МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені І. І. МЕЧНИКОВА

САЙКО ПЕТРО ОЛЕКСІЙОВИЧ

УДК 537.61, 537.62, 537.63

КВАДРУПОЛЬНІ ТА КВАДРУПОЛЬНО-ФЕРОМАГНІТНІ ФАЗИ В ОДНОВІСНИХ МАГНЕТИКАХ ІЗ ОДНОІОННОЮ АНІЗОТРОПІЄЮ ТА БІКВАДРАТНОЮ ОБМІННОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

01.04.02 − теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса − 2020

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики та астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Маломуж Микола Петрович,
професор кафедри теоретичної фізики та астрономії, Одеський національний університет імені І. І. Мечникова.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Держко Олег Володимирович,
завідувач відділу квантової статистики, Інститут фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів);

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Славін Віктор Валерійович,
завідувач лабораторії чисельних методів теоретичної фізики, Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Вєркіна НАН України (м. Харків).

Захист дисертації відбудеться «5» лютого 2021 року о 14 год. 00 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 41.051.04 Одеського національного університету імені І. І. Мечникова за адресою:

65023, м. Одеса, вул. Пастера, 27, ОНУ імені І. І. Мечникова,
Велика фізична аудиторія.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Одеського національного університету імені І. І. Мечникова за адресою:
65082, м. Одеса, вул. Преображенська, 24
та на веб-сторінці спеціалізованої вченої ради Д 41.051.04 за адресою:
http://onu.edu.ua/uk/science/spec-sci-council/d4105104.

Автореферат розісланий «24» грудня 2020 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 41.051.04

кандидат фізико-математичних наук В. О. Ющенко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Пошук нових матеріалів з унікальними властивостями, обумовлений розвитком сучасних технологій, призводить до необхідності їх комплексного дослідження, зокрема до детального вивчення магнітних властивостей таких речовин. Протягом значного часу однією з моделей, яку найчастіше використовують для вивчення властивостей магнетиків, є модель Гайзенберґа [1]. Вона є основою побудови квантової теорії магнетизму. Проте магнітні властивості речовин з магнітоактивними іонами достатньо повно описуються цією моделлю, коли величина спіну магнітного іона S=1/2, а у випадку магнітних сполук з більшим значенням спіну ця модель не завжди дозволяє пояснити їх властивості у повній мірі. Експериментально досліджено багато магнетиків (DySb, TbTe, TmCu, $CsMnBr_3$ та інш.), в яких значну роль відіграють взаємодії мультиполів вищих порядків [2–3]. Вони впливають на формування властивостей основного стану, спектральні та термодинамічні характеристики таких магнітних систем.

Вивчення магнетиків з більш складною взаємодією між магнітними іонами, ніж звичайний гайзенберґівський обмін [4–10], завжди викликало інтерес та привертало значну увагу до вивчення модельних гамільтоніанів, які включають додаткові складові порівняно з моделлю Гайзенберга. При дослідженні магнетиків зі спіном S≥1 урахування поряд з обмінною взаємодією (ОВ) інших взаємодій, таких як тензорні взаємодії, до яких належать одноіонна анізотропія (ОА) та біквадратна обмінна взаємодія (БОВ) дозволяє більш адекватно описати їх властивості.

Підвищений інтерес дослідників викликає як теоретичне, так і експериментальне вивчення властивостей магнітних систем у випадку, коли тензорні взаємодії є порівняними або більшими за ОВ. Експериментальні та теоретичні дослідження магнетиків з БОВ [11–13] дозволили встановити, що в таких системах можуть виникати нові незвичайні магнітні структури. Наявність у гамільтоніані магнітної системі доданків, що відповідають ОА та БОВ, призводить до появи багатьох нових упорядкованих станів. Серед них присутні квадрупольні фази з тензорними параметрами порядку.

Найменшим значенням спіну, при якому у магнетику присутня ОА є S=1, при цьому ОВ вищих ступенів за спіном у даному випадку зводиться до БОВ. Цей випадок є найбільш простим, але в той же час дозволяє дослідити основні властивості моделей магнетиків за наявності ОА та БОВ. При розгляді властивостей магнетиків з БОВ найчастіше увага приділялася випадку ізотропної БОВ, а магнітним системам з анізотропною БОВ не приділялося достатньої уваги, особливо у випадку скінченних температур.

Вивчення властивостей магнетиків зі спіном S≥1 з урахуванням ОА та анізотропною БОВ дозволяє у подальшому використовувати їх для вивчення властивостей нових магнітних матеріалів та робить відповідні дослідження актуальними.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась на кафедрі теоретичної фізики та астрономії Одеського національного університету ім. І. І. Мечникова, а також є складовою частиною досліджень, які проводились за держбюджетною темою "Дослідження термодинамічних, критичних та кінетичних властивостей рідких металів та їх сплавів" №0118U000202. Напрямок роботи був узгоджений з планом наукових досліджень кафедри.

Мета і задачі дослідження. Основною *метою* дисертаційної роботи є теоретичне дослідження властивостей одновісного магнетика (Z – вісь симетрії) зі спіном S=1 з урахуванням ОА та анізотропної БОВ за відсутності або наявності повздовжнього зовнішнього магнітного поля у випадку скінченних температур, визначення властивостей впорядкованих фаз, що можуть реалізовуватися у таких магнетиках і переходів між цими фазами, та побудова фазових діаграм (ФД) при різних значеннях параметрів модельного гамільтоніана.

Відповідно до основної мети були поставлені та розв'язані наступні *задачі*:

1. Дослідити конкуренцію між феромагнітною фазою з віссю впорядкування *Z* (ФМФ) і площинною квадрупольною фазою з площиною впорядкування *XOY* (ПКФ) та розглянути особливості фазових переходів (ФП) між ними за скінченних температур.

2. Дослідити осьову квадрупольну фазу (ОКФ) з віссю впорядкування *Z* та визначити вплив зовнішнього магнітного поля на структуру спектра спінових збуджень у цій фазі.

3. Дослідити ФП між фазою ОКФ та іншими можливими фазами за наявності зовнішнього магнітного поля.

4. Вивчити особливості ФП між ОКФ та ПКФ за відсутності зовнішнього магнітного поля.

5. Побудувати ФД одновісного магнетика з ОА та анізотропною БОВ за наявності зовнішнього магнітного поля та вивчити поведінку можливих мультикритичних точок в залежності від констант ОА та анізотропії БОВ.

Об'єктом дослідження є одновісні магнетики з тензорними взаємодіями – ОА та анізотропною БОВ у випадку одиничного спіну.

Предметом дослідження даної роботи є впорядковані фази одновісних магнетиків з ОА та анізотропною БОВ; фазові діаграми, що ілюструють ФП за наявності або відсутності зовнішнього магнітного поля за скінченних температур; поведінка параметрів порядку в упорядкованих фазах; спектри спінових збуджень у різних фазах; гістерезисні явища, що супроводжують фазові переходи.

Методи дослідження. У роботі, поряд з перевіреними часом підходами квантової теорії магнетизму, використовуються сучасні методи теоретичної фізики. Зокрема, використовується метод унітарного перетворення [4] та метод динамічної матриці (МДМ) [14]. При необхідності, разом з аналітичними використовуються чисельні розрахунки.

Наукова новизна одержаних результатів. У дисертаційній роботі набуло подальшого розвинення дослідження магнетиків з тензорними взаємодіями на

основі моделі одновісного магнетика зі спіном S=1 за наявності ОА та анізотропної БОВ найбільш загального вигляду. У результаті проведених досліджень вперше були отримані наступні результати:

1. Досліджено явища, які виникають при ФП між фазами ФМФ та ПКФ за скінченних температур та мають гістерезисний характер.

2. Отримано спектр спінових збуджень у фазі ОКФ в найбільш загальному для одновісного магнетика випадку за наявності повздовжнього зовнішнього магнітного поля та визначено його вплив на структуру спектра.

3. Виявлено, що критична температура ФП між фазами ОКФ та змішаною квадрупольно-феромагнітною фазою (КФФ) має специфічну нелінійну залежність від параметрів анізотропії БОВ η та ζ.

4. Запропоновано альтернативний спосіб отримання фазової границі між фазами ОКФ та ФМФ на основі вивчення поведінки компоненти параметра порядку $\langle Q^2 \rangle$.

5. Доведено можливість "квадрупольного гістерезису" при ФП між фазами ОКФ і ПКФ за відсутності магнітного поля, який істотно відрізняється від гістерезису, що спостерігається у магнетиках за наявності магнітного поля.

6. Побудовано ФД діаграму одновісного магнетика з ОА та анізотропною БОВ за наявності зовнішнього магнітного поля та досліджено поведінку можливих мультикритичних точок в залежності від значень констант ОА та БОВ.

Практичне значення отриманих результатів. Отримані результати дослідження теоретичної моделі магнітних систем з ОА та анізотропною БОВ можуть бути використані експериментаторами при підготовці та проведенні експериментів, а також використовуватися як теоретичне підґрунтя при поясненні отриманих результатів. Результати проведених досліджень також будуть корисними при створенні магнітних матеріалів із заздалегідь визначеними властивостями, при проектуванні та виготовленні різних технічних приладів, наприклад, таких як низькотемпературні датчики магнітного поля, тиску та температури.

Особистий внесок здобувача. В дисертаційній роботі було розглянуто відомості про сучасний стан дослідження магнетиків з тензорними взаємодіями, здійснено огляд експериментальних і теоретичних робіт з цієї тематики, обґрунтовано необхідність подальшого дослідження магнетиків з тензорними взаємодіями. Усі наукові результати, що ввійшли в дисертацію, були отримані за особистою участю здобувача. Роботи [1–6] (зі списку статей автора за темою дисертації) опубліковані у співавторстві з І. П. Шаповаловим.

У роботі [1] автору належить дослідження залежності координат потрійної точки від значень констант ОА і БОВ.

У роботі [2] автору дисертації належить дослідження гістерезисних явищ за скінченних температур.

У роботі [3] автору дисертації належить дослідження властивостей фази ОКФ та побудова границі між фазами ОКФ та ПКФ.

У роботі [4] автору дисертації належить дослідження ФП між фазами ОКФ та ПКФ, побудова температурної залежності квадрупольної намагніченості $\langle Q^0 \rangle$

і $\langle Q^2 \rangle$ та аналіз “квадрупольного гістерезису” за відсутності зовнішнього магнітного поля.

У роботі [5] автору дисертації належить побудова фазової діаграми магнетика зі спіном S=1 у повздовжньому магнітному полі за наявності ОА та БОВ.

У роботі [6] автору дисертації належить побудова та аналіз температурної залежності квадрупольної намагніченості $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$, побудова фазової границі між фазами ОКФ та ФМФ, розрахунок спектра спінових збуджень у фазі ОКФ за наявності повздовжнього зовнішнього магнітного поля та визначення впливу магнітного поля на структуру спектра, побудова залежності критичної температури θ^* фазових переходів між фазами ОКФ та КФФ від констант анізотропії БОВ η та ζ за різних значень напруженості магнітного поля.

У роботах [1-6], що виконані із співавтором, здобувачу також належить проведення чисельних розрахунків та графічне зображення фазових діаграм та інших графічних залежностей.

Обговорення результатів та формулювання висновків проводились спільно з науковим керівником проф. М. П. Маломужем та І. П. Шаповаловим.

Апробація результатів дисертації. Наукові результати дисертаційної роботи неодноразово доповідалися та обговорювалися на семінарах кафедри теоретичної фізики та астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова, а також на 6 наступних міжнародних наукових конференціях, школах-семінарах та симпозіумах:

1. International Workshop «Magnetic Phenomena in Micro- and Nano-Structures», May 27-29, 2010, Donetsk, Ukraine.
2. IV Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології», 28 червня - 2 липня, 2010, Одеса, Україна.
3. Young Scienstists Conference «Modern Problems of Teoretical Physics», December 22-24, 2010, Kyiv, Ukraine.
4. Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2011, 24-27 травня, 2011, Ужгород, Україна.
5. IV Young Scienstists Conference «Modern Problems of Teoretical Physics», October 23-26, 2012, Kyiv, Ukraine.
6. XVI Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 9-10 червня 2016, Львів.

Публікації. За результатами дисертаційної роботи опубліковано 6 статей у фахових виданнях та 7 матеріалів конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота викладена на 161 сторінці машинописного тексту, складається зі вступу, чотирьох розділів основної частини, у яких викладені результати досліджень, висновків, списку використаних джерел, що містить 133 посилання, і 5 додатків. Обсяг основного тексту дисертації складає 119 сторінок друкованого тексту. Робота ілюстрована 21 рисунком та 12 таблицями.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету та завдання роботи, наведено шляхи і методи їх розв'язання, визначено об'єкт та предмет дослідження, визначено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів дослідження, визначено особистий внесок здобувача, наведено відомості про апробацію роботи, публікації, конференції, наведено стислу характеристику дисертації.

У **першому розділі** наведені відомості про сучасний стан досліджень магнетиків, що містять поряд з обмінною взаємодією ОА та БОВ. Розглянуто основні підходи до вивчення такого типу магнетиків. Здійснено огляд експериментальних і теоретичних робіт з цієї тематики, обґрунтована необхідність подальшого дослідження магнетиків з тензорними взаємодіями – ОА та анізотропною БОВ.

У **другому розділі** представлена методика вивчення магнетиків з ОА та БОВ. Розглянуто структуру гамільтоніана досліджуваної магнітної системи та його представлення за допомогою різних типів операторів. Обгрунтовано можливість використання методу унітарних перетворень та методу динамічної матриці при вивченні таких магнетиків.

У **підрозділі 2.1** було розглянуто структуру гамільтоніана магнітної системи та його представлення за допомогою ермітових квадрупольних операторів S,Q, операторів Хаббарда X^{pq} та незвідних тензорних операторів. Було обрано модель гамільтоніана для дослідження одновісного магнетика з одиничним спіном за наявності зовнішнього магнітного поля.

У випадку використання базису ермітових операторів Q, який включає 3 спінових оператори S^X,S^Y,S^Z та п'ять квадрупольних операторів Q^P (p=0,±1,±2), гамільтоніан одновісного магнетика з одиничним спіном у повздовжньому полі h ($h \parallel Z$, а $h_\perp$=0) можна надати у наступному вигляді:

$$H = -h\sum_i S_i^Z - \sum_{i,j} J_{ij}\left[S_i^Z S_j^Z + \xi\left(S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y\right)\right] + \frac{1}{3}D\sum_i Q_i^0 - \\ -\sum_{i,j} K_{ij}\left[\frac{1}{3}Q_i^0 Q_j^0 + \eta\left(Q_i^1 Q_j^1 + Q_i^{-1} Q_j^{-1}\right) + \zeta\left(Q_i^2 Q_j^2 + Q_i^{-2} Q_j^{-2}\right)\right], \quad (1)$$

де J_{ij} – константи, обумовленні ОВ, i та j – індекси, які нумерують вузли кристалічної ґратки, $S^\alpha(\alpha = x, y, z)$ – спінові оператори, D – константа ОА, K_{ij} – константа БОВ, ξ − константа анізотропії ОВ, η та ζ − константи анізотропії БОВ.

Для ефективного визначення термодинамічних параметрів, що описують макроскопічні магнітні стани магнетика, важливо знати симетрію гамільтоніана даної системи.

Для аналізу симетрії гамільтоніана (1) необхідно обчислити комутатори операторів базису Q та гамільтоніана системи.

Симетрія гамільтоніана (1) залежить від того, які значення приймають параметри гамільтоніана ξ, η, ζ, *h, D,* J_0 та K_0. При різних значеннях параметрів можливі наступні випадки:

а) при довільних значеннях вказаних параметрів дорівнює нулю тільки комутатор $\left[\sum_p S_p^z, H\right]$, а для гамільтоніана наявна лише одна операція безперервної симетрії – інваріантність щодо перетворення $\exp(i\alpha S^Z)$, де α − довільний кут. Тобто, маємо "одновісний" гамільтоніан (з віссю симетрії Z). При цьому ОВ, анізотропія якої задається величинами ξ ,η, ζ, також має одновісну симетрію.

До порушення одновісної симетрії ОВ можуть привести доданки, які мають вигляд:

$$\sum_{i,j} J_{ij}\left(\xi_1 S_i^X S_j^X + \xi_2 S_i^Y S_j^Y\right),\ \sum_{i,j} K_{ij}\left(\eta_1 Q_i^1 Q_j^1 + \eta_2 Q_i^{-1} Q_j^{-1}\right),\ \sum_{i,j} K_{ij}\left(\zeta_1 Q_i^2 Q_j^2 + \zeta_2 Q_i^{-2} Q_j^{-2}\right). \qquad (2)$$

У роботі розглядається одновісний випадок, коли виконуються умови:

$$\xi_1 = \xi_2 = \xi,\ \eta_1 = \eta_2 = \eta,\ \zeta_1 = \zeta_2 = \zeta.$$

б) при виконанні умов *h=D=0,* ξ=η=ζ=1 дорівнюють нулю три комутатора $\left[\sum_p S_p^z, H\right]$, $\left[\sum_p S_p^x, H\right]$, $\left[\sum_p S_p^y, H\right]$, що відповідає симетрії SU(2). У цьому випадку гамільтоніан має вигляд:

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij}\left(\vec{S}_i \vec{S}_j\right) - \sum_{i,j} K_{ij}\left(\vec{S}_i \vec{S}_j\right)^2 \qquad (3)$$

та ОВ є ізотропною.

в) якщо при цьому виконується умова $J_{ij} = K_{ij}$, то всі вісім комутаторів операторів базису *Q* та гамільтоніана системи дорівнюють нулю, та має місце симетрія SU(3).

Формула (1) подає найбільш загальний вигляд одновісного гамільтоніана. Додавання до нього будь-якого доданку призводить до простого перенормування констант, або до втрати одновісної симетрії.

У **підрозділі 2.2** розглянуто метод побудови динамічної матриці, запропонований у роботі [14], який дозволяє визначити можливі однорідно-впорядковані фази та спектри спінових збуджень у фазах досліджуваного магнетика.

У **підрозділі 2.3** описано метод унітарних перетворень, що можливо використати для діагоналізації модельного гамільтоніана. При розгляді властивостей магнетиків зі спіном S>1/2 розглянута доцільність використання методу унітарних перетворень, що був запропонований у роботі [4] для систем з ОА, а у роботі [15] − для випадку наявності в системі анізотропної БОВ.

У третьому розділі вивчені властивості симетричних фаз та гістерезисні явища, які можуть виникати у досліджуваній магнітній системі.

У **підрозділі 3.1** розглянуто розв'язки системи рівнянь для параметрів φ, χ, ψ унітарного перетворення, яке приводить гамільтоніан магнітної системи (1) до діагонального вигляду, та відповідні їм фази, що виникають як за наявності зовнішнього магнітного поля, так і у випадку його відсутності.

У **підрозділах 3.2** та **3.3** надано коротку характеристику фаз ФМФ та ПКФ, які були досліджені в роботах [15−22].

У **підрозділі 3.4** наведено розрахунок для ентропії та вільної енергії магнітної системи у симетричних фазах ФМФ та ПКФ.

У **підрозділі 3.5** досліджується конкуренція фаз ФМФ і ПКФ.

У певному інтервалі значень параметрів гамільтоніана у магнетику можливе виникнення симетричних фаз: ФМФ та ПКФ.

У підрозділі наведено діаграму стійкості, стабільності та метастабільності цих фаз (рис. 1).

На ФД (рис. 1) лінії **1** та **2** є границями стійкості фаз ПКФ та ФМФ відповідно.

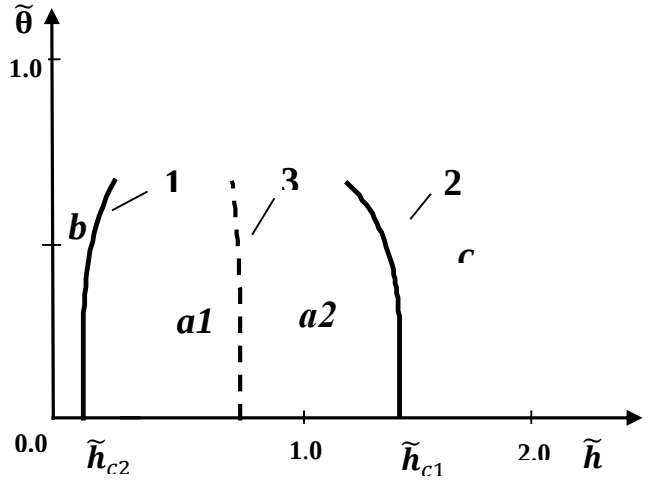

Рис. 1. Діаграма стійкості, стабільності та метастабільності симетричних фаз ФМФ та ПКФ. Побудовано за значень параметрів: $\tilde{D} = 0{,}5; \tilde{K}_0 = 1{,}25; \xi = 1; \eta = 0{,}85$

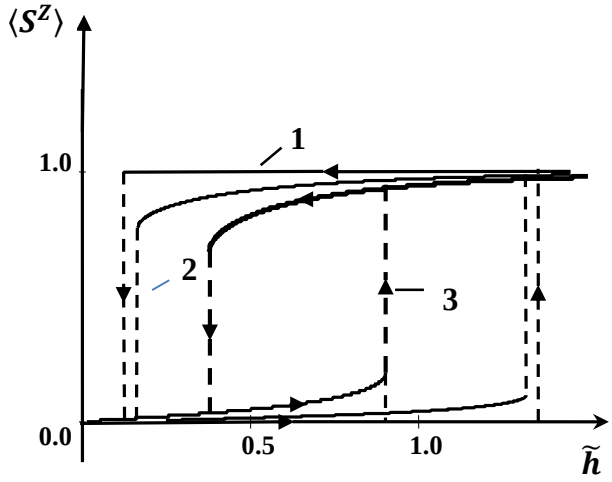

Рис. 2. Залежність відносної намагніченості $\langle S^Z \rangle$ від величини $\tilde{h}$: лінія 1 – $\tilde{\theta} = 0$; лінія 2 – $\tilde{\theta} = 0{,}5$; лінія 3 – $\tilde{\theta} = 0{,}8$. Побудовано за значень параметрів: $\tilde{D} = 0{,}5$; $\tilde{K}_0 = 1{,}2$

В області **a** (**a1**, **a2**) спектри фаз ФМФ та ПКФ одночасно є стійкими, а лінія **3** є границею стабільності фаз ФМФ та ПКФ. Лінія **3** визначається з умови рівності вільної енергії в обох цих фазах.

Таким чином, з аналізу приведеної на рис. 1 діаграми можна зробити висновок, що в області **a1** фаза ПКФ є стабільною, а фаза ФМФ може бути реалізована тільки як метастабільна. Тоді як в області **a2** навпаки − стабільною є фаза ФМФ, а фаза ПКФ може бути реалізована лише як метастабільна.

В області **b** фаза ФМФ є нестійкою і реалізується тільки фаза ПКФ, а в області **c** спостерігається протилежна ситуація. Різниця в значеннях компонентів ПП для ФМФ і ПКФ на лінії **3** зменшується зі зростанням значення температури.

Також у підрозділі розглянуто залежність відносної намагніченості $\langle S^Z \rangle$ від величини зовнішнього магнітного поля h (рис. 2). Показано, що як у випадку нульових температур (лінія 1) так і за скінченних температур (лінії 2 та 3) відповідна залежність відносної намагніченості має гістерезисний вигляд.

Було розраховано залежність енергії перемагнічування W від величини параметра η за нульової температури. Вона має майже лінійний характер.

У **підрозділі 3.6** вивченні деякі особливості ФД магнетика за скінченних температур за наявності фаз ПКФ, ФМФ та парамагнітної фази (ПМФ) за відповідних значень параметрів гамільтоніана. Зокрема, розглянуто границю між ПМФ та іншими фазами. Особливістю ФД є наявність мультикритичної точки.

На рис. 3 приведена відповідна фазова діаграма досліджуваної системи в безрозмірних координатах $\tilde{\theta} - \tilde{h}$ ($\tilde{\theta} = \theta/J_0$, $\tilde{h}=h/J_0$).

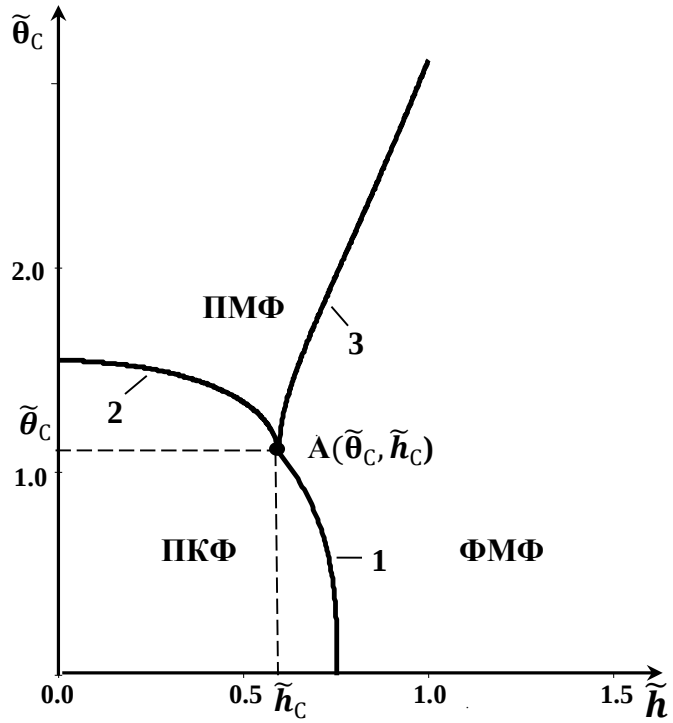

Рис. 3. Фазова діаграма магнетика за скінченних температур. Діаграма побудована за значень параметрів гамільтоніана: $\tilde{D} = 0{,}5$; $\tilde{K}_0 = 1{,}25$

Розглянемо більш детально особливості цієї ФД. Лінія **1** визначається умовою рівності вільних енергій у відповідних фазах. Лінії **2** та **3** є межами фази ПМФ з ПКФ та ФМФ відповідно. Точка $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_C, \tilde{h}_C)$ на ФД є критичною точкою та викликає особливий інтерес. Ця точка на ФД досліджуваної магнітної системи відноситься до так званих мультикритичних точок, які визначаються перетином двох або більше фазових границь та допускають існування декількох упорядкованих фаз. Так, у даному випадку точка $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_C, \tilde{h}_C)$ є бікритичною точкою, тобто точкою перетину двох ліній ФП другого роду і однієї лінії ФП першого роду. У цій точці сходяться три фазові границі і вона є точкою рівноваги трьох фаз: ПКФ, ФМФ та ПМФ. Координати $\tilde{\theta}_C$ та $\tilde{h}_C$ критичної точки $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_C, \tilde{h}_C)$ є функціями параметрів гамільтоніана D та K_0. Залежність координат цієї точки від параметрів гамільтоніана D та K_0 має майже лінійний характер.

У **четвертому розділі** досліджені властивості несиметричних фаз та побудовані відповідні фазові діаграми за їх наявності. Також показано, що в досліджуваній магнітній системі поряд з класичним магнітним гістерезисом має місце особливий вид поведінки подібної до гістерезисної – “квадрупольний гістерезис”, який виникає у випадку відсутності магнітного поля.

У підрозділі 4.1 вивчається фаза ОКФ. Властивості фази ОКФ були досліджені в роботах [15, 16, 23]. У цьому підрозділі проведено більш детальне дослідження цієї фази.

Фазі ОКФ відповідає наступний набір значень параметрів унітарних перетворень гамільтоніана магнітної системи (1):

– при h=0: $\varphi = -\pi/2$, $\chi = 0$, $\psi = \pi/4$,

– при $h \neq 0$: $\varphi = -\pi/2$, $\sin 2\chi = \dfrac{-h}{(K_0\varsigma - J_0)(\sigma+\lambda)}$, $\psi = \pi/4$,

де введені позначення: $\sigma \equiv \langle \tilde{S}^Z \rangle$, $\lambda \equiv \langle \tilde{Q}^0 \rangle$.

Відповідні значення ПП, як функції параметрів гамільтоніана та величин σ та λ мають вигляд:

$$\langle S^Z \rangle = -\frac{(\sigma+\lambda)}{2}\sin 2\chi,\ \langle Q^0 \rangle = (3\sigma-\lambda)/2,\ \langle S^X \rangle = 0,\ \langle Q^{-1} \rangle = 0,\ \langle Q^2 \rangle = \frac{(\sigma+\lambda)}{2}\cos 2\chi,$$

які за нульової температури та при значеннях параметрів σ=0, λ=–2, дорівнюють:

$$\langle S^Z \rangle = \sin 2\chi,\ \langle Q^0 \rangle = 1,\ \langle S^X \rangle = 0,\ \langle Q^{-1} \rangle = 0,\ \langle Q^2 \rangle = -\cos 2\chi.$$

Тоді вирази для компонент ПП можна записати таким чином:

$$< S^Z > = \frac{h}{2(K_0\varsigma - J_0)},\ \langle Q^0 \rangle = (3\sigma-\lambda)/2,\ \langle Q^2 \rangle = -\frac{\sqrt{(K_0\varsigma - J_0)^2(\sigma+\lambda)^2 - h^2}}{2(K_0\varsigma - J_0)}, \tag{4}$$

$$\langle S^X \rangle = 0, \quad \langle Q^{-1} \rangle = 0.$$

Гамільтоніан системи в наближенні молекулярного поля за наявності зовнішнього магнітного поля має вигляд:

$$H_0 = -(h + 2J_0\langle S^Z \rangle)\sum_i S_i^Z + \frac{1}{3}(D - 2K_0\langle Q^0 \rangle)\sum_i Q_i^0 - 2\varsigma K_0 \langle Q^2 \rangle \sum_i Q_i^2, \tag{5}$$

відповідно середнє значення енергії, що припадає на один іон, дорівнює:

$$E = -h\langle S^Z \rangle - 2J_0\langle S^Z \rangle^2 + \frac{1}{3}D\langle Q^0 \rangle - \frac{2}{3}K_0\langle Q^0 \rangle^2 - 2\varsigma K_0 \langle Q^2 \rangle^2,$$

а вираз для енергії основного стану має вигляд:

$$E_{OCH} = \frac{1}{3}D - \frac{8}{3}K_0 - 2K_0(\zeta - 1).$$

У фазі ОКФ квадрупольна складова ПП $\langle Q^0 \rangle$, яка задається другим виразом формули (4), не залежить від магнітного поля h.

Температурна залежність квадрупольних складових параметра порядку $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$ від безрозмірної температури $\tilde{\theta}(\tilde{\theta} = \theta/J_0)$ наведена на рис. 4 та рис. 5. Лінії побудовано за значень параметрів гамільтоніана: J_0=1,0; D=1,2; K_0=1,25; ξ=1,0; η=2,0; ζ =3,0.

Зі збільшенням величини поля фаза ОКФ переходить у феромагнітну фазу ФМФ, тобто відбувається фазовий перехід другого роду. Критична температура $\tilde{\theta}_C$ цього ФП, яка відповідає значенню температури, на якому закінчується лінія $\langle Q^0 \rangle = f(\tilde{\theta})$, залежить від величини магнітного поля h. Оскільки в феромагнітній фазі ФМФ виконується умова $\langle Q^2 \rangle$=0, точки $\tilde{\theta}_{cm}$ (m=1,2,3) для кожної кривої на рис. 5 є точками ФП з фази ОКФ в ФМФ, а сукупність кривих на рис. 5 дозволяє визначити множину точок фазової межі ОКФ↔ФМФ в координатах $\tilde{\theta} - \tilde{h}$.

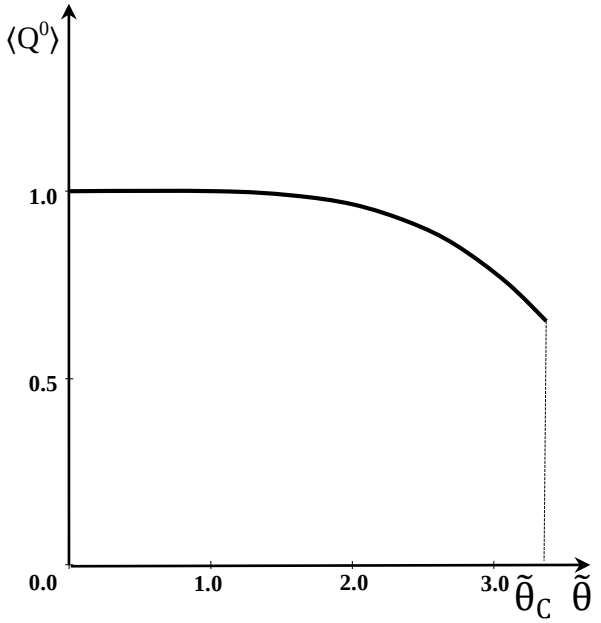

Рис. 4. Температурна залежність квадрупольної намагніченості $\langle Q^0 \rangle$

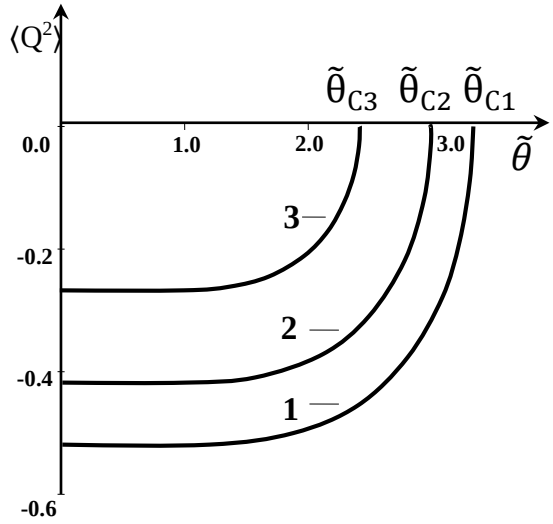

Рис. 5. Температурна залежність квадрупольної намагніченості $\langle Q^2 \rangle$ при різних значеннях безрозмірного поля: $1 - \tilde{h} = 4{,}7$; $2 - \tilde{h} = 5{,}0$; $3 - \tilde{h} = 5{,}3$

Ця межа приведена на рис. 6. Вона цілком співпадає с лінією втрати стійкості спінових збуджень в ФМФ, що побудована за алгоритмом роботи [16].

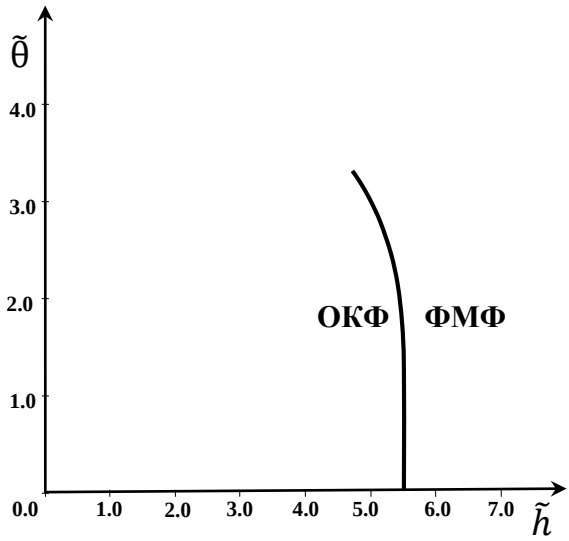

Рис. 6. Межа між фазами ОКФ та ФМФ. Побудована за значень параметрів гамільтоніана: $J_0 = 1{,}0; \tilde{D} = 1{,}2; \tilde{K}_0 = 1{,}25; \xi = 1; \eta = 2{,}0; \zeta = 3{,}0$

Визначення відповідних віток спектра за скінченних температур доцільно проводити за допомогою МДМ [14]. Дві вітки спектра спінових збуджень за умови h=0 були отримані в роботі [23], а у випадку наявності ненульового зовнішнього магнітного поля узагальнення обчислень дозволяє отримати наступний вираз для першої вітки спектра:

$$\omega_1(\vec{k}) = \left\{ L(\vec{k}) + \sqrt{L^2(\vec{k}) - 4M(\vec{k})} \right\}^{1/2}, \qquad (6)$$

де

$$L(\vec{k}) = A_{\mathbf{k}}^2 - B_{\mathbf{k}}^2 + G_{\mathbf{k}}^2 - H_{\mathbf{k}}^2 + 2C_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}} - 2D_{\mathbf{k}}F_{\mathbf{k}}, \quad M(\vec{k}) = \det \begin{Vmatrix} A_{\mathbf{k}} & B_{\mathbf{k}} & C_{\mathbf{k}} & D_{\mathbf{k}} \\ -B_{\mathbf{k}} & -A_{\mathbf{k}} & -D_{\mathbf{k}} & -C_{\mathbf{k}} \\ E_{\mathbf{k}} & F_{\mathbf{k}} & G_{\mathbf{k}} & H_{\mathbf{k}} \\ -F_{\mathbf{k}} & -E_{\mathbf{k}} & -H_{\mathbf{k}} & -G_{\mathbf{k}} \end{Vmatrix}.$$

Відповідні значення коефіцієнтів матриці $M(\vec{k})$ наведені у таблиці 1.

Таблиця 1

Коефіцієнти матриці $M(\vec{k})$

Коефі-цієнт	Відповідний вираз
$A_{\mathbf{k}}$	$h\sin 2\chi - D + (3\sigma - \lambda)K_0 - (\sigma + \lambda)(J_0 \sin^2 2\chi + \varsigma K_0 \cos^2 2\chi) - (\sigma - \lambda)(\xi J_{\mathbf{k}} + \eta K_{\mathbf{k}}),$
$B_{\mathbf{k}}$	$(\sigma - \lambda)\cos 2\chi(\xi J_{\mathbf{k}} - \eta K_{\mathbf{k}})$
$C_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}$	$h\cos 2\chi - (\sigma + \lambda)\sin 2\chi \cos 2\chi(J_0 - \varsigma K_0)$
$D_{\mathbf{k}}$	$(\sigma - \lambda)\sin 2\chi(\eta K_{\mathbf{k}} - \xi J_{\mathbf{k}})$
$F_{\mathbf{k}}$	$2\sigma \sin 2\chi(\eta K_{\mathbf{k}} - \xi J_{\mathbf{k}})$
$G_{\mathbf{k}}$	$-h\sin 2\chi - D + (3\sigma - \lambda)K_0 + (\sigma + \lambda)(J_0 \sin^2 2\chi + \varsigma K_0 \cos^2 2\chi) - 2\sigma(\xi J_{\mathbf{k}} + \eta K_{\mathbf{k}}),$
$H_{\mathbf{k}}$	$2\sigma cos 2\chi(\eta K_{\mathbf{k}} - \xi J_{\mathbf{k}}).$

У довгохвильовому наближенні, коли $\vec{k} \to 0$, отриманий закон дисперсії є квадратичним, як і у випадку відсутності магнітного поля.

Умова стійкості вітки спектра $\omega_1(\vec{k})$ має вигляд $\omega_1(\vec{k}) > 0$, а відповідна межа стійкості:

$$\omega_1(0) = 0 . \tag{7}$$

Враховуючи вираз (6) для вітки спектра, можна перейти від рівності (7) до наступної системи: $\begin{cases} L(0) < 0, \\ M(0) = 0. \end{cases}$

Вираз для другої вітки спектра $\omega_2(\vec{k})$ у випадку наявності ненульового зовнішнього магнітного поля може бути записаний наступним чином:

$$\begin{aligned} \omega_2(\vec{k}) = 2\{&[h\sin 2\chi + (\sigma + \lambda)(\varsigma K_{\mathbf{k}} - J_0)\sin^2 2\chi - (\sigma + \lambda)(\varsigma K_0 - J_{\mathbf{k}})\cos^2 2\chi] \times \\ &\times [h\sin 2\chi + (\sigma + \lambda)(\varsigma K_{\mathbf{k}} - J_0)\sin^2 2\chi - \varsigma(\sigma + \lambda)(K_0 - K_{\mathbf{k}})\cos^2 2\chi]\}^{1/2}. \end{aligned} \tag{8}$$

На відміну від випадку, коли зовнішнє магнітне поле відсутнє, для вітки спектра (8) в довгохвильовому наближенні, коли $\vec{k} \to 0$, має місце квадратичний закон дисперсії. Тобто, увімкнення магнітного поля змінює закон дисперсії вітки $\omega_2(\vec{k})$ з лінійного на квадратичний. Отримані результати цілком узгоджуються з результатами інших робіт [16, 23].

У підрозділі розраховано ентропію та вільну енергію у фазі ОКФ за наявності зовнішнього магнітного поля.

У **підрозділі 4.2** вивчено особливості фазового переходу між квадрупольними фазами – ОКФ і ПКФ за відсутності магнітного поля та подібне до гістерезисних явище – “квадрупольний гістерезис”.

В досліджуваному магнетику за відсутності зовнішнього магнітного поля (h=0) та коли виконується умова:

$$4(\eta-1)<\zeta-1\,, \tag{9}$$

в системі реалізуються тільки дві фази: ОКФ та ПКФ [23].

Дослідження спектра спінових збуджень у фазах ОКФ та ПКФ за скінченних температур дозволяє виявити критичні значення константи ОА D. Так, $D_C^{(1)}(T)$ є критичним значенням константи ОА, що відповідає фазі ОКФ та визначається наступною формулою:

$$D_C^{(1)}(T)=2(\lambda-\sigma)K_0(\eta-1)-(\lambda+\sigma)K_0(\varsigma-1)\,,$$

а $D_C^{(2)}(T)$ є критичним значенням константи ОА, що відповідає фазі ПКФ та визначається формулою:

$$D_C^{(2)}(T)=2\langle Q^0\rangle K_0(1-\eta).$$

За нульової температури (T = 0) вирази для критичних значень величин $D_C^{(1)}(T)$ та $D_C^{(2)}(T)$ мають вигляд:

$$D_C^{(1)}(0)=2K_0(\varsigma-1)-4K_0(\eta-1),\quad D_C^{(2)}(0)=4K_0(\eta-1).$$

Коли реалізується умова (9), відповідно маємо нерівність: $D_C^{(1)}(0)>D_C^{(2)}(0)$.

У цьому випадку на фазовій діаграмі у координатах (D,T) існує область, в якій є стабільними обидві фази: ОКФ та ПКФ. Конкуренція фаз у цій області визначається значеннями вільної енергії у відповідних фазах. Межа між фазами ОКФ та ПКФ визначається рівністю вільних енергій відповідних фаз.

Вона поділяє області стабільності та метастабільності фаз ОКФ та ПКФ.

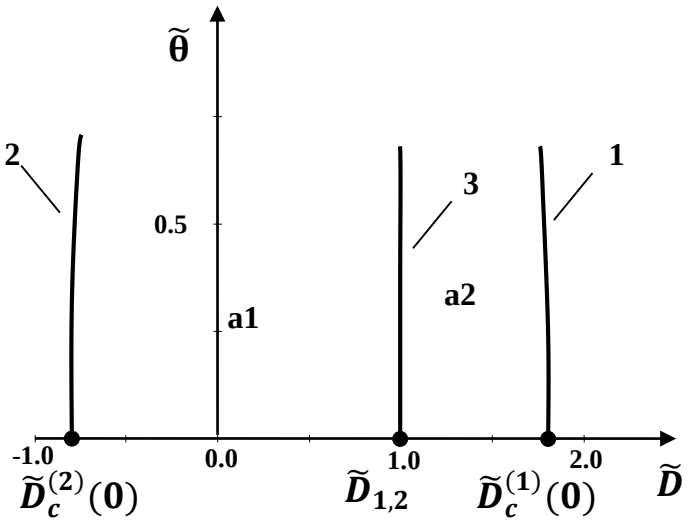

Рис. 7. Характерні області на фазовій діаграмі при низьких температурах та значеннях констант анізотропії η = 0,8 і ζ = 1,5

На рис. 7 представлена $\tilde{\theta}-\tilde{D}$ фазова діаграма, побудована за низьких температур та значень констант анізотропії: η = 0,8 і ζ = 1,5 у випадку відсутності магнітного поля. На фазовій діаграмі (див. рис. 7) присутні тільки квадрупольні фази: ОКФ і ПКФ, та представлені характерні області стабільного і метастабільного стану досліджуваного магнетика.

Крива 1 на рис. 7 є межею стійкості спектра спінових збуджень для фази ОКФ. В області, що знаходиться з правого боку від кривої 1, фаза ОКФ є абсолютно нестійкою, тоді як фаза ПКФ − абсолютно стійка.

Крива 2 – це межа стійкості спектра спінових збуджень для фази ПКФ. В області, що знаходиться з лівого боку від кривої 2, фаза ОКФ є абсолютно стійкою, тоді як фаза ПКФ – абсолютно нестійка.

Вільні енергії в обох цих фазах стають рівними на кривій 3. Таким чином, фаза ОКФ є стабільною в області **a1**, що обмежується кривими 2 та 3. В той же час, фаза ПКФ є метастабільною в цій області. В області **a2**, що обмежується кривими 1 та 3, ситуація протилежна.

За нульової температури енергії основних станів обох фаз стають рівними між собою тільки в точці $\widetilde{D}_{1,2}$. Положення цієї точки задається виразом:

$$\widetilde{D}_{1,2} = 2(\zeta - 1), \tag{10}$$

з якого випливає, що з ростом параметра ζ значення $\widetilde{D}_{1,2}$ збільшується і відповідно збільшується область існування фази ОКФ на площині $\tilde{\theta} - \widetilde{D}$.

У фазі ОКФ ненульовими є тільки дві складові ПП: $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$, які є функціями константи одноіонної анізотропії D.

Залежності квадрупольних намагніченостей $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$ від значення константи одноіонної анізотропії $\widetilde{D}$ за нульової температури наведені на рис. 8.

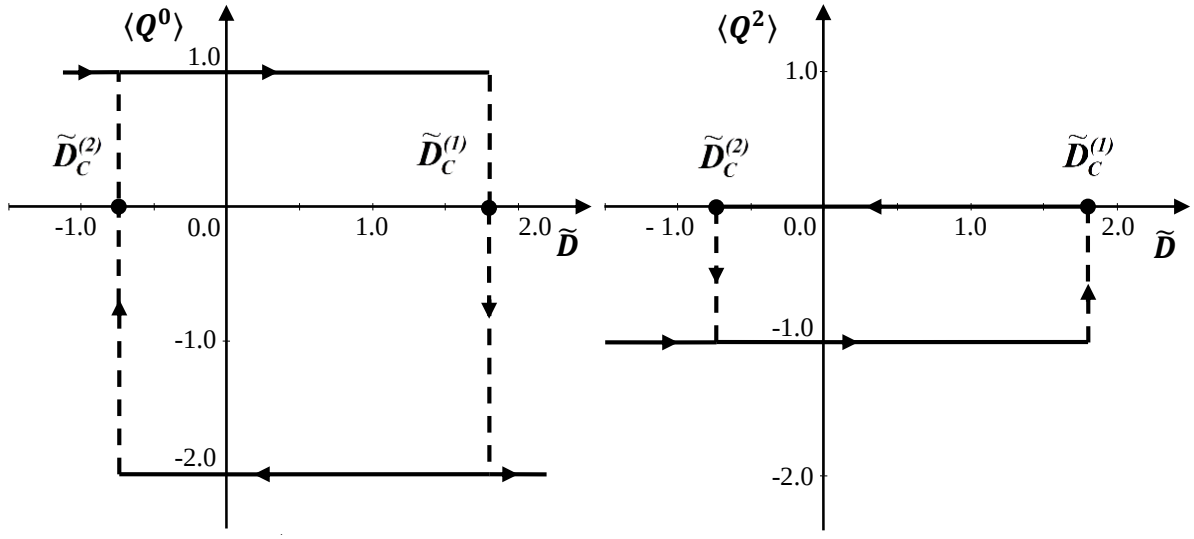

Рис. 8. Залежність квадрупольної намагніченості $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$ від величини $\widetilde{D}$ при значеннях констант анізотропії η = 0,8 та ζ = 1,5

Одному й тому ж значенню константи одноіонної анізотропії D відповідає існування двох фаз із різними типами симетрії.

Розгляд залежностей ($\langle Q^0 \rangle = f(\widetilde{D})$ та $\langle Q^2 \rangle = f(\widetilde{D})$), представлених на рис. 8, дозволяє зробити висновок, що ФП між квадрупольними фазами ОКФ і ПКФ за відсутності зовнішнього магнітного поля може супроводжуватися явищами, подібними до гістерезисних, які істотно відрізняються від гістерезису, який спостерігається в магнетиках з виключно векторними взаємодіями. Гістерезисну поведінку проявляють квадрупольні компоненти параметра порядку $\langle Q^0 \rangle$ і $\langle Q^2 \rangle$, які є функціями параметра одноіонної анізотропії D. Таку поведінку можна назвати “квадрупольним гістерезисом”. За нульової та низьких температур

відповідні петлі “квадрупольного гістерезису” мають прямокутну, або близьку до неї форму зі зменшенням площі петлі гістерезису при зростанні температури.

Енергію перемагнічування Q, яка припадає на один вузол, за нульової температури можна розрахувати за формулою:

$$\tilde{Q} = 2(\zeta - 1) - 8(\eta - 1), \tag{11}$$

де $\tilde{Q} = Q/K_0$. Розглянувши вираз (11), можна зробити висновок, що у випадку ізотропної БОВ ($\zeta = \eta = 1$) $\tilde{Q} = 0$, тобто “квадрупольний гістерезис” є неможливим.

У **підрозділі 4.3** розглянуто фазу КФФ та її особливості за наявності зовнішнього магнітного поля. Вона була досліджена у роботах [14, 15, 24], але у випадку більш простої моделі гамільтоніана ніж гамільтоніан (1). У випадку більш загального гамільтоніана відповідна фаза досліджувалась у роботах [16, 21]. Так, у роботі [21] приведені розрахунки значення критичного поля h на межі між КФФ та іншими фазами.

У підрозділі розглядається фазовий перехід між фазою КФФ та фазою ОКФ. Лінія ФП другого роду між фазою КФФ та фазою ОКФ задається умовою (7). За фіксованого значення зовнішнього магнітного поля критична температура θ^* фазових переходів між фазами КФФ↔ОКФ є неявною функцією констант анізотропії БОВ η та ζ.

Залежність безрозмірної критичної температури $\tilde{\theta}^*(\tilde{\theta}^* = \theta^*/J_0)$ від констант η та ζ при різних значеннях безрозмірного поля $\tilde{h}$ (h/J_0) приведена на рис. 9 та рис. 10. Відповідні розрахунки проведені за таких значень параметрів гамільтоніана: J_0 = 1,0; ξ = 1,0; D = 1,2; K_0 = 1,25.

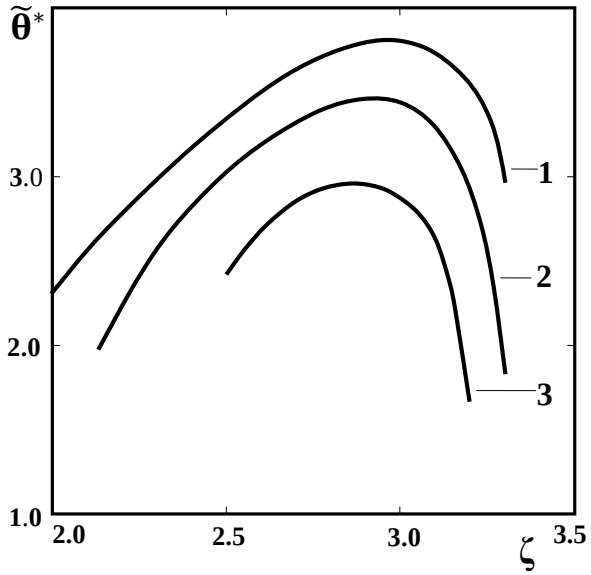

Рис. 9. Залежність безрозмірної критичної температури $\tilde{\theta}^*$ від величини параметра ζ при фіксованому значенні η = 2,0 для різних значень безрозмірного поля: $\tilde{h}$=2,5 (**1**); $\tilde{h}$=3,2 (**2**); $\tilde{h}$ =3,8 (**3**)

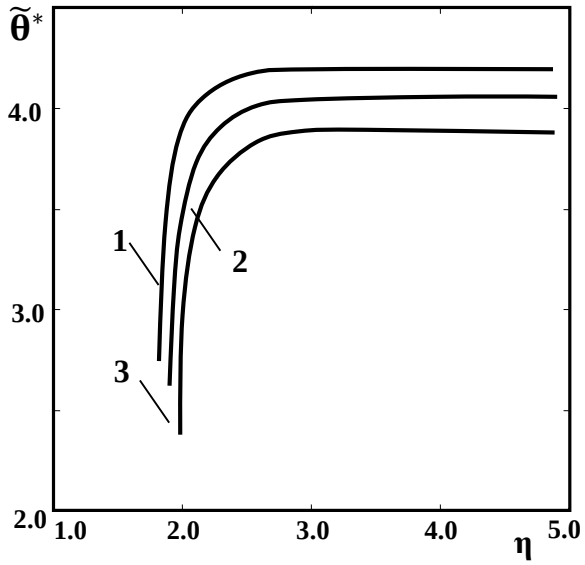

Рис. 10. Залежність безрозмірної критичної температури $\tilde{\theta}^*$ від величини параметра η при фіксованому значенні ζ=3,0 для різних значень безрозмірного поля: $\tilde{h}$=2,5(**1**); $\tilde{h}$=3,2 (**2**); $\tilde{h}$ =3,8 (**3**)

Значення критичної температури θ^* фазових переходів між фазами КФФ та ОКФ суттєво залежить від констант анізотропії БОВ ζ і η.

У **підрозділі 4.4** побудована ФД досліджуваного магнетика за скінченних температур на якій наявні п'ять фаз. Вивченні особливості цієї ФД.

У випадку, коли магнітна система описується модельним гамільтоніаном (1) у певному інтервалі значень параметрів гамільтоніана при наявності зовнішнього магнітного поля за скінченних температур крім симетричних фаз: ФМФ, ПКФ і ПМФ, також можлива реалізація двох фаз с порушеною симетрією: ОКФ та КФФ.

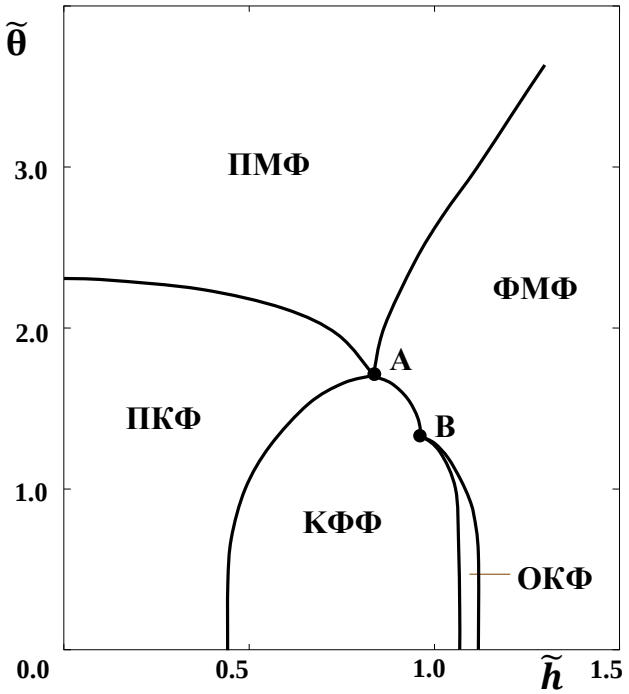

Рис. 11. Фазова діаграма одновісного магнетика з ОА та БОВ. Діаграма побудована за значень параметрів гамільтоніана: $\tilde{D} = 1{,}0$; $\tilde{K}_0 = 0{,}8$; $\xi = 1{,}0$; $\zeta = 1{,}95$; $\eta = 1{,}0$

На рис. 11 в безрозмірних координатах $\tilde{\theta} - \tilde{h}$ побудована фазова діаграма досліджуваного магнетика, що містить всі наведені вище п'ять фаз.

Особливістю фазової діаграми, зображеної на рис. 11, є присутність мультикритичних точок: $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_{C1}, \tilde{h}_{C1})$ та $\mathbf{B}(\tilde{\theta}_{C2}, \tilde{h}_{C2})$.

Критична точка $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_{C1}, \tilde{h}_{C1})$ є точкою перетину чотирьох ліній ФП другого роду, у якій знаходяться у рівновазі чотири фази: ПКФ, КФФ, ФМФ і ПМФ, тому критичну точку $\mathbf{A}(\tilde{\theta}_{C1}, \tilde{h}_{C1})$ можна вважати тетра-критичною точкою.

У критичній точці $\mathbf{B}(\tilde{\theta}_{C2}, \tilde{h}_{C2})$ перетинаються три лінії ФП другого роду та знаходяться в рівновазі три фази: ОКФ, ФМФ і КФФ, тобто критичну точку $\mathbf{B}(\tilde{\theta}_{C2}, \tilde{h}_{C2})$ можна вважати трикритичною точкою.

ВИСНОВКИ

Проведені у дисертації дослідження дозволяють зробити наступні висновки:

1. В одновісних магнетиках з тензорними взаємодіями в певному інтервалі значень параметрів гамільтоніана і величини зовнішнього поздовжнього магнітного поля спостерігаються тільки симетричні фази: ФМФ, ПКФ і ПМФ, що випливає з побудованої відповідної цьому випадку фазової діаграми в безрозмірних координатах поле – температура, яка описує переходи між цими фазами та містить потрійну точку. Розраховано залежності координат потрійної

критичної точки $\tilde{\theta}_C$ та $\tilde{h}_C$ від значення константи $\widetilde{D}$ при фіксованому значенні константи $\widetilde{K}_0$ та від $\widetilde{K}_0$ при фіксованому $\widetilde{D}$, які мають майже лінійний характер.

2. Конкуренція фаз ФМФ і ПКФ призводить до фазових переходів першого роду, які можуть супроводжуватися гістерезисними явищами. Побудовано залежність квадрупольної намагніченості від величини зовнішнього магнітного поля за скінченних температур, яка має гістерезисний вигляд.

3. Отримано спектр спінових збуджень у фазі ОКФ в найбільш загальному для одновісного магнетика випадку за наявності повздовжнього зовнішнього магнітного поля та визначено вплив магнітного поля на структуру спектра.

4. Побудовано температурну залежність складової параметра порядку $\langle Q^2 \rangle$ для фази ОКФ. З ростом температури величина $\langle Q^2 \rangle$ зменшується (за модулем) і за деякої критичної температури θ_C наближається до нуля. Оскільки в фазі ФМФ виконується умова $\langle Q^2 \rangle = 0$, то температура θ_C є температурою фазового переходу між фазами ОКФ та ФМФ.

5. Показано, що метод, використаний для побудови лінії фазового переходу між фазами ОКФ та ФМФ в координатах поле – температура, є альтернативним методом визначення фазової границі.

6. Показано, що безрозмірна критична температура $\tilde{\theta}^*$ фазового переходу між фазами ОКФ та КФФ суттєво залежить від ступеня анізотропії БОВ, а відповідні залежності від параметрів анізотропії БОВ η та ζ мають специфічний нелінійний вигляд.

7. Виявлено, що при ФП першого роду між квадрупольними фазами ОКФ та ПКФ за відсутності зовнішнього магнітного поля квадрупольні складові ПП $\langle Q^0 \rangle$ та $\langle Q^2 \rangle$, які є функціями параметра одноіонної анізотропії *D*, проявляють поведінку подібну до гістерезисної.

8. Доведено, що на фазовій $\tilde{\theta} - \tilde{h}$ діаграмі магнетика, можуть бути присутні п'ять фаз: ФМФ, ПКФ, ПМФ, ОКФ та КФФ. У цьому випадку на ФД наявні дві мультикритичні точки: потрійна та тетракритична.

СПИСОК ЦИТОВАНИХ РОБІТ

1. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus / W. Heisenberg // Zeitschrift für Physik. – 1928. – V. 49, № 9-10. – P. 619-636.
2. Вонсовский С. В. Магнетизм / С. В. Вонсовский. – М.: Наука, 1971. – 1032 с.
3. Нагаев Э. Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями / Э. Л. Нагаев – М.: Наука, 1988. – 231 с.
4. Онуфриева Ф. П. Точное решение одноионной задачи для магнетика с одноионной анизотропией в поле произвольного направления / Ф. П. Онуфриева // ЖЭТФ. – 1981. − Т. 80, № 6. – С. 2372-2379.
5. Локтев В. М. Особенности статики и динамики магнитных диэлектриков с одноионной анизотропией / В. М. Локтев, В. С. Островский // ФНТ. – 1994. – Т. 20, № 10. – С. 983-1016.

6. Фридман Ю. А. Фазовые переходы в ферромагнетике с биквадратичным обменным взаимодействием и одноионной анизотропией / Ю. А. Фридман, О. А. Космачёв, Б. Л. Эйнгорн // ФНТ. – 2005. – Т. 31, № 6. – С. 687-694.
7. Wierschem K. Magnetic and nematic orderings in spin-1 antiferromagnets with single-ion anisotropy / K. Wierschem, Y. Kato, Y. Nishida, C. D. Batista, and P. Sengupta // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86. – P. 201108.
8. Zapf V. S. Bose-Einstein condensation in quantum magnets / V. S. Zapf, M. Jaime, and C. D. Batista // Rev. Mod. Phys. – 2014. – V. 86, № 2. – P. 563-614.
9. Kovalevsky M. Y. Quantum states, symmetry and dynamics in degenerate spin S=1 magnets / M. Y. Kovalevsky, A. V. Glushchenko // JMMM. – 2014. – V. 355. – P. 192-196.
10. Космачев О. А. Двухподрешеточный негейзенберговский магнетик S=1 со сложной межионной анизотропией / О. А. Космачев, А. В. Кривцова, Ю. А. Фридман // ЖЭТФ. – 2018. – Т. 154, вып. 2 (8). – С. 382-391.
11. Nauciel-Bloch M. Spin-one heisenberg ferromagnet in the presence of biquadratic exchange / M. Nauciel-Bloch, G. Sarma, A. Castets // Phys. Rev. B. – 1972. – V. 5. – P. 4603-4609.
12. Chen H. H. Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models / H. H. Chen and Peter M. Levy // Phys. Rev. B. – 1973. – Vol. 7. – P. 4267-4284.
13. Матвеев В. М. Квантовый квадрупольный магнетизм и фазовые переходы при биквадратичном обмене / В. М. Матвеев // ЖЭТФ. – 1973. – Т. 65, № 4(10). – С. 1626-1636.
14. Шаповалов І. П. Квадрупольна фаза магнетика з анізотропною біквадратною обмінною взаємодією / І. П. Шаповалов // УФЖ. – 2008. – Т. 53, № 7. – С. 653-660.
15. Onufrieva F. P. Peculiarities of spontaneous breaking continuous symmetry in magnets with tensor interactions / F. P. Onufrieva, I. P. Shapovalov // J. Moscov. Phys. Soc. – 1991. – V. 1. – P. 63-83.
16. Шаповалов І. П. Феромагнітна фаза одновісного магнетика у присутності анізотропної біквадратичної обмінної взаємодії / І. П. Шаповалов // УФЖ. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 307-312.
17. Матвеев В. М. Квантовый квадрупольный магнетизм и фазовые переходы при биквадратичном обмене / В. М. Матвеев // ЖЭТФ. – 1973. – Т. 65, № 4(10). – С. 1626-1636.
18. Онуфриева Ф. П. Низкотемпературные свойства спиновых систем с тензорным параметром порядка / Ф. П. Онуфриева // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 86, № 6. – С. 2270-2287.
19. Дьяконов В. П. Индуцированные магнитным полем фазовые переходы в синглетных магнетиках с ферромагнитным обменом / В. П. Дьяконов, Э. Е. Зубов, Ф. П. Онуфриева, А. В. Сайко, И. М. Фита // ЖЭТФ. – 1987. – Т. 93, № 5(11). – С. 1775-1788.
20. Шаповалов І. П. Фазові переходи в магнітодіелектриках із тензорними взаємодіями / І. П. Шаповалов // Журнал фізичних досліджень. – 1999. – Т. 3, № 2. – С. 192-198.

21. Шаповалов И. П. Упорядковані фази та фазові переходи в одновісних SU(3)-магнетиках: дис. канд. фіз.-мат. наук: 01.04.02 – теоретична фізика / І. П. Шаповалов – Одеса, 2013. – 122 с.
22. Левицький Р. Р. Вплив магнітного поля на термодинамічні характеристики спін-1 ізінґовської моделі з білінійними та квадрупольними взаємодіями. Кластерне наближення / Р. Р.Левицький, О. Р. Баран // Журнал фізичних досліджень. – 2007. – Т. 11, № 3. – С. 303-310.
23. Шаповалов И. П. Квадрупольные фазы и фазовые переходы в одноосных магнетиках с тензорными взаимодействиями / И.П. Шаповалов // ФНТ. – 2013. – Т. 39, № 6. – С. 663-672.
24. Вальков В. В. Влияние сильного кристаллического поля на спектральные свойства магнетиков с биквадратным обменом / В. В. Вальков, Г. Н. Мацулева, С. Г Овчинников // ФТТ. – 1989. – Т. 31, № 6. – С. 60-68.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Сайко П. А. Фазовые переходы в магнетиках с тензорными взаимодействиями и низкотемпературные датчики магнитного поля / И. П. Шаповалов, П. А. Сайко // Сенсорная электроника и микросистемные технологии. – 2010. – Т. 1(7), № 4. – С. 17-20. DOI: 10.18524/1815-7459.2010.4.116174.
2. Сайко П. О. Гістерезисні явища в магнетиках з тензорними взаємодіями / І. П. Шаповалов, П. О. Сайко // Український фізичний журнал – 2011. – Т. 56, № 3. – С. 248-253.
3. Сайко П. О. Квадрупольна фаза з порушеною симетрією в одновісному SU(3)–магнетику / І. П. Шаповалов, П. О. Сайко // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. Випуск 30. – 2011. – С. 80-86. DOI: 10.24144/2415-8038.2011.30.80-86.
4. Sayko P. A. Quadrupole hysteresis in uniaxial magnet with unity spin / I. P. Shapovalov, P. A. Sayko // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2013. – V. 348 – P. 132-135. DOI: 10.1016/j.jmmm.2013.08.023 (Scopus, WoS, Q2).
5. Сайко П. А. Магнитное упорядочение мелкодисперсного магнетика во внешнем магнитном поле / П. А. Сайко, И. П. Шаповалов // Физика аэродисперсных систем. – 2014. – № 51. – С. 27-32.
6. Sayko P. A. Axial quadrupole phase of a uniaxial spin-1 magnet / P. A. Sayko, I. P. Shapovalov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2015. – V. 392. – P. 134-138. DOI: 10.1016/j.jmmm.2015.04.117 (Scopus, WoS, Q2).

Матеріали дисертації додатково представлено в наступних тезах та працях міжнародних наукових конференцій/шкіл/симпозіумів:

7. Sayko P. A. The T-H phase diagram of one-axis magnetics with single-ion anisotropy of the light-plane type and anisotropic biquadrate exchange interaction / P. A. Sayko, I. P. Shapovalov // Magnetic Phenomena in Micro- and Nano-Structures: International Workshop, May 27-29, 2010, Donetsk, Ukraine. Abstracts – Donetsk, 2010. – P. 178-179.

8. Сайко П. А. Фазовые переходы в магнетиках с тензорными взаимодействиями и низкотемпературные датчики магнитного поля / И. П. Шаповалов, П. А. Сайко // Сенсорна електроніка та мікросистемні технології: 4-та Міжнародна науково-технічна конференція, 28 червня − 2 липня, Одеса, Ukraine. Тези доповідей – Одеса, 2010. − С. 188.
9. Сайко П. А. Материалы для низкотемпературных датчиков магнитного поля / И. П. Шаповалов, П. А. Сайко // IV Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології», 28 червня − 2 липня, 2010, Одеса, Україна. – Одеса, 2010. – С. 306.
10. Sayko P. A. Single-domain hysteresis in magnetics with tensor interaction / P. A. Sayko, I. P. Shapovalov // Modern Problems of Theoretical Physics: Young Scientists Conference, December 22-24, 2010, Kyiv, Ukraine. Abstracts – Kyiv, 2010. – P. 87.
11. Сайко П. А. Квадрупольная фаза с нарушенной симметрией в одноосном SU(3)-магнетике / П. А. Сайко, И. П. Шаповалов // ІЕФ-2011: Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів, 24-27 травня, 2011, Ужгород, Україна. Тези доповідей – Ужгород, 2011. – С. 141.
12. Sayko P. A. Quadrupolar phases and phase transitions in uniaxial magnets with tensor interaction / P. A. Sayko, I. P. Shapovalov // Modern Problems of Theoretical Physics: IV Young Scientists Conference, October 23-26, 2012, Kyiv, Ukraine. Abstracts – Kyiv, 2012. – P. 88.
13. Сайко П. О. Квадрупольне перемагнічування в одновісному спін-1 магнетику / П. О. Сайко, І. П. Шаповалов // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини − 2016, 9-10 червня 2016 р., Львів, Україна. Збірка тез – Львів, 2016. – С.41.

АНОТАЦІЯ

Сайко П.О. Квадрупольні та квадрупольно-феромагнітні фази в одновісних магнетиках із одноіонною анізотропією та біквадратною обмінною взаємодією. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика (104 – фізика та астрономія). – Одеський національний університет імені І. І. Мечникова МОН України, Одеса, 2020.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей спін-1 магнетика з конкуруючими векторними та тензорними взаємодіями найбільш загального для одновісної симетрії вигляду.

Показано, що наявність в системі багатьох конкуруючих взаємодій обумовлює її високу чутливість до зміни значень констант модельного гамільтоніана. Існує інтервал значень параметрів гамільтоніана, в якому можуть

реалізовуватися лише три симетричні фази: феромагнітна фаза з віссю впорядкування Z (ФМФ), площинна квадрупольна фаза з площиною впорядкування XOY (ПКФ) та парамагнітна фаза. У безрозмірних координатах поле – температура побудовано відповідну фазову діаграму, яка містить потрійну точку. Розраховано залежність координат потрійної точки від параметрів гамільтоніана. У тих самих координатах у певному інтервалі значень параметрів гамільтоніана фазова діаграма окрім вказаних симетричних фаз включає дві фази із порушеною симетрією: осьову квадрупольну фазу з віссю впорядкування *Z* (ОКФ) та змішану квадрупольно-феромагнітну фазу (КФФ). На відповідній фазовій діаграмі наявні дві мультикритичні точки: потрійна і тетракритична.

Доведено, що фазовий перехід першого роду між фазами ФМФ та ПКФ супроводжується гістерезисними явищами. Побудовано відповідну петлю гістерезису у координатах поле – намагніченість.

Детально досліджено ОКФ фазу та отримано спектр спінових збуджень за наявності повздовжнього зовнішнього магнітного поля. Для цієї фази побудовано температурну залежність квадрупольних складових параметра порядку. Доведено, що критична температура фазового переходу між фазами ОКФ та КФФ сильно залежить від ступеня анізотропії біквадратної обмінної взаємодії.

Досліджено фазовий перехід між ОКФ і ПКФ за відсутності зовнішнього магнітного поля та було виявлено, що квадрупольні складові параметру порядку, які є функціями константи одноіонної анізотропії, проявляють поведінку подібну до гістерезисної.

Ключові слова: одновісні магнетики, тензорні взаємодії, одноіонна анізотропія, біквадратна обмінна взаємодія, квадрупольні фази, параметр порядку, фазові переходи.

АННОТАЦИЯ

Сайко П. А. Квадрупольные и квадрупольно-ферромагнитные фазы в одноосных магнетиках с одноионной анизотропией и биквадратным обменным взаимодействием. – Квалификационная научная работа на правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика (104 – физика и астрономия). – Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова МОН Украины, Одесса, 2020.

Диссертационная работа посвящена исследованию свойств спин-1 магнетика с конкурирующими векторными и тензорными взаимодействиями наиболее общего для одноосной симметрии вида.

Показано, что наличие в системе многих конкурирующих взаимодействий обусловливает ее высокую чувствительность к изменению значений констант модельного гамильтониана. Существует интервал значений параметров гамильтониана, в котором могут реализовываться только три симметричные фазы: ферромагнитная фаза с осью упорядочения Z (ФМФ), плоскостная квадрупольная фаза с плоскостью упорядочения XOY (ПКФ) и парамагнитная фаза. В безразмерных координатах поле – температура построена соответствующая фазовая диаграмма, которая содержит тройную точку. Рассчитана зависимость координат тройной точки от параметров гамильтониана. В тех же координатах в определенном интервале значений параметров гамильтониана фазовая диаграмма, кроме указанных симметричных фаз, включает две фазы с нарушенной симметрией: осевую квадрупольную фазу с осью упорядочения Z (ОКФ) и смешанную квадрупольно-ферромагнитную фазу (КФФ). На фазовой диаграмме имеются две мультикритические точки: тройная и тетракритическая.

Доказано, что фазовый переход первого рода между фазами ФМФ и ПКФ сопровождается гистерезисными явлениями. Построена соответствующая петля гистерезиса в координатах поле – намагниченность.

Подробно исследована ОКФ фаза, получен спектр спиновых возбуждений при наличии продольного внешнего магнитного поля, построена температурная зависимость квадрупольных составляющих параметра порядка. Доказано, что критическая температура фазового перехода между фазами ОКФ и КФФ сильно зависит от степени анизотропии биквадратного обменного взаимодействия.

Исследован фазовый переход между ОКФ и ПКФ при отсутствии внешнего магнитного поля. Было выявлено, что квадрупольные составляющие параметра порядка, которые являются функциями константы одноионной анизотропии, проявляют поведение подобное гистерезисному.

Ключевые слова: одноосные магнетики, тензорные взаимодействия, одноионная анизотропия, биквадратное обменное взаимодействие, квадрупольные фазы, параметр порядка, фазовые переходы.

ABSTRACT

Saiko P. O. Quadrupole and quadrupole-ferromagnetic phases in uniaxial magnets with single-ion anisotropy and biquadratic exchange interaction. – Qualification scientific paper, manuscript.

Thesis for the Candidate of Sciences degree in Physics and Mathematics (Doctor of Philosophy) by specialty 01.04.02 – theoretical physics (104 — physics and astronomy). – Odessa I. I. Mechnikov National University, the Ministry of Education and Science of Ukraine, Odessa, Ukraine, 2020.

The thesis is devoted to the study of the properties of a spin-1 magnet with competing vector and tensor interactions with the most general form of uniaxial symmetry. Such types of tensor interactions as single-ion anisotropy (SIA) and biquadratic exchange interaction (BEI) are considered.

It has been shown that the presence of several competing interactions in the system causes its high sensitivity to changes of the model Hamiltonian constants. There is a range of Hamiltonian parameters where only three symmetric phases can be realized: ferromagnetic phase with the ordering axis Z (FMP), planar quadrupole phase with the ordering plane XOY (PQP) and paramagnetic phase (PMP). The corresponding phase diagram in dimensionless field-temperature coordinates is constructed, and it contains a triple point. The dependence of the triple point coordinates on the Hamiltonian parameters is calculated. There is a range of Hamiltonian parameters where the phase diagram in the same coordinates in addition to the specified symmetric phases also includes two phases with broken symmetry: axial quadrupole phase with the ordering axis Z (AQP) and mixed quadrupole-ferromagnetic phase (QFP). There are two multicritical points on the phase diagram: triple and tetracritical.

The competition of the FMP and PQP phases is considered and it is proved that the first-order phase transition between this phases is accompanied by the hysteresis phenomena. A corresponding hysteresis loop in the field-magnetization coordinates is constructed.

The AQP phase has been studied in details and the spin excitation spectrum in presence of the longitudinal external magnetic field was obtained. The dependence of the quadrupole components of the order parameter on the temperature is constructed for this phase. It is proved that the critical temperature of the phase transition between the AQP and QFP phases strongly depends on the degree of BEI anisotropy.

The phase transition between the AQP and PQP phases in the absence of the external magnetic field is investigated. It is determined that quadrupole components of the order parameter, which are functions of the single-ion anisotropy parameter, show hysteresis-like behavior.

Thus, it has been shown that the behavior of the uniaxial spin-1 magnets in the presence of SIA and BEI significantly depends on the competition between different types of interactions. The BEI and its anisotropy degree play a significant role in this competition and at the properties of the magnetic system. The change of the BEI anisotropy constants affects the presence of certain phases in it.

For the experimental check of the thesis results, it is advisable to use a magnet for which BEI plays a dominant role in the formation of magnetic ordering, where quadrupole and quadrupole-ferromagnetic phases are implemented along with FMP and PMP phases.

Key words: uniaxial magnets, tensor interactions, single-ion anisotropy, biquadratic exchange interaction, quadrupole phases, the order parameter, phase transitions, magnetic hysteresis.