

## НОВЫЙ ТИП МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА

Э.Л.Нагаев, А.А.Коваленко

Доказана возможность фазовых переходов первого рода (ФП1) типа "дальний порядок – чужой ближний порядок". Предложен новый механизм ВП1 типа ферромагнетик-антиферромагнетик.

Ряд магнитных кристаллов обнаруживает фазовые переходы первого рода (ФП1) с изменением типа дальнего порядка или с его исчезновением. Иногда их можно объяснить взаимодействием магнитной подсистемы с решеткой кристалла [1]. Некоторые ФП1 могут быть целиком обусловлены спецификой магнитных взаимодействий. Например, ФП1 ферромагнетик – парамагнетик (ФМ – ПМ) может происходить из-за существенного вклада в обменное взаимодействие биквадратичных членов  $\sim (S_1 S_2)^2$ , где  $S_g$  – спин атома  $g$  [2]. ФП1 с исчезновением дальнего порядка, происходящие по механизмам [1, 2], характеризуются тем, что ближний порядок после перехода – того же типа, какого был дальний порядок до перехода. О типе ближнего порядка, определяющегося коррелятором  $\sum_{g \neq 0} \langle S_0 S_g \rangle / S(S+1) = \Theta / (T - \Theta)$ , где  $S(S+1) = S_g^2$ , можно судить по знаку ПМ температуры Кюри  $\Theta$ . Например, в антиферромагнетике (АФ) после ФП1 по [1, 2]  $\Theta$  отрицательна.

Ниже будет показано, что, во-первых, возможны и ФП1 типа "дальний порядок – чужой ближний порядок" (например, из АФ состояния в ПМ состояние с ФМ ближним порядком, т.е. с  $\Theta > 0$ ). Во-вторых, ФП1 типа АФ-ФМ, которые ранее объяснялись изменением знака обменного интеграла при тепловом расширении решетки [1], можно объяснить и чисто магнитными причинами, что более реалистично для низкотемпературных ФП1.

Фазовые переходы с изменением типа порядка в изотропных магнетиках происходят, если обменный интеграл достаточно мал. Но в этих условиях наряду с гейзенберговским обменом, становятся существенными негейзенберговские члены. Проводимый ниже анализ основывается на гамильтониане, в котором наряду с гейзенберговскими двуспиновыми учтены еще и трехспиновые члены (т.е. типа  $(S_1 S_2)(S_1 S_3)$ ):

$$H = -\frac{J}{2} \sum_g (S_g S_{g+\Delta}) - \frac{K}{2} \sum_g (S_g S_{g+\Delta}) [(S_{g+\Delta'} S_{g+\Delta}) + (S_g S_{g+\Delta+\Delta'})], \quad (1)$$

$\Delta \Delta'$   $\Delta' \neq \pm \Delta$

где вектор  $\Delta$  нумерует  $z$  ближайших соседей, векторы  $\Delta'$  удовлетворяют условию, чтобы атомы  $g + \Delta + \Delta'$  и  $g + \Delta'$  были вторыми по дальности соседями атомов  $g$  и  $g + \Delta$  соответственно. Решетка кристалла считается простой кубической.

Гамильтониан (1) допускает только коллинеарные магнитные структуры. Будем считать для определенности, что при  $T = 0$  наиболее энергетически выгодно АФ упорядочение шахматного типа. Гейзенберговский интеграл обмена  $J$  считается положительным, а негейзенберговский интеграл обмена  $K$  — отрицательным.

Качественно характер зависимости магнитных свойств от  $T$  можно понять из следующих соображений. Характер упорядочения определяется знаком эффективного обменного интеграла  $\tilde{J}(T) = J + 8K(S^z)^2$ , где черта — знак температурного усреднения. Величина  $(S^z)^2$  падает с ростом  $T$ , стремясь при  $T \rightarrow \infty$  к  $S^2/3$  (спины считаются классическими векторами). Если  $J < 8|K|S^2 < 3J$ , то  $\tilde{J}(0)$  отрицателен. При повышении температуры происходит инверсия его знака и АФ упорядочение становится неустойчивым. Однако положительность  $\tilde{J}(T)$  еще не гарантирует стабильности ФМ упорядочения: вместо перехода из АФ состояния в ФМ состояние может произойти переход в ПМ состояние с ФМ ближним порядком.

Количественный анализ производится в приближении самосогласованного поля (ССП), причем из-за негейзенберговской структуры гамильтониана (1) здесь необходимо введение двух самосогласованных полей. Одно из них,  $h$ , как обычно, входит в гамильтониан ССП  $H_0$  как действующее на проекцию спина, второе,  $\sim k$ , действует на квадрат проекции спина

$$H_0^\pm = \mp (hx + 1/2 ks^2x^2), \quad x = S^z/S, \quad (2)$$

$$h = (km^2 - 1)s, \quad k = 8|K|S^2/J, \quad s = |S^z|/S, \quad m^2 = (\overline{S^z})^2/S^2,$$

где верхний знак соответствует АФ, а нижний — ФМ упорядочению. Все энергии здесь и ниже измеряются в единицах  $6JS^2$ .

Свободные энергии этих двух типов упорядочения, вычисленные, как обычно, в теории ССП с использованием вариационного принципа, соответственно даются выражениями (на атом):

$$F_\pm = \pm (km^2 - 1/2)s^2 - \tau \ln Z_\pm, \quad \tau = T/6JS^2, \quad (3)$$

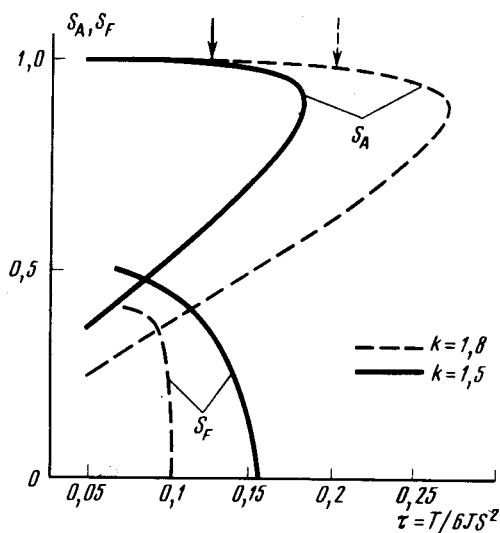
$$Z_\pm = \sum_x \exp \{ \pm \tau^{-1} [(km^2 - 1)sx + 1/2 ks^2x^2] \},$$

(отсчет идет от свободной энергии ПМ состояния  $-\tau \ln(2S + 1)$ ). Вариационные параметры  $s$  (средняя намагниченность) и  $m^2$  определяются из условий

$$\frac{\partial F}{\partial s} = \frac{\partial F}{\partial m^2} = 0. \quad (4)$$

Результаты численного решения уравнений (4) представлены на рисунке для случаев  $k = 1,5$  (сплошные линии) и  $k = 1,8$  (пунктирные линии). Верхняя из двух линий, соответствующих заданному  $k$ , изображает температурную зависимость параметра АФ порядка  $S_A$ , нижняя — то

же самое для ФМ порядка  $S_F$ . При всех температурах, при которых возможно ФМ упорядочение, его свободная энергия  $F_-$  — отрицательна. Свободная энергия АФ упорядочения  $F_+$  отрицательна лишь на той части кривой  $S_A(T)$ , которая лежит слева от стрелки. Справа от стрелки АФ состояние заведомо неустойчиво.



Если стрелке соответствует температура  $\tau_p$  ниже ФМ точки Кюри  $\tau_c$ , то АФ состояние должно переходить в результате фазового перехода первого рода в ФМ при температуре  $\tau_0$ , когда сравниваются их свободные энергии. Именно так обстоит дело при  $k=1,5$  (для  $\tau_0$  получено значение 0,12). После перехода в ФМ состояние следует фазовый переход второго рода в ПМ состояние. Если же  $\tau_p$  превышает  $\tau_c$ , то переход АФ — ФМ не обязателен: при температуре  $\tau_p$  может произойти фазовый переход из АФ непосредственно в ПМ состояние. Такова ситуация при  $k=1,8$ . В интервале между 1,5 и 1,8 лежит значение  $k_c$ , соответствующее тройной точке  $\tau_p = \tau_0$ . Чтобы доказать, что ПМ состояние характеризуется ФМ ближним порядком и при  $k > k_c$ , когда происходит переход из АФ непосредственно в ПМ состояние; достаточно стандартными методами вычислить ПМ температуру Кюри  $\Theta$ . Для нее получается значение  $1/3(1 - k/3)$ , которое положительно при рассматриваемых значениях  $k$ .

Полученные выше результаты подтверждаются анализом эксперимента по  $\text{EuSe}$ . Фазовый переход из АФ в ПМ состояние в нем при 4,6 К — первого рода (все экспериментальные данные вместе с ссылками на оригинальные работы приведены в [3]). О том, что в ПМ состоянии реализуется ФМ ближний порядок; свидетельствует, прежде всего, положительность  $\Theta = 9$  К. О том же свидетельствует и существование сильного красного сдвига края оптического поглощения при понижении температуры. Он наблюдается при температурах, несколько превышающих  $T_N = 4,6$  К, но исчезает ниже 4,6 К. Такой сдвиг типичен для ФМ полупроводников, но у АФ полупроводников он отсутствует. Таким образом, выше  $T_N$   $\text{EuSe}$  ведет себя подобно ФМ полупроводникам. В них красный

сдвиг в ПМ области обусловлен понижением дна зоны проводимости при установлении ближнего ФМ порядка. То же самое должно происходить и в  $\text{EuSe}$ .

Авторы признательны М.И. Каганову за ценные советы и замечания.

Поступила в редакцию

16 января 1979 г.

После переработки

27 февраля 1979 г.

### Литература

- [1] С. Kittel. Phys. Rev., **120**, 335, 1960; С. Bean, D. Rodbell. Phys. Rev., **126**, 104, 1962.
  - [2] В.М. Матвеев, ФТТ, **16**, 1635, 1974; Н. Chen, P. Levy. Phys. Rev., В, **7**, 4267, 4284, 1973.
  - [3] Э.Л. Нагаев. Физика магнитных полупроводников. М., изд. Наука, 1979.
-