Ученые записки Таврического национального университета имени В.И.Вернадского
Серия «Физика». Том 17-18 (56-57). 2005 г. № 1. С. 20-26

УДК 537.612

ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ ДВУХОСНОГО НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА ПРИ РАВЕНСТВЕ КОНСТАНТ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО И БИКВАДРАТИЧНОГО ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Фридман Ю. А., Космачев О.А., Кожемяко О.В.

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что адекватный учет обменного взаимодействия требует рассмотрения не только билинейных по спиновым операторам членов, но и более сложных, например, биквадратичных по спинам [1,2]. Влияние биквадратичного взаимодействия приводит к ряду эффектов, таких, например, как возникновение фаз с тензорным параметром порядка [1].

Изучению систем с биквадратичным взаимодействием посвящено большое количество работ, некоторые из них мы приводим в списке цитированной литературы [1,3-13]. В работах [4-7], были исследованы фазовые состояния негейзенберговского двухосного ферромагнетика с большой одноионной анизотропией (ОА) при различных соотношениях констант гейзенберговского и биквадратичного взаимодействий, в работах [8,9] изучались магнитные состояния и фазовые переходы (ФП) в изотропных негейзенберговских магнетиках, а в [10,11] изучались магнетики с биквадратичным взаимодействием и ОА типа «легкая плоскость». В [12,13] исследованы фазовые состояния негейзенберговских магнетиков в отсутствие внешнего магнитного поля, как при низких температурах [12], так и вблизи температуры фазового перехода [13]. Проведенные исследования позволили выяснить, при каких условиях в системе реализуются фазы с тензорным параметром порядка - квадрупольные фазы, а также установить ряд интересных особенностей в динамике таких систем. При этом, оказалось, что в таких системах существенную роль играют квантовые эффекты (см., например, [1]), а их адекватное описание невозможно провести без учета одноузельных корреляций. Однако, этот учет достигается автоматически, если использовать технику операторов Хаббарда [12,13,15].

При всем многообразии работ, посвященных исследованию негейзенберговских магнетиков, вопрос о свойствах магнитоупорядоченных систем с равными константами гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий исследован недостаточно. Для изотропного ферромагнетика с биквадратичным обменным взаимодействием такая ситуация изучалась в [1,9], и хотя в [9] отмечалось, эта задача носит сугубо теоретический интерес, тем не менее, как нам кажется, эта ситуация может представлять интерес, поскольку магнитный порядок, устанавливаемый в результате действия каждого из этих взаимодействий по отдельности, различен [1,3], а совместное их действие может привести как к появлению ферромагнитного, так и квадрупольного упорядочения.

Так же, необходимо отметить, что в окрестности ФП существенное влияние на динамику системы оказывает магнитоупругое (МУ) взаимодействие [14]. С одной стороны, влияние упругой подсистемы приводит к появлению дополнительной МУ щели в спектре магнитных возбуждений, а с другой стороны, влияние магнитной подсистемы трансформирует спектр упругих возбуждений и делает его квадратичным (по волновому вектору) в окрестности ФП [16]. Следовательно, для адекватного описания динамики системы необходимо учитывать, наряду с другими релятивистскими взаимодействиями, и МУ взаимодействие. В [13] учет МУ взаимодействия проводился на основе модели Родбелла – Бина [20], что приводило к перенормировке константы биквадратичного взаимодействия. Такой подход не позволяет выяснить влияние МУ связи в явном виде. В работах [4-7] МУ связь учитывалась точно в одноузельном гамильтониане, однако в этих работах не рассматривался случай равенства констант гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий.

Таким образом, целью данной работы является изучение фазовых состояний двухосного негейзенберговского ферромагнетика с МУ взаимодействием, при равенстве констант гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий.

Исходя из всего выше сказанного, гамильтониан исследуемой системы представим в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathsf{H} = & -H\sum_n S_n^x - \frac{1}{2}\sum_{n,n'}\left\{J\left(n-n'\right)\vec{S}_n\vec{S}_{n'} + K\left(n-n'\right)\left(\vec{S}_n\vec{S}_{n'}\right)^2\right\} - \\ & - B_2^0\sum_n\left\{3\left(S_n^z\right)^2 - S\left(S+1\right)\right\} - B_2^2\sum_n\frac{1}{2}\left\{\left(S_n^+\right)^2 + \left(S_n^-\right)^2\right\} + \\ & + \nu\sum_n S_n^i S_n^j u_{ij}\left(n\right) + \int dr\left\{\frac{\lambda+\eta}{2}\sum_i u_{ii}^2 + \eta\sum_{i\neq j}u_{ij}^2 + \lambda\sum_{i\neq j}u_{ii}u_{jj}\right\}, \end{aligned} \qquad (1)$$

где S_n^i – спиновый оператор в узле n; $J(n-n')$; $K(n-n')$ – константы гейзенберговского и биквадратичного взаимодействий, B_2^0, B_2^2 – константы одноионной анизотропии (ОА), H – внешнее магнитное поле в энергетических единицах, ν – константа МУ связи, λ, η – упругие модули, u_{ij} – симметричная часть компонент тензора упругих деформаций.

Дальнейшие вычисления будем проводить, предполагая, что спин магнитного иона $S=1$. Это связано с тем, что при малых значениях спина, особенно при $S=1$, наиболее существенны квантовые эффекты [1,3].

СПЕКТРЫ СВЯЗАННЫХ МАГНИТОУПРУГИХ ВОЛН

Точный учет ОА и МУ взаимодействия удается провести, используя технику операторов Хаббарда [15,16]. Эти операторы строятся на полном базисе одноионных состояний одноузельного гамильтониана

$$\mathsf{H}_0(n) = -\overline{H}S_n^x - \widetilde{B}_2^0 O_{2n}^0 - \widetilde{B}_2^2 O_{2n}^2 + \nu S_n^i S_n^j u_{ij}(n) \ .$$

где $\overline{H} = H + (I_0 - \frac{K_0}{2})\langle S^x \rangle$; $\widetilde{B}_2^0 = B_2^0 + \frac{1}{6}K_0 q_2^0$; $\widetilde{B}_2^2 = B_2^2 + \frac{1}{2}K_0 q_2^2$;
$q_2^0 = \langle O_{2n}^0 \rangle$; $q_2^2 = \langle O_{2n}^2 \rangle$; $I_0 = \sum_{n'} I(n-n')$; $K_0 = \sum_{n'} K(n-n')$;

Собственные функции и собственные значения одноузельного гамильтониана имеют вид [5]:

$$\Psi_n(+) = \cos\theta|+\rangle + \sin\theta|0\rangle\ ;\ \Psi_n(0) = -\sin\theta|+\rangle + \cos\theta|0\rangle\ ;\ \Psi_n(-) = |-\rangle . \qquad (2)$$

$$E_+ = \frac{\widetilde{B}_2^0 - \widetilde{B}_2^2}{2} + \nu\left(u_{xx}^{(0)} + \frac{u_{yy}^{(0)} + u_{zz}^{(0)}}{2}\right) - \frac{\chi}{2};$$

$$E_0 = \frac{\widetilde{B}_2^0 - \widetilde{B}_2^2}{2} + \nu\left(u_{xx}^{(0)} + \frac{u_{yy}^{(0)} + u_{zz}^{(0)}}{2}\right) + \frac{\chi}{2}; \qquad (3)$$

$$E_- = \widetilde{B}_2^2 - \widetilde{B}_2^0 + \nu\left(u_{yy}^{(0)} + u_{zz}^{(0)}\right);\ \ \chi^2 = 4\overline{H}^2 + \left(3\widetilde{B}_{2n}^0 + \widetilde{B}_{2n}^2 + \nu\left(u_{yy}^{(0)} - u_{zz}^{(0)}\right)\right)^2 .$$

Здесь $\cos 2\theta = \frac{3\widetilde{B}_{2n}^0 + \widetilde{B}_{2n}^2 + \nu\left(u_{yy}^{(0)} - u_{zz}^{(0)}\right)}{\chi}$, $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle \pm |-1\rangle\right)$, $|0\rangle, |1\rangle, |-1\rangle$ – собственные векторы оператора S^z, $u_{ij}^{(0)}$ - спонтанные деформации.

Операторы Хаббарда определяются следующим образом [15,16] $X_n^{M'M} \equiv |\Psi_n(M')\rangle\langle\Psi_n(M)|$, и описывают переход магнитного иона из состояния M в состояние M'.

Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда имеет вид:

$$S_n^+ = \left(H_n^+ - H_n^0\right)\sin 2\theta + \left(X_n^{+0} + X_n^{0+}\right)\cos 2\theta + \left(X_n^{-+} - X_n^{+-}\right)\sin\theta + \left(X_n^{-0} - X_n^{0-}\right)\cos\theta$$

$$S_n^- = \left(S_n^+\right)^+;\quad S_n^z = \left(X_n^{+-} + X_n^{-+}\right)\cos\theta - \left(X_n^{0-} + X_n^{-0}\right)\sin\theta . \qquad (4)$$

Хорошо известно, что учёт МУ взаимодействий приводит к гибридизации элементарных возбуждений, и хотя, МУ связь очень слаба, в окрестности ОФП именно этот параметр играет важную роль в динамике системы [14,16]. Тензор деформации представим в виде двух слагаемых: спонтанных деформаций $u_{ij}^{(0)}(n)$ и динамического слагаемого $u_{ij}^{(1)}(n)$, описывающего колебания в решётки. Квантуя стандартным образом [17] динамическую часть тензора деформаций, получим гамильтониан, описывающий процессы трансформаций магнонов в фононы и обратно который, как показано в [4-7], представляется в виде:

$$\mathrm{H}_{tr} = \sum_n \left\{ \sum_M \mathrm{P}_M H_n^M + \sum_\alpha \mathrm{P}_\alpha X_n^\alpha \right\} . \qquad (5)$$

где $\mathrm{P}_{M(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\lambda} \left(b_{k,\lambda} + b^{+}_{-k,\lambda}\right) T_n^{M(\alpha)}(k,\lambda)$, $b^{+}_{k,\lambda}\left(b_{k,\lambda}\right)$ – операторы рождения (уничтожения) фононов с поляризацией λ, $T_n^{M(\alpha)}(k,\lambda)$ – амплитуды трансформаций, $\alpha \equiv \alpha(M, M')$ – корневые векторы, компоненты которых определяются алгеброй операторов Хаббарда [7,15].

Хорошо известно, что полюса функции Грина определяют спектр элементарных возбуждений [18]. Функция Грина для исследуемой системы имеет следующий вид:

$$G^{\alpha\alpha'}(n,\tau;n',\tau') = -\left\langle \hat{T} \tilde{X}_n^{\alpha}(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau') \right\rangle. \qquad (6)$$

Здесь $\hat{T}$ – оператор Вика, $\tilde{X}_n^{\alpha}(\tau)$ – оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении. Усреднение в (6) проводится с полным гамильтонианом $\mathrm{H} = \mathrm{H}_{int} + \mathrm{H}_{tr} + \mathrm{H}_0$.

Дисперсионное уравнение, определяющее спектры связанных МУ волн, аналогично полученному в [7], поэтому подробный вывод его мы здесь не приводим. Поскольку одноузельные корреляторы нами учитывались точно, дисперсионное уравнение справедливо при произвольных значениях ОА.

Проанализируем дисперсионное уравнение в случае, когда $J_0 - K_0 - a_0 \sim 0$, где $a_0 = \frac{\nu^2}{2\eta}$ – параметр МУ связи. Представляет интерес рассмотреть отдельно ситуации, когда $J_0 - K_0 - a_0 = 0 + 0$ и $J_0 - K_0 - a_0 = 0 - 0$.

Рассмотрим наиболее интересный случай, когда направление волнового вектора $\vec{k}$, как и в работах [5-7], совпадает с направлением внешнего магнитного поля, т.е. $\vec{k} \parallel \vec{H} \parallel OX$.

Рассмотрим вначале ситуацию, когда мы приближаемся к точке $J_0 - K_0 - a_0 = 0$ "справа", т.е. $J_0 - K_0 - a_0 = 0 + 0$.

Ранее было показано [7], что при $J_0 - K_0 - a_0 > 0$ в системе реализуются три магнитные фазы: квадрупольно-ферромагнитная КФМ$_{zx}$-фаза, в которой вектор намагниченности лежит в плоскости ZOX; квадрупольно-ферромагнитная КФМ$_{xy}$-фаза, в которой вектор намагниченности лежит в плоскости XOY; коллинеарная ФМ$_x$-фаза, в которой вектор намагниченности параллелен оси OX. Реализация той или иной фазы зависит от соотношения констант анизотропии и величины внешнего поля: при $B_2^2 > -3B_2^0$ и $H_{c3} < H < H_{c1}$ в системе реализуется КФМ$_{zx}$-фаза; в случае $B_2^2 < -3B_2^0$ и $H_{c4} < H < H_{c2}$ реализуется КФМ$_{xy}$- фаза. Кроме того, в рассматриваемой системе может реализовываться квадрупольная фаза (КУ`1-фаза), в которой намагниченность равна нулю, но отличны от нуля квадрупольные параметры порядка $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = -1$. В данной работе изучаются фазовые состояния системы при тех же значениях констант ОА, что и в [7].

Решение дисперсионного уравнения в окрестности ФП ФМ$_x$ – КФМ$_{zx}$ свидетельствует о том, что с магнитной подсистемой активно взаимодействует $t-$поляризованные квазифононы, спектр которых можно представить в следующем виде:

$$\omega_1^2(k)=\omega_t^2(k)\frac{\alpha k^2+H-H_{c1}}{\alpha k^2+H-H_{c1}+a_0}, \tag{7}$$

где $\alpha=J_0R_0^2$; R_0-радиус гейзенберговского взаимодействия, а

$$H_{c1}=\sqrt{2B_2^2\left(B_2^2-3B_2^0\right)}\left(1-\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(J_0-K_0-a_0\right)\left(B_2^2+3B_2^0\right)}{3B_2^2\left(B_2^0-B_2^2\right)}\right) \tag{8}$$

поле ФП из ФМ$_x$ – фазы в КФМ$_{zx}$ – фазу. В спектре квазимагнонов (при $H=H_{c1}$) появляется магнитоупругая щель, равная:

$$\varepsilon(0)=2a_0\frac{H_{c1}}{3\left(B_2^0-B_2^2\right)}. \tag{9}$$

Если соотношение между материальными константами рассматриваемой системы таково, что реализуется ФП ФМx – КФМ$_{yx}$ – фаза, то с магнитной подсистемой взаимодействуют $\tau-$поляризованные квазифононы, спектр которых имеет вид:

$$\omega_2^2(k)=\omega_\tau^2(k)\frac{\alpha k^2+H-H_{c2}}{\alpha k^2+H-H_{c2}+a_0}, \tag{10}$$

где

$$H_{c2}=\sqrt{2B_2^2\left(B_2^2-3B_2^0\right)}\left(1+\frac{1}{2}\cdot\frac{\left(J_0-K_0-a_0\right)\left(B_2^2+3B_2^0\right)}{3\left(B_2^2-3B_2^0\right)\left(B_2^0-B_2^2\right)}\right) \tag{11}$$

поле ФП из ФМ$_x$ – фазы в КФМ$_{yx}$ – фазу. МУ щель в спектре квазимагнонов в этом случае имеет вид:

$$\varepsilon(0)=2a_0\frac{H_{c2}}{3\left(B_2^0-B_2^2\right)}. \tag{12}$$

Необходимо отметить, что МУ щель в рассматриваемом случае становится близкой к линейной по параметру a_0, в отличие от ситуации, когда $J_0-K_0-a_0>0$ (см. [7]).

Как уже отмечалось ранее [7], кроме рассмотренных уже ФП, может реализовываться переход из КУ`1 фазы в одну из квадрупольно- ферромагнитную фазу: КФМxz при $B_2^2>-3B_2^0$ либо КФМxy при $B_2^2<-3B_2^0$. При сделанных нами ранее предположениях поля этих ФП имеют вид:
переход КУ`$_1$ – КФМ$_{xz}$

$$H_{c3} = \sqrt{2B_2^2\left(B_2^2 - 3B_2^0\right)}\left(1 + \frac{J_0 - K_0 - a_0}{2B_2^2}\right), \tag{13}$$

переход КУ$^*_1$ – КФМ$_{xy}$

$$H_{c4} = \sqrt{2B_2^2\left(B_2^2 - 3B_2^0\right)}\left(1 + \frac{J_0 - K_0 - a_0}{B_2^2 - 3B_2^0}\right). \tag{14}$$

Из выражений (8) и (11) легко видеть, что при $J_0 - K_0 - a_0 = 0$ поля H_{c1} и H_{c3} совпадают и становятся равными $H_c = \sqrt{2B_2^2\left(B_2^2 - B_2^0\right)}$. Аналогичный результат из (13) и (14) получается и для полей H_{c2} и H_{c4}. Отсюда следует, что при $J_0 - K_0 - a_0 = 0$ КФМ$_{xz}$ и КФМ$_{xy}$ фазы исчезают; кроме того, совпадают спектры $t -$и $\tau -$поляризованных квазифононов и МУ щели в спектрах квазимагнонов.

Рассмотрим теперь ситуацию, когда разность $J_0 - K_0 - a_0 = 0 - 0$. Как отмечалось в работах [6,7,9], в случае большого биквадратичного обмена ($J_0 - K_0 - a_0 < 0$), квадрупольно-ферромагнитная фаза становится энергетически невыгодной, и в системе могут реализовываться только ФМ$_x$ и КУ$^*_1$ – фазы. Причем ФП между ними является переходом первого рода. Поле фазового перехода в этом случае определяется из условия равенства плотности свободной энергии на линии перехода и уравнения состояния [19], и при $J_0 - K_0 - a_0 = 0$ оно равно:

$$H_c = \sqrt{2B_2^2\left(B_2^2 - B_2^0\right)}. \tag{15}$$

ВЫВОДЫ

Таким образом, проведенные исследования показывают, что в точке $J_0 = K_0 - a_0$ квадруполно-ферромагнитная фаза становится энергетически невыгодной, и в системе могут реализовываться либо квадрупольная, либо ферромагнитная фазы. Причем, фазовый переход между этими фазами происходит при поле H_c (см.выражение (15)), и является фазовым переходом первого рода.

Для лучшей интерпритации полученных результатов, удобно воспользоваться следующими соображениями. В КУ-фазе тензор квадрупольного момоента соответствует виду сплюснутого эллипсоида, причем этот эллипсоид ориентирован так, чтобы магнитное поле находилось в его плоскости. Тензор квадрупольного момента в КУ-фазе становится двухосным. В ФМ-фазе тензор квадрупольного момента соответствует вытянотому эллипсоиду, причем, направление намагниченности и, следовательно, вытянутая ось эллипсоида ориентированы вдоль магнитного поля. При фазовом переходе КУ-ФМ фаза скачком изменяется компонента тензора квадрупольного момента q_2^2.

Список литературы

1. Э. Л. Нагаев. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука. (1988)
2. В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский. Функции Грина в теории магнетизма. Киев: Наукова думка. (1984).
3. В. М. Локтев, В. С. Островский// ФТТ, 20, 3086 (1978).
4. Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман, О. В. Кожемяко, О. А. Космачев// ФНТ, 25, 690 (1999).
5. Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, Г. Э. Байрамалиева// ФНТ 26, 1108 (2000).
6. Ю. А. Фридман, О. А. Космачев// ФНТ 27, 642 (2001).
7. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev// JMMM, 236, № 3, (2001).
8. В. М. Калита// ФТТ 33, 1940 (1991).
9. В. М. Калита, А. Ф. Лозенко// ФНТ 24, 958 (1998).
10. Ю. Н. Мицай, А. Н. .Майорова, Ю. А. Фридман// ФТТ 34, 66 (1992).
11. Ю. А. Фридман, О. В. Кожемяко, Б. Л. Эйнгорн// ФНТ 27, № 5 (2000).
12. В. В. Вальков, Г. Н. Мацулева, С. Г. Овчинников// ФТТ, 31, 60 (1989).
13. В. В. Вальков, Б. В. Федосеев// ФТТ, 32, 3522 (1990).
14. Е. А. Туров, В. Г. Шавров// УФН 140, 429 (1983).
15. Р. О. Зайцев// ЖЭТФ, 68, 207 (1975).
16. Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман// ТМФ 81, 263 (1989).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Часть I. Наука. М. (1976).
18. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука (1987).
19. Ю. А. Изюмов, В. Н. Сыромятников. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука (1984).
20. C.P.Bean, D.S.Rodbell// Phys.Rev. 126, 104 (1962).

Поступила в редакцию 19.01.2005 г.