

На правах рукописи

Федосеев Борис Валерьевич

**СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА МАГНЕТИКОВ
СО СЛОЖНЫМИ ОБМЕННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

Диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико – математических наук

Красноярск 2009

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В.Киренского СО РАН

Научный руководитель:

доктор физико – математических наук,
профессор Вальков В.В.

Официальные оппоненты:

доктор физико – математических наук,
профессор Барабанов А.Ф.

кандидат физико – математических наук
Булгаков Е.Н.

Ведущая организация:

Новосибирский государственный
университет, г. Новосибирск

Защита состоится « ____ » _____ 2009 г. в ____ часов
на заседании диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики
им. Л.В.Киренского СО РАН

по адресу: 660036 г. Красноярск, Академгородок, 50, строение 38

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Института физики
им. Л.В.Киренского СО РАН

Автореферат разослан « ____ » _____ 2009 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.

I. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Вещества, обладающие магнитными свойствами, сегодня находят применение во всех областях производства. Бурное развитие микроэлектроники, особенно в области информационных технологий, требует постоянного поиска новых материалов с новыми, уникальными свойствами. Это приводит к синтезированию новых кристаллов и комплексному исследованию их физических свойств. При этом, описание магнитных свойств новых материалов требует выхода за рамки уже известных, хорошо изученных теоретических моделей.

Проблема построения эффективного спинового гамильтониана, способного отразить основные характеристики магнетика (энергетический спектр, время жизни возбуждений, намагниченность, восприимчивость и другие) является одной из центральных задач магнетизма. В течении десятилетий гамильтониан Гейзенберга является основой построения квантовой теории магнетизма. Модель Гейзенберга описывает изотропные магнетики, в которых энергия взаимодействия двух атомов зависит от скалярного произведения спинов этих атомов. Для сравнения с экспериментальными данными такой модели, вообще говоря, недостаточно. Поэтому для развития теории магнитной структуры требуется обобщение гейзенберговской модели. Оно проходит в направлении учета магнитной анизотропии, а так же в направлении включения инвариантов более высокого порядка по спиновым операторам [1].

На сегодня известно большое число магнетиков [1, 2], описание экспериментальных свойств которых невозможно без учета более сложного, чем гейзенберговское обменное взаимодействие. Это приводит к постановке задачи по исследованию свойств основного состояния и энергетического спектра негейзенберговских магнетиков.

Цель и задачи исследования. Основная цель диссертационной работы заключалась в изучении особенностей спектральных и термодинамических свойств магнетиков со сложными обменными взаимодействиями.

Для достижения поставленной цели осуществлено решение следующих задач:

1. Исследование влияния четырехспинового обменного взаимодействия на термодинамические и спектральные свойства магнетиков, сравнение результатов с экспериментальными данными легкоплоскостного антиферромагнетика - Bi_2CuO_4 ,

на основе полученных уравнений определение параметров обменных взаимодействий Bi_2CuO_4 .

2. Экспериментальное исследование антиферромагнитного резонанса [3,4] привело к новым данным для уточнения магнитной структуры и магнитных взаимодействий Bi_2CuO_4 , определения обменных параметров системы на основе единого спинволнового подхода. Это сделало актуальным теоретическое рассмотрение антиферромагнитного резонанса в системах с четырехспиновым обменным взаимодействием.

3. Исследование термодинамических свойств анизотропных магнетиков с биквадратным обменным взаимодействием [1,5,6], изучение фазового перехода в модельных системах, описываемых эффективным спиновым гамильтонианом с величиной спина $S = 1$, содержащим наряду с взаимодействием дипольных моментов взаимодействия высших мультиполей.

Научная новизна полученных в диссертации результатов определяется следующими основными положениями, которые выносятся на защиту:

1. Для объяснения магнитных свойств Bi_2CuO_4 записан эффективный спиновый гамильтониан, включающий четырехспиновое обменное взаимодействие, позволившее описать анизотропию кристалла в базисной плоскости;

2. Методом двухвременных температурных функций Грина получены аналитические выражения для спектра спиновых волн и термодинамических характеристик рассматриваемого магнетика. На основании сравнения с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов и данными по высокотемпературной восприимчивости Bi_2CuO_4 определены значения констант обменных взаимодействий.

3. При учете четырехспинового обменного взаимодействия проведено теоретическое исследование частоты антиферромагнитного резонанса для тетрагонального легкплоскостного магнетика. Из сравнения экспериментальных данных и теоретических расчетов установлено, что магнитные моменты подрешеток антиферромагнетика Bi_2CuO_4 ориентированы под углом 45^0 к кристаллографическим осям a и b в базисной плоскости.

4. Для систем с сильным биквадратным обменным взаимодействием показано, что одноионная анизотропия даже при ее малых значениях приводит к смене характера фазового перехода в квадрупольную или ферромагнитную фазу с первого рода на второй. Получены температурные зависимости параметров

порядка, определены критические температуры и построены фазовые диаграммы, определяющие области реализации фазовых переходов первого рода.

Достоверность результатов. полученных в диссертационной работе, подтверждается корректностью методов, используемых для теоретического анализа модельных гамильтонианов. Полученные уравнения удовлетворяют общефизическим требованиям, а в предельном случае переходят в общеизвестные уравнения, полученные ранее другими авторами. Кроме того, полученные результаты хорошо коррелируют с экспериментальными данными по рассеянию нейтронов, а также по антиферромагнитному резонансу в Bi_2CuO_4 .

Научная и практическая ценность. В диссертации построен модельный спиновый гамильтониан Bi_2CuO_4 , позволяющий описать совокупность экспериментальных данных по АФМР, спектру спиновых волн, магнитной восприимчивости и температуре Нееля в рамках единого спин-волнового подхода. Проведен анализ модели и сопоставление с данными эксперимента, что позволило определить константы обменных взаимодействий Bi_2CuO_4 и уточнить магнитную структуру Bi_2CuO_4 . Рассмотрено влияние одноионной анизотропии на термодинамические свойства систем с биквадратным обменным взаимодействием, исследовано температурное поведение дипольного и квадрупольных параметров порядка в таких системах, построены фазовые диаграммы.

Практическая ценность связана с получением численных значений обменных параметров кристалла Bi_2CuO_4 , позволяющих дополнить паспортные характеристики этого материала.

Апробация работы.

Результаты работ, вошедших в настоящую диссертацию, были представлены и обсуждались на семинарах отдела теоретической физики ИФ СО РАН, на семинаре лаборатории РСМУВ ИФ СО РАН и на семинаре по физике низких температур в г. Донецк, 1989г..

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 10 работах, список которых приведен в конце автореферата.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав основного текста, заключения, включает 25 рисунков, а также список литературы из 64 наименований. Общий объем работы 98 страниц.

II. КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обсуждено состояние области исследований на момент начала работы. Сформулированы задачи, решение которых составило данную диссертационную работу. Показано, что решаемые задачи являются актуальными, а проведение исследований в данной области – необходимым.

В первой главе рассмотрена в наиболее общем виде задача построения спинового гамильтониана, с учетом того, что все магнитные атомы фиксированы в узлах кристаллической решетки, а орбитальный момент отсутствует. Показано, что в общем случае магнитный гамильтониан содержит не только скалярное произведение спинов магнитных атомов (модель Гейзенберга), но и более высокие степени:

$$H = - \sum_n \sum_{(f)} J(f_1, \dots, f_n) (\vec{S}_{f_1} \vec{S}_{f_2}) \cdot \dots \cdot (\vec{S}_{f_{2n-1}} \vec{S}_{f_{2n}}). \quad (1)$$

Рассматривая возможности обобщения гамильтониана (1) выделены два случая: спин атома $S=1/2$ и спин атома $S>1/2$. Такое разделение обусловлено тем, что при $S=1/2$ возможен только гейзенберговский обмен, а биквадратный обмен типа $(\vec{S}_f \vec{S}_g)^{n>1}$ отсутствует. Это объясняется тем, что более высокие, чем $2S$ степени компонент спина (для любых S) выражаются через единичную матрицу и компоненты спина в степени до $2S$.

Поэтому обобщение гейзенберговского гамильтониана при $S=1/2$ дает четырехспиновое обменное взаимодействие – взаимодействие четверки атомов, образующих квадрат с наименьшей возможной стороной (приведен простейший инвариант тетрагональной симметрии):

$$H_{(4)} = -\frac{1}{4} \sum_{\langle f_1 f_2 f_3 f_4 \rangle} \left\{ K_{f_1 f_2 f_3 f_4}^{\perp} \left(S_{f_1}^x S_{f_2}^x S_{f_3}^x S_{f_4}^x + S_{f_1}^y S_{f_2}^y S_{f_3}^y S_{f_4}^y \right) + K_{f_1 f_2 f_3 f_4}^{\parallel} S_{f_1}^z S_{f_2}^z S_{f_3}^z S_{f_4}^z \right\}. \quad (2)$$

При обобщении гейзенберговского гамильтониана при $S > 1/2$ возможен учет взаимодействия более высоких, чем вторая степень произведений спиновых операторов:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle f,m \rangle} [I_{fm} \bar{S}_f \bar{S}_m + K_{f,m} (\bar{S}_f \bar{S}_m)^2]. \quad (3)$$

Во второй главе рассмотрено влияние четырехспинового обменного взаимодействия на термодинамические и спектральные свойства магнетиков на основе рассмотрения экспериментальных данных легкоплоскостного антиферромагнетика Bi_2CuO_4 , интенсивное исследование которого объясняется интересом, проявляемым к ВТСП и ВТСП - подобным материалам.

В кристалле Bi_2CuO_4 ионы меди образуют тетрагональную решетку, которая не является ни объемноцентрированной, ни базоцентрированной. Структура Bi_2CuO_4 изображена на рисунке 1:

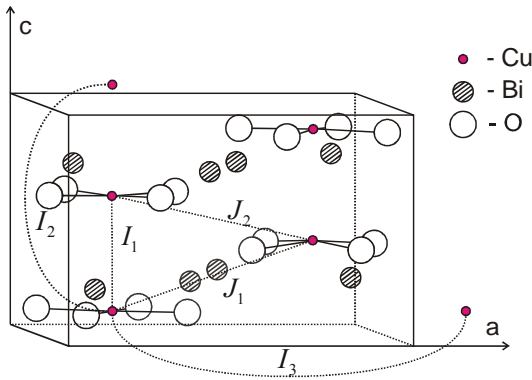


Рисунок 1.
Кристаллическая структура Bi_2CuO_4

Из экспериментов по рассеянию нейтронов на монокристалле, а также из данных по измерению магнитной восприимчивости было установлено, что намагниченности подрешеток ориентируются в базисной плоскости тетрагонального Bi_2CuO_4 . Температура Нееля $T_N = 45,78 \pm 0,19$ К. Парамагнитная температура Нееля Θ и g фактор существенно анизотропны:

$$\Theta^l = -32\text{К}, \quad \Theta^t = -40\text{К}, \quad g^l = 2,290, \quad g^t = 2,017.$$

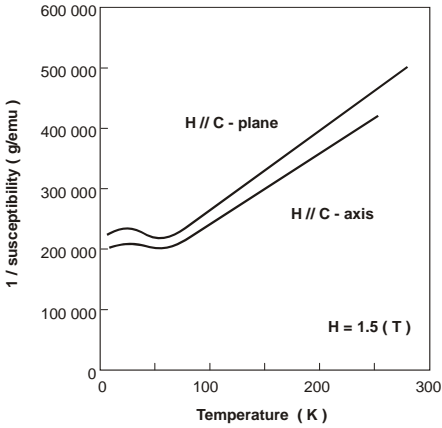


Рисунок 2.
Обратная магнитная
восприимчивость Bi_2CuO_4

Данные по магнитной восприимчивости Bi_2CuO_4 приведены на рис.2. Лабораторией РСМУВ Института физики СО РАН совместно с институтом Пауля Шерера (Швейцария) было проведено исследование дисперсии магнитных возбуждений Bi_2CuO_4 . Измерение температурных зависимостей подрешеточных намагниченностей осуществлялось методом неупругого рассеяния нейтронов ($\lambda = 2,345\text{\AA}$) на двухосном спектрометре P2AX.

Результирующая картина спектра спиновых волн, полученная после обработки зависимостей интенсивности неупругого рассеяния показана на рис.3.

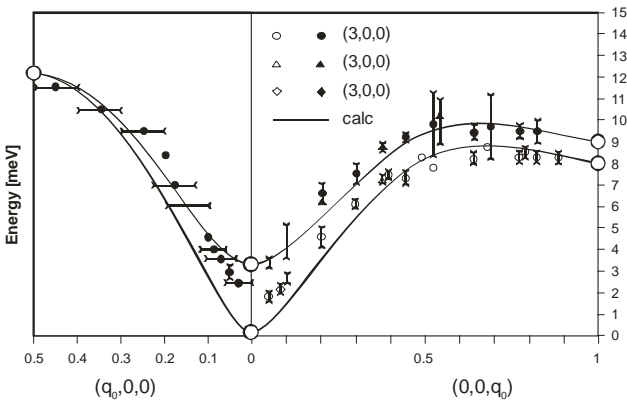


Рисунок 3.
Спектр
спиновых волн Bi_2CuO_4

Для объяснения экспериментальных данных по Bi_2CuO_4 был проведен расчет спектра элементарных возбуждений легкплоскостного антиферромагнетика с четырехспиновым взаимодействием. Описание спектра магнитных возбуждений и намагниченности подрешеток при $T < T_N$ проведено на основе эффективного

спинового гамильтониана двухподрешеточного тетрагонального антиферромагнетика.

При записи модельного гамильтониана были учтены особенности магнитной структуры Bi_2CuO_4

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{1}{2} \sum_{\langle f, f' \rangle} \left\{ I_{f, f'}^{\perp} (S_f^x S_{f'}^x + S_f^y S_{f'}^y) + I_{f, f'}^{\parallel} S_f^z S_{f'}^z \right\} - \\
 & -\frac{1}{2} \sum_{\langle g, g' \rangle} \left\{ I_{g, g'}^{\perp} (S_g^x S_{g'}^x + S_g^y S_{g'}^y) + I_{g, g'}^{\parallel} S_g^z S_{g'}^z \right\} + \\
 & + \sum_{\langle f, g \rangle} \left\{ J_{f, g}^{\perp} (S_f^x S_g^x + S_f^y S_g^y) + J_{f, g}^{\parallel} S_f^z S_g^z \right\} - \\
 & -\frac{1}{4} \sum_{\langle f, g, f', g' \rangle} \left\{ K_{f, g, f', g'}^{\perp} (S_f^x S_g^x S_{f'}^x S_{g'}^x + S_f^y S_g^y S_{f'}^y S_{g'}^y) + K_{f, g, f', g'}^{\parallel} S_f^z S_g^z S_{f'}^z S_{g'}^z \right\}
 \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь два первых слагаемых описывают обменное взаимодействие внутри подрешеток ($f, f' \in F$; $g, g' \in G$). Третье слагаемое гамильтониана соответствует учету обменного взаимодействия между спиновыми моментами из разных подрешеток. Последнее слагаемое учитывает четырехузельное обменное взаимодействие.

Вычисление спектра спиновых волн проведено методом двухвременных функций Грина в приближении Тябликова.

Для удобства введены интегральные параметры:

$$\begin{aligned}
 I_q &= \frac{1}{2} (I_q^{\parallel} + I_q^{\perp}), & J_q &= \frac{1}{2} (J_q^{\parallel} + J_q^{\perp}), \\
 \varepsilon_q &= \sigma (I_0^{\perp} - I_q) + K_0^{\perp} \sigma^3 + J_0^{\perp} \sigma, & & \\
 \xi_q &= \frac{1}{4} (I_q^{\parallel} - I_q^{\perp}), & \zeta_q &= \frac{1}{4} (J_q^{\parallel} - J_q^{\perp}),
 \end{aligned} \tag{5}$$

где σ – намагниченность подрешетки.

Две ветви спектра спин-волновых возмущений определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
 \omega_1(q) &= \{A_q - W_q\}^{1/2} \\
 \omega_2(q) &= \{A_q + W_q\}^{1/2}
 \end{aligned} \tag{6}$$

где использованы обозначения:

$$\begin{aligned}
 A_q &= (\varepsilon_q - 2\sigma_{\zeta_2}^{\varepsilon}) \cdot (\varepsilon_q + 2\sigma_{\zeta_q}^{\varepsilon}) + \left(4|\zeta_q|^2 - |J_q|^2\right) \cdot \sigma^2; \\
 W_q &= 2\sigma \cdot \left\{4|\varepsilon_q \zeta_q + \sigma_{\zeta_q}^{\varepsilon} J_q|^2 + B_q \sigma^2\right\}^{1/2} \\
 B_q &= (\zeta_q^*)^2 \cdot (J_q^*)^2 + (\zeta_q^*)^2 \cdot (J_q^*)^2 - 2|\zeta_q|^2 \cdot |J_q|^2;
 \end{aligned} \tag{7}$$

Полученные выражения для спектра спиновых волн позволяют в «аналитических» точках (выделены на рис. 3) получить простые уравнения, связывающие обменные взаимодействия системы с экспериментальными данными.

Экспериментальные значения парамагнитных температур θ^I и θ^{\perp} связывают обменные параметры двумя уравнениями:

$$\theta^{\perp} = \frac{S(S+1)}{3} \cdot (I_0^{\perp} - J_0^{\perp}), \quad \theta^I = \frac{S(S+1)}{3} \cdot (I_0^I - J_0^I); \tag{8}$$

Из полученной системы уравнений построен пошаговый алгоритм, позволивший определить константы обменных взаимодействий:

$$\begin{aligned}
 I_1^{\perp} &= -0.4i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad I_1^{\parallel} = -0.1i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad I_2 = 1.0i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad I_3 = 1.2i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \\
 J_1^{\perp} &= 3.4i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad J_1^{\parallel} = 3.0i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad J_2^{\perp} = 1.5i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \quad J_2^{\parallel} = 1.4i \text{ } \acute{y}\hat{A}, \\
 K &= 0.0024i \text{ } \acute{y}\hat{A}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Далее, используя двухвременные температурные функции Грина, найдено уравнение для равновесной подрешеточной намагниченности рассматриваемого антиферромагнетика.

Сравнение экспериментальных данных и теоретической зависимости подрешеточной намагниченности при выбранных обменных параметрах приведено на рисунке 4.

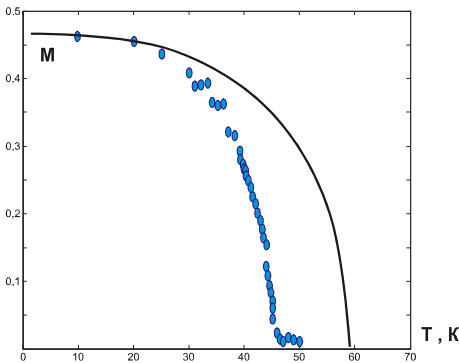


Рисунок 4.
Температурная зависимость
подрешеточной
намагниченности Bi_2CuO_4

В третьей главе решена задача о спектре элементарных возбуждений легкоплоскостного антиферромагнетика с четырехспиновым обменным взаимодействием в магнитном поле, ориентированном в базисной плоскости. Получены аналитические выражения для двух ветвей спектра при произвольной геометрии задачи, показанной на рисунке 5. На основе полученных формул проведено сравнение с данными антиферромагнитного резонанса для Bi_2CuO_4 . [3,4].

Гамильтониан системы записан в виде:

$$H = \sum_{\langle f,g \rangle} \{J_{f,g}^{\perp} (S_f^x S_g^x + S_f^y S_g^y) + J_{f,g}^{\parallel} S_f^z S_g^z\} - \sum_i \{h_x S_i^x + h_y S_i^y\} - \frac{1}{4} \sum_{\langle f,g,f',g' \rangle} K_{f,g,f',g'} \{S_f^x S_g^x S_{f'}^x S_{g'}^x + S_f^y S_g^y S_{f'}^y S_{g'}^y\}. \quad (10)$$

где первое слагаемое описывает взаимодействие типа «легкая плоскость» ($J^{\perp} > J^{\parallel} > 0$). Второе слагаемое описывает взаимодействие с магнитным полем, лежащем в плоскости $[xy]$. Здесь использованы обозначения, аналогичные (4). Третье слагаемое учитывает четырехспиновое обменное взаимодействие, причем, с целью упрощения интерпретации экспериментальных данных в гамильтониане оставлены наиболее существенные слагаемые, которые позволяют описать анизотропию в базисной плоскости при тетрагональной симметрии.

В настоящей работе рассмотрение ограничено монодоменной моделью, так как сравнение с данными эксперимента проведено в области больших магнитных полей. Геометрия задачи изображена на рисунке 5.

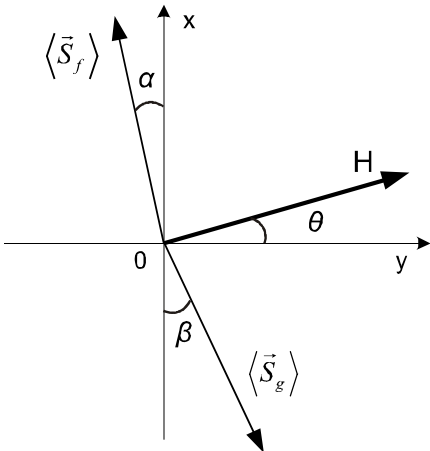


Рисунок 5.

Исходная геометрия задачи

α, β - углы наклона намагниченности подрешеток F и G к кристаллографической оси a (ox);

Θ - угол между магнитным полем и кристаллографической осью b (oy)

Уравнения, определяющие углы равновесной намагниченности α и β найдены из условия обращения в нуль слагаемых первого порядка гамильтониана в терминах бозе операторов:

$$\begin{aligned} g\mu_B h \cos(\theta - \alpha) + sJ_0^\perp \sin(\alpha - \beta) + 6s^3 K^\perp \sin 2\alpha \cdot \cos 2\beta &= 0, \\ g\mu_B h \cos(\theta - \beta) + sJ_0^\perp \sin(\alpha - \beta) - 6s^3 K^\perp \cos 2\alpha \cdot \sin 2\beta &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

При нулевом внешнем поле (для $K > 0$) определена частота резонанса:

$$\Delta^2 = \frac{1}{2} K_0 S^4 (J_0^\perp + J_0^\parallel + \frac{1}{2} K_0 S^2) \quad (12)$$

Для частного случая сильного магнитного поля, когда произошел переход в одноподрешеточное состояние, получено:

$$\begin{aligned} \alpha = -\frac{\pi}{2} + \theta - \delta; \quad \beta = \frac{\pi}{2} + \theta - \delta; \quad \delta \ll 1 \\ \delta \approx \left(\frac{3S^3 K^\perp}{g\mu_A h} \right) \sin(4\theta), \quad g\mu_A h > SJ_0^\perp \gg S^3 K^\perp \end{aligned} \quad (13)$$

При этом искомая зависимость частоты антиферромагнитного резонанса от угла между магнитным полем и кристаллографической осью в базисной плоскости определяется выражением:

$$\omega(\theta) \approx g\mu_A H + 9S^3 K^\perp \cos(4\theta) \quad (14)$$

Рассмотрим $K > 0$ (кристаллографические оси a и b соответствуют направлению легкого намагничивания). В этом случае при $\Theta = 0$ ($H \parallel (oy)$) магнитные моменты составляют с осью x углы $\alpha = -\beta$, которые увеличиваются с ростом поля H .

При другом направлении магнитного поля, $\Theta = 45^\circ$, углы α и β начинают отклоняться от оси (oy) и при $H = H_{кр}$ система испытывает спин-флоп переход. Зависимость частоты АФМР от интенсивности магнитного поля изображена на рисунке 6.

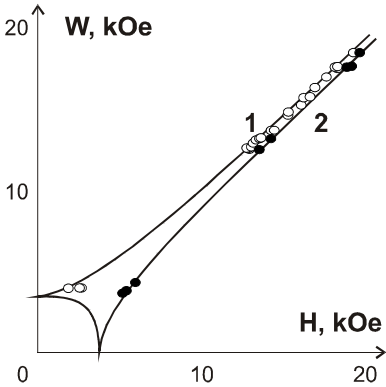


Рисунок 6.

Полевая зависимость частоты резонанса для двух направлений: 1- H [100], 2- H [110]

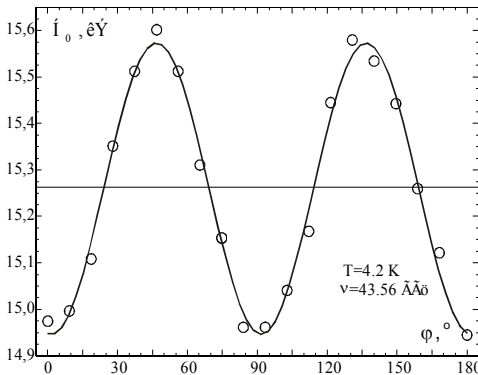


Рисунок 7.

Угловая зависимость частоты резонанса Bi_2CuO_4 [3]

Из сравнения уравнения на частоту АФМР с экспериментальными данными (рисунки 6, 7) следует вывод об отрицательном знаке константы четырехспинового взаимодействия. В основном состоянии именно знак четырехспинового взаимодействия определяет ориентацию магнитных моментов в базисной плоскости, следовательно, при $K < 0$, (что соответствует экспериментальным данным) оси легкого намагничивания будут не вдоль осей a и b , а под углом 45° к ним (рисунок 8). Этот вывод противоречит изображаемой ранее в литературе магнитной структуре Bi_2CuO_4 , где легким считалось направление $[001]$ и $[010]$. В этих работах нет данных, доказывающих существование такой структуры, и несомненным может считаться только легкоплоскостной характер антиферромагнитного упорядочения, подтверждаемый как данными по восприимчивости, так и по рассеянию нейтронов. Таким образом, интерпретация данных по резонансу позволяет уточнить магнитную структуру Bi_2CuO_4 .

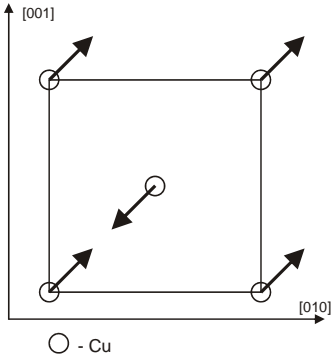


Рисунок 8.
Магнитная структура Bi_2CuO_4

В четвертой главе исследовано влияние одноионной анизотропии ромбической симметрии на температурную эволюцию негейзенберговского магнетика с величиной спинового момента $S = 1$, гамильтониан которого содержит наряду с взаимодействием дипольных моментов взаимодействия высших мультиполей [7-9]. Рассмотрен модельный гамильтониан:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle f,m \rangle} [I_{fm} \bar{S}_f \bar{S}_m + K_{f,m} (\bar{S}_f \bar{S}_m)^2] - \sum_f [B_2^0 O_{2f}^0 + B_2^2 O_{2f}^2]$$

где (15)

$$O_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1); \quad O_{2f}^2 = (S_f^x)^2 - (S_f^y)^2 = \frac{1}{2} [(S_f^+)^2 + (S_f^-)^2].$$

Здесь первое слагаемое соответствует парному обменному взаимодействию, (I_{fm} - константа гейзенберговского обмена). Второе слагаемое описывает биквадратное обменное взаимодействие (константа K_{fm}), а третье - одноионную анизотропию в наиболее общем для $S = 1$ виде. Константы B_2^0 и B_2^2 характеризуют интенсивность кристаллического поля и в общем случае могут быть сравнимы с величинами, отвечающими за обменное взаимодействие.

Для исследования данного гамильтониана использовалось приближение анизотропного молекулярного поля.

На первом этапе исследована симметрия гамильтониана, что позволило существенно сократить область анализа параметров системы.

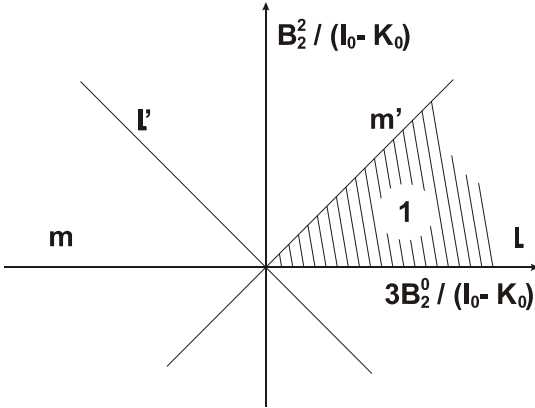


Рисунок 9.

Плоскость констант анизотропии
исследуемого магнетика

Состояние, в котором находится описываемая система, определяется термодинамическим поведением дипольного параметра порядка σ и квадрупольными параметрами порядка q_2^0 и q_2^2 , которые определяются по правилам статистической механики:

$$\begin{aligned}\sigma &= \langle S^z \rangle = \frac{Sp(e^{-\beta H_0} S^z)}{Sp(e^{-\beta H_0})} \\ q_2^0 &= \langle O_2^0 \rangle = \frac{Sp(e^{-\beta H_0} O_2^0)}{Sp(e^{-\beta H_0})} \\ q_2^2 &= \langle O_2^2 \rangle = \frac{Sp(e^{-\beta H_0} O_2^2)}{Sp(e^{-\beta H_0})}\end{aligned}\quad (16)$$

Решение задачи о температурном поведении системы проведено методом унитарных преобразований с использованием атомного представления. Введены собственные состояния оператора S^z , записанного в исходной системе координат:

$$S^z |n\rangle = (S - n) |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2$$

Выразив спиновые и квадрупольные операторы через операторы Хаббарда: $X^{n,m} = |n\rangle \langle m|$, получен гамильтониан в терминах X -операторов. Для диагонализации гамильтониана и приведения его к виду:

$$H_0 \rightarrow H'_0 = U_{02}(\alpha) H_0 U_{02}^+ = E_0 X^{00} + E_1 X^{11} + E_2 X^{22}\quad (17)$$

Использовано унитарное преобразование:

$$H \rightarrow H(\alpha) = U(\alpha) H U^+(\alpha) \quad U(\alpha) = \prod_f \left[\alpha (X_f^{02} + X_f^{20}) \right]\quad (18)$$

Уравнение на угол α , определяемый требованием диагональности гамильтониана после преобразования:

$$\left[(I_0 - K_0)(N_0 - N_2)\sin(2\alpha) - B_2^2 \right] \cos(2\alpha) = 0 \quad (19)$$

где N – числа заполнения:

$$N_i = \frac{\exp(-\beta E_i)}{\sum_i \exp(-\beta E_i)} \equiv \langle X^{ii} \rangle \quad (20)$$

Анализ был проведен отдельно для одноосного магнетика, когда $B_2^2 = 0$, и для двухосного магнетика.

Для одноосного магнетика решение проводилось методом сравнения свободной энергии каждой из возможных фаз. Определены законы температурной эволюции параметров порядка, найдены критические температуры. Результирующая фазовая диаграмма приведена на рисунке 10.

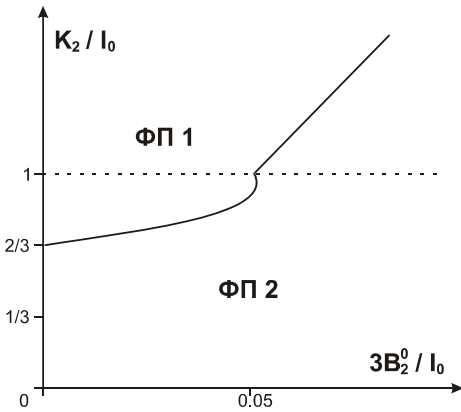


Рисунок 10.

Диаграмма характера фазового перехода легкоосного магнетика с биквадратным обменом

Для двухосного магнетика возможны только два класса решений, для которых также основное состояние определялось сравнением свободной энергии.

Построена фазовая диаграмма, определяющая область фазового перехода 1 рода для квадрупольных параметров порядка (рисунок 11).

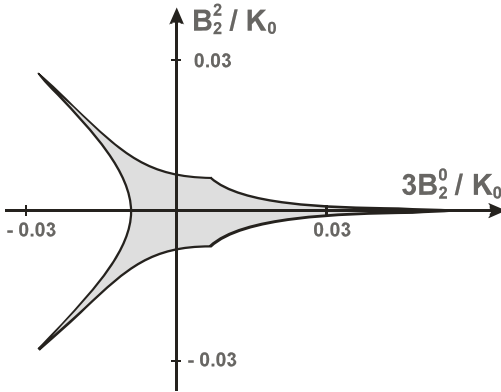


Рисунок 11.
Область существования скачкообразного температурного поведения q_2^0 и q_2^2 при $K_0 > I_0$

Исследована зависимость температуры фазового перехода в ферромагнитную фазу от интенсивности биквадратного обменного взаимодействия и одноионной анизотропии.

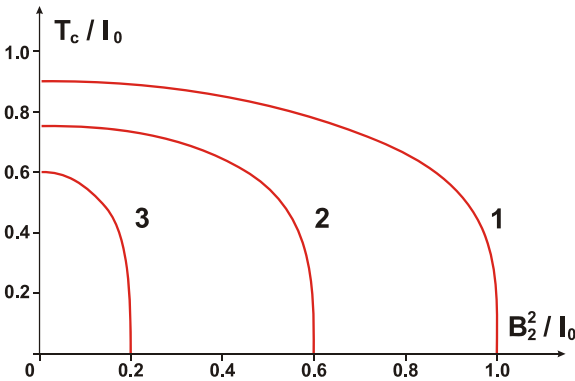


Рисунок 12
Зависимость температуры перехода в ферромагнитную фазу от величины B_2^2 ($B_2^0 = 0,4 I_0$):
1. $K_0 = 0$,
2. $K_0 = 0,4 I_0$,
3. $K_0 = 0,8 I_0$.

В результате проведенного анализа отмечено, что одноионная анизотропия сильным образом влияет на характер перехода в квадрупольную или ферромагнитную фазу. Если в изотропном пределе фазовый переход был первого рода, то уже при достаточно малых значениях констант одноионной анизотропии, составляющих по порядку величины $\sim 10^{-2}$ от характерных энергий парных взаимодействий, фазовый переход становится 2-го рода. Эта тенденция сохраняется и для изоморфного фазового перехода, когда при малых значениях констант одноионной анизотропии ромбической симметрии температурное поведение компонент q_2^0 и q_2^2 квадрупольного момента (а значит и параметров ромбической решетки) носит скачкообразный характер, тогда как при больших значениях B_2^0 и B_2^2 изменение параметров решетки является плавным.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Вальков В.В., Федосеев Б.В. Фазовые переходы в анизотропных магнетиках с биквадратным обменом // Красноярск.- ИФ СО АН СССР.- 1990.- Препринт 659Ф.- 20с.
2. Вальков В.В., Федосеев Б.В. Фазовые переходы в анизотропных негејзенберговских магнетиках с тензорным параметром порядка // ФТТ.- 1990.- Т.32, №12.- С.3522-3530.
3. Roessli B., Fischer P., Furrer A., Petrakovskii G., Sablina. K., Val'kov V., Fedoseev B. Magnetic Neutron Scattering in Single Crystal Bi₂CuO₄ // Neutronen-Streuung Progress-Report.- Paul Scherrer Inst.- 1993.- p.106-107.
4. Roessli B., Fischer P., Furrer A., Petrakovskii G., Sablina. K., Val'kov V., Fedoseev B. Structure Determination of Single Crystal Bi₂CuO₄ Using a Four Circle Diffractometer // Neutronen-Streuung Progress-Report.- Paul Scherrer Inst.- 1993.- p.136-137.
5. Roessli B., Fischer P., Furrer A., Petrakovskii G., Sablina. K., Val'kov V., Fedoseev B. Temperature Dependence of the Low-Energy Magnetic Excitation Gap in Bi₂CuO₄ // Neutronen-Streuung Progress-Report.- Paul Scherrer Inst.- 1993. p.74.
6. Roessli B., Furrer A., Fisher P., Petrakovskii G., Sablina. K., Valkov V., Fedoseev B. Magnetic neutron scattering in single crystal Bi₂CuO₄ //J.Appl.Phys.- 1993.- 73, 10.- p.6448.
7. Furrer A., Fisher P., Roessli B., Petrakovskii G., Sablina. K., Valkov V., Fedoseev B. Investigation of spin waves in single crystal Bi₂CuO₄ by inelastic neutron scattering //Sol. St. Comm.- 1992.- V.82, №6.- p.443-446.
8. Петраковский Г.А., Саблина К.А., Вальков В.В., Федосеев Б.В., Фурер А., Фишер П., Росли Б. Исследование спектра спиновых волн в монокристалле Bi₂CuO₄ методом неупругого рассеяния нейтронов // Письма в ЖЭТФ.- 1992.- Т.56, 3.- С.148.
9. Федосеев Б.В. Антиферромагнитный резонанс в системах с четырехспиновым обменным взаимодействием // ФТТ.- 1995.- Т.38.- С.962-964.
10. Федосеев Б.В. Антиферромагнитный резонанс в системе с четырехспиновым обменным взаимодействием // Красноярск.- ИФ СО РАН.- 2008.- Препринт 846Ф.- 20с.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями // Москва: Наука.- 1988.- 232с.
2. Звездин А.К., Матвеев В.М., Мухин А.А., Попов А.И. Редкоземельные ионы в магнитноупорядоченных кристаллах // Москва: Наука.- 1985.- 294с.
3. Pankrats A.I., Petrakovskii G.A., Sablina K.A. Microwave resonance absorption in antiferromagnet Bi_2CuO_4 . // Sol. St. Comm.- 1994.- v. 91, No. 2.- P. 121–124.
4. Pankrats A.I., Sobyenin D.Yu., Vorotinov A.M., Petrakovskii G.A. Antiferromagnetic resonance in Bi_2CuO_4 . // Sol. St. Commun.- 1999.- V.109, No. 4.- P.263–266.
5. Матвеев В.М. Квантовый квадрупольный магнетизм и фазовые переходы при биквадратном обмене // УФН.-1982.-Т.136, №1.- С.61-103.
6. Вальков В.В., Мацулева Г.Н., Овчинников С.Г. Влияние сильного кристаллического поля на спектральные свойства магнетиков с биквадратным обменом // ФТТ.-1989.-Т.31, №6.-С.60-68.
7. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике // ЖЭТФ.- 1975.- Т.68, №1.- С.207-215.
8. Онуфриева Ф.П. Низкотемпературные свойства спиновых систем с тензорным параметром порядка // ЖЭТФ.- 1984.- Т.89, №6.- С.2270-2287.
9. Локтев В.М., Островский В.С. Квантовая теория одноосных антиферромагнетиков в поперечном магнитном поле // ФТТ.- 1978.- Т.20, №10.- С.3086-3093.

Подписано в печать 30.12.08

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 80 экз. Заказ № .

Отпечатано в типографии института физики СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН

