ЖУРНАЛ НАНО- ТА ЕЛЕКТРОННОЇ ФІЗИКИ
Том **6** № 1, 01028(4cc) (2014)

JOURNAL OF NANO- AND ELECTRONIC PHYSICS
Vol. **6** No 1, 01028(4pp) (2014)

Теория Ландау в области фазовых переходов первого рода

О.Г. Медведовская[1], Ю.М Лопаткин[2], Т.А. Федоренко[2], Г.К. Чепурных[3]

[1] *Сумский государственный педагогический университет им. А.С. Макаренко, ул. Роменская, 87, 40002 Сумы, Украина*
[2] *Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина*
[3] *Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская, 58, 40000 Сумы, Украина*

(Получено 12.01.2014; опубликовано online 06.04.2014)

Для случая, когда линия фазовых переходов первого рода не переходит в линию фазовых переходов второго рода, т. е. оканчивается не трикритической точкой, а критической: определены критические линии, ограничивающие область метастабильных состояний, путем использования теории фазовых переходов Ландау.

Ключевые слова: Теория Ландау, Фазовые переходы, Магнитоупорядоченные кристаллы.

PACS numbers: 61.50.Ks, 75.10. ± b

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема фазовых переходов в конденсированных средах в течении более ста лет привлекает к себе внимание исследователей и имеет важное значение для изучения физических свойств широкого круга веществ (ферромагнетиков и антиферромагнетиков, сегнетоэлектриков, сверхпроводников, сплавов и жидкостей). В последние десятилетия этой проблеме придается особо важное значение, о чем свидетельствуют проводимые специальные научные конференции и симпозиумы, а также непрерывный поток работ в периодической печати, в которой рассматриваются различные вопросы критических явлений (см., например, [1-4]). Огромную роль в создании теории фазовых переходов сыграли работы Ландау [5]. Он впервые ввел общее описание всех фазовых переходов как изменение симметрии вещества. Однако теория фазовых переходов Ландау используется при описании явлений при переходах второго рода [6]. Для определения критических линий, определяющих область существования метастабильных состояний при фазовых переходах первого рода (в частности, при ориентационных переходах в антиферромагнетиках), используется тот факт, что либо одна из ветвей антиферромагнитного резонанса равна нулю на критических линиях (если не учитывать магнитострикцию), либо использовать метод нахождения огибающих из дифференциальной геометрии. В предлагаемой работе на примере классического spin-flop перехода в легкоосных антиферромагнетиках [7-8] показывается, что наиболее простым способом определения критических линий при переходе первого рода, является использование теории фазовых переходов Ландау.

2. ПРИНЦИПЫ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ЛАНДАУ

Для количественной характеристики изменения структуры тела при прохождении через точку фазового перехода необходимо ввести величину η (которую называют параметром порядка), определенную таким образом, чтобы она пробегала отличные от нуля значения в несимметричной фазе и была равна нулю в симметричной фазе. Для магнитных моментов под η необходимо понимать макроскопический магнитный момент (отнесенный к единице объема) ферромагнетика или магнитный момент подрешетки – в случае антиферромагнетика.

Симметрия тела меняется лишь в тот момент, когда η обращается в нуль; любое сколь угодное малое, но отличное от нуля значение параметра порядка приводит к понижению симметрии. При прохождении через точку фазового перехода второго рода обращение η в нуль происходит непрерывным образом, без скачка.

Термодинамический потенциал тела не может измениться при изменении знака времени, тогда как магнитный момент (играющий здесь роль параметра порядка) меняет знак. Поэтому в таких случаях разложение Φ не содержит членов нечетных порядков.

Так что разложение термодинамического потенциала имеет вид

$$\Phi(P,T,\eta) = \Phi_0(P,T) + A(P,T)\eta^2 + B(P,T)\eta^4, \quad (1)$$

где $B > 0$, а коэффициент $A > 0$ в симметричной и $A < 0$ в несимметричной фазе; точки перехода определяются уравнением $A(P, T) = 0$.

Предполагается, что функция $A(P, T) = 0$ не имеет особенности в точке перехода, так что вблизи нее она разложима по целым степеням «расстояния» до этой точки

$$A(P,T) = \alpha(P)(T - T_c)\,, \quad (2)$$

где $T_c = T_c(P)$ – температура перехода. Коэффициент же $B(P) = (P, T_c)$. Таким образом, разложение гамильтониана принимает вид

$$\Phi(P,T) = \Phi_0(P,T) + \alpha(P)(T - T_c)\eta^2 + B(P)\eta^4, \quad (3)$$

причем $B(P) > 0$.

Согласно [6] кривая фазовых переходов второго рода не может просто окончиться в некоторой точке, однако может перейти в кривую фазовых переходов первого рода. Точку, в которой одна кривая переходит в другую, называют трикритической [6].

Для переходов второго рода $B > 0$, и для фазовых переходов первого рода $B < 0$. В трикритической точке выполняется условие $A = 0$, $B = 0$ (см. рис. 1).

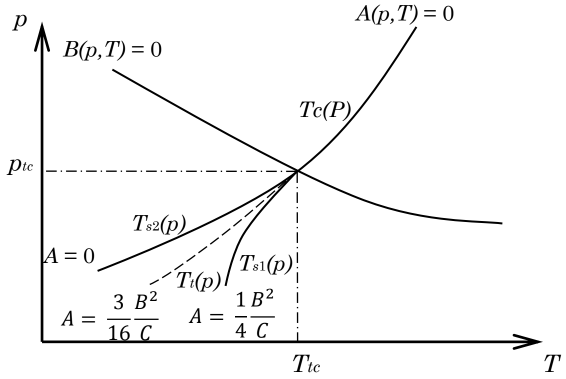

Рис. 1 – Схематический вид фазовой диаграммы системы вблизи трикритической точки

Все изложенное также относится и к фазовым переходам, связанным с изменением ориентации магнитных моментов в магнитоупорядоченных кристаллах. Эти переходы происходят с изменением магнитного поля, температуры и одноосного давления. Такие переходы называют еще переходами порядок – порядок, и в этих переходах область неприменимости теории Ландау оказывается чрезвычайно узкой.

3. СОСТАВЛЕНИЕ УРАВНЕНИЙ

Гамильтониан одноосного антиферромагнетика запишем в форме [8]

$$\mathcal{H} = 2M_0\left[\frac{E}{2}\mathbf{m}^2 + \frac{b}{2}l_z^2 + \frac{a}{2}m_z^2 - \mathbf{mH}\right], \qquad (4)$$

где $\mathbf{m} = (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)/2M_0$, $\mathbf{l} = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)/2M_0$ – ферро- и антиферромагнитные вектора, $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ – намагниченности подрешеток, $2M_0$ – величина размерности "Гс", E – параметр обменного взаимодействия, a и b – параметры одноосной анизотропии, $\mathbf{H}$ – внешнее магнитное поле. Согласно выбранной форме записи все эти параметры являются эффективными магнитными полями. Кроме того, выполняется условие $E >> |b|, |a|$. Поскольку намагниченности подрешеток $\mathbf{M}_1$ и $\mathbf{M}_2$ не зависят от величины магнитного поля, то выполняется условие $\mathbf{m} \perp \mathbf{l}$. На векторы $\mathbf{m}$ и $\mathbf{l}$ также наложим условие связи

$$\mathbf{m}^2 + \mathbf{l}^2 = 1\,. \qquad (5)$$

Будем рассматривать ориентацию магнитных моментов при $\mathbf{H} \| OZ$ и поскольку $l_z = l\cos\theta$ и $m_z = m\sin\theta$, то гамильтониан (4) запишем в форме

$$\mathcal{H} = 2M_0\left[\frac{E}{2}m^2 + \frac{b}{2}\cos^2\theta - \frac{b}{2}m^2\cos^2\theta + \right.$$
$$\left. + \frac{a}{2}m^2\sin^2\theta - mH\sin\theta\right] \qquad (6)$$

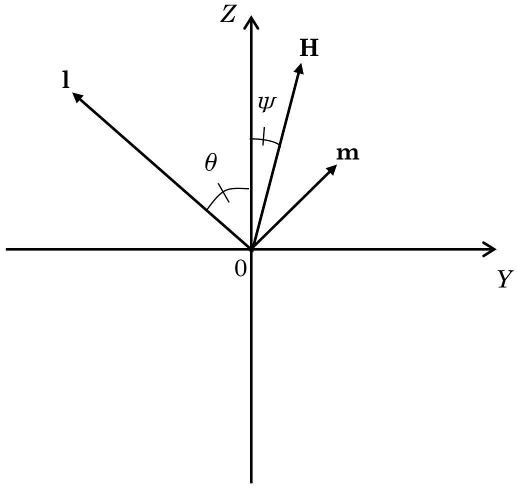

Рис. 2 – Состояние легкоосного антиферромагнетика ($b < 0$) при совпадении легкой оси **ЕМА** с осью OZ.

Таким образом в чисто математическом плане задача сводится к изучению необходимых и достаточный условий существования минимума гамильтониана (6) к функции двух переменных (Классический spin-flop переход с использованием гамильтониана (6) рассмотрен в [8]) m и θ, т. е. $\mathcal{H} = (m, \theta)$. При использовании необходимых условий получаем уравнения

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial m} = m\left(E - b\cos^2\theta + a\sin^2\theta\right) - H\sin\theta = 0\,, \qquad (7)$$

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\theta} = \sin\theta\cos\theta\left(-b + bm^2 + am^2\right) - mH\cos\theta = 0\,. \qquad (8)$$

Из уравнения (7) следует

$$m = \frac{H\sin\theta}{E - b\cos^2\theta + a\sin^2\theta}. \qquad (9)$$

Если значение для m, определенное формулой (9), подставить в уравнения (8), то получим

$$\sin\theta\cos\theta\left[-bE\left(1 - \frac{b}{E}\cos^2\theta + \frac{a}{E}\sin^2\theta\right) - \right.$$
$$\left. -H^2 + \frac{a+b}{E}H^2\sin^2\theta\right] = 0 \qquad (10)$$

Уравнение (10) получено при пренебрежении членами $(b/E)^2$ и $(a/E)^2$.

Из уравнения (10) следуют состояния $\theta = 0$ $\mathbf{l} \| \mathbf{EMA} \| OZ$ и $\theta = \pi/2$ ($\mathbf{l} \perp \mathbf{EMA}$).Состояние $\mathbf{l} \| \mathbf{EMA}$ при $H = 0$, реализуется при $b < 0$, а переход первого рода между состояниями $\theta = 0$, $\theta = \pi/2$ при $\mathbf{H} \| OZ$ происходит, если $a + b < 0$ (см. [8]).

Критические поля при фазовом переходе первого рода, используя достаточные условия существования минимума функции (6), определены в [8]. Но можно эти поля определить иначе. Из уравнения (10) следует

$$\sin\theta\cos\theta = 0\,, \qquad (10a)$$

$$-bE\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)-$$
$$-H^2+\frac{a+b}{E}H^2\sin^2\theta=0. \qquad (10б)$$

Полагая в уравнении (7б) $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$ получаем соответственно выражение H_2 для верхнего критического поля и выражение H_1 для нижнего критического поля, т. е.

$$H_2 = H_{EA}\left(1-\frac{b}{2E}\right),\ \ H_1 = H_{EA}\left(1-\frac{b+2a}{E}\right), \qquad (10в)$$

где $H_{EA}=\sqrt{|b|E}$, а разность $H_2 - H_1 = H_{EA}(-(a+b)/E)$ в согласии с данными [8].

Из уравнения (10б) следует значение для угла θ, соответствующее максимуму. Однако представляет интерес каким образом изменяется этот угол вблизи критических полей. Полагая в уравнении (10б) $\theta \ll 1$ и разлагая тригонометрические функции в ряд получаем

$$\theta = \frac{H_2^2 - H^2}{2|b||a+b|}. \qquad (11)$$

Из формулы (11) следует, что при $H \to H_2$, $\theta \to 0$.

Полагая в уравнении (10б) угол $\theta = \pi/2 - \alpha$ и разлагая тригонометрические функции в ряд с учетом малости α получаем

$$\alpha^2 = \frac{H^2 - H_1^2}{2|b||a+b|}. \qquad 12)$$

Из формулы (12) следует, что при $H \to H_1$, $\alpha \to 0$.

Обращает на себя внимание тот факт, что согласно формулам (11), (12), наиболее значительное изменение барьера, разделяющего два минимума, происходит вблизи критических полей.

4. РАЗЛОЖЕНИЕ ГАМИЛЬТОНИАНА

Подставляя в выражение (6) значение для m, определенное формулой (9), получим

$$\mathscr{H} = 2M_0\left[\frac{1}{2}\frac{H^2\sin^2\theta}{E\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)^2}+\frac{1}{2}b\cos^2\theta+\right.$$
$$+\frac{1}{2}\frac{\left(a\sin^2\theta-b\cos^2\theta\right)H^2\sin^2\theta}{E^2\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)^2}-$$
$$\left.-\frac{H^2\sin^2\theta}{E\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)}\right]. \qquad (13)$$

Выражение (13) удобно записать в виде

$$\mathscr{H} = \frac{2M_0}{E}\left[\frac{H^2\sin^2\theta}{2\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)^2}+\right.$$
$$+\frac{1}{2}b\cos^2\theta+\frac{\left(a\sin^2\theta-b\cos^2\theta\right)H^2\sin^2\theta}{2E\left(1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta\right)^2}-$$
$$\left.-\frac{H^2\sin^2\theta}{1-\frac{b}{E}\cos^2\theta+\frac{a}{E}\sin^2\theta}\right] \qquad (13а)$$

Выражение (13а) можно привести к виду

$$\mathscr{H} = \frac{2M_0}{E}\left[\sin^2\theta\cos^2\theta\left(-\frac{1}{2}H^2\frac{b}{E}\right)+\sin^4\theta\left(\frac{1}{2}H^2\frac{a}{E}\right)+\right.$$
$$\left.+\sin^2\theta\left(-\frac{1}{2}H^2\right)+\cos^2\theta\left(-\frac{1}{2}H_{EA}^2\right)\right. \qquad (13б)$$

если пренебречь членами $(b/E)^2$ и $(a/E)^2$. Полагая в формуле (13б) $\theta \ll 1$ и разлагая тригонометрические функции в ряд, получаем

$$\mathscr{H} = \frac{2M_0}{E}\left[\frac{1}{2}\left(-H^2\frac{b}{E}-H^2+H_{EA}^2\right)\theta^2+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{6}\left(4H^2\frac{b}{E}+3H^2\frac{a}{E}+H^2-H_{EA}^2\right)\theta^4\right] \qquad (14)$$

В выражении (14) угол θ выполняет роль параметра порядка в теории Ландау и, полагая коэффициент при θ^2 равным нулю, мы получим соотношение $H_2 = H_{EA}(1 - (b/2E))$ определяющее верхнее критическое поле (см. формулу (10в)).

Определять угол θ из уравнения $\partial\mathscr{H}/\partial\theta = 0$ используя (14), нельзя. Если же в выражении (13б) положить угол $\theta = \pi/2 - \alpha$ и произвести необходимые разложения с учетом малости α то получим

$$\mathscr{H} = \frac{2M_0}{E}\left[\frac{1}{2}\left(-\frac{b}{E}H_{EA}^2-10\frac{a}{E}H_{EA}^2+H^2-H_{EA}^2\right)\alpha^2+\ldots\right]. \qquad (15)$$

В выражении (15) роль параметра порядка выполняет угол α и полагая коэффициент при α равным нулю, мы получим соотношение $H_1 = H_{EA}(1 - (b + 2a/E))$ определяющее нижнее критическое поле. В формуле (15) мы не стали выписывать член содержащий угол α в четвертой степени, так как его нельзя использовать для определения угла α.

5. ВЫВОДЫ

1. Использование теории фазовых переходов Ландау для определения критических полей, ограничивающих область существования метастабильных состояний легкоосного антиферромагнетика в случае классического spin-flop перехода, расширяет наши представления об универсальности теории Ландау.

2. Выполненные нами исследования могут быть распространены и на другие ориентационные фазовые переходы.

3. Однако использовать теорию Ландау в области фазовых переходов первого рода для определения поведения параметра порядка некорректно.

Landau Theory in the Region of First Order Phase Transitions

O.G. Medvedovskaya[1], Yu.M. Lopatkin[2], T.A. Fedorenko[2], G.K. Chepurnykh[3]

[1] *A.S. Makarenko Sumy State Pedagogical University, 87, Romens'ka Str., 40002 Sumy, Ukraine*
[2] *Sumy State University 2, Rimsky-Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine*
[3] *Institute of Applied Physics, National Academy of Science of Ukraine 58, Petropavlivs'ka Str., 40000 Sumy, Ukraine*

For the case when the line of the first order phase transitions does not transform into the line of the second order phase transitions, i.e. not as ends with the tricritical point but not with a critical one: critical lines, limiting the region of metastable states, by using the Landau theory of phase transitions were determined.

Keywords: Landau theory, Phase transitions, Magnetically ordered crystals.

Теорія Ландау в області фазових переходів першого роду

О.Г. Медведовска[1], Ю.М Лопаткін[2], Т.О. Федоренко[2], Г.К. Чепурних[3]

[1] *Сумський державний педагогічний університет імені А.С. Макаренка, вул. Роменська, 87, 40002 Суми, Україна*
[2] *Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна*
[3] *Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, 40000 Суми, Україна*

Для випадку, коли лінія фазових переходів першого роду не переходить в лінію фазових переходів другого роду, тобто закінчується не три критичною точкою, а критичною: визначено критичні лінії, що обмежують область метастабільних станів, використовуючи теорію фазових переходів Ландау.

Ключові слова: Теорія Ландау, Фазові переходи, Магнітовпорядковані кристали.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J. Ma, C.D. Dela Cruz, Tao Hong, W. Tian, A.A. Aczel, Songxue Chi1, J.-Q. Yan, Z.L. Dun, H.D. Zhou, M. Matsuda, *Phys. Rev. B* **88**, 144405 (2013).
2. S.K. Niesen, G. Kolland, M. Seher, O. Breunig, M. Valldor, M. Braden, B. Grenier, T. Lorenz, *Phys. Rev. B* **87**, 224413 (2013).
3. N.J. Ghimire, M.A. McGuire, D.S. Parker, B. Sipos, S. Tang, J.-Q Yan, B.C. Sales, D. Mandrus, *Phys. Rev. B* **87**, 104403 (2013).
4. R. Torchio, Y.O. Kvashnin, C. Marini, et al., *Phys. Rev. B* **88**, 184412 (2013).
5. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Москва: Наука: 1975).
6. Л.Д. Ландау, В.Л. Ливщиц, *Статическая физика* (Москва: Наука: 1964).
7. Л. Неель, *Изв. АН СССР, Сер.: физ.* **21** № 6, 890 (1957).
8. Е.А. Туров, *Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов* (АН СССР: Москва: 1963).