac{\beta}{8\eta} \left(1 + \frac{\beta - 2\nu}{\eta} \right) \right] - \frac{\beta}{6} \right\}^{-1}. \quad (12)
 \end{aligned}$$

Из условия $\Theta = 0$ можно определить поле ориентационного фазового перехода угловая - ФМ - фаза. Отметим, что этот фазовый переход одновременно является и структурным переходом.

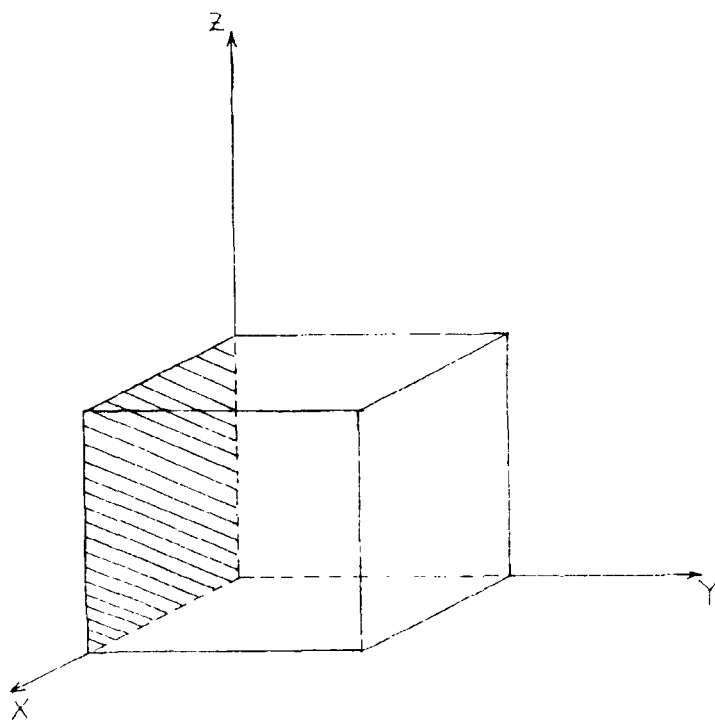


Рис.1. Способ крепления образца.

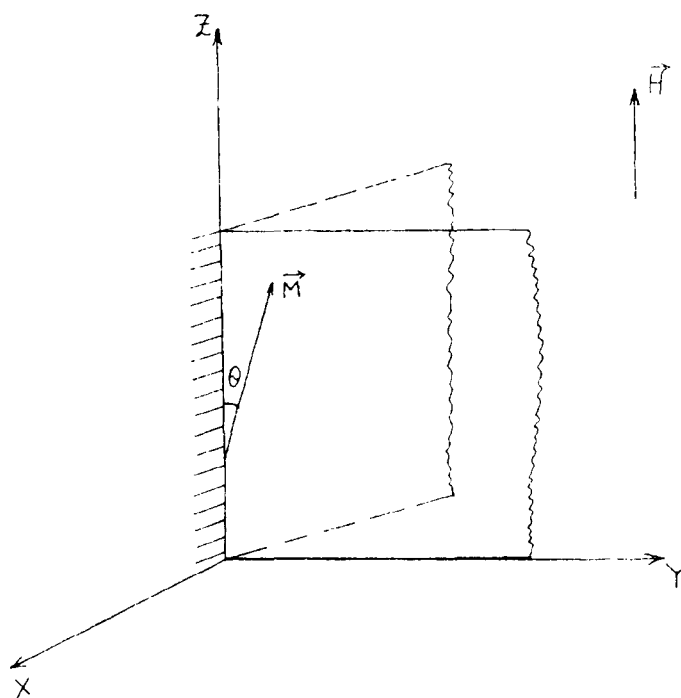


Рис.2. Ориентация средней намагниченности образца при наличии механических граничных условий.

В рассматриваемом случае поле перехода H_c имеет следующий вид:

$$H_c = \frac{\beta}{2} - \frac{\frac{\beta}{2} - \nu}{2\eta} \left\{ \frac{\frac{\beta}{2} - \nu}{4} \frac{\beta}{\eta} - \frac{\beta}{2} + \nu - \frac{\nu\beta}{2\eta} \right\} \quad (13)$$

Необходимо отметить, что для свободного образца (или равномерно зажатого со всех сторон) в теории без учета вращательной инвариантности, поле перехода $H_c = \frac{\beta}{2}$ [5], т.е. МУ связь не перенормирует поле перехода. Для такого же образца, но с учетом вращательной инвариантности [2]:

$$H_c = \frac{\beta}{2} + \frac{\left(\frac{\beta}{2} - \nu\right)^2}{2\eta} - \frac{\nu^2}{2\eta}.$$

В этом случае МУ связь перенормирует величину поля перехода.

Как видно из (12) и (13) при $\eta > \beta$ система испытывает фазовый переход второго рода. Однако ситуация может координально измениться при $\eta < 0.72\beta$. В этом случае поле $H = H_c$, описываемое формулой (13), также будет полем переориентационного фазового перехода. Но в этом случае фазовый переход будет являться фазовым переходом первого рода, поскольку при:

$$H_0 = H_c - \frac{9}{2048} \frac{\beta^2 \left(\frac{\beta}{2} - \nu\right)^4}{\eta^4} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\beta}{2} - \nu\right)^2 \left[1 + \frac{\beta}{8\eta} \left(1 + \frac{\frac{\beta}{2} - 2\nu}{\eta} \right) \right]^{-\frac{\beta}{6}}} \quad (14)$$

угол Θ становится равным:

$$\Theta_0 = \frac{3}{64} \cdot \frac{\beta \left(\frac{\beta}{2} - \nu\right)^2}{\eta^2} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\beta}{2} - \nu\right)^2 \left[1 + \frac{\beta}{8\eta} \left(1 + \frac{\frac{\beta}{2} - 2\nu}{\eta} \right) \right]^{-\frac{\beta}{6}}},$$

а при $H \leq H_0$ (и $\eta < 0.72\beta$) коэффициент при ν в выражении (11) меняет свой знак. Такое поведение коэффициентов в разложении (11) свидетельствует о том, что система претерпевает фазовый переход первого рода. Этот результат согласуется с известными результатами теории фазовых переходов [8].

Таким образом, закрепление образца, т.е. наложение механических граничных условий, может привести к изменению типа фазового перехода (при определенном соотношении материальных констант).

Необходимо отметить, что приведенное выше ограничение на упругий модуль η и константу одноионной анизотропии β не являются экзотическими, а вполне реально для целого ряда материалов. Так, например, для редкоземельных магнетиков Dy, Tb и т.п. константа одноионной анизотропии $\beta \approx 10^9$ эрг/см³ [6], кроме того, эти вещества обладают "гигантской" магнитострикцией $\frac{\Delta l}{l} \approx \frac{\nu}{\eta} \approx 10^{-2} \div 10^{-3}$ [6]. Отсюда можно легко оценить η . Так, например, для сплавов редкоземельных металлов $\nu \approx 10^6 \div 10^7$ эрг/см³ [7]. Отсюда следует, что $\eta \approx 10^8 \div 10^9$ эрг/см³, что вполне соответствует полученному нами условию $\eta < 0.72 \beta$.

Учет механических граничных условий существенно влияет на поведение в окрестности фазовых переходов. Прежде всего это влияние оказывается на изменение функциональной зависимости свободной энергии, как функции параметра порядка.

Как следствие этого может измениться тип фазового перехода при определенных соотношениях материальных констант магнетика. Если же тип фазового перехода не изменился, то в этом случае существенным образом перенормируется поле перехода.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Г. Барьяхтар, И. М. Витебский, И. М. Лавриненко, В. Л. Соболев ЖЭТФ, 90, 3, 1111-1117 (1986).
2. И. М. Витебский, И. М. Лавриненко, А. Н. Майорова, Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман Препринт ИМК.- 93-8, Харьков. 21 с (1993).
3. В. Г. Барьяхтар, Е. А. Туров В сб. Электронная структура и электронные свойства металлов и сплавов. Киев (1988). 39-70.
4. Р.О. Зайцев ЖЭТФ, 63, 1, 207-215 (1975).
5. Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман ТМФ, 81, 2, 263-270 (1989).
6. И. Е. Дикштейн, Е. А. Туров, В. Г. Шавров. В сб. Динамические и кинетические свойства магнетиков. Москва (1986), 69-103.
7. S. Yoshino, M. Masuda, H. Takahashi, S. Tsunashima, S.Uchiyama J. Appl. Phys. 64, 10, 5498-5500 (1988).
8. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский Флуктуационная теория фазовых переходов. Москва (1982). 380.