

УДК 537.61

**Сайко П. А., Шаповалов И. П.**

Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова,  
кафедра теоретической физики  
E-mail: fesswolf10@gmail.com

## **Магнитное упорядочение мелкодисперсного магнетика во внешнем магнитном поле**

*Исследованы возможные типы однородного магнитного упорядочения в мелкоразмерной частице одноосного магнетика с единичным спином ионов во внешнем поле. Рассмотрен случай, когда между магнитными ионами наряду с гейзенберговским обменным взаимодействием присутствует биквадратичное обменное взаимодействие. В координатах напряженность поля - температура построена фазовая диаграмма магнетика при определенных значениях параметров гамильтониана. На фазовой диаграмме кроме тройной точки также присутствует тетракритическая точка.*

**Введение.** Одним из основных свойств очень мелкой магнитной пыли является ее однодоменность. Иными словами, если размер частицы  $d$  меньше некоторого критического размера  $d_c$ , разбиения частицы на домены не происходит [1]. В этом случае частица пыли может обладать макроскопическим магнитным моментом в отсутствие внешнего магнитного поля и без предварительной намагниченности. Возможность возникновения однодоменного состояния обоснована Френкелем и Дорфманом [2]. Изменение магнитных свойств обусловлено тем, что при уменьшении размера частицы до значений ниже  $d_c$  разделение областей намагниченности на домены становится энергетически невыгодным. Т.е происходит преобразование мультидоменной магнитной структуры, свойственной макроскопическим материалам, в однодоменную структуру – присущую микрочастицам (наночастицам). Размеры таких частиц определяются свойствами конкретного вещества индивидуально для каждого магнитного материала.

По расчетам Кондорского [3] для железа, например,  $d_c \approx 200 \text{ \AA}$ , а для никеля  $d_c \approx 600 \text{ \AA}$ . Расчеты Киттеля [4] для никеля дают такое же значение:  $d_c \approx 600 \text{ \AA}$ . Анализ различных методов получения однодоменных частиц дан в работе [5].

Традиционно исследование магнитных свойств однодоменных частиц проводят на основе модели Гейзенберга. Однако существует широкий класс магнитных соединений, для исследования которых эта модель оказывается неприемлемой. В частности, для адекватного описания свойств многих магнитных диэлектриков наряду с гейзенберговским обменным взаимодействием (ОВ) необходимо учитывать взаимодействие ионов с кристаллическим полем и ОВ высших степеней по спину [6]. При значении спина  $S = 1$ , которое рассматрива-

ется в настоящей работе, ОВ высших степеней по спину сводятся к биквадратичному ОВ.

Целью настоящей работы является построение фазовой диаграммы мелко-размерной частицы ( $d < d_c$ ) одноосного магнетика с единичным спином при наличии кристаллического поля и анизотропного биквадратичного ОВ.

**Модель системы.** Гамильтониан одноосного магнетика со спином  $S = 1$  в продольном магнитном поле при наличии кристаллического поля и биквадратичного ОВ в наиболее общем случае имеет вид (см., например, [7]):

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

где  $h$  – напряжённость внешнего продольного магнитного поля;  $J_{ij}$  и  $K_{ij}$  – константы гейзенберговского и биквадратичного ОВ;  $D$  – константа кристаллического поля;  $\xi$  – константа анизотропии гейзенберговского ОВ;  $\eta, \zeta$  – константы анизотропии биквадратичного ОВ;  $S^l$  ( $l = x, y, z$ ) – спиновые операторы;  $Q^p$  ( $p = 0, \pm 1, \pm 2$ ) – операторы компонент квадрупольного магнитного момента; индексы  $i, j$  нумеруют узлы кристаллической решётки.

Гамильтониан (1) имеет единственную ось симметрии (ось  $Z$ ), т.е. является одноосным.

Первый член в гамильтониане представляет собой энергию магнитных моментов ионов во внешнем поле (зеemanовскую энергию). Второй член – энергия гейзенберговского ОВ. Это взаимодействие при условии  $\xi = 1$  становится изотропным. Третий член гамильтониана соответствует энергии взаимодействия магнитных ионов с кристаллическим полем (ее величина зависит от константы  $D$ ). Четвертый член – энергия биквадратичного ОВ, которое при условии  $\eta = \zeta = 1$  является изотропным. Таким образом, отличие констант  $\xi, \eta, \zeta$  от единицы характеризует степень анизотропии ОВ.

Мы рассматриваем такой случай, когда в системе могут реализовываться только одноподрешёточные фазы. Это обеспечивается выполнением условий  $J_{ij} > 0$  и  $K_{ij} > 0$ .

Кроме неупорядоченной парамагнитной фазы (ПМФ) и фазы ферромагнитного упорядочения (ФМФ) модельный гамильтониан (1) допускает реализацию в системе плоскостной и осевой квадрупольных фаз (ПКФ и ОКФ), а также угловой фазы (УФ) [8]. Таким образом, число возможных фаз в системе равно пяти.

Главная отличительная черта квадрупольных фаз состоит в том, что в отсутствие внешнего магнитного поля намагниченность исследуемой частицы равна нулю, а квадрупольный магнитный момент отличен от нуля. При этом в ПКФ магнитные моменты отдельных ионов частицы свободно вращаются в плоскости, перпендикулярной оси симметрии частицы, а в ОКФ магнитные

моменты ионов с равной вероятностью могут быть направлены вдоль или против оси симметрии. В угловой фазе намагниченность образует некоторый угол с осью симметрии частицы.

**Фазовая диаграмма.** Исследование гамильтониана (1) в приближении молекулярного поля позволяет получить систему двух неявных уравнений для средних значений операторов  $S^Z$  и  $Q^0$  (см., например, [7]):

$$\langle S^Z \rangle = \frac{2sh\left(\left(h + 2J_0\langle S^Z \rangle\right)/kT\right)\exp(kT)}{1 + 2ch\left(\left(h + 2J_0\langle S^Z \rangle\right)/kT\right)\exp\left(\left(6K_0\langle Q^0 \rangle - D\right)/kT\right)}$$

$$\langle Q^0 \rangle = \frac{1}{3} - \frac{1}{1 + 2ch\left(\left(h + 2J_0\langle S^Z \rangle\right)/kT\right)\exp\left(\left(6K_0\langle Q^0 \rangle - D\right)/kT\right)}, \quad (2)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура,  $J_0$  и  $K_0$  определяются выражениями

$$J_0 = \sum_i J_{ij}, \quad K_0 = \sum_i K_{ij}. \quad (3)$$

Величины  $\langle S^Z \rangle$  и  $\langle Q^0 \rangle$  играют роль относительных намагниченностей (дипольной и квадрупольной) частицы. Зависимости этих величин от температуры, полученные путем численного решения системы уравнений (2), позволяют определить границы ПМФ [9]. Так в ПКФ при фиксированном значении магнитного поля  $h$  с ростом температуры намагниченность  $\langle S^Z \rangle$  увеличивается, а в ПМФ – уменьшается. Поэтому температуре перехода между ПКФ и ПМФ соответствует максимальное значение функции  $\langle S^Z \rangle = f(T)$ . В ФМФ при фиксированном значении  $h$  с ростом температуры квадрупольная намагниченность  $\langle Q^0 \rangle$  уменьшается, проходя через ноль, а в ПМФ увеличивается, стремясь к нулю. Следовательно, температуре перехода между ФМФ и ПМФ соответствует минимальное значение функции  $\langle Q^0 \rangle = f(T)$ .

Границы ФМФ для модели магнетика, задаваемой гамильтонианом (1), приведены в [7]. Так, для границы ФМФ  $\leftrightarrow$  ОКФ имеем:

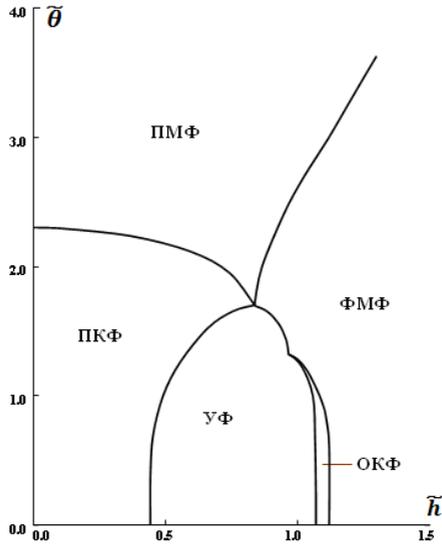
$$h + 2\langle S^Z \rangle(J_0 - \zeta K_0) = 0,$$

а для границы ФМФ  $\leftrightarrow$  УФ, соответственно:

$$h + \langle S^Z \rangle(2J_0 - \xi J_0 - \eta K_0) =$$

$$= \left\{ \left(\langle S^Z \rangle\right)^2 (\xi J_0 - \eta K_0)^2 + \left[ D - 2\langle Q^0 \rangle (K_0 - \xi J_0) \right] \left[ D - 2\langle Q^0 \rangle K_0 (1 - \eta) \right] \right\}^{1/2}.$$

Выражение, описывающее границу ПКФ  $\leftrightarrow$  УФ, по виду совпадает с приведенным выше выражением для границы ФМФ  $\leftrightarrow$  УФ. При этом следует учиты-



**Рис.1** Фазовая диаграмма магнетика с сильным кристаллическим полем и биквадратичным обменным взаимодействием. Диаграмма построена при  $J_0 = 1.0$ ;  $D = 1.0$ ;  $K=0.8$ ;  $\xi = 1.0$ ;  $\zeta = 1.95$ ;  $\eta = 1.0$ .

вать, что численные значения величин  $\langle S^z \rangle$  и  $\langle Q^0 \rangle$  в обоих случаях различаются.

Уравнение границы УФ ↔ ОКФ было получено в [10], однако ввиду чрезвычайной громоздкости мы его не приводим.

На рис.1 в безразмерных координатах  $\tilde{h} - \tilde{\theta}$ , где  $\tilde{\theta} = kT/J_0$ ;  $\tilde{h} = h/J_0$ , построена фазовая диаграмма исследуемого магнетика, содержащая все описанные выше границы.

На фазовой диаграмме присутствуют мультикритические точки: тройная и тетракритическая. Численные расчеты показывают, что безразмерные координаты обеих мультикритических точек сильно зависят от величины кристаллического поля  $D$ .

**Выводы.** Из полученной в работе фазовой диаграммы следует, что в мелких частицах магнетика с негейзенберговскими взаимодействиями могут реализовываться сложные каскады фазовых переходов по полю и по температуре. Для экспериментального наблюдения таких каскадов необходимо использовать магнетик, в котором наряду с ФМФ и ПМФ могут реализовываться квадрупольные и квадрупольно-угловая фазы. Возможность реализации этих фаз обусловлена негейзенберговскими членами в гамильтониане [6]. Подходящим может оказаться магнетик, принадлежащий к классу веществ  $RT_2X_2$ , где  $R$  – ред-

коземельний елемент,  $T$  – переходний метал, а  $X$  –  $Ge$  або  $Si$ . В речовинах цього класу іменно негеізенберговські взаємодії грають домінуючу роль в формуванні магнітного упорядкування.

### Література:

1. Петров Ю.И. Фізика малих частиц. – М.: Наука, 1982. – 360 с.
2. Frenkel J., Dorfman J. Spontaneous and induced magnetization in ferromagnetic bodies // Nature. – 1930. – V.126. – P.274 – 275.
3. Кондорский Е.И. Микромагнетизм и перемагничивание квазиоднодоменных частиц // Известия АН СССР, Сер. физ. – 1978. – Т. 42, №8. – С.1638-1645.
4. Kittel C., Galt J.K. Ferromagnetic domain theory. Solid state physics // Ed. by F. Seitz, D. Turnbull. – N.Y: Academic Press. – 1956.– V.3 – P. 437-564.
5. Губин С.П., Кокшаров Ю.А., Хомутов Г.Б., Юрков Г.Ю. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства // Успехи химии. – 2005. – Т.74, №6. – С.539–574.
6. Шаповалов И.П. Мелкодисперсные одноосные магнетики с анизотропным биквадратным обменным взаимодействием. // Фізика аеродисперсних систем. – 2008. – №. 45. – С.5–9.
7. Fridman Yu.A., Kosmachev O.A., Klevets Ph.N. Phase states of an S=1 magnet with anisotropic exchange interactions.// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2008. –V.320. – P. 435-449.
8. Шаповалов И.П., Сайко П.А. Фазовые переходы в магнетиках с тензорными взаимодействиями и низкотемпературные датчики магнитного поля // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2010. – Т.1, №4. – С.17-20.
9. Shapovalov I.P., Sayko P.A. Axial quadrupole phase of a uniaxial spin-1 magnet // arXiv:1405.0606 [cond-mat.str-el] [3 May 2014].
10. Massidda V. Transitions involving conical magnetic phases in a model with bilinear and biquadratic interactions.// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2008. – V.320. – P. 851–856.

**Сайко П. О., Шаповалов І. П.**

**Частинка дрібнодисперсного магнетика зі складними обмінними взаємодіями у зовнішньому магнітному полі**

### АНОТАЦІЯ

Досліджені можливі типи однорідного магнітного впорядкування в дрібнорозмірній частинці одновісного спин-1 магнетика у зовнішньому полі. Розглянуто випадок, коли в системі присутні складні обмінні взаємодії. У координатах поле – температура побудована фазова діаграма магнетика при певних значеннях параметрів гамільтоніана. На фазовій діаграмі окрім потрійної точки присутня тетракритична точка.

*Sayko P.O., Shapovalov I.P.*

**The particle of highly dispersed magnetic with complex exchange interactions in an external magnetic field**

SUMMARY

*The possible types of uniform magnetic ordering in small-sized particle of the uniaxial spin-1 magnet in an external field have been investigated. The case of the system with complex exchange interactions is considered. The phase diagram of a magnet in the field – temperature coordinates is constructed for certain values of the Hamiltonian parameters. There is a tetracritical point besides a triple point on the phase diagram.*