

На правах рукописи

Прошкин Алексей Игоревич

**ТЕПЛОВЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА
МНОГОВЕРШИННЫХ МОДЕЛЕЙ ПОТТСА**

Специальность 01.04.11 —
Физика магнитных явлений

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург — 2016

Работа выполнена в лаборатории квантовой теории конденсированного состояния Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института Физики Металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук

Научный руководитель:

Кассан-Оглы Феликс Александрович
доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории квантовой теории конденсированного состояния ФГБУН Института Физики Металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург

Официальные оппоненты:

Михеенков Андрей Витальевич
доктор физико-математических наук, доцент, руководитель отдела теоретической физики ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, г. Троицк

Никифоров Анатолий Елеферьевич
доктор физико-математических наук, профессор кафедры компьютерной физики института естественных наук и математики ФГАОУ ВО Уральского Федерального Университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Ведущая организация:

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Защита состоится 31 марта 2017 г. в 11:00 на заседании диссертационного совета Д004.003.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института Физики Металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук по адресу: 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФМ УрО РАН, а также на сайте www.imp.uran.ru.

Автореферат разослан «_____» _____ 20__ г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д004.003.01, д.ф.-м.н.

Чарикова Татьяна Борисовна

Общая характеристика работы

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал по магнитным структурам и свойствам множества соединений типа AX со структурой NaCl, называемых монопниктидами и монохалькогенидами, где A — редкоземельный элемент или актиноид, а X — элемент V или VI групп (UAs, NpAs, EuSe, UTe, USb и т.д.). Надежно установлено, что данный класс материалов обладает сильной магнитокристаллической анизотропией (причем не простого одноосного типа), значительно превосходящей обменное взаимодействие. К экспериментальным свидетельствам этого факта относятся перекрещивающиеся кривые намагничивания в различных кристаллографических направлениях [1; 2], сильное различие величины намагниченности насыщения в них (намагниченность насыщения равна магнитному моменту только вдоль оси легкого намагничивания) [3–8], и необычный ход поведения теплоемкости [9–13]. Более того, величина магнитного момента, определенная методом асимптотической намагниченности, всегда ниже таковой, определенной из нейтронографических экспериментов [4; 14]. Как резонно указал Фогт, «кривые намагничивания в таких кристаллах не могут быть представлены функцией Бриллюэна» [4, с. 207], и «для переориентации всех магнитных моментов вдоль выбранного направления магнитного поля требуются поля порядка миллиона эрстед, недоступные в настоящее время» [там же].

Первые работы по определению магнитных структур урановых соединений, проведенные на поликристаллах UN [15], UP [16], USb [17] и UBi [18], показали, что все они имеют антиферромагнитную структуру типа I (AF 1), которая представляет из себя набор чередующихся плоскостей (001), в каждой плоскости спины упорядочены ферромагнитно, а между плоскостями — антиферромагнитно. Волновой вектор такой магнитной структуры $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$. Исключением оказался арсенид урана [17], которому была приписана структура с волновым вектором $\mathbf{k} = (0, 0, 1/2)$ (антиферромагнитная структура типа IA).

С развитием метода магнитной нейтронографии [19] стало проводиться все больше и больше экспериментов по определению магнитных структур различных соединений, и урановые пниктиды не оказались исключением. Группой Россата-Миньё [20] было показано, что для описания экспериментальных данных соединений UP, UAs и USb одной компоненты волнового вектора недостаточно. Были предложены мульти- \mathbf{k} структуры, волновой вектор которых содержит более одной компоненты (соответственно 2- \mathbf{k} структуры для двухкомпонентного волнового вектора и 3- \mathbf{k} для трехкомпонентного). Обнаружение мульти- \mathbf{k} структур в реальных кристаллах однозначно показало, что магнитные моменты ряда «новых» материалов уже не являются коллинеарными друг другу, а для описания их магнитных свойств нужны модели, в которых бы с самого начала присутствовала жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой.

Одной из самых простых моделей в физике магнетизма является модель Изинга, в которой, в классическом случае, спины могут принимать всего два значения $s = \pm 1$. Эта модель используется, в частности, для описания свойств магнетиков со структурными типами I и IA, о которых шла речь выше. Обобщением модели Изинга на число возможных

направлений спина больше двух являются модели Поттса: стандартные, в которых углы между любыми двумя направлениями спина совпадают, и модифицированные, в которых это условие не соблюдается. В данной работе предлагается описывать термодинамические и магнитные свойства монониктидов и монохалькогенидов лантаноидов и актиноидов в рамках моделей Изинга и Поттса.

Цель данной работы состояла в разработке последовательной системы физических представлений для наблюдаемых магнитных и термодинамических свойств большого класса соединений редких земель и актиноидов со структурой NaCl, а также магнитных фазовых переходов в них.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Исследовать трех-, четырех- и двенадцативершинные одномерные модели Поттса, модель Изинга на цепочке с произвольным значением спина, классическую модель Изинга на квадратной решетке, а также трехвершинную модель Поттса на треугольной решетке. Получить ряд точных аналитических выражений для фрустрационных полей и энтропии в них при $T \rightarrow 0$, выявить особенности, характерные для всех фрустрированных систем. Выяснить, имеется ли качественное совпадение физических свойств магнетиков, описываемых в рамках одномерных и двумерных моделей;
2. Изучить поведение магнитокалорического эффекта (отношения $\partial T/\partial H$) в пара-, ферро- и антиферромагнетиках, описываемых в рамках предлагаемых моделей и подходов, определить общие закономерности, характерные для всего класса рассматриваемых магнитных материалов;
3. Рассмотреть особенности поведения одномерных поликристаллических моделей Поттса, определить возможные причины расхождения экспериментальных данных по определению магнитного момента в пниктидах и халькогенидах актиноидов и редких земель.

Актуальность темы.

Экспериментальный материал по магнитным и термодинамическим свойствам монониктидов и монохалькогенидов весьма богат, в том числе имеются данные, полученные на монокристаллах высокого качества. Однако, надлежащая интерпретация и теоретическое объяснение очень многих экспериментальных фактов в настоящее время отсутствует: кривые температурной зависимости намагниченности значительно отклоняются от бриллюэновского поведения, теория не дает перекрещивающихся кривых намагничивания в трех основных кристаллографических направлениях кубической решетки, причины сильнейшего различия величин намагниченности насыщения в этих трех направлениях остаются не установленными. Между тем класс обсуждаемых магнетиков довольно велик. Все это порождает довольно крупную проблему в физике магнитных явлений, причем проблему теоретическую. Она требует обновления физических моделей взаимодействий и новых подходов в расчетах свойств таких магнетиков. Именно такая цель и была поставлена при работе над настоящей диссертацией.

Следует отметить, что в 2010 году россиянину Станиславу Смирнову была присуждена Филдсовская премия «за доказательство конформной инвариантности двумерной перколяции и модели Изинга в статистической физике». Все это говорит о том, что к статистическим моделям до сих пор проявляется огромный интерес, причем не только в физике. Так, модели Изинга и Поттса нашли свое применение в биологии, кибернетике, экономике, и во многих других областях знаний.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Показано, что поскольку в пниктидах и халькогенидах лантаноидов и актиноидов магнитокристаллическая анизотропия значительно превосходит обменное взаимодействие, то для описания их физических свойств в качестве отправной точки необходимо рассматривать не изотропную модель Гайзенберга, а анизотропные модели Изинга и Поттса, поскольку при таком подходе с самого начала присутствует жесткая связь магнитных моментов с кристаллической структурой;
2. Установлено, что критерием существования фазового перехода и отсутствия фрустраций на языке конфигураций является тот факт, что все энергетически выгодные конфигурации должны обладать трансляционной инвариантностью. Если среди энергетически выгодных конфигураций существуют таковые, не обладающие трансляционной инвариантностью, то возникают фрустрации и фазовый переход отсутствует;
3. Обнаружено, что вблизи любой точки фрустрации или фрустрационного поля (в любой модели на любой решетке в системе любой размерности) возникает расщепление магнитной теплоемкости на два пика (острый лямбда-образный пик и широкий куполообразный максимум);
4. Выяснена причина расхождения значения магнитного момента, определенного методами асимптотической намагниченности и из нейтронографических экспериментов. Показано, что в поликристаллах исследуемого класса магнетиков с увеличением магнитного поля не все спины ориентируются вдоль выбранного поля и, как следствие, намагниченность стремится к некоторому асимптотическому значению, которое всегда меньше величины магнитного момента;
5. Определено, что энтропия в точке фрустрации при $T \rightarrow 0$ не всегда стремится к ненулевому значению. Если число конфигураций, обладающих одинаковой энергией, порядка q^N , где q — число возможных направлений спина на узле, а N — общее число узлов, то энтропия такой системы при $T = 0$ отлична от нуля. Если это условие не соблюдается, то энтропия при $T = 0$ равна нулю;
6. Показано, что в некоторых моделях (например, в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке) могут существовать целые области таких значений обменных интегралов и магнитного поля, при которых основное состояние системы является фрустрированным.

Научная новизна:

В работе детально исследованы термодинамические (теплоемкость, энтропия, магнитокалорический эффект) и магнитные (намагниченность, магнитная восприимчивость) свойства материалов, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса. Установлены критерии существования фрустраций и фазовых переходов в рассматриваемых системах, получены точные аналитические формулы для точек и полей фрустраций. Исследовано общее поведение магнитокалорического эффекта в пара-, ферро- и антиферромагнитных материалах рассматриваемого класса соединений. Для одномерной модели Изинга впервые в мировой литературе получены формулы для намагниченности и энтропии при нулевой температуре для произвольного спина. Впервые продемонстрировано, что фрустрации могут наблюдаться не только в отдельных точках и фрустрационных полях, но и в целых диапазонах мультикомпонентного пространства обменных взаимодействий и магнитного поля.

Практическая значимость заключается в понимании природы магнетизма пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов, условий возникновения фрустраций и их влияния на фазовые переходы.

Достоверность полученных результатов обеспечивается строгой обоснованностью принятых приближений и допущений, использованием широко разработанных и обоснованных в мировой литературе аналитических и численных методов, а также тем фактом, что результаты находятся в согласии с теоретическими и экспериментальными работами других авторов.

Публикации. По материалам диссертации имеется 29 публикаций, в том числе 11 статей [A1–A11] (стр. 17) в реферируемых научных журналах, входящих в перечень рекомендованных ВАК, а также 18 тезисов докладов на Российских и международных конференциях.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на семинарах Института Физики Металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, а также на ряде Российских и международных конференций и симпозиумов:

1. VI Всероссийская научно-техническая конференция «Физические свойства металлов и сплавов» (ФСМиС–VI), 17 – 19 октября 2011 года, Екатеринбург;
2. XXII Международная конференция Новое в Магнетизме и Магнитных Материалах (НМММ–22), 17 – 21 сентября 2012 года, Астрахань;
3. 46-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ПИЯФ–46), 12 – 17 марта 2012 года, Санкт-Петербург;
4. XIII Всероссийская молодежная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–13), 7 – 14 ноября 2012 года, Екатеринбург;
5. 47-я Школа ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния (ПИЯФ–47), 11 – 16 марта 2013 года, Санкт-Петербург;
6. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка–XXXV», 23 февраля – 1 марта 2014 года, Верхняя Сысерть;

7. Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2013 года, 31 марта – 4 апреля 2014 года, Екатеринбург;
8. Московский международный симпозиум по магнетизму (Moscow International Symposium on Magnetism, MISM–2014), 29 июня – 3 июля 2014 года, Москва;
9. Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2014 года, 30 марта – 3 апреля 2015 года, Екатеринбург;
10. Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах, 24 – 28 августа 2015 года, Челябинск;
11. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка–XXXVI», 21 – 27 февраля 2016 года, Верхняя Сысерть.

Проведенные исследования были поддержаны Российский Фондом Фундаментальных Исследований — грант № 16-32-00032 мол_а «Исследование низкоразмерных моделей Изинга и Поттса. Расчет магнитных структур с учетом одноионной анизотропии, произвольного спина, различных знаков обменных взаимодействий и внешнего поля».

Личный вклад. Автор самостоятельно проводил поиск и анализ научной литературы по теме работы, под руководством научного руководителя выполнял задачи, поставленные в начале работы над диссертацией, участвовал в получении и обсуждении ряда результатов, написании тезисов и статей.

Содержание диссертации соответствует пункту 3: «исследование изменений различных физических свойств вещества, связанных с изменением их магнитных состояний и магнитных свойств» паспорта научной специальности 01.04.11 — физика магнитных явлений.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, семи глав основного текста и заключения. Полный объём диссертации составляет 139 страниц с 76 рисунками. Список литературы содержит 125 наименований.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность выбранной темы исследования, описаны цель и задачи диссертационной работы, приведены выносимые на защиту положения.

В **первой главе** представлено современное состояние проблемы исследования магнитных свойств пниктидов и халькогенидов лантаноидов и актиноидов, приведены теоретические обоснования применимости моделей Изинга и Поттса, рассмотрены общие свойства фрустрированных систем. Также в этой главе на примере модели Изинга на цепочке спинов $s = 1/2$ рассмотрен принцип построения трансфер-матриц Крамерса-Ваннье. Метод трансфер-матриц использовался при выводе практически всех аналитических результатов, приведенных в диссертационной работе.

Вторая глава посвящена модели Изинга: в пунктах 2.1 и 2.2 приведены результаты исследования модели на одномерной цепочке с произвольным значением спина s , а в пункте 2.3 — «классической» модели на квадратной решетке с учетом взаимодействий между ближайшими соседями вплоть до третьих.

Что касается одномерной модели Изинга, то во второй главе диссертационной работы показано, что в данной модели при учете антиферромагнитного взаимодействия ($J < 0$) только между ближайшими соседями существует одно фрустрирующее поле H_{fr} , в котором намагниченность при низких температурах испытывает скачок, а энтропия при стремлении температуры к нулю стремится к ненулевым значениям. Были найдены аналитические выражения для поля фрустрации H_{fr} , а также значений намагниченности M_{fr} и энтропии S_{fr} в этом поле при $T \rightarrow 0$:

$$H_{fr} = -2sJ, \quad M_{fr} = \left(\frac{2s-1}{4}\right) + \left(\frac{2s+1}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{1+8s}}, \quad S_{fr} = \ln\left(\frac{1+\sqrt{1+8s}}{2}\right), \quad (1)$$

где s — величина спина, J — величина обменного взаимодействия (всюду в диссертации H и T измеряются в величинах $|J|$).

На рисунке 1 графически изображены зависимости для намагниченности и энтропии во фрустрирующем поле от величины спина. В случае $s = 1/2$ энтропия во фрустрирующем поле равна натуральному логарифму золотого сечения $\ln[(1 + \sqrt{5})/2]$, что совпадает со значением, полученным для классической модели Изинга [A4]. Интересно отметить, что в формуле для энтропии (1) в скобках стоит выражение, которое является корнем уравнения $x^2 - x - 2s = 0$, так что его можно условно назвать «обобщенным» золотым сечением.

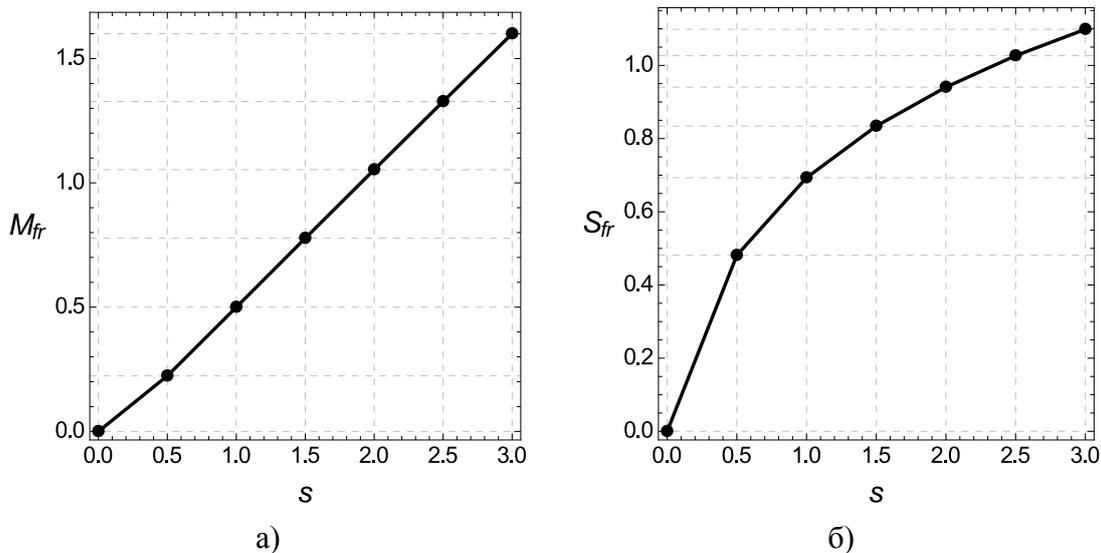


Рис. 1 — Намагниченность а) и энтропия б) во фрустрационном поле как функции s в одномерной антиферромагнитной ($J < 0$) модели Изинга

Далее во второй главе приведены результаты исследования одномерной модели Изинга с произвольным спином при учете взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями как во внешнем магнитном поле, так и при его отсутствии. Исследованы основные состояния, получен ряд точных аналитических выражений для фрустрирующих полей, а также намагниченностей и энтропий в них при $T \rightarrow 0$.

В пункте 2.2 исследуется фурье-образ корреляционной функции одномерной модели Изинга с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями как в магнитном поле, так и при его отсутствии, в частном случае $s = 1/2$. В методе трансфер-матриц выражение

для фурье образа парной спиновой корреляционной функции имеет вид [21]:

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{r=0}^N \sum_{r'=0}^N \frac{\text{Sp}(V_1 V_2 \dots S_r V_r \dots S_{r'} V_{r'} \dots V_N)}{\text{Sp}(V_1 V_2 \dots V_N)} \exp(-iqa(r - r')), \quad (2)$$

где q — вектор рассеяния, a — постоянная решетки, N — число атомов, V_r — трансфер-матрица модели и суммирование ведется по всем узлам решетки.

Показано, что при отсутствии магнитного поля, выражение для корреляционной функции может быть записано в виде:

$$K(q) = \frac{1}{4} \cdot \frac{1 - \eta^2}{1 - 2\eta \cos(q) + \eta^2}, \quad (3)$$

где $\eta = \lambda_2/\lambda_{\max}$ — отношение второго собственного значения трансфер-матрицы к максимальному (параметр решетки a положен равным единице). Зависимость корреляционной функции от волнового вектора (3) для четырех значений температур приведена на рисунке 2.

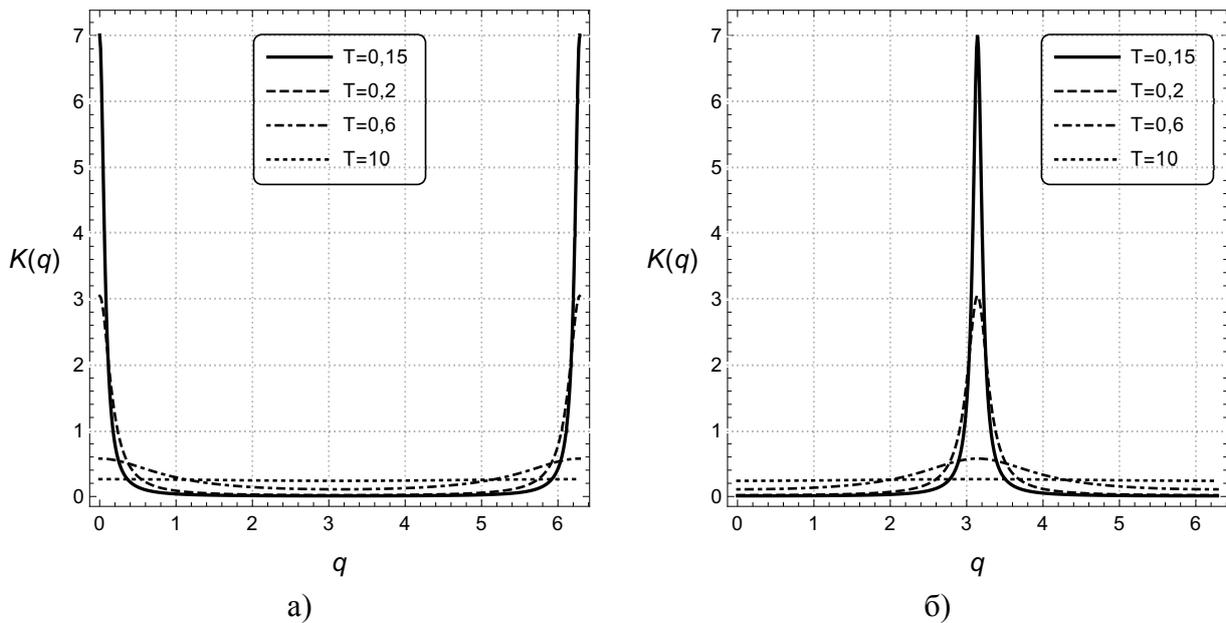


Рис. 2 — Зависимость корреляционной функции от волнового вектора для одномерной модели Изинга $s = 1/2$ при отсутствии магнитного поля в случае ферромагнетика (а) и антиферромагнетика (б) для четырех значений температур

Из рисунка 2а следует, что в случае ферромагнетика корреляционная функция имеет максимумы точно в позициях брэгговских рефлексов $q_n = 2\pi n$, $n = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ и при стремлении температуры к нулю принимает вид дельта-функции, что говорит о фазовом переходе в системе (в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре).

На рисунке 2б изображена корреляционная функция для антиферромагнетика и хорошо видно, что максимумы расположены точно посередине между позициями брэгговских рефлексов $q_n = \pi(2n + 1)$, $n = (0, \pm 1, \pm 2, \dots)$, поскольку основное состояние в данном

случае (+ − +−) обладает удвоенным, по сравнению с решеткой, периодом трансляций. При стремлении температуры к нулю корреляционная функция также принимает вид дельта-функции, что свидетельствует о фазовом переходе.

Далее во второй главе показано, что корреляционная функция (2) одномерной модели Изинга со спином $s = 1/2$ во внешнем магнитном поле состоит из двух слагаемых:

$$K(q) = M^2 L(q) + D(q), \quad (4)$$

где функция Лауэ $L(q)$ задает положения брэгговских рефлексов, а $D(q)$ — определяет диффузное рассеяние,

$$L(q) = \frac{1}{N} \frac{\sin^2(qN/2)}{\sin^2(q/2)}, \quad (5)$$

$$D(q) = \left(\frac{1}{4} - M^2\right) \frac{1 - \eta^2}{1 - 2\eta \cos(q) + \eta^2}, \quad (6)$$

где M — намагниченность, а $\eta = \lambda_2/\lambda_{\max}$.

Функция Лауэ определяет брэгговское рассеяние, которое задается параметрами исходной решетки и не зависит от знака обменного взаимодействия. Внешнее магнитное поле, индуцируя намагниченность, усложняет расчет интенсивности рассеяния. Вся температурная зависимость содержится в параметре η . Поэтому, исследуя температурное поведение корреляционной функции, стоит рассматривать только функцию диффузного рассеяния $D(q)$. Более того, поскольку функция диффузного рассеяния модулирована множителем $(1/4 - M^2)$, то в ферромагнетике при низких температурах $D(q) = 0$ уже при небольших полях (в модели Изинга со спином $s = 1/2$ намагниченность насыщения равна $1/2$).

На рисунке 3а приведена кривая намагниченности для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином $s = 1/2$, а на рисунке 3б — зависимость корреляционной функции от волнового вектора в той же модели.

Хорошо видно, что при низких температурах выше фрустрирующего поля ($H > 1$) диффузное рассеяние отсутствует (поскольку обращается в нуль коэффициент $(1/4 - M^2)$). В полях ниже фрустрирующего ($H < 1$) корреляционная функция при стремлении температуры к нулю приобретает дельта-образный вид, что свидетельствует о фазовом переходе. В самой же точке фрустрации ($H = 1$) корреляционная функция имеет плавный максимум и не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах, что говорит об отсутствии фазового перехода.

Подобное поведение корреляционной функции присуще трехвершинной и четырехвершинной моделям Поттса [22; 23]. Таким образом, фрустрация — совершенно особое состояние. В ней намагниченность испытывает скачок, энтропия при стремлении температуры к нулю стремится к ненулевым значениям (в данном случае к натуральному логарифму золотого сечения), а диффузное рассеяние имеет плавный максимум и не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах. Последнее свидетельствует о том,

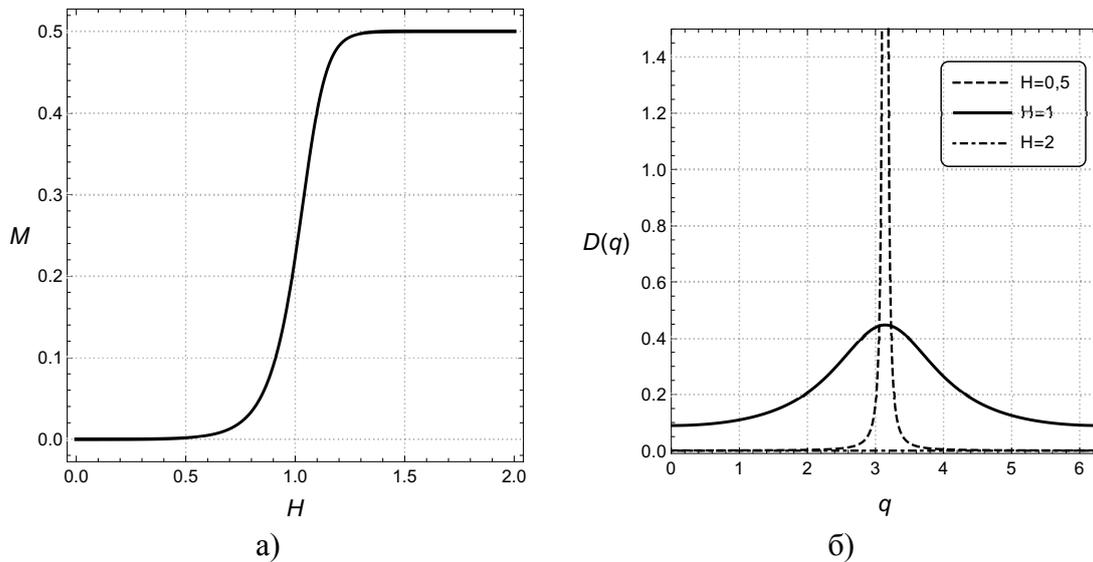


Рис. 3 — (а) Намагниченность как функция поля и (б) корреляционная функция в зависимости от волнового вектора для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином $s = 1/2$ при температуре $T = 0,05$

что в самой точке фрустрации подавляющее большинство конфигураций не обладает трансляционной инвариантностью.

Наконец, в пункте 2.3 главы два в рамках классической модели Изинга на квадратной решетке подробно изучено поведение намагниченности при учете антиферромагнитного взаимодействия между соседями вплоть до третьих и проведено сравнение полученных результатов с одномерной задачей. Показано, что магнитные свойства модели Изинга на линейной цепочке с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями и на квадратной решетке, с учетом взаимодействий между ближайшими и третьими соседями, качественно схожи. На основании этого можно предсказать, что при определенном выборе модели, намагниченность одномерных, двумерных и даже трехмерных моделей будет иметь качественно подобный вид, несмотря на то, что в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.

Третья глава посвящена исследованию трехвершинной модели Поттса на цепочке спинов (пункт 3.1) и на треугольной решетке (пункт 3.2).

Для цепочки спинов с учетом антиферромагнитного взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями получены фазовые диаграммы $H - R$ (магнитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). Проанализированы возникающие конфигурации, построены кривые намагничивания, получены аналитические выражения для величин намагниченности и энтропии во фрустрирующих полях при $T \rightarrow 0$, проведено сравнение полученных результатов с таковыми, полученными для модели Изинга.

В рамках трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом антиферромагнитного взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями получены аналитические выражения для фрустрирующих полей при $T \rightarrow 0$, а также обнаружена целая

область значений параметров R , при которых основное состояние системы является фрустрированным. Численно определена величина энтропии фрустрированного состояния при $T = 0$.

На рисунке 4 приведены рассчитанные зависимости температуры фазового перехода и энтропии при $T \rightarrow 0$ как функции отношения обменных параметров R для трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке. Видно, что в диапазоне $1/5 \leq R \leq 1$ фазовый переход отсутствует, а энтропия при $T \rightarrow 0$ стремится к значению $0,302(2)$ (в скобках указана точность последней цифры). Наличие ненулевой энтропии объясняется бесконечной кратностью вырождения состояния при $1/5 \leq R \leq 1$.

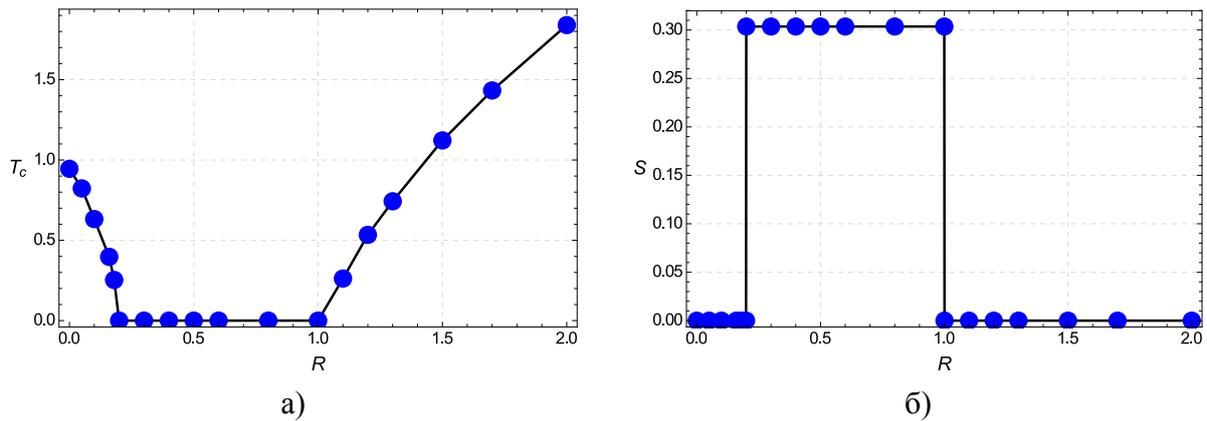


Рис. 4 — Температура фазового перехода а) и энтропия при $T \rightarrow 0$ б) как функции $R = J_2/J_1$ в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом антиферромагнитного взаимодействия между ближайшими J_1 и вторыми J_2 соседями

Теплоемкость в рассматриваемой модели ведет себя типичным для фрустрированных систем образом. Вдали от точек фрустраций имеется острый λ -образный пик, положение которого соответствует температуре фазового перехода. Высота этого пика увеличивается с ростом числа узлов в рассматриваемой решетке и при $L \rightarrow \infty$ стремится к бесконечности. В любой точке из области фрустраций имеется не острый пик, а плавный горб. Положение максимума этого горба, естественно, зависит от R , но его величина при изменении L остается практически постоянной. Пример такого поведения представлен на рисунке 5, где приведены кривые теплоемкости при $R = 0$ и $R = 1/2$. Видно, что в первом случае теплоемкость имеет острый пик, положение которого соответствует температуре фазового перехода, а во втором случае — плавный горб. Вблизи точек фрустрации наблюдается явление расщепления теплоемкости. Подобное поведение теплоемкости справедливо для всех фрустрированных систем, при этом расщепление теплоемкости происходит как вблизи точки фрустрации, так и фрустрационного поля.

Следует отметить, что впервые в мировой литературе исследована система, основное состояние которой является фрустрированным в целом интервале значений R . Ранее изучались системы, в которых фрустрации имеют место только при каком-то конкретном значении R .

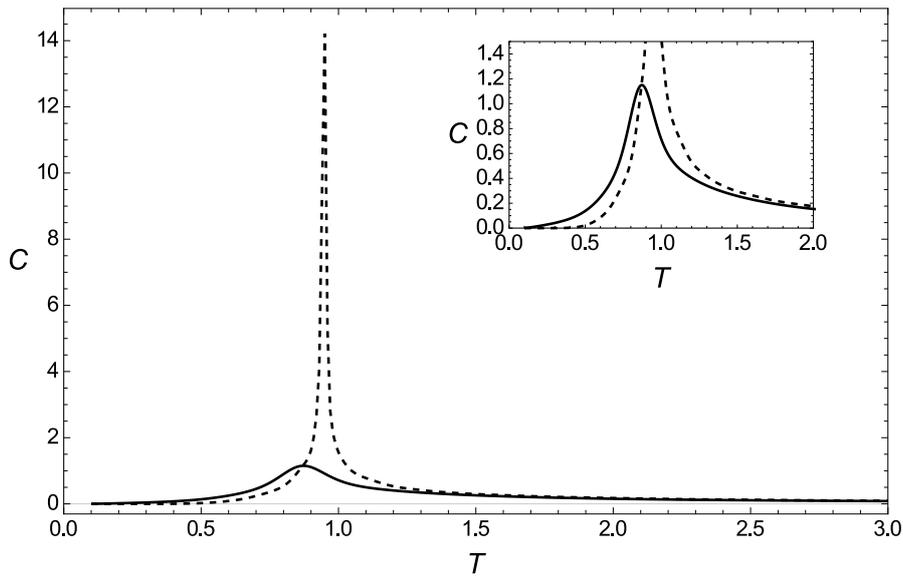


Рис. 5 — Теплоемкость в трехвершинной модели на треугольной решетке при $R = 0$ (пунктирная кривая) и $R = 1/2$ (сплошная кривая)

В последнее время наблюдается повышенный интерес к исследованию мульти- \mathbf{k} структур. В работах [24; 25] было показано, что расшифровка нейтронограммы USb в модели $3\text{-}\mathbf{k}$ структуры лучше согласуется с экспериментальными данными, чем в модели коллинеарной структуры. Эта $3\text{-}\mathbf{k}$ структура в точности соответствует четырехвершинной стандартной модели Поттса. В главе четыре подробно исследуется поведение намагниченности в системах, описываемых в рамках четырехвершинной модели Поттса на линейной цепочке спинов с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями в магнитных полях, направленных вдоль [111], [110] и [100]. Построены фазовые диаграммы $H - R$ (магнитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). В рамках данной модели сделано следующее

1. Показано, что в такой модели могут иметь место до четырех фрустрирующих полей, в которых намагниченность испытывает скачок, а энтропия при $T \rightarrow 0$ стремится к ненулевым значениям.
2. Получены точные аналитические выражения для фрустрирующих полей для различных значений параметра R и направлений внешнего магнитного поля, а также величин намагниченности и энтропии в них при $T \rightarrow 0$.

Четырехвершинная модель может быть использована для описания магнитных и термодинамических свойств реальных магнетиков с $3\text{-}\mathbf{k}$ структурой первого типа. Так, например, имеется качественное совпадение между теоретически рассчитанной намагниченностью и полученной экспериментально (рисунок 6).

В обоих случаях имеется ряд скачков намагниченности с промежуточными плато. Существенная разница заключается в том, что экспериментальная намагниченность в области низких полей ведет себя антиферромагнитным образом, тогда как рассчитанная теоретически в области низких полей ведет себя ферромагнитно. Это объясняется тем, что одномерная четырехвершинная модель Поттса при учете взаимодействия только между ближайшими и

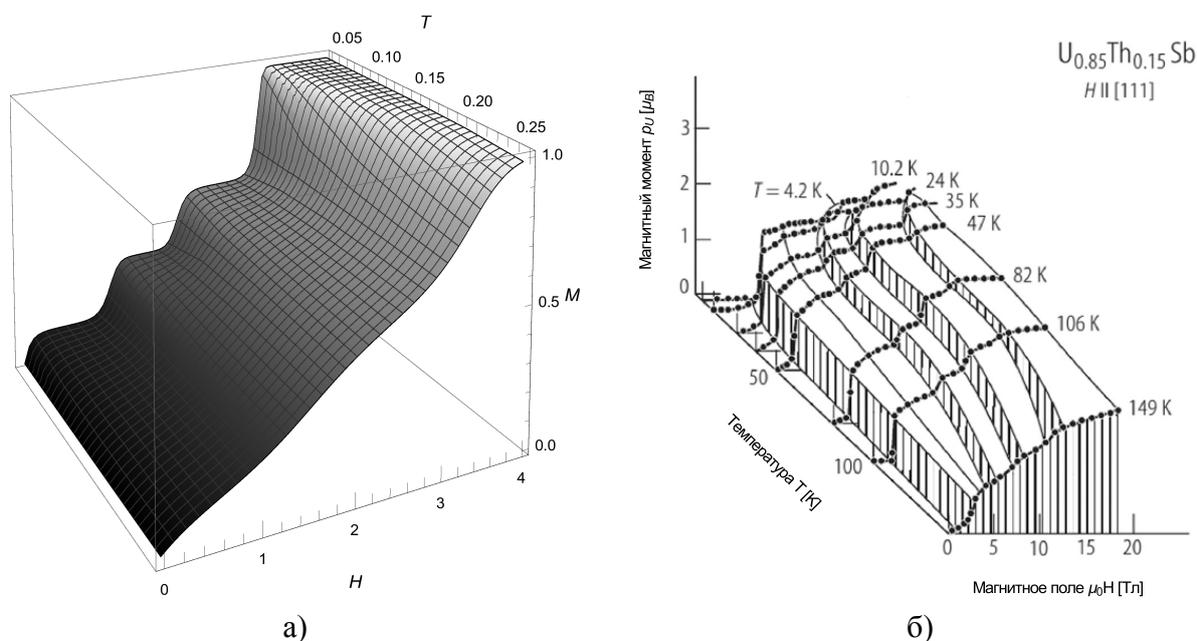


Рис. 6 — Намагниченность четырехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на одномерной цепочке при направлении поля вдоль $[111]$ а) экспериментальная намагниченность $UThSb$ [26] б)

вторыми соседями является фрустрированной в отсутствие магнитного и даже наличие небольшого поля изменяет структуру. В данном случае необходим учет взаимодействия и между третьими соседями.

Дальнейшая работа в этом направлении подразумевает исследование физических свойств магнетиков, описываемых в рамках четырехвершинной модели Поттса на ГЦК решетке, поскольку такая модель эквивалентна 3-к структуре типа I. В дальнейшем автор предполагает заняться такой задачей.

В **пятой главе** диссертационной работы приведены результаты исследования намагниченности и энтропии в рамках одномерной модифицированной двенадцативершинной модели Поттса во внешнем магнитном поле. В рамках этой модели сделано следующее:

1. Определены магнитные структуры, возникающие в данной модели при увеличении магнитного поля.
2. Получены точные аналитические выражения для намагниченности, магнитной теплоемкости и энтропии в полях фрустраций, изучены их температурные и полевые зависимости. Показано, что в точках фрустрации намагниченность испытывает скачок, а энтропия стремится к ненулевым значениям при стремлении температуры к нулю.
3. Показано, что полученные результаты представляют собой не только теоретический интерес: они могут быть применены для описания магнитных свойств реальных трехмерных кристаллов, таких как UP , $NpAs$, UAs и DyS . Объяснены сходства и различия между теоретически рассчитанными кривыми намагничивания и таковыми, полученными из экспериментальных данных.

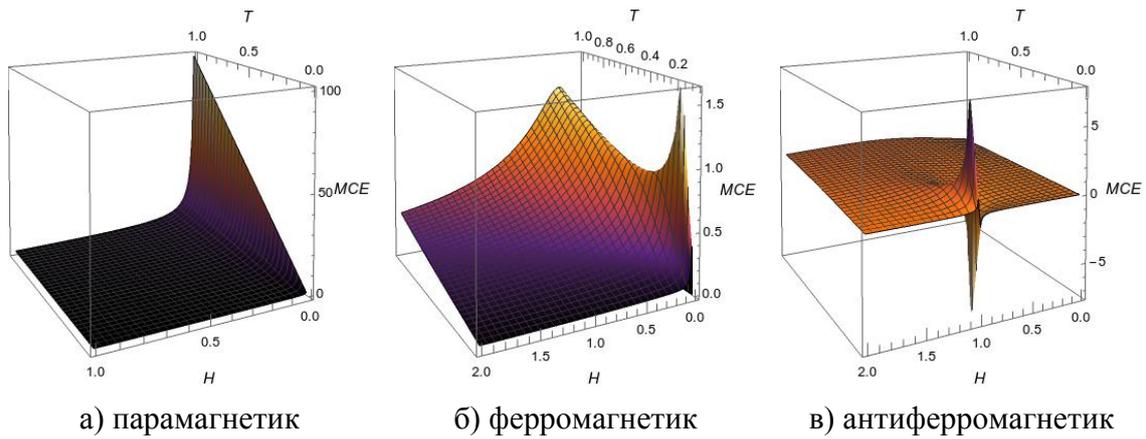


Рис. 7 — Магнитокалорический эффект в одномерной модели Изинга $s = 1/2$ в случаях: парамагнетика $J = 0$ а), ферромагнетика $J > 0$ б) и антиферромагнетика $J < 0$ в)

Качественно результаты, представленные для двенадцативершинной модели, совпадают с таковыми, полученными для одномерных моделей в предыдущих главах. Единственное существенное отличие заключается в том, что в двенадцативершинной модели Поттса осью легкого намагничивания является ось $[110]$.

В **шестой главе** рассматривается магнитокалорический эффект (МКЭ), под которым всюду понимается отношение $\partial T / \partial H$, в одномерных магнетиках, описываемых в рамках моделей Изинга и Поттса. Такой выбор обусловлен тем, что одномерные модели позволяют получить точные выражения для магнитокалорического эффекта. На рисунке 7 приведены зависимости магнитокалорического эффекта от внешнего поля и температуры в одномерной модели Изинга со спином $1/2$ в случаях пара-, ферро- и антиферромагнетика.

Парамагнитная система $J = 0$. В случае, когда взаимодействие между спинами отсутствует, статсумма, теплоемкость, энтропия, намагниченность и другие термодинамические параметры являются функциями отношения H/T , так что магнитокалорический эффект в такой системе всегда будет пропорционален T/H . Этот вывод согласуется, в частности с результатами расчета магнитокалорического эффекта в одномерной модели Изинга (рисунок 7а).

Ферромагнитная система $J > 0$. Зависимость магнитокалорического эффекта от поля и температуры в этом случае приведена на рисунке 7б. Видно, что при $J > 0$ МКЭ всегда положителен и достигает максимальных значений при $H \rightarrow 0, T \rightarrow 0$. Это объясняется тем, что МКЭ всегда имеет максимум в точке фазового перехода, а в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.

Антиферромагнитная система $J < 0$. Зависимость магнитокалорического эффекта от поля и температуры для одномерной антиферромагнитной модели Изинга со спином $1/2$ приведена на рисунке 7в. В такой модели имеется фрустрационное поле $H_{fr} = 1$, в котором МКЭ меняет знак. Слева от этого поля он отрицателен, а справа — положителен. В самом же критическом поле магнитокалорический эффект при низких температурах может достигать огромных значений. Тем не менее, при $T \rightarrow 0$ МКЭ стремится к нулю в соответствии с

третьим началом термодинамики. Для систем, в которых имеют место несколько полей фрустраций, магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из них.

В **седьмой главе** диссертационной работы в рамках трех-, четырех-, шести- и восьмивершинных моделей Поттса проведены детальные расчеты намагниченности поликристаллических (или порошковых) кубических ферро- и антиферромагнетиков с сильной магнитокристаллической анизотропией и различными типами осей легкого намагничивания для разных температур и в произвольном внешнем магнитном поле. Определены общие закономерности намагничивания поликристаллов, а также отличия от намагничивания монокристаллов:

1. При ферромагнитном обменном взаимодействии характер зависимости намагниченности от поля почти не отличается от традиционных ферромагнетиков: имея вид плавно нарастающей выпуклой (без перегибов) кривой при всех температурах, и стремящейся при $T \rightarrow 0$ к скачкообразной зависимости в точке $H = 0$. Единственное отличие — значение намагниченности насыщения для поликристалла меньше, чем таковое для монокристалла при ориентировке поля вдоль легкой оси.
2. При антиферромагнитном обменном взаимодействии критические (фрустрирующие) магнитные поля приводят к появлению точек перегиба на кривой зависимости намагниченности от поля. В некоторых моделях Поттса (трехвершинной и четырехвершинной) при низких значениях магнитного поля могут существовать промежуточные плато намагниченности.
3. При величинах магнитных полей, превышающих критические, намагниченность имеет вид монотонно возрастающей выпуклой (без перегибов) кривой даже при $T \rightarrow 0$.

Отличия асимптотических значений намагниченности поликристаллов и монокристаллов в магнитном поле, направленном вдоль легкой оси, свидетельствует о наличии сильной анизотропии, а полученные аналитические значения асимптот намагниченностей поликристаллов и конкретные особенности кривых намагничивания позволяют сделать выбор в пользу той или иной модели для определения магнитной структуры при расшифровке магнитных нейтронограмм.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Для одномерной модели Изинга с произвольным значением спина получены аналитические выражения для фрустрирующих полей, а также величин намагниченности и энтропии в них при $T \rightarrow 0$ как функции спина s . Показано, что в точке фрустрации намагниченность испытывает скачок, энтропия может стремиться к ненулевому значению при стремлении температуры к нулю, а фурье-образ парной спиновой корреляционной функции не переходит в дельта-функцию ни при каких температурах. Последнее свидетельствует о том, что подавляющее большинство конфигураций в точке фрустрации не имеет трансляционной инвариантности.

2. В рамках модели Изинга на квадратной решетке показано, что магнитные свойства модели Изинга на линейной цепочке с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями и на квадратной решетке, с учетом взаимодействий между ближайшими и третьими соседями, качественно схожи. На основании этого можно предсказать, что при определенном выборе модели, намагниченность одномерных, двумерных и даже трехмерных моделей будет иметь качественно подобный вид, несмотря на то, что в одномерных моделях фазовый переход имеет место при нулевой температуре.
3. Для одномерных трех- и четырехвершинных моделей Поттса построены магнитные фазовые диаграммы $H - R$ (магнитное поле – отношение взаимодействия между вторыми соседями к таковому между ближайшими). Для всех рассмотренных моделей Поттса получены аналитические выражения для фрустрирующих полей, а также величин намагниченности и энтропии в них при $T \rightarrow 0$. В рамках трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке впервые обнаружена целая область параметров обменных взаимодействий, при которых основное состояние системы является фрустрированным. Показано, что полученные результаты качественно объясняют экспериментальные данные реальных анизотропных магнетиков.
4. Выяснено, что в парамагнетике с локализованными магнитными моментами магнитокалорический эффект ($\partial T / \partial H$) для любой модели любой размерности всегда равен T/H . В ферромагнетике магнитокалорический эффект всегда положителен и достигает максимального значения при $H \rightarrow 0, T \rightarrow 0$: в одномерных моделях фазовый переход происходит при нулевой температуре. В антиферромагнетиках, благодаря наличию фрустраций, магнитокалорический эффект имеет особенность в каждой из критических точек, при этом слева от точки фрустрации он отрицателен, справа — положителен.
5. Установлен факт отличия асимптотических значений намагниченности поликристаллов и монокристаллов в магнитном поле, направленном вдоль легкой оси. Найденные аналитические выражения для асимптотических значений намагниченности и определенные особенности кривых намагничивания позволяют сделать выбор в пользу той или иной модели при расшифровке магнитных нейтронограмм для определения магнитной структуры.
6. Обнаружено, что в любой модели на любой решетке магнитная теплоемкость в непосредственной близости от точки фрустрации испытывает расщепление — наряду с острым онзагеровским максимумом, соответствующим точке фазового перехода, возникает дополнительный куполообразный максимум.

Список публикаций по теме диссертации

- [A1] Магнитокалорический эффект в одномерных магнетиках / Ф. А. Кассан-Оглы, М. В. Медведев, А. И. Прошкин, А. В. Зарубин // *Известия РАН, серия физическая*. — 2013. — Т. 77, № 10. — С. 1449–1451.
- [A2] Фрустрации и фазовые переходы в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей / А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин // *Письма в ЖЭТФ*. — 2014. — Т. 100, № 4. — С. 267–271.
- [A3] Прошкин А. И. Особенности намагниченности поликристаллов магнетиков с сильной анизотропией / А. И. Прошкин, Ф. А. Кассан-Оглы // *ФММ*. — 2014. — Т. 115, № 3. — С. 227–241.
- [A4] Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions / F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, A. I. Proshkin // *J. Magn. Magn. Mat.* — 2015. — Vol. 384. — Pp. 247–254.
- [A5] Двенадцативершинная модель Поттса в магнитном поле / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов, А. И. Прошкин, А. В. Зарубин // *ФММ*. — 2015. — Т. 116, № 2. — С. 123–135.
- [A6] Proshkin A. I., Kassan-Ogly F. A. Four-state standard Potts model // *J. Magn. Magn. Mat.* — 2015. — Vol. 383. — Pp. 13–18.
- [A7] Magnetocaloric effect in one-dimensional magnets / A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, M. V. Medvedev, A. I. Proshkin // *Solid State Phenom.* — 2015. — Vol. 233–234. — Pp. 212–215.
- [A8] Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей / А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин // *ЖЭТФ*. — 2016. — Т. 149, № 2. — С. 357–366.
- [A9] Proshkin A. Exact solution of 1D Ising model on linear chain with arbitrary spin / A. Proshkin, F. Kassan-Ogly // *Materials Science Forum*. — 2016. — Vol. 845. — Pp. 93–96.
- [A10] Frustrations and phase-transitions in low-dimensional magnetic systems / F. Kassan-Ogly, A. Proshkin, A. Murtazaev, A. Babaev, M. Ramazanov, M. Magomedov // *Materials Science Forum*. — 2016. — Vol. 845. — Pp. 111–116.
- [A11] Zarubin A. V. Diffuse scattering on Ising chain with competing interactions / A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, A. I. Proshkin // *Materials Science Forum*. — 2016. — Vol. 845. — Pp. 122–125.

Список литературы

1. Similarities in magnetic behavior of cerium and plutonium compounds / B. R. Cooper, P. Thayamballi, J. C. Spirlet et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1983. — Vol. 51, no. 26. — Pp. 2418–2421.
2. Cooper B. R. Magnetization behaviour and the valence of uranium in $(U_xTh_{1-x})Sb$ / B. R. Cooper, O. Vogt // *J. Phys. Colloq.* — 1979. — Vol. 40, no. 4. — Pp. 66–67.
3. Vogt O. Properties of pure single crystals of actinide compounds / O. Vogt // *J. Nucl. Mater.* — 1989. — Vol. 36. — Pp. 36–40.
4. Vogt O. Magnetization measurements on single crystals of uranium chalcogenides and pnictides / O. Vogt // *Physica B.* — 1980. — Vol. 102. — Pp. 206–211.
5. Magnetization measurements on single crystals of neptunium monopnictides. In: *Transuranium elements: a half century* / K. Mattenberger, O. Vogt, J. Rebizant, J. C. Spirlet; Ed. by L. R. Morss, J. Fuger. — Washington DC: Amer. Chem. Soc., 1992. — Pp. 378–396.
6. Magnetization measurement of EuSe single crystal / H. Fukuma, T. Komatsubara, T. Suzuki et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1985. — Vol. 54. — Pp. 3067–3075.
7. Hulliger F. Low-temperature behavior of DyS, DySe, HoS and HoSe. In: *The rare earths in modern science and technology* / F. Hulliger, M. Landolt, R. Schmelzger; Ed. by G. J. McCarthy, H. B. Silber, J. J. Rhyne. — New York: Plenum Press, 1982. — Vol. 3. — Pp. 455–458.
8. Suski W. Magnetic properties of some cubic uranium compounds / W. Suski, T. Mydlarz, V. U. S. Rao // *Phys. Stat. Solidi A.* — 1972. — Vol. 14. — Pp. 157–160.
9. The magnetic phase transitions in Ce-monopnictides, strong p-f mixing effect / T. Kasuya, Y. S. Kwon, T. Suzuki et al. // *J. Magn. Magn. Mat.* — 1990. — Vol. 90–91. — Pp. 389–392.
10. Scheer E. Specific heat of $Eu_xSr_{1-x}Te$ / E. Scheer, J. Wosnitza, H. v. Löhneysen // *Z. Phys. B: Condens. Matter.* — 1991. — Vol. 85. — Pp. 79–86.
11. Wada H. Low temperature specific heat of DyBi and ErBi / H. Wada, H. Imai, M. Shiga, M. // *J. Alloys Compd.* — 1995. — Vol. 218. — Pp. 73–76.
12. Calorimetric study of trivalent Kondo compound TmS / A. Berton, J. Chaussy, J. Flouquet et al. // *Phys. Rev. B.* — 1985. — Vol. 31, no. 7. — Pp. 4313–4318.
13. Matsumara T. Specific heat study of the quadrupolar ordering in TmTe / T. Matsumara, H. Shida, T. Suzuki // *Physica B: Condensed Matter.* — 1997. — Vol. 230–232. — Pp. 738–740.
14. Wedgwood F. A. Actinide pnictides and chalcogenides: I. Study of magnetic ordering and ordered moments in uranium monochalcogenides by neutron diffraction / F. A. Wedgwood, M. Kuznietz // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1972. — Vol. 5. — Pp. 3012–3020.
15. Curry N. A. An investigation of the magnetic structure of uranium nitride by neutron diffraction / N. A. Curry // *Proc. Phys. Soc.* — 1965. — Vol. 86. — Pp. 1193–1198.

16. *Curry N. A.* The magnetic structure of uranium monophosphide / N. A. Curry // *Proc. Phys. Soc.* — 1966. — Vol. 89. — Pp. 427–429.
17. *Leciejewicz J.* The antiferromagnetic ordering in uranium monoarsenide and monoantimonide / J. Leciejewicz, A. Murasik, R. Troć // *Phys. Stat. Solidi.* — 1968. — Vol. 30, no. 1. — Pp. 157–162.
18. *Kuznietz M.* Antiferromagnetic structures of USb and UBi / M. Kuznietz, G. H. Lander, F. P. Campos // *J. Phys. Chem. Solids.* — 1969. — Vol. 30. — Pp. 1642–1643.
19. *Shull C. G.* Neutron diffraction by paramagnetic and antiferromagnetic substances / C. G. Shull, W. A. Strauser, E. O. Wollan // *Phys. Rev.* — 1951. — Vol. 83, no. 2. — Pp. 333–345.
20. *Rossat-Mignod J.* Neutron scattering. In: *Methods of experimental physics* / J. Rossat-Mignod; Ed. by K. Skjöld, D. J. Price. — New York: Academic Press, 1987. — Vol. 23. — P. 69.
21. *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер; под. ред. А. М. Бродского. — М.: Мир, 1985. — 487 с.
22. *Кассан-Оглы Ф. А.* Корреляционная функция одномерной четырехвершинной стандартной модели Поттса с взаимодействием вторых соседей / Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов // *ФММ.* — 2003. — Т. 95. — С. 12–24.
23. *Kassan-Ogly F. A.* Correlation-function of one-dimensional 3-state Potts-model with next-nearest-neighbor-interaction / F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov // *Phase Transitions.* — 2004. — Vol. 77. — Pp. 261–279.
24. *Vogt O.* Magnetic ordering in cerium and uranium monpnictides / O. Vogt // *Physica B.* — 1980. — Vol. 102. — Pp. 237–248.
25. $(U_{1-x}Pu_x)Sb$ solid solutions. I. Magnetic configurations / P. S. Normile, W. G. Stirling, D. Mannix et al. // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 014405.
26. Magnetic phase diagrams of some uranium monpnictides and mono-chalcogenides. In: *Crystalline electric field effects in f-electron magnetism* / J. Rossat-Mignod, P. Burlet, S. Quezel et al.; Ed. by R. P. Guertin, W. Suski, Z. Zolnierek. — Germany: Springer, 1982. — Pp. 501–518.

Отпечатано на ризографе ИФМ УрО РАН тираж 100 экз. заказ № 01

объем 1 печ. л. формат 60×84 1/16

620990, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18