

ВПЛИВ МАГНЕТНОГО ПОЛЯ НА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПІН-1 ІЗИНГІВСЬКОЇ МОДЕЛІ З БІЛІНІЙНИМИ ТА КВАДРУПОЛЬНИМИ ВЗАЄМОДІЯМИ. КЛАСТЕРНЕ НАБЛИЖЕННЯ

Р. Р. Левицький, О. Р. Баран

*Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна*

(Отримано 4 грудня 2003 р.; в остаточному вигляді — 18 квітня 2006 р.)

У кластерному наближенні вивчено вплив зовнішнього магнетного поля на спін-1 ізингівську модель із білінійними та квадрупольними взаємодіями. Побудовано фазові діаграми в площині (магнетне поле, температура) при різних значеннях квадрупольної взаємодії та отримано температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при різних значеннях параметрів моделі. Показано, що при значеннях квадрупольної взаємодії, за яких у нульовому магнетному полі в системі наявний температурний фазовий перехід квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза, включення магнетного поля не просто індукує ненульову намагненість у “парамагнетній” та “квадрупольній” фазах, а може приводити до розділення цього фазового переходу на каскад фазових переходів “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фази.

Ключові слова: спін-1 ізингівська модель, магнетне поле, кластерне наближення.

PACS number: 75.10.Hk, 75.10.-b

I. ВСТУП

Для адекватного опису багатьох магнетних матеріалів недостатньо використовувати спінові моделі лише з білінійними обмінними взаємодіями, оскільки в них обміни вищих порядків за спіном, природа яких для різних магнетиків є різною [1–3], відіграють суттєву роль. У зв'язку з цим теоретичному дослідженню спінових моделей із тензорними членами в гамільтоніані як обмінної (зокрема біквадратна взаємодія), так і необмінної (зокрема однойонна анізотропія) природи приділяють значну увагу [4–14].

Однією з найпростіших моделей, що містить у своєму гамільтоніані тензорні обміни, є спін-1 ізингівська модель ($S_i = S_i^z = 0, \pm 1$) з білінійними K та квадрупольними $K^{(q)}$ короткосяжними взаємодіями:

$$H = - \sum_{i=1}^N \Gamma S_i \quad (1.1)$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \left[K S_i S_{i+\delta} + K^{(q)} \left(S_i^2 - \frac{2}{3} \right) \left(S_{i+\delta}^2 - \frac{2}{3} \right) \right].$$

Тут Γ — магнетне поле; сумування i, δ пробігає по парах найближчих сусідів.

На основі цієї моделі в наближенні молекулярного поля (НМП) у випадку $\Gamma = 0$ досліджували квадрупольне впорядкування в магнетних матеріалах [4], причому квадрупольний момент в НМП виявляється параметром порядку. В наближенні ж константи зв'язку та наближенні двочастинкового кластера (НДК) квадрупольний момент не є параметром порядку [1, 15, 16]. Варто тут нагадати, що наближення константи зв'язку і двочастинкового кластера, а також наближення Бете (див., наприклад, [17]) перед-

бачають однакові результати, які, проте, отримуємо з різних міркувань.

Модель (1.1) є частковим випадком загальнішої моделі Блюма–Емері–Гріфітса

$$H = - \sum_{i=1}^N [\Gamma S_i + D S_i^2] \quad (1.2)$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} [K S_i S_{i+\delta} + K' S_i^2 S_{i+\delta}^2],$$

де D — однойонна анізотропія, K' — константа біквадратної короткосяжної взаємодії. Цю модель уведено в праці [18] для опису суміші He^3 – He^4 . Вона є однією з найінтенсивніше досліджуваних моделей у теорії конденсованих систем. Це пов'язано як з відносною простотою проведення на її основі наближених розрахунків та тестування різних наближених методів, так і з можливістю моделювання нею широкого класу реальних об'єктів. Вона ефективна і при дослідженні простих та багатокомпонентних рідин [11, 19, 20], дипольних та квадрупольних упорядкувань у магнетиках [1, 4, 11], двокомпонентних сплавів з феромагнетними та немагнетними компонентами [11, 21], упорядкування в напівпровідникових сплавах [22]. Крім того, багата фазова діаграма [17, 23–29] зумовлює і суто теоретичний інтерес до цієї моделі.

У своїй роботі ми вивчимо вплив магнетного поля на термодинамічні характеристики моделі (1.1) на простій кубічній ґратці при додатніх білінійній та квадрупольній взаємодіях у наближенні двочастинкового кластера. Буде показано, що магнетне поле не просто індукує ненульову намагненість у “парамагнетній” та “квадрупольній” фазах, а може приводити до розділення температурного фазового переходу на

каскад фазових переходів.

Слід зауважити, що у випадку моделі Блюма–Емері–Гріфітса НДК, на відміну від НМП (яким часто обмежуються або приймають як перше наближення при побудові фазових діаграм моделей магнетних систем із спин-спіновими та квадруполь-квадрупольними взаємодіями [4–7]), коректно реагує не лише на конкуренцію феромагнетної білінійної взаємодії з від’ємною однойонною анізотропією, а й на конкуренцію феромагнетної білінійної та від’ємної біквадратної взаємодій. Отримані в НДК фазові діаграми на площині (біквадратна взаємодія, температура) для моделі Блюма–Емері–Гріфітса на різних типах ґраток при нульовій однойонній анізотропії [16, 17, 30] якісно узгоджуються з результатами моделювання Монте-Карло [31, 32]. Стосовно робіт [16, 30, 31] слід, однак, ще зауважити, що наведені в них фазові діаграми на площині (біквадратна взаємодія, температура) при нульовій однойонній анізотропії є неповними: відсутня лінія, яка розділяє квадрупольну та нестійку квадрупольну фази, оскільки в цих роботах обмежилися однопідґратковою задачею. Про точність НДК свідчить і той факт, що для спин-1 ізінгівської моделі воно приводить до результатів, які збігаються з точними (див. [15]).

II. КЛАСТЕРНЕ НАБЛИЖЕННЯ

Для послідовного (з урахуванням залежності варіаційного поля від величини псевдоспіну) здійснення кластерного наближення для моделі (1.1) зручно виходити з гамільтоніана моделі Блюма–Емері–Гріфітса (1.2).

Вираз для вільної енергії моделі (1.2) в НДК отримуємо на основі одночастинкового

$$\begin{aligned} H_1 &= -\tilde{z}S_1 - \tilde{z}'S_1^2; \\ \tilde{z} &= \Gamma + z\varphi; \quad \tilde{z}' = D + z\varphi' \end{aligned} \quad (2.1)$$

(z — кількість найближчих сусідів) та двочастинкового

$$\begin{aligned} H_{12} &= -\tilde{z}(S_1 + S_2) - \tilde{z}'(S_1^2 + S_2^2) \\ &\quad - K S_1 S_2 - K' S_1^2 S_2^2; \\ \tilde{z} &= \Gamma + (z - 1)\varphi; \quad \tilde{z}' = D + (z - 1)\varphi' \end{aligned} \quad (2.2)$$

гамільтоніанів стандартно [16, 33, 34].

$$F = -k_B T N [(1 - z) \ln Z_1 + \frac{z}{2} \ln Z_{12}]; \quad (2.3)$$

$$Z_1 = 2e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{z}) + 1; \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} Z_{12} &= 2e^{\beta(2\tilde{z}'+K')} [e^{\beta K} \cdot \cosh(2\beta\tilde{z}) + e^{-\beta K}] \\ &\quad + 4e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{z}) + 1. \end{aligned}$$

Тут $\beta = (k_B T)^{-1}$. Кластерні поля φ та φ' є варіацій-

ними параметрами. Їх знаходимо з умови мінімуму вільної енергії, що дає систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \sinh(\beta\tilde{z})}{Z_1} &= \frac{e^{\beta(2\tilde{z}'+K'+K)} \cdot \sinh(2\beta\tilde{z}) + e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \sinh(\beta\tilde{z})}{Z_{12}}; \\ \frac{e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{z})}{Z_1} &= \frac{e^{\beta(2\tilde{z}'+K')} [e^{\beta K} \cdot \cosh(2\beta\tilde{z}) + e^{-\beta K}] + e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{z})}{Z_{12}}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Вирази для намагненості $m = \langle S \rangle = -\frac{1}{N} \frac{dF}{d\Gamma}$ і квадрупольного моменту $q = \langle S^2 \rangle = -\frac{1}{N} \frac{dF}{dD}$ з урахуванням (2.5) матимуть такий вигляд:

$$m = \frac{2e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \sinh(\beta\tilde{z})}{Z_1}; \quad q = \frac{2e^{\beta\tilde{z}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{z})}{Z_1}. \quad (2.6)$$

III. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО ДОСЛІДЖЕННЯ

На основі наведених вище результатів, покладаючи $K^{(q)} = K'$ та $D = -2zK'/3$, проведено числове дослідження впливу магнетного поля на термодинамічні характеристики моделі (1.1) на простій кубічній ґратці ($z=6$) при додатних K та $K^{(q)}$.

Використовуватимемо позначення для відносних величин: $t = 3k_B T / (2zK)$, $h = \Gamma / K$, $k^{(q)} = K^{(q)} / K$.

Результати при ненульовому магнетному полі легше описати, якщо ми спочатку нагадаємо й дещо доповнимо результати при нульовому полі. У цьому випадку в НДК [1, 15, 16], за аналогією до результатів НМП [4], розрізнятимемо три фази:

- феромагнетну фазу ($m \neq 0$, $q \neq 2/3$; характерним є спадні опуклі вверх $m(t)$, $q(t)$);
- парамагнетну фазу ($m = 0$, $q \neq 2/3$, $q(t \rightarrow \infty) = 2/3$; характерним є спадна опукла вниз або зростаюча опукла вверх $q(t)$);
- квадрупольну фазу ($m = 0$, $q \neq 2/3$; характерним є зростаюча опукла вниз $q(t)$).

Яка поведінка термодинамічних характеристик із зміною температури є характерною для згаданих фаз, ми визначали тільки при таких значеннях $k^{(q)}$, коли можна чітко сказати, у якій з фаз перебуває система: коли зі зміною температури в системі відбувається фазовий перехід (ФП). Слід зауважити, що в наближенні молекулярного поля критерій для розрізнення фаз є чіткішим, оскільки в НМП не тільки намагненість, а й квадрупольний момент моделі (1.1) є параметрами порядку (у парафазі $q = 2/3$) [4, 16, 30].

На рис. 1 зображено отриману в НДК фазову діаграму на $(k^{(q)}, t)$ площині. При $k^{(q)} < k_{\text{ТСР}}^{(q)}$ (ТСР — трикритична точка; $k_{\text{ТСР}}^{(q)} = 2.28$) НДК передбачає температурні фазові переходи феромагнетна →

парамагнетна фаза другого роду. В точці ФП відбувається занулення намагненості, квадрупольний момент має злам (див. рис. 3а). При $k_{\text{ТСР}}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{ТР}}^{(q)}$ (ТР — потрійна точка; $k_{\text{ТР}}^{(q)} = 3.0$) у системі відбуваються температурні фазові переходи феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду, причому $m(t_c + 0) = 0$, $q(t_c - 0) > q(t_c + 0)$ (див. рис. 4а; t_c — температура ФП). При $k_{\text{ТР}}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{СР}}^{(q)}$ (СР — критична точка; $k_{\text{СР}}^{(q)} = 3.2$) відбуваються температурні фазові переходи квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду. В точці ФП квадрупольний момент має розрив, причому $q(t_c - 0) < q(t_c + 0)$ (див. рис. 5а, 6а). При $k^{(q)} > k_{\text{СР}}^{(q)}$ НДК не передбачає фазового переходу зі зміною температури. Проте при низьких температурах поведінка $q(t)$ є такою, як характерно для квадрупольної, а при високих — для парамагнетної фази (див. рис. 7а).

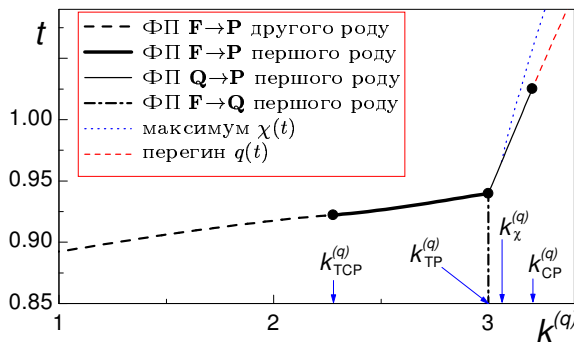


Рис. 1. Фазова діаграма на $(k^{(q)}, t)$ площині при нульовому зовнішньому магнетному полі. Товсті штрихована та суцільна лінії відповідають ФП феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза другого та першого родів відповідно. Тонка суцільна лінія відповідає ФП квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду. Товстий штрих-пунктир відповідає ФП феромагнетна \rightarrow квадрупольна фаза першого роду. Тонкі штрихована та пунктирна лінії відповідають перегинам та максимумам у температурних залежностях квадрупольного моменту та статичної магнетної сприйнятливості відповідно. ТСР — трикритична точка; ТР — потрійна точка; СР — критична точка; $k_{\chi}^{(q)}$ — координата перетину лінії температурного ФП з лінією, яка відповідає максимумам $\chi(t)$.

На рис. 1 також зображено лінію, що відповідає максимумам статичної магнетної сприйнятливості $\chi(t)$, та лінію, яка відповідає перегинам $q(t)$. Важливо відзначити, що лінія, яка відповідає максимумам $\chi(t)$, збігається з лінією фазового переходу квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза лівіше від критичної точки при $k^{(q)} = k_{\chi}^{(q)}$. У парамагнетній фазі при $k_{\chi}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{СР}}^{(q)}$ $\chi(t)$ не є спадною функцією, а має максимум [35]. Лінія ж, яка відповідає перегинам $q(t)$, збігається з лінією фазового переходу квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза у критичній точці при $k^{(q)} = k_{\text{СР}}^{(q)}$. Тому зручно вибирати як характеризуючу

функцію квадрупольний момент (при $k^{(q)} < k_{\text{СР}}^{(q)}$ $q(t)$ має характерну поведінку в різних фазах).

Фазова діаграма, отримана в наближенні молекулярного поля, є якісно інакшою [4, 16, 30]. При $k^{(q)} < 1.5$ та $1.5 < k^{(q)} < 3.0$ НМП, подібно як і НДК, передбачає температурні фазові переходи феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза другого та першого родів, відповідно ($k^{(q)} = 1.5$ та $k^{(q)} = 3.0$ — координати трикритичної та потрійної точок). Проте НМП не передбачає критичної точки: ФП квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду передбачається НМП при будь-яких $k^{(q)} > 3.0$, причому величина стрибка квадрупольного моменту не залежить від значення параметра $k^{(q)}$ ($q(t_c - 0) = 1/3$, $q(t > t_c) = 2/3$ при будь-яких $k^{(q)} > 3.0$).

У ненульовому магнетному полі, за аналогією до випадку з нульовим полем, будемо розрізняти також три фази: феромагнетну, “парамагнетну” та “квадрупольну”. “Парамагнетна” та “квадрупольна” фази відрізняються, відповідно, від парамагнетної та квадрупольної фаз лише ненульовою, індукованою магнетним полем, намагненістю, причому для “квадрупольної” фази характерним є зростаюча $m(t)$ (див., наприклад, рис. 5b), а для “парамагнетної” характерним є спадна випукла вниз $m(t)$ (див., наприклад, рис. 4b).

При ненульовому магнетному полі температурні фазові переходи можуть бути лише першого роду, причому в точці фазового переходу мають розриви всі розглянуті термодинамічні характеристики (намагненість, квадрупольний момент, статична сприйнятливості [35], теплоємність).

На рис. 2 зображено отримані в НДК фазові діаграми на (h, t) площині при різних значеннях квадрупольної взаємодії. На них наведено також лінії, які відповідають максимумам та перегинам у температурних залежностях статичної магнетної сприйнятливості та квадрупольного моменту відповідно.

Із рис. 2 можна бачити основний аспект зміни топології фазових діаграм на (h, t) площині зі зміною $k^{(q)}$. Зупинимося на цьому докладніше.

При величинах квадрупольної взаємодії, за яких у випадку $h = 0$ в системі з підвищенням температури відбувається ФП феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза другого роду ($k^{(q)} < k_{\text{ТСР}}^{(q)}$), включення поля приводить до “розмиття” (зникнення) температурного фазового переходу (див. рис. 3). Замість занулення намагненості та зламу квадрупольного моменту, як при фазовому переході феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза другого роду, при ненульовому полі наявні перегини в температурних залежностях намагненості і квадрупольного моменту, а $\chi(t)$ не розбігається, а має максимум [35]. Топології фазових діаграм на (h, t) площині для $k^{(q)} \in [0, k_{\text{ТСР}}^{(q)}[$ є такими, як на рис. 2а для $k^{(q)} = 1.4$ та $k^{(q)} = 2.2$. На цих фазових діаграмах наявні критичні точки. Причому точки, які відповідають температурам фазового переходу феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза другого роду при $h = 0$, є на фазових діаграмах на (h, t) площині критичними точками: $h_{\text{СР}} = 0$, $t_{\text{СР}} = t_c$.

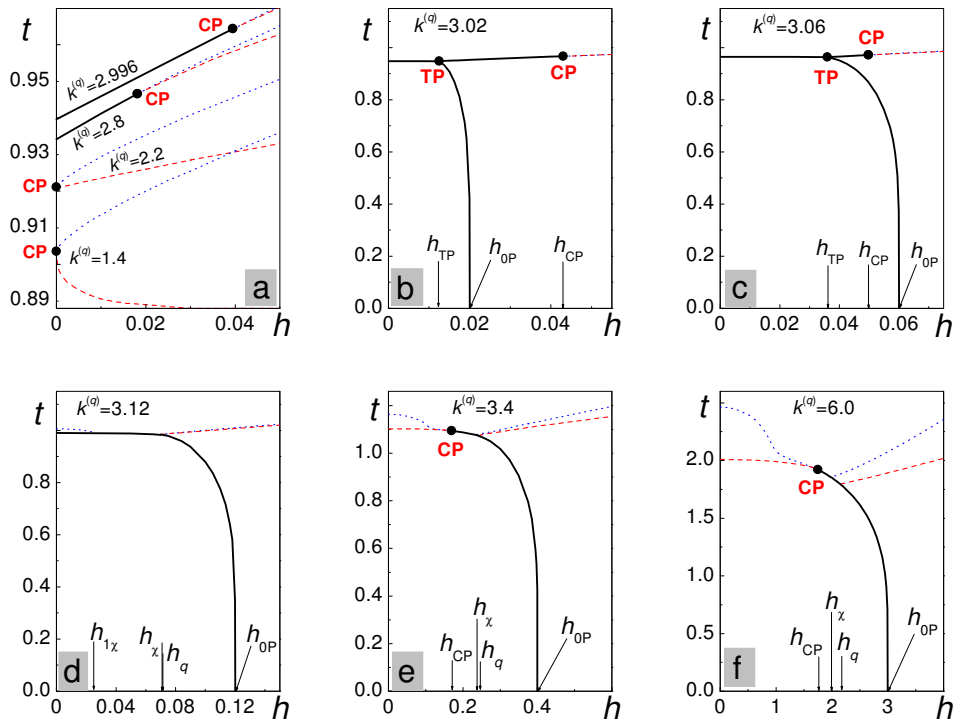


Рис. 2. Фазові діаграми на (h, t) площині при різних значеннях величини квадрупольної взаємодії: а – $k^{(q)} = 1.4$, 2.2, 2.8, 2.996; б – $k^{(q)} = 3.02$; в – $k^{(q)} = 3.06$; д – $k^{(q)} = 3.12$; е – $k^{(q)} = 3.4$; ф – $k^{(q)} = 6.0$. Товсті суцільні лінії відповідають фазовим переходам першого роду. Тонкі штрихована та пунктирна лінії відповідають перегинам та максимумам у температурних залежностях квадрупольного моменту та статичної магнетної сприйнятливості відповідно. TP – потрійна точка; CP – критична точка; OP – точка межі фаз в основному стані; $h_{1\chi}$, h_χ та h_q – координати перетину лінії температурного ФП з лініями, які відповідають максимумам у $\chi(t)$ та перегинам у $q(t)$.

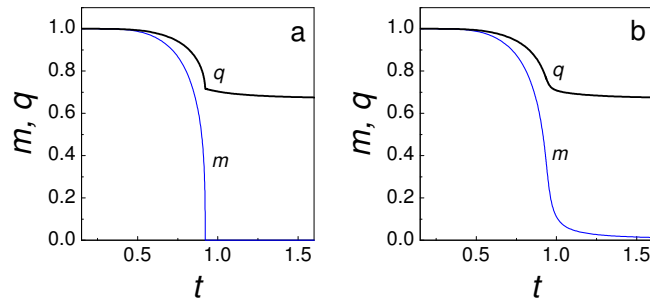


Рис. 3. Температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при $k^{(q)} = 2.2$ і різних значеннях поля: а – $h = 0.0$; б – $h = 0.05$.

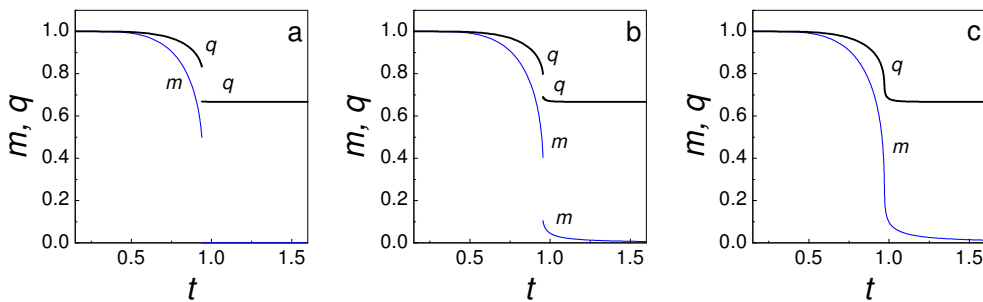


Рис. 4. Температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при $k^{(q)} = 2.996$ і різних значеннях поля: а – $h = 0.0$; б – $h = 0.025$; в – $h = 0.05$.

При величинах квадрупольної взаємодії, за яких у системі в нульовому магнетному полі з підвищенням температури відбувається фазовий перехід феромагнетна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду ($k_{\text{ТСР}}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{ТР}}^{(q)}$), збільшення магнетного поля приводить спочатку до зменшення стрибків термодинамічних характеристик у точці ФП феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фаза першого роду, а пізніше, при $h = h_{\text{СР}}$, до їх зникнення та “розмиття” цього температурного фазового переходу (див. рис. 2а, 4). Топології фазових діаграм на (h, t) площині при $k_{\text{ТСР}}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{ТР}}^{(q)}$ є такими, як на рис. 2а для $k^{(q)} = 2.8$ і $k^{(q)} = 2.996$.

При величинах квадрупольної взаємодії, за яких у системі в нульовому магнетному полі з підвищенням температури відбувається ФП квадрупольна \rightarrow парамагнетна фаза першого роду ($k_{\text{ТР}}^{(q)} < k^{(q)} < k_{\text{СР}}^{(q)}$; див. рис. 5а, 6а), із включенням магнетного поля ситуація не така однозначна, як у двох описаних вище випадках. Із погляду різних топологій фазових діаграм на (h, t) площині (див. рис. 2б, 2с, 2д) проміжок $k^{(q)} \in]k_{\text{ТР}}^{(q)}, k_{\text{СР}}^{(q)}[$ можна поділити на три частини: $k^{(q)} \in]k_{\text{ТР}}^{(q)}, 3.048[$, $k^{(q)} \in]3.048, 3.099[$, $k^{(q)} \in]3.099, k_{\text{СР}}^{(q)}[$.

При $k^{(q)} \in]k_{\text{ТР}}^{(q)}, 3.048[$ фазові діаграми на (h, t) площині мають топології такі, як фазова діаграма на рис. 2б. На них наявні потрійні точки при $h = h_{\text{ТР}}$, критичні точки при $h = h_{\text{СР}}$ та точки межі фаз в основному стані (0Р) при $h = h_{0\text{Р}} = k^{(q)} - 3$ (у яких зникає фазовий перехід при нульових температурах), причому $h_{0\text{Р}} < h_{\text{СР}}$. При малих полях у системі відбувається температурний фазовий перехід “квадрупольна” \rightarrow “парамагнетна” фаза (див. рис. 5б). Збільшення поля спричиняє розділення цього ФП у потрійній точці на каскад фазових переходів “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фаза (див. рис. 5с). Подальше збільшення поля приводить до зниження температури ФП “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна фаза аж до його зникнення при нульовій температурі, при $h = h_{0\text{Р}}$, та до зменшення стрибків термодинамічних характеристик при ФП феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фаза (див. рис. 5с, 5д) аж до їх зникнення та “розмиття” цього ФП.

При $k^{(q)} \in]3.048, 3.099[$ фазові діаграми на (h, t) площині мають топології такі, як фазова діаграма на рис. 2с і відрізняються від фазових діаграм із описаною вище топологією тим, що $h_{\text{СР}} < h_{0\text{Р}}$. При $h \in]0, h_{\text{ТР}}[$ у системі спостерігаємо температурний фазовий перехід “квадрупольна” \rightarrow “парамагнетна” фаза. При $h \in]h_{\text{ТР}}, h_{\text{СР}}[$ в системі відбувається каскад фазових переходів “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фаза, а при $h \in]h_{\text{СР}}, h_{0\text{Р}}[$ — ФП “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна фаза.

Слід зауважити, що лінії, які відповідають максимумам $\chi(t)$ та перегинам $q(t)$ в усіх описаних вище випадках (див. рис. 2а–2с), збігаються у критичну точку.

При $k^{(q)} = 3.099$ на фазовій діаграмі на (h, t) площині потрійна і критична точки збігаються та зника-

ють разом із лінією фазового переходу феромагнетна \rightarrow “парамагнетна” фаза, і при $k^{(q)} > 3.099$ вже немає межі між феромагнетною та “парамагнетною” фазами. При $k^{(q)} \in]3.099, k_{\text{СР}}^{(q)}[$ фазові діаграми мають топологію, як фазова діаграма на рис. 2д. Тут лінії, що відповідають максимумам $\chi(t)$, збігаються з лінією ФП при $h = h_{1\chi}$ та $h = h_{\chi}$, а лінія, що відповідає перегинам $q(t)$, — при $h = h_q$, причому $h_{\chi} \neq h_q$. Як змінюються температурні залежності намагнетченості та квадрупольного моменту зі зміною магнетного поля, показано на рис. 6. Із рис. 2д, 6 видно, що при $h \in [0, h_{0\text{Р}}[$ у системі відбувається температурний ФП, причому при малих полях температурні залежності термодинамічних характеристик в околі t_c є такими, як при ФП “квадрупольна” \rightarrow “парамагнетна” фаза, а при значеннях поля, близьких до $h_{0\text{Р}}$, — як при ФП “квадрупольна” \rightarrow феромагнетна фаза. При значеннях поля, близьких до h_q , у високотемпературній фазі в околі t_c температурні залежності одних термодинамічних характеристик є такими, як притаманно “парамагнетній” фазі, а інших — як притаманно феромагнетній фазі (наприклад, температура, при якій відбувається перегин $q(t)$, не збігається з температурою, при якій спостерігаємо перегин $m(t)$).

Якщо $k^{(q)} > k_{\text{СР}}^{(q)}$, коли в системі в нульовому магнетному полі відсутній температурний ФП (див. рис. 7а), фазові діаграми на (h, t) площині мають топології, як фазові діаграми на рис. 2е, 2ф. На цих фазових діаграмах наявні критичні точки при $h = h_{\text{СР}}$ та точки межі фаз в основному стані при $h = h_{0\text{Р}}$. Тут критичні точки іншого типу, аніж критичні точки на фазових діаграмах на рис. 2а–2с. У цих критичних точках зі збільшенням поля температурний фазовий перехід не зникає, а появляється. Слід також зауважити (див. рис. 2е, 2ф), що лінії, які відповідають максимумам $\chi(t)$ та перегинам $q(t)$, при малих полях збігаються з лінією фазового переходу у критичній точці (при $h = h_{\text{СР}}$), а лінії, які відповідають максимумам $\chi(t)$ та перегинам $q(t)$, при великих значеннях поля збігаються з лінією фазового переходу не в одній точці ($h_{\chi} < h_q$).

Окрім того, треба сказати, що при досить великих значеннях $k^{(q)}$ лінія, яка відповідає максимумам $\chi(t)$ при $h < h_{\text{СР}}$, розділяється на дві гілки (що якісно не міняє самих фазових діаграм). Фазові діаграми разом із лініями, що відповідають максимумам у температурних залежностях магнетної сприйнятливості, при квадрупольній взаємодії, значно більшій від $k_{\text{СР}}^{(q)}$, будуть наведені в окремій праці.

Як змінюються температурні залежності намагнетченості та квадрупольного моменту зі зміною магнетного поля, якщо $k^{(q)} > k_{\text{СР}}^{(q)}$, показано на рис. 7. Включення магнетного поля індукує ненульову намагнетченість, причому $m(t)$ має максимум (див. рис. 7б). Збільшення поля приводить до появи температурного ФП, причому спочатку намагнетченість у високотемпературній фазі має максимум (див. рис. 7с), пізніше $m(t)$ в околі t_c поводить, як при ФП “квадрупольна” \rightarrow “парамагнетна” фаза (див. рис. 7д), а при досить великих значеннях поля $m(t)$ та $q(t)$ в

околі t_c поведуться, як при ФП “квадрупольна” → феромагнетна фаза (див. рис. 7е). Подальше збільшення поля приводить до зменшення температури

ФП, аж до його зникнення при нульовій температурі (при $h = h_{0F}$).

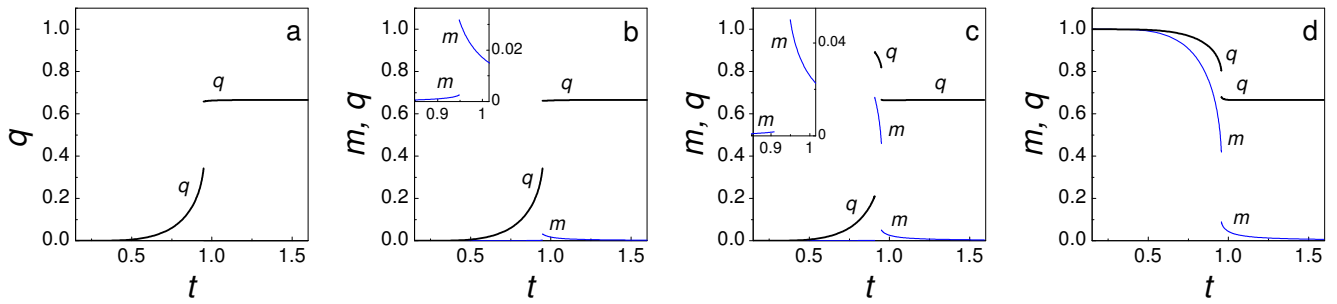


Рис. 5. Температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при $k^{(q)} = 3.02$ і різних значеннях поля: a — $h = 0.0$; b — $h = 0.01$; c — $h = 0.015$; d — $h = 0.025$.

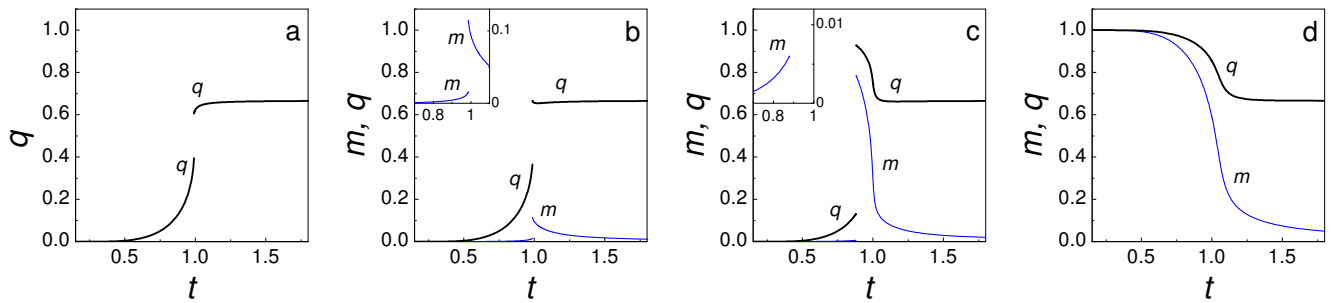


Рис. 6. Температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при $k^{(q)} = 3.12$ і різних значеннях поля: a — $h = 0.0$; b — $h = 0.06$; c — $h = 0.1$; d — $h = 0.25$.

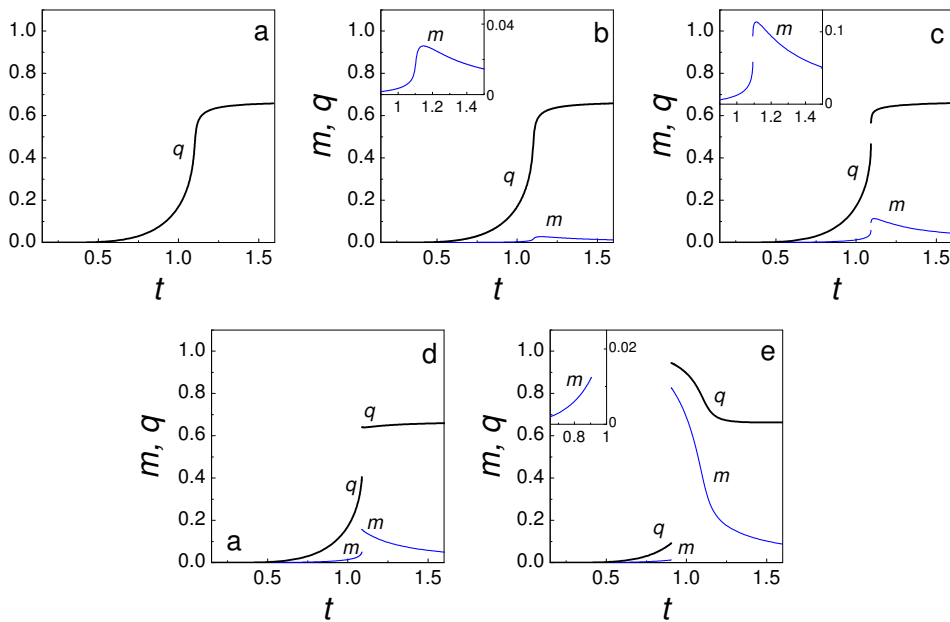


Рис. 7. Температурні залежності намагненості та квадрупольного моменту при $k^{(q)} = 3.4$ і різних значеннях поля: a — $h = 0.0$; b — $h = 0.05$; c — $h = 0.175$; d — $h = 0.2$; e — $h = 0.35$.

IV. ВИСНОВКИ

У наближенні двочастинкового кластера вивчено вплив магнетного поля на термодинамічні властивості спін-1 ізінгівської моделі магнетика з білінійними та квадрупольними взаємодіями на простій кубічній ґратці. Показано, що при значеннях квадрупольної взаємодії, за яких у системі при нульовому полі відбувається температурний фазовий перехід із феромагнетної в парамагнетну фази першого або другого роду, на фазових діаграмах у площині (температура, магнетне поле) наявна критична точка. При значеннях квадрупольної взаємодії, за яких у системі при нульовому полі відбувається температурний фазовий перехід із квадрупольної в парамагнетну фази першого роду, на фазових діаграмах у площині (температура, магнетне поле) можуть бути наявні погрійна точка, критична точка і точка межі фаз в основному стані або лише точка межі фаз в основному стані. При значеннях квадрупольної взаємодії, за яких у системі при нульовому полі температурний фазовий перехід відсутній, на фазових діаграмах у площині (температура, магнетне поле) наявні критична точка і точка межі фаз в основному стані.

Установлено, що якщо на фазовій діаграмі на площині (температура, магнетне поле) наявна критична точка, то в ній збігається лінія фазового переходу з лініями, які відповідають перегибам та максимумам у температурних залежностях квадрупольного моменту та статичної магнетної сприйнятливості відповідно.

Також показано, що на фазових діаграмах на площині (температура, магнетне поле) критичні точки є трьох типів. У критичних точках одного типу відбувається при нульовому магнетному полі температурний фазовий перехід із феромагнетної в парамагнетну фази другого роду, і включення поля “розмиває” цей перехід. У критичних точках другого типу зі збільшенням магнетного поля зникає температурний фазовий перехід з феромагнетної в “парамагнетну” фази першого роду. У критичних точках третього типу зі збільшенням поля температурний фазовий перехід появляється, причому в цьому випадку в околі температури фазового переходу термодинамічні характеристики поводяться, як при фазовому переході з “квадрупольної” в “парамагнетну” фази першого роду.

-
- [1] Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями* (Наука, Москва, 1988).
- [2] E. Čížmár, M. Kačmár, M. Orendáč, A. Orendáčová, J. Černák, A. Feher, J. Magn. Magn. Mater. **196–197**, 433 (1999).
- [3] Th. Strässle, F. Juranyi, M. Schneider, S. Janssen, A. Furrer, K. W. Krämer, H. U. Güdel, Phys. Rev. Lett. **92**, 257202 (2004).
- [4] H. Chen, P. Levy, Phys. Rev. B **7**, 4267 (1973).
- [5] J. Sivardiere, M. Blume, Phys. Rev. B **5**, 1126 (1972).
- [6] D. K. Ray, J. Sivardiere, Phys. Rev. B **18**, 1401 (1978).
- [7] F. P. Onufrieva, I. P. Shapovalov, J. Moscow Phys. Soc. **1**, 63 (1991).
- [8] H. A. Brown, Phys. Rev. B **31**, 3118 (1985).
- [9] Yu. K. Rudavsky, O. Z. Vatamaniuk, V. P. Savenko, Condens. Matter Phys. (Lviv) iss. 5, 143 (1995).
- [10] O. Z. Vatamaniuk, Yu. K. Rudavsky, Phys. Status Solidi B **197**, 199 (1996).
- [11] J. Sivardiere, in *Proc. Internat. Conf. Static critical phenomena in inhomogeneous systems, Karpacz 1984*, Lecture notes in physics **206** (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [12] T. Iwashita, N. Uryū, Phys. Status Solidi B **137**, 65 (1986).
- [13] T. Iwashita, N. Uryū, Phys. Status Solidi B **139**, 597 (1987).
- [14] T. Iwashita, N. Uryū, Phys. Status Solidi B **158**, 347 (1990).
- [15] K. Takahashi, M. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn **46**, 1428 (1979).
- [16] С. І. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, Укр. фіз. журн. **41**, 490 (1996).
- [17] K. Kasono, I. Ono, Z. Phys. B **88**, 205 (1992).
- [18] M. Blume, V. J. Emery, R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **10**, 1071 (1971).
- [19] D. Mukamel, M. Blume, Phys. Rev. A **10**, 610 (1974).
- [20] D. Furman, S. Dattagupta, R. B. Griffiths, Phys. Rev. B **15**, 441 (1977).
- [21] J. Bernasconi, F. Rys, Phys. Rev. B **4**, 3045 (1971).
- [22] K.E. Newman, J. D. Dow, Phys. Rev. B **27**, 7495 (1983).
- [23] K. Takahashi, M. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn **48**, 1423 (1980).
- [24] W. Hoston, A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **67**, 1027 (1991).
- [25] R. R. Netz, A. N. Berker, Phys. Rev. B **47**, 15019 (1993).
- [26] T. Balcerzak, M. Gzik-Szumiatka, Phys. Rev. B **60**, 9450 (1999).
- [27] M. Keskin, A. Erdinç, J. Magn. Magn. Mater. **283**, 392 (2004).
- [28] O. R. Baran, R. R. Levitskii, Phys. Status Solidi B **219**, 357 (2000).
- [29] O. R. Baran, R. R. Levitskii, Phys. Rev. B **65**, 172407 (2002).
- [30] Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, С. І. Сороков, препринт ІСМР–97–22U, Львів, 1997.
- [31] O. F. de Alcantara Bonfim, C. H. Obcemea, Z. Phys. B **64**, 469 (1986).
- [32] R. J. C. Booth, Lu Hua, J. W. Tucker, C. M. Care, I. Halliday, J. Magn. Magn. Mater. **128**, 117 (1993).
- [33] S. I. Sorokov, R. R. Levitskii, O. R. Baran, Condens. Matter Phys. (Lviv) iss. 9, 57 (1997).
- [34] Дж. Смарт, *Эффективное поле в теории магнетизма* (Наука, Москва, 1968).
- [35] Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, препринт ІСМР–01–36U, Львів, 2001.

**MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS
OF SPIN-1 ISING MODEL WITH BILINEAR AND QUADRUPOLEAR
INTERACTIONS. CLUSTER APPROXIMATION**

R. R. Levitskii, O. R. Baran
Institute for Condensed Matter Physics
1 Svientsitskii St., Lviv, 79011, Ukraine
e-mail: ost@icmp.lviv.ua

The influence of external magnetic field on spin-1 Ising model with bilinear and quadrupolar interactions is studied within the cluster approximation. Phase diagrams in the (magnetic field, temperature) plane are constructed at different values of quadrupolar interaction. Temperature dependences of magnetization and quadrupolar moment are obtained at different values of the model parameters. We show that at those values of the quadrupolar interaction when at zero magnetic field the system undergoes the temperature phase transition between quadrupolar and paramagnetic phases, the external magnetic field not only induces a non-zero magnetization in “paramagnetic” and “quadrupolar” phases, but also can split this transition into a cascade of phase transitions: “quadrupolar” \rightarrow ferromagnetic \rightarrow “paramagnetic” phase.