

INSTYTUT FIZYKI
POLITECHNIKI WROCŁAWSKIEJ

TERMODYNAMIKA ŚCIŚLIWYCH MODELI
ISINGA I HEISENBERGA Z SILNYM
ANHARMONIZMEM DRGAŃ SIECI KRYSTA-
LICZNEJ I Z SILNYM SPRZĘŻENIEM
SPINOWO-FONONOWYM

/praca doktorska/
mgr inż.fizyki Włodzimierz Salejda

Promotor

Doc.dr hab.Henryk Konwent
Instytut Fizyki
Politechniki Wrocławskiej

WROCŁAW 1984

Mojemu Nauczycielowi i Promotorowi

Panu Doc.dr hab. Henrykowi Konwentowi
składam serdeczne podziękowania za
sformułowanie tematu niniejszej pracy
i wszechstronną pomoc w trakcie jej
wykonywania.

Panu Dr Antoniemu Mitusiowi dziękuję
za wprowadzenie mnie w problematykę
obliczeń numerycznych.

Najserdeczniej dziękuję mojej Żonie
za okazane mi wsparcie w czasie
pisanie tej pracy.

SPIS TREŚCI

1.	Wstęp	str. 5
2.	Model Isinga z polem poprzecznym w ściślejszej sieci w przybliżeniu pola samouzgodnionego.....	10
2.1.	Wprowadzenie	10
2.2.	Potencjały termodynamiczne	12
2.3.	Samouzgodniony układ równań dla modelowych oddziaływań	17
2.4.	Wyniki obliczeń numerycznych	22
2.5.	Dyskusja i wnioski	26
3.	Oddziaływanie spinowo-fononowe w anharmonicznym ferromagnetyku Heisenberga o dowolnym spinie w przybliżeniu pola samouzgodnionego.....	59
3.1.	Wprowadzenie	59
3.2.	Potencjały termodynamiczne układu	60
3.3.	Model oddziaływań i samouzgodniony układ równań. Metoda A.....	64
3.4.	Wyniki obliczeń numerycznych. Metoda A....	67
3.5.	Dynamika drgań sieci oraz termodynamiczne funkcje stanu. Metoda B.....	96
3.6.	Wyniki obliczeń numerycznych. Metoda B....	100
3.7.	Dyskusja otrzymanych wyników.....	102
3.8.	Porównanie z doświadczeniem	115
4.	Oddziaływanie spinowo-fononowe w modelu Heisenberga ze spinem $S = 1$ i wymianą bikwadratową	163
4.1.	Wprowadzenie	163
4.2.	Funkcje termodynamiczne układu w przybliżeniu pola samouzgodnionego	165
4.3.	Model oddziaływań oraz samouzgodniony układ równań	168
4.4.	Wyniki analizy numerycznej i ich dyskusja	176

4.5. Przybliżenie faz przypadkowych	184
4.5.1. Podukład sieciowy	184
4.5.2. Podukład magnetyczny	187
5. Podsumowanie. Uwagi końcowe	209
DODATEK A	218
6. Spis literatury	230

1. Wstęp

Mikroskopowa teoria zjawisk fizycznych w kryształach ze zlokalizowanymi momentami magnetycznymi jest formułowana w oparciu o modele Isinga [1, 10], Heisenberga [1-3, 6, 9-20] lub ich uogólnienia [2, 3, 6, 9, 21-30].

Zazwyczaj modele te opisują układ oddziaływujących spinów (momentów magnetycznych) zajmujących nieruchome położenia w węzłach sieci kryształu [1-30]. Będziemy je dalej nazywali nieściśliwymi modelami spinowymi (NMS).

Ruch cieplny atomów modyfikuje charakter oddziaływań w kryształach. NMS można w znacznym stopniu urealnić przyjmując następujące założenia [2, 29, 31]:

- (1) Atomy o efektywnym spinie S wykonują drgania cieplne wokół położenia równowagi.
- (2) Energie oddziaływań, istotnych z uwagi na własności magnetyczne układu, zależą od chwilowych odległości między atomami.

Układ oddziaływujących spinów, w którym uwzględnia się powyższe założenia będziemy nazywali ściśliwym modelem spinowym (ŚMS). Hamiltonian ŚMS można, w przybliżeniu adiabatycznym [2], zapisać w najogólniejszej postaci następująco:

$$\mathcal{H}_{\text{ŚMS}} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{\text{NMS}} + \mathcal{H}_{L-S} \quad (1.1)$$

gdzie $\mathcal{H}_L$ i $\mathcal{H}_{HMS}$ są odpowiednio hamiltonianami podukładu sieciowego (atomy biorą udział w ruchu cieplnym) oraz magnetycznego (układ oddziaływujących spinów w sztywnej sieci).

Hamiltonian oddziaływania spinowo-fononowego $\mathcal{H}_{L-S}$ otrzymujemy przez rozwinięcie w szereg Taylora, względem wychyleń atomów z położeń równowagi, następujących (w zależności od modelu) wielkości:

- energii (całki) wymiany [2, 15, 17-19, 31-87];
- energii pola krystalicznego Van Vlecka [15, 22, 88-91];
- energii oddziaływania dipolowego [19, 92]

W przeszłości obszernie dyskutowano nad wpływem oddziaływania spinowo-fononowego między innymi na: energie wzbudzeń elementarnych oraz ich tłumienie [2, 12, 15, 19, 31, 34, 46, 52, 63, 64, 68-85, 86], rodzaj przemiany fazowej oraz indeksy krytyczne [32-3, 36, 38, 43, 52, 53, 59-62, 65-68, 93-99], współczynniki: rozszerzalności cieplnej [31, 53, 64] i pochłanianie dźwięku [31, 34, 39-41, 44, 56, 70, 76], temperaturę magnetycznej przemiany fazowej oraz namagnesowanie [31, 35, 42, 46, 52], przewodnictwo cieplne [19, 41] i ciepło właściwe [31, 32, 33, 52], stałe sprężyste [38, 45, 47, 55, 72, 93, 96].

W większości z dotychczas przytoczonych prac, drgania sieci rozpatrywano w przybliżeniu harmonicznym, a w $\mathcal{H}_{L-S}$ uwzględniano człony najniższego rzędu w operatorach fononowych. Mikroskopową teorię oddziaływania spinowo-fononowego w silnie anharmonicznych kryształach, których własności magne-

tyczne opisuje model Heisenberga, sformułowali i rozwinęli Tjablikov, Konwent i Płakida [77-87]. Oparta jest ona na założeniach (1) i (2). Człony w H_{L-S} są wynikiem uwzględnienia zależności całki wymiany od chwilowych odległości między atomami. W ramach tej teorii, w odróżnieniu od innych podejść, uwzględnia się wszystkie wyrazy rozwinięcia w szereg Taylora - względem wychyleń atomów z położenia równowagi - energii potencjalnej oraz energii wymiany.

Teoria Konwenta-Płakidy przyjmuje stosunkowo prostą i zamkniętą postać w ramach przybliżenia pola samouzgodnionego [2, 81, 84, 86]. W tym sformułowaniu teorii można z jednolitego punktu widzenia zbadać własności cieplne, magnetyczne oraz mechaniczne SMS-go [84, 86]. Ogólne wyniki teorii pola samouzgodnionego stały się podstawą do dalszych badań, opartych na wybranych zależnościach całki wymiany oraz energii potencjalnej od odległości między atomami [100-103].

Celem niniejszej pracy jest zbadanie własności termodynamicznych ściśleliwych modeli spinowych silnie anharmonicznego kryształu magnetycznego. Szczególną uwagę zwrócimy przy tym na ilościowe zbadanie efektów oddziaływania spinowo-fononowego w dynamice sieci oraz w pewnych charakterystykach termodynamicznych rozpatrywanych układów.

Nasze rozważania przeprowadzimy w głównej mierze w ramach teorii pola samouzgodnionego [2, 84, 86], która jest równoważna przybliżeniu pseudoharmonicznemu oraz przybliżeniu pola molekularnego dla podukładów, odpowiednio, fononowego i magnetycznego.

Zajmiemy się przypadkiem silnego sprzężenia spinowo-fononowego $0.1 \leq k_B T_c^0 / D_0 \leq 1$, gdzie T_c^0 jest temperaturą Curie magnetycznej przemiany fazowej NMS-go, a D_0 - energią niemagnetycznego oddziaływania atomów.

Nasze rozważania przeprowadzimy dla układów, w których energia potencjalna oraz całka wymiany są określone odpowiednio przez: potencjał Morse'a

$$\varphi(r) = D_0 \{ \exp[-2a(r-r_0)] - 2 \exp[-a(r-r_0)] \} \quad (1.2)$$

oraz funkcję wykładniczą

$$J(r) = J_0 \exp[-b(r-R_0)] \quad (1.3)$$

gdzie D_0 , a , r_0 , I_0 , b i R_0 są parametrami modelu.

Potencjał Morse'a (1.2) był stosowany w obliczeniach własności fizycznych modeli anharmonicznych kryształów [81, 104-111]. W przypadku $ar_0 = 6$ daje on wyniki podobne do rezultatów otrzymanych przy pomocy potencjału Lennarda-Jones'a [105].

Wyliczenie zależności całki wymiany od odległości, w oparciu o metody ab initio, związane jest z wielkimi trudnościami, a wyniki nie są jednoznaczne [1, 9, 112-114]. Dlatego w naszych obliczeniach przyjęliśmy zależność całki

wymiany $J(r)$ od odległości międzyatomowych w postaci (1.2), która jakościowo poprawnie opisuje sytuację doświadczalną [10, 29, 81, 115].

W oparciu o wybrane postacie oddziaływań (1.2) i (1.3) zbadamy termodynamiczne własności następujących układów:

- 1) modelu Isinga z polem poprzecznym, rozdział II [100];
- 2) modelu Heisenberga o dowolnym spinie, rozdział III [101, 102];
- 3) modelu Heisenberga ze spinem $S = 1$ i wymianą bikwadratową, rozdział IV [103].

W rozdziale IV-tym sformułujemy także zamknięty układ równań opisujący własności SMS Heisenberga ze spinem $S = 1$ w przybliżeniu przypadkowych faz (RPA).

Ostatni rozdział pracy zawiera końcowe wnioski oraz uwagi.

Pracę zamyka spis cytowanej literatury.

2. Model Isinga z polem poprzecznym w ściśliwej sieci w przybliżeniu pola samouzgodnionego.

2.1. Wprowadzenie.

W ostatnich latach model Isinga z polem poprzecznym (IMTF) [24] był przedmiotem intensywnych badań [23-26, 116-129]. Obszerną dyskusję jego własności oraz zastosowań można znaleźć w monografiach [23, 25, 26] oraz w pracach [24, 116].

Ściśliwy model Isinga z polem poprzecznym w sieci harmo-
nicznej i słabo anharmonicznej rozpatrzono w [25, 119-129].

W dotychczasowych pracach sprzężenie między układem sie-
ciowym i spinowym badano w oparciu o hamiltonian oddziaływania
liniowy w operatorach spinowych [25, 119-129].

W tej części pracy [100] rozpatrzmy ściśliwy model Isinga
z polem poprzecznym w silnie anharmonicznej sieci, którego
hamiltonian przyjmujemy w następującej postaci:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{L-S} \quad , \quad (2.1.1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_L &= \sum_{n,x} \frac{(P_n^x)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \varphi(|\bar{R}_n - \bar{R}_m|) = \\ &= \sum_{n,x} \frac{(P_n^x)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{1,\dots,l} \varphi_{n-m}^{1,\dots,l} \bar{u}_1 \dots \bar{u}_l \quad , \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

$$\mathcal{H}_{L-S} = -\Omega_0 \sum_n S_n^x - \frac{1}{2} \sum_{n,m} J(|\bar{R}_n - \bar{R}_m|) S_n^z S_m^z =$$

$$= - \Omega_0 \sum_n S_n^x - \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{l_1 \dots l_l} J_{n-m}^{l_1 \dots l_l} S_n^z S_m^z \bar{u}_1 \dots \bar{u}_l, \quad (2.1.3)$$

gdzie $\bar{P}_n$ i $\bar{R}_n$ są, odpowiednio, pędem i wektorem położenia atomu o spinie $S = 1/2$ i masie M w n -tym węźle sieci; Ω_0 jest całką tunelowania, co do której zakładamy, że jest wielkością stałą. W hamiltonianie układu (2.1.2-3) wprowadzono zmienne dynamiczne $\bar{u}_n$ określające wychylenia atomów z ich położen równowagi $\langle \bar{R}_n \rangle = \bar{n}$ [84]

$$\bar{u}_n = \bar{R}_n - \langle \bar{R}_n \rangle = \bar{R}_n - \bar{x}_n = \bar{R}_n - \bar{n}, \quad (2.1.4)$$

gdzie

$$\langle \dots \rangle = \text{Tr}[\dots \exp(-\beta \mathcal{H})] / \text{Tr}[\exp(-\beta \mathcal{H})], \quad \beta = (k_B T)^{-1}.$$

Występujące w (2.1.2-3) wielkości $\varphi_{n-m}^{1 \dots l}$ oraz $J_{n-m}^{1 \dots l}$ są równe

$$\varphi_{n-m}^{1 \dots l} = \prod_{i=1}^l (\delta_{in} - \delta_{im}) \nabla_{nm}^{\alpha_1} \dots \nabla_{nm}^{\alpha_l} \varphi(|\bar{n} - \bar{m}|), \quad (2.1.5)$$

$$J_{n-m}^{1 \dots l} = \prod_{i=1}^l (\delta_{in} - \delta_{im}) \nabla_{nm}^{\alpha_1} \dots \nabla_{nm}^{\alpha_l} J(|\bar{n} - \bar{m}|), \quad (2.1.6)$$

gdzie

$$\nabla_{nm}^{\alpha_i} = \frac{\partial}{\partial (x_n - x_m)^{\alpha_i}}.$$

W odróżnieniu od dotychczasowych prac [25, 119-129], zajmemy się zbadaniem wpływu na własności termodynamiczne badanego układu, zależności całki wymiany od chwilowych odległości między atomami.

2.2. Potencjały termodynamiczne.

Termodynamiczne własności modelu (2.1.1-3) zbadamy stosując metodę wariacyjną, którą dla anharmonicznego kryształu magnetycznego sformułowali Boccara [130], Płakida i Konwent [2, 84].

Próbna energia swobodna układu F_{trial} jest określona następująco :

$$F_{trial} = F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (2.2.1)$$

gdzie

$$F_0 = -k_B T \ln \{ \text{Tr} [\exp(-\mathcal{H}_0 / k_B T)] \}. \quad (2.2.2)$$

Hamiltonian efektywny $\mathcal{H}_0$ wybieramy w postaci sumy hamiltonianu spinowego $\mathcal{H}_0^S$ oraz fononowego $\mathcal{H}_0^L$ [84]

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0^S + \mathcal{H}_0^L, \quad (2.2.3)$$

gdzie

$$\mathcal{H}_0^S = -\tilde{\Omega}_0 \sum_n S_n^x - \sum_n \tilde{K}_n S_n^z, \quad (2.2.4)$$

$$\mathcal{H}_0^L = \sum_{n,\alpha} \frac{(P_n^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,\alpha \\ m,\beta}} \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n,m) U_n^\alpha U_m^\beta. \quad (2.2.5)$$

Wprowadzamy próbną macierz dynamiczną układu [84]:

$$D_{\alpha\beta}(\bar{q}) = \frac{1}{M} \sum_m \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n,m) \exp[-i\bar{q}(\bar{n}-\bar{m})]. \quad (2.2.6)$$

Wartości własne $\Omega(\bar{q}j)$ oraz wektory własne $\bar{e}(\bar{q}j)$ są rozwiązaniami równania

$$\Omega^2(\bar{q}j) \bar{e}_\alpha(\bar{q}j) = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\bar{q}) \bar{e}_\beta(\bar{q}j). \quad (2.2.7)$$

Wektory polaryzacji spełniają następujące warunki ortogonalności i zupełności;

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha}^{*}(\bar{q}j) e_{\alpha}(\bar{q}j') = \delta_{jj'} \quad , \quad (2.2.8)$$

$$\sum_j e_{\alpha}^{*}(\bar{q}j) e_{\beta}(\bar{q}j) = \delta_{\alpha\beta} \quad , \quad (2.2.9)$$

oraz

$$e_{\alpha}^{*}(\bar{q}j) = e_{\alpha}(-\bar{q}j) \quad . \quad (2.2.10)$$

Z uwagi na postać hamiltonianu próbnego $\mathcal{H}_0$ (2.2.3-5), korzystając z (2.2.6-10), otrzymujemy

$$\begin{aligned} F_{\text{trial}} = & k_B T \left\{ \sum_{\bar{q}j} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2 k_B T} \right) \right] \right. \\ & \left. - \sum_n \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mathcal{H}_n^*}{2 k_B T} \right) \right] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \left[\tilde{\varphi}(|\bar{n}-\bar{m}|) - \tilde{J}(|\bar{n}-\bar{m}|) \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_m^z \rangle_0 \right] \quad (2.2.11) \\ & - \Omega_0 \sum_n \langle S_n^x \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,\alpha \\ m,\beta}} \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n,m) \langle u_n^{\alpha} u_m^{\beta} \rangle_0 \\ & + \tilde{\Omega}_0 \sum_n \langle S_n^x \rangle_0 + \sum_n \tilde{K}_n \langle S_n^z \rangle_0 \quad , \end{aligned}$$

gdzie

$$\tilde{\mathcal{H}}_n^* = \sqrt{(\tilde{\Omega}_0)^2 + (\tilde{K}_n)^2} \quad , \quad (2.2.12)$$

$$\tilde{\varphi}(|\bar{n}-\bar{m}|) = \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\langle(u_n^\alpha-u_m^\alpha)(u_n^\beta-u_m^\beta)\rangle_0 \nabla_n^\alpha \nabla_n^\beta\right\} \varphi(|n-m|) \quad , \quad (2.2.13)$$

$$\tilde{J}(|\bar{n}-\bar{m}|) = \exp\left\{\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\langle(u_n^\alpha-u_m^\alpha)(u_n^\beta-u_m^\beta)\rangle_0 \nabla_n^\alpha \nabla_m^\beta\right\} J(|n-m|) \quad . \quad (2.2.14)$$

Wielkości $\langle u_n^\alpha u_m^\beta \rangle_0$, $\tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n,m)$, $\tilde{K}_n$, $\tilde{\Omega}_0$, $\langle S_n^x \rangle_0$, $\langle S_n^z \rangle_0$ oraz $X_n^\alpha = n^\alpha$ są parametrami wariacyjnymi, które wyznaczamy z warunków stacjonarności F_{trial}

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_{trial}}{\delta \langle u_n^\alpha u_m^\beta \rangle_0} &= \frac{\delta F_{trial}}{\delta \tilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n,m)} = \frac{\delta F_{trial}}{\delta \tilde{K}_n} = \frac{\delta F_{trial}}{\delta \tilde{\Omega}_0} = \\ &= \frac{\delta F_{trial}}{\delta \langle S_n^x \rangle_0} = \frac{\delta F_{trial}}{\delta \langle S_n^z \rangle_0} = \frac{\delta F_{trial}}{\delta X_n^\alpha} \quad . \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

Biorąc pod uwagę (2.2.11) oraz (2.2.15), otrzymujemy :

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\beta}(n,m) &= \delta_{nm} \sum_l \{ \nabla_n^\alpha \nabla_n^\beta \tilde{\varphi}(|\bar{n}-\bar{l}|) \\ &\quad - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_l^z \rangle_0 \nabla_n^\alpha \nabla_n^\beta \tilde{J}(|\bar{n}-\bar{l}|) \} \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

$$- \{ \nabla_n^\alpha \nabla_n^\beta \tilde{\varphi}(|\bar{n}-\bar{m}|) - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_m^z \rangle_0 \nabla_n^\alpha \nabla_n^\beta \tilde{J}(|\bar{n}-\bar{m}|) \} ,$$

$$\langle u_n^\alpha u_m^\beta \rangle_0 = \frac{1}{2MN} \sum_{\bar{q}j} \Omega^{-1}(\bar{q}j) \coth\left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2k_B T}\right) e_\alpha^*(\bar{q}j) e_\beta(\bar{q}j) e^{i\bar{q}(\bar{n}-\bar{m})} , \quad (2.2.17)$$

$$\langle S_n^z \rangle_0 = \frac{\tilde{K}_n}{2 \tilde{\mathcal{H}}_n^*} \tanh\left(\frac{\tilde{\mathcal{H}}_n^*}{2k_B T}\right) , \quad (2.2.18)$$

$$\langle S_n^x \rangle_0 = \frac{\tilde{\Omega}_0}{2 \tilde{\mathcal{H}}_n^*} \tanh\left(\frac{\tilde{\mathcal{H}}_n^*}{2k_B T}\right) , \quad (2.2.19)$$

$$\tilde{K}_n = \sum_m \tilde{J}(|\bar{n}-\bar{m}|) \langle S_m^z \rangle_0 , \quad (2.2.20)$$

$$\tilde{\Omega}_0 = \Omega_0 . \quad (2.2.21)$$

Ostatni warunek wariacyjny w (2.2.15), w przypadku przyłożenia do układu o objętości V izotropowego ciśnienia zewnętrznego Π , prowadzi do równania stanu, które ma postać [81,84]:

$$\begin{aligned} \Pi = & -\frac{1}{6V} \sum_{n,\alpha} (n^\alpha - m^\alpha) \left\{ \frac{\partial}{\partial n^\alpha} \tilde{\varphi}(|\bar{n} - \bar{m}|) \right. \\ & \left. - \langle S_n^z \rangle \langle S_m^z \rangle \frac{\partial}{\partial n^\alpha} \tilde{J}(|\bar{n} - \bar{m}|) \right\}. \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

Wyrażenia (2.2.7), (2.2.16-22) tworzą zamknięty układ równań samouzgodnionych [100].

Znajomość $\langle S^z \rangle$, częstości wzbudzeń fononowych $\Omega(\bar{q}j)$, funkcji korelacji $\langle u_n^\alpha u_m^\beta \rangle_0$ oraz równowagowej odległości między atomami $\bar{X}_n$ jako funkcji temperatury i ciśnienia pozwoli nam zbadać zachowanie się takich potencjałów termodynamicznych układu, jak entalpia $\tilde{W}$

$$\tilde{W} = \tilde{E} + \Pi V/N \quad (2.2.23)$$

oraz energia swobodna Gibbsa $\tilde{F}_G$

$$\tilde{F}_G = \tilde{F} + \Pi V/N, \quad (2.2.24)$$

gdzie $\tilde{E}$ i $\tilde{F}$ oznaczają odpowiednio energię wewnętrzną i energię swobodną przypadającą na jedną cząstkę, które są równe :

$$\begin{aligned} \tilde{E} = \langle \mathcal{H} \rangle_0 / N = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \frac{\Omega(\bar{q}j)}{4} \coth\left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2k_B T}\right) \\ - \Omega_0 \langle S_0^x \rangle_0 + \frac{1}{2} \sum_n \left(\tilde{\varphi}(n) - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_0^z \rangle_0 \tilde{J}(n) \right), \end{aligned} \quad (2.2.25)$$

$$\begin{aligned} \tilde{F} = \frac{k_B T}{N} \left\{ \sum_{\bar{q}j} \left[\ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2k_B T} \right) \right] - \frac{\Omega(\bar{q}j)}{4} \coth \left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2k_B T} \right) \right] \right\} \\ - \frac{k_B T}{N} \sum_n \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mathcal{H}_n^*}{2k_B T} \right) \right] \quad (2.2.26) \\ + \frac{1}{2} \sum_n \left\{ \tilde{\varphi}(n) + \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_0^z \rangle_0 \tilde{J}(n) \right\}. \end{aligned}$$

2.3. Samouzgodniony układ równań dla modelowych oddziaływań.

Sformułowany poprzednio (patrz paragraf 2.2 równania (2.2.7), (2.2.16-22)) układ równań rozpatrzmy szczegółowo dla kryształu o sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej, z oddziaływaniem najbliższych sąsiadów. Przyjmujemy, że całka wymiany J maleje wykładniczo wraz z odległością [10, 81]

$$J(r) = J_0 \exp[-b(r-R_0)] \quad , \quad (2.3.1)$$

a energię potencjalną oddziaływania niemagnetycznego wybieramy w postaci potencjału Morse'a [81]

$$\varphi(r) = D_0 \{ \exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r-r_0)] \}, \quad (2.3.2)$$

gdzie r_0 jest odległością między najbliższymi atomami w

przybliżeniu harmonicznym:

$\frac{d\tilde{\varphi}(r)}{dr}\bigg|_{r=r_0} = 0$. Stosując w obliczeniach przybliżenie członów wiodących [104]

$$\nabla_{l_1}^{\alpha_1} \dots \nabla_{l_{2n}}^{\alpha_{2n}} \varphi(l) = \frac{l_{\alpha_1} l_{\alpha_2}}{l^2} \dots \frac{l_{\alpha_{2n-1}} l_{\alpha_{2n}}}{l^2} \frac{d^{2n}}{d l^{2n}} \varphi(l) \quad (2.3.3)$$

oraz korzystając z własności symetrii układu, otrzymujemy [81]

$$\left. \frac{\tilde{\varphi}(l)}{J(l)} \right\} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 R e^{-R^2/2} \left\{ \frac{\varphi(\bar{l} + \bar{R} \sqrt{y_1})}{J(\bar{l} + \bar{R} \sqrt{y_1})} \right\} =$$

$$= \begin{cases} D_0 \{ \exp[2(y - a(l - r_0))] - 2 \exp[y/2 - a(l - r_0)] \}, & (2.3.4) \\ I_0 \exp\left[\frac{b^2}{2a^2} y - b(l - R_0)\right], & (2.3.5) \end{cases}$$

gdzie $l = |\bar{l}|$ jest odległością między najbliższymi sąsiadami,

$y = \alpha^2 y_1$, a y_1 jest równe:

$$y_1 = \frac{1}{l^2} \left\langle \left[\bar{l} (\bar{u}_l - \bar{u}_0) \right]^2 \right\rangle_0 =$$

$$\frac{1}{M N l^2} \sum_{\bar{q}j} \frac{(\bar{l} \cdot \bar{e}(\bar{q}j))^2}{\Omega(\bar{q}j)} \coth\left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2k_B T}\right) (1 - e^{-i\bar{q}\bar{l}}) \quad (2.3.6)$$

Występujące w powyższych wyrażeniach wielkości D_0 , I_0 , R_0 , a i b są parametrami modelu.

Jeżeli skorzystamy z przybliżenia Debey'a

$$\frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} f[\Omega(\bar{q}j)] = 3 \int_0^{\Omega_D} f(\Omega) \frac{3\Omega^2}{\Omega_D^3} d\Omega, \quad (2.3.7)$$

gdzie $\Omega_D = 1.05 \sqrt{16 D_0 \alpha^2 / M}$,

to układ równań (2.2.16-22) przyjmie następującą postać [100]:

$$\Delta^2 \cdot y - \frac{3}{32} \cdot \Delta \cdot Q - \frac{1}{4} T_0 \cdot W \cdot Q \cdot F_D \left[\frac{\Delta}{W \cdot T_0} \right] = 0, \quad (2.3.8)$$

$$\sqrt{\sigma^2 + (\Gamma^*)^2} - \tanh \left[\frac{\sqrt{\sigma^2 + (\Gamma^*)^2}}{\Gamma^*} \right] = 0, \quad (2.3.9)$$

$$\begin{aligned} & \Pi_1 \cdot x^2 - \exp\{2[y - A(x-1)]\} + \exp[y/2 - A(x-1)] + \\ & + \frac{B}{24A} \cdot W \cdot Q \cdot \sigma^2 \cdot \exp\left[\left(\frac{B}{A}\right)^2 y/2 - B(x-1)\right] = 0, \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

gdzie wielkość Δ , opisująca stosunek częstości drgań sieci $\Omega(\bar{q}j)$ magnetycznego kryształu anharmonicznego do częstości drgań $\Omega_0(\bar{q}j)$ tego kryształu w przybliżeniu harmonicznym - bez uwzględnienia oddziaływania spinowo-fononowego - wyraża się wzorem [81]

$$\begin{aligned} \Delta^2 = & 2 \exp\{2[y - A(x-1)]\} - \exp[y/2 - A(x-1)] - \\ & - \frac{1}{24} \left(\frac{B}{A}\right)^2 \cdot W \cdot Q \cdot \sigma^2 \cdot \exp\left[\left(\frac{B}{A}\right)^2 y/2 - B(x-1)\right]. \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

W równaniach (2.3.8-11) wprowadziliśmy bezwymiarowe zmienne: $x = \ell/r_0$, $\sigma = 2\langle S^z \rangle$, $A = a r_0$, $B = b r_0$ (przyjęto $R = r_0$), $T_0 = T/T_c^0$ ($T_c^0 = 3J_0$), $W = T_c^0/T_D$, $Q = T_D/D_0$, $\Gamma_0 = \Omega/6J_0$, $\Pi_1 = \Pi r_0^2 / (4\sqrt{2} D_0 a) = \Pi r_0^3 / (4\sqrt{2} D_0 A)$, $\Gamma^* = \Gamma_0 \exp[B(x-1) - \frac{1}{2}(\frac{B}{A})^2 y]$, $T^* = T_0 \exp[B(x-1) - \frac{1}{2}(\frac{B}{A})^2 y]$;

$F_D(x)$ jest funkcją Debey'a, T_c^0 temperaturą przejścia fazowego w układzie magnetycznym w nieściśliwej sieci, a T_D temperaturą Debey'a.

Zastosowano układ jednostek $\hbar = k_B = 1$.

Energia swobodna Gibbsa i entalpia są równe :

$$\begin{aligned} \widetilde{F}_G = & \frac{g}{8} \cdot \frac{\Delta}{W} + T_0 \left\{ 3 \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\Delta}{W \cdot T_0} \right) \right] \right. \\ & - F_D \left(\frac{\Delta}{W \cdot T_0} \right) \left. \right\} - \frac{Z_{nn}}{2} \cdot \frac{\Delta^2 \cdot y}{W \cdot Q} + \\ & + \frac{Z_{nn}}{2} \left\{ \frac{1}{W \cdot Q} \left[\exp \left[2(y - A(x-1)) \right] - 2 \exp \left[y/2 - A(x-1) \right] \right] \right. \\ & + \frac{\sigma^2}{12} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y - B(x-1) \right] \left. \right\} - \\ & - T_0 \ln \left\{ 2 \cosh \left[\frac{Z_{nn}}{12 T^*} \sqrt{\sigma^2 + (\Gamma^*)^2} \right] \right\} \\ & + 4 \pi_1 \cdot A \cdot x^3 / W \cdot Q , \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{W} = & \frac{Z_{nn}}{2} \cdot \frac{\Delta^2 \cdot y}{W \cdot Q} + \frac{Z_{nn}}{2} \left\{ \frac{1}{W \cdot Q} \left[\exp[2(y - A(x-1))] - \right. \right. \\ & \left. \left. - 2 \exp[y/2 - A(x-1)] \right] - \frac{\sigma^2}{12} \exp\left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right] \right\} \\ & - \Gamma_0^2 \exp\left[B(x-1) - \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 y\right] \frac{\tanh\left(\frac{Z_{nn}}{12 T^*} \sqrt{\sigma^2 + (\Gamma^*)^2}\right)}{\sqrt{\sigma^2 + (\Gamma^*)^2}} \\ & + 4 \pi_1 \cdot A \cdot x^3 / W \cdot Q, \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

gdzie $Z_{nn} = 12$ jest liczbą najbliższych sąsiadów.

Entropię układu $\widetilde{S}$ wyznaczmy wykorzystując tożsamość termodynamiczną [10] $S = -(\partial \Phi_G / \partial T)_{\pi}$,

$$S = (W - \Phi_G) / T, \quad \text{na mocy}$$

których

$$\widetilde{S} = \frac{S}{N} = - \left(\frac{\partial (\Phi_G / N T_c^0)}{\partial (T / T_c^0)} \right)_{\pi_1} = \frac{\widetilde{W} - \widetilde{F}_G}{T / T_c^0} \quad (2.3.14)$$

Pojemność cieplną układu przy stałym ciśnieniu $\widetilde{C}_{\pi_1}$ można wyznaczyć na dwa sposoby, wykorzystując odpowiednie tożsamości termodynamiczne [10]. Ostateczne formuły są następujące:

$$\tilde{C}_{\pi_1} = T_0 \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T_0} \right)_{\pi_1} = \left(\frac{\partial \tilde{W}}{\partial T_0} \right)_{\pi_1} . \quad (2.3.15)$$

2.4. Wyniki obliczeń numerycznych.

Wyrażenia (2.3.8-10) tworzą algebraiczny układ równań nieliniowych, który w tej części pracy rozwiążemy numerycznie, dla wybranych parametrów modelu [100].

Rozpatrzmy najpierw przypadek $\pi_1 = \sigma = 0$ (paramagnetyczny kryształ anharmoniczny).

Wtedy badany układ równań redukuje się do równania samouzgodnienia (2.3.8)

$$\Delta_0^2 \cdot y - \frac{3}{32} \Delta_0 \cdot Q - \frac{1}{4} T_0 \cdot W \cdot Q \cdot F_D \left(\frac{\Delta_0}{W \cdot T_0} \right) = 0, \quad (2.4.1)$$

gdzie Δ_0 oznacza wartość Δ (patrz równanie (2.3.11)) przy $\sigma=0$ i

$$\Delta_0 = \exp[-y/2] . \quad (2.4.2)$$

Z uwagi na to, że $\pi_1=0$ zredukowana odległość między najbliższymi atomami χ wyraża się przez y (z równania (2.3.10)) i wynosi

$$\chi = 1 + 1.5 y / A . \quad (2.4.3)$$

Równanie (2.4.1) rozwiązywano numerycznie [132] dla różnych wartości parametru $Q = T_D / D_0$ (patrz rys. 1A), w szerokim zakresie temperatury zredukowanej T/T_D . Otrzymane wykresy dla y można zinterpretować analitycznie w przypadkach granicznych:

1° Dla $T \ll T_D$, $F_D(\Delta_0 T_D/T) \approx 0$, a stąd $\gamma \approx 0.094 \cdot Q$ co odpowiada wartościom linii poziomych w lewej części rysunku 1A

2° Dla $T \gg T_D$ wyrażenie (2.4.1) można przybliżyć równaniem

$$\exp(\gamma) \approx 4 \cdot T_D \cdot \gamma / T \cdot Q \quad (2.4.4)$$

Z równania tego wynika, że jeśli T/T_D rośnie, rosną również wartości γ , które są rozwiązaniami (2.4.4) (wykresy lewej i prawej strony tego równania przecinają się przy coraz większych wartościach γ , jeśli T/T_D rośnie) . Znajduje to swoje odzwierciedlenie w szybkim wzroście γ wraz z T/T_D (patrz rysunek 1A) .

Na przedstawionych wykresach (rys.1A) istnieją (przy $Q \ll 1$) obszary temperatur, w których $\ln \gamma$ jest liniową funkcją $\ln(T/T_D)$. Wskazuje to na potęgową zależność γ od T/T_D [100].

Na podstawie otrzymanych wyników dla γ , z uwagi na (2.4.3), można wyznaczyć zależność zredukowanej odległości między atomami $x = l/r_0$ od temperatury T/T_D .

Pełny układ równań (2.3.8-10) rozwiązano dla

$$A=1 \quad , \quad B=2 \quad , \quad (2.4.5)$$

przy pozostałych wartościach parametrów równych

$$W = T_c^0 / T_D = 5 \quad , \quad Q = T_D / D_0 = 0.1 \quad , \quad \Gamma_0 = \Omega / 6J_0 = 0.1 (0.7; 1.0) \quad (2.4.6)$$

W obliczeniach numerycznych, wartości zredukowanej temperatury T_0 oraz ciśnienia Π_1 zmieniano, odpowiednio, w przedziałach (0.1, 2.0) i (0, 0.6) .

Rysunki 1B oraz 2 przedstawiają rozwiązania układu
(2.3.8-10) przy podanych wartościach Π_1 .

Rezultaty wskazują na istotną zależność zredukowanej odległości między atomami $\chi = \ell/r_0$ od parametru porządku $\langle S^z \rangle$. W fazie uporządkowanej $\chi = \ell/r_0$ przyjmuje wartości mniejsze od wartości, jakie miałyby $\chi = \ell/r_0$, gdyby nie uwzględnić oddziaływania spinowo-fononowego. Wartości χ bez sprzężenia spinowo-fononowego otrzymamy, przedłużając linie proste z wykresów na rys.2 dla ℓ/r_0 przy $T^* > 1$, w obszar gdzie $T^* < 1$. W pobliżu punktu przejścia fazowego ($T^* \lesssim 1$), wartości $\chi = \ell/r_0$ rosną, osiągając swe wartości z fazy nieuporządkowanej w $T^* = 1$.

Wpływ $\langle S^z \rangle$ na $\chi = \ell/r_0$ najpełniej uwidacznia się na rys.3, gdzie przedstawiono zależność współczynnika rozszerzalności cieplnej układu

$$\alpha_{\Pi_1}^* = \frac{1}{\chi(T_1^*)} \frac{\chi(T_2^*) - \chi(T_1^*)}{T_2^* - T_1^*}$$

od temperatury przy podanych ciśnieniach Π_1 .

Wielkość $\alpha_{\Pi_1}^*$ doznaje skoku w punkcie przemiany fazowej ($T^* = 1$), przy czym wartość nieciągłości maleje wraz ze wzrostem ciśnienia Π_1 .

Rysunek 2 przedstawia również zależności $\sigma = 2\langle S^z \rangle$ od T^* , które dla wszystkich Π_1 mają taki sam przebieg. Jest to konsekwencją małej wartości parametru $\Gamma_0 = 0.1$.

W pracy [100] sformułowano przypuszczenie, że dla $\Gamma_0 \gg 0.5$ zależność σ od temperatury dla różnych π_1 powinny się różnić.

Rysunki 4a, 4b oraz 5a, 5b przedstawiają rozwiązania pełnego układu równań (2.3.8-10) dla odpowiednio $\Gamma_0 = 0.7$ i $\Gamma_0 = 1.0$ przy podanych wartościach π_1 .

Otrzymane zależności σ od temperatury potwierdzają sformułowaną w [100] sugestię.

Wartość temperatury przejścia fazowego T_c rośnie wraz ze wzrostem ciśnienia π_1 , tj. $\partial T_c / \partial \pi_1 > 0$ (porównaj rysunki 4 i 5). Jest to rezultatem zależności całki wymiany od x oraz y (patrz 2.3.5).

Zależności entalpii $\tilde{W}$, energii swobodnej Gibbsa $\tilde{F}_G$, entropii układu $\tilde{S}$ oraz pojemności cieplnej $\tilde{C}_{\pi_1}$ od temperatury dla różnych wartości Γ_0 i π_1 przedstawiono na rysunkach 6a-6c, 7a-b, 8a, 8b.

Przy obliczaniu, na podstawie (2.3.14-16), charakterystyk termodynamicznych układu, z uwagi na dyskretny zbiór wartości potencjałów termodynamicznych (2.3.12-13), stosowano odpowiednie wzory rachunku różnicowego [132]

$$\frac{\partial F(\dots, x, \dots)}{\partial x} \approx \frac{F(\dots, x+\Delta x, \dots) - F(\dots, x, \dots)}{\Delta x},$$

$$\frac{\partial^2 F(\dots, x, \dots)}{\partial x^2} \approx \frac{F(\dots, x+\Delta x, \dots) + F(\dots, x-\Delta x, \dots) - F(\dots, x, \dots)}{(\Delta x)^2},$$

gdzie $F(\dots, x, \dots)$ oznacza funkcję wielu zmiennych.

W kryształach anharmonicznych częstotliwości drgań sieci zależą od temperatury i zewnętrznego ciśnienia Π_1 przyłożonego do układu $[81, 10, 110]$.

Rysunki 9a + 9c przedstawiają zależność czynnika renormalizacji częstotliwości drgań Δ (paragraf 2.3, wyrażenie (2.3.11)) od T/T_c^0 przy podanych wartościach Π_1 oraz Γ_0 .

2.5. Dyskusja i wnioski.

Przy wybranych parametrach modelu (2.4.5-6) przejście fazowe w podukładzie magnetycznym jest przejściem drugiego rodzaju $[54]$ (patrz rys. 2, 4a, 5b, 7a, 7b)

Szerszą dyskusję tego zagadnienia przeprowadzimy w następnym rozdziale dla ściśliwego modelu Heisenberga ze spinem $S = 1/2$ (patrz Dodatek A).

Drgania sieci krystalicznej wpływają na własności podukładu spinowego. Analiza otrzymanych rezultatów pozwala stwierdzić, że temperatura Curie przemiany fazowej T_c oraz wartość parametru porządku σ ^{rosną} (maleją) wraz ze wzrostem funkcji korelacji y (zredukowanej odległości między atomami $x = l/r_0$).

Dla $\Pi_1 = 0.0$ temperatura T_c , ściśliwego modelu Isinga z polem poprzecznym, jest mniejsza od T_c^0 dla modelu sztywnego i $T_c \approx 0.9 T_c^0$ ($\Gamma_0 = 0.1$).

W ściśliwym modelu Isinga $[42, 54, 58, 68]$ charakter zmian T_c dla $\Pi_1 = 0.0$ zależy od zasięgu oddziaływania wymiennego. W zależności od tego, czy ma ono skończony, czy nieskończony

zasięg temperatura Curie T_c wzrasta [42,54,68] lub maleje [58] w porównaniu z T_c^0 .

Otrzymane wyniki dla $\Pi_1 = 0.0$ pozostają w zgodzie z istniejącymi oszacowaniami.

W rozpatrywanym modelu przejście fazowe zachodzi przy

$$T^* = 1.0 = (T_c / T_c^0) \exp[2(x_c - y_c - 1)], \text{ stąd}$$

$$T_c = T_c^0 \exp[2(y_c + 1 - x_c)] \quad , \quad (2.5.1)$$

i tym samym temperatura przemiany fazowej T_c w modelu ściślimy zależy od x oraz y , które są funkcjami temperatury oraz ciśnienia.

Z przeprowadzonych obliczeń numerycznych wynika, że dla

$$\Pi_1 \gtrsim 0.0 \quad , \quad (x_c - y_c) > 1.0 \quad , \text{ więc z uwagi na (2.5.1)} \\ T_c < T_c^0 \quad .$$

Nałożenie na układ zewnętrznego ciśnienia Π_1 powoduje istotne zmiany w wartościach zredukowanej odległości między atomami $x = l/r_0$ (płytki studnia potencjału Morse'a (2.4.5-6)) oraz nieznaczne zmiany wartości funkcji korelacji y (porównaj rysunki 4b, 5b). Istnieje więc taka wartość ciśnienia $\Pi_2 > 0$, dla której $(x_c - y_c) = 1.0$, to znaczy $T_c = T_c^0$. Dla $\Pi_1 > \Pi_2$ w punkcie przemiany fazowej $(x_c - y_c) > 1.0$ i stąd $T_c > T_c^0$ (patrz rysunki 4a i 5b).

Omówione zależności ilustruje jakościowo rys. 10A.

Temperatura T_c oraz wartość $\sigma_0 = \lim_{T \rightarrow 0} \sigma(T)$, zarówno w sztywnym [24,25], jak i w ściślimy modelu Isinga z polem poprzecznym, zależą od Γ_0 .

Jednakże w ściśliwym modelu faza uporządkowania może istnieć dla $\Gamma_0 \gg 1$, podczas gdy dla modelu sztywnego $T_c^0 = 0$, jeśli $\Gamma_0 \gg 1$ (rys.5). Jest to jakościowo nowy rezultat, będący efektem uwzględnienia ściśliwości sieci (patrz rys.10B). W fazie uporządkowanej zaznacza się wpływ parametru porządku na odległość między atomami $x = \ell/r_0$. W każdym ze zbadanych przypadków (rys.2, 4A, 5A), wartość x maleje o wielkość rzędu $(B/24A) \cdot N \cdot Q \cdot \sigma^2$, w porównaniu z wartością x bez uwzględnienia oddziaływania spinowo-fononowego.

Wpływ $\langle S^z \rangle$ na ℓ/r_0 jest najistotniejszy w pobliżu punktu przemiany fazowej i prowadzi do nieciągłości współczynnika rozszerzalności cieplnej układu.

Przedstawiono to na rysunku 10C.

W fazie uporządkowanej (dla ustalonej temperatury $T_0 = T/T_c < 1$), wartość częstości drgań sieci $\Omega_{\sigma \neq 0}$ anharmonicznego kryształu, są większe od częstości drgań Ω_0 bez uwzględnienia oddziaływania spinowo-fononowego (porównaj rysunki $g_a - g_c$).

Jest to dość zaskakujący rezultat, gdyż z uwagi na jawną zależność czynnika Δ od σ (patrz 2.3.11) należałoby oczekiwać zmniejszenia $\Omega_{\sigma \neq 0}$ [81].

W celu interpretacji otrzymanych wyników czynnik renormalizacji częstości drgań Ω przedstawimy w postaci

$$\Delta(T_0) = \sqrt{\Delta^{anh}(T_0) - \Delta^{sp-ph}(T_0)}, \quad (2.5.2)$$

gdzie

$$\Delta^{anh}(T_0) = 2 \exp[2(y - A(x-1))] - \exp[y/2 - A(x-1)], \quad (2.5.3)$$

$$\Delta^{sp-ph} = \frac{B}{24A} \cdot W \cdot Q \cdot \sigma^2(r) \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right]. \quad (2.5.4)$$

Do Δ^{anh} i Δ^{Sp-ph} najistotniejszy wkład wnoszą (będąc wzajemnie ze sobą związane), odpowiednio, anharmoniczność drgań sieci oraz oddziaływanie spinowo-fononowe.

Otrzymane rezultaty dla $\Delta(T_0)$ (patrz rysunki 9a - c) są konsekwencją tego, że przy zastosowanych wartościach parametrów (2.4.5-6), zależność Δ od T_0 określa w głównej mierze Δ^{anh} , będący uwikłaną funkcją oddziaływania spinowo-fononowego (przez zależność x oraz y od T_0 patrz rys. 1b, 2, 4a, 4b, 5a).

W następnym rozdziale pokażemy, że nierówność $\Omega_{\sigma \neq 0} < \Omega_0$ jest spełniona dla dostatecznie dużych wartości B/A (patrz paragrafy 3.6 i 3.7); istotny wkład do Δ wnosi wtedy Δ^{Sp-ph} .

Jawną postać zależności entropii $\tilde{S}$ (przypadającej na jedną cząstkę) od temperatury zredukowanej T_0 , wyznaczymy stosując odpowiednią tożsamość termodynamiczną

[10] (patrz (2.3.14)). Z uwagi na (2.3.12-14) otrzymujemy

$$\tilde{S}(T_0) = \tilde{S}^{(sp)}(T_0) + \tilde{S}^{(e)}(T_0), \quad (2.5.5)$$

gdzie wkłady pochodzące od podukładów spinowego oraz sieciowego $\tilde{S}^{(e)}(T_0)$ są równe :

$$\tilde{S}^{(sp)}(T_0) = \ln \{ 2 \cosh [E_2(T_0)] \} - \quad (2.5.6)$$

$$- \frac{1}{T_0} \left\{ \frac{Z_{nn} \Theta^2(T_0)}{24 E_1(T_0)} - \frac{\Gamma_0^2 E_1(T_0)}{E_3(T_0)} \tanh [E_2(T_0)] \right\} ,$$

$$\tilde{S}^{(u)}(T_0) = F_D \left[\frac{\Delta(T_0)}{W \cdot T_0} \right] - 3 \ln \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{\Delta(T_0)}{W \cdot T_0} \right] \right\} +$$

$$+ \frac{1}{T_0} \left[\frac{Z_{nn}}{W \cdot Q} \Delta^2(T_0) \cdot y(T_0) - \frac{g}{8} \frac{\Delta(T_0)}{W} \right] . \quad (2.5.7)$$

W (2.5.6-7) wprowadzono oznaczenia (patrz również paragraf 2.3):

$$E_1(T_0) = \exp \left[B \cdot (\chi - 1) - \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y \right] , \quad (2.58)$$

$$E_2(T_0) = \frac{Z_{nn}}{12 T^*} \sqrt{[\Gamma^*(T_0)]^2 + \sigma^2(T_0)} =$$

$$(2.59)$$

$$= \frac{Z_{nn}}{12 T^*} E_3(T_0) .$$

Zależność $\widetilde{S}$ od $T_0 = T$ jest funkcją ciągłą (przejście fazowe II-go rodzaju, patrz rysunki 2, 4a, 5a, 7a-b), którą oddziaływanie spinowo-fononowe oraz anharmoniczność drgań sieci modyfikują poprzez omówioną (patrz dyskusja po (2.5.2-4)) zależność czynnika Δ (2.3.11) od temperatury T_0 .

Biorąc pod uwagę (2.3.13) oraz (2.3.15) analityczne wyrażenie na $C_{\pi_1}(T_0)$ (pojemność cieplną układu przy stałym ciśnieniu przypadającą na jedną cząstkę) możemy napisać w postaci

$$C_{\pi_1}(T_0) = C_{\pi_1}^{(l)}(T_0) + C_{\pi_1}^{(sp)}(T_0) + C_{\pi_1}^{(reg)}(T_0) , \quad (2.5.10)$$

gdzie

$$C_{\pi_1}^{(\ell)}(T_0) = A_y(T_0) \frac{\partial y(\tau)}{\partial T_0} + A_x(T_0) \mathcal{L}_{\pi_1}^*(T_0), \quad (2.5.11)$$

$$C_{\pi_1}^{(sp)}(T_0) = A_\sigma(T_0) \sigma(T_0) \frac{\partial \sigma(T_0)}{\partial T_0}, \quad (2.5.12)$$

$$C_{\pi_1}^{(reg)}(T_0) = -\Gamma_0^2 \frac{E_1(T_0) E_2(T_0)}{T_0 E_3(T_0) \cosh^2[E_2(T_0)]}, \quad (2.5.13)$$

oraz

$$\begin{aligned} A_y(T_0) = & \frac{Z_{nn}}{2 \cdot W \cdot Q} \left\{ E_4(T_0) [4 y(T_0) + 2] - E_5(T_0) [y(T_0)/2 + 1] \right. \\ & \left. + \Delta^2(T_0) - \frac{y(T_0)}{48} \left(\frac{B}{A} \right)^2 \cdot W \cdot Q \cdot \sigma^2(T_0) / E_1(T_0) \right\} \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{2} \left(\frac{B \Gamma_0}{A} \right)^2 \frac{E_1(T_0)}{E_3(T_0)} \left(\frac{E_1^2(T_0) \Gamma_0^2}{E_3^2(T_0)} - 1 \right) \cdot \left\{ \frac{E_2(T_0)}{\cosh^2[E_2(T_0)]} \right. \\ & \left. - \tanh[E_2(T_0)] \right\} - \frac{Z_{nn}}{48} \left(\frac{B}{A} \right)^2 \sigma^2(T_0) / E_1(T_0), \end{aligned}$$

$$A_x(T_0) = \frac{A \cdot Z_{nn} \cdot x(T_0)}{2 \cdot W \cdot Q} \left\{ y(T_0) [E_5(T_0) - 4E_4(T_0)] \right. \\ \left. + 2[E_5(T_0) - E_4(T_0)] + \frac{B^3 \cdot W \cdot Q \cdot \sigma^2(T_0) y(T_0)}{24 \cdot A^3 \cdot E_1(T_0)} \right\} \quad (2.5.15)$$

$$+ \frac{Z_{nn} \cdot B \cdot \sigma^2(T_0)}{24 \cdot E_1(T_0)} x(T_0) + 12 \cdot \pi_1 \cdot A \cdot x^3(T_0) / W \cdot Q \\ + \frac{\Gamma_0^2 \cdot B \cdot E_1(T_0)}{E_3(T_0)} \left\{ \frac{E_2(T_0)}{\cosh[E_2(T_0)]} - \tanh[E_2(T_0)] \right\} \left\{ 1 - \frac{\Gamma_0^2 E_1^2(T_0)}{E_3(T_0)} \right\},$$

$$A_\sigma(T_0) = - \frac{Z_{nn}}{12 E_1(T_0)} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y(T_0) \right] \quad (2.5.16)$$

$$- \frac{\Gamma_0^2 \cdot E_1(T_0)}{E_3^3(T_0)} \left\{ \frac{E_2(T_0)}{\cosh^2[E_2(T_0)]} - \tanh[E_2(T_0)] \right\},$$

$$C_{\pi_1}^{(reg)}(T_0) = \frac{\Gamma_0^2 E_1(T_0) E_2(T_0)}{T_0 E_3(T_0) \cosh[E_2(T_0)]}, \quad (2.5.17)$$

$$E_4(T_0) = \exp \{ 2[y(T_0) - A \cdot (x(T_0) - 1)] \}, \quad (2.5.18)$$

$$E_5(T_0) = \exp \{ y(T_0)/2 - A \cdot [x(T_0) - 1] \}, \quad (2.5.19)$$

$$\alpha_{\pi_1}^{(l)}(T_0') = \frac{1}{x(T_0)} \frac{x(T_0') - x(T_0)}{T_0' - T_0} \quad . \quad (2.5.20)$$

W punkcie przemiany fazowej $C_{\pi_1}(T_0)$ zmienia się w sposób nieciągły (patrz rysunki 8a, 8b), a wartość skoku $\delta C_{\pi_1}(T_0)$ dla $T_0 = T_0^c$ jest równa

$$\delta C_{\pi_1}(T_0^c) = \delta_y(T_0^c) + \delta_x(T_0^c) + \delta_\theta(T_0^c), \quad (2.5.21)$$

gdzie

$$\delta_y(T_0^c) = A_y(T_0^c) \left\{ \lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^-} \left[\frac{\partial y}{\partial T_0} \right] - \lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^+} \left[\frac{\partial y}{\partial T_0} \right] \right\}, \quad (2.5.22)$$

$$\delta_x(T_0^c) = A_x(T_0^c) \left\{ \lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^-} \mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}(T_0) - \lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^+} \mathcal{L}_{\pi_1}^{(v)}(T_0) \right\}, \quad (2.5.23)$$

$$\delta_o(T_0^c) = A_o(T_0^c) \lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^-} \left[o(T_0) \frac{\partial o(T_0)}{\partial T_0} \right]. \quad (2.5.24)$$

Główny wkład do $C_{\pi_1}(T_0)$ i $\delta C_{\pi_1}(T_0)$, przy $T_0 \rightarrow T_0^c$, pochodzi od podukładu spinowego (człony $C_{\pi_1}^{(sp)}(T_0)$ i $\delta_o(T_0)$ odpowiednio w (2.5.10) i (2.5.21)).

Efekty oddziaływania spinowo-fononowego zaznaczają się w

$C_{\pi_1}(T_0)$, poprzez przedyskutowane wyżej zależności zredukowanej odległości między atomami $\chi = \ell/\gamma_o$, funkcji korelacji (2.3.6) wychyleń atomów z położenia równowagi $y = a^2 y_1$ (człony $C_{\pi_1}^{(v)}(T_0)$ w (2.5.10) oraz wyrazy $\delta_y(T_0^c)$, $\delta_x(T_0^c)$ w (2.5.21)) i częstości drgań anharmonicznej sieci (patrz 2.3.11), od temperatury.

Przeprowadzone oszacowania wielkości omawianych efektów (dla $\pi_1 = 0$), prowadzą do następującego wniosku:

uwzględnienie sprzężenia spinowo-fononowego daje poprawki do C_{π_1} , których wielkość nie przekracza 15 %.

Ponieważ wartości $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}(T_0)$ oraz $\delta_X(T_0)$ (patrz obszarna dyskusja w paragrafie 3.7) jak również $C_{\pi_1}^{(sp)}(T_0)$ oraz $\delta_G(T_0)$ (patrz (2.5.12) i (2.5.24)) dla $T_0 \rightarrow T_0^c$ określa wyrażenie

$$\lim_{T_0 \rightarrow (T_0^c)^-} \left[G(T_0) \frac{\partial G(T_0)}{\partial T_0} \right] = \mathcal{L}, \quad (2.5.25)$$

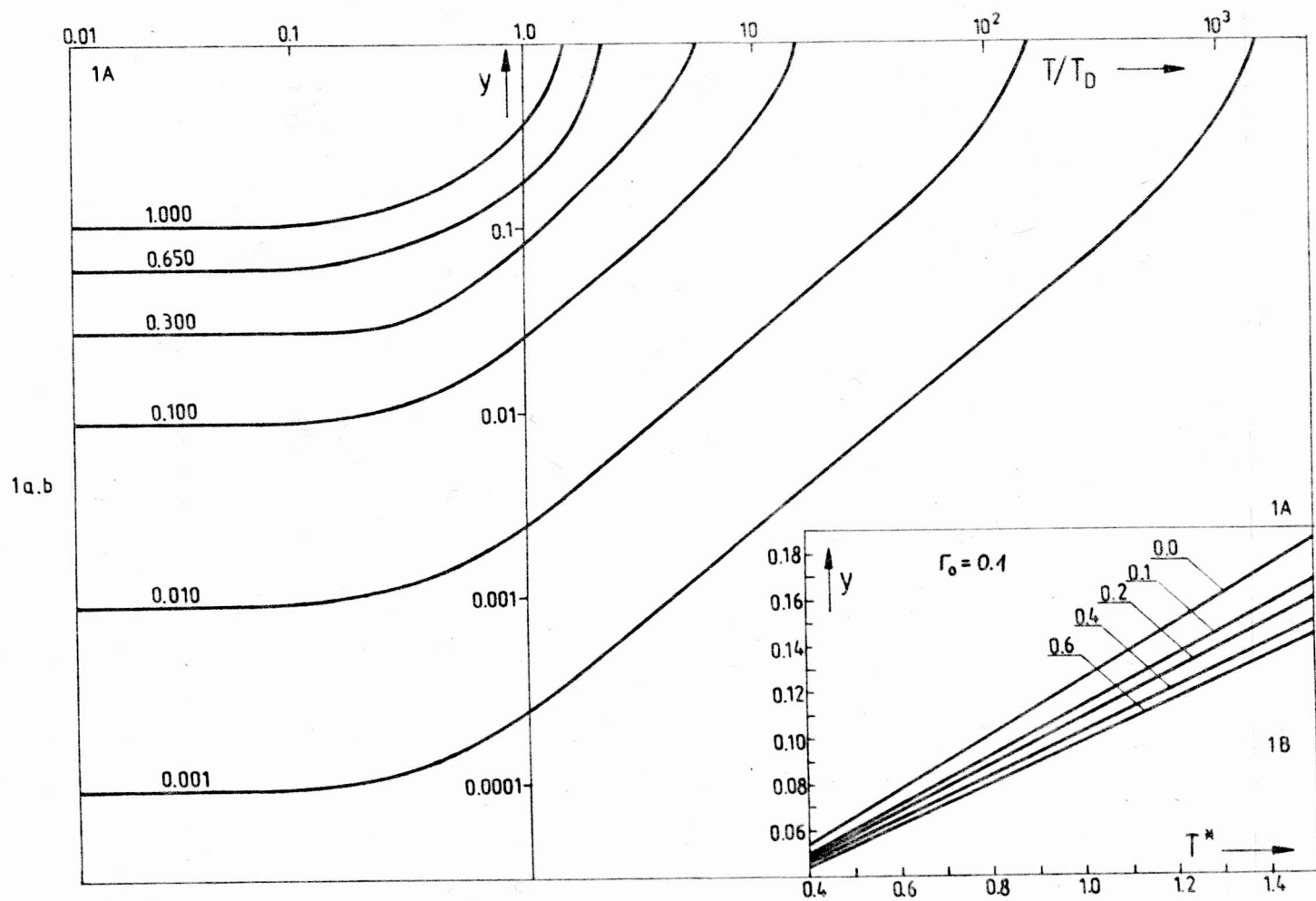
które, z uwagi na zastosowane przybliżenie, ma wartość skończoną ($\mathcal{L} < \infty$), więc również $\delta C_{\pi_1}(T_0^c) < \infty$ (patrz rys. 8a-b).

Otrzymane rezultaty można zastosować do opisu własności anharmonicznego kryształu ferromagnetycznego, w którym jony magnetyczne wykazują strukturę najniższych poziomów energetycznych typu singlet-singlet (singletowy stan podstawowy oraz singletowy pierwszy stan wzbudzony).

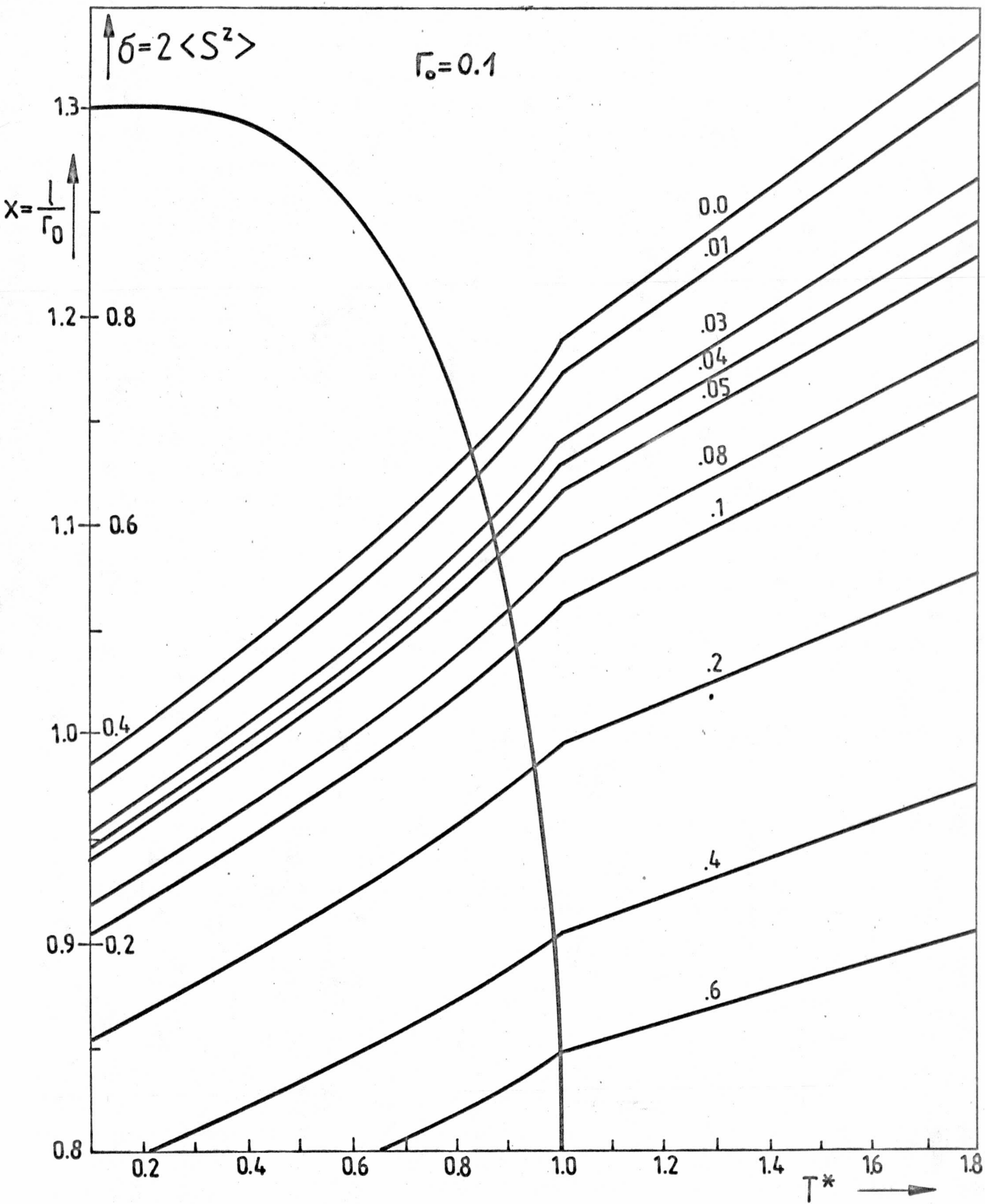
Układami tego rodzaju są związki pierwiastków ziem rzadkich z pierwiastkami V i VI grupy układu okresowego, które krystalizują w strukturze soli kuchennej (Stinchcombe [24], Kowalewski [128], Wang i Cooper [133]). Jak się wydaje ogólny formalizm przedstawiony w paragrafach 2.1 - 2.2 może być podstawą do dalszych badań efektów oddziaływania spinowo-fononowego w:

- ferromagnetykach z silną anizotropią jednoosiową umieszczonych w zewnętrznym polu magnetycznym [24],

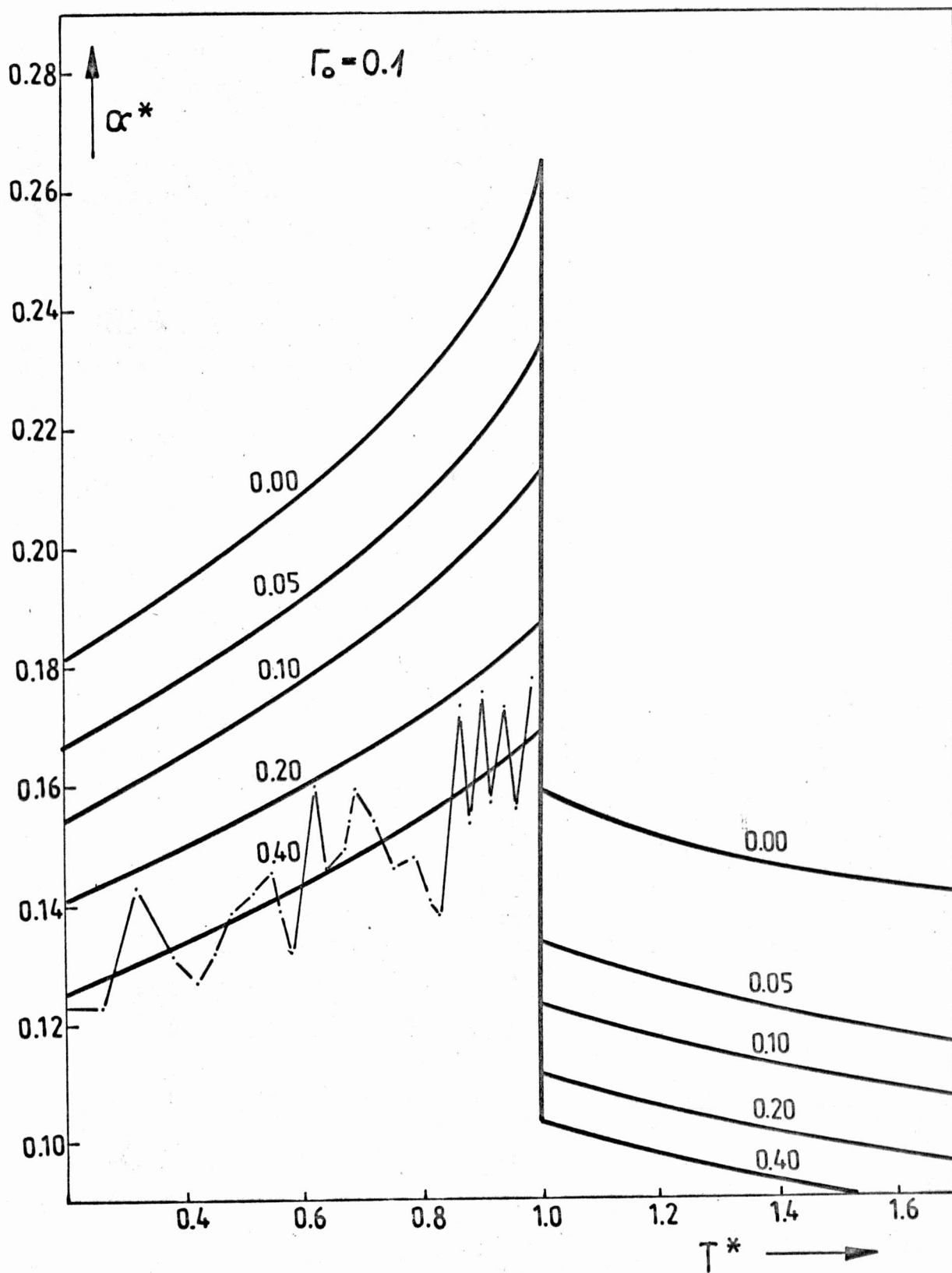
- ferroelektrykach typu porządek-nieporządek, po uprzednim uwzględnieniu w obliczeniach, pominiętej przez nas, zależności całki tunelowania od chwilowych odległości między atomami [25]



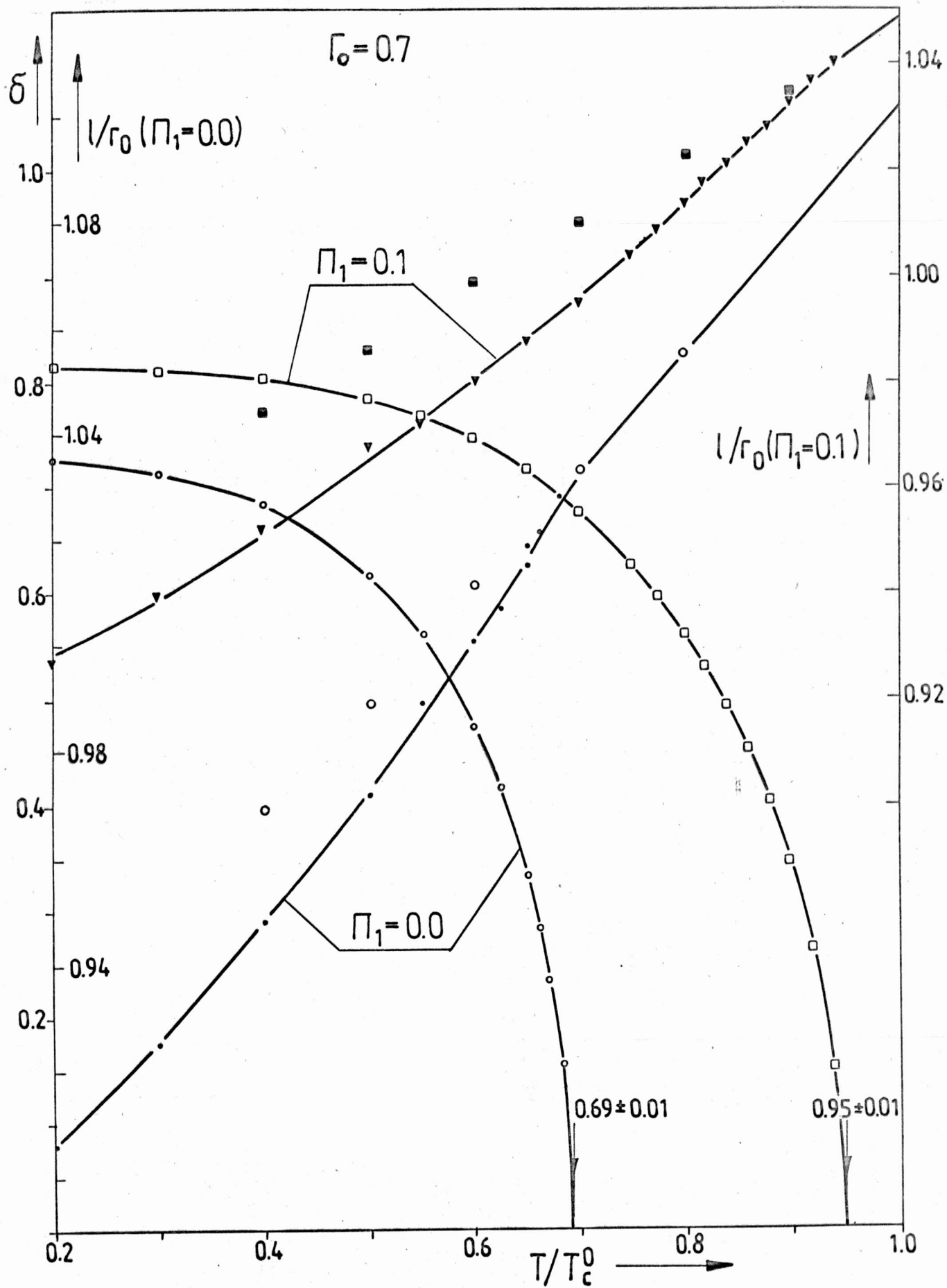
Rys.1.



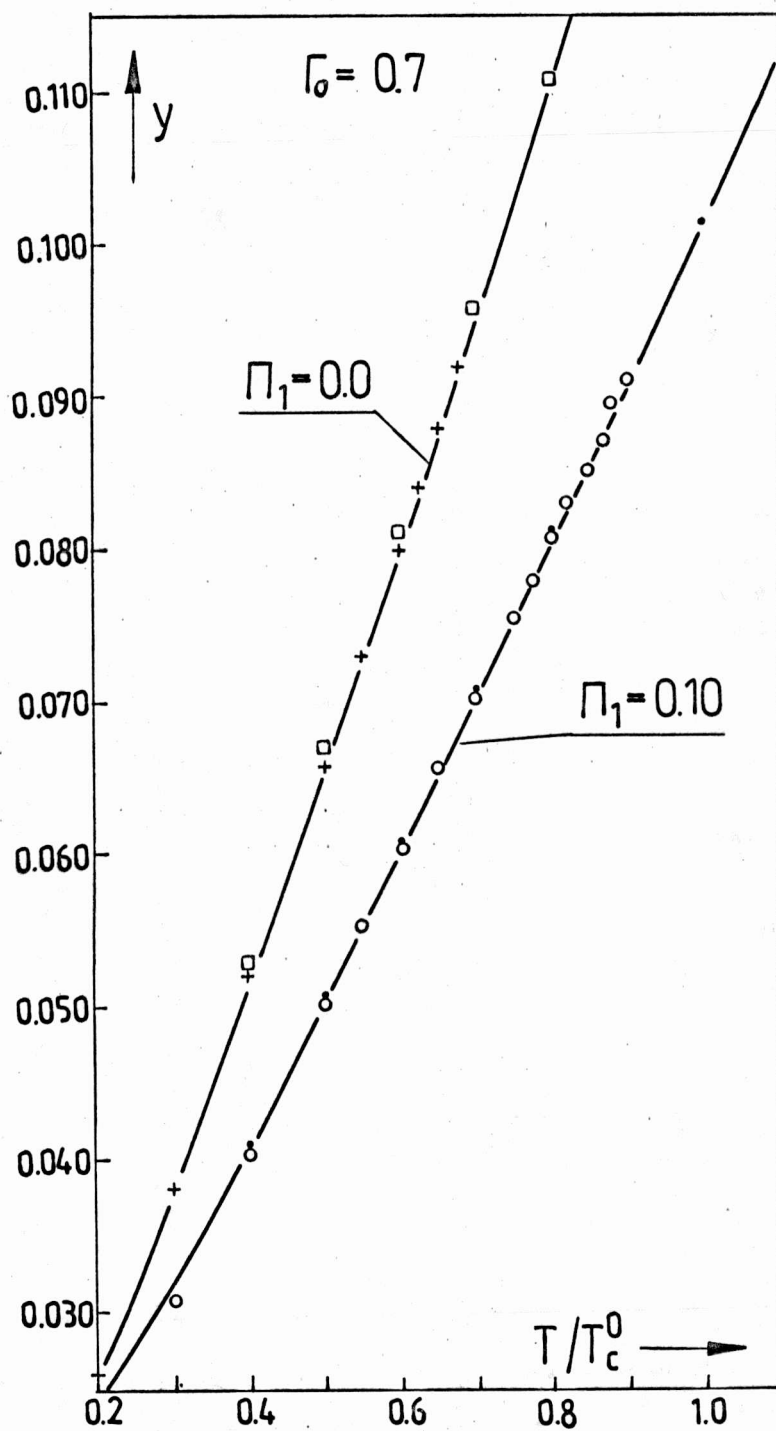
Rys.2.



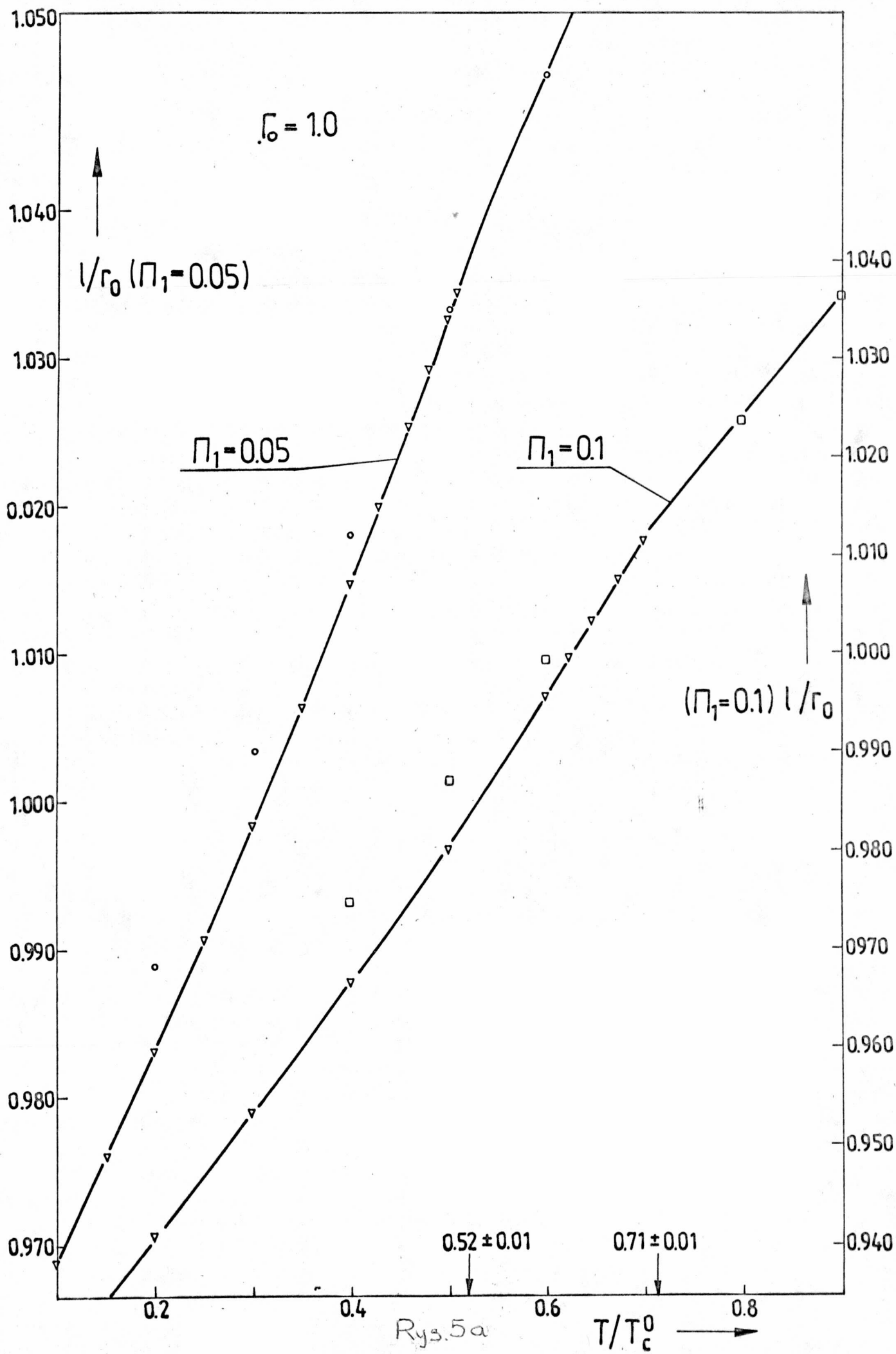
Rys. 3.

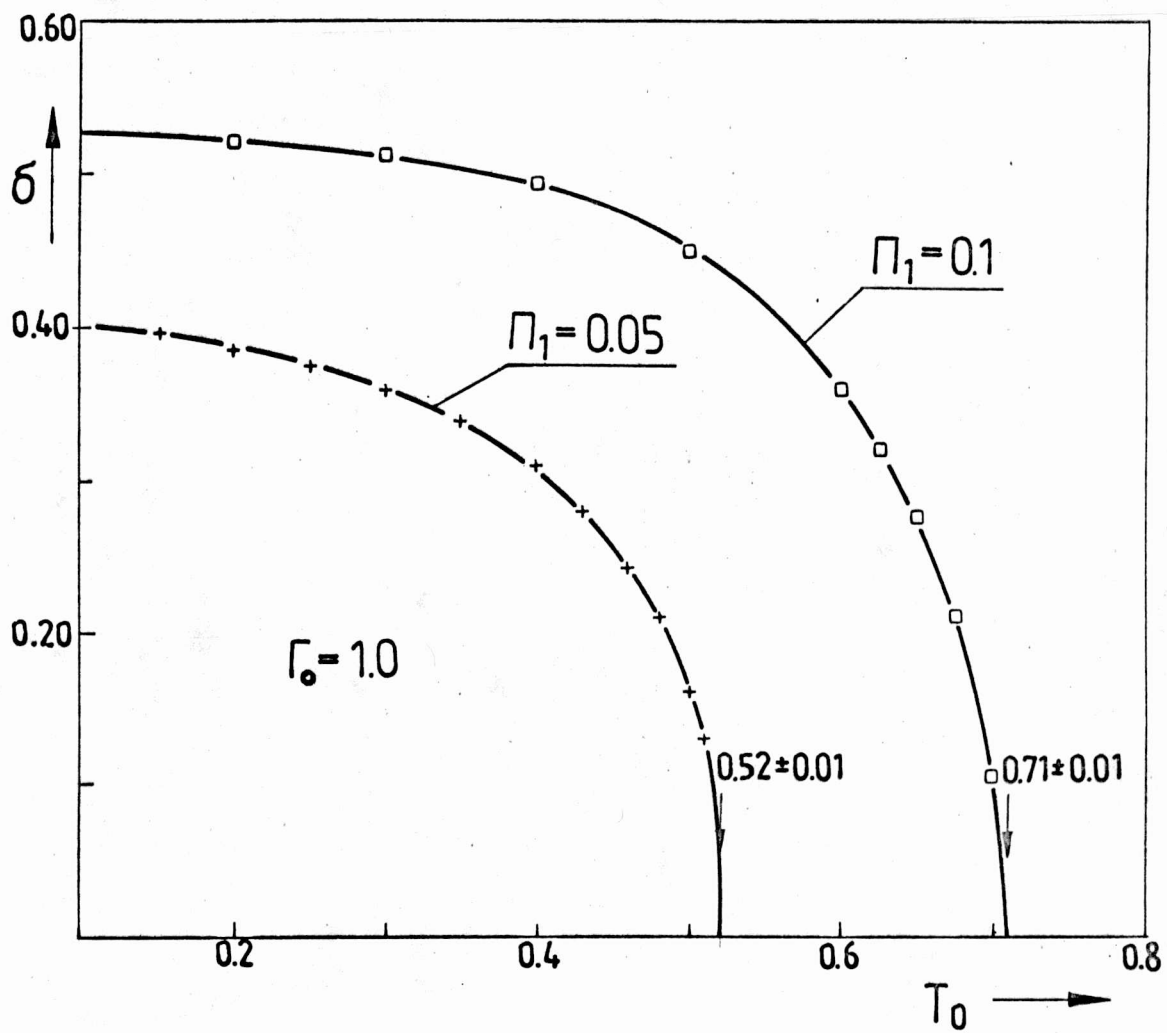


Rys. 4a

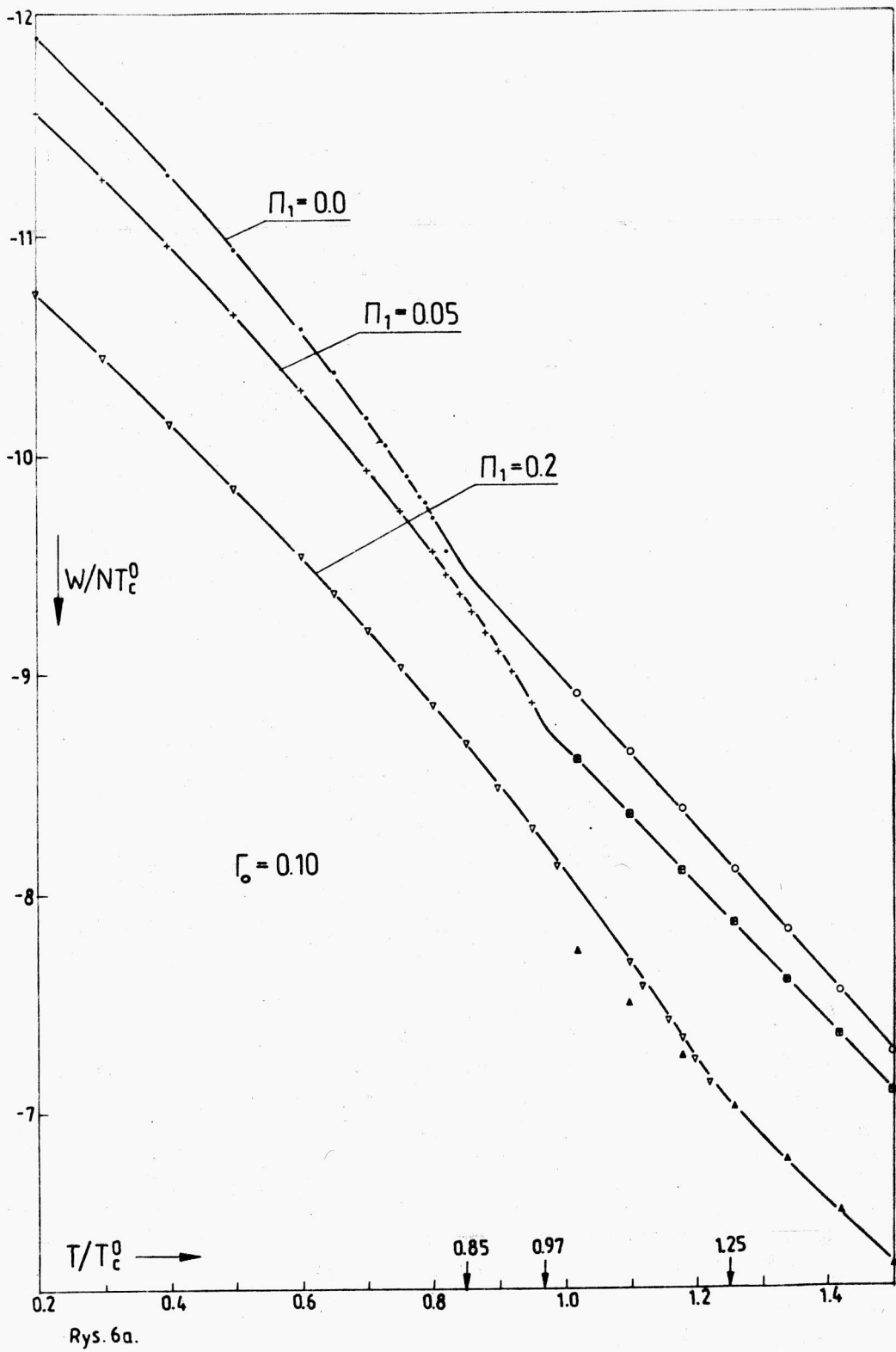


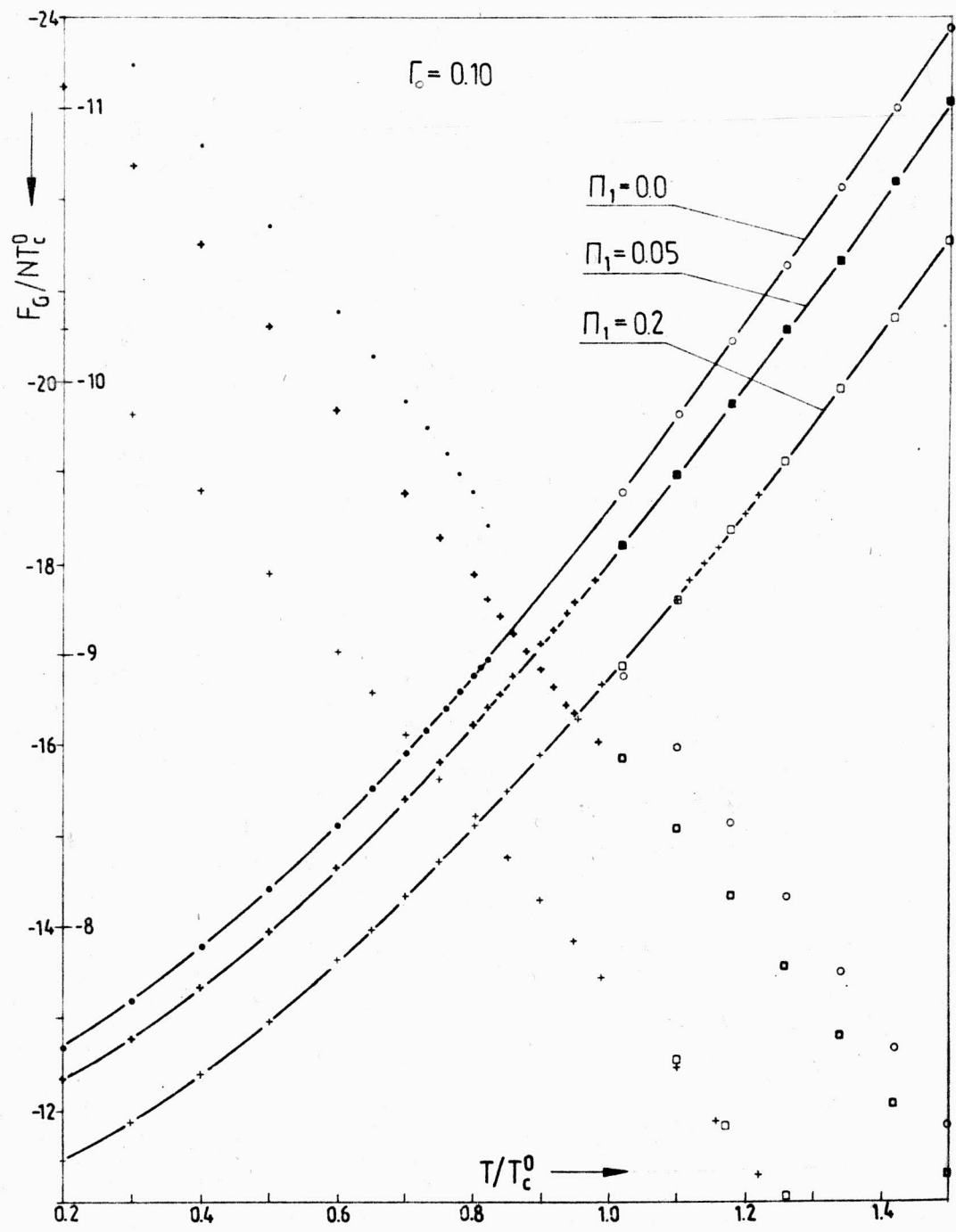
Rys. 4b.



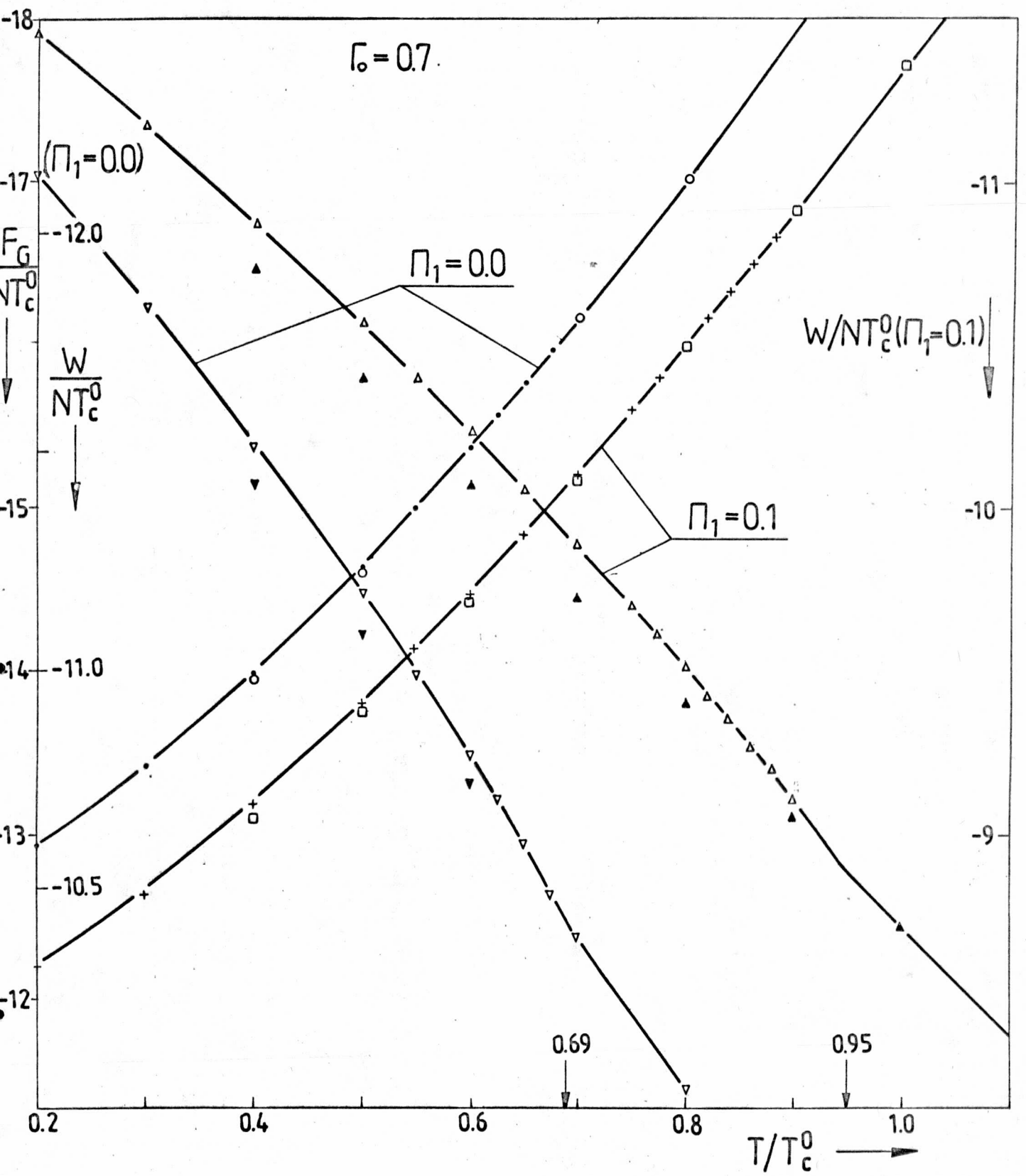


Rys. 5b.

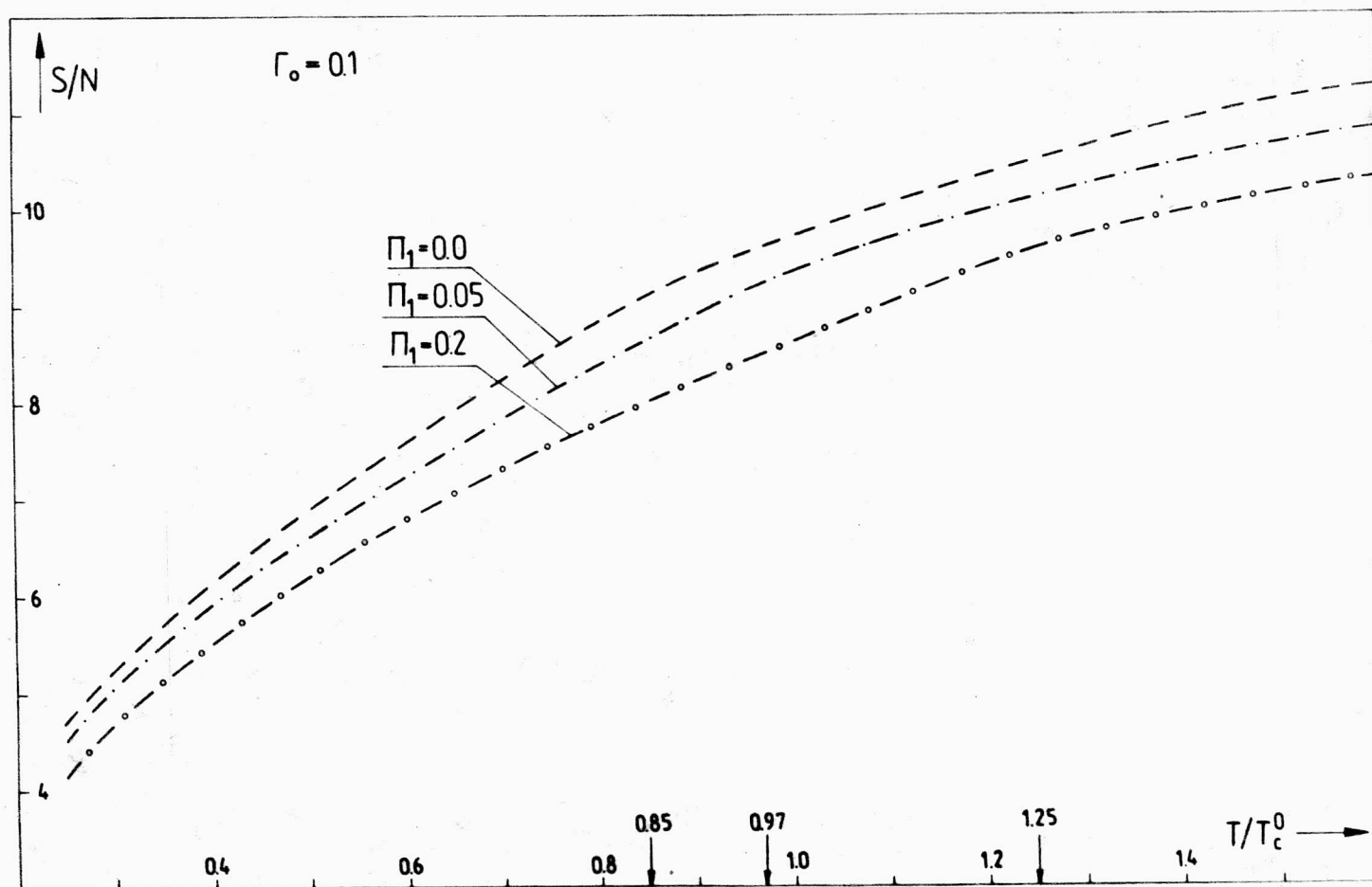




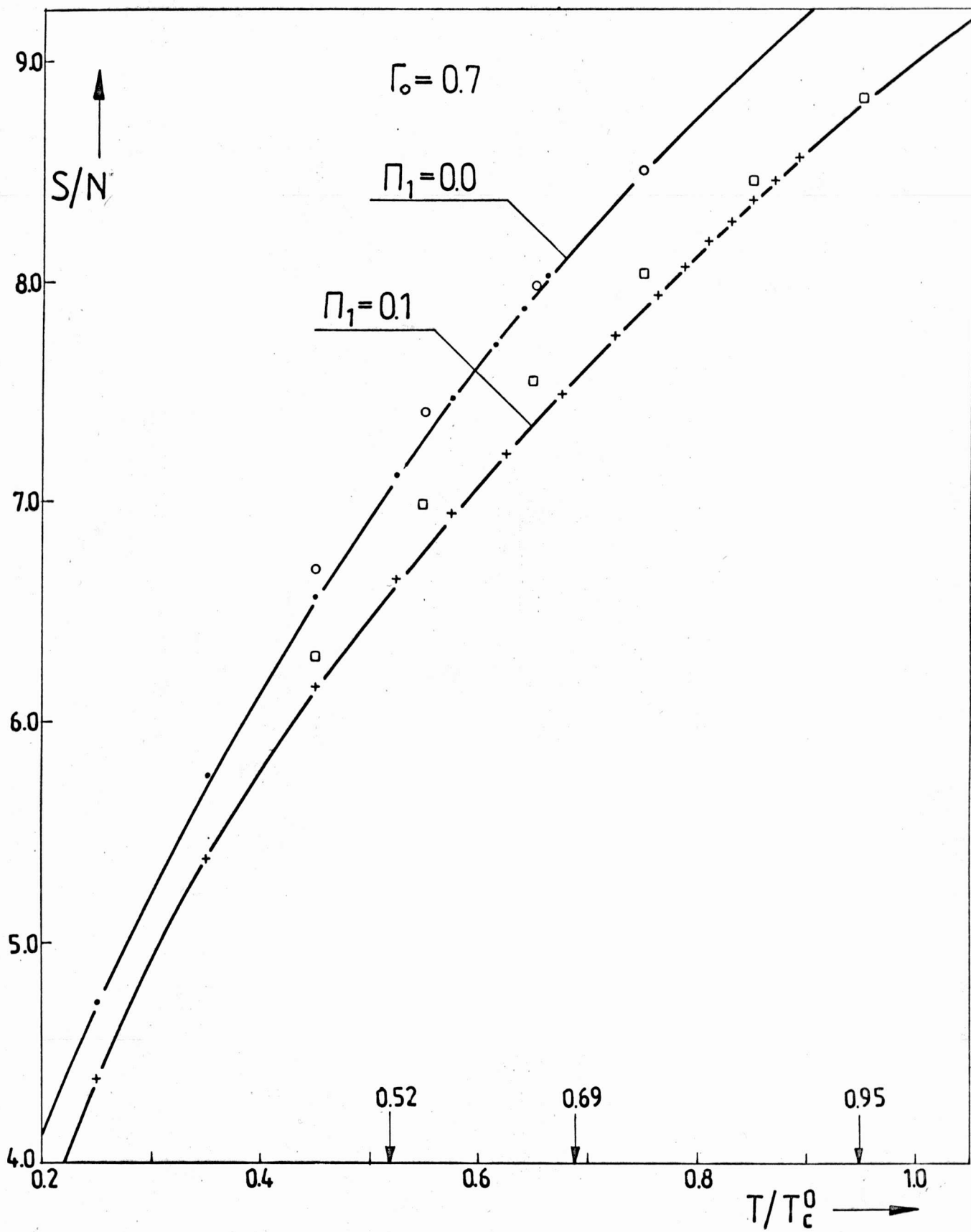
Rys. 6b.



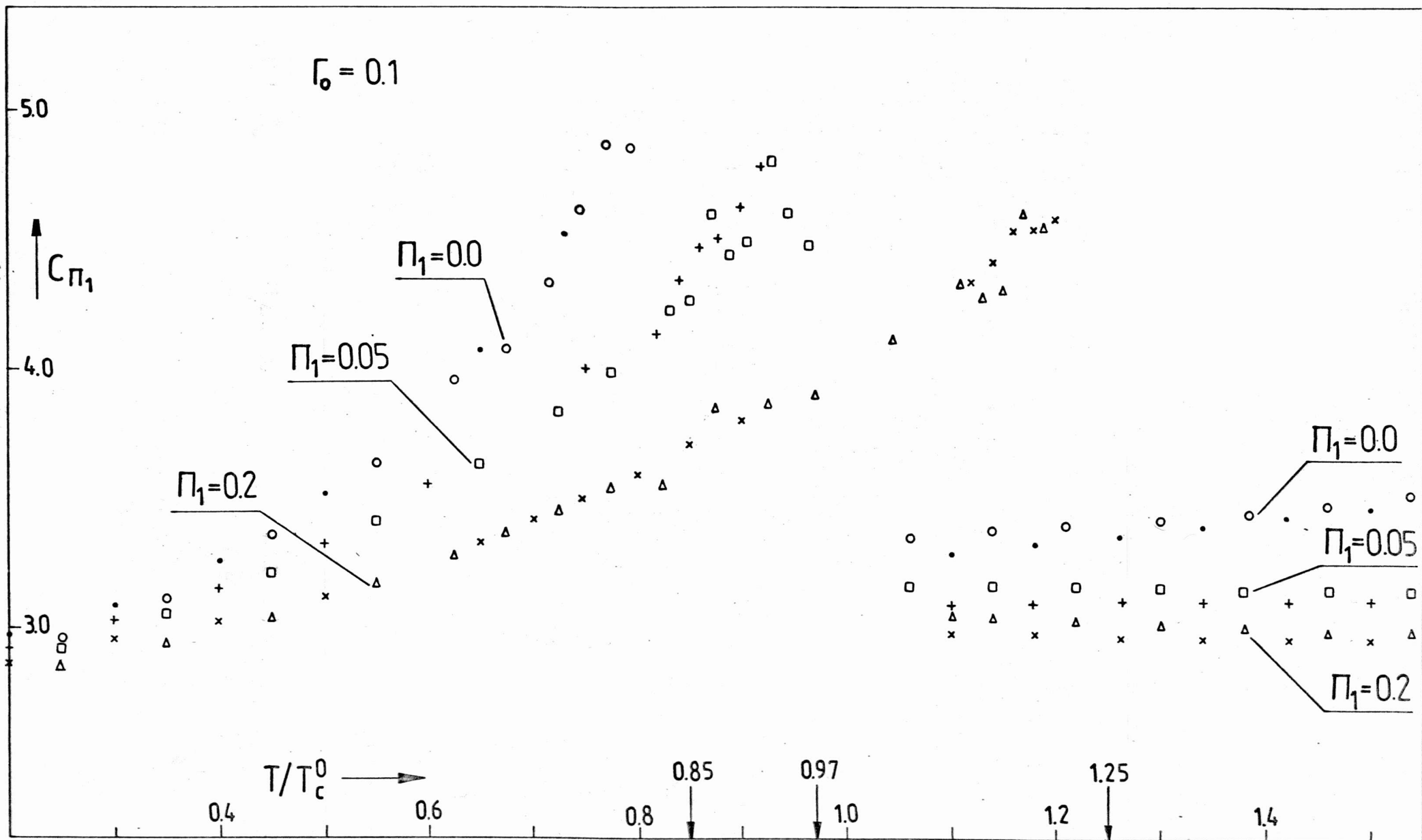
Rys. 6c.



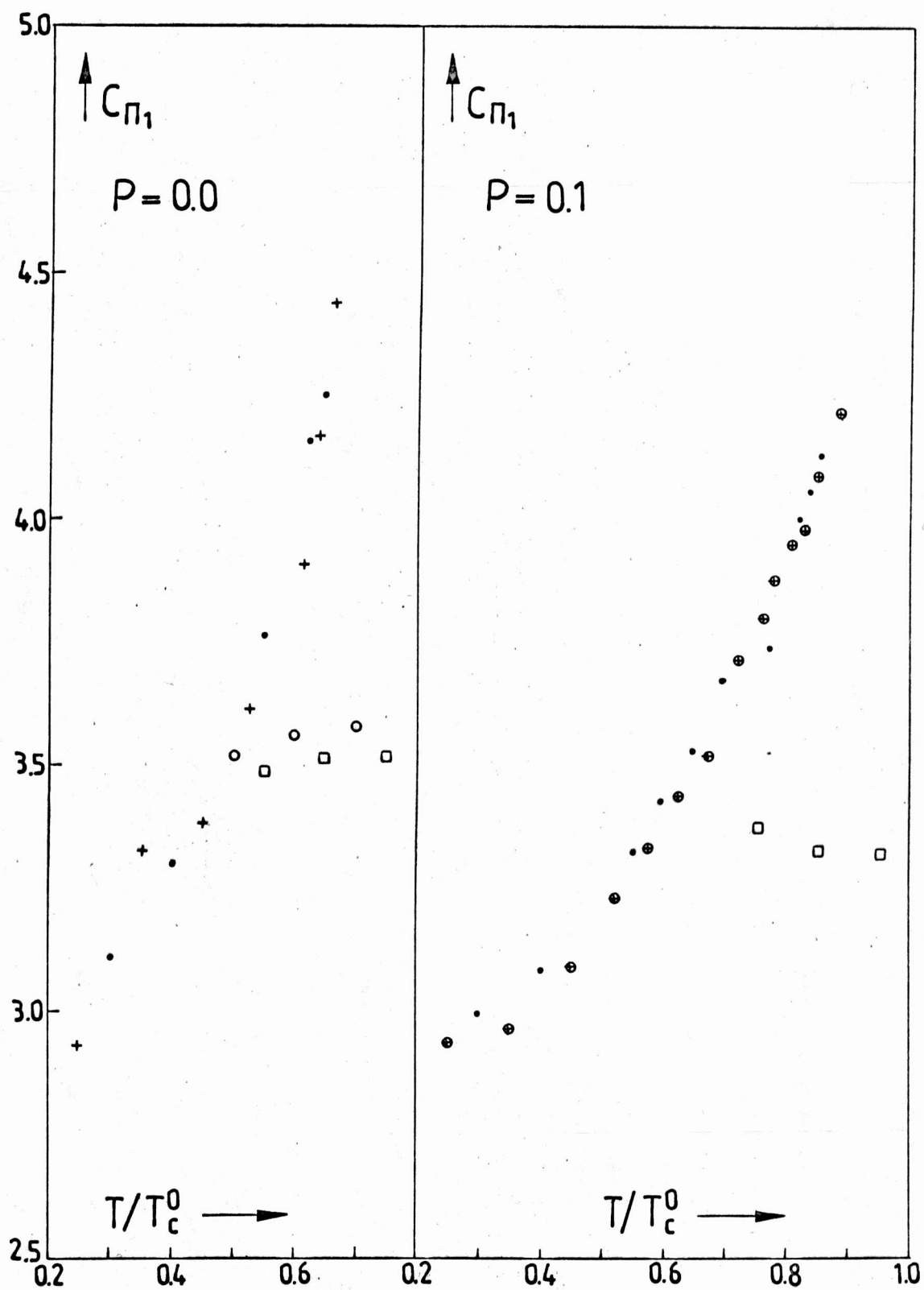
Rys. 7a.



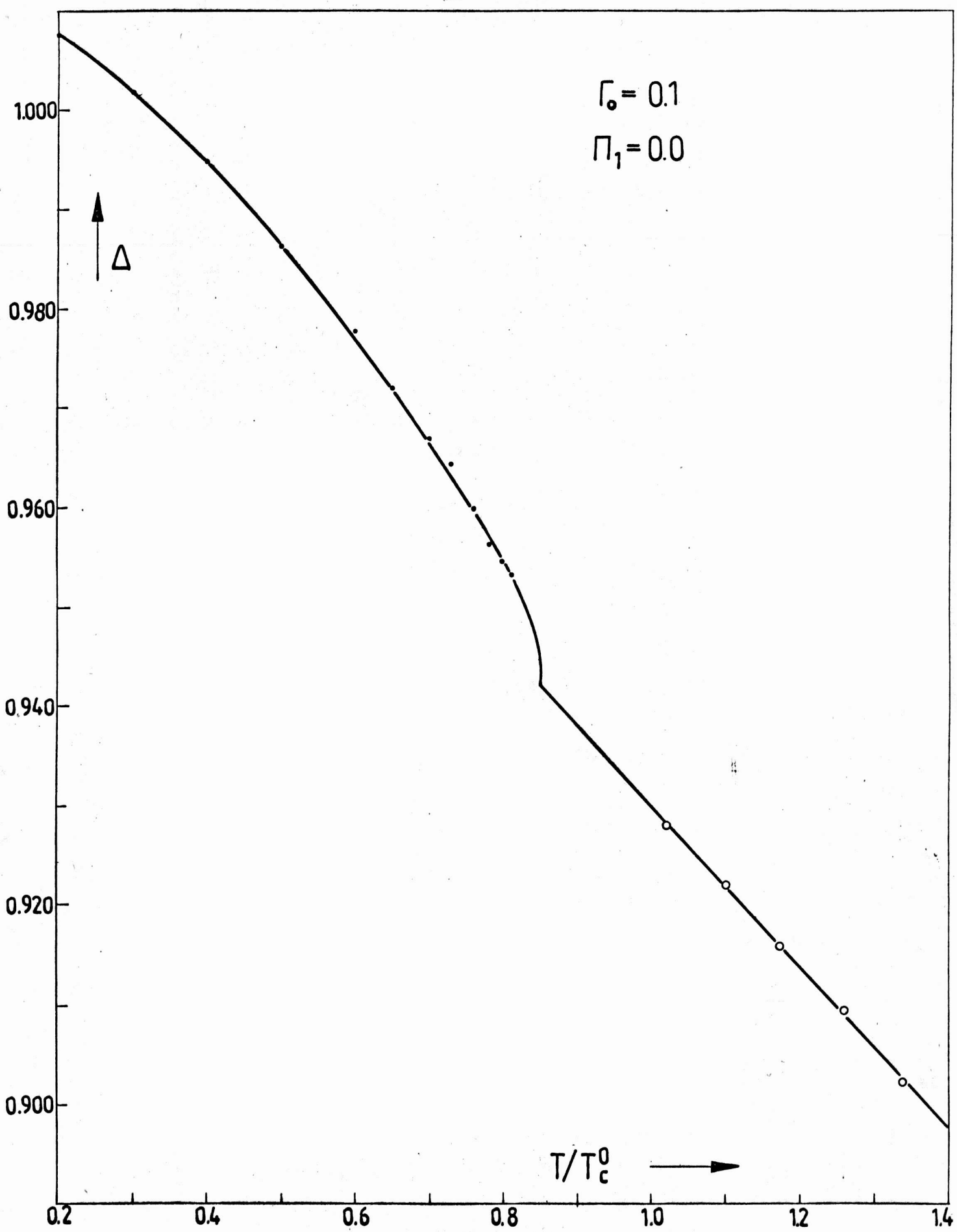
Rys. 7b.



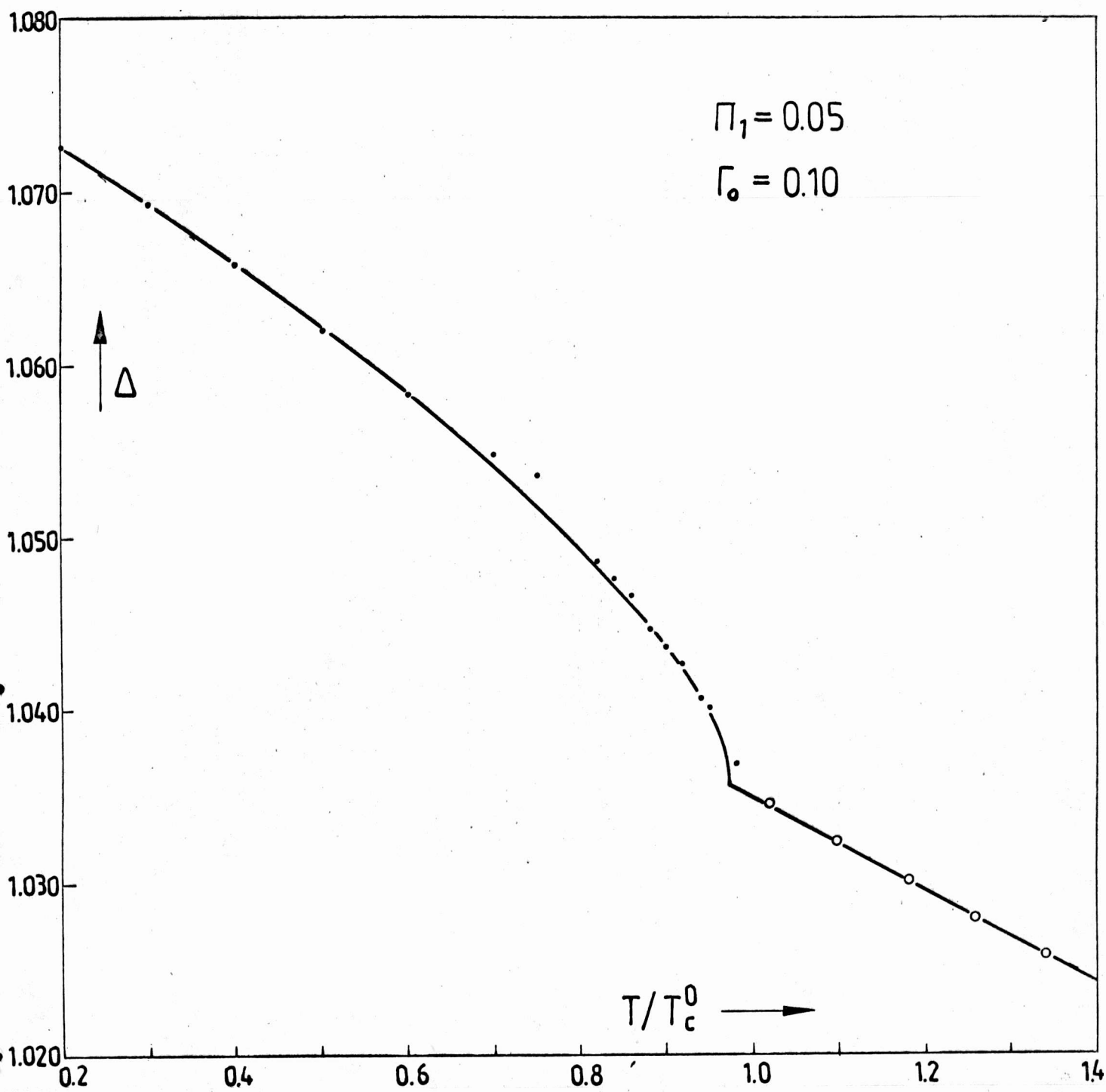
Rys. 8a.



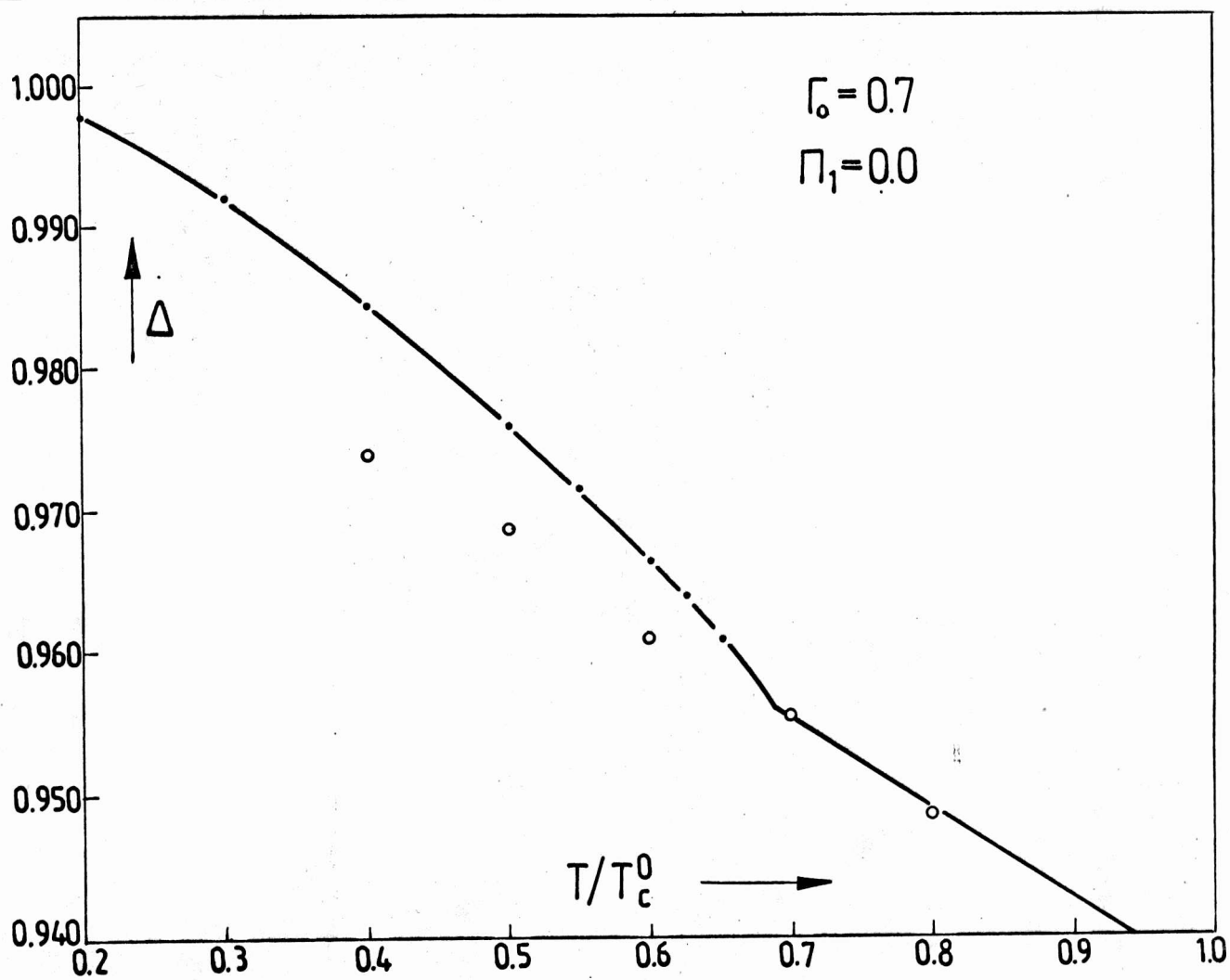
Rys. 8b.



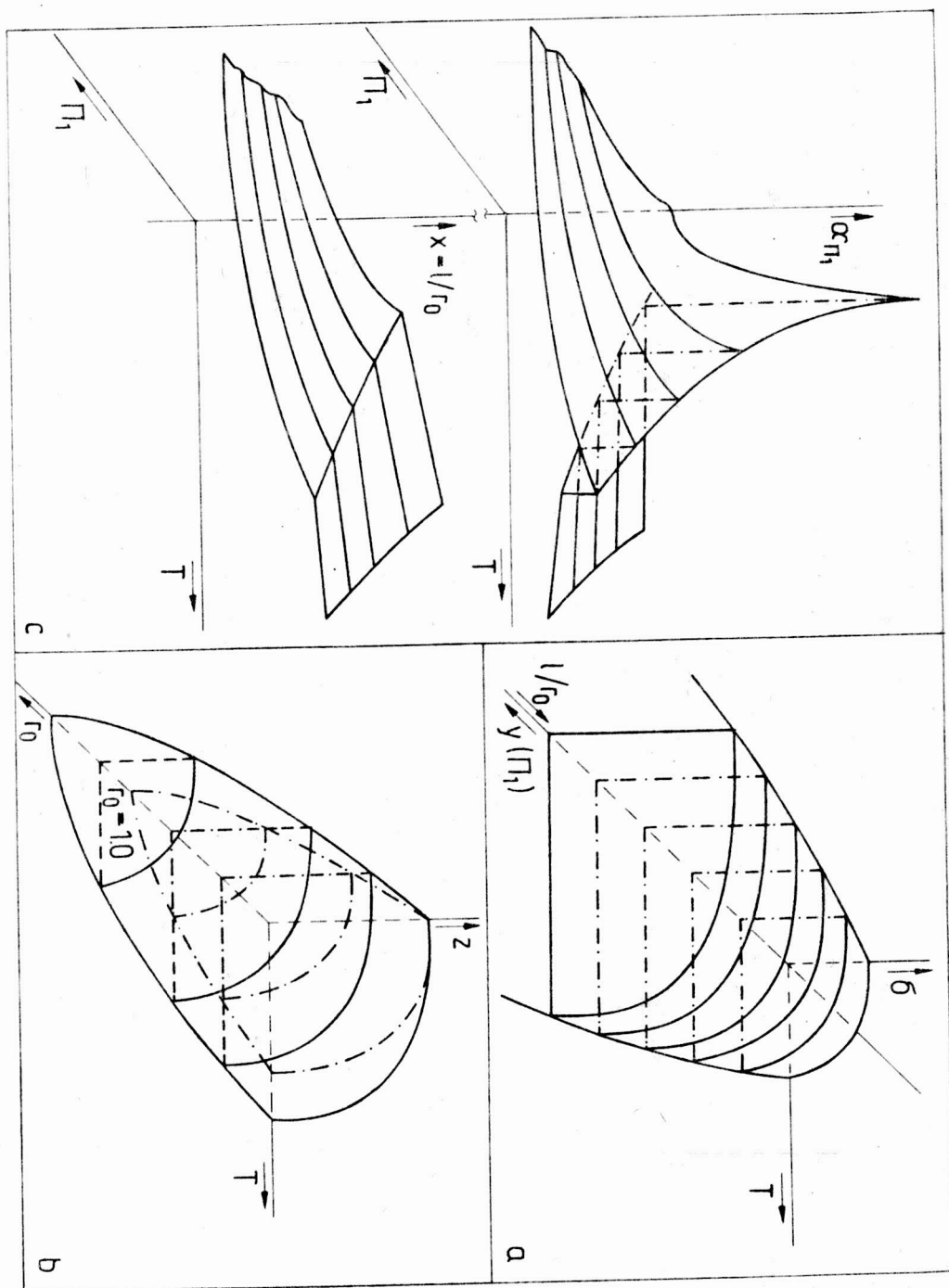
Rys. 9a.



Rys. 9b.



Rys. 9c.



Rys. 10

Opisy rysunków

- Rys. 1A. Rozwiązanie równania (2.4.4). Wykresy przedstawiają zależności $\log_{10} y$ od $\log_{10}(T/T_D)$ dla $\pi_1 = \sigma = 0$ przy podanych wartościach parametrów $Q = T_D/D$.
- Rys. 1B. Rozwiązania równań (2.3.8 - 10). Wykresy zależności y od T^* dla podanych π_1 .
- Rys. 2. Rozwiązanie równań (2.3.8 - 10). Wykresy zależności σ oraz $X = \ell/r_0$ od T^* dla różnych wartości π_1 .
- Rys. 3. Wykresy zależności współczynnika rozszerzalności cieplnej układu $\alpha_{\pi_1}^*$ od temperatury zredukowanej T^* dla podanych π_1 .
- Rys. 4a. Rozwiązania równań (2.3.8 - 10) dla $\Gamma_0 = 0.7$, $\pi_1 = 0$ i $\pi_1 = 0.1$. Zależności ℓ/r_0 i σ od $T_0 = T/T_0^0$.
- Rys. 4b. Rozwiązanie równań (2.3.8 - 10) dla $\Gamma_0 = 0.7$, $\pi_1 = 0$ i $\pi_1 = 0.1$. Zależności y od T_0 .
- Rys. 5a. Rozwiązania układu równań (2.3.8-10) dla $\Gamma_0 = 1.0$, $\pi_1 = 0.05$ i $\pi_1 = 0.1$. Wykresy zależności ℓ/r_0 od T_0 .
- Rys. 5b. Rozwiązania układu równań (2.3.8 - 10) dla $\Gamma_0 = 1.0$, $\pi_1 = 0.05$ i $\pi_1 = 0.1$. Zależności parametru porządku σ od temperatury zredukowanej $T_0 = T/T_0^0$.
- Rys. 6a. Wykresy zależności entalpii $\tilde{W} = W/NT_0^0$ (patrz wzór (2.3.13)) od T^0 przy $\Gamma_0 = 0.1$, dla wybranych wartości π_1 .

- Rys. 6b. Wykresy zależności energii swobodnej Gibbsa $\tilde{F}_G = F_G/NT_0^0$ (patrz wzór 2.3.12)) od temperatury T/T_0^0 przy $\Gamma_0 = 0.1$ dla wybranych wartości π_1 .
- Rys. 6c. To samo co na rysunkach 6a i 6b dla $\Gamma_0 = 0.7$ i podanych wartościach π_1 .
- Rys. 7a. Wykresy zależności entropii $\tilde{S} = S/N$ układu (patrz wzór (2.3.14)) od temperatury T/T_0^0 dla $\Gamma_0 = 0.1$ i różnych π_1 .
- Rys. 7b. Zależności $\tilde{S}$ od T_0 dla $\Gamma_0 = 0.7$ oraz $\pi_1 = 0.0$ i $\pi_1 = 0.1$.
- Rys. 8a. Pojemność cieplna układu przy stałym ciśnieniu $\tilde{C}_{\pi_1}$ dla $\Gamma_0 = 0.1$ i różnych π_1 . Symbole (o), (□), (Δ) odpowiadają wartościom $\tilde{C}_{\pi_1}$ wyznaczonym na podstawie relacji termodynamicznej $\tilde{C}_{\pi_1} = \left(\frac{\partial \tilde{N}}{\partial T_0} \right) \pi_1$, natomiast znaki (•), (+), (×) określają wartości $\tilde{C}_{\pi_1}$ obliczone przy pomocy zależności $\tilde{C}_{\pi_1} = T_0 \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T_0} \right) \pi_1$.
- Rys. 8b. To samo co na rys. 8a ale dla $\Gamma_0 = 0.7$; (⊗), (+), (□), określają wartości $\tilde{C}_{\pi_1} = \left(\frac{\partial \tilde{N}}{\partial T_0} \right) \pi_1$, a (•) i (o) wartości $\tilde{C}_{\pi_1} = T_0 \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial T_0} \right) \pi_1$.
- Rys. 9a. Zależność Δ od temperatury T_0 dla $\Gamma_0 = 0.1$ i $\pi_1 = 0.0$
- Rys. 9b. Zależność Δ od T_0 dla $\Gamma_0 = 0.1$ i $\pi_1 = 0.05$
- Rys. 9c. Zależność Δ od T_0 dla $\Gamma_0 = 0.7$ i $\pi_1 = 0.0$
- Rys. 10a. Jakościowy wykres fazowy przedstawiający zależność parametru porządku σ od (T, y) lub $(T, x = \ell/r_0)$ lub (T, π_1) .

Rys. 10b. Wykres fazowy w zmiennych (σ , r_0 , T); dla sztywnego modelu Isinga z polem poprzecznym faza uporządkowana ($\sigma \neq 0$) istnieje pod powierzchnią, której przekroje zaznaczano liniami ($-\cdot-\cdot-\cdot-$); w ściślim modelu faza ta istnieje pod powierzchnią, której przekroje zaznaczono liniami ciągłymi.

Rys. 10c. Jakościowa ilustracja zależności $L_{\pi_1}^*$ oraz $x = \ell/r_0$ od T i π_1 .

3. Oddziaływanie spinowo-fononowe w anharmonicznym ferromagnetyku Heisenberga o dowolnym spinie w przybliżeniu pola samouzgodnionego.

3.1. Wprowadzenie.

W dotychczasowych pracach poświęconych teorii oddziaływania spinowo-fononowego w anharmonicznych kryształach magnetycznych [79-87], zajmowano się głównie rozwijaniem ogólnej teorii. Zastosowanie formalizmu rozwiniętego przez Konwenta i Płakidę [84], nawet w najprostszym wariancie, wymaga użycia metod numerycznych.

W tej części pracy przedstawione zostaną wyniki obliczeń numerycznych dotyczące własności termodynamicznych anharmonicznego ferromagnetyka Heisenberga [101-102].

Rozpatrzmy kryształ o sieci prostej zawierający N atomów o efektywnym spinie $S \gg \frac{1}{2}$ i objętości V .

Hamiltonian układu przyjmujemy w postaci [101]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{L-S}, \quad (3.1.1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_L &= \sum_{n,\alpha} \frac{(P_n^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} ' \varphi(|\bar{R}_n - \bar{R}_m|) = \\ &= \sum_{n,\alpha} \frac{(P_n^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} ' \sum_l \frac{1}{l!} \sum_{1\dots l} \Phi_{n-m}^{1\dots l} \bar{u}_1 \dots \bar{u}_l, \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{L-S} &= -\mu_B \hbar \sum_n S_n^z - \frac{1}{2} \sum_{n,m} ' \mathcal{J}(|\bar{R}_n - \bar{R}_m|) = \\ &= -\mu_B \hbar \sum_n S_n^z - \frac{1}{2} \sum_{n,m} ' \sum_l \frac{1}{l!} \sum_{1\dots l} \mathcal{J}_{n-m}^{1\dots l} \bar{u}_1 \dots \bar{u}_l \vec{S}_n \cdot \vec{S}_m, \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

gdzie h - zewnętrzne pole magnetyczne, μ_B - magneton Bohra. Pozostałe oznaczenia są takie same jak w rozdziale 2.

3.2. Potencjały termodynamiczne układu.

Funkcje termodynamiczne wyznaczymy, podobnie jak w paragrafie 2.2, stosując metodę wariacyjną Bogolubowa [84, 86]. Hamiltonian próbny $\mathcal{H}_0$ wybieramy w postaci:

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_L^0 + \mathcal{H}_S^0, \quad (3.2.1)$$

$$\mathcal{H}_L^0 = \sum_{n,\alpha} \frac{(P_n^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,n' \\ \alpha,\alpha'}} \tilde{\Phi}_{\mathcal{L}\mathcal{L}'}(n,n') u_n^\alpha u_{n'}^{\alpha'}, \quad (3.2.2)$$

$$\mathcal{H}_S^0 = - \sum_n \tilde{K}_n^z S_n^z. \quad (3.2.3)$$

Próbna energia swobodna F_{trial} jest równa

$$F_{trial} = T \left\{ \sum_{\bar{q},j} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Omega(\bar{q},j)}{2T} \right) \right] - \sum_n \ln \Psi_S \left(\frac{S \tilde{K}_n^z}{T} \right) \right\} + \quad (3.2.4)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{n,n'}' \left\{ \tilde{\varphi}(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|) - J(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|) \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \right\} \\ + \sum_n (\tilde{K}_n^z - \mu_B h) \langle S_n^z \rangle_0 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,\alpha \\ n',\alpha'}} \tilde{\Phi}_{\mathcal{L}\mathcal{L}'}(n,n') \langle u_n^\alpha u_{n'}^{\alpha'} \rangle_0,$$

gdzie

$$\Psi_S(x) = \sinh\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) / \sinh(x/2S), \quad (3.2.5)$$

$$\bar{x}_n = \langle \bar{R}_n \rangle = \text{Tr}[\bar{R}_n e^{-\beta \mathcal{H}}] / \text{Tr}[e^{-\beta \mathcal{H}}]. \quad (3.2.6)$$

Wielkości $\tilde{\varphi}(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|)$ oraz $\tilde{\mathcal{J}}(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|)$ są dane formułami (2.2.13) i (2.2.14).

W (3.2.4) wprowadzone zostały częstości drgań $\Omega(\bar{q}_j)$ próbnej macierzy dynamicznej układu $\tilde{\mathcal{D}}(\bar{q})$, którą określamy w sposób podany w paragrafie 2.2 (patrz wyrażenia (2.2.6) - (2.2.10)).

Z warunków stacjonarności próbnej energii swobodnej (3.2.4) względem $\tilde{\Phi}_{\mathcal{L}\mathcal{L}'}(n, n')$, $\langle u_n^{\mathcal{L}} u_{n'}^{\mathcal{L}'} \rangle_0$, $\tilde{K}_n^z$, $\langle S_n^z \rangle_0$ i $X_n^{\mathcal{L}}$ otrzymujemy [101]:

$$\langle u_n^{\mathcal{L}} u_{n'}^{\mathcal{L}'} \rangle_0 = \frac{1}{2MN} \sum_{\bar{q}_j} \frac{e_{\mathcal{L}}^*(\bar{q}_j) e_{\mathcal{L}'}(\bar{q}_j)}{\Omega(\bar{q}_j)} \coth\left(\frac{\Omega(\bar{q}_j)}{2T}\right) e^{i\bar{q}(\bar{n} - \bar{n}')}, \quad (3.2.7)$$

$$\tilde{\Phi}_{\mathcal{L}\mathcal{L}'}(n, n') = \delta_{nn'} \sum_m \left[\nabla_n^{\mathcal{L}} \nabla_n^{\mathcal{L}'} \tilde{\varphi}(|\bar{n} - \bar{m}|) - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_m^z \rangle_0 \nabla_n^{\mathcal{L}} \nabla_n^{\mathcal{L}'} \tilde{\mathcal{J}}(|\bar{n} - \bar{m}|) \right]$$

$$- \nabla_n^{\mathcal{L}} \nabla_n^{\mathcal{L}'} \left[\tilde{\varphi}(|\bar{n} - \bar{n}'|) - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \tilde{\mathcal{J}}(|\bar{n} - \bar{n}'|) \right],$$

$$\begin{aligned} \langle S_n^z \rangle_0 &= \langle S^z \rangle_0 = S\sigma = S \mathcal{B}_S(S\tilde{K}_n^z/T) = \\ &= S \left[\frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2} \frac{\tilde{K}_n^z}{T}\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{\tilde{K}_n^z}{2T}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

$$\tilde{K}_n^z = \mu_B \hbar + \sum_{n'} \tilde{J}(|\bar{n} - \bar{n}'|) \langle S_{n'}^z \rangle_0 \quad (3.2.10)$$

Jeśli na kryształ działa zewnętrzne ciśnienie Π (patrz paragraf 2.2 wyrażenia (2.2.22)), warunek stacjonarności F_{trial} , względem położenia równowagi $\bar{X}_n$, pozwala otrzymać równanie stanu $[101]$:

$$\begin{aligned} \Pi = - \frac{1}{6V} \sum_{n, n', \alpha'} (x_n^\alpha - x_{n'}^{\alpha'}) \left\{ \frac{\partial}{\partial x_n^\alpha} \left[\tilde{\varphi}(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|) \right. \right. \\ \left. \left. - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \tilde{J}(|\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}|) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

Po uwzględnieniu symetrii translacyjnej układu, wyrażenia na energię swobodną Gibbsa i entalpię przypadającą na jedną cząstkę, przyjmują następującą postać:

3.3. Model oddziaływań i samouzgodniony układ równań.

Metoda A.

Rozpatrzmy kryształ o sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej, z oddziaływaniem najbliższych sąsiadów, który poddany jest działaniu zewnętrznego ciśnienia izotropowego Π .

Przyjmujemy, że energia potencjalna oddziaływań niemagnetycznych ma postać potencjału Morse'a (patrz rozdział 2), a zależność całki wymiany od odległości opisuje (2.3.1). Postępując analogicznie jak w paragrafie 2.3, samouzgodniony układ równań dla $h = 0$, zapisujemy w postaci [101]:

$$\Delta^2 \cdot y - \frac{3}{32} \cdot \Delta \cdot T_D / D_0 - \frac{1}{4} \frac{T}{T_c^0} \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} F_D \left(\frac{\Delta}{\frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T}{T_c^0}} \right) = 0, \quad (3.3.1)$$

$$\begin{aligned} \Pi_1 \cdot x^2 - \exp \{ 2[y - A(x-1)] \} + \exp [y/2 - A(x-1)] \\ + \frac{B}{A} \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{S\sigma^2}{8(S+1)} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y - B(x-1) \right] = 0, \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_G = F_{\text{trial}}|N + \pi V|N = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \{ T \ln [2 \sinh (\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2T})] \\ - \frac{\Omega(\bar{q}j)}{4} \coth (\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2T}) - T \ln \Psi_s (\frac{S \tilde{K}_n^z}{2T}) + \\ + \frac{1}{2} \sum_l [\tilde{\varphi}(l) + S^2 \sigma^2 \cdot \tilde{J}(l)] + \pi \cdot V|N, \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

$$\begin{aligned} \tilde{W} = \langle \mathcal{H} \rangle_0 |N + \pi V|N = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \frac{\Omega(\bar{q}j)}{4} \coth (\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2T}) \\ + \frac{1}{2} \sum_l [\tilde{\varphi}(l) - S^2 \sigma^2 \tilde{J}(l)] - \mu_B \cdot h \cdot S \cdot \sigma \\ + \pi V|N, \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

gdzie $\tilde{\varphi}(l)$ oraz $\tilde{J}(l)$ są równe [131]:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\varphi}(l) \\ \tilde{J}(l) \end{aligned} \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{y_1}{2} \right)^n \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial^{2n}}{\partial l^{2n}} \varphi(l) \\ \frac{\partial^{2n}}{\partial l^{2n}} J(l) \end{aligned} \right. \quad (3.2.14)$$

(porównaj z wyrażeniami (2.3.4-6) z poprzedniego rozdziału) .

$$\sigma - \frac{2S+1}{2S} \coth \left\{ \frac{3(2S+1)\sigma \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right]}{2(T/T_c^0)(S+1)} \right\} \quad (3.33)$$

$$+ \frac{1}{2S} \coth \left\{ \frac{3\sigma \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right]}{2(T/T_c^0)(S+1)} \right\},$$

gdzie wprowadzono te same oznaczenia, co w paragrafie 2.3 oraz uwzględniono, że $T_c^0 = \frac{Z_{nn}}{3} S(S+1) J_0$ jest temperaturą Curie w przybliżeniu pola molekularnego dla modelu sztywnego.

Czynnik renormalizacji częstości drgań (patrz paragraf 2.3) jest równy

$$\Delta = \left\{ 2 \exp[2(y - A(x-1))] - \exp[y/2 - A(x-1)] - \left(\frac{B}{A}\right)^2 \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{S\sigma^2}{8(S+1)} \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right] \right\}^{1/2} \quad (3.34)$$

Energia swobodna Gibbsa $\widetilde{F}_G/NT_c^0$ oraz entalpia $\widetilde{W}/NT_c^0$
są równe :

$$\begin{aligned} \widetilde{F}_G/NT_c^0 = & \frac{g}{8} \frac{\Delta}{W} + \frac{T}{T_c^0} \left\{ 3 \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\Delta}{W \cdot T/T_c^0} \right) \right] \right. \\ & \left. - \widetilde{F}_D \left(\frac{\Delta}{W \cdot T/T_c^0} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

$$\begin{aligned} & - 6 \cdot \Delta^2 \cdot y / W \cdot Q + \frac{3}{2} \frac{5\sigma^2}{s+1} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y - B(x-1) \right] \\ & + \frac{6}{W \cdot Q} \left\{ \exp [2(y - A(x-1))] - 2 \exp [y/2 - A(x-1)] \right. \\ & \left. - \frac{T}{T_c^0} \ln \left\{ \frac{\sinh \left[\frac{3(2s+1)\sigma \exp [\frac{1}{2} (\frac{B}{A})^2 y - B(x-1)]}{2(s+1) T/T_c^0} \right]}{\sinh \left[\frac{3\sigma \exp [\frac{1}{2} (\frac{B}{A})^2 y - B(x-1)]}{2(s+1) T/T_c^0} \right]} \right\} \right. \\ & \left. + 4 \pi_1 \cdot A \cdot x^3 / W \cdot Q, \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{W}/T_c^0 = & 6 \cdot \Delta^2 \cdot y / W \cdot Q + \\
 & + \frac{6}{W \cdot Q} \{ \exp[2(y - A(x-1))] - 2 \exp[y/2 - A(x-1)] \} \\
 & - \frac{3}{2} \frac{S\sigma^2}{S+1} \exp\left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right] \\
 & + 4\pi_1 \cdot A \cdot x^3 / W \cdot Q .
 \end{aligned} \tag{3.3.6}$$

3.4. Wyniki obliczeń numerycznych. Metoda A.

Równania (3.3.1) - (3.3.3) rozwiązywano, stosując metody analizy numerycznej [132, 134], przy następujących wartościach parametrów modelu [101]:

$$\begin{aligned}
 A = a r_0 = 6 \quad , \quad B = b r_0 = 12 \quad , \\
 W = T_c^0 / T_D = 5 \quad , \quad Q = T_D / D_0 = 0.1 \quad .
 \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

Obliczenia przeprowadzono dla

$$0.1 \leq \tau = T/T_c^0 \leq 1.8 \quad i \quad 0 \leq \pi_1 \leq 0.5 \quad (3.4.2)$$

oraz dla wybranych wartości efektywnego spinu $S \geq 1/2$.

Rezultaty analizy numerycznej (3.3.1) - (3.3.3) przedstawiono na rysunkach 11 - 21.

Na osiach odciętych (za wyjątkiem rys.13) odłożono temperaturę zredukowaną T/T_c^0 .

Rysunki 11a - 11d przedstawiają zależności zredukowanej odległości między najbliższymi atomami ℓ/r_0 od temperatury $\tau = T/T_c^0$ oraz ciśnienia π_1 dla spinu $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2}$ i $S = \infty$.

Strzałkami zaznaczono wartość $\tau_c = T_c/T_c^0$, przy której zachodzi przemiana fazowa.

Niewypełnionymi kółkami (o) naniesiono wartości ℓ/r_0 , w przypadku gdy nie uwzględnia się oddziaływania spinowo-fononowego.

Rysunek 12 przedstawia zależność $\log_{10} (\overline{u^2(\ell)}/r_0^2)$ od τ , dla różnych wartości π_1 i $S = \frac{3}{2}$.

Rysunek 13 ilustruje zależność σ dla podanych wartości S od temperatury zredukowanej

$$T^* = \tau \exp \left[B(x-1) - \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 y \right] \quad (3.4.3)$$

Zależności $\langle S^z \rangle$ i efektywnej całki wymiany $\tilde{J}(\ell)/J_0$ od temperatury T dla $S = 3/2$ i różnych π_1 zawierają odpowiednio rysunki 14 i 15.

Nieliniową zależność temperatury przemiany fazowej T_c/T_c^0 od ciśnienia Π_1 ilustruje rysunek 16 (na osi odciętych odłożono $\log_{10}(\Pi_1)$).

Na rysunkach 17a - 17e przedstawiono zależności współczynnika objętościowej rozszerzalności cieplnej układu od τ

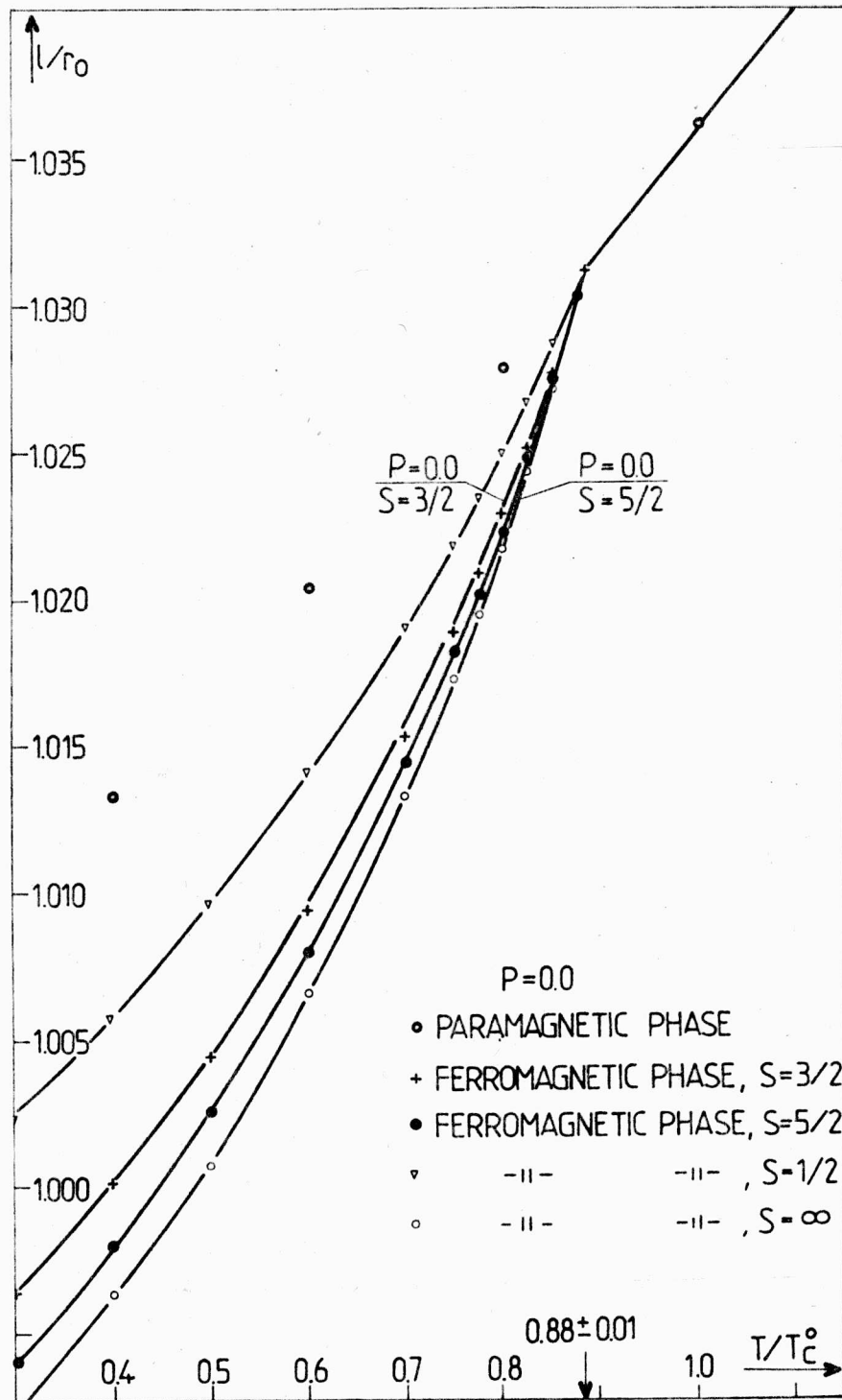
$$\alpha_{\Pi_1} = \frac{1}{\chi^3(\tau_1)} \frac{\chi^3(\tau_2) - \chi^3(\tau_1)}{\tau_2 - \tau_1} \quad (3.4.4)$$

dla różnych wartości Π_1 i S .

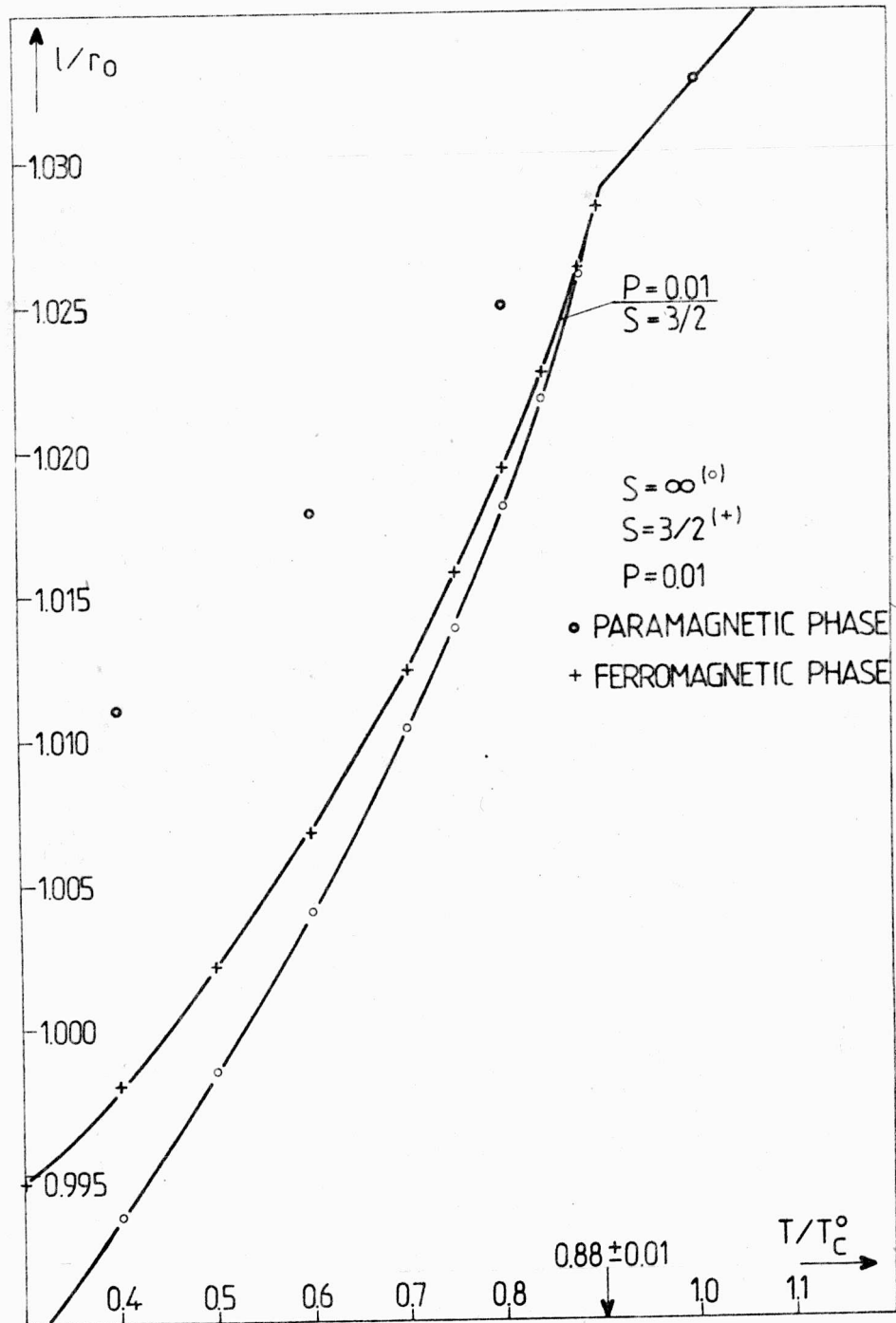
Rysunki 18a-c zawierają wykresy zależności czynnika renormalizacji częstości drgań Δ oraz $-\partial\Delta/\partial\tau$ od temperatury, przy podanych wartościach Π_1 oraz S .

Rysunki 19a-19c, 20a-20c, 21a-21c przedstawiają odpowiednio wykresy energii swobodnej Gibbsa (3.3.5) i entalpii (3.3.6), entropii przypadającej na jedną cząstkę (patrz (2.3.14)) oraz pojemności cieplnej (patrz (2.3.15)) dla podanych wartości efektywnego spinu S oraz ciśnienia Π_1 .

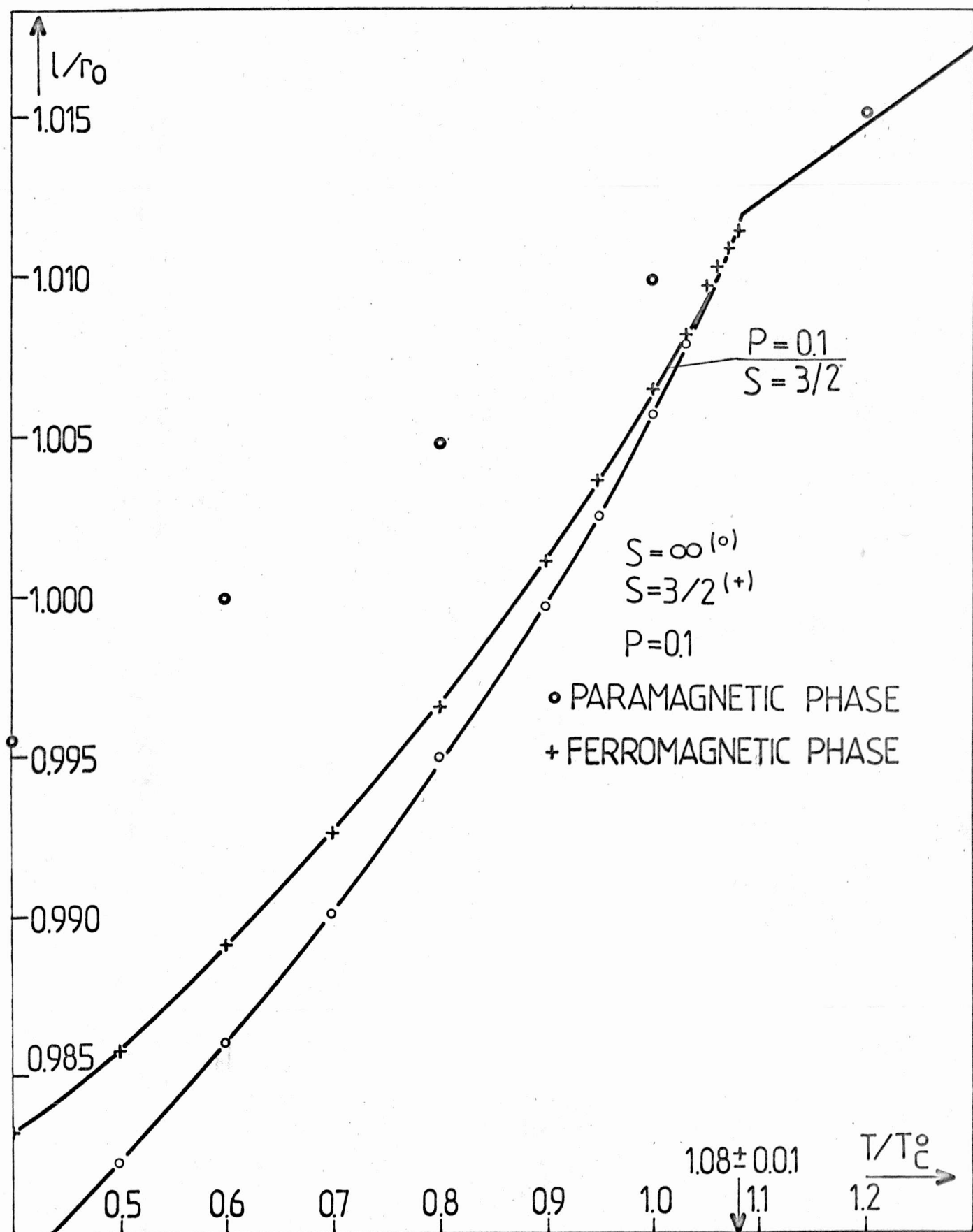
Dyskusję przedstawionych tutaj wyników przeprowadzimy w paragrafie 3.7.



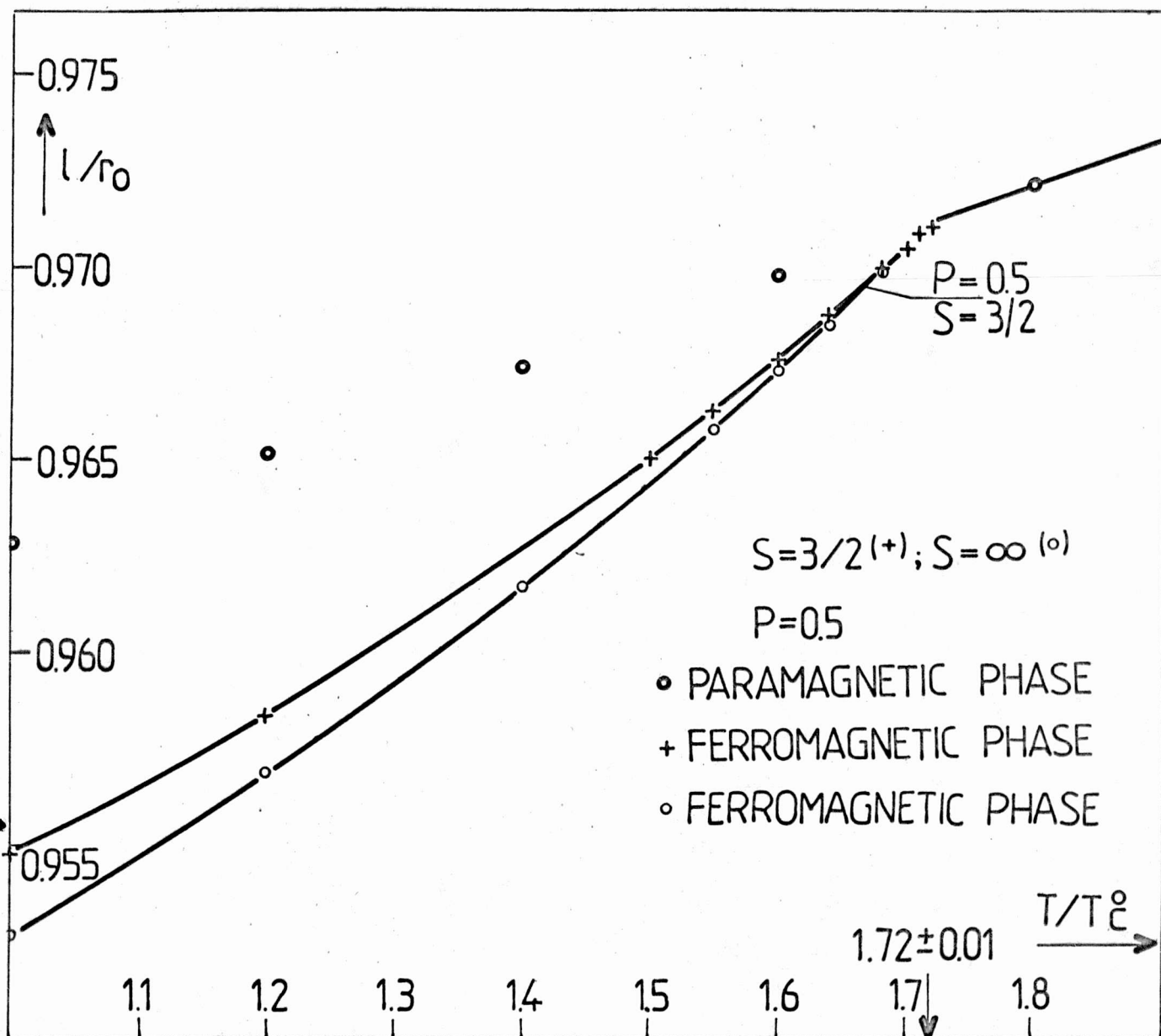
Rys. 11 a.



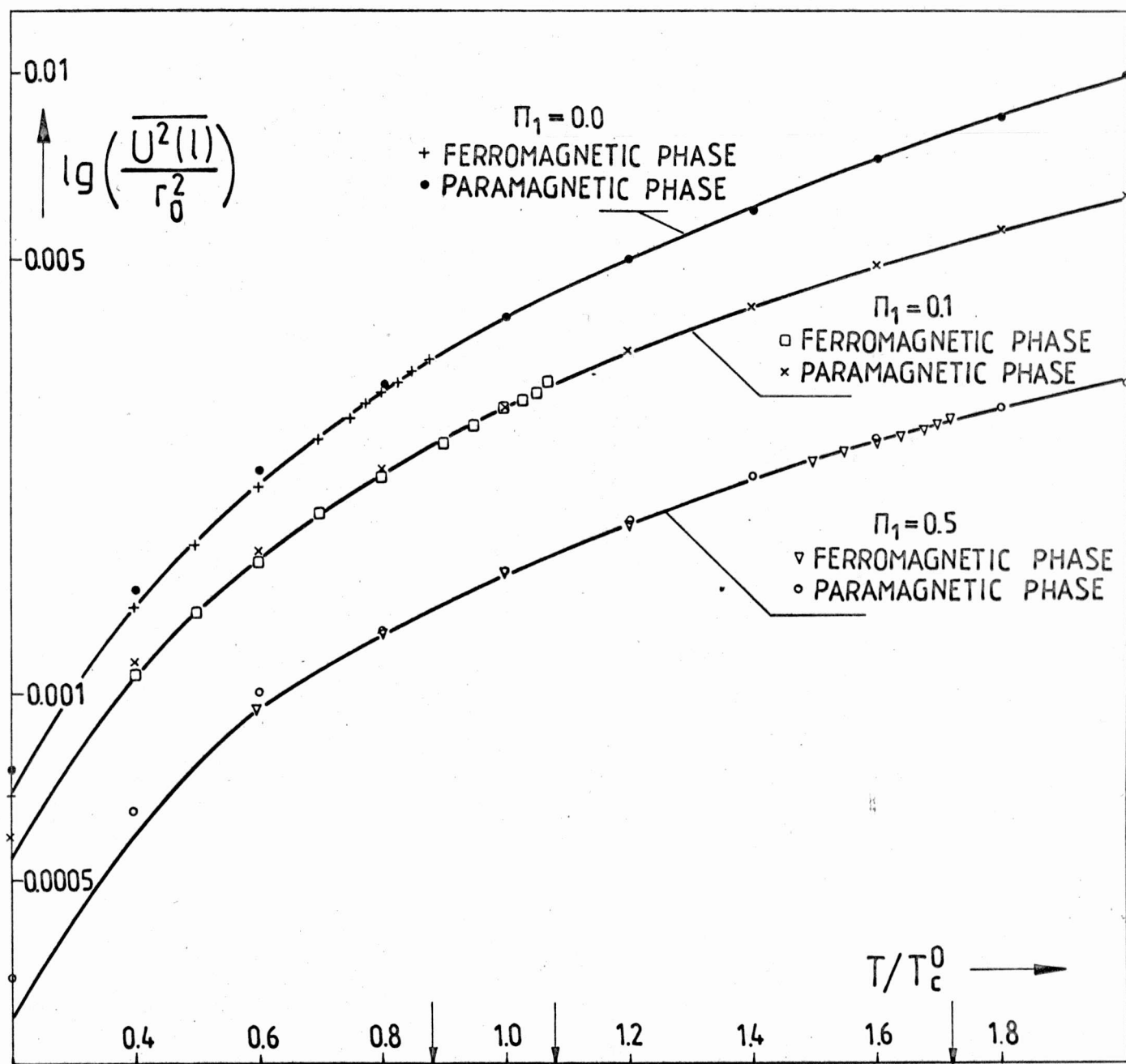
Rys. 11b.



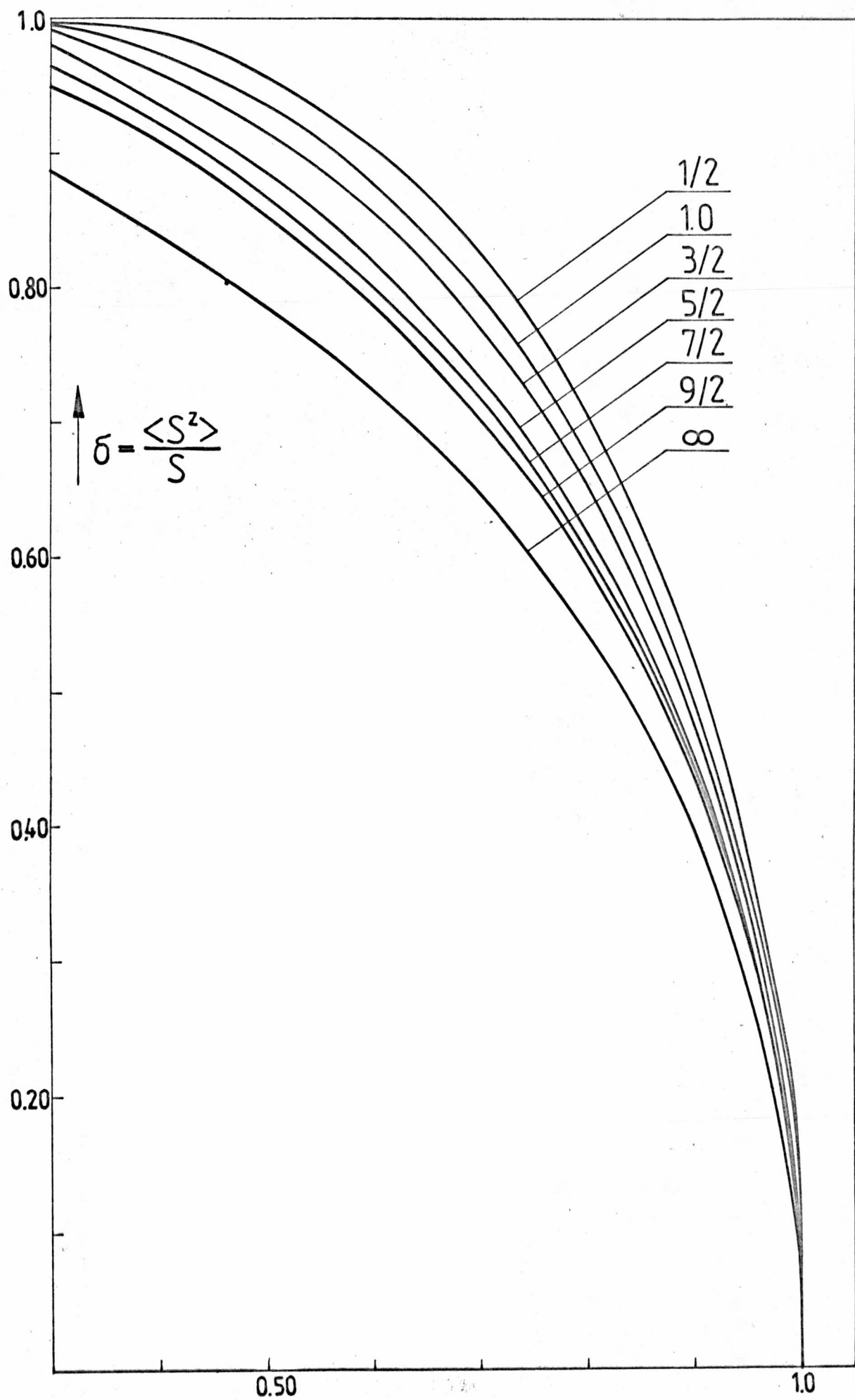
Rys. 11 c.



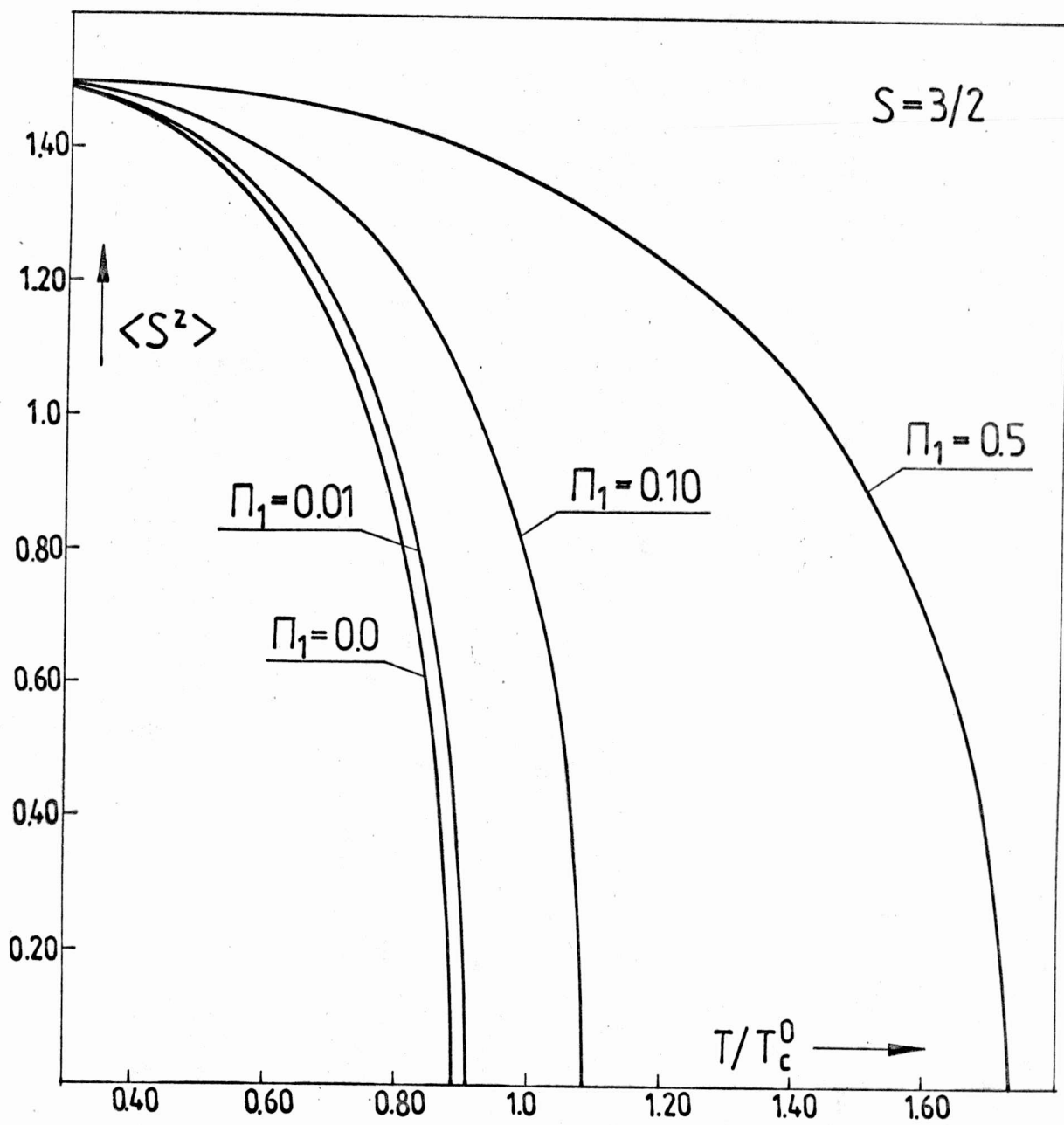
Rys. 11 d.



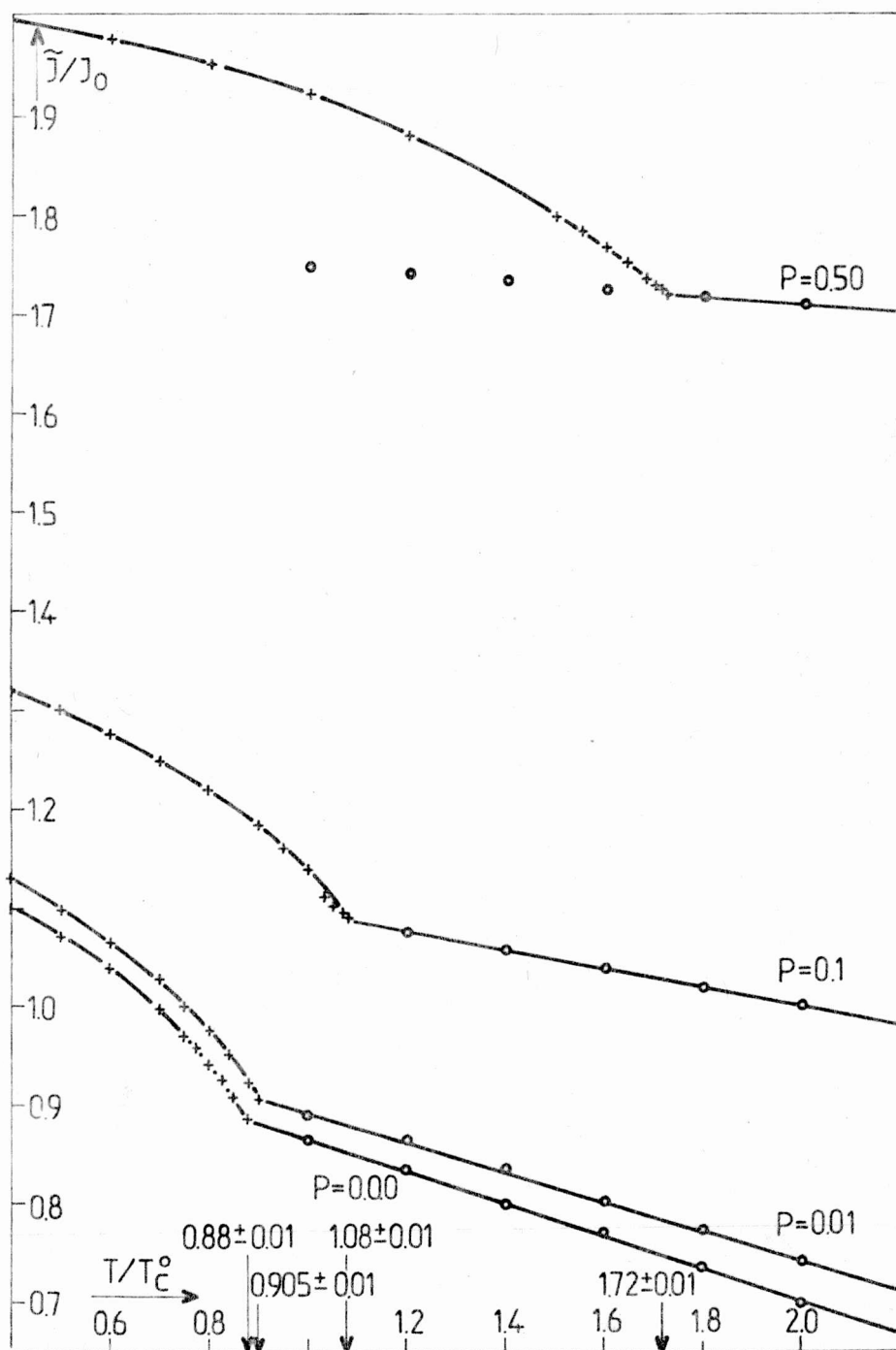
Rys. 12.



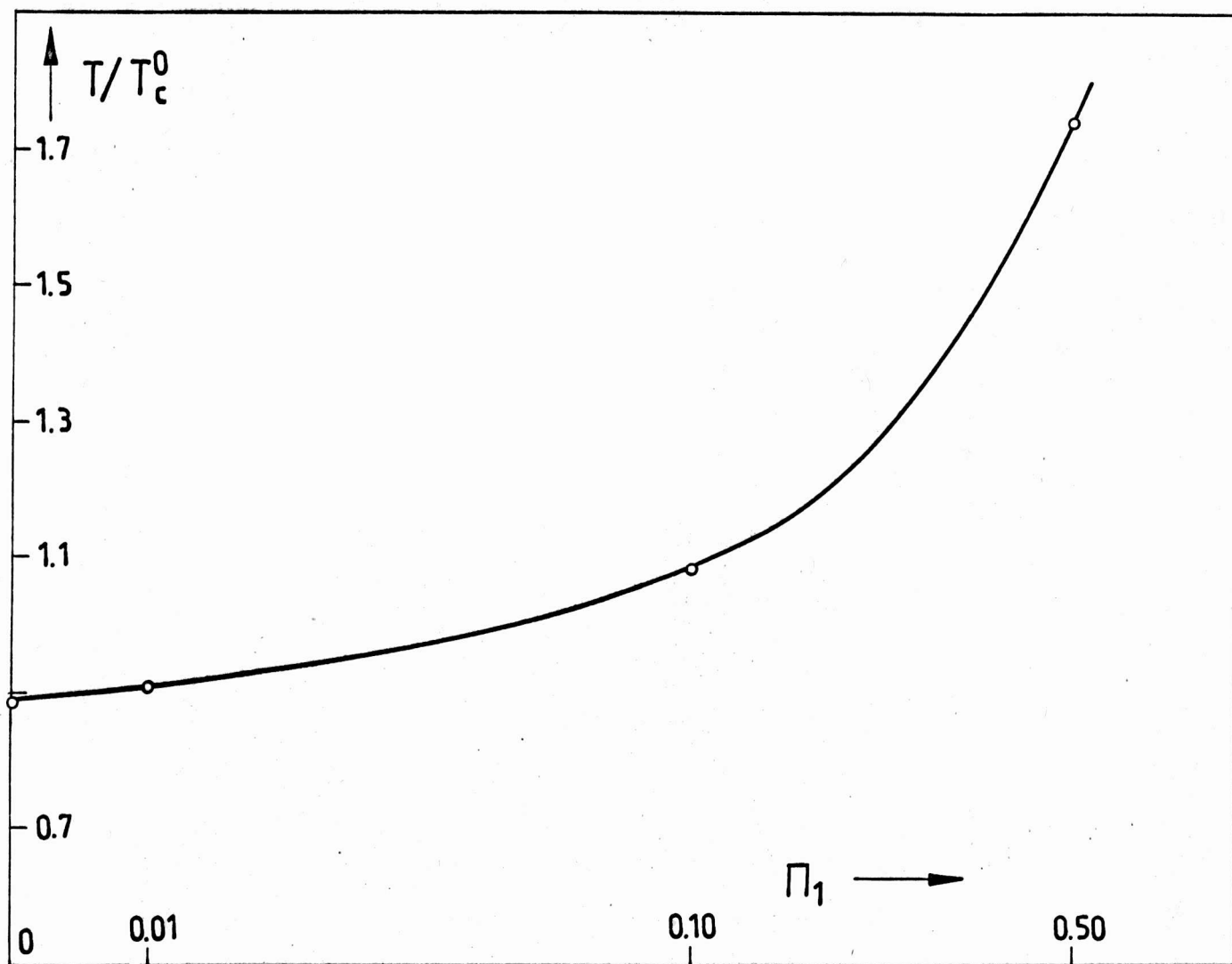
Rys. 13.



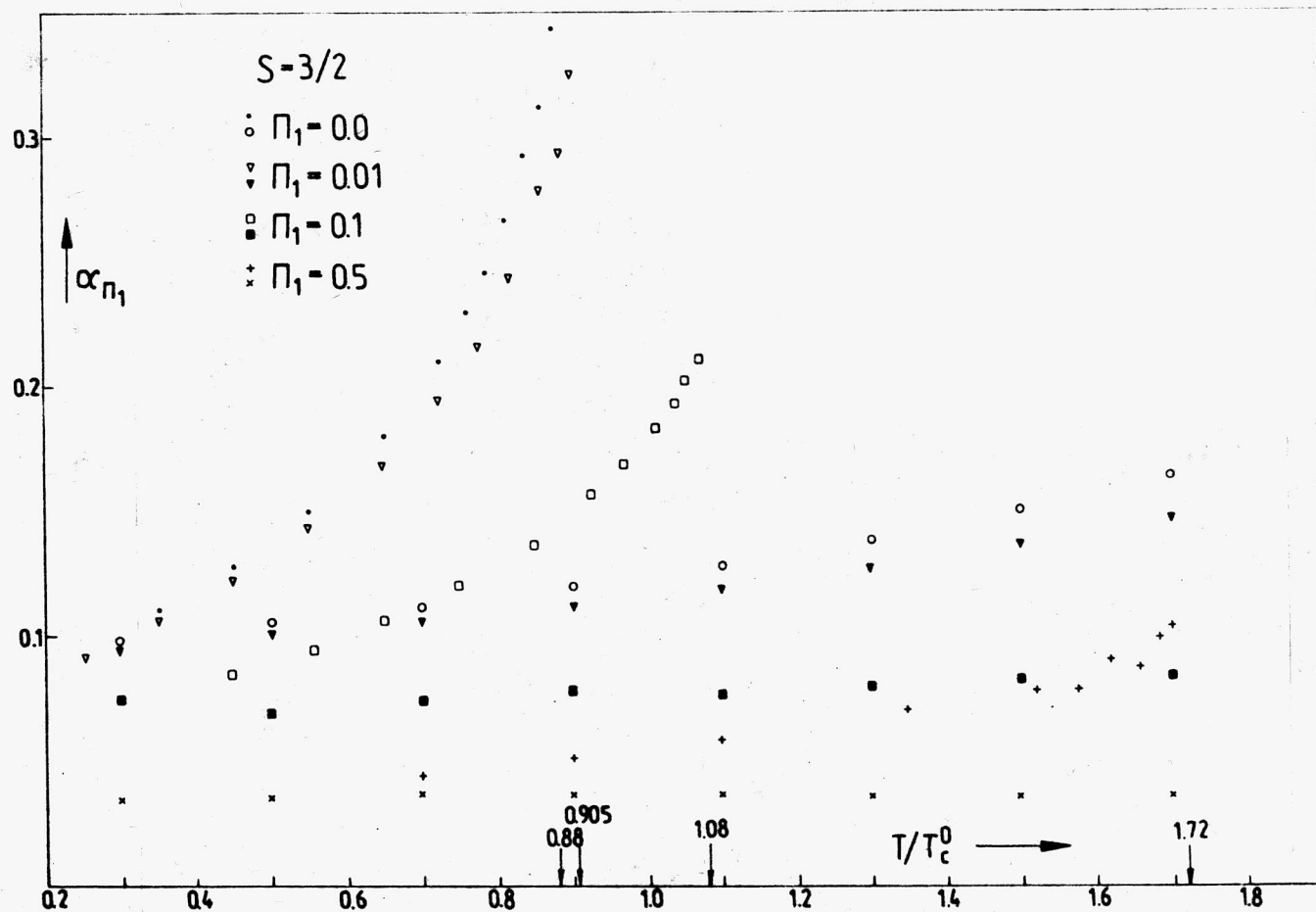
Rys. 14.



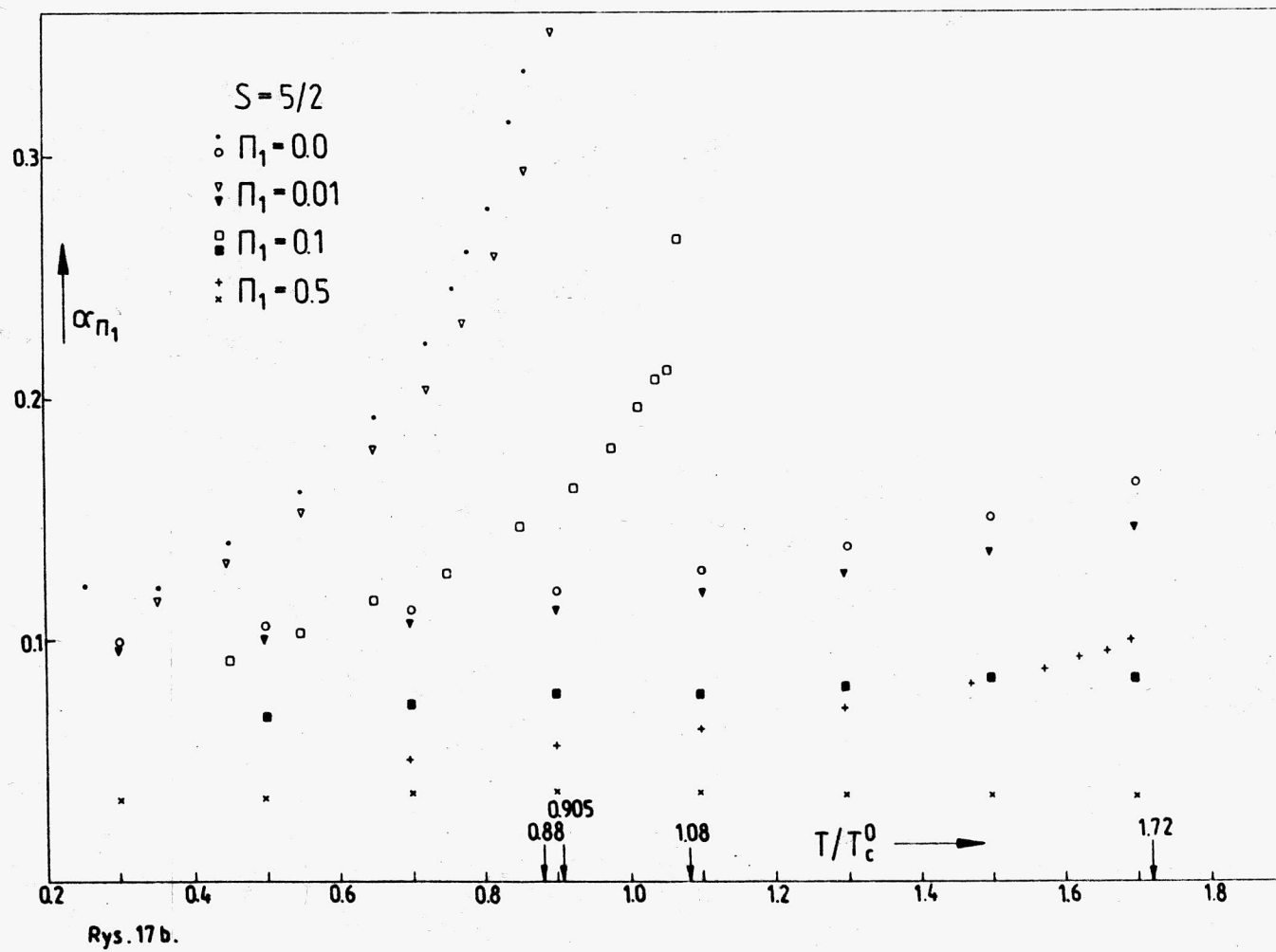
Rys. 15.

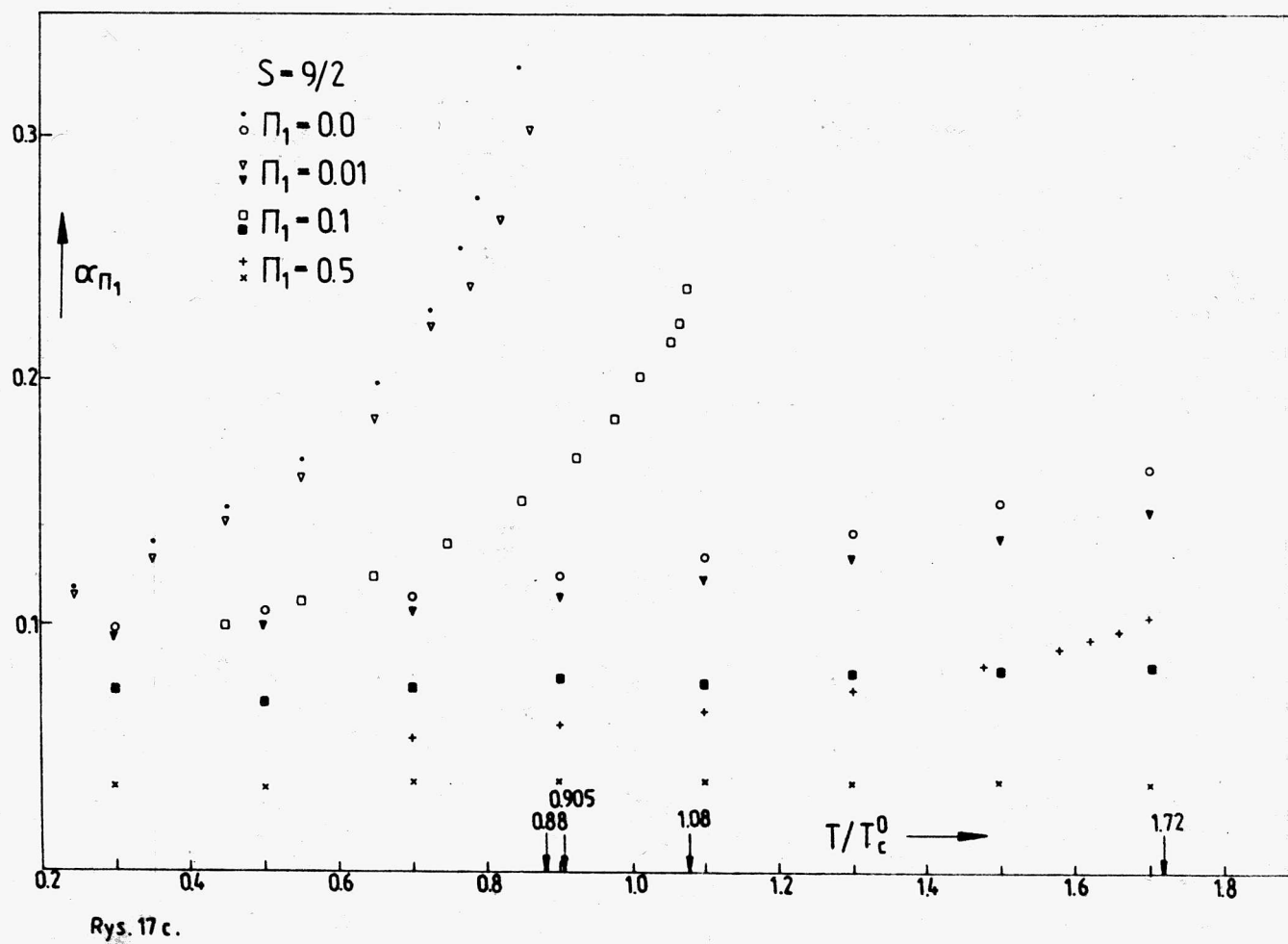


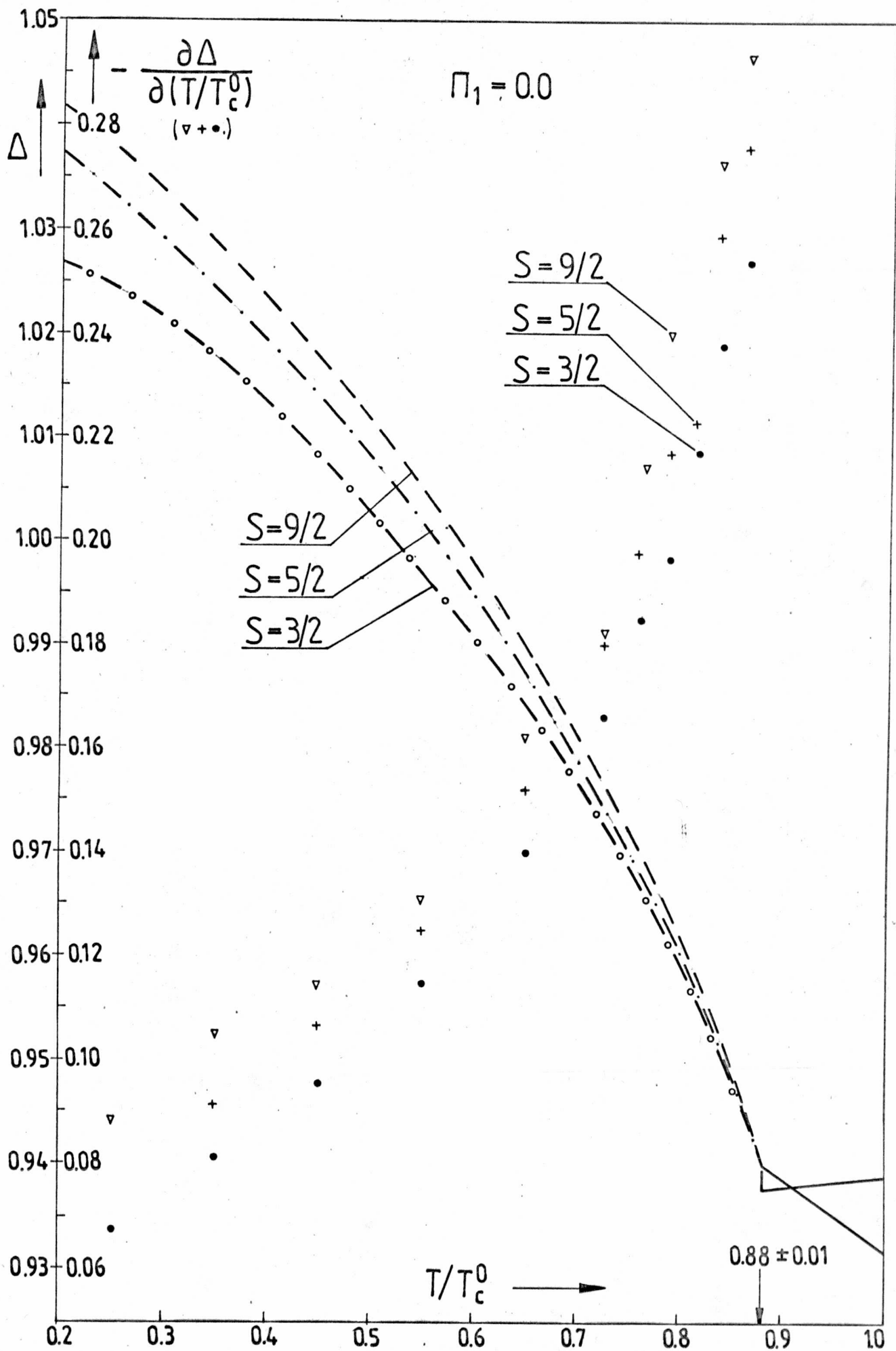
Rys. 16.

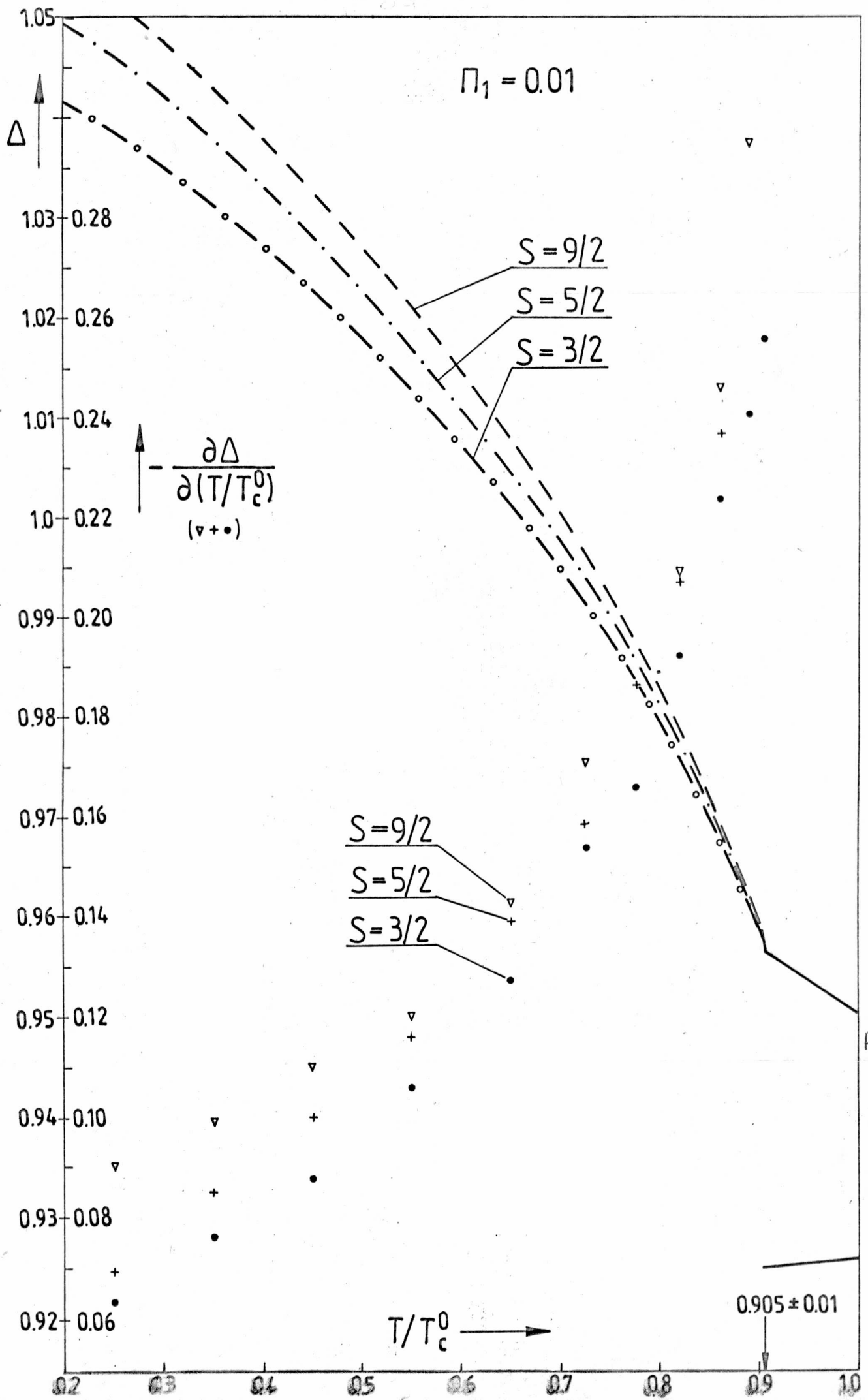


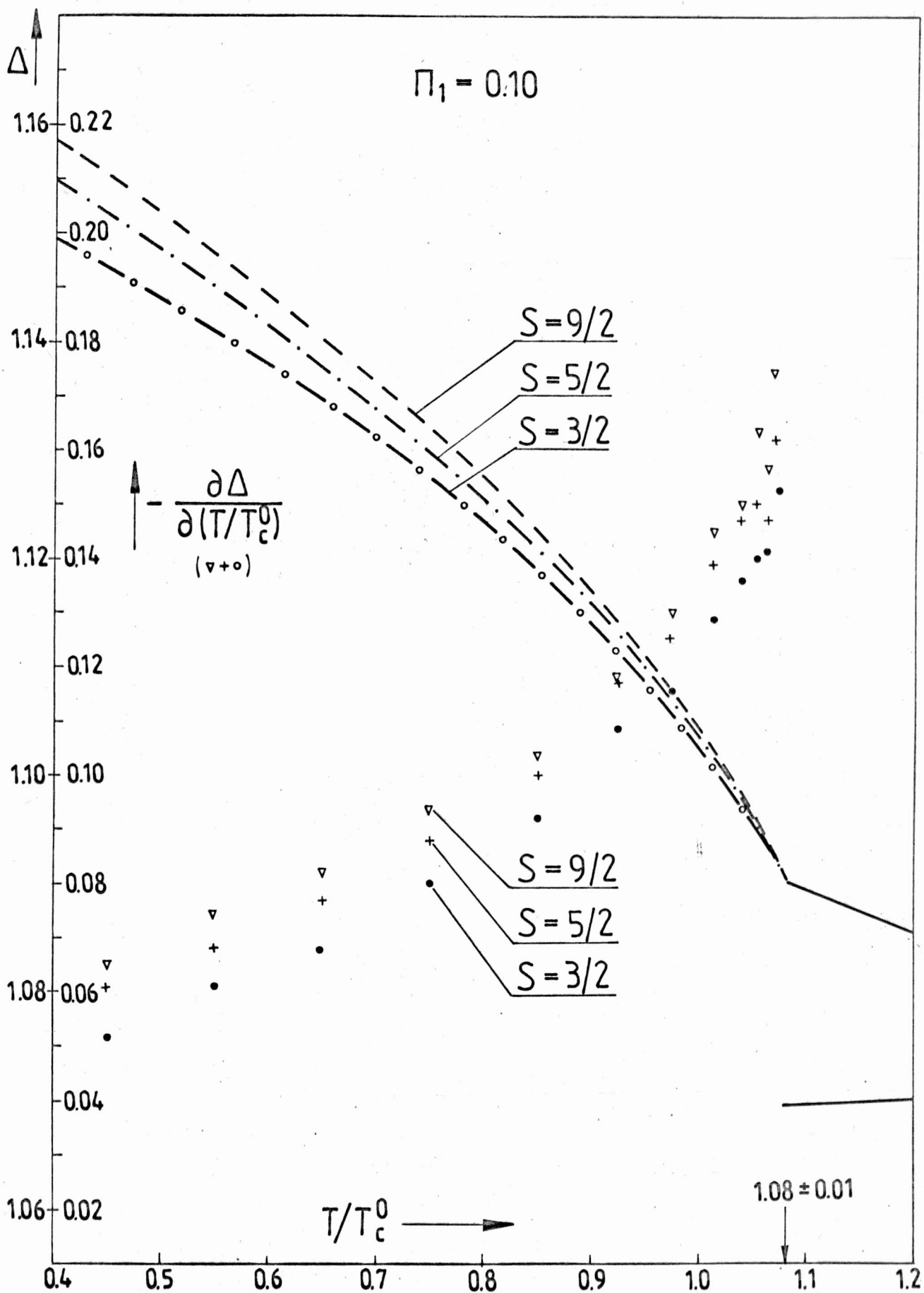
Rys. 17a.











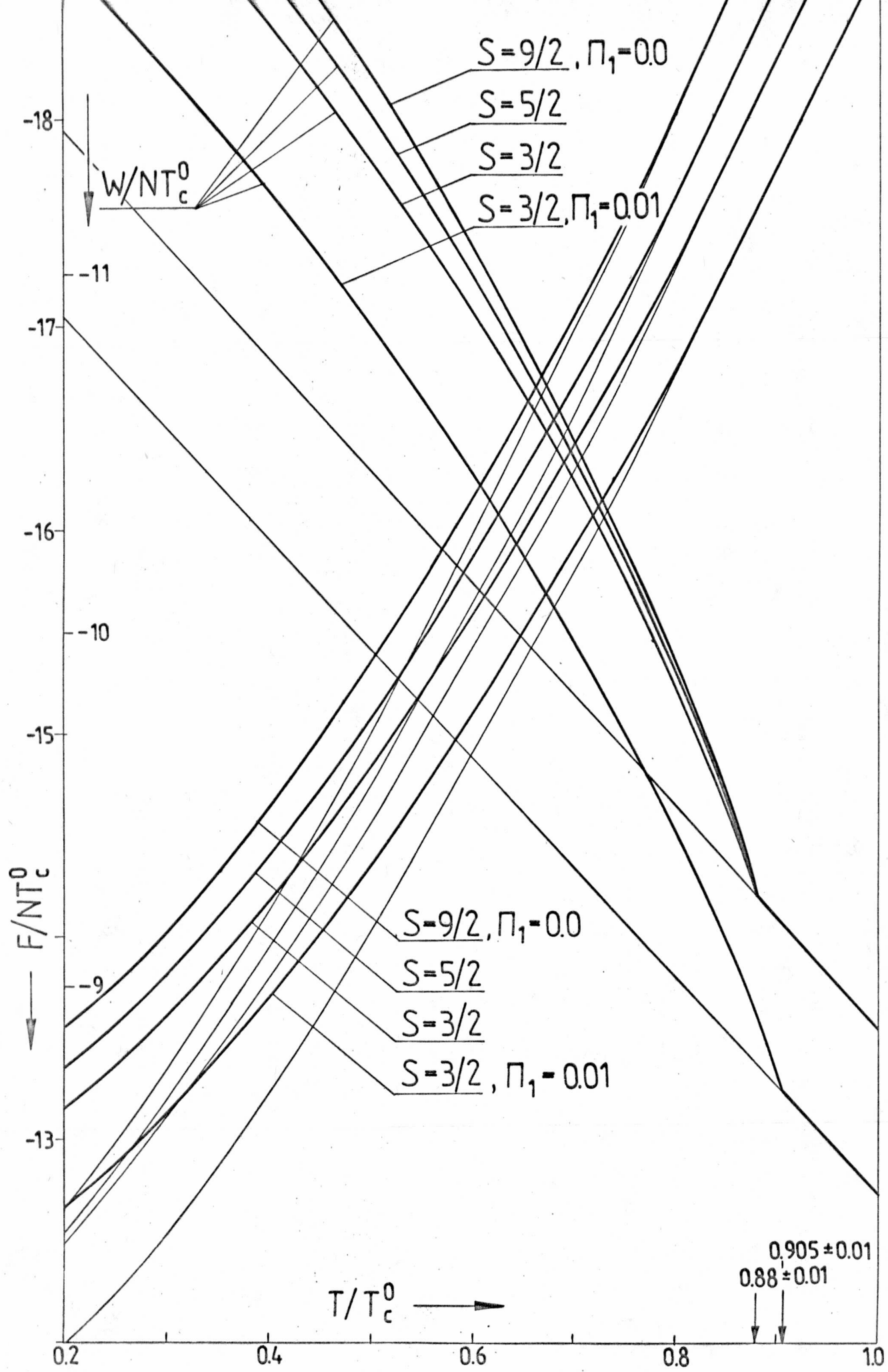
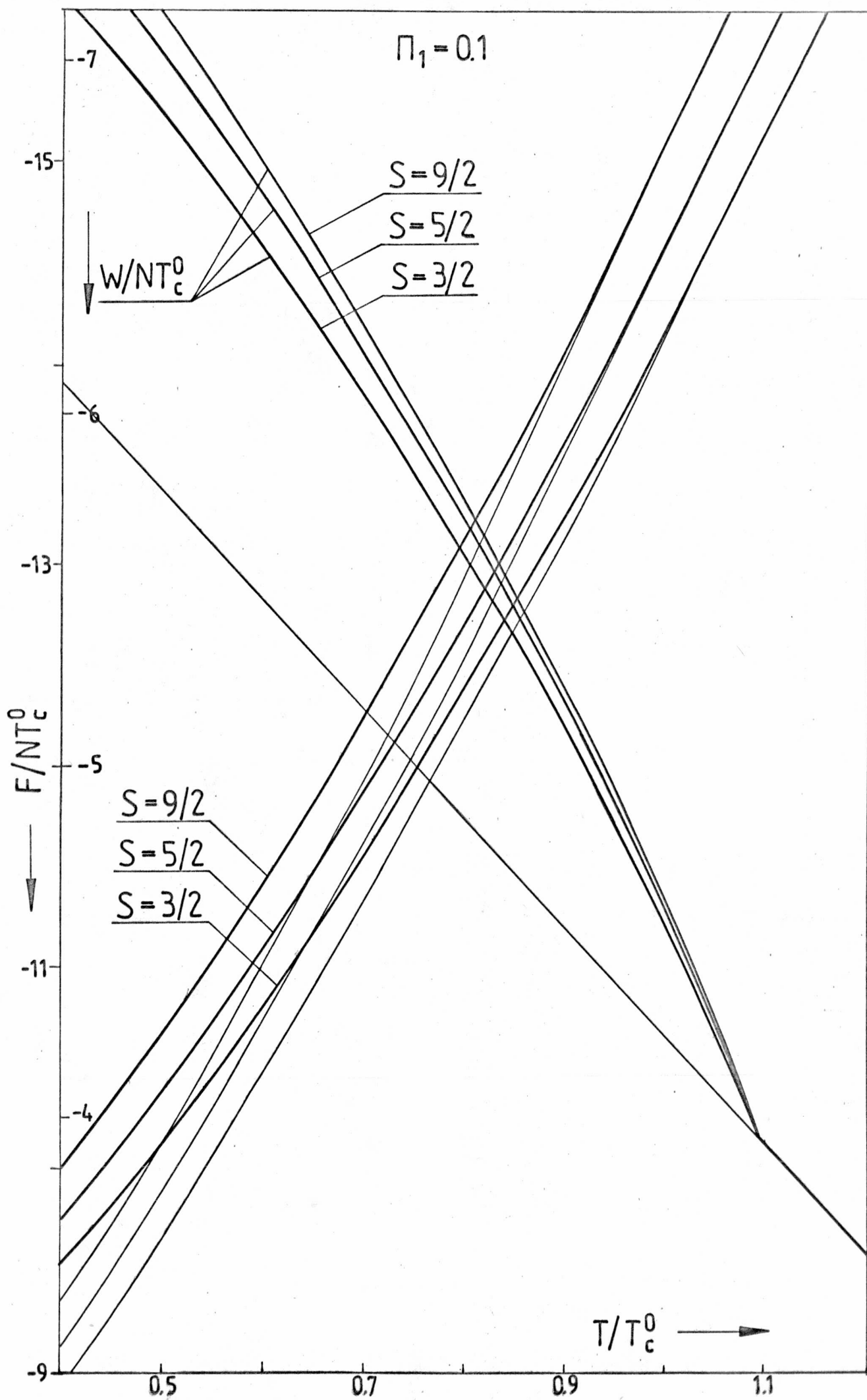
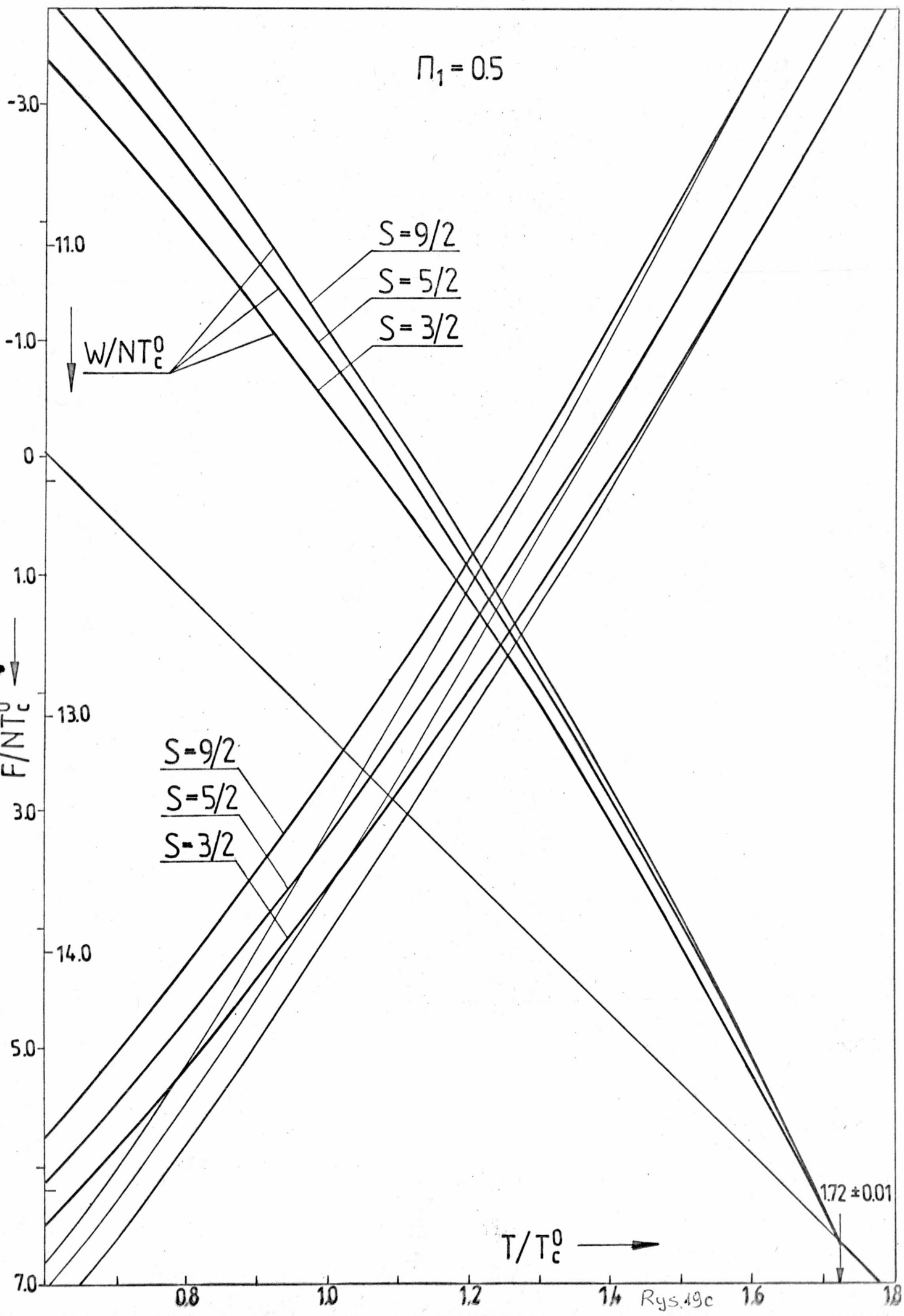
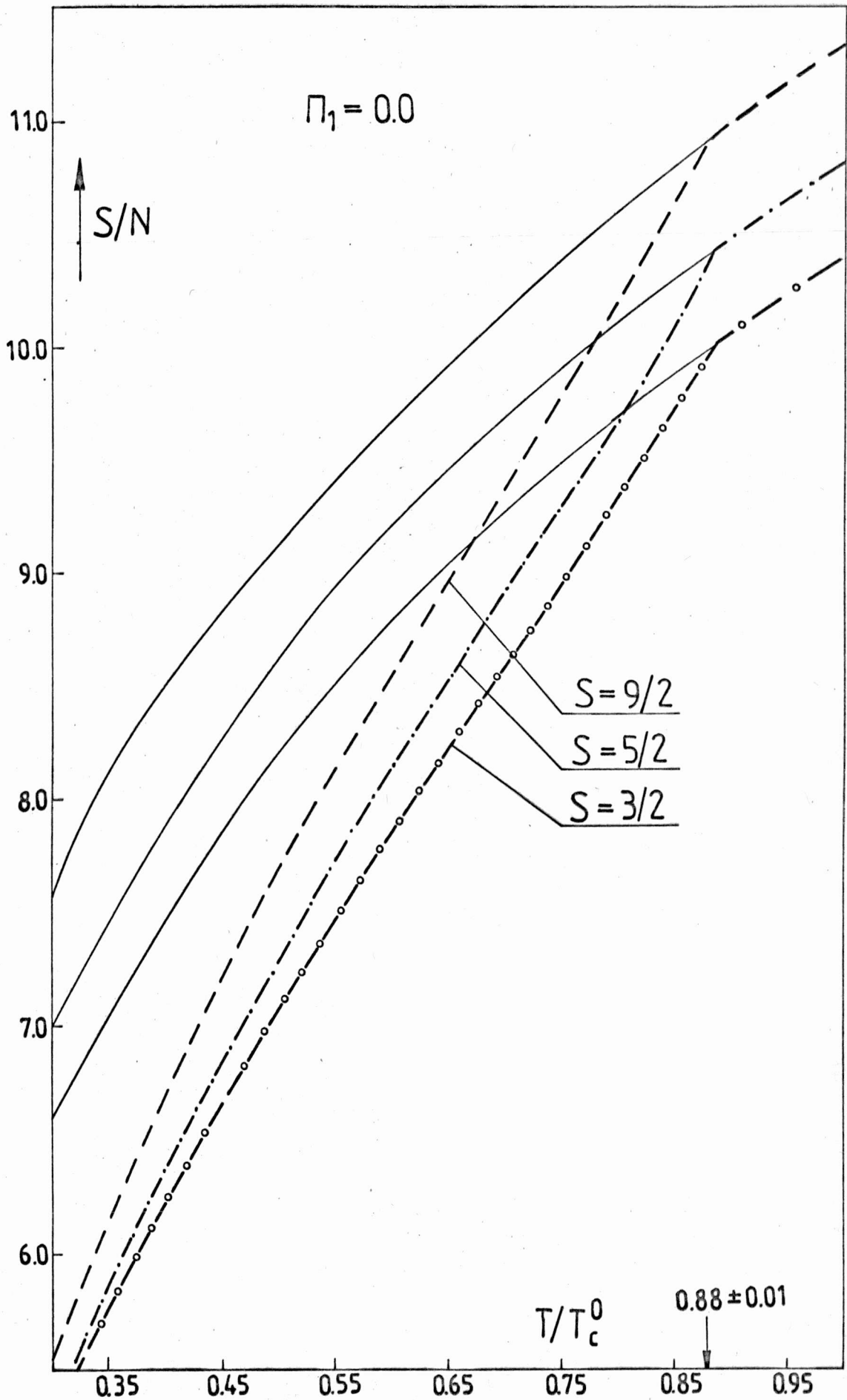


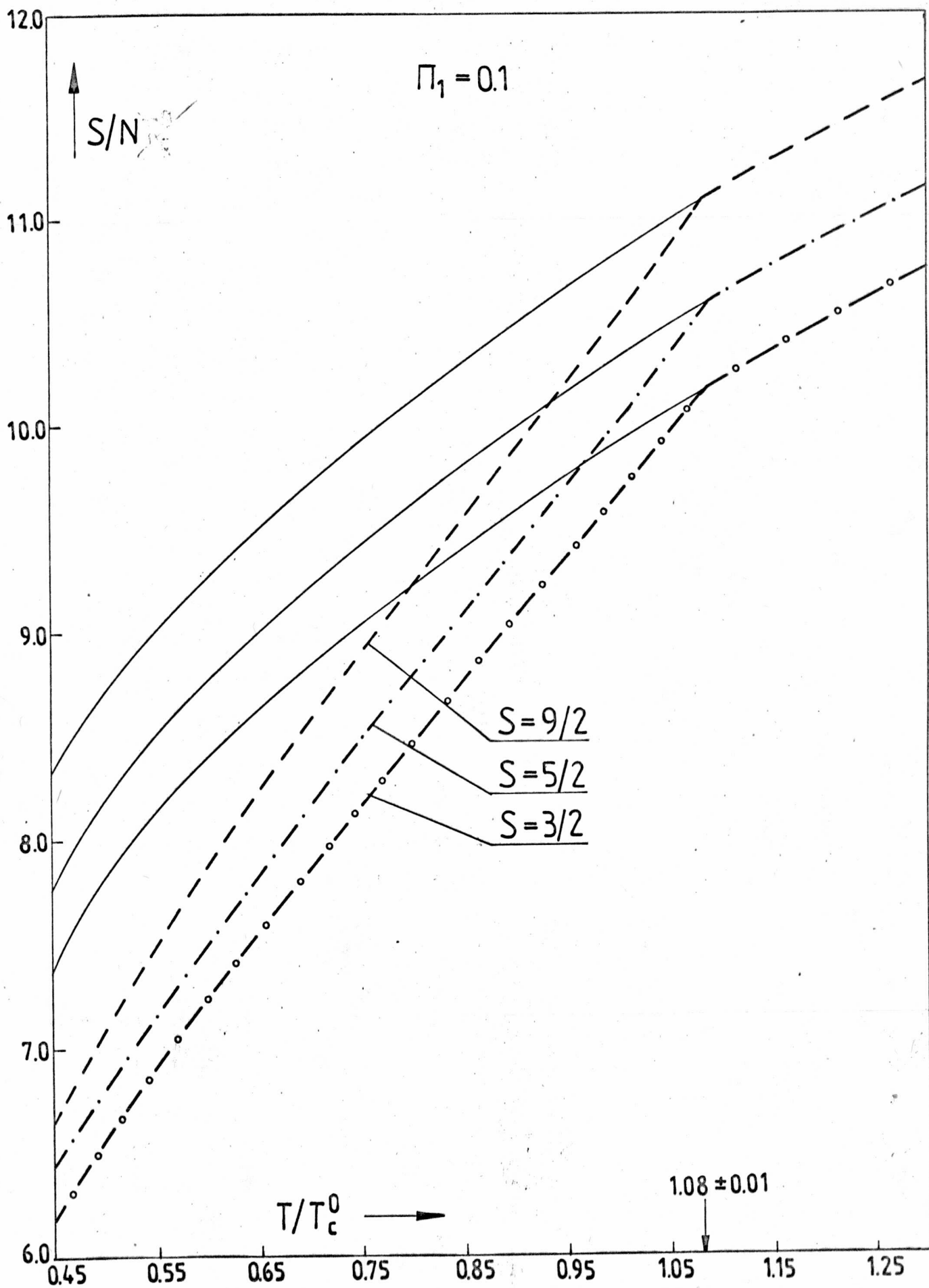
Рис. 19 а

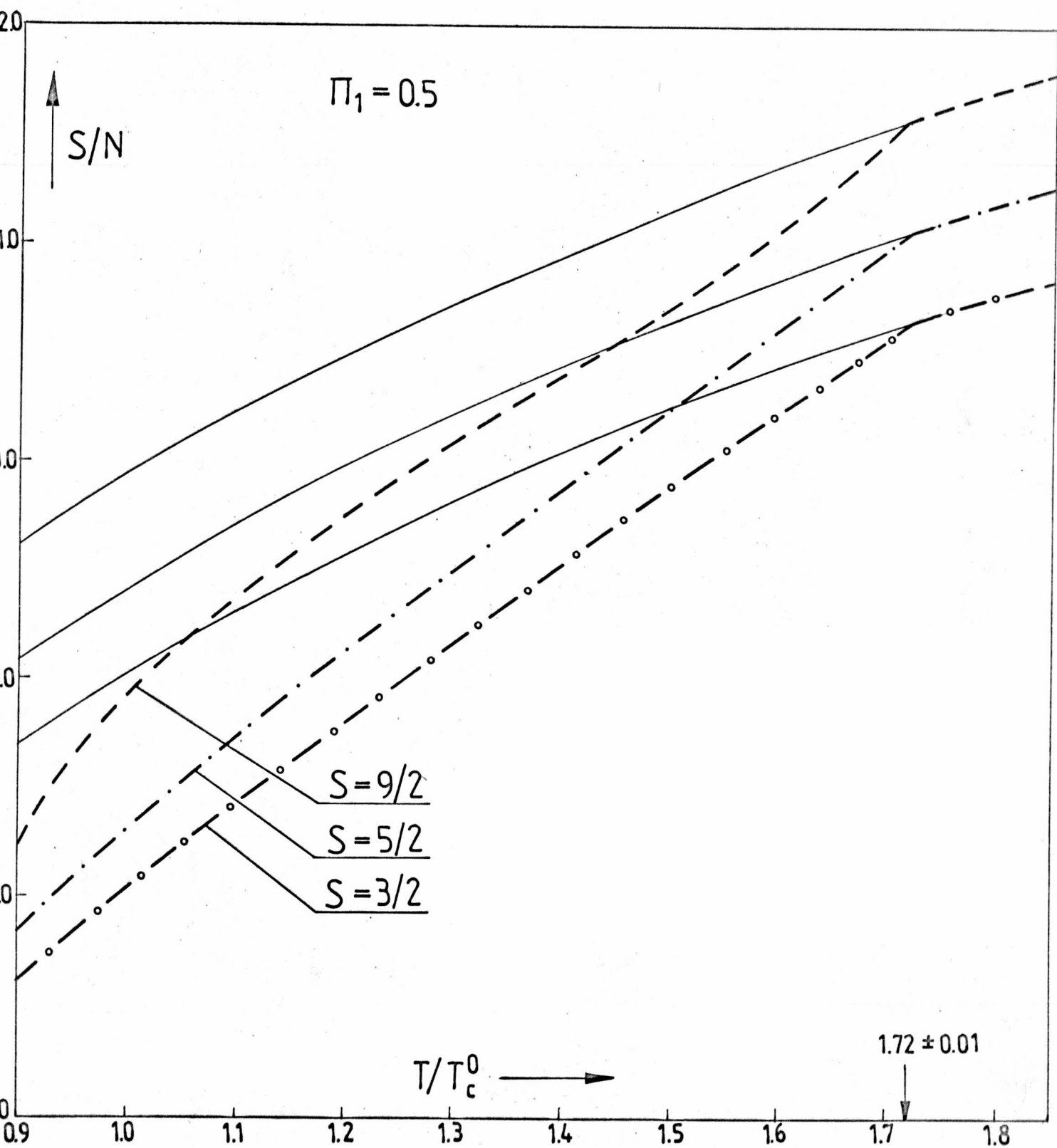


Rys. 19b

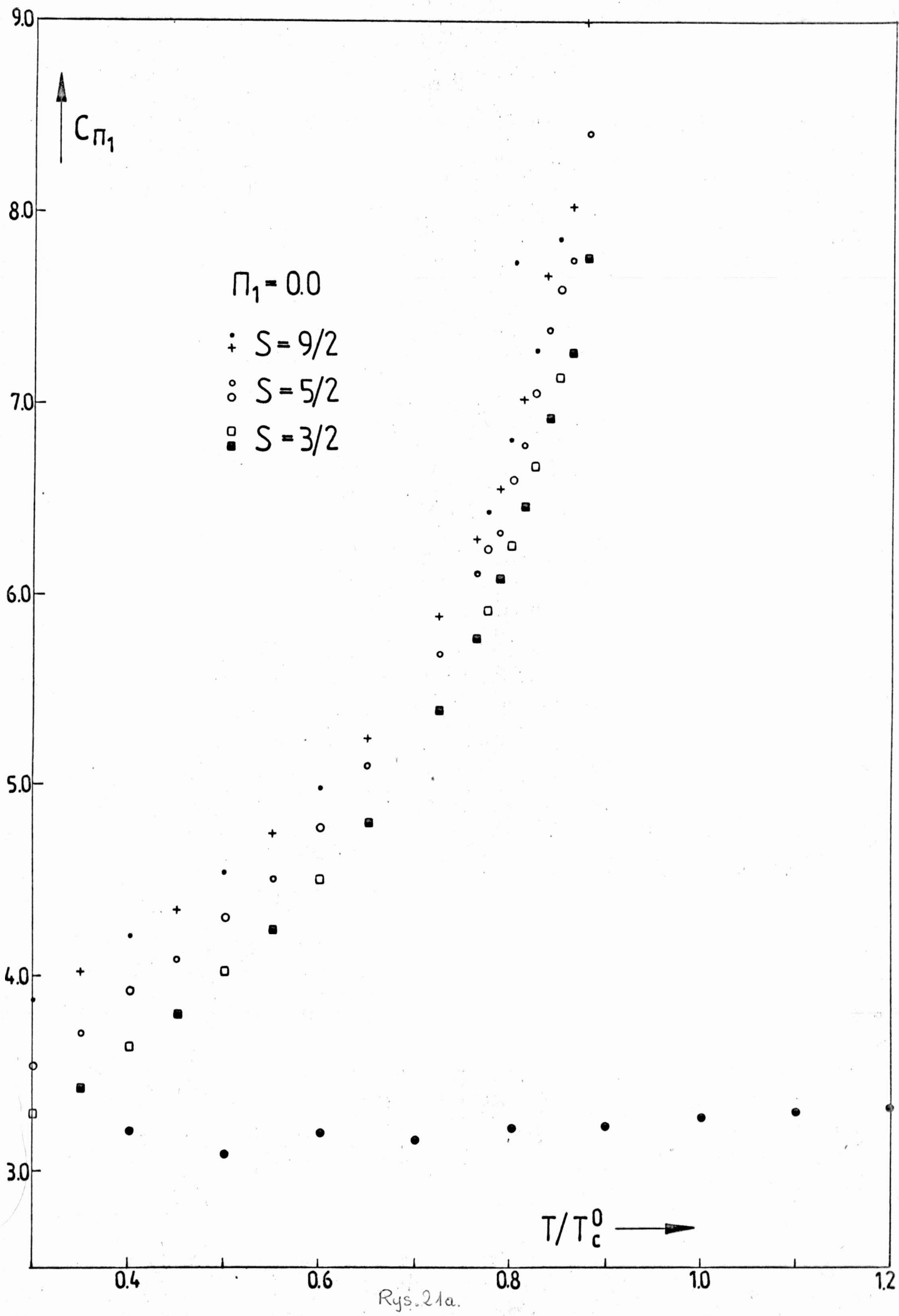


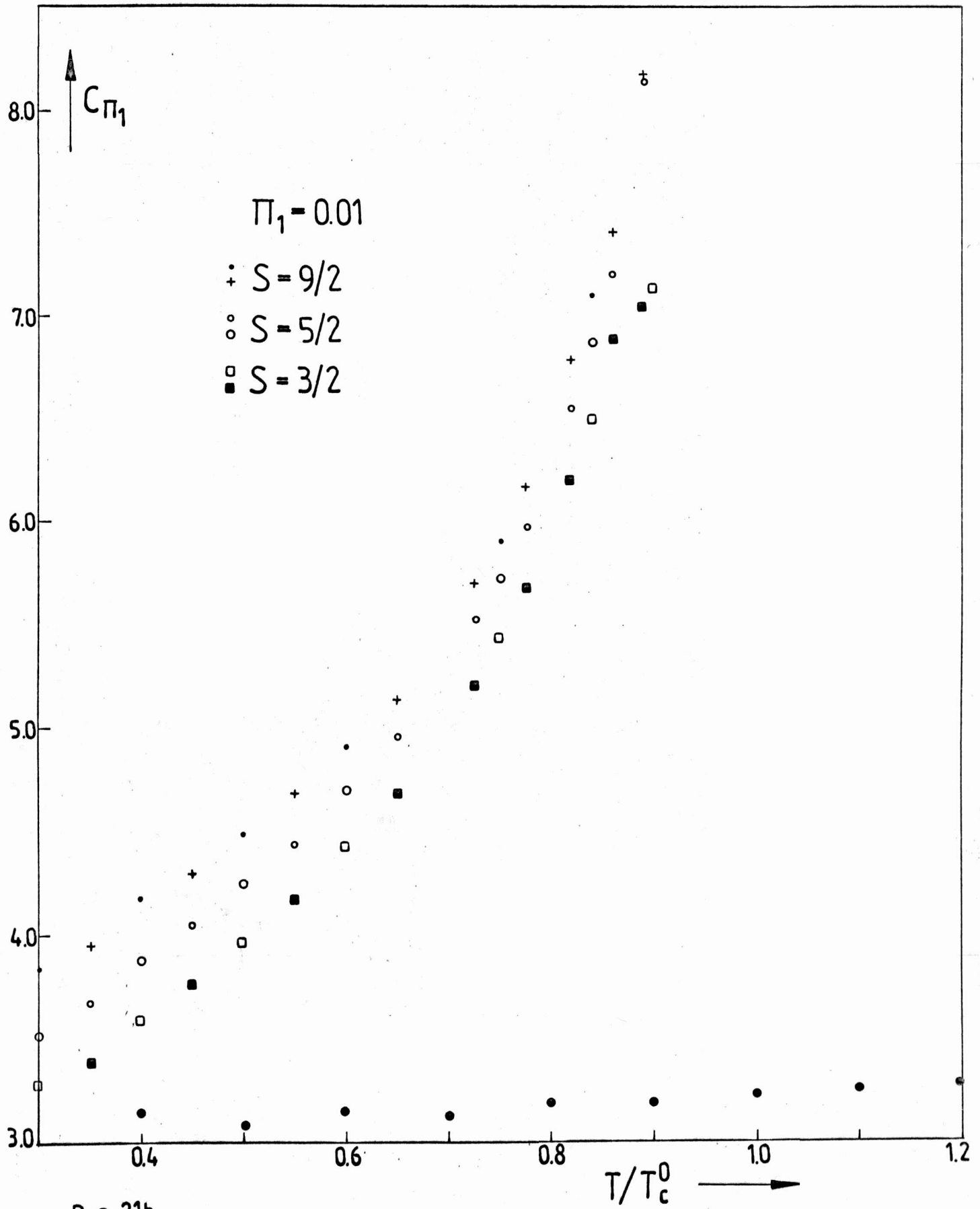




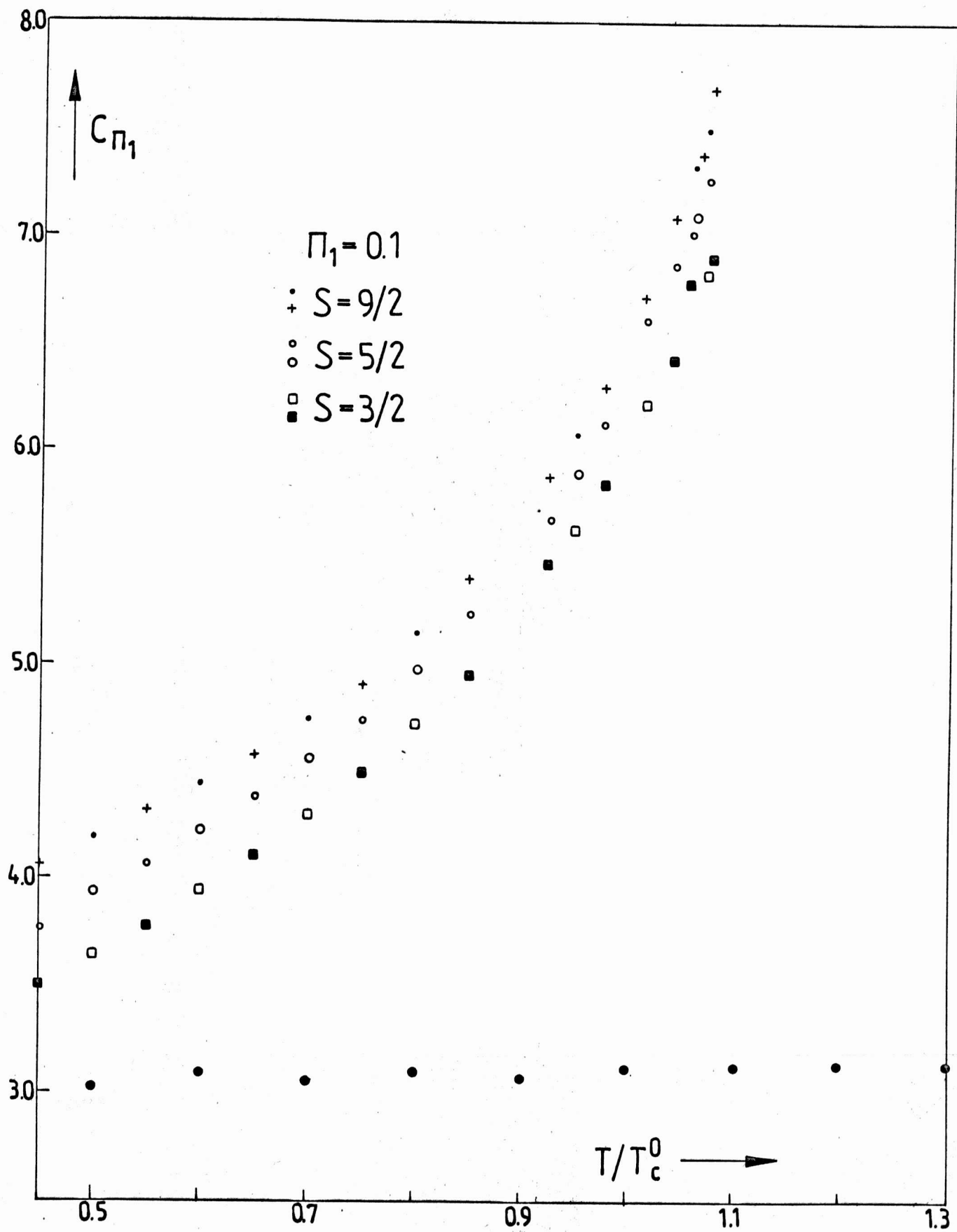


Rys. 20 c.





Rys. 21b.



Rys. 21c.

Opis rysunków

- Rys. 11a-d. Rozwiązania równań (3.3.1) - (3.3.3). Wykresy zależności ℓ/r_0 od $T = T/T_0^0$ przy podanych wartościach ciśnienia zredukowanego $\pi_1 = p$ oraz spinu S .
- Rys. 12. Rozwiązania równań (3.3.1) - (3.3.3). Wykresy zależności $\log_{10} \left(\frac{U^2(\ell)}{r_0^2} \right)$ od τ , dla $S = 3/2$ i podanych wartości π_1 .
- Rys. 13. Rozwiązania równań (3.3.1) - (3.3.3). Wykresy zależności $\sigma = \langle S^z \rangle / S$ od temperatury zredukowanej T^* (wzór (3.4.3)).
- Rys. 14. Zależność $\langle S^z \rangle$ od τ dla $S = 3/2$ i podanych wartości π_1 , otrzymane w wyniku rozwiązania numerycznego (3.3.1 - 3).
- Rys. 15. Wykresy zależności $\tilde{J}/J_0$ od τ dla $S = 3/2$ i podanych wartości π_1 . Strzałkami na osi odciętych zaznaczono wartości τ , przy których ma miejsce przejście fazowe w podukładzie magnetycznym.
- Rys. 16. Nieliniowa zależność temperatury przemiany fazowej T_0/T_0^0 od ciśnienia π_1 dla spinu $S = 3/2$.
- Rys. 17a-c. Wartości współczynnika objętościowej rozszerzalności cieplnej układu α_{π_1} (patrz (3.4.4)), w pobliżu temperatury przemiany fazowej, dla podanych S i π_1 .
- Rys. 18a-c. Wykresy zależności oznika Δ (patrz (3.3.4)) od τ , oraz wartości pochodnej $-\frac{d\Delta}{d\tau}$, w pobliżu T_0 , dla wybranych wartości S i π_1 .

Rys. 19a-c. Wykresy zależności energii swobodnej Gibbsa (3.3.5) oraz entalpii swobodnej (3.3.6) od τ , dla wybranych wartości spinu i ciśnienia.

Rys. 20a-c. Wyznaczone na podstawie relacji termodynamicznych (patrz (2.3.14)), zależności entropii (przypadającej na jedną cząstkę) od τ , dla podanych S i π_1 .

Rys. 21a-c. Wartości pojemności cieplnej $C\pi_1$ w pobliżu T_c dla podanych S i π_1 ; ($\cdot$), ($\circ$), ($\square$) to wartości $C\pi_1$ wyznaczone w oparciu o relację $C\pi_1 = \tau \left(\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \tau} \right)_{\pi_1}$, natomiast (+), ($\circ$), ($\blacksquare$) odpowiadają wartościom $C\pi_1 = \left(\frac{\partial (W/T_c^0)}{\partial \tau} \right)_{\pi_1}$.

3.5. Dynamika drgań sieci oraz termodynamiczne funkcje stanu. Metoda B.

Analizując numerycznie, modele Isinga z polem poprzecznym (paragraf 2.4) oraz Heisenberga (paragraf 3.4), nie rozwiązywano zagadnienia własnego dla macierzy dynamicznej (równanie 2.2.7). Przy wyprowadzaniu zamkniętego układu równań (paragrafy 2.3 i 3.3), przyjęliśmy dodatkowe założenie, że widmo częstości drgań sieci opisuje model Debey'a.

W tym paragrafie przedstawimy zastosowanie metod rozwiniętych w teorii kryształów anharmonicznych [104-111], do obliczenia dynamiki sieci oraz własności termodynamicznych anharmonicznego ferromagnetyka Heisenberga.

Przedmiotem naszych rozważań będzie model kryształu, sformułowany w paragrafach 2.3 i 3.3.

Z założeń tam przyjętych pominiemy jedynie założenie dotyczące widma częstości drgań sieci.

Mając na uwadze przejrzystość dalszych rozważań, przytoczymy zamknięty układ równań, który będziemy badali w tym paragrafie.

Równanie na wartości własne $\Omega^{(1)}(\bar{q}j)$ i wektory własne $\bar{e}(\bar{q}j)$ bezwymiarowej macierzy dynamicznej układu $D^{(1)}(\bar{q}j)$ ma postać

$$D_{\alpha\beta}^{(1)}(\bar{q})e_{\beta}(\bar{q}j) = \left(\Omega^{(1)}(\bar{q}j)\right)^2 e_{\alpha}(\bar{q}j) . \quad (3.5.1)$$

Macierz dynamiczna $\mathcal{D}(\bar{q})$ (patrz 2.2.7) jest związana z $\mathcal{D}'^{(1)}(\bar{q})$ relacją

$$\mathcal{D}(\bar{q}) = \Delta_{(1)}^2 \mathcal{D}'^{(1)}(\bar{q}) = \frac{4D_0 \alpha^2}{M} \Delta^2 \mathcal{D}'^{(1)}(\bar{q}), \quad (3.5.2)$$

gdzie

$$\Delta^2 = 2C_1(x,y) - C_2(x,y) - \frac{5\sigma^2}{8(s+1)} \left(\frac{B}{A}\right)^2 \frac{T_c^0}{D_0} C_3(x,y), \quad (3.5.3)$$

$$C_1(x,y) = \exp[2(y - A(x-1))], \quad (3.5.4a)$$

$$C_2(x,y) = \exp[y/2 - A(x-1)], \quad (3.5.4b)$$

$$C_3(x,y) = \exp\left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right]. \quad (3.5.4c)$$

Przedstawiając wektor falowy $\bar{q}$ w postaci $\bar{q} = \frac{2\pi}{\gamma_0}(\lambda, \mu, \nu)$, otrzymujemy [104]:

$$\mathcal{D}_{\beta\beta}^{(1)}(\bar{q}) = 2 - \cos(\pi\beta) [\cos(\pi\delta) + \cos(\pi\varepsilon)] \quad (3.5.5)$$

$$\text{dla } \beta \neq \delta, \beta \neq \varepsilon, \delta \neq \varepsilon,$$

$$\mathcal{D}_{\beta\delta}^{(1)}(\bar{q}) = \sin(\pi\beta) \sin(\pi\delta) \quad (3.5.6)$$

$$\text{dla } \beta \neq \delta.$$

Wartości własne $\Omega(\bar{q}_j)$ macierzy $\mathcal{D}(\bar{q})$ są związane z $\Omega^{(1)}(\bar{q}_j)$ relacją

$$\Omega(\bar{q}_j) = \frac{1}{2} \Omega_{\max} \cdot \Delta \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}_j), \quad (3.5.7)$$

$$\text{gdzie } \Omega_{\max} = 4A \cdot \sqrt{D_0 / M \gamma_0^2}$$

jest maksymalną częstotliwością drgań sieci.

Równanie stanu układu oraz równanie dla $\sigma = \langle S^z \rangle / S$ mają postać :

$$\mathcal{T}_1 \cdot X^2 - C_1(x, y) + C_2(x, y) + \frac{S\sigma^2}{8(S+1)} \frac{T_c^0}{D_0} \frac{B}{A} C_3(x, y) = 0, \quad (3.5.8)$$

$$\begin{aligned} \sigma - \frac{2S+1}{2S} \coth \left[\frac{3\sigma(2S+1)C_3(x, y)}{2(S+1)T/T_c^0} \right] + \\ + \frac{1}{2S} \coth \left[\frac{3\sigma C_3(x, y)}{2(S+1)T/T_c^0} \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.5.9)$$

Funkcja korelacji y , dla $\bar{l} = \bar{l}_{nn} = \frac{\alpha_0}{2} (1, 1, 0)$ jest równa

$$y = \frac{1}{8} \frac{\Omega_{\max}}{D_0} \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}_j} \frac{[e_\lambda(\bar{q}_j) + e_\mu(\bar{q}_j)]^2}{\Delta \cdot \Omega^{(n)}(\bar{q}_j)} \times \quad (3.5.10)$$

$$\times \left[1 - \cos \pi(\lambda + \mu) \right] \coth \left(\frac{\Delta \cdot \Omega^{(n)}(\bar{q}_j)}{2T/T_c^0} \right).$$

Energia swobodna Gibbsa $\tilde{F}_G/T_c^0$ oraz entalpia $\tilde{W}/T_c^0$ są równe :

$$\begin{aligned}
 \widetilde{F}_G / T_c^0 &= \frac{6 \cdot D_0}{T_c^0} [C_1(x, y) - 2 C_2(x, y)] + \frac{3 \sigma^2 \cdot S \cdot C_3(x, y)}{2(S+1)} \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \left\{ \frac{T}{T_c^0} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Delta \cdot \Omega_{max} \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}j)}{4 T} \right) \right] \right. \\
 &- \frac{\Delta \cdot \Omega_{max} \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}j)}{8 T_c^0} \coth \left[\frac{\Delta \cdot \Omega_{max} \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}j)}{4 T} \right] \Big\} \\
 &- \frac{T}{T_c^0} \ln \left\{ \frac{\sinh [3(2S+1) \sigma C_3(x, y) / ((S+1) T / T_c^0)]}{\sinh [3 \cdot \sigma \cdot C_3(x, y) / ((S+1) T / T_c^0)]} \right\} + 4 \pi_1 \cdot A \cdot x^3 \cdot \frac{D_0}{T_c^0},
 \end{aligned} \tag{3.5.11}$$

$$\begin{aligned}
 \widetilde{W} / T_c^0 &= \frac{6 D_0}{T_c^0} [C_1(x, y) - 2 C_2(x, y)] - \frac{3 \sigma^2 \cdot S \cdot C_3(x, y)}{2(S+1)} \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \frac{\Delta \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}j) \Omega_{max}}{8 T_c^0} \coth \left[\frac{\Delta \cdot \Omega_{max} \cdot \Omega^{(1)}(\bar{q}j)}{4 T} \right] \\
 &+ 4 \cdot \pi_1 \cdot A \cdot x^3 \cdot \frac{D_0}{T_c^0}.
 \end{aligned} \tag{3.5.12}$$

W powyższych formułach zastosowano te same oznaczenia, co w poprzednim paragrafie.

Wzory (3.5.1) , (3.5.8) oraz (3.5.9) tworzą zamknięty układ równań na wektory i wartości własne macierzy dynamicznej układu oraz na $x = \ell/r_0$ i $\sigma = \langle s^2 \rangle / S$.

3.6. Wyniki obliczeń numerycznych.

Równanie (3.5.1) , (3.5.8) , (3.5.9) rozwiązywano numerycznie dla następujących wartości parametrów modelu :

$$\frac{T_c^0}{D_0} = 0.525 \quad , \quad \frac{T_c^0}{\Omega_{max}} = 5.25 \quad (3.6.1a)$$

i

$$\frac{T_c^0}{D_0} = 0.1 \quad , \quad \frac{T_c^0}{\Omega_{max}} = 5.0 \quad (3.6.1b)$$

oraz

$A=6$, $B=12$ przy różnych wartościach spinu S i ciśnienia π_1 . Z uwagi na to, że $T_D = 1.05 \Omega_{max}$ [131] wybór wartości (3.6.1a) i (3.6.1b) można wyrazić przez parametry stosowane w paragrafach 2.3 i 3.3. Wtedy

$$T_c/T_D = 5 \quad , \quad T_D/D_0 = 0.105 \quad (3.6.1a)$$

$$T_c/T_D = 5.25 \quad , \quad T_D/D_0 = 0.021 \quad (3.6.1b)$$

Procedura obliczeń numerycznych przy zadanych π_1 i T/T_c^0 była następująca [104] :

Macierz dynamiczną $D''(\bar{q})$ (3.5.1) diagonalizowano metodą Jacobiego [104, 132] dla określonej liczby N_f wektorów falowych z nieredukowalnej części pierwszej strefy Brillouin'a (patrz rys.22).

Obliczenia przeprowadzono dla $N_f = 88 (S = \frac{1}{2})$ i $N_f = 239 (S > \frac{1}{2})$ co odpowiadało odpowiednio 2041 lub 6947 wektorom falowym w pierwszej strefie Brillouin'a kryształu. Diagonalizację macierzy dla każdego $\bar{q}$ przerywano, jeśli wartość bezwzględna największego elementu pozadiagonalnego $D''(\bar{q})$ (3.5.6), była mniejszą od 10^{-5} . Otrzymane z procesu diagonalizacji

$D''(\bar{q})$ wartości własne i wektory własne pozwalały, przy wykorzystaniu wszystkich operacji symetrii grupy punktowej kryształu O_h , obliczyć wartość y (3.5.10). Dla wyznaczonej w ten sposób wartości funkcji korelacji y rozwiązano równanie stanu (3.5.8) oraz równanie (3.5.9).

Obliczone, z rozwiązań (3.5.8), (3.5.9), wartości $x = \ell/r_0$, σ umożliwiały wyznaczenie czynnika Δ (3.5.3).

Następnie otrzymaną wartość Δ stosowano do ponownego wyznaczenia y z równania (3.5.10).

Gdy różnica między wartościami y w dwóch kolejnych krokach iteracyjnych była mniejszą od 0,001, obliczenia przerywano. Wyniki obliczeń przedstawiono na rysunkach 23-31.

Rysunek 23 przedstawia histogram wartości własnych macierzy $D''(\bar{q})$ dla $N_f = 239$; na osi odciętych odłożono bezwymiarową energię.

Zależność parametru porządku σ , odległości między atomami ℓ/r_0 oraz funkcji korelacji y wychyleń atomów z położeń równowagi od temperatury T/T_c^0 i ciśnienia π_1 , przy podanych wartościach parametrów modelu efektywnego spinu S

przedstawiają rysunki 24a - d.

Rysunki 25a - b, 26a - b, zawierają zależności energii swobodnej Gibbsa $\tilde{F}_G/T_c^0$, entalpii $\tilde{W}/T_c^0$ oraz entropii od temperatury przy podanych wartościach innych parametrów.

Zachowanie się pojemności cieplnej C_{π_1} , współczynnika cieplnej rozszerzalności układu $\mathcal{L}_{\pi_1}$, czynnika renormalizacji częstości wrażeń Δ oraz jego pochodnej względem temperatury $-d\Delta/d\tau$, w pobliżu punktu przemiany fazowej przedstawiają rysunki 27a - d, 28a - b.

Na rysunku 29 zestawiono rozwiązania samouzgodnionego układu równań dla $B = 12$, $B = 18$, $A = 6$; inne parametry określa (3.6.1a) .

Rysunki 30 - 36 przedstawiają rozwiązania równań 3.5.1 , 3.5.8 , 3.5.9 , dla wartości parametrów modelu, danych przez 3.6.1b i $S = \frac{1}{2}$, oraz obliczone na tej podstawie charakterystyczne wielkości i funkcje termodynamiczne układu.

3.7. Dyskusja otrzymanych rezultatów.

Przy zastosowanych wartościach parametrów (3.4.1), (3.6.1) przemiana fazowa w podukładzie magnetycznym jest drugiego rodzaju. Jest to zgodne z oszacowaniem Zagrebnowa i Fedjanina [54] . Użyte przez nas wartości parametrów (3.4.1), (3.6.1) odpowiadają wartości stałej oddziaływania spinowo-fononowego (J_0/D_0), przy której w ściślim układzie spinowym zachodzi ciągłe przejście fazowe.

Wyniki numeryczne wskazują na to, że w rozważanym modelu (porównaj rys.29), dla dostatecznie dużych wartości B , jest możliwe przejście fazowe I rodzaju.

Szerszą dyskusję tego problemu zamieszczono w dodatku A.

Oddziaływanie spinowo-fononowe, którego źródłem jest zależność całki wymiany od chwilowych odległości między atomami, wpływa na własności fizyczne układu.

Wartość zredukowanej odległości między najbliższymi atomami, w fazie uporządkowanej $x_{\sigma \neq 0} = (l/r_0)$, jest mniejsza od wartości jaką przyjmuje x , bez uwzględniania oddziaływania spinowo-fononowego.

Rząd wielkości tego efektu określa w danej temperaturze wyrażenie

$$\frac{B}{A} \cdot \frac{T_c^\circ}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{S\sigma^2}{8(S+1)} \cdot \exp\left[\frac{\gamma}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 - B(x-1)\right]. \quad (3.7.1)$$

Przy użytych w obliczeniach wartościach parametrów występujących w (3.7.1), oddziaływanie spinowo-fononowe daje poprawki do $x = l/r_0$, które w niskich temperaturach (w zależności od wartości S) są rzędu 4 - 13 % (rys. 11a-d, 24a-d, 29, 30a-d). Współczynnik rozszerzalności cieplnej układu określają: rozszerzalność cieplna kryształu anharmonicznego oraz omówiona wyżej zależność l/r_0 od σ . Z równania stanu (równanie (3.3.2) lub (3.5.8)), dla współczynnika liniowej rozszerzalności cieplnej

$$\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)} = \frac{1}{X(\tau)} \frac{dX(\tau)}{d\tau}, \quad (3.7.2)$$

gdzie $X(\tau) = l/r_0$, $\tau = T/T^0$ otrzymujemy

$$\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)} = \frac{1}{Z_1} \left[Z_2 \frac{dy}{d\tau} - Z_3 \sigma \frac{d\sigma}{d\tau} \right], \quad (3.7.3)$$

gdzie (ω oznaczeniach paragrafu 3.5)

$$Z_1 = X \left\{ 2 \cdot \Pi_1 \cdot X + 2A \cdot C_1(x,y) - A \cdot C_2(x,y) - \frac{B^2}{A} \cdot \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{S}{8(S+1)} C_3(x,y) \right\}, \quad (3.7.4)$$

$$Z_2 = 2 \cdot C_1(x,y) - \frac{1}{2} C_2(x,y) - \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^3 \sigma^2 \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{S}{8(S+1)} C_3(x,y), \quad (3.7.5)$$

$$Z_3 = 2 \frac{B}{A} \cdot \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{S}{8(S+1)} C_3(x,y). \quad (3.7.6)$$

Z wyrażenia (3.7.2) wynika, że dla $T \rightarrow T_c$, dominujący wkład do $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}$ wnosi człon oddziaływania spinowo-fononowego

$-(Z_3/Z_1) \sigma d\sigma/d\tau$, który powoduje gwałtowny wzrost $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}$ w pobliżu punktu przemiany fazowej (patrz rysunki 17a-c, 22b-d, 31a-d).

W przybliżeniu pola samouzgodnionego w punkcie przemiany fazowej $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}$ doznaje skoku, którego wartość jest wielkością skończoną, określoną następującym wyrażeniem :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau_c) &= \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau \rightarrow \tau_c^-) - \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau \rightarrow \tau_c^+) = \\ &= \frac{Z_3[x(\tau_c), y(\tau_c)]}{Z_1[x(\tau_c), y(\tau_c)]} \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \left[\sigma(\tau) \frac{d\sigma(\tau)}{d\tau} \right]. \end{aligned} \quad (3.7.8)$$

W fazie ferromagnetycznej, w danej temperaturze $\tau < \tau_c^\circ$ ($\tau_c^\circ = T_c / T_c^\circ$), częstości drgań sieci $\Omega_{\sigma \neq 0}(\bar{q}j)$ różnią się od częstości drgań kryształu, w którym nie uwzględnia się oddziaływania spinowo-fononowego $\Omega_{\sigma=0}(\bar{q}j)$, i zazwyczaj $\Omega_{\sigma \neq 0}(\bar{q}j) > \Omega_{\sigma=0}(\bar{q}j)$ (patrz rysunki 18a-c, 28a-b, 32a-d).

Tylko w jednym przypadku ($T_c^\circ / T_D = 5$, $T_D / D_0 = 0.105$, $A=6$, $B=18$) uzyskano efekt przeciwny tj. $\Omega_{\sigma \neq 0}(\bar{q}j) < \Omega_{\sigma=0}(\bar{q}j)$ (patrz rysunek 28a).

Jest to wynik nałożenia się zależności l/τ_0 , funkcji korelacji y , parametru porządku σ od temperatury oraz przyjętych wartości parametrów modelu (B), od których zależy czynnik Δ (równanie (3.3.4) lub (3.5.3)). Wymienione zależności są przyczyną anomalnego zachowania się, w pobliżu punktu przemiany fazowej, pochodnej parametru renormalizacyjnego częstości drgań względem temperatury

$$\frac{d(\Delta)}{d\tau} \quad (\text{patrz rysunki 18a-c, 28a-b, 33a - d}).$$

Biorąc pod uwagę analityczną postać Δ (wzór 3.3.4),
mamy

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{1}{2\Delta} \left[\tilde{Q}_0 \sigma \cdot \frac{d\sigma}{d\tau} + \tilde{Q}_y \frac{dy}{d\tau} + \tilde{Q}_x \frac{dx}{d\tau} \right], \quad (3.7.9)$$

gdzie

$$\tilde{Q}_0 = -2 \left(\frac{B}{A} \right)^2 \frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{S}{8(S+1)} C_3(x, y), \quad (3.7.10)$$

$$\tilde{Q}_y = 4 C_1(x, y) - \frac{1}{2} C_2(x, y) - \frac{1}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^4 \cdot \frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{S \sigma^2}{8(S+1)} C_3(x, y), \quad (3.7.11)$$

$$\tilde{Q}_x = -4A \cdot C_1(x, y) + A \cdot C_2(x, y) + \left(\frac{B}{A} \right)^2 \frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{S \sigma^2}{8(S+1)} C_3(x, y).$$

Dla $B = 12$ w (3.7.4), decydującą rolę odgrywa człon

$$\tilde{Q}_x dx/d\tau < 0, \quad \text{a dla } B = 18 \text{ człon } \tilde{Q}_0 d\sigma/d\tau.$$

Stąd też, w pierwszym przypadku $d\Delta/d\tau < 0$ (tak jest
zawsze w fazie paramagnetycznej) (patrz rysunki 18a-c,
28a-b, 33a-d), a w drugim ($B = 18$) $d\Delta/d\tau > 0$

(rysunek 28a').

Wyjaśnia to otrzymane w obliczeniach numerycznych wartości liczbowe $d\Delta/d\tau$.

W punkcie przemiany fazowej $d\Delta/d\tau$, podobnie jak $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}$, zmienia się skokowo o wartość $\delta[d\Delta/d\tau]$, która na mocy (3.7.8) i (3.7.9-12), wynosi

$$\begin{aligned} \delta\left[\frac{d\Delta}{d\tau}\right] &= \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \frac{d\Delta(\tau)}{d\tau} - \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^+} \frac{d\Delta(\tau)}{d\tau} \\ &= \frac{1}{2\Delta[x(\tau_c), y(\tau_c), \sigma=0]} \left[Q_0(x(\tau_c), y(\tau_c)) \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \frac{\sigma(\tau) d\sigma(\tau)}{d\tau} \right. \\ &\quad \left. + Q_x(x(\tau_c), y(\tau_c)) x(\tau_c) \cdot \delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(e)}(\tau_c) \right]. \end{aligned} \quad (3.7.13)$$

Zewnętrzne ciśnienie π_1 wpływa na własności fizyczne rozważanego układu.

Wzrost π_1 powoduje zwiększenie częstości drgań sieci

$d\Delta/d\pi_1 > 0$ (porównaj rysunki 18a-c, 28a-b, 32a-d)

oraz ^{wzrost}temperatury magnetycznej przemiany fazowej $d\tau_c/d\pi_1 > 0$

(porównaj rysunki 11a-d, 14-16, 24a, 24c, 29, 30a-d).

Oba efekty są konsekwencją zależności, odpowiednio, czynnika Δ oraz efektywnej całki wymiany (rys. 15)

od $\chi(\tau, \pi_1)$ i $\gamma(\tau, \pi_1)$. Podobnie jak w przypadku modelu Isinga z polem poprzecznym (patrz dyskusja w paragrafie 2.5), przejście fazowe dla $\pi_1 = 0$ zachodzi w temperaturze $T_c < T_c^0$, gdzie T_c^0 jest temperaturą przemiany dla modelu sztywnego (patrz rys. 14, 24a, 24c, 29, 30d).

Uwzględnienie oddziaływania spinowo-fononowego powoduje zmniejszenie się funkcji korelacji y wychyleń atomów z położeń równowagi (porównaj rys. 12, 24b, 24d, 30a-d). Efekty oddziaływania spinowo-fononowego zależą od wartości spinu S.

W równaniu stanu (3.3.2) oraz w wyrażeniu (3.3.4) na czynnik renormalizacji drgań Δ , człony będące wynikiem oddziaływania (między podukładem magnetycznym i sieciowym) zawierają czynnik $S/(S+1)$. Dla rosnących S człony te rosną, zwiększając nieznacznie, omówione dotychczas, efekty oddziaływania spinowo-fononowego w zależnościach od temperatury następujących wielkości: ℓ/γ_0 (patrz rys. 11a-c, 24a), $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(1)}$ (rys. 17a-c, 22b-d), Δ (patrz rys. 18a-c, 28a-b) oraz $d\Delta/d\tau$ (patrz rys. 18a-c, 28a-b).

W ramach metody A i B możemy podać analityczne wyrażenia na entropię $\tilde{S}(\tau)$ oraz $C_{\pi_1}(\tau)$. Na podstawie (3.3.5-6) oraz (2.3.14) otrzymujemy

$$\tilde{S}(\tau) = \tilde{S}^{(sp)}(\tau) + \tilde{S}_{A/B}^{(l)}(\tau), \quad (3.7.14)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \tilde{S}^{(sp)}(\tau) = \ln \left\{ \frac{\sinh \left[\frac{3(2S+1)\sigma(\tau)}{2\tau(S+1)E_1(\tau)} \right]}{\sinh \left[\frac{3\sigma(\tau)}{2\tau(S+1)E_1(\tau)} \right]} \right\} - \\ - \frac{3 \cdot S \cdot \sigma^2(\tau)}{\tau(S+1)E_1(\tau)}, \end{aligned} \quad (3.7.15)$$

a) metoda A:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_A^{(e)}(\tau) = F_D \left(\frac{\Delta_A(\tau)}{\tau \cdot T_c^\circ / T_D} \right) - 3 \ln \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{\Delta_A(\tau)}{\tau \cdot T_c^\circ / T_D} \right] \right\} \\ + \frac{1}{\tau} \left[\frac{12 \cdot \Delta_A^2(\tau) \cdot \gamma(\tau)}{(T_c^\circ / T_D) \cdot (T_D / D_0)} - \frac{9}{8} \frac{\Delta_A(\tau)}{T_c^\circ / T_D} \right], \end{aligned} \quad (3.7.16)$$

b) metoda B:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_B^{(e)}(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \left\{ \frac{S_o(\tau, \bar{q}j)}{T_c^o} \cosh[S_o(\tau, \bar{q}j)] - \right. \\ \left. - \ln[2 \sinh[S_o(\tau, \bar{q}j)]] \right\}, \end{aligned} \quad (3.7.18)$$

$$S_o(\tau, \bar{q}j) = \frac{\Delta_B(\tau) \Omega^{(1)}(\bar{q}j) \Omega_{max}}{4 \cdot \tau \cdot T_c^o}, \quad (3.7.19)$$

gdzie $E_1(\tau)$ jest dane wzorem (2.5.8), a $\Delta_A(\tau)$ i $\Delta_B(\tau)$ odpowiednio (3.3.4) i (3.5.3).

Pojemność cieplną $C_{\pi_1}(\tau)$ przypadającą na jedną cząstkę w metodzie A można zapisać w postaci

$$C_{\pi_1}^A(\tau) = C_{\pi_1}^{(l,A)}(\tau) + C_{\pi_1}^{(sp,A)}(\tau), \quad (3.7.20)$$

gdzie w oznaczeniach z paragrafu 2.5

$$C_{\pi_1}^{(l,A)}(\tau) = A_y^{(A)}(\tau) \frac{dy}{d\tau} + A_x^{(A)}(\tau) \frac{dx}{d\tau}, \quad (3.2.21)$$

$$C_{\pi_1}^{(spA)}(\tau) = A_\sigma^{(A)}(\tau) \sigma(\tau) \frac{d\sigma}{d\tau}, \quad (3.2.22)$$

oraz

$$\begin{aligned} A_y^{(A)}(\tau) = & \frac{1}{(T_c^\circ/T_D)(T_D/D_0)} \left\{ E_4(\tau) [4y(\tau) + 2] - E_5(\tau) [y(\tau)/2 + 1] \right. \\ & + \Delta_A^2(\tau) - \frac{y(\tau)S}{(S+1)16} \cdot \frac{T_c^\circ}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \left(\frac{B}{A}\right)^4 \sigma^2(\tau) / E_1(\tau) \Big\} \\ & - \frac{3}{4} \frac{S\sigma^2(\tau)}{S+1} \left(\frac{B}{A}\right)^2 / E_1(\tau), \end{aligned} \quad (3.2.23)$$

$$\begin{aligned} A_x^{(A)}(\tau) = & \frac{6 \cdot A \cdot x(\tau)}{(T_c^\circ/T_D)(T_D/D_0)} \left\{ y(\tau) [E_5(\tau) - 4E_4(\tau)] + \right. \\ & + 2[E_5(\tau) - E_4(\tau)] + \left(\frac{B}{A}\right)^3 \frac{T_c^\circ}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{S y(\tau) \sigma^2(\tau)}{8(S+1)E_1(\tau)} + \end{aligned}$$

$$+ \frac{3}{2} \frac{S\sigma^2}{S+1} B \cdot x(\tau) / E_1(\tau) + \frac{12 \cdot \pi_1 \cdot A \cdot x^3(\tau)}{(\tau_c^0 / \tau_D) (\tau_D / D_0)} \quad (3.7.26)$$

$$A_\sigma^{(A)}(\tau) = -12 y(\tau) \left(\frac{B}{A} \right)^2 \frac{S}{8(SH) E_1(\tau)} - \frac{3S}{S+1} \cdot \quad (3.7.25)$$

W metodzie B, z uwagi na (3.5.12), otrzymujemy

$$C_{\pi_1}^{(B)}(\tau) = C_{\pi_1}^{(l,B)}(\tau) + C_{\pi_1}^{(sp,B)}(\tau), \quad (3.7.26)$$

$$C_{\pi_1}^{(l,B)}(\tau) = A_y^{(B)}(\tau) \frac{dy}{d\tau} + A_x^{(B)}(\tau) \frac{dx}{d\tau}, \quad (3.7.27)$$

$$C_{\pi_1}^{(sp,B)}(\tau) = A_\sigma^{(B)}(\tau) \sigma(\tau) \frac{d\sigma}{d\tau}, \quad (3.7.28)$$

gdzie

$$A_y^{(B)}(\tau) = \frac{6D_0}{T_c^0} [2E_4(\tau) - E_5(\tau)] - \frac{3S\sigma^2}{4(S+1)} \left(\frac{B}{A}\right)^2 / E_1(\tau) +$$

$$+ [4E_4(\tau) - E_5(\tau)/2 - \frac{S}{16(S+1)} \left(\frac{B}{A}\right)^4 \frac{T_c^0}{D_0} / E_1(\tau)] \Sigma_0(\tau),$$

(3.7.29)

$$A_x^{(B)}(\tau) = \frac{12D_0}{T_c^0} A \cdot x(\tau) [E_5(\tau) - E_4(\tau)] +$$

$$\frac{3S\sigma^2(\tau)}{2(S+1)} \cdot B \cdot x(\tau) / E_1(\tau) + \frac{12 \cdot T_1 \cdot A \cdot x^3(\tau)}{D_0 / T_c^0}$$

$$+ A \cdot x(\tau) [E_5(\tau) - 4E_4(\tau) + \frac{S\sigma^2(\tau)}{16(S+1)} \left(\frac{B}{A}\right)^3 \frac{T_c^0}{D_0} / E_1(\tau)] \Sigma_0(\tau),$$

(3.7.30)

$$A_0^{(B)}(\tau) = -\frac{3S}{(S+1)E_1(\tau)} - \frac{S}{4(S+1)} \left(\frac{B}{A}\right)^2 \frac{T_c^0}{D_0} \Sigma_0(\tau) / E_1(\tau),$$

(3.7.31)

$$\begin{aligned} \Sigma_o(\tau) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}j} \frac{\Omega_o(\bar{q}j)}{4 \Delta_B(\tau)} \left\{ \coth \left[\Delta_B(\tau) \Omega_o(\bar{q}j) \right] + \right. \\ \left. + \frac{\Delta_B(\tau) \Omega_o(\bar{q}j)}{\sinh^2 \left[\Delta_B(\tau) \Omega_o(\bar{q}j) \right]} \right\}, \end{aligned} \quad (3.7.32)$$

$$\Omega_o(\bar{q}j) = \Omega^{(1)}(\bar{q}j) \Omega_{max} / 4 T_c^0. \quad (3.7.33)$$

Zwróćmy uwagę na podobieństwa, jakie wykazują zależności $C_{\pi_1}(\tau)$ oraz $L_{\pi_1}^{(e)}(\tau)$ od temperatury, gdy $\tau \rightarrow T_c^-$ (porównaj rysunki 17, 21, 27, 31, 36). Tym samym nasze wyniki, dotyczące pojemności cieplnej oraz współczynnika rozszerzalności cieplnej układu, przy stałym ciśnieniu, są zgodne z relacją termodynamiczną [10, 135-6]

$$\frac{C_{\pi_1}}{\tau} = \gamma_1 \cdot L_{\pi_1}^{(e)} + \gamma_2, \quad (3.7.34)$$

gdzie γ_1 i γ_2 są ciągłymi funkcjami temperatury τ .

3.8. Porównanie z doświadczeniem.

Otrzymane tutaj rezultaty mogą być wykorzystane do interpretacji danych doświadczalnych dotyczących nieprzewodzących, anharmonicznych kryształów ferromagnetycznych, których własności magnetyczne opisuje izotropowy model Heisenberga.

Przykładem tego typu układów są, krystalizujące w strukturze NaCl ferromagnetyki EuO oraz EuS, których temperatury Curie wynoszą odpowiednio 69 K i 16 K [30, 137].

Jony magnetyczne Eu^{+2} , znajdujące się w sferycznie symetrycznym stanie spinowym $^8\text{S}_{7/2}$ ($L = 0$, $S = J = 7/2$), zajmują w kryształach EuO i EuS węzły sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej [30].

Z uwagi na stosunkowo małą wartość anizotropii krystalicznej [30], związki te są prawie idealnymi ferromagnetykami Heisenberga.

Do efektywnej całki wymiany J_{eff} w EuO i EuS najistotniejszy wkład wnoszą różne mechanizmy wymiany pośredniej oraz nadwymiany Kramersa-Andersona [137-148] (wymiana bezpośrednia jest anomalnie mała z uwagi na silną lokalizację orbit 4f atomów Eu^{+2} [30, 137]).

Przeprowadzone dla halogenków europu obliczenia J_{eff} (oparte na strukturze pasmowej tych związków) wskazują explicite, na wykładnicze malenie efektywnej całki wymiany wraz z odległością [137-148].

Dynamika sieci kryształów EuO i EuS jest stosunkowo słabiej zbadana. Autorowi nie są znane pełne dane doświadczalne do-

tyczące krzywych dyspersji fononów oraz własności termodynamicznych (związanych z drganiami sieci) tych kryształów. Ponieważ masa atomów niemagnetycznych jest znacznie mniejsza od masy jonów europu, to należy oczekiwać, że efekty anharmoniczności drgań jonów niemagnetycznych będą bardziej istotne w dynamice sieci.

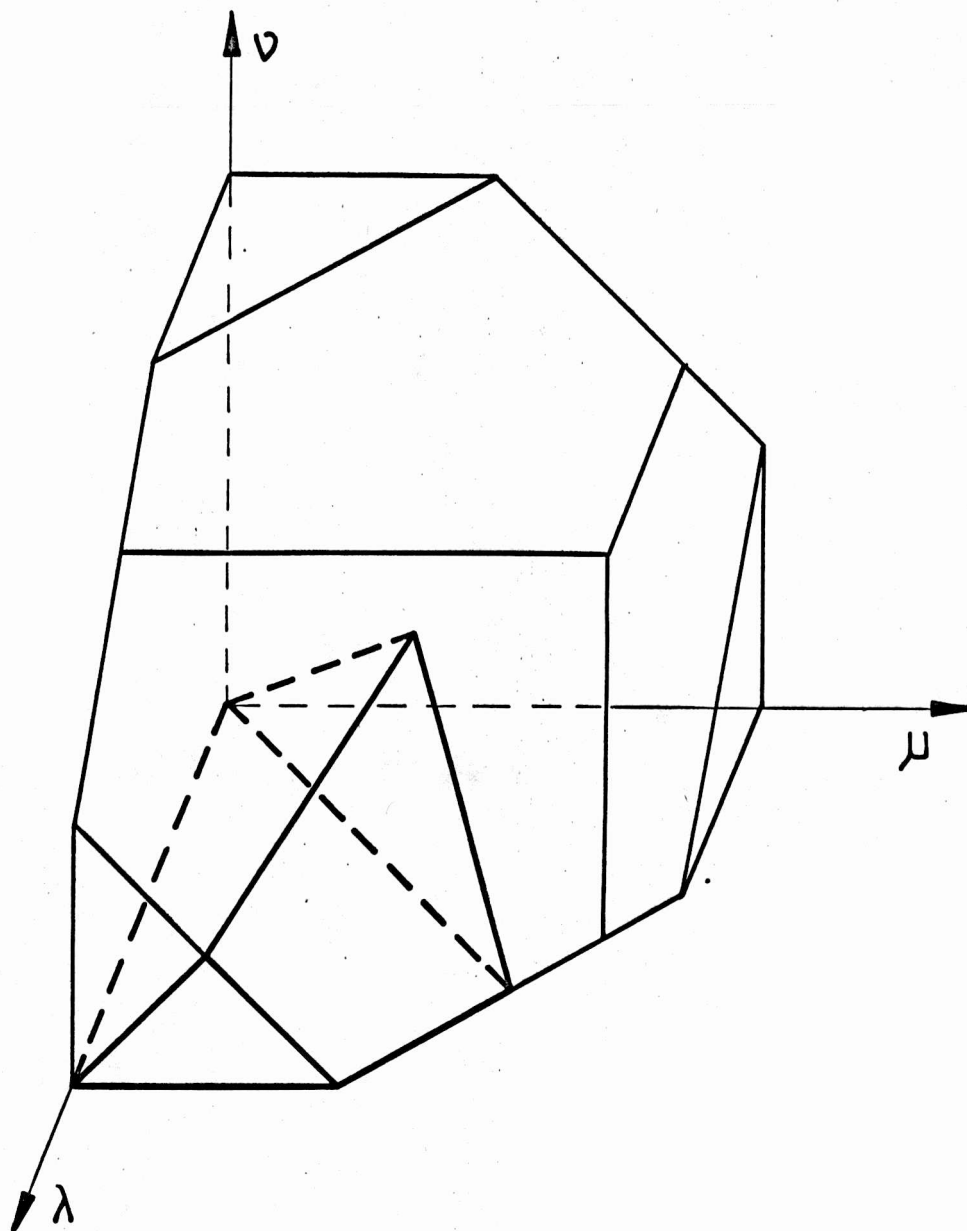
W pracy rozpatrzono model monoatomowej sieci (wszystkie atomy magnetyczne). Wobec tego porównanie z danymi doświadczalnymi należy przeprowadzać ostrożnie, bo uwzględnienie realnej sytuacji może wnieść istotne zmiany do przedstawionych w pracy wyników.

Z tych względów możemy przeprowadzić jedynie jakościowe porównanie otrzymanych wyników teoretycznych z danymi doświadczalnymi [149-159].

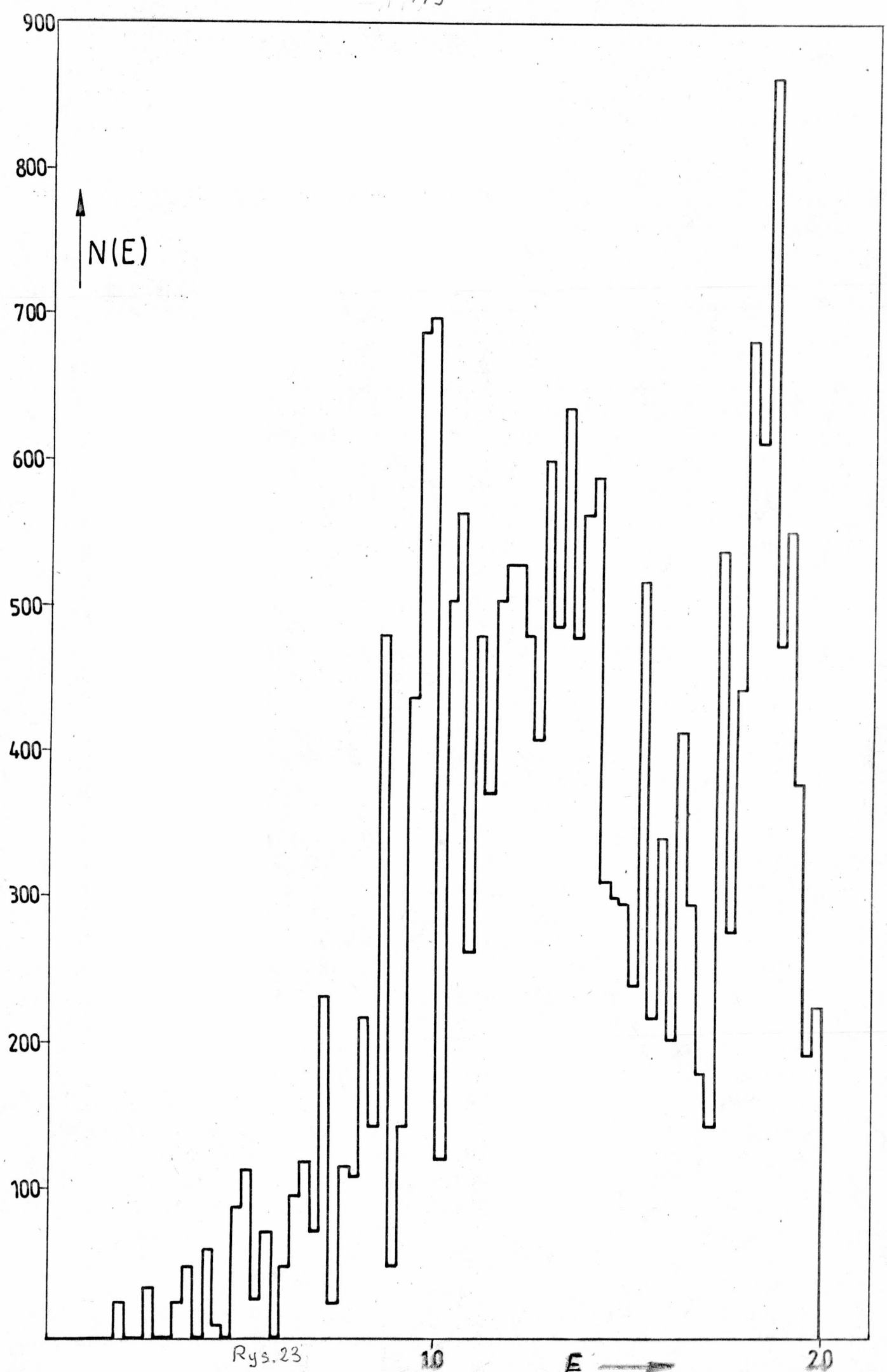
Ogólnie rzecz biorąc, można stwierdzić, że teoria daje wyniki jakościowo zgodne z rezultatami eksperymentalnymi. W szczególności na uwagę zasługują rezultaty badań doświadczalnych dotyczących wpływu ciśnienia zewnętrznego na temperaturę Curie [156-158] oraz na zależność współczynnika rozszerzalności cieplnej układu (przy stałym ciśnieniu) $\mathcal{L}_{\pi_1}$ od temperatury [159]. Wyniki przedstawione w naszej pracy i dotyczący $dT_c/d\pi_1$ oraz zachowanie się $\mathcal{L}_{\pi_1}$ w obszarze przemiany fazowej, wykazują jakościową zgodność z danymi doświadczalnymi [156-159].

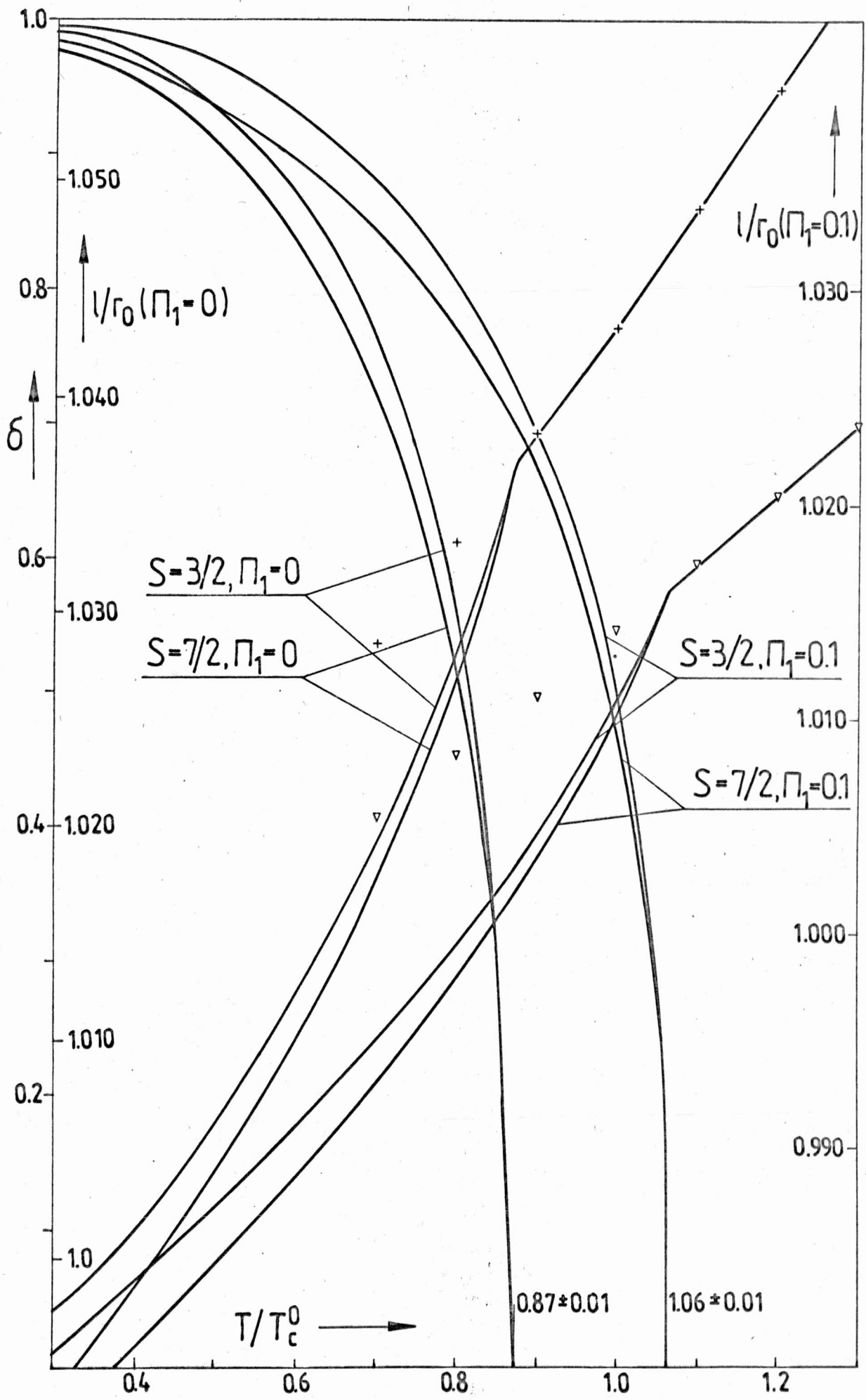
Ciekawe byłoby porównanie otrzymanych rezultatów dotyczących wpływu oddziaływania spinowo-fononowego oraz ciśnienia na częstości drgań sieci w związkach EuO i EuS. Jest to w chwili obecnej niemożliwe z powodu braku odpowiednich wyni-

ków doświadczalnych. Wyniki obliczeń można zastosować także przy interpretacji własności innych kryształów magnetycznych, które dadzą się opisać przy pomocy efektywnego hamiltoni Heisenberga [31] . Zwróćmy uwagę, że wyznaczone przez nas tendencje zmian, dotyczące wpływu uporządkowania magnetycznego na częstości drgań sieci i współczynnik rozszerzalności cieplnej oraz zewnętrznego ciśnienia na temperaturę przemiany fazowej, pozostają w zgodzie z danymi eksperymentalnymi otrzymanymi dla kryształu niklu [160-163] .

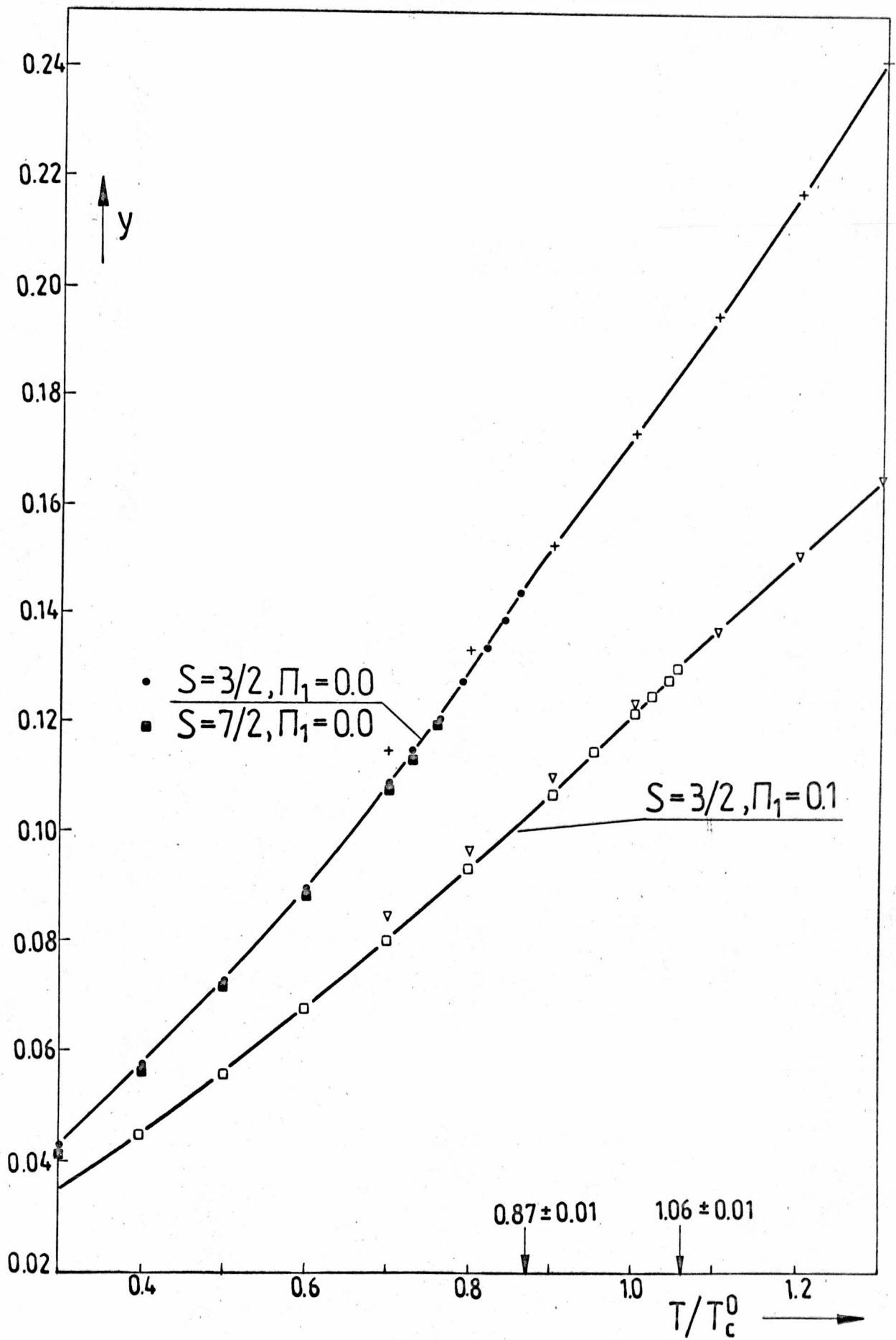


Rys. 22.

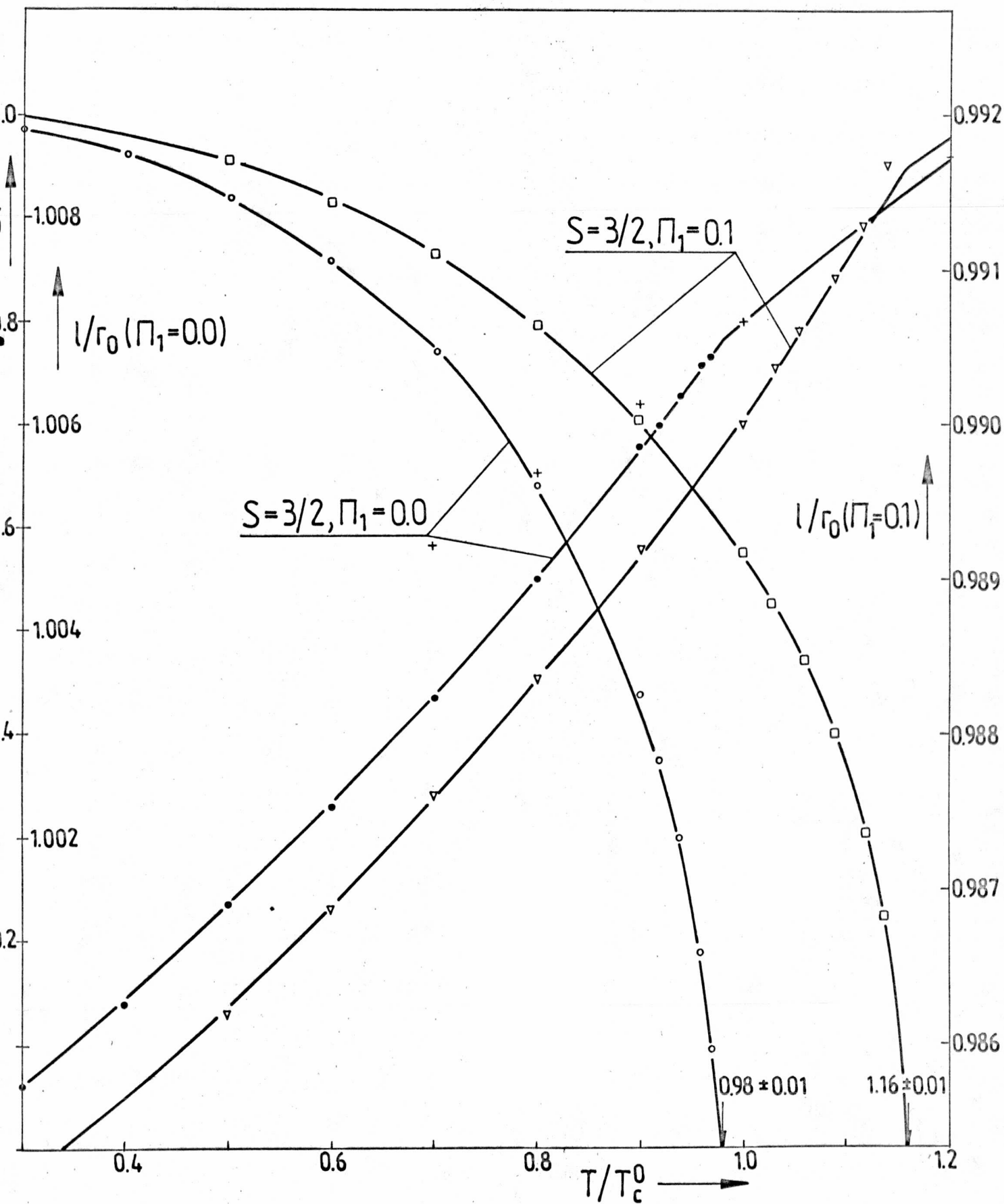




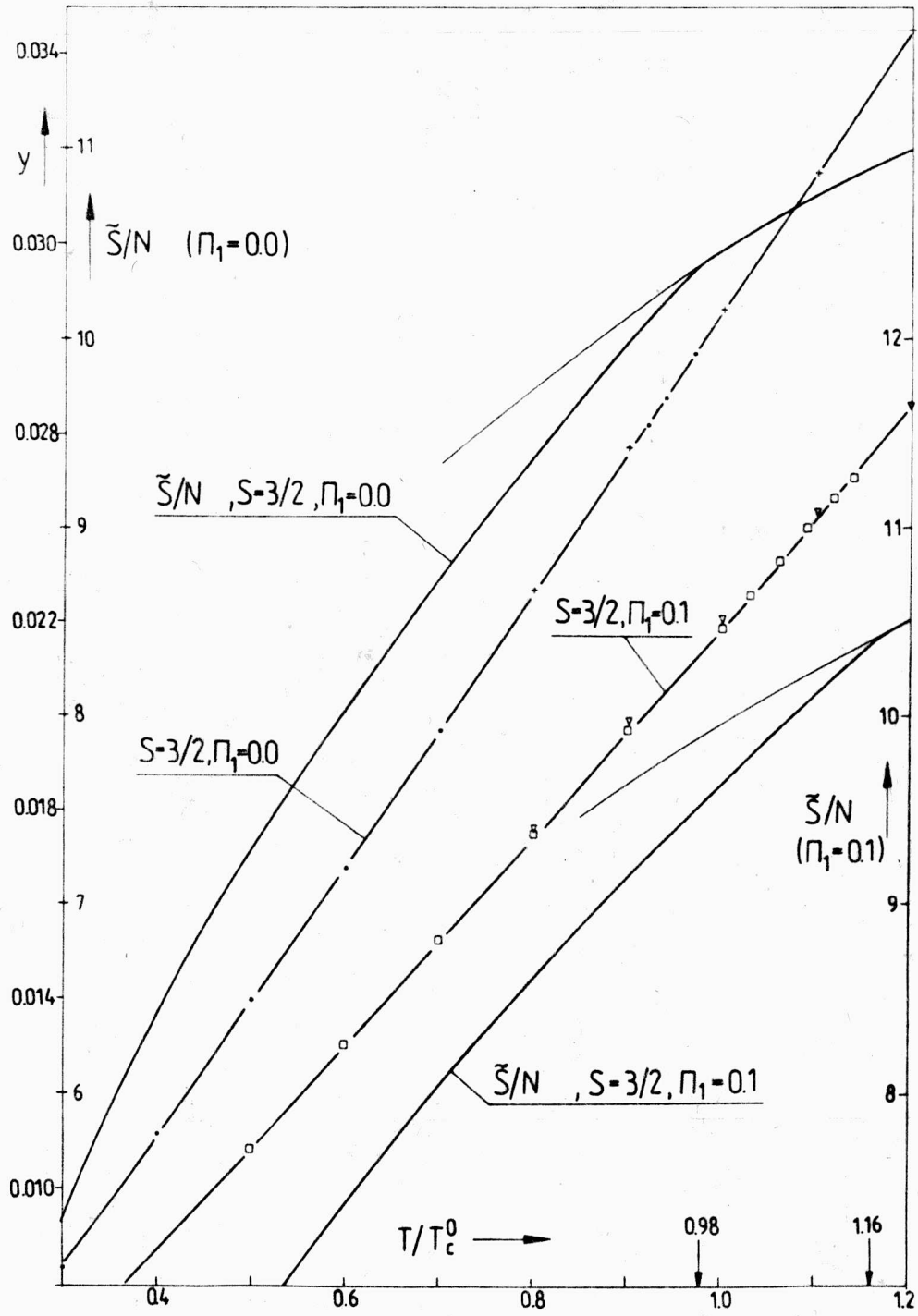
Rys. 24 a.



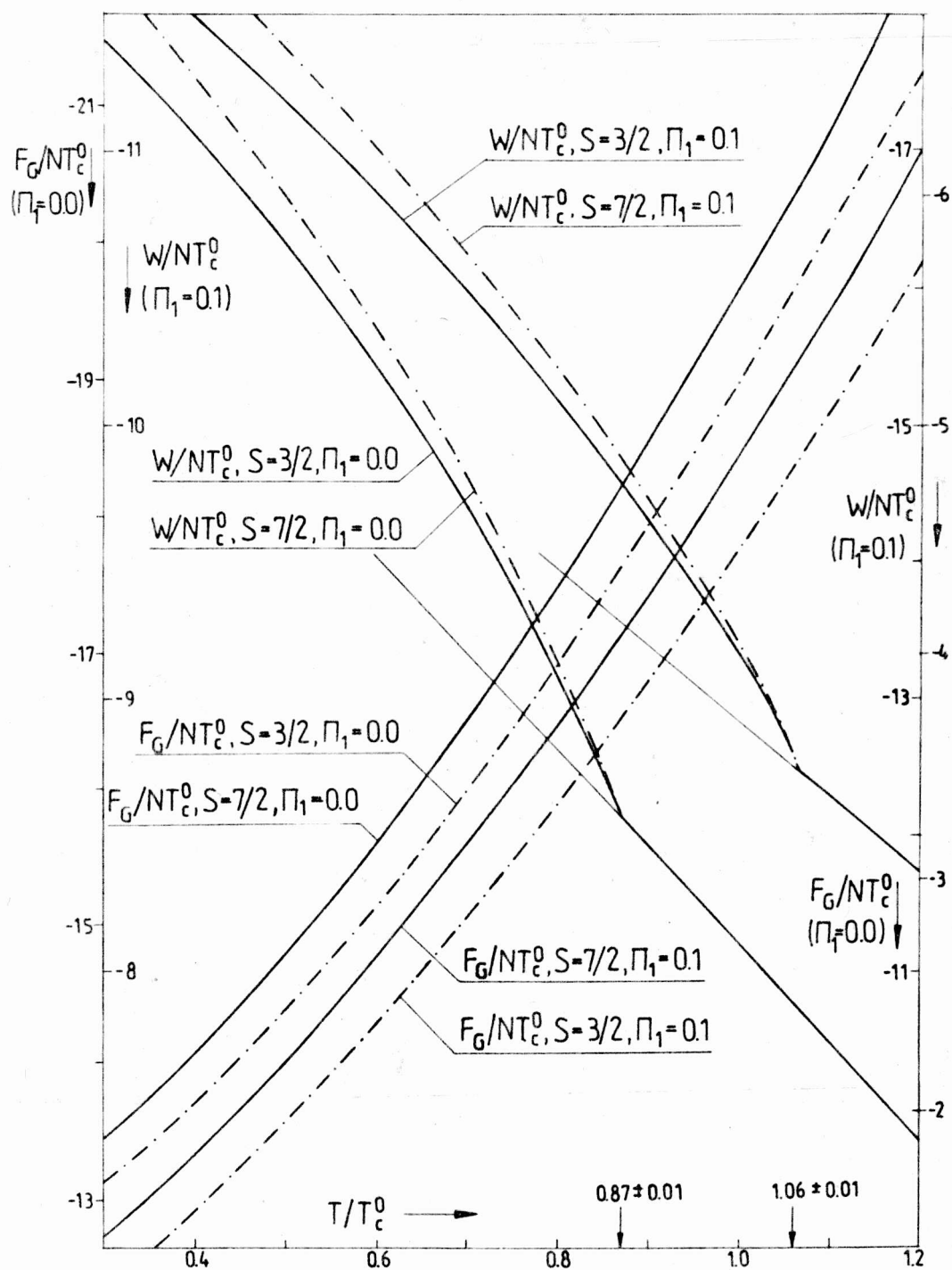
Rys.24 b.



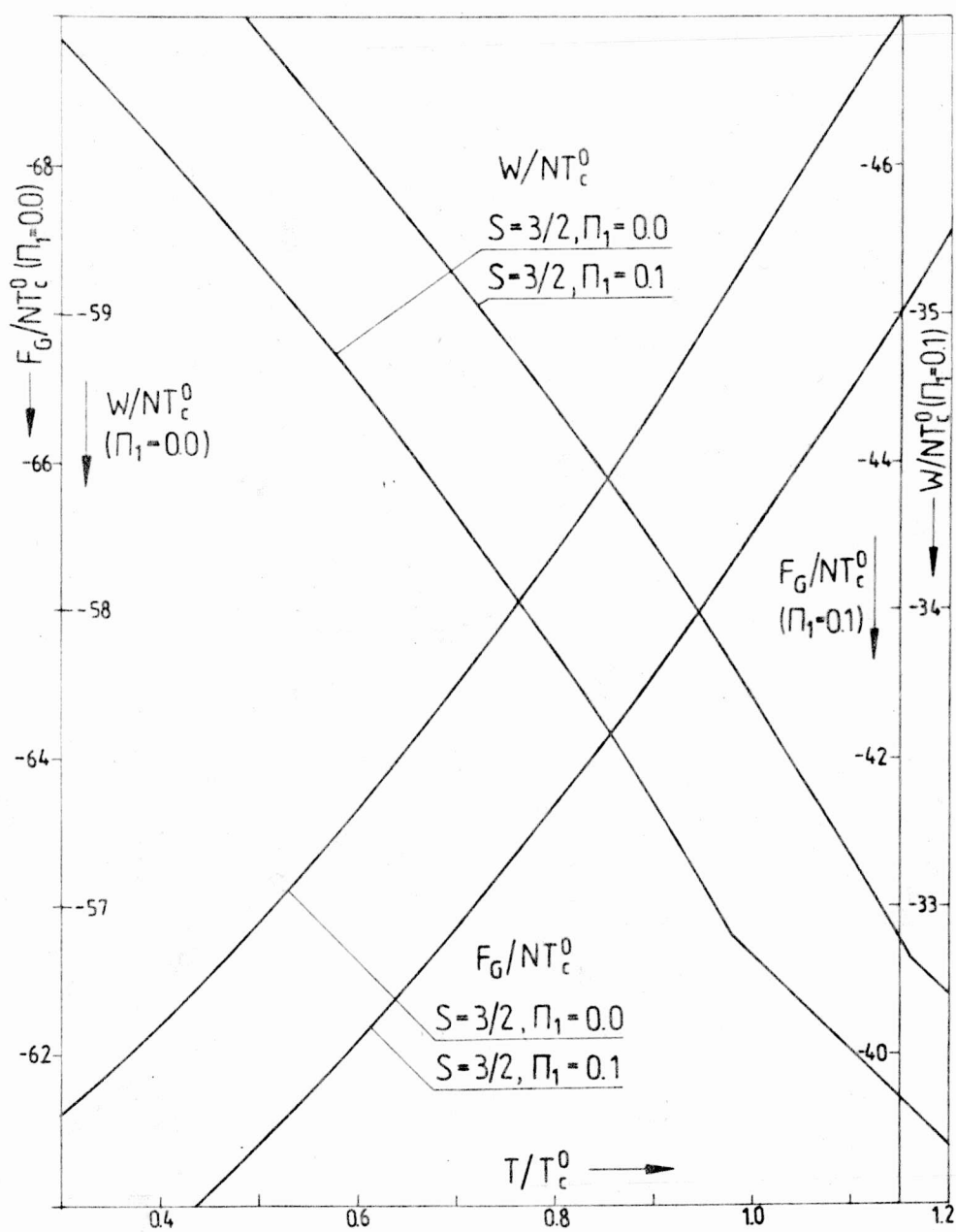
Rys. 24c.



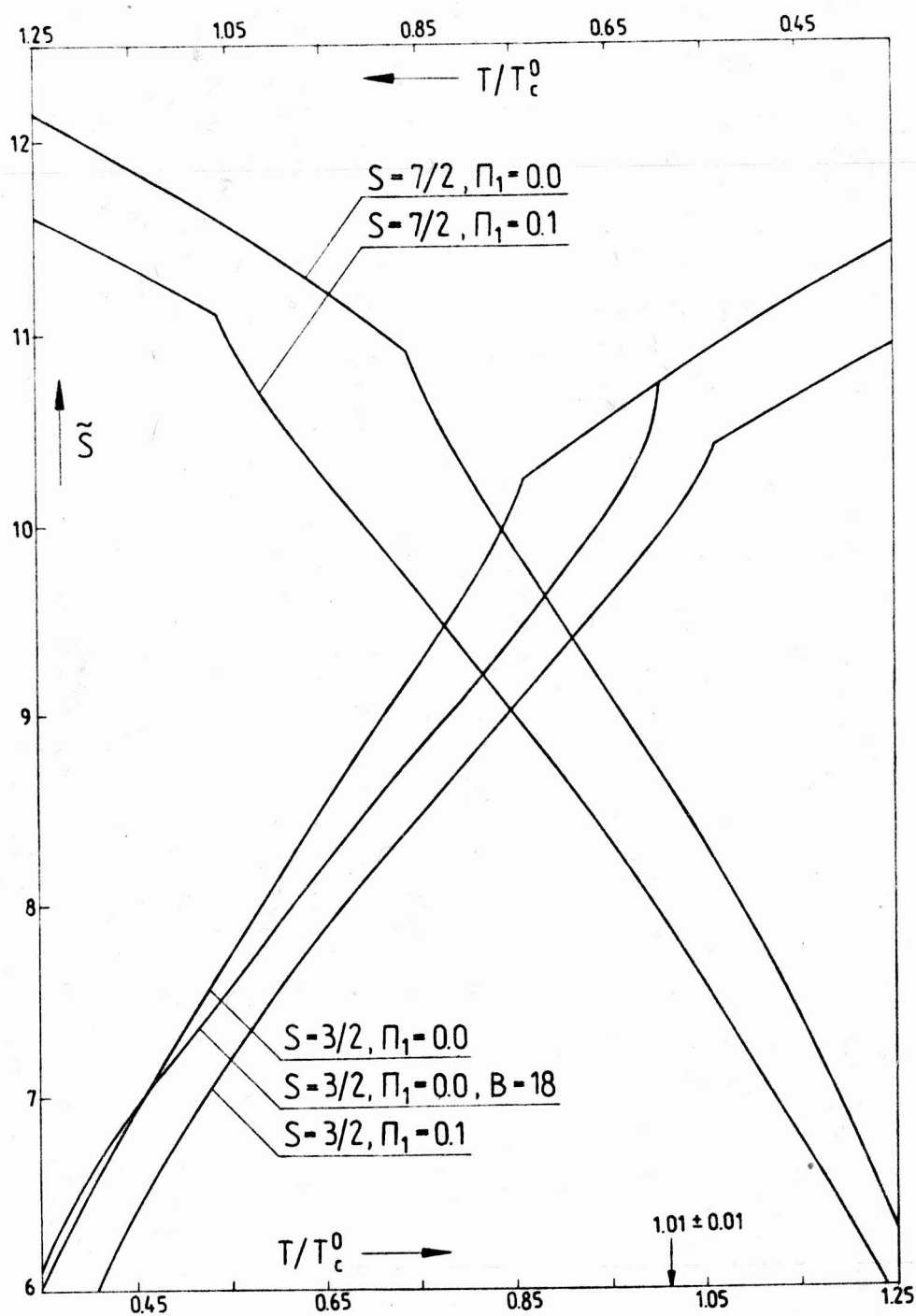
Rys. 24 d.



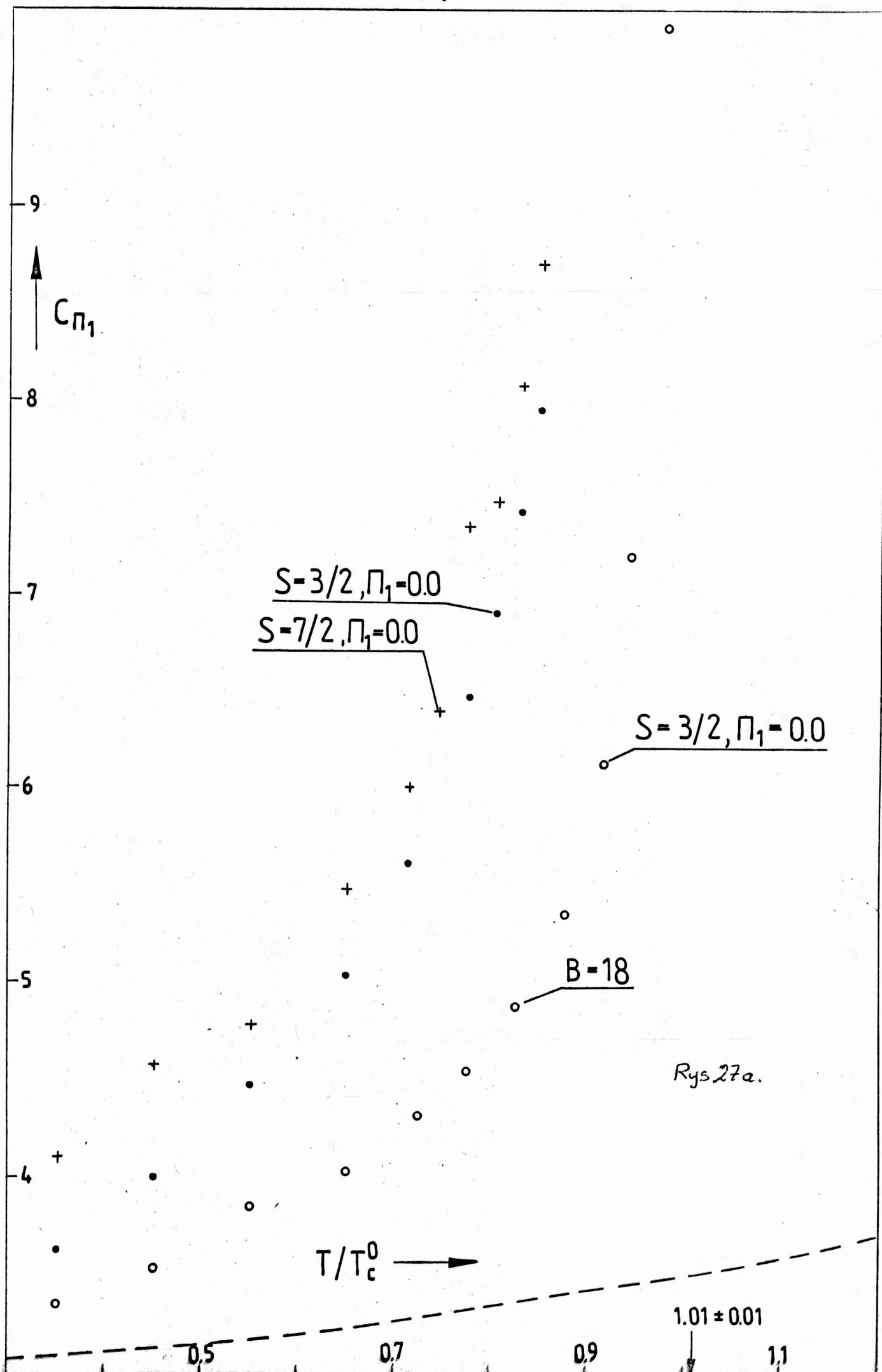
Rys. 25a

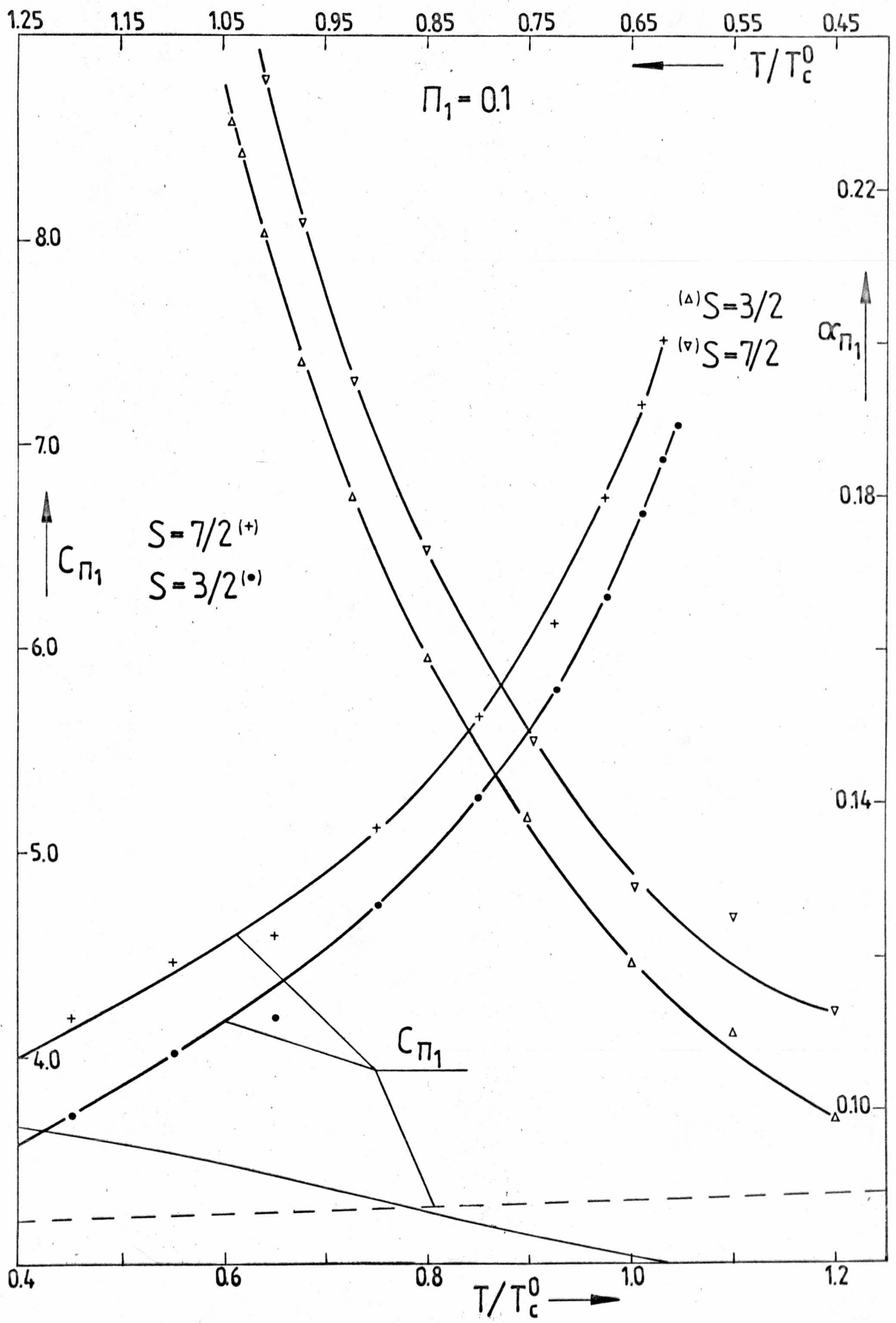


Rys. 25b.

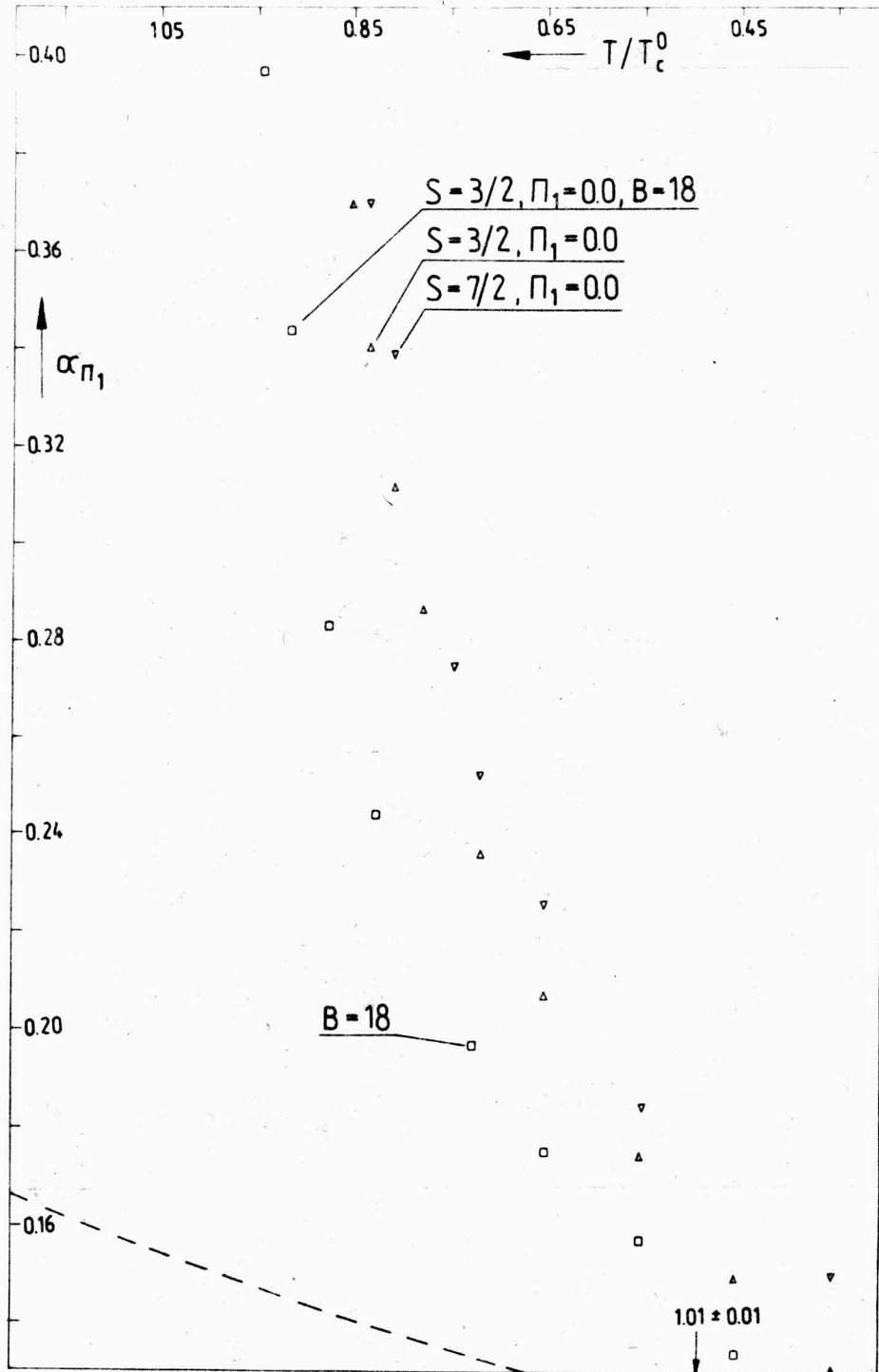


Rys. 26a.

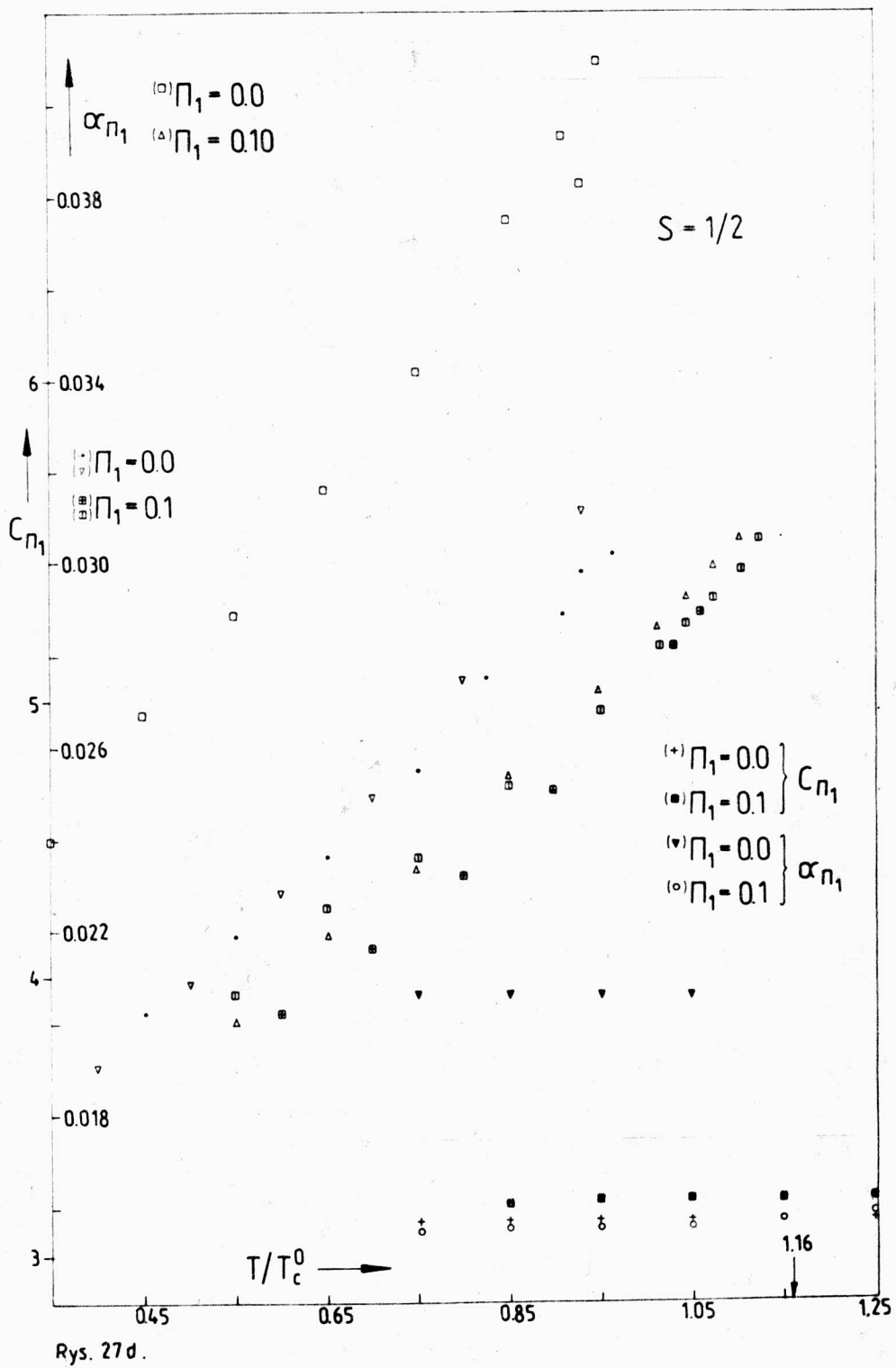


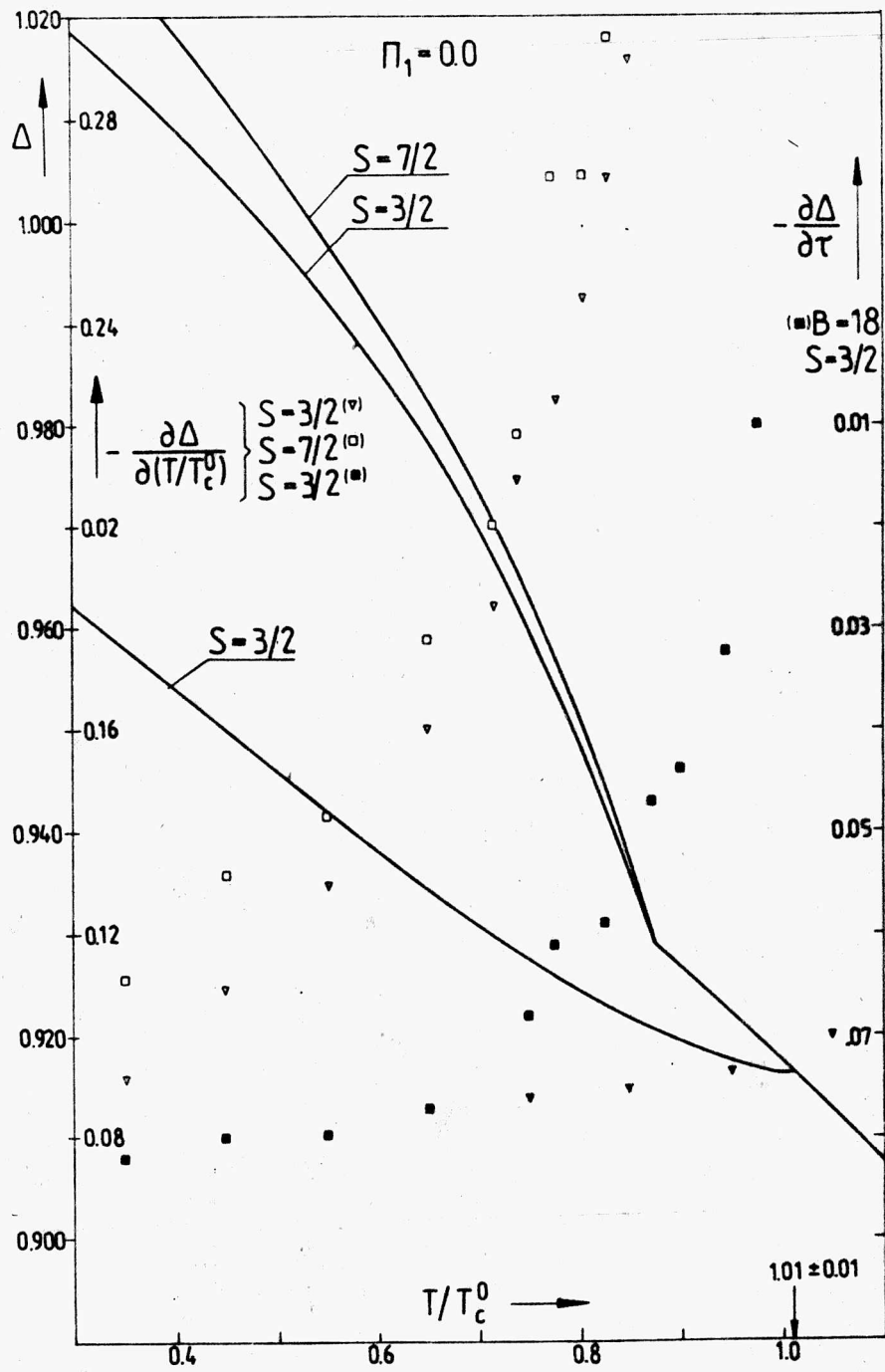


Rys. 27b.

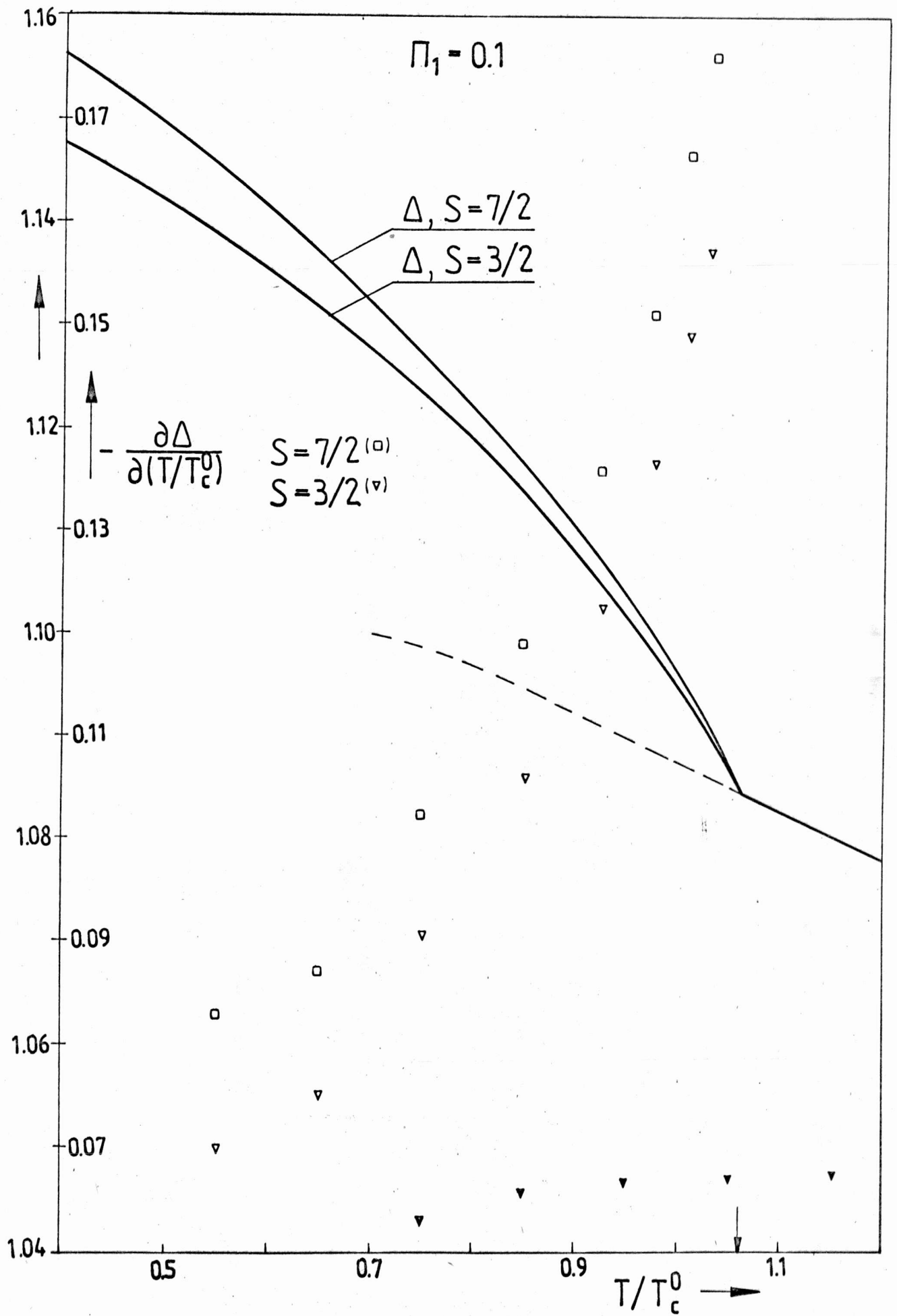


Rys. 27c.

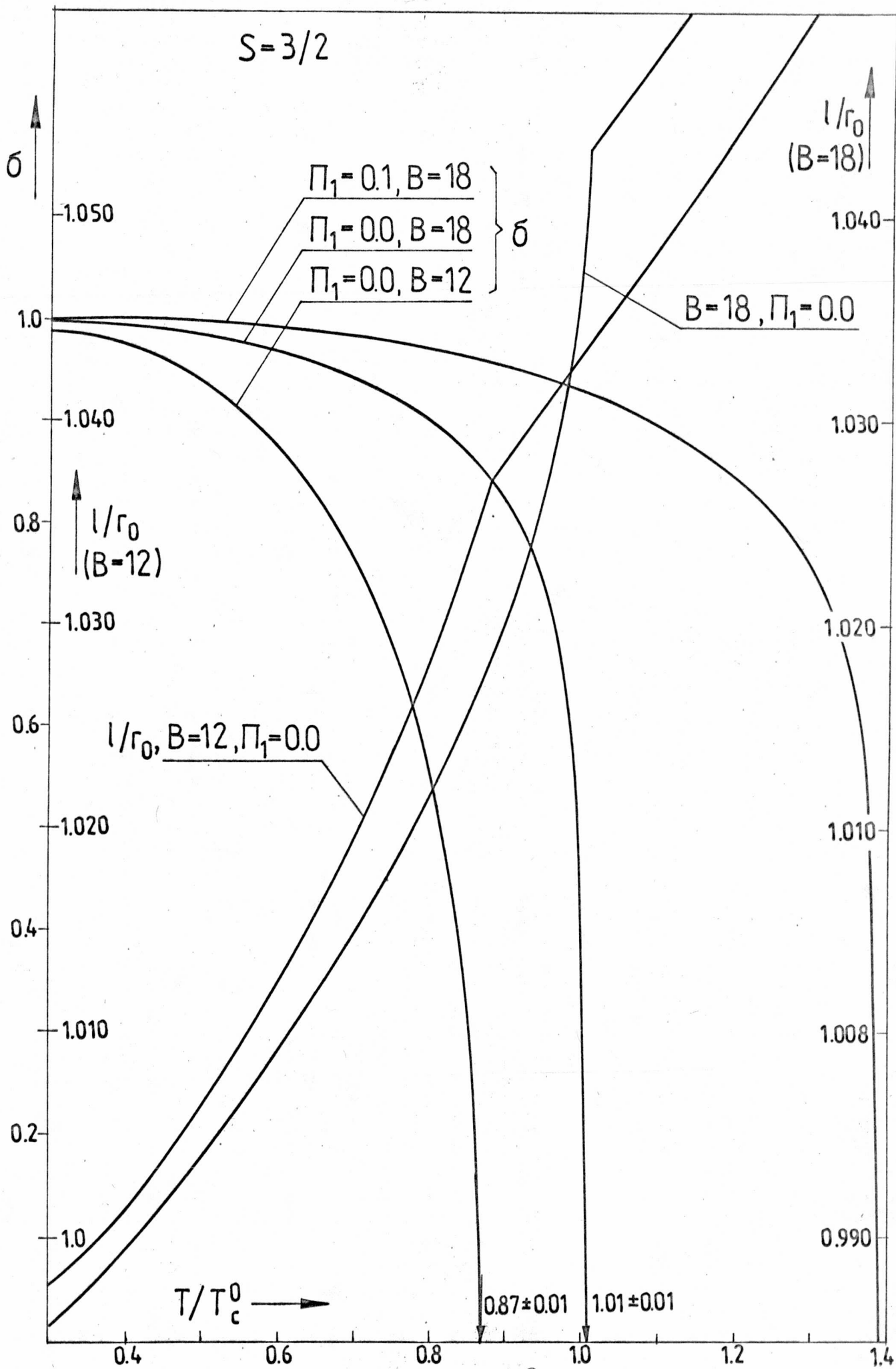


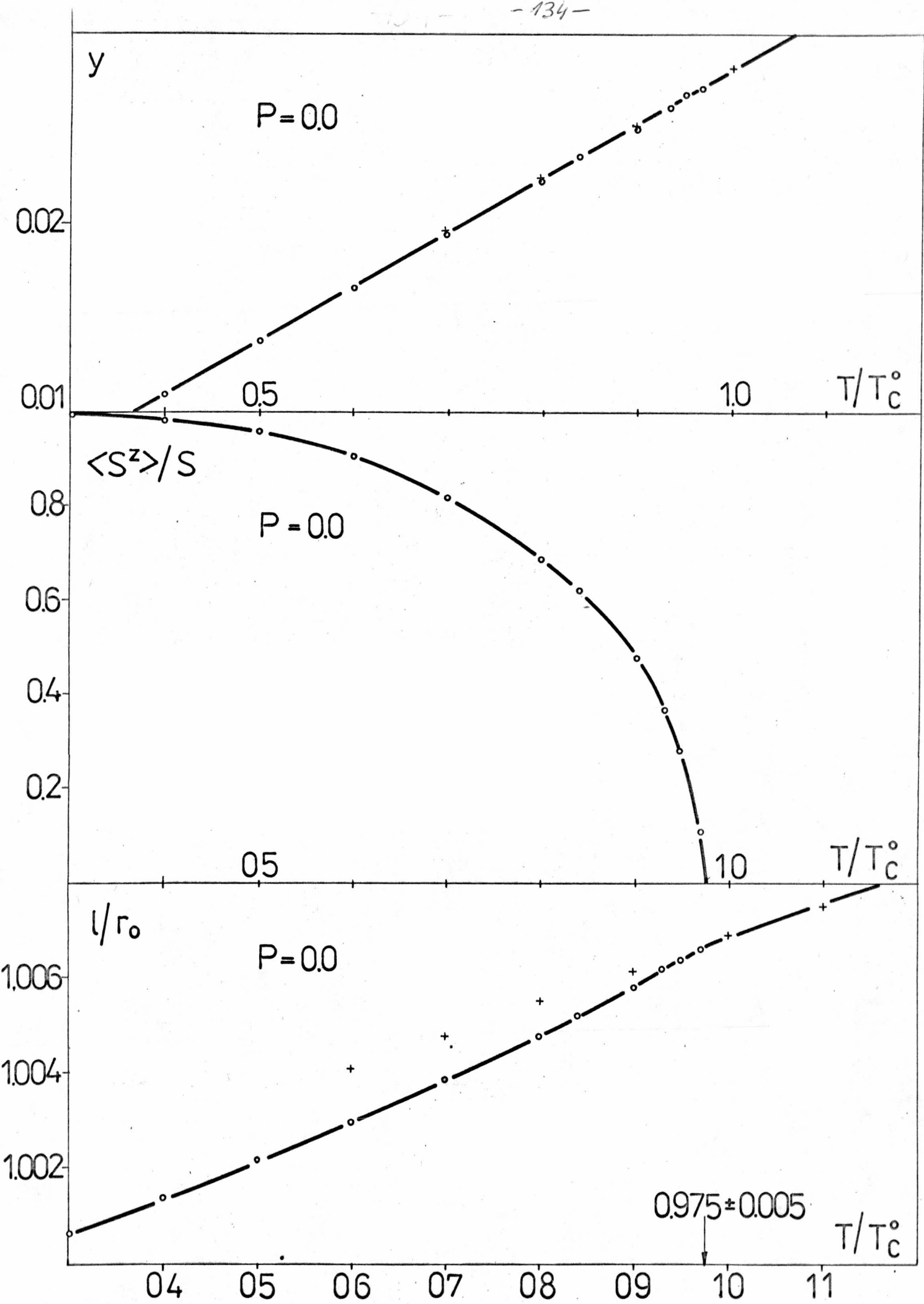


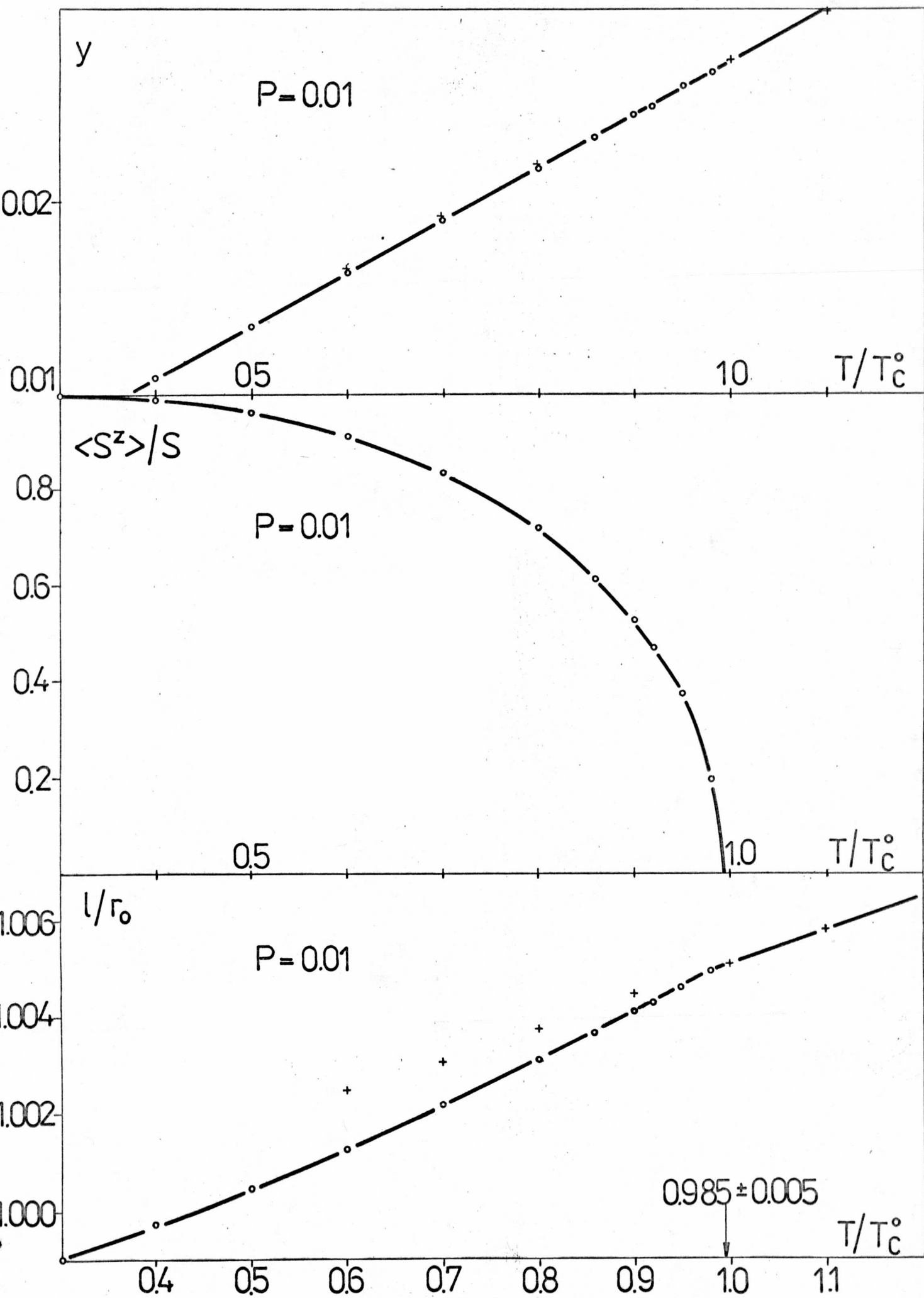
Rys. 28 a.



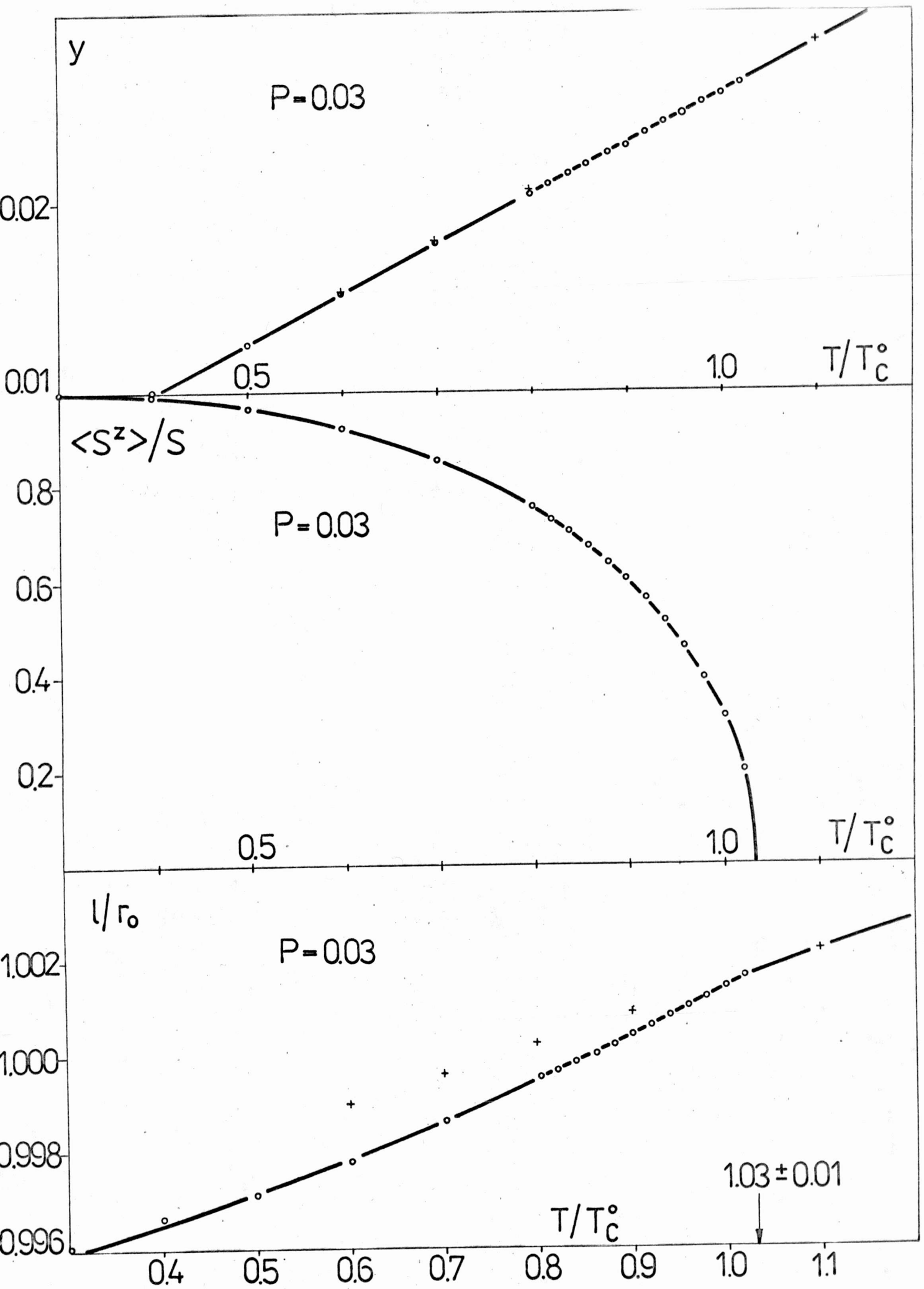
Rys. 28 b.

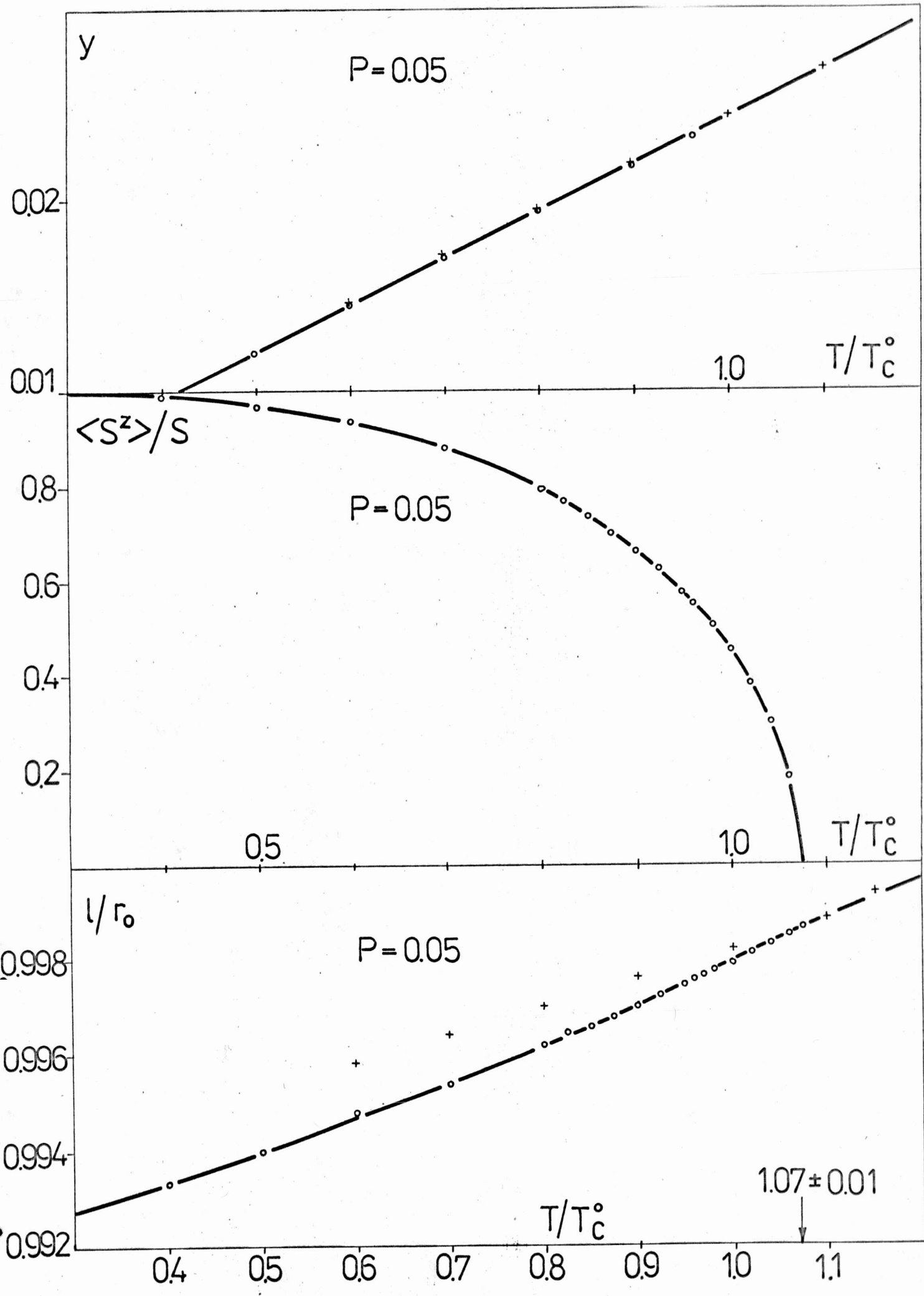


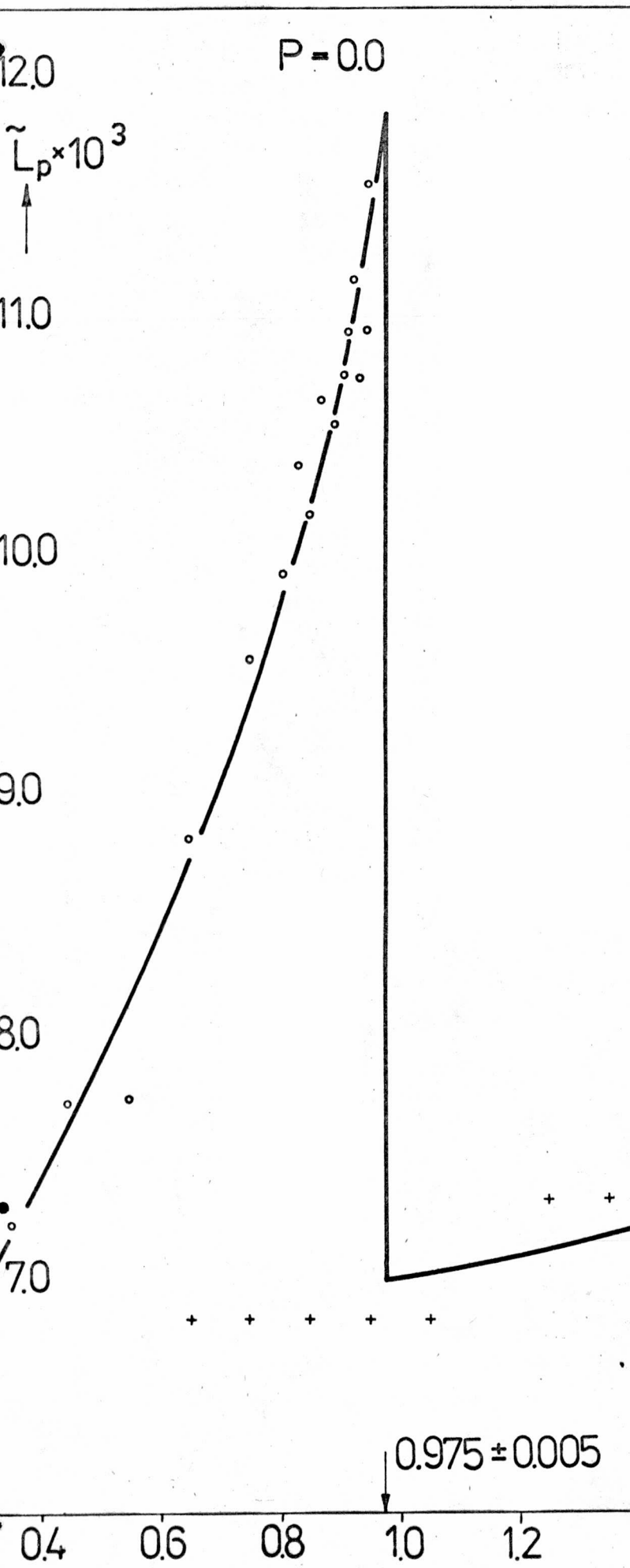




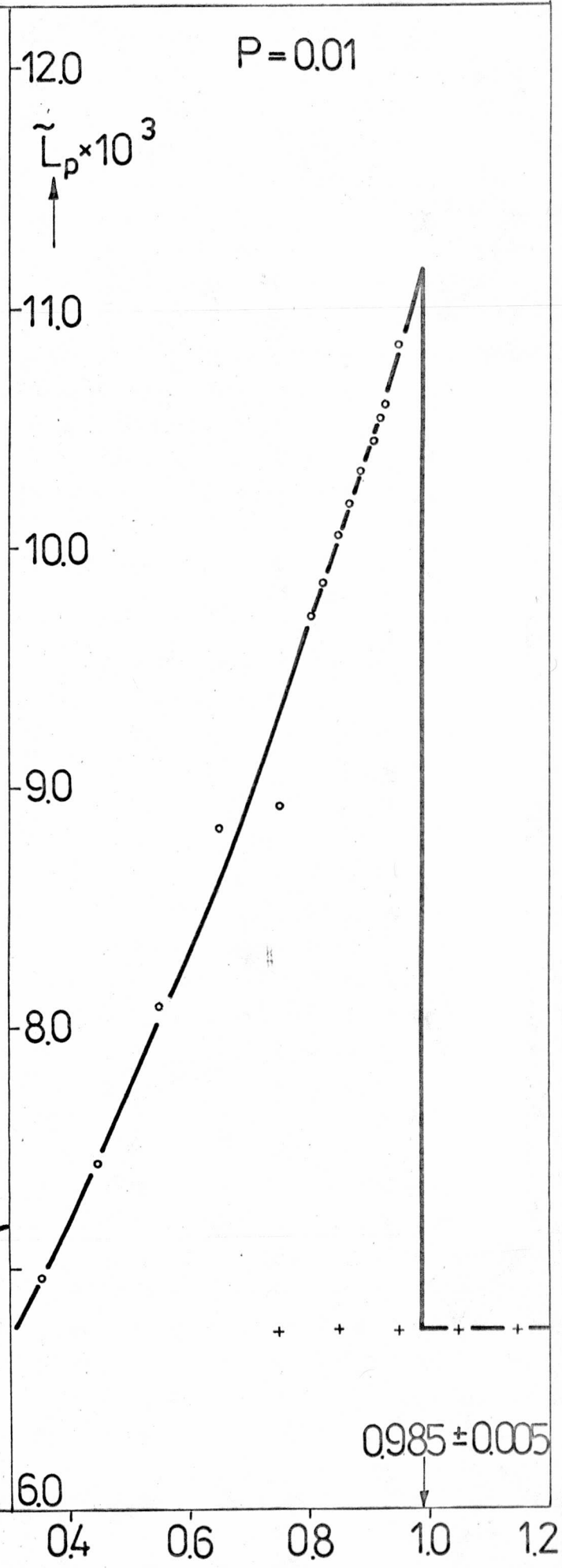
Rys. 306.



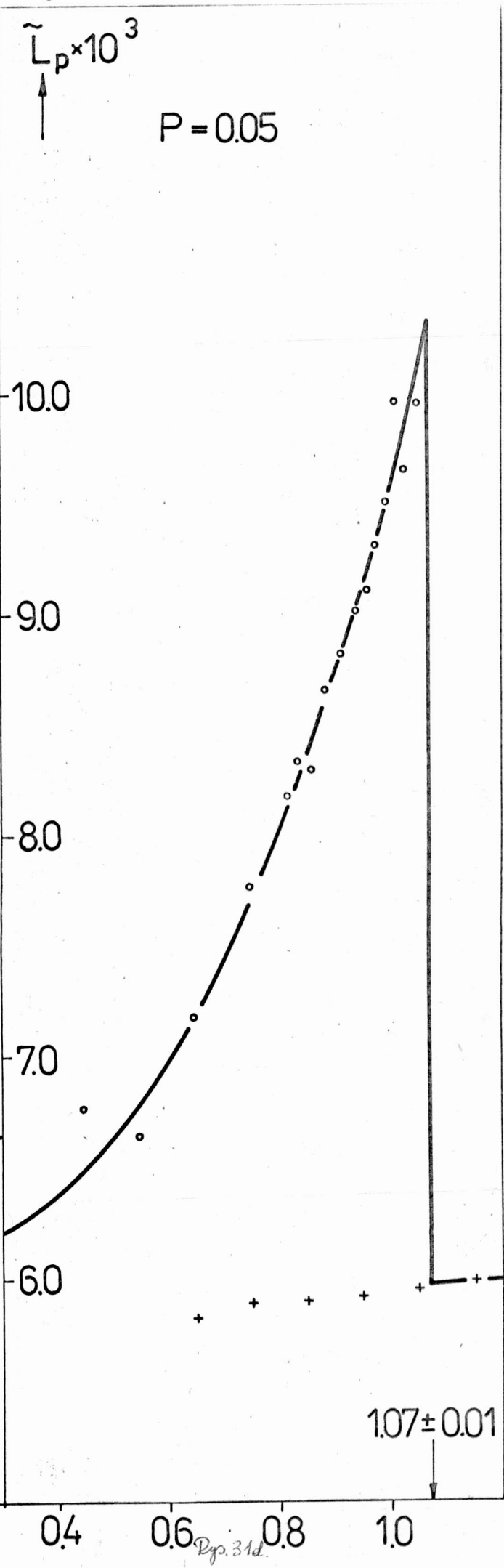
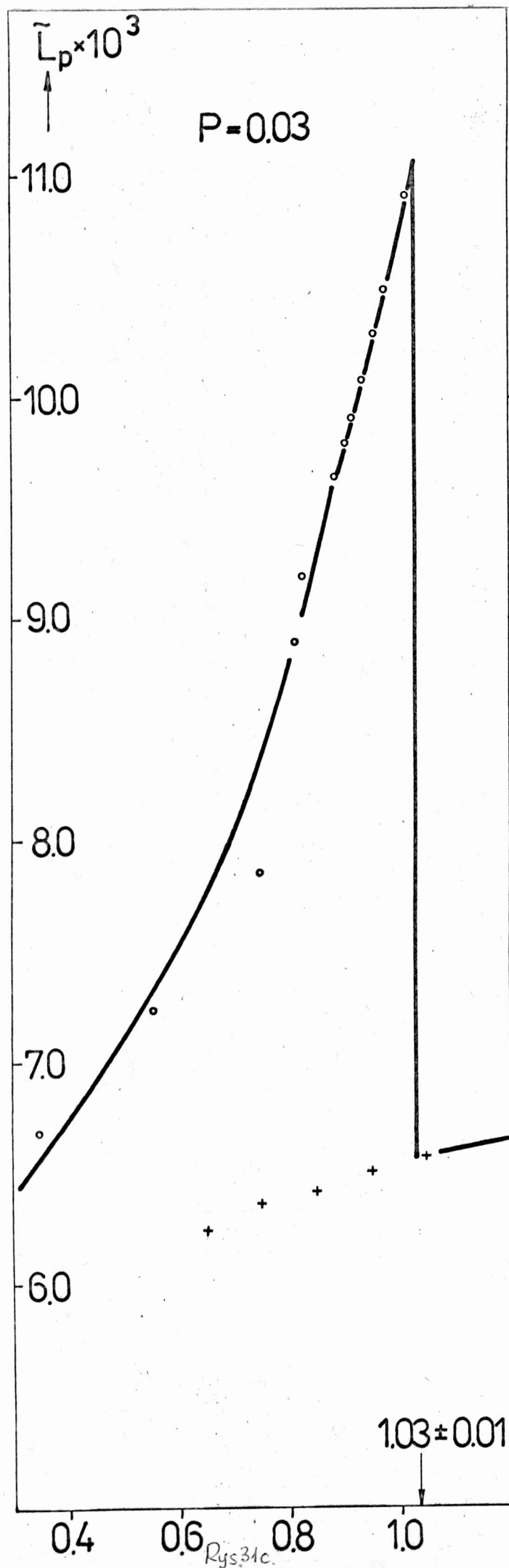


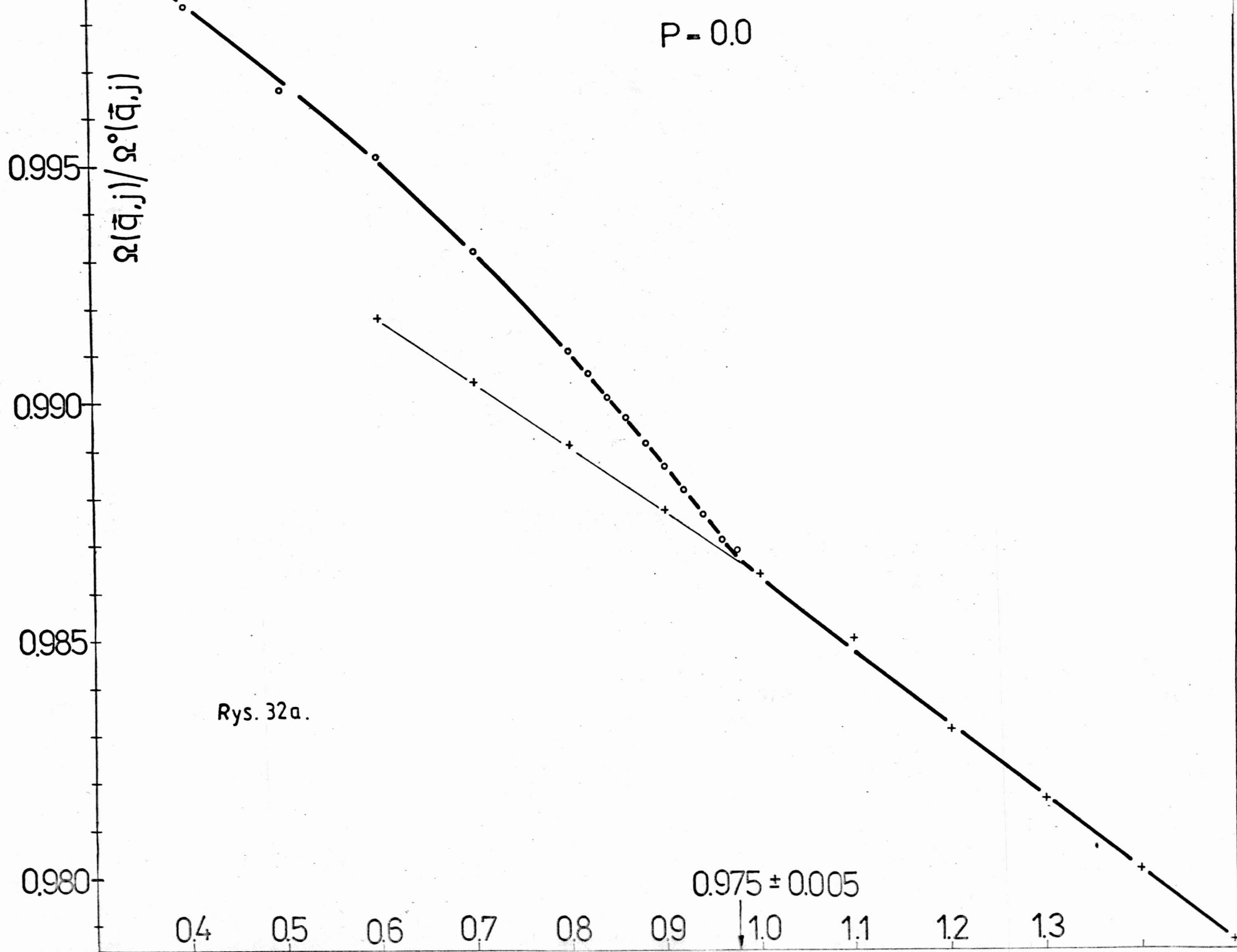


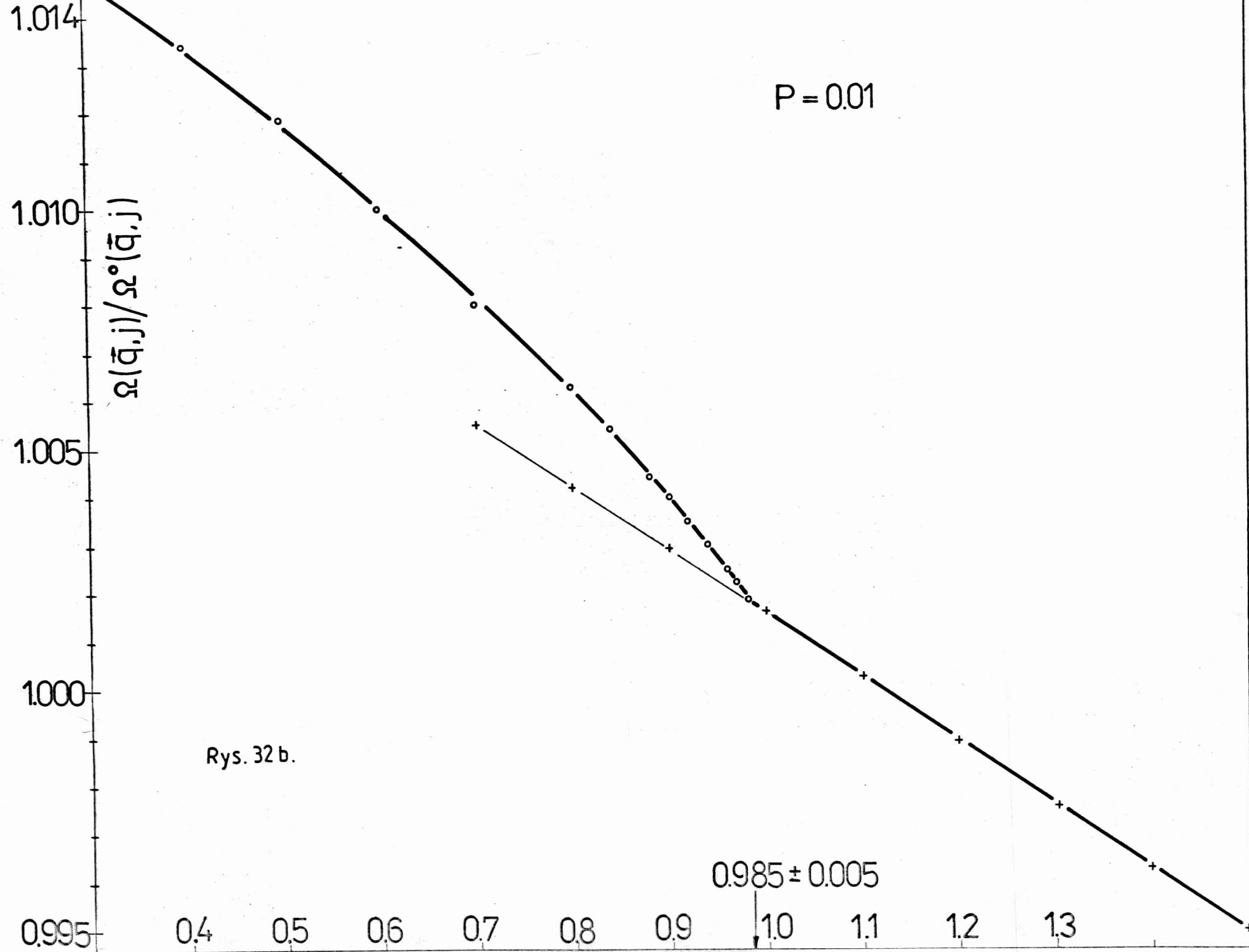
Rys. 31 a.

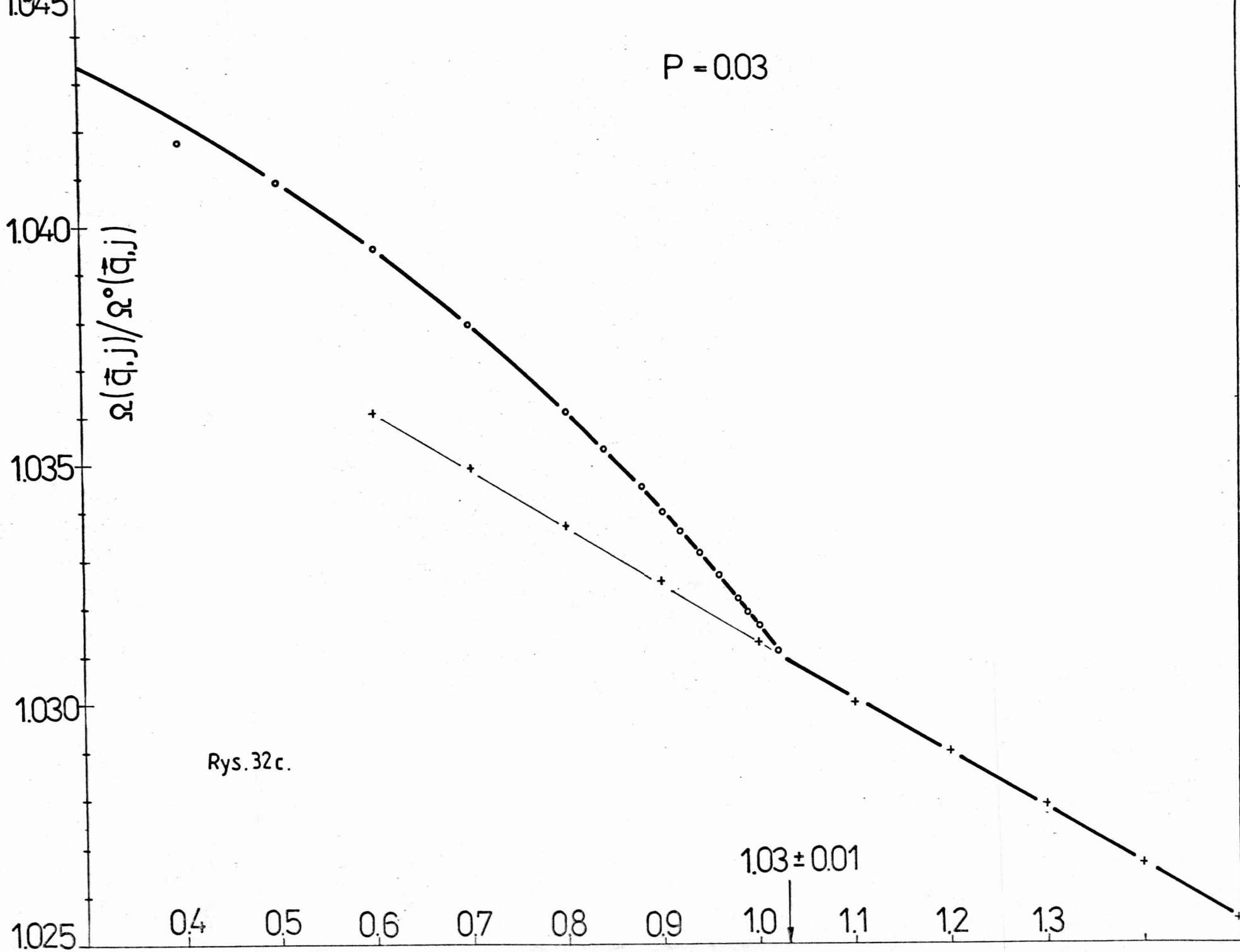


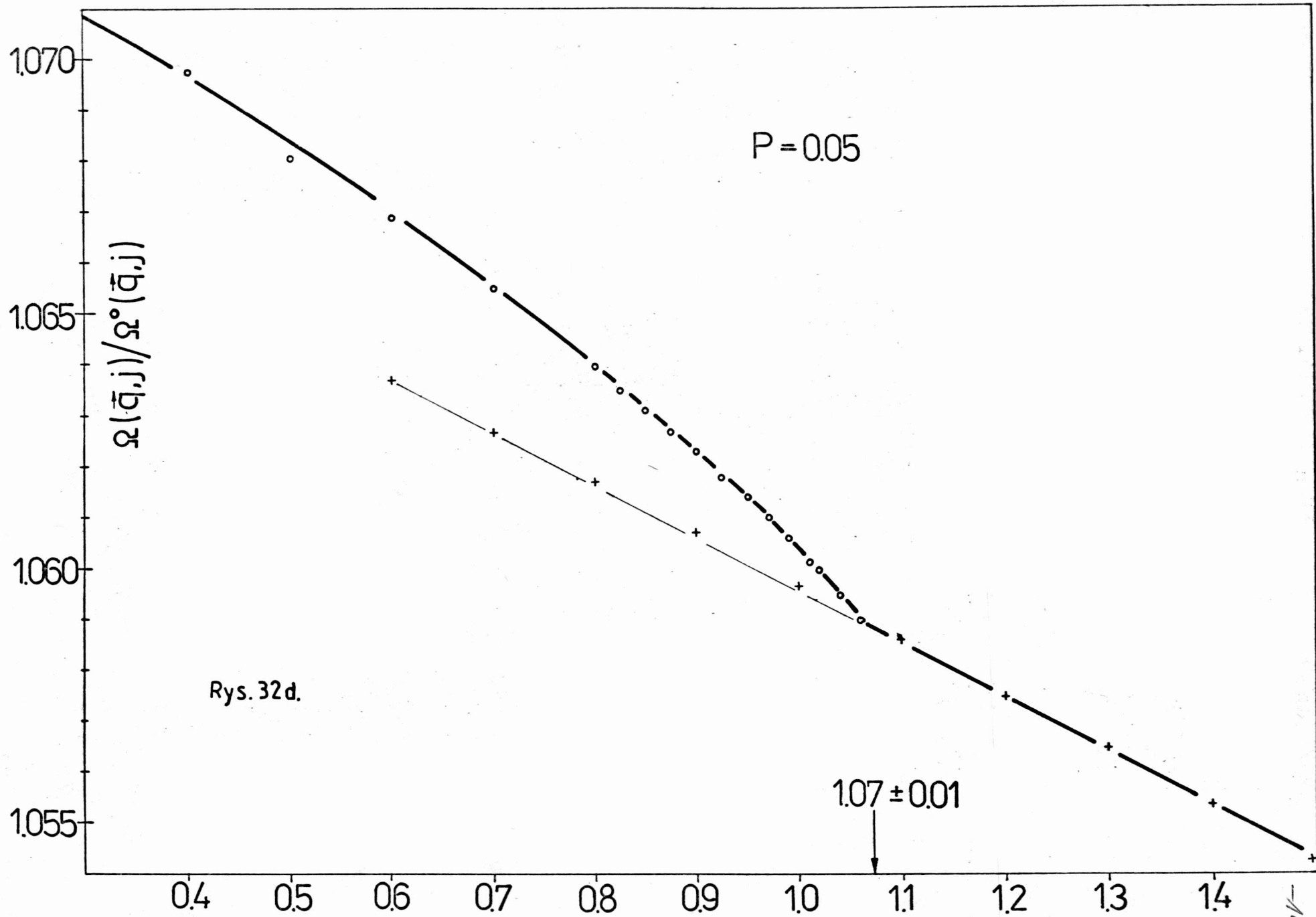
Rys. 31 b.





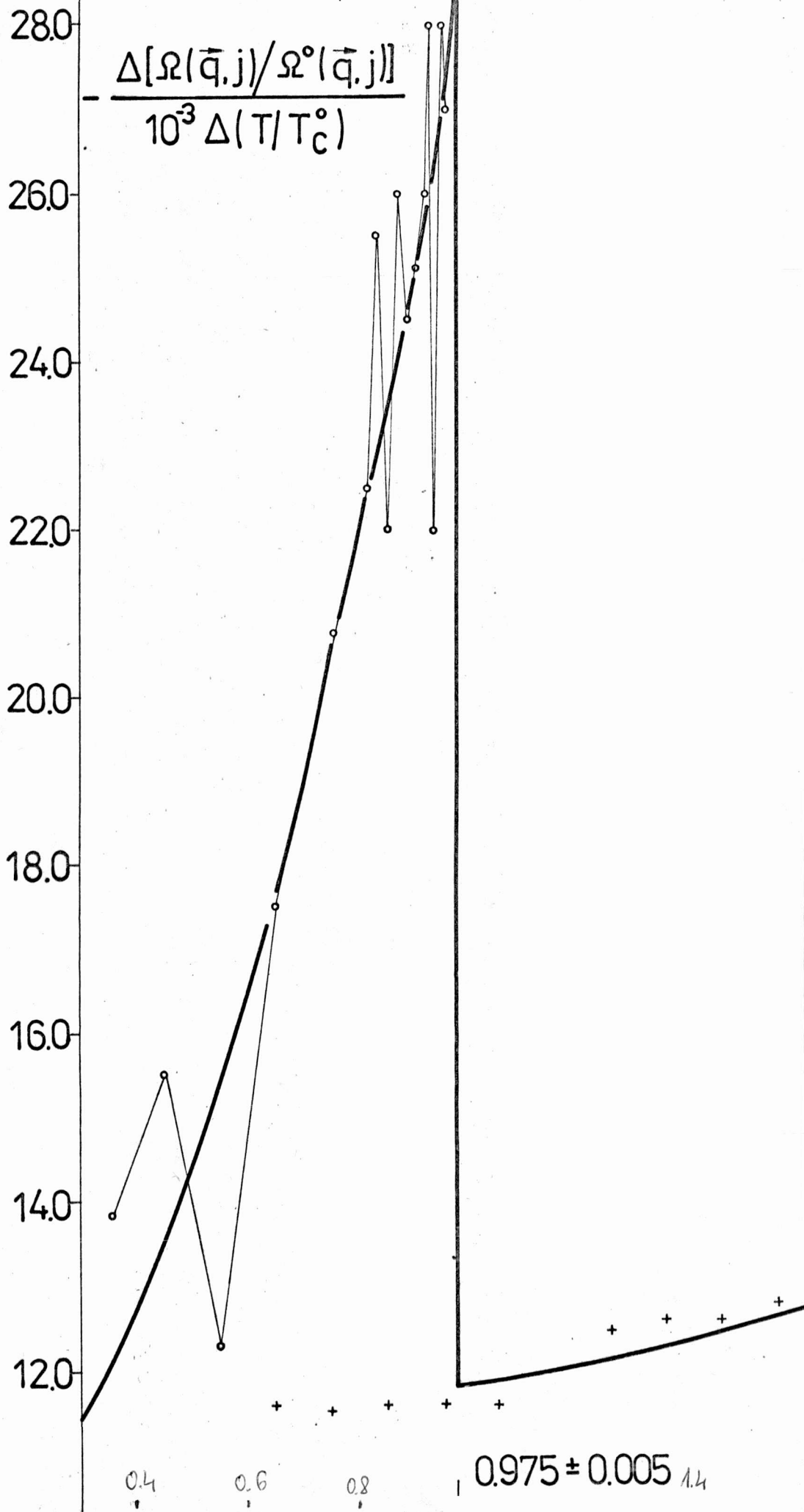






P = 0.0

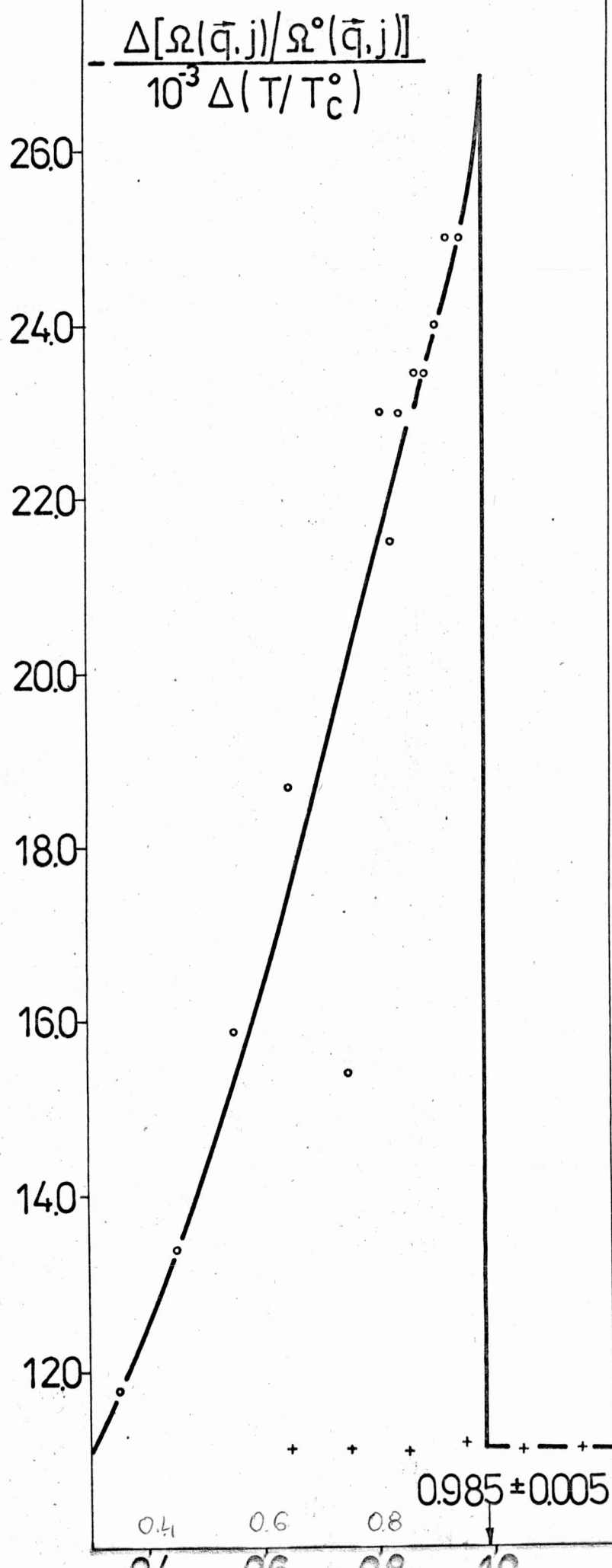
-144-



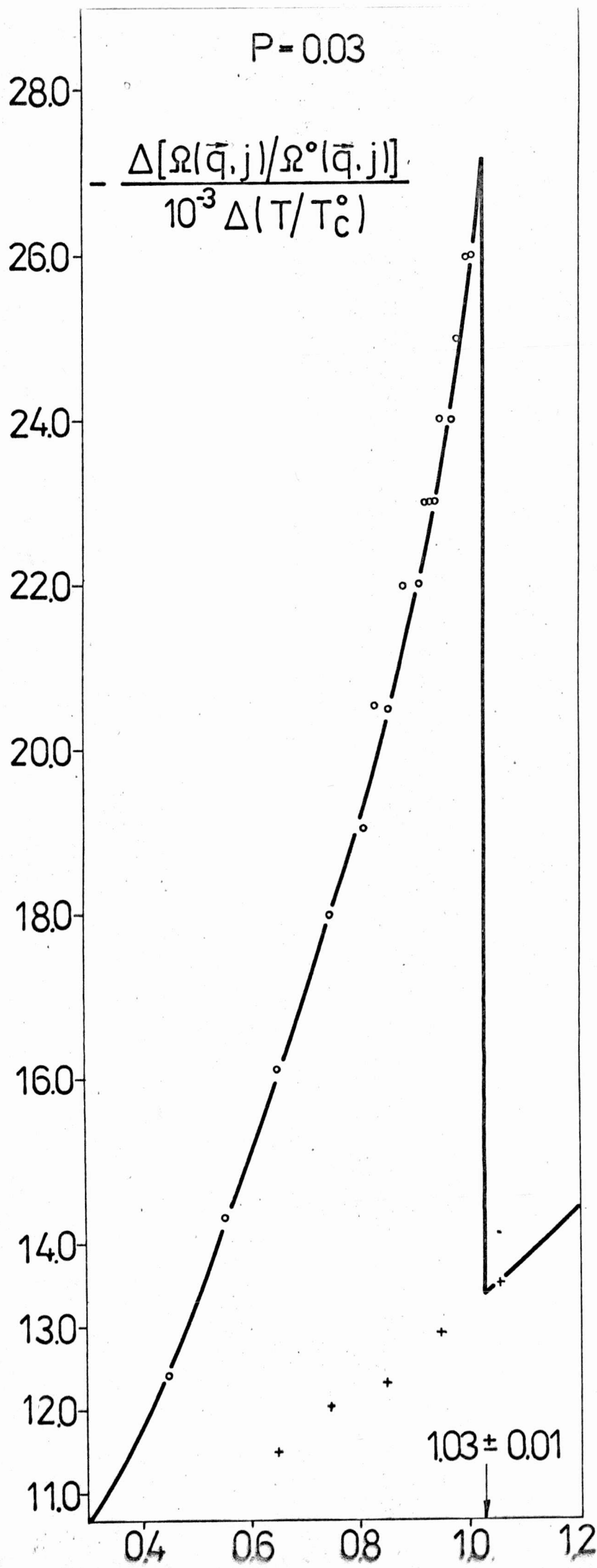
Rys. 33a.

P = 0.01

12-145



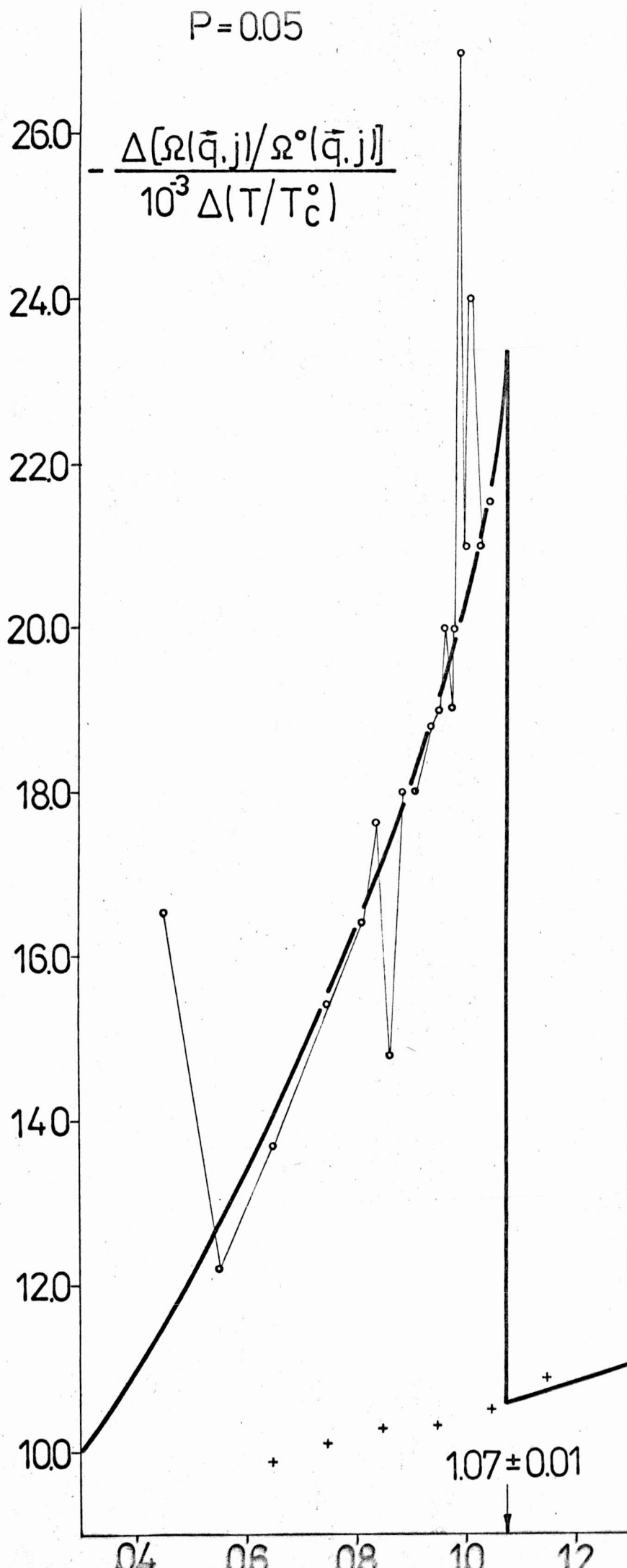
Rys. 33b.



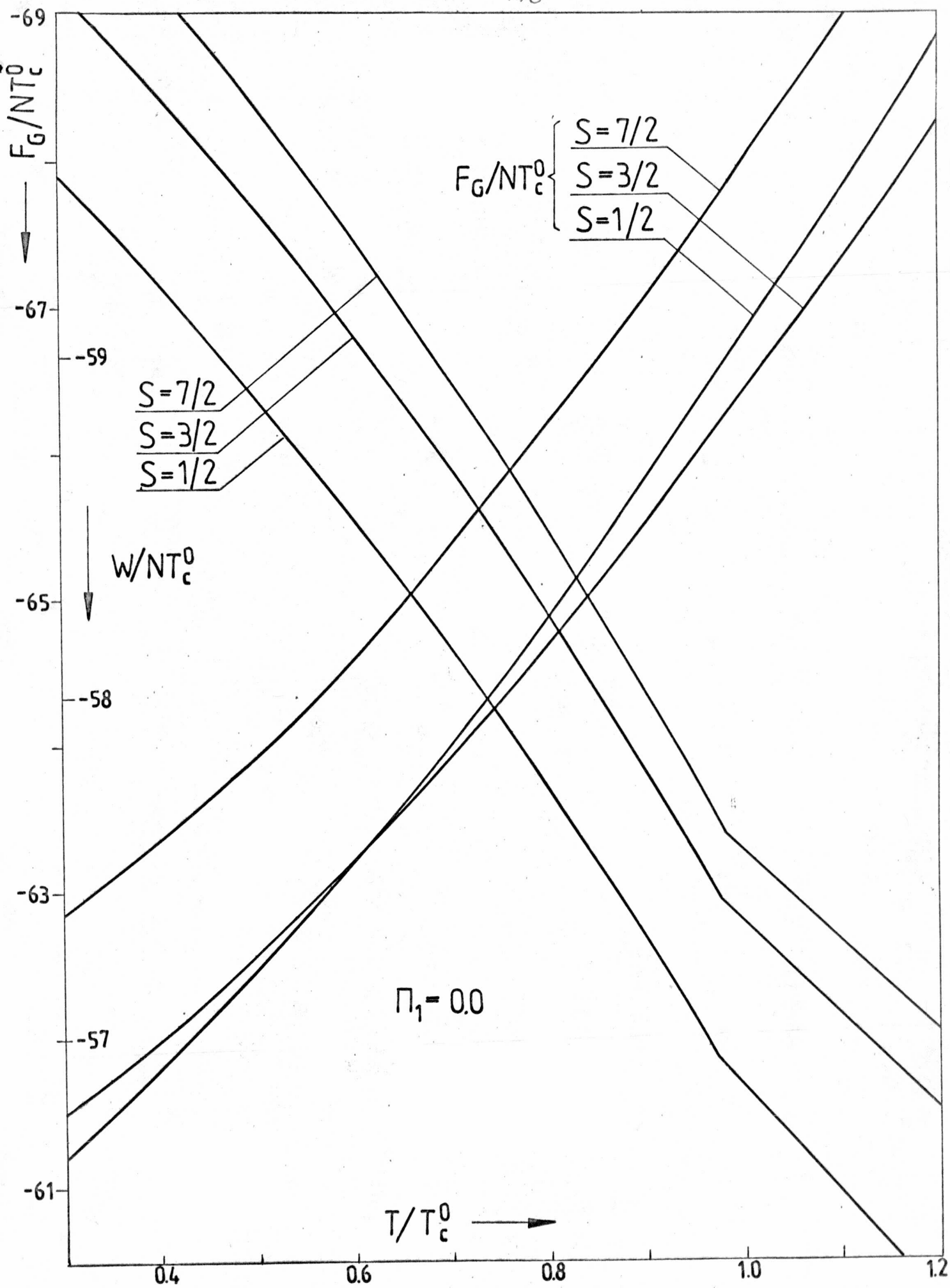
Rys. 33c.

P = 0.05

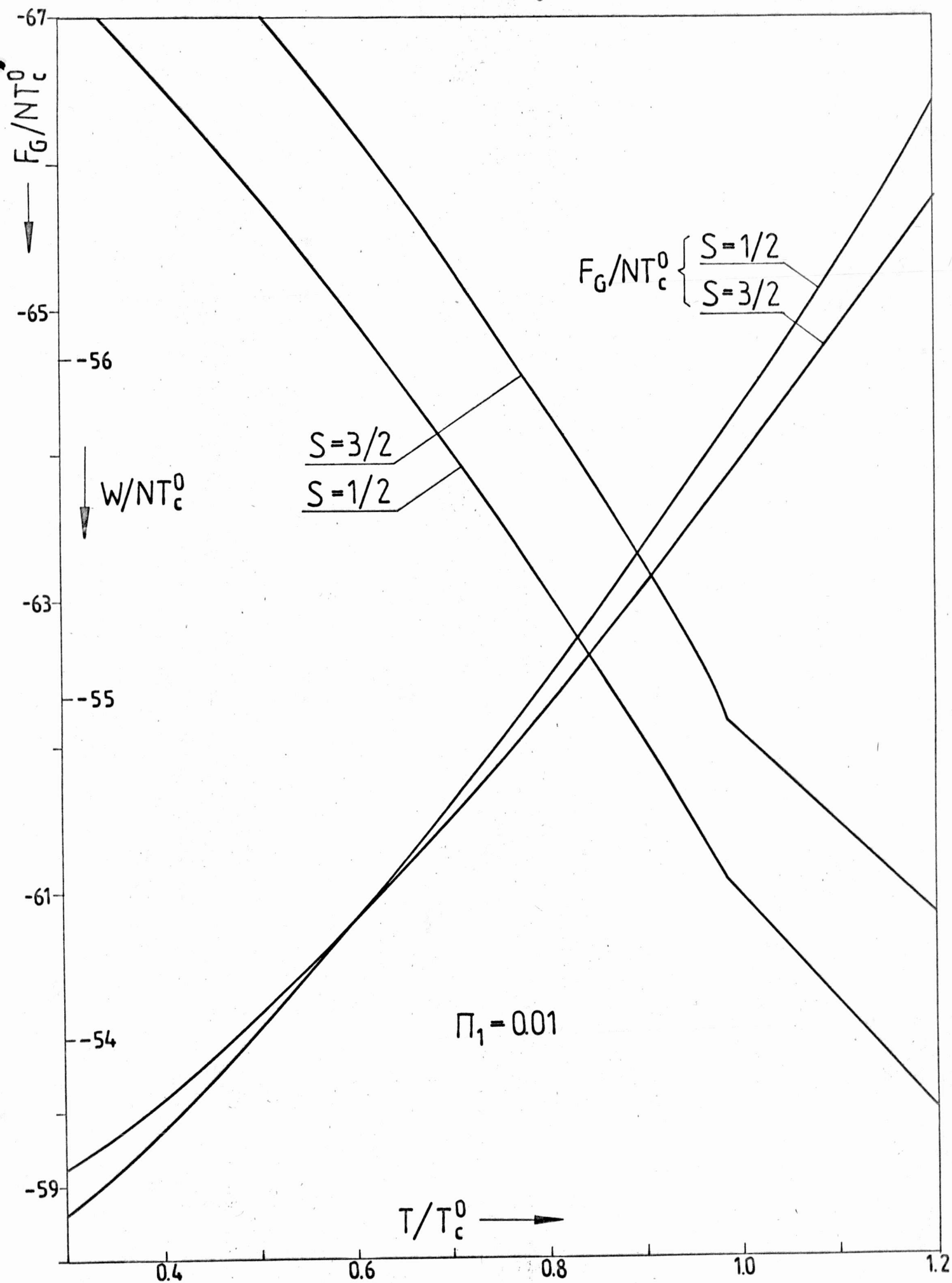
- 147 -



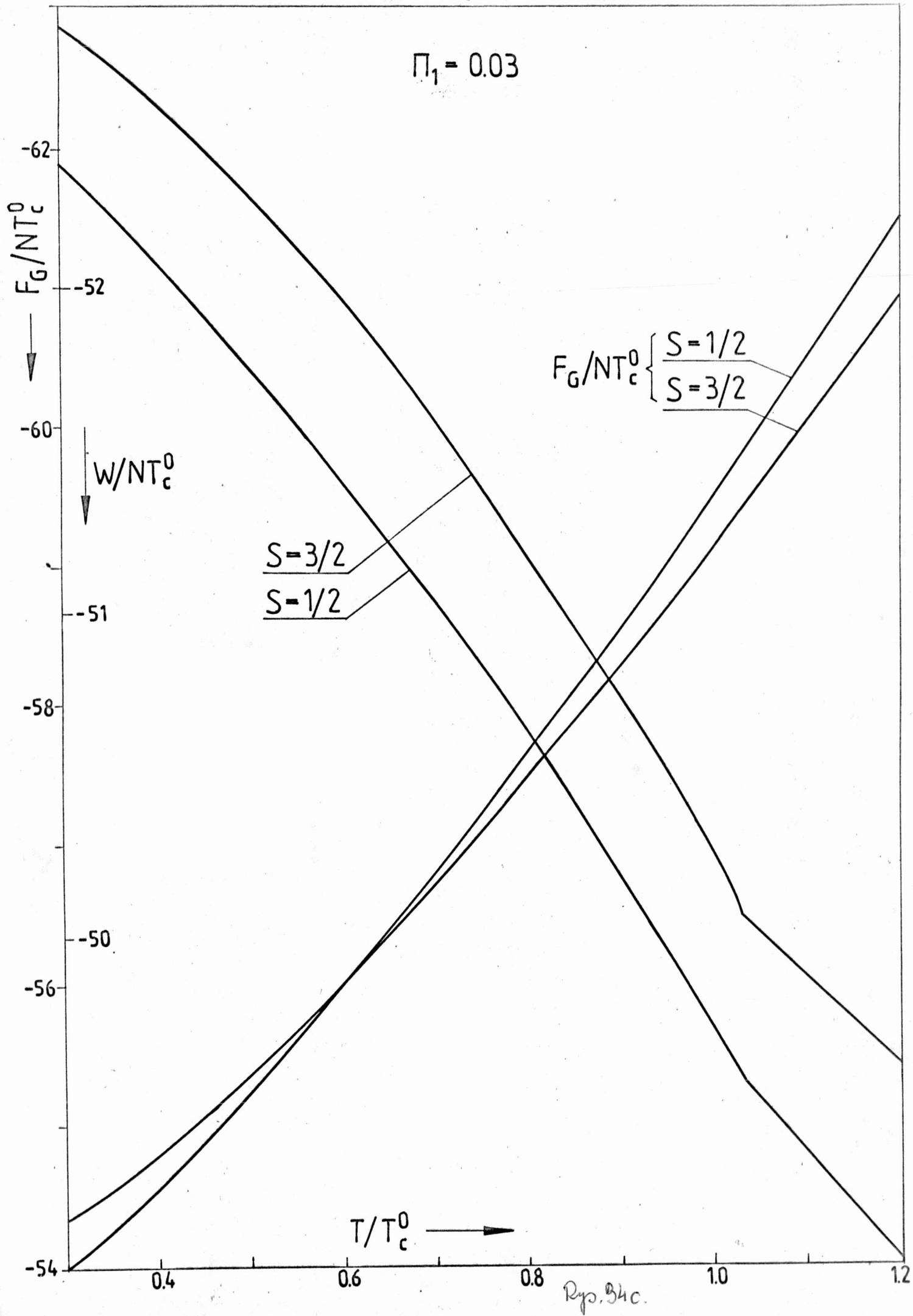
Rys. 33d.

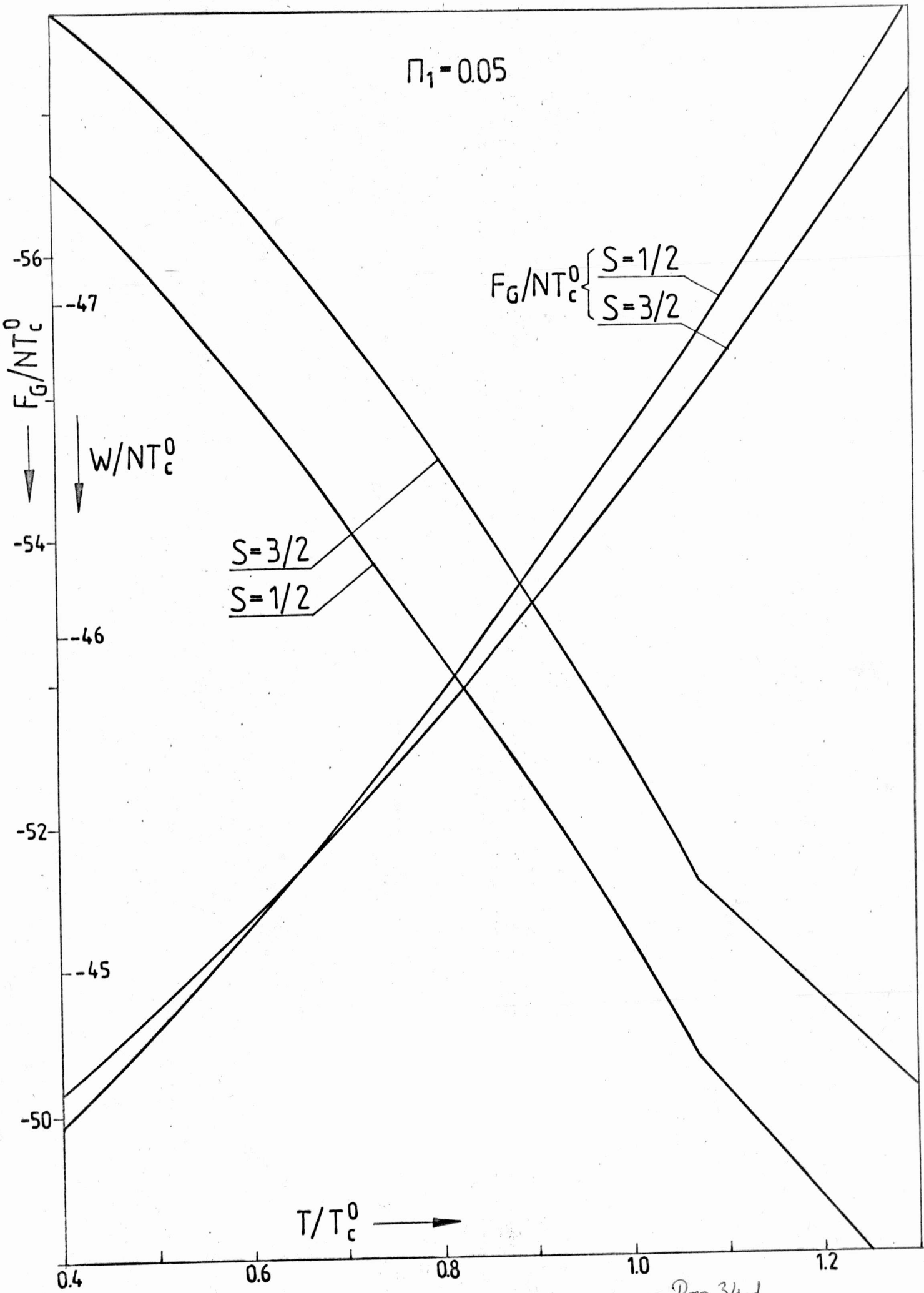


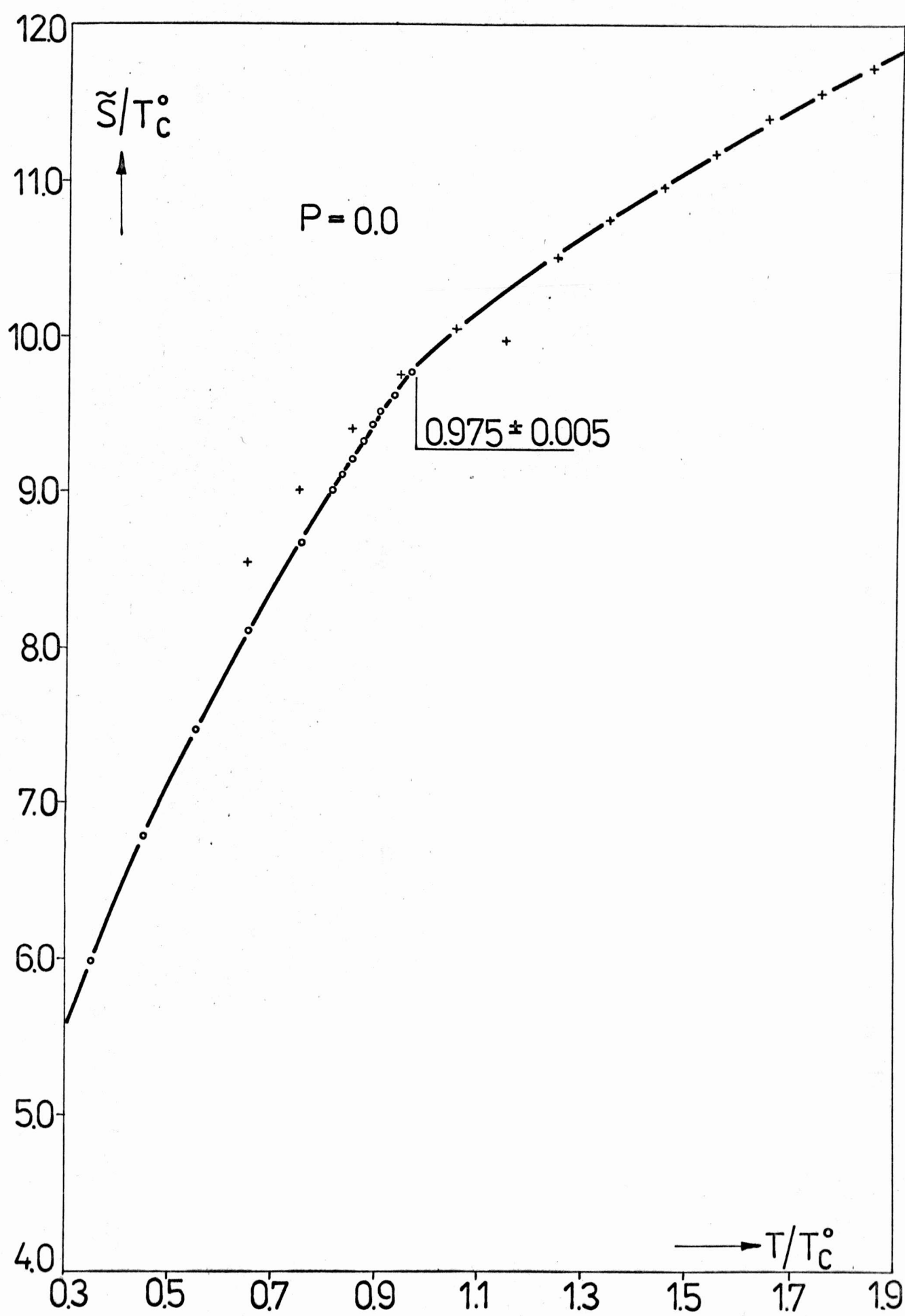
Rys. 34a.



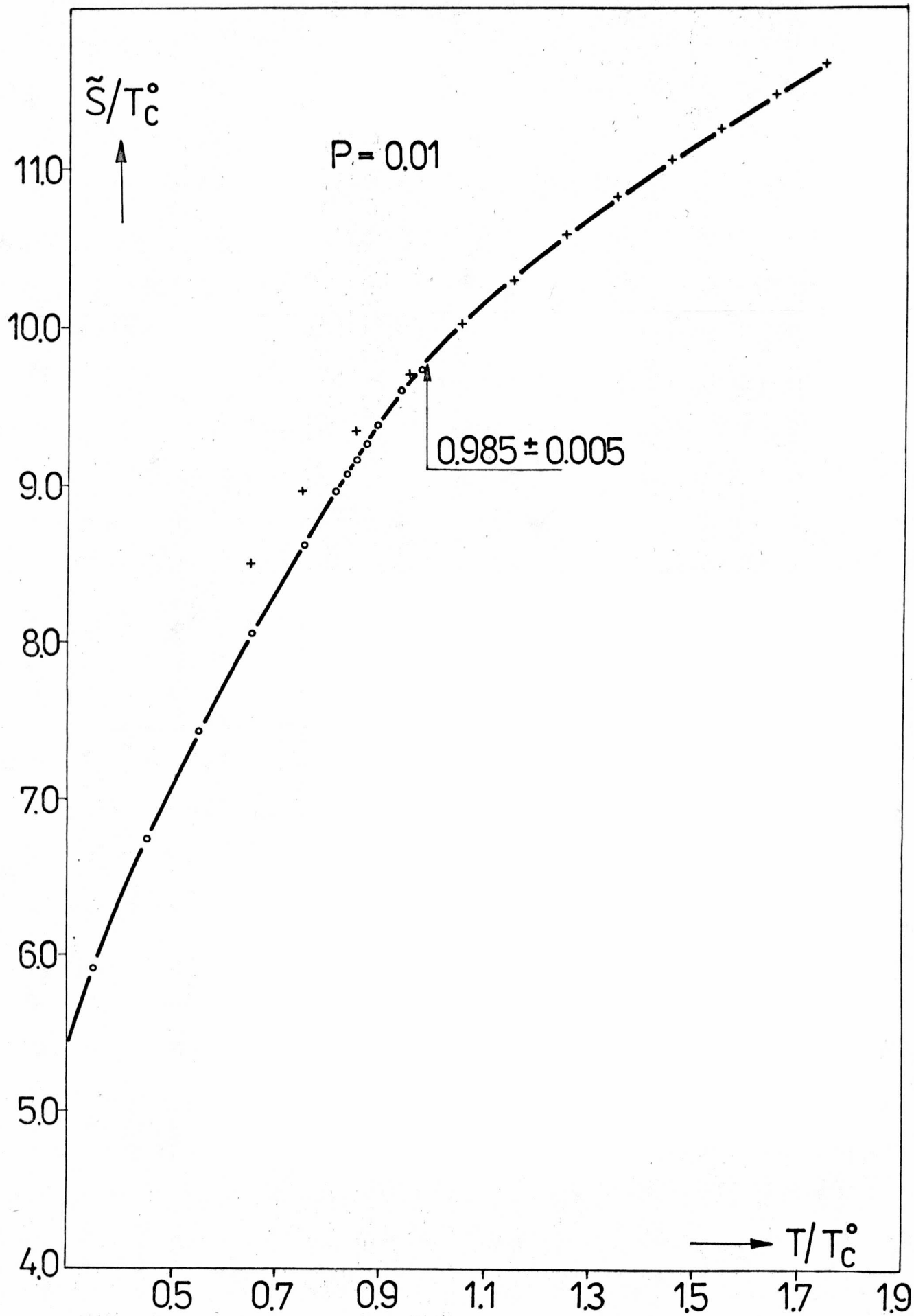
Rys. 34b.



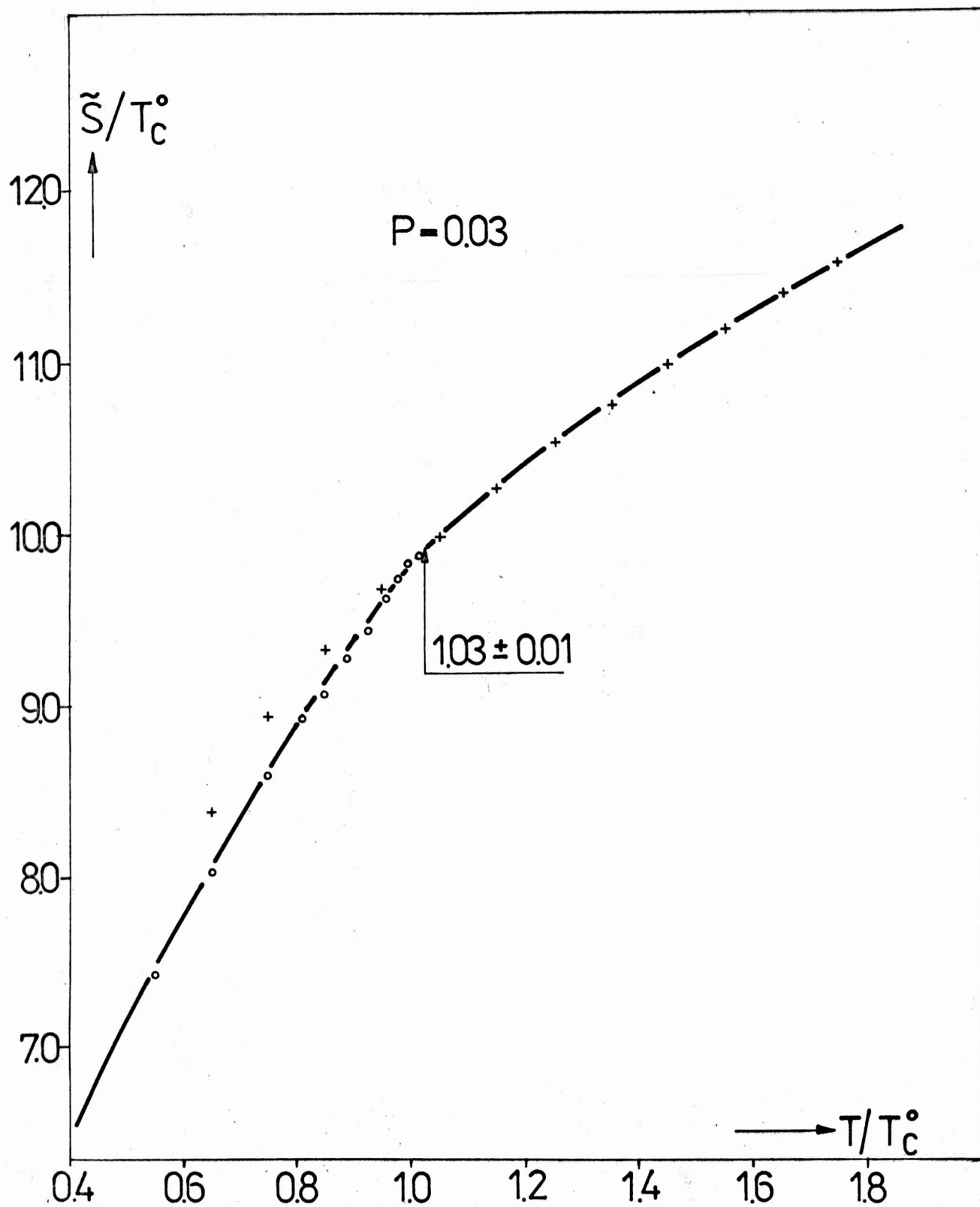




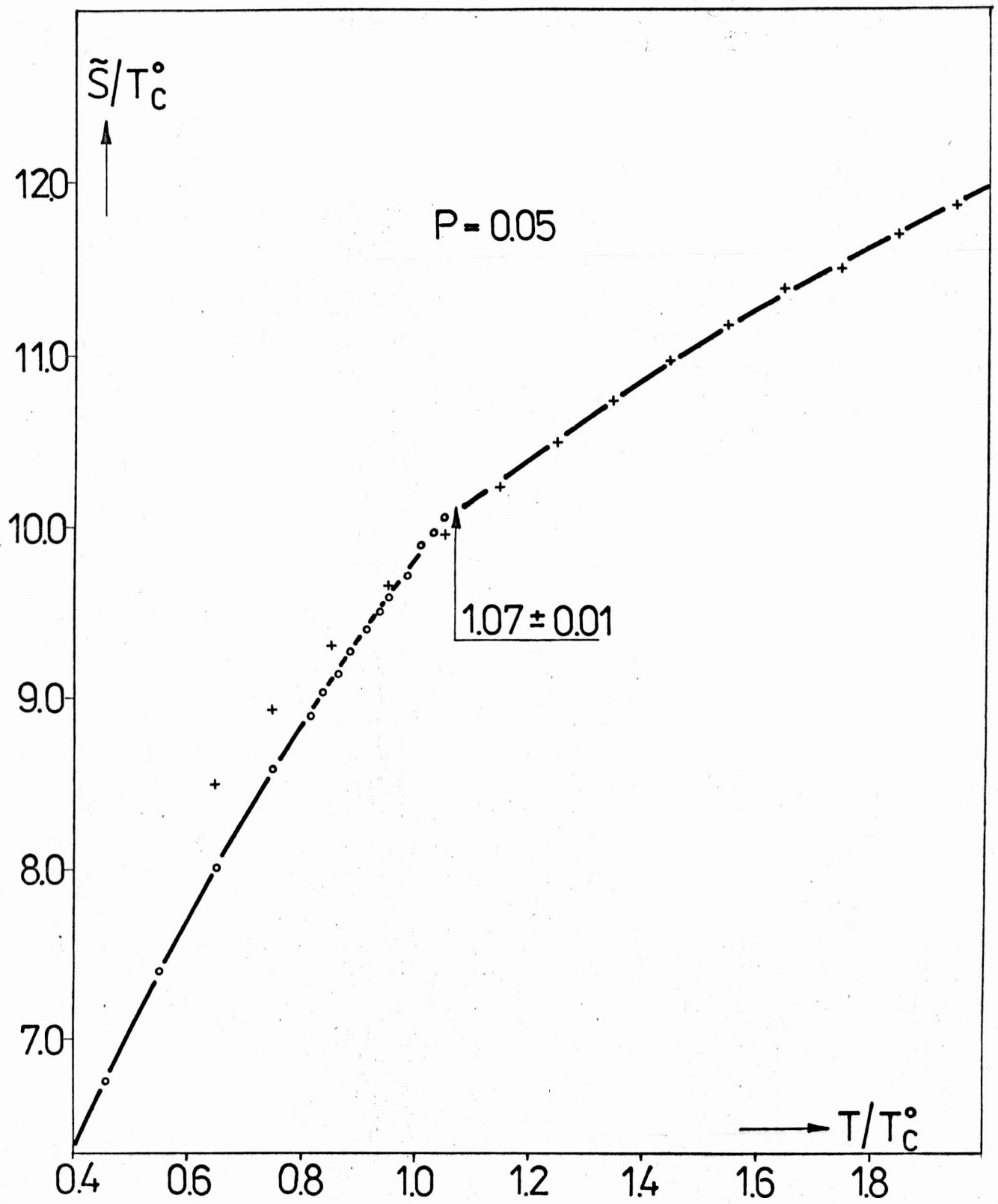
Rys. 35a.



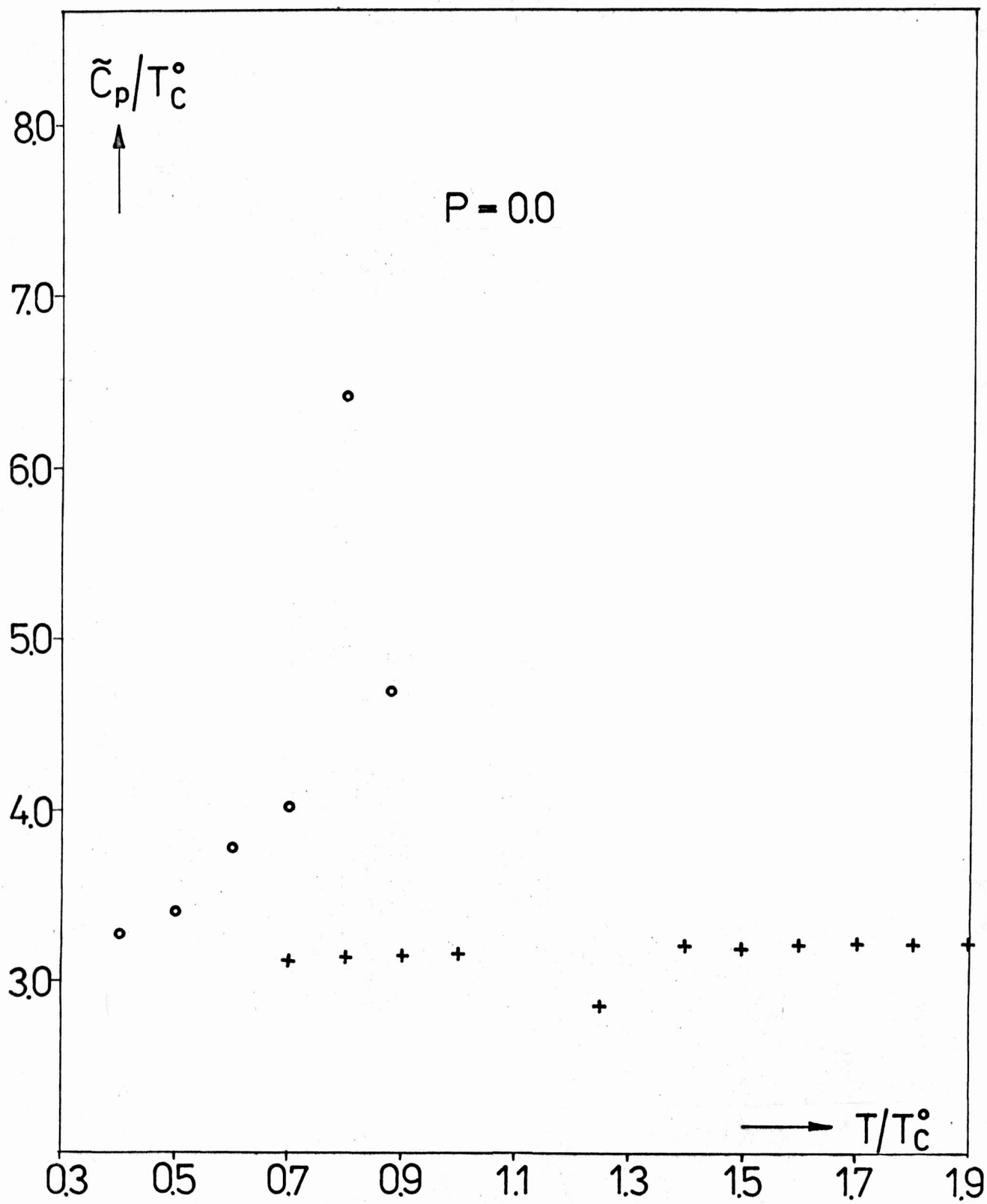
Rys. 35b.



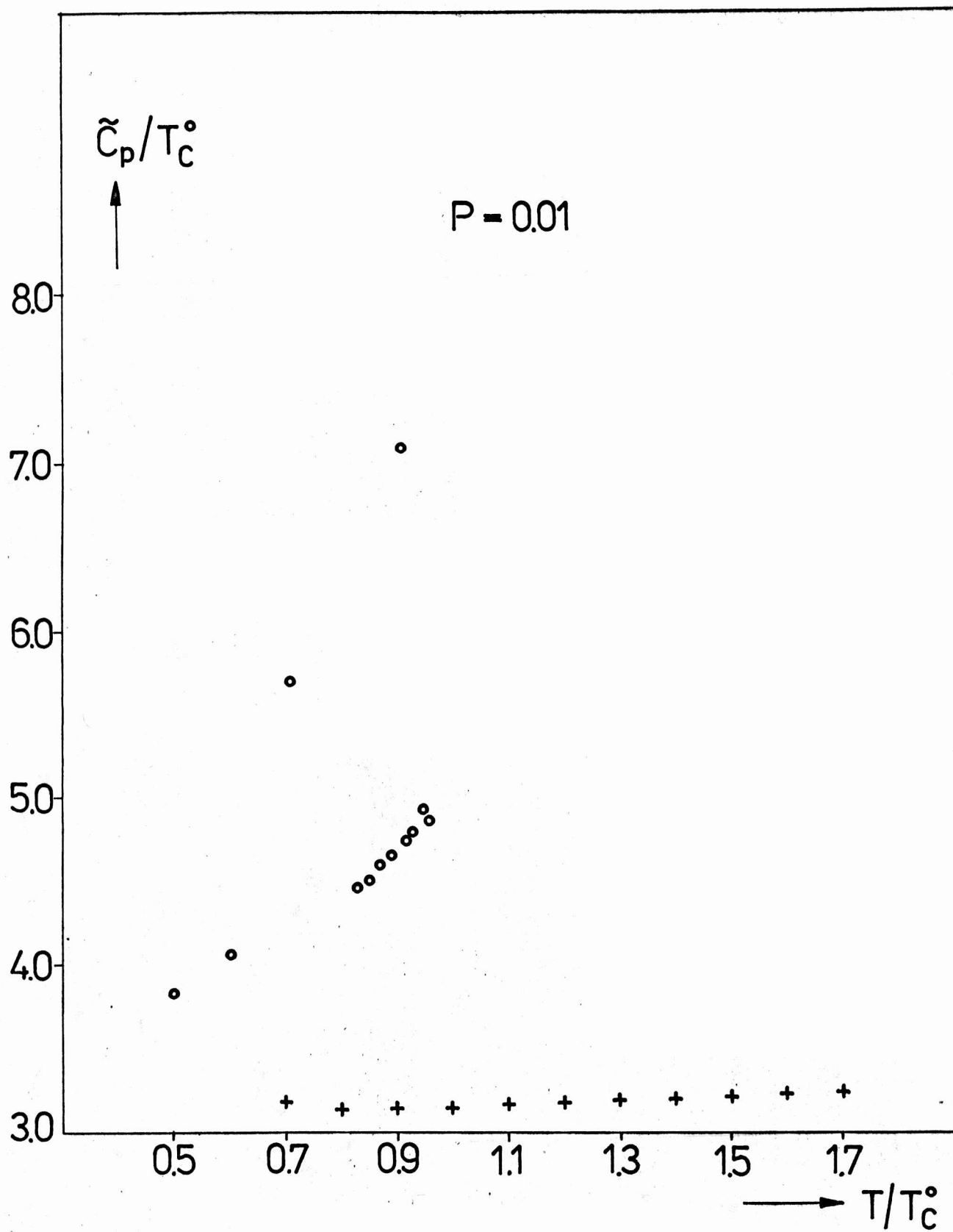
Rys. 35c.



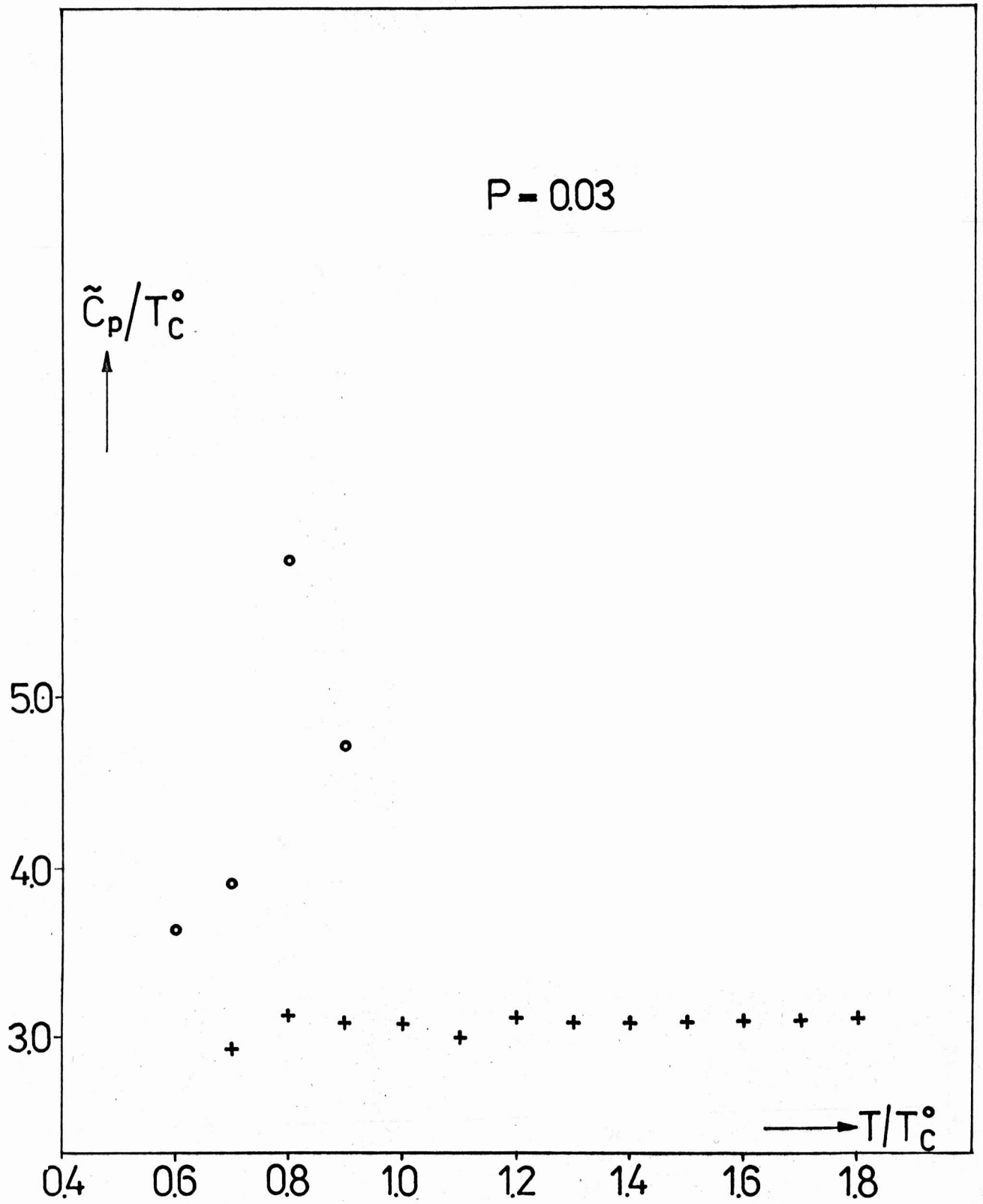
Rys. 35d.



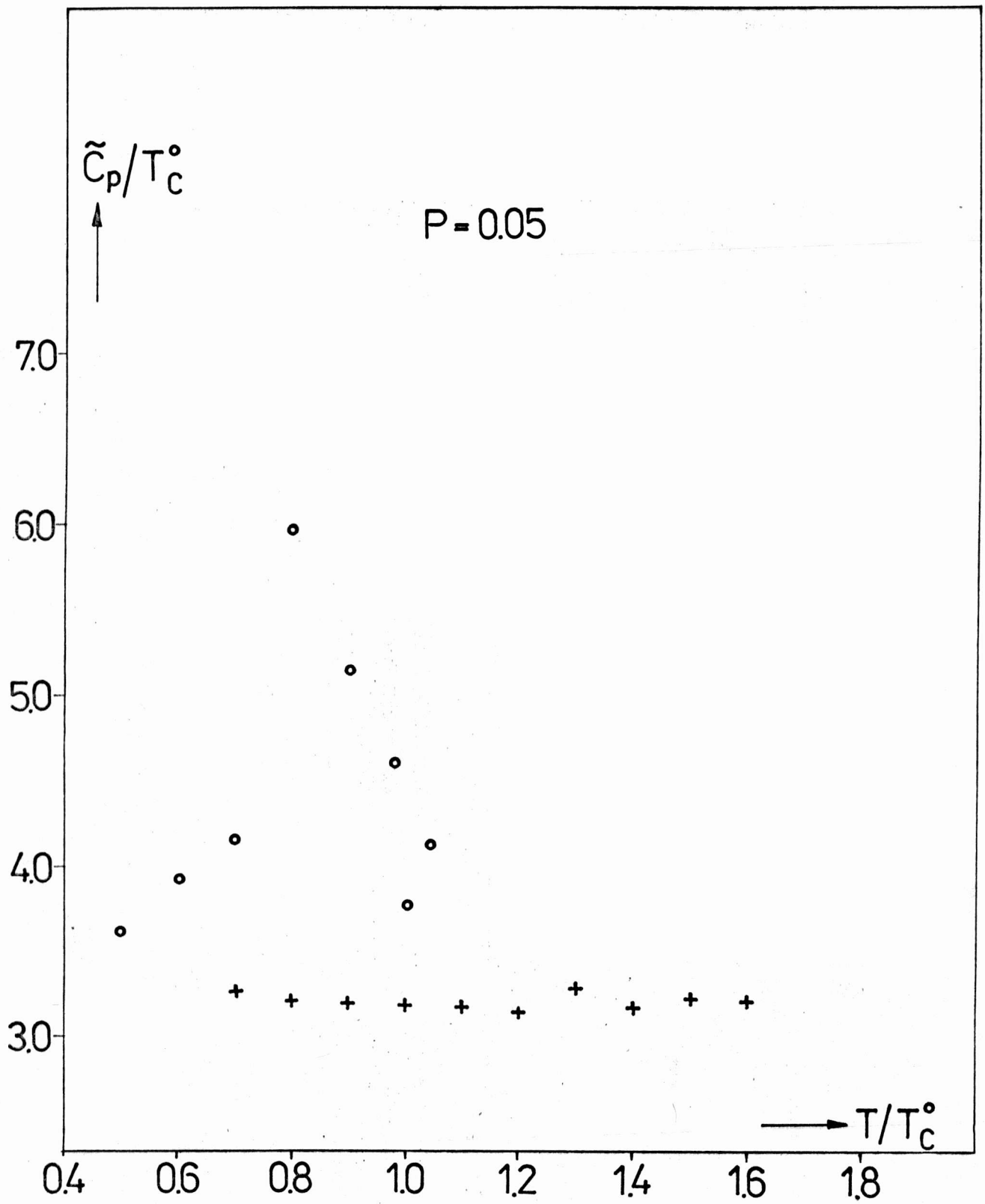
Rys. 36a.



Rys. 36 b.



Rys. 36 c.



Rys. 36d.

Opis rysunków

- Rys.22.** Nieredukowalna część pierwszej strefy Brillouin'a dla kryształu o sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej.
- Rys.23.** Histogram wartości własnych macierzy $D^{(1)}(\bar{q})$ (patrz (3.5.1) i (3.5.5-6)). Na osi odciętych odłożono wartości własne (3.5.1), które leżą w przedziale $(0,2)$.
- Rys.24a-d.** Rozwiązania równań (3.5.1), (3.5.8-9) dla podanych wartości π_1 , S. Wartość parametrów modelu określa (3.6.1a). Rys.24d zawiera wykresy entropii (patrz opis rysunku 26).
- Rys.25a-b.** Wykresy zależności $\tilde{F}_G/T_c^0$ (3.5.11) oraz $\tilde{W}/T_c^0$ (3.5.12) od temperatury przy podanych π_1 oraz S.
- Rys.26a-b.** Wykresy zależności entropii układu od temperatury $\tau = T/T_c^0$ (patrz również rys.24d).
- Rys.27a-b.** Wartości pojemności cieplnej układu, przy stałym ciśnieniu $C\pi_1$, w pobliżu temperatury przemiany fazowej. Wartości S oraz π_1 zaznaczono na rysunkach. Rys. 27a zawiera ^{również} wartości $C\pi_1$ dla $B = 18$. Na rysunku 27b punkty (+), (.) oraz linia przerywana (-----) określają wartości $C\pi_1$, odpowiednio, w fazie ferro- oraz paramagnetycznej.
- Rys.27b-c.** Wartości współczynnika objętościowej rozszerzalności cieplnej układu przy stałym ciśnieniu $\alpha\pi_1$ w pobliżu temperatury przemiany fazowej dla podanych S i π_1 . Na rys. 27b punkty (∇), (Δ)

oraz linia ciągła określają wartości $\mathcal{L}\pi_1$,
odpowiednio, w fazie ferro- oraz paramagne-
tycznej.

Rys. 27d. Wartości $C\pi_1$ oraz $\mathcal{L}\pi_1$ dla $S = 1/2$ i po-
danych π_1 ; parametry modelu określa (3.6.1b)
a $N_f = 88$ (patrz paragraf 3.6). Wartości:
 $\mathcal{L}\pi_1 = 0$ określają ($\square$) i (∇),
 $\mathcal{L}\pi_1 = 0.1$ ($\triangle$) i ($\circ$), $C\pi_1 = 0$ ($\cdot$), (∇)
i (+), $C\pi_1 = 0.1$ ($\boxplus$), ($\boxminus$) i ($\boxtimes$).
Pierwszy symbol w $\mathcal{L}\pi_1$ oraz dwa pierwsze w
 $C\pi_1$ oznaczają wartości tych wielkości w fa-
zie ferromagnetycznej.

Rys. 28a. Wykresy zależności czynnika renormalizacji
częstości drgań Δ (patrz (3.5.2)) od tempe-
ratury τ (linie ciągłe) oraz wartości $-\frac{d\Delta}{d\tau}$
w pobliżu punktu przemiany fazowej (znaki ($\square$),
(∇) odpowiadają $B = 12$; ($\boxtimes$) odpowiada $B = 18$
natomiast (∇) określają wartości $-d\Delta/d\tau$ w
fazie paramagnetycznej) dla różnych S i $\pi_1 = 0$.

Rys. 28b. To samo, co na rysunku 28a, dla ciśnienia
 $\pi_1 = 0.1$.

Rys. 29. Rozwiązania samouzgodnionego układu równań
(3.5.1), (3.5.8-9) dla $S = 3/2$, $\pi_1 = 0.0$ i 0.1
oraz dla $B = br_0$ równych 12 i 18. Parametry mo-
delu określa (3.6.1a), a $N_f = 239$.

Rys. 30a-d. Rozwiązania równań (3.5.1), (3.5.8-9) dla
 $S = 1/2$, $N_f = 88$. Parametry modelu określa
(3.6.1b). Wartości ciśnienia zredukowanego π_1
określają podane wartości P .

Rys. 31a-d. Wykresy współczynnika liniowej rozszerzalności cieplnej układu przy stałym ciśnieniu

$$L_P = \frac{1}{x(\tau)} \frac{dx}{d\tau} /_P = \pi_1 = \text{const}$$

w pobliżu punktu przemiany fazowej dla różnych ciśnień $\pi_1 = P$; $S = 1/2$ i $N_f = 88$.

Rys. 32a-d. Zależności czynnika renormalizacji częstości drgań $\Delta = \Omega(qj)/\Omega^0(qj)$ od τ dla podanych wartości $\pi_1 = P$; $S = 1/2$, $N_f = 88$.

Rys. 33a-d. Wykresy zależności $d\Delta/d\tau$ od $\tau = T/T_c^0$ dla różnych wartości $\pi_1 = P$; $S = 1/2$, $N_f = 88$.

Rys. 34a-d. Wykresy zależności energii swobodnej Gibbsa $\tilde{F}_G/T_c^0$ oraz entalpii $\tilde{W}/T_c^0$ od temperatury dla podanych wartości π_1 . Wartości $\tilde{F}_G/T_c^0$ i $\tilde{W}/T_c^0$, odpowiadające $S = 1/2$, uzyskano diagonalizując $D^{(1)}(\bar{q})$ dla $N_f = 88$ wektorów falowych; pozostałe wykresy otrzymano dla $N_f = 239$; parametry modelu określa (3.6.1b).

Rys. 35a-d. Zależności entropii układu od temperatury dla podanych $\pi_1 = P$; $S = 1/2$, $N_f = 88$.

Rys. 36a-d. Wartości pojemności cieplnej C_P/T_c^0 układu w pobliżu punktu przemiany fazowej dla podanych $P = \pi_1$; $S = 1/2$, $N_f = 88$.

4. Oddziaływanie spinowo-fononowe w modelu Heisenberga ze spinem $S = 1$ i wymianą bikwadratową.

4.1. Wprowadzenie.

Ważną rolę w teorii magnetyzmu odgrywają modele spinowe, w których uwzględnia się kwadrupolowe (i wyższe) człony sprzężenia spinowego [2, 3, 14, 17, 29, 30, 164-171].

Człony te są szczególnie istotne w tych przypadkach, gdy całka wymiany między najbliższymi sąsiadami przyjmuje anomalnie małą wartość [29].

W poprzednim rozdziale w hamiltonianie układu (patrz wzór (3.1.3)) dla $S \geq 1$ pominięte zostały człony sprzężenia spinowego

$$\sum_{n=2}^{2S} \mathcal{K}_n(\bar{R}_m; \bar{R}_{m'}) (\bar{S}_m \bar{S}_{m'})^n. \quad (4.1.1)$$

W tej części pracy rozpatrzymy model Heisenberga izotropowego ferromagnetyka o spinie $S = 1$ w silnie anharmonicznej sieci, którego hamiltonian przyjmujemy w następującej postaci [103]:

$$\mathcal{H}_{S=1} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{L-S}^{S=1}, \quad (4.1.2)$$

$$\mathcal{H}_L = \sum_l \frac{\bar{P}_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m}' \sum_l \sum_{1\dots l} \frac{1}{l!} \Phi_{n-m}^{1\dots l} \bar{u}_1 \dots \bar{u}_l, \quad (4.1.3)$$

$$\mathcal{H}_{L-S}^{S=1} = -\mu_B \hbar \sum_n S_n^z -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{n,m}' \sum_l \sum_{1\dots l} \frac{1}{l!} [\mathcal{J}_{n-m}^{1\dots l} + \mathcal{K}_{(2)n-m}^{1\dots l} \bar{S}_n \bar{S}_m] \bar{S}_n \bar{S}_m. \quad (4.1.4)$$

W (4.1.3) i (4.1.4) zastosowano oznaczenia, takie same, jak w poprzednich rozdziałach (patrz paragrafy 2.1 i 3.1). W rozważanym modelu źródłem oddziaływania spinowo-fononowego jest zależność całki wymiany $\mathcal{J}$ oraz całki wymiany bi-kwadratowej $K_{(2)}$ od chwilowych odległości między atomami [103].

W następnych paragrafach tego rozdziału zbadamy własności termodynamiczne układu (4.1.2)-(4.1.4) stosując przybliżenie pseudoharmoniczne i przybliżenie pola molekularnego lub faz przypadkowych dla podukładów, odpowiednio, sieciowego i magnetycznego [84].

4.2. Funkcje termodynamiczne układu w przybliżeniu pola samouzgodnionego.

W obliczeniach energii swobodnej metodą wariacyjną próbny hamiltonian $\mathcal{H}_0^{S=1}$ wybieramy w postaci [103]:

$$\mathcal{H}_0^{S=1} = \sum_{n,\alpha} \frac{(P_n^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,n' \\ \alpha,\alpha'}} \tilde{\Phi}_{\alpha\alpha'}(n,n') u_n^\alpha u_{n'}^{\alpha'} - \sum_n \left(k_n^{(1)} + k_n^{(2)} S_n^z \right) S_n^z. \quad (4.2.1)$$

Wtedy próbna energia swobodna układu jest równa

$$\begin{aligned} F_{trial}^{S=1} = & T \left\{ \sum_{\bar{q}j} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2T} \right) \right] - \right. \\ & \left. - \sum_n \ln \left[\sum_{m=-1}^{m=1} \exp \left[\left(k_n^{(1)} m + k_n^{(2)} m^2 \right) \right] \right] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n,n'} \left[\tilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \tilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \langle S_{n_0}^z \rangle \langle S_{n'_0}^z \rangle \right] + \\ & + \sum_n \left[k_n^{(1)} - \mu_B \hbar + \frac{1}{4} \sum_{n'} \tilde{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \langle S_{n'_0}^z \rangle \right] \langle S_{n_0}^z \rangle \\ & + \sum_n \left[k_n^{(2)} + \sum_{n'} \left[1 - \frac{3}{4} \langle (S_{n'_0}^z)^2 \rangle \right] \tilde{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \right] \langle (S_{n_0}^z)^2 \rangle \\ & - \sum_{n,n'} \tilde{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,n' \\ \alpha,\alpha'}} \tilde{\Phi}_{\alpha\alpha'}(n,n') \langle u_n^\alpha u_{n'}^{\alpha'} \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

W (4.2.2) zastosowano oznaczenia takie same, jak w rozdziałach 2 i 3. Wyrażenie na $\widetilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'})$ ma postać

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) &= \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \langle (u_n^\alpha - u_{n'}^\alpha)(u_n^\beta - u_{n'}^\beta) \rangle_0 \nabla_n^\alpha \nabla_{n'}^\beta \right\} \mathcal{K}_{(2)}(\bar{n} - \bar{n}'). \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Z warunków stacjonarności $F_{\text{trial}}^{S=1'}$ względem

$$\begin{aligned} \langle u_n^\alpha u_{n'}^{\alpha'} \rangle_0, \quad \widetilde{\Phi}_{\alpha\beta}(n, n'), \quad \langle S_n^z \rangle_0, \quad \langle (S_n^z)^2 \rangle_0, \\ k_n^{(1)}, \quad k_n^{(2)} \quad i \quad x_n^\alpha \end{aligned}$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned} \widetilde{\Phi}_{\alpha\alpha'}(n, n') &= \delta_{nn'} \sum_l \nabla_n^\alpha \nabla_n^{\alpha'} \{ \widetilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_l) - \\ &- \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_l^z \rangle_0 \widetilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_l) + \widetilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_l) [2 \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 \\ &+ \frac{1}{2} \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_l^z \rangle_0 - 2 - \frac{3}{2} \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 \langle (S_l^z)^2 \rangle_0] \} \\ &- \nabla_n^\alpha \nabla_n^{\alpha'} \{ \widetilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \widetilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \\ &+ \widetilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) [2 \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 + \frac{1}{2} \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 - 2 \\ &- \frac{3}{2} \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 \langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0] \}, \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

$$\langle u_n^* u_{n'}^* \rangle_0 = \frac{1}{2MN} \sum_{\bar{q}j} \frac{e_{\alpha}^*(\bar{q}j) e_{\alpha}(\bar{q}j)}{\Omega(\bar{q}j)} \coth \left[\frac{\Omega(\bar{q}j)}{2T} \right] e^{i\bar{q}(\bar{n}-\bar{n}')} , \quad (4.2.5)$$

$$k_n^{(1)} = \mu_B \hbar + \sum_{n'} \left[\tilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \frac{1}{2} \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \right] \langle S_{n'}^z \rangle_0 , \quad (4.2.6)$$

$$k_n^{(2)} = \frac{3}{2} \sum_{n'} \mathcal{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \left[\langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0 - \frac{2}{3} \right] , \quad (4.2.7)$$

$$\langle S_n^z \rangle_0 = \mathcal{B}_1^{(1)}(T, k_n^{(1)}, k_n^{(2)}) , \quad (4.2.8)$$

$$\langle (S_n^z)^2 \rangle_0 = \mathcal{B}_1^{(2)}(T, k_n^{(1)}, k_n^{(2)}) , \quad (4.2.9)$$

$$\begin{aligned} \Pi = & -\frac{1}{6} \sum_{n, n', \alpha} (x_n^\alpha - x_{n'}^\alpha) \frac{\partial}{\partial x_n^\alpha} \left\{ \tilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \right. \\ & - \tilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 + \frac{1}{2} \mathcal{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \left[\langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \right. \\ & \left. \left. + 4 \left(\langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0 - 1 \right) - 3 \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 \langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0 \right] \right\} . \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

W (4.2.4) - (4.2.10) wprowadzono funkcję

$$\mathcal{B}_S^{(n)}(T, k_n^{(1)}, k_n^{(2)}) = \frac{\sum_{m=-S}^{m=S} m^n \exp\left[\frac{k_n^{(1)}m + k_n^{(2)}m^2}{T}\right]}{\sum_{m=-S}^{m=S} \exp\left[\frac{k_n^{(1)}m + k_n^{(2)}m^2}{T}\right]} \quad (4.2.11)$$

$(n=1, 2)$.

Z uwagi na (4.2.4) - (4.2.10), energia swobodna
Gibbsa $F_G^{S=1}$ oraz entalpia $W^{S=1}$ wyrażają się wzorami:

$$\begin{aligned} F_G^{S=1} = & T \left\{ \sum_{\bar{q}, j} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\Omega(\bar{q}, j)}{2T} \right) \right] \right. \\ & \left. - \sum_n \ln \left[\sum_{m=-1}^{m=1} \exp \left[(k_n^{(1)}m + k_n^{(2)}m^2) / T \right] \right] \right\} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \left[\tilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) + \tilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \right] \\ & + \frac{1}{4} \sum_{n, n'} \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \left[3 \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 \langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0 \right. \\ & \left. - \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 - 4 \right] + \Pi \cdot V, \end{aligned} \quad (4.2.12)$$

$$\begin{aligned}
 W^{S=1} = & \sum_{\bar{q}, j} \frac{\Omega(\bar{q}, j)}{4} \coth \left(\frac{\Omega(\bar{q}, j)}{2T} \right) + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{n, n'} \{ \tilde{\varphi}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) - \tilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 \} \\
 & - \mu_B h \sum_n \langle S_n^z \rangle + \sum_{n, n'} \tilde{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \{ \langle S_n^z \rangle_0 \langle S_{n'}^z \rangle_0 / 4 \\
 & + \langle (S_n^z)^2 \rangle_0 [1 - 3 \langle (S_{n'}^z)^2 \rangle_0 / 4] - 1 \} + \Pi \cdot V.
 \end{aligned}
 \tag{4.2.13}$$

Występujące, w przytoczonych formułach, częstości $\Omega(\bar{q}, j)$ są rozwiązaniami zagadnienia własnego macierzy dynamicznej, której elementy otrzymamy podstawiając (4.2.4) do (2.2.6).

W następnych paragrafach zbadamy numerycznie, wyprowadzony tutaj układ równań samouzgodnionych (4.2.4-10), przyjmując modelowe zależności J , $K_{(2)}$ oraz φ od odległości.

4.3. Model oddziaływań oraz samouzgodniony układ równań.

Rozważymy model ferromagnetyka opisany w paragrafach 2.3 i 3.3.

Zależność całki wymiany bikwadratowej od odległości wybieramy w postaci wykładniczej

$$K_{(2)}(r) = K_{(2)}^0 \exp[-c(r - r_0)] \quad . \quad (4.3.1)$$

Stosując założenia podane w paragrafie 2.3, samouzgodniony układ równań (4.2.4)-(4.2.10) można zapisać następująco:

$$\Delta^2 \times y - \frac{3}{32} \times \Delta \times \frac{T_D}{D_0} - \frac{1}{4} \times \frac{T}{T_c^0} \times \frac{T_c^0}{T_D} \times \frac{T_D}{D_0} \times F_D \left(\frac{\Delta}{\frac{T_c^0}{D_0} \times \frac{T}{T_c^0}} \right) = 0, \quad (4.3.2)$$

$$\begin{aligned} & \Pi_1 \cdot x^2 - \exp[2(y - A(x-1))] + \exp[y/2 - A(x-1)] \\ & + \frac{B}{A} \times \frac{T_c^0}{T_D} \times \frac{T_D}{D_0} \times \frac{\sigma_1^2}{16} \exp\left[\frac{1}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right] \\ & - \frac{1}{16} \times \frac{C}{A} \times \frac{T_c^0}{T_D} \times \frac{T_D}{D_0} \times \frac{K_0^0}{J_0} \left(\sigma_1^2/2 - \sigma_2^2/6 - 4/3 \right) \times \\ & \times \exp\left[\frac{1}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 y - C(x-1)\right] = 0, \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

$$\sigma_1 = \langle S^z \rangle = \exp(q_2 \sigma_2) \frac{\sinh(q_1 \sigma_1)}{1/2 + \exp(q_2 \sigma_2) \cosh(q_1 \sigma_1)}, \quad (4.3.4)$$

$$\sigma_2 = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 2 = 3 \sigma_1 \coth(q_1 \sigma_1) - 2, \quad (4.3.5)$$

gdzie czynnik renormalizacji

$$\Delta^2 = 2 \exp[2(y - A(x-1))] - \exp[y/2 - A(x-1)] - \left(\frac{B}{A}\right)^2 \frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{\sigma_1^2}{16} \cdot \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right] \quad (4.3.6)$$

$$+ \frac{1}{16} \left(\frac{C}{A}\right)^2 \frac{T_c^0}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_0} \cdot \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \cdot \left(\frac{\sigma_1^2}{2} - \frac{\sigma_2^2}{6} - \frac{4}{3}\right) \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{A}\right)^2 y - C(x-1)\right],$$

i

$$q_1 = \frac{12 \tilde{J}(x, y)}{T} \left(1 - \frac{\tilde{K}_{(2)}(x, y)}{2 \tilde{J}(x, y)}\right), \quad (4.3.7)$$

$$q_2 = \frac{6 \tilde{J}(x, y)}{T} \cdot \frac{\tilde{K}_{(2)}(x, y)}{\tilde{J}(x, y)}, \quad (4.3.8)$$

$$\tilde{J}(x, y) = J_0 \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{B}{A}\right)^2 y - B(x-1)\right], \quad (4.3.9)$$

$$\tilde{K}_{(2)}(x, y) = K_{(2)}^0 \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{A}\right)^2 y - C(x-1)\right] \quad (4.3.10)$$

Energia swobodna Gibbsa $F_G^{S=1}/NT_c^0$ i entalpia przypadająca na jedną cząstkę $W^{S=1}/NT_c^0$ mają postać :

$$\begin{aligned}
 F_G^{S=1}/NT_c^0 = & \frac{9}{8} \cdot \frac{T_D}{T_c^0} \cdot \Delta + \frac{T}{T_c^0} \left\{ 3 \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\Delta}{\frac{T}{T_c^0} \frac{T_c^0}{T_D}} \right) \right] \right. \\
 & \left. - F_D \left(\frac{\Delta}{\frac{T}{T_c^0} \frac{T_c^0}{T_D}} \right) \right\} - 6 \cdot \Delta^2 \cdot y \frac{T_D}{T_c^0} \frac{D_0}{T_D} \\
 & - \frac{T}{T_c^0} \ln \left\{ 1 + 2 \exp \left[\frac{3\sigma_2 \cdot \Delta_1}{T/T_c^0} \cdot \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \right] \cosh(\Delta_2) \right\} \\
 & + 6 \left\{ \frac{T_D}{T_c^0} \frac{D_0}{T_D} \left[\exp(2(y - A(x-1))) - 2 \exp\left(\frac{y}{2} - A(x-1)\right) \right] \right. \\
 & + \frac{\sigma_1^2}{8} \left[\exp\left(\frac{y}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 - B(x-1)\right) - \frac{K_{(2)}^0}{2J_0} \exp\left(\frac{y}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right) \right] \left. \right\} \\
 & + \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \exp\left[\frac{y}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right] \left(\frac{\sigma_2}{8} (4 + \sigma_2) - 1 \right) + \\
 & + 4 \cdot \pi_1 \cdot A \cdot x^3 \cdot \frac{T_D}{T_c^0} \frac{D_0}{T_D} ,
 \end{aligned}
 \tag{4.311}$$

$$\begin{aligned}
 W/NT_c^0 = & G \cdot \gamma \cdot \Delta^2 \cdot \frac{T_D}{T_c^0} \cdot \frac{D_0}{T_D} + \\
 & + 6 \left\{ \frac{T_D}{T_c^0} \cdot \frac{D_0}{T_D} \left[\exp(2(\gamma - A(x-1))) - 2 \exp\left(\frac{\gamma}{2} - A(x-1)\right) \right] \right. \\
 & - \frac{\sigma_1^2}{8} \left[\exp\left(\frac{\gamma}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 - B(x-1)\right) - \frac{K_{(2)}^0}{2J_0} \exp\left(\frac{\gamma}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right) \right] \\
 & \left. - \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \left(1 + \frac{\sigma_2^2}{8}\right) \exp\left[\frac{\gamma}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right] + 4 \cdot \pi_1 \cdot A \cdot x^3 \cdot \frac{T_D}{T_c^0} \cdot \frac{D_0}{T_D} \right\},
 \end{aligned}
 \tag{4.3.12}$$

gdzie

$$\Delta_1 = \exp\left[\frac{\gamma}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right], \tag{4.3.13}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta_2 = & \frac{3\sigma_1}{2T_1/T_c^0} \left\{ \exp\left[\frac{\gamma}{2} \left(\frac{B}{A}\right)^2 - B(x-1)\right] \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \exp\left[\frac{\gamma}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - C(x-1)\right] \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{4.3.14}$$

Entropię układu $\tilde{S}^{s=1}(\tau)$ oraz pojemność cieplną $\tilde{C}_{\pi_1}^{s=1}$ wyznaczamy w oparciu o (4.3.11-12) . Z uwagi na (2.3.14) oraz (2.3.15) otrzymujemy:

$$\tilde{S}^{s=1}(\tau = T/T_c^0) = \tilde{S}_{(l)}^{s=1}(\tau) + \tilde{S}_{(sp)}^{s=1}(\tau), \quad (4.315)$$

$$\tilde{S}_{(l)}^{s=1}(\tau) = \frac{1}{\tau} \left\{ \frac{12\gamma}{T_c^0/T_D} \cdot \frac{D_0}{T_D} \cdot \Delta^2 - \frac{9\Delta}{8} \cdot \frac{T_D}{T_c^0} \right\} \quad (4.316)$$

$$+ F_D \left(\frac{\Delta \cdot T_D}{\tau \cdot T_c^0} \right) - 3 \ln \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{\Delta \cdot T_D}{\tau \cdot T_c^0} \right] \right\},$$

$$\tilde{S}_{(sp)}^{s=1}(\tau) = \ln \left\{ 1 + 2 \cosh[\Delta_2] \exp \left[\frac{3\sigma_2 \cdot \Delta_1 \cdot K_{(2)}^0}{4\tau \cdot J_0} \right] \right\}$$

$$- \frac{3}{2\tau} \sigma_1^2 \left[1/E_1 - \frac{\Delta_1 \cdot K_{(2)}^0}{2J_0} \right] \quad (4.317)$$

$$- \frac{K_{(2)}^0}{2J_0} \Delta_1 \cdot \frac{\sigma_2}{\tau} \left(\sigma_2/2 + 1 \right),$$

$$\tilde{C}_{\pi_1}^{s=1}(\tau) = \tilde{C}_{\pi_1(sp)}^{s=1}(\tau) + \tilde{C}_{\pi_1(l)}^{s=1}(\tau), \quad (4.318)$$

$$\tilde{C}_{\pi_1(sp)}^{s=1}(\tau) = C_{\sigma_1} \left(\sigma_1 \frac{d\sigma_1}{d\tau} \right) + C_{\sigma_2} \left(\sigma_2 \frac{d\sigma_2}{d\tau} \right), \quad (4.3.19)$$

$$\tilde{C}_{\pi_1(l)}^{s=1}(\tau) = C_y \frac{dy}{d\tau} + C_x \cdot \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau), \quad (4.3.20)$$

gdzie

$$C_{\sigma_1} = \frac{6}{16A^2} y \left(C^2 \Delta_1 \cdot \mathcal{K}_{(2)}^0 / \mathcal{I}_0 - 2B^2 / E_1 \right) - \frac{3}{2} \left(1/E_1 - \frac{\mathcal{K}_{(2)}^0}{2\mathcal{I}_0} \Delta_1 \right), \quad (4.3.21)$$

$$C_{\sigma_2} = - \frac{\Delta_1 \cdot \mathcal{K}_{(2)}^0}{4\mathcal{I}_0} \left[1 + \frac{C^2 y}{2} \right], \quad (4.3.22)$$

$$C_y = \frac{6}{\mathcal{T}_c^0 / \mathcal{T}_D} \cdot \frac{\mathcal{D}_0}{\mathcal{T}_D} \left\{ \Delta^2 + y \left[4E_4 - E_5 / 2 - \frac{1}{32} \left(\frac{B}{A} \right)^4 \frac{\mathcal{T}_c^0}{\mathcal{T}_D} \cdot \frac{\mathcal{T}_D}{\mathcal{D}_0} \cdot \sigma_1^2 / E_1 + \frac{1}{32} \left(\frac{C}{A} \right)^2 \frac{\mathcal{T}_c^0}{\mathcal{T}_D} \cdot \frac{\mathcal{T}_D}{\mathcal{D}_0} \cdot \frac{\mathcal{K}_{(2)}^0}{\mathcal{I}_0} \cdot \Delta_1 \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\sigma_1^2 / 2 - \sigma_2^2 / 6 - 4/3 \right) + 2E_4 - E_5 \right] - \frac{3}{8} \sigma_1^2 \left(\frac{B}{A} \right)^2 / E_1 - \frac{\mathcal{K}_{(2)}^0}{4\mathcal{I}_0} \left(\frac{C}{A} \right)^2 \Delta_1 \left(3 + \sigma_2^2 / 4 \right) \right\}, \quad (4.3.23)$$

$$C_x = \frac{6 \cdot X}{T_c^0 / T_D} \frac{D_0}{T_D} \left\{ A \cdot \gamma [E_5 - 4E_4 + \frac{1}{16} \left(\frac{B}{A} \right)^3 \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \cdot \sigma_1^2 / E_1 \right. \\ \left. - \frac{1}{16} \left(\frac{C}{A} \right)^3 \frac{T_c^0}{T_D} \frac{T_D}{D_0} \frac{K_{(2)}^0}{J_0} \cdot \Delta_1 \left(\frac{\sigma_1^2}{2} - \frac{\sigma_2^2}{6} - \frac{4}{3} \right) + 2A(E_5 - E_4) \right\} \\ + \frac{3}{4} \sigma_1^2 \cdot X \cdot B / E_1 + \frac{C K_{(2)}^0}{2 J_0} \Delta_1 \left(3 + \sigma_2^2 / 4 \right) . \quad (4.324)$$

W (4.3.17-24) zastosowano oznaczenia z paragrafu 2.5 .

W następnym paragrafie zastosujemy wyprowadzone wzory (4.3.2-6), (4.3.11-24) do ilościowego zbadania efektów oddziaływania spinowo-fononowego w rozpatrywanym układzie.

4.4. Wyniki analizy numerycznej i ich dyskusja.

Układ równań (4.3.2)-(4.3.5) rozwiązywano numerycznie dla następujących wartości parametrów modelu:

$$\frac{T_c^0}{T_D} = 5 \quad , \quad \frac{T_D}{D_0} = 0.1 \quad , \quad \frac{K_{(2)}^0}{J_0} = \frac{8 K_{(2)}^0}{T_c^0} = 0.3 \\ A = a r_0 = 6 \quad , \quad B = C = b r_0 = c r_0 = 12 \quad , \quad (4.4.1)$$

Wyniki przedstawiono graficznie na rysunkach 37-41

Rysunki 37a-c przedstawiają rozwiązania równań (4.3.2-5) dla różnych wartości π_1 .

Rysunki 38a-c zawierają zależność czynnika Δ (4.3.6) od temperatury przy podanych π_1 .

Zależności energii swobodnej Gibbsa (4.3.11), entalpii (4.3.12) oraz entropii (4.3.15) od T/T_c^0 przedstawiają rysunki 39a-c.

Zachowanie się pojemności cieplnej $C_{\pi_1}^{s=1}$ (4.3.18) oraz współczynnika rozszerzalności cieplnej układu α_{π_1} , w pobliżu punktu przemiany fazowej, zawierają rysunki 40 i 41.

Przemiana fazowa w podukładzie magnetycznym jest, przy użytych wartościach parametrów (4.4.1), II-go rodzaju (patrz rysunki 37a-c).

Poprzednio pokazano (por. rozdział III-ci oraz dodatek A), że w ścisłym modelu Heisenberga magnetyczna przemiana fazowa może być I-go rodzaju, przy dostatecznie dużych wartościach pochodnej całki wymiany względem odległości.

W rozważanym przez nas modelu, nieciągłej magnetycznej przemiany fazowej, należy się spodziewać, w przypadku dostatecznie dużych wartości parametru $K_{(2)}^0/I_0$ (w przybliżeniu pola molekularnego, w sztywnym modelu przejście fazowe I rodzaju występuje przy $K_{(2)}^0/J_0 > \frac{2}{3}$ [171]).

Temperaturę przemiany fazowej określa, w ramach stosowanego przybliżenia, równanie

$$\lim_{\sigma_1 \rightarrow 0} \{ \sigma_1 \coth(q_1 \sigma_1) \} = 2/3, \quad (4.4.3)$$

które w naszym przypadku ma postać

$$\frac{T_c^{\text{SMS}}}{T_c^0} = \exp \left[\frac{y}{2} \left(\frac{B}{A} \right)^2 - B(x-1) \right]. \quad (4.4.4)$$

$$\left\{ 1 - \frac{K_{(2)}^0}{2J_0} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{C^2 - B^2}{A^2} \right) y - (C-B)(x-1) \right] \right\},$$

gdzie $T_c^0 = 8J_0$, a T_c^{SMS} jest temperaturą przemiany fazowej w ściśliwym modelu.

Dla NMS-go mamy $B=C=0$ i z uwagi na (4.4.1) :

$$\frac{T_c^{\text{NMS}}}{T_c^0} = \left(1 - \frac{K_{(2)}^0}{2J_0} \right) = 0.85 \quad (4.4.5)$$

Porównując (4.4.5) z rezultatami obliczeń numerycznych dla $T_1=0$ (rysunek 37a), możemy stwierdzić, że (porównaj rozdział III) uwzględnienie ściśliwości sieci sprzyja procesom termicznego rozuporządkowania w podukładzie magnetycznym. Przejście fazowe w SMS (4.1.2-4) ma miejsce przy

$$\frac{T_c^{\text{SMS}}}{T_c^0} (= 0.795) < \frac{T_c^{\text{NMS}}}{T_c^0} (= 0.85).$$

Dla rosnących wartości π_1 temperatura przemiany T_c^{SMS} rośnie (patrz rysunki 3b-c ; porównaj dyskusję w paragrafie 3.7), co jest konsekwencją wzrostu $\tilde{J}/J_0$ wraz z ciśnieniem.

Z uwagi na (4.4.4), interesującym zagadnieniem wydaje się być, zbadanie zachowania się temperatury magnetycznej przemiany T_c^{SMS} w przypadkach gdy $B \gtrless C$.

Rezultatem uwzględnienia w obliczeniach zależności całki wymiany bikwadratowej od odległości, jest pojawienie się dodatkowych członów w równaniu stanu (4.3.3) oraz we wzorze (4.3.6), określającym czynnik renormalizacji częstotliwości drgań sieci kryształu. Z uwagi na to, że

$$-\frac{4}{3} \leq \frac{\sigma_1^2}{2} - \frac{\sigma_2^2}{6} - \frac{4}{3} \leq -1 \quad (4.4.6)$$

wspomniane człony - w odróżnieniu od przyczynków pochodzących od całki wymiany $\tilde{J}$ - wnoszą również w fazie paramagnetycznej różny od zera wkład w równania (4.3.3) i (4.3.6).

Różniczkując równanie stanu (4.3.3) względem $\tilde{\tau}$, otrzymujemy wyrażenie na współczynnik rozszerzalności cieplnej układu (porównaj paragraf 3.7)

$$\mathcal{L}_{\pi_1}^{(u)} = \frac{1}{Z_1'} \left[Z_2' \frac{dy}{d\tilde{\tau}} + Z_3' \sigma_1 \frac{d\sigma_1}{d\tilde{\tau}} + Z_4' \sigma_2 \frac{d\sigma_2}{d\tilde{\tau}} \right], \quad (4.4.7)$$

gdzie w oznaczeniach z rozdziału 3-go (dla $S = 1$):

$$Z'_1 = Z_1 + \frac{C^2}{16A} \cdot \frac{T_c^o}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_o} \cdot \frac{K_{(2)}^o}{J_o} \cdot \sigma_3 \cdot x \cdot C_4(x, y), \quad (4.4.8)$$

$$Z'_2 = Z_2 - \frac{1}{32} \cdot \left(\frac{C}{A}\right)^3 \cdot \frac{T_c}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_o} \cdot \frac{K_{(2)}^o}{J_o} \cdot \sigma_3 \cdot C_4(x, y), \quad (4.4.9)$$

$$Z'_3 = -Z_3 + \frac{C}{16A} \cdot \frac{T_c^o}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_o} \cdot \frac{K_{(2)}^o}{J_o} \cdot C_4(x, y), \quad (4.4.10)$$

$$Z'_4 = -\frac{C}{48A} \cdot \frac{T_c^o}{T_D} \cdot \frac{T_D}{D_o} \cdot \frac{K_{(2)}^o}{J_o} \cdot C_4(x, y), \quad (4.4.11)$$

$$C_4(x, y) = \exp\left[\frac{y}{2} \left(\frac{C}{A}\right)^2 - B(x-1)\right], \quad (4.4.12)$$

$$\sigma_3 = \frac{\sigma_1^2}{2} - \frac{\sigma_2^2}{6} - \frac{4}{3} \quad . \quad (4.4.13)$$

Ze wzorów (4.4.3-9) wynika, że uwzględnienie zależności $K_{(2)}$ od odległości międzyatomowych, przyczynia się do wzrostu współczynnika rozszerzalności cieplnej układu (trzeci składnik w wyrażeniu (4.4.7) jest dodatni).

Wartość skoku $\delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}$ (patrz rys. 40), jakiego doznaje w punkcie przemiany fazowej $\mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}$, można oszacować w oparciu o wzory (4.4.3-9), z których otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)} &= \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau) - \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^+} \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau) \\ &= \frac{1}{Z_1'[x(\tau_c), y(\tau_c)]} \left\{ Z_3'[x(\tau_c), y(\tau_c)] \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \left(\sigma_1 \frac{d\sigma_1}{d\tau} \right) \right. \\ &\quad \left. + Z_4'[x(\tau_c), y(\tau_c)] \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \left(\sigma_2 \frac{d\sigma_2}{d\tau} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.4.14)$$

Występujące w (4.4.10) pochodne parametrów porządku σ_1 oraz σ_2 względem temperatury τ obliczamy dla $\tau \rightarrow \tau_c^-$.

Na podstawie (4.3.4-5), otrzymujemy

$$\sigma_1(\tau) = \Theta_1(\tau_c) \sqrt{\tau_c - \tau}, \quad (4.4.15)$$

$$\sigma_2(\tau) = \Theta_2(\tau_c) (\tau_c - \tau), \quad (4.4.16)$$

gdzie

$$\Theta_1(\tau_c) = 2 \sqrt{\frac{1}{q_1'(\tau_c)} \left\{ 1 + \frac{3[(q_1(\tau_c) - 1) q_1(\tau_c)]}{q_1(\tau_c)} \right\}},$$

$$q_1'(\tau_c) = \left[1 - \frac{\tilde{K}_2(\tau_c)}{2\tilde{J}(\tau_c)} \right] \tilde{J}(\tau_c) / J_0, \quad ,$$

$$\Theta_2(\tau_c) = q_1(\tau_c) \cdot \Theta_1^2(\tau_c) - 2 / q_1'(\tau_c),$$

$$q_1(\tau_c) = 3 \cdot q_1'(\tau_c) \cdot \frac{8J_0}{T_c^{5ms}}.$$

Tak więc, z uwagi na (4.4.11-12),

$$\delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau_c) = - \frac{Z_3'[x(\tau_c), y(\tau_c)]}{2 Z_1'[x(\tau_c), y(\tau_c)]} \Theta_1(\tau_c). \quad (4.4.17)$$

Oznacza to, że w przybliżeniu pola molekularnego niezerowy wkład do $\delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau)$ przy $\tau \rightarrow \tau_c^-$, wnosi jedynie zależność σ_1 od temperatury.

Wartość skoku $\delta C_{\pi_1}^{S=1}(\tau_c)$ pojemności cieplnej $C_{\pi_1}^{S=1}(\tau)$ (4.3.18) układu w punkcie przemiany fazowej jest równa (patrz (4.3.18-24)) :

$$\begin{aligned} \delta C_{\pi_1}^{S=1}(\tau_c) = & C_y(\tau_c) \left[\lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \frac{dy}{d\tau} - \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^+} \frac{dy}{d\tau} \right] \\ & + C_x(\tau_c) \cdot \delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau_c) + \\ & + \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \left[C_{\sigma_1}(\tau) \sigma_1(\tau) \frac{d\sigma_1(\tau)}{d\tau} + \right. \\ & \left. + C_{\sigma_2}(\tau) \sigma_2(\tau) \frac{d\sigma_2(\tau)}{d\tau} \right]. \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

Z uwagi na zastosowane przybliżenie (patrz wyżej dyskusja dotycząca $\delta \mathcal{L}_{\pi_1}^{(l)}(\tau_c)$), $\delta C_{\pi_1}^{S=1}(\tau_c) < \infty$ (np. 41) .

4.5. Przybliżenie faz przypadkowych.

W poprzednich paragrafach tego rozdziału wartości parametrów porządku $\langle S^z \rangle$ i $\langle (S^z)^2 \rangle$ wyznaczono w przybliżeniu pola molekularnego. W tej części pracy wyprowadzimy zamknięty układ równań, który własności magnetyczne rozpatrywanego modelu, opisuje w przybliżeniu faz przypadkowych. W tym celu zastosujemy formalizm dwuczasowych termodynamicznych funkcji Greena [84, 172].

4.5.1. Podukład sieciowy.

Równanie ruchu dla transformaty Fouriera $\langle\langle u_n | u_m \rangle\rangle_\omega$ fononowej funkcji Greena

$$\langle\langle u_n(t) | u_m(t') \rangle\rangle = -i \Theta(t-t') \langle [u_n(t), u_m(t')] \rangle$$

(4.5.1.1)

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \langle\langle u_n | u_m \rangle\rangle_\omega e^{-i\omega(t-t')}$$

(gdzie $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią termodynamiczną z hamiltonianem (4.1.2) - (4.1.4), a $u_n = u_n^{\alpha_n}$)
ma postać [81, 84]:

$$M \omega^2 \langle\langle u_n | u_m \rangle\rangle_\omega = \delta_{nm} +$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{1 \dots l} \left\{ \nabla_n \nabla_1 \dots \nabla_l \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2}' \varphi(\bar{x}_{l_1} - \bar{x}_{l_2}) \langle\langle u_1 \dots u_l | u_m \rangle\rangle_\omega \right.$$

$$- \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{1 \dots l} \left\{ \nabla_n \nabla_1 \dots \nabla_l \left[\frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2}' \mathcal{J}(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{m_2}) \cdot \right. \right.$$

$$\left. \langle\langle u_1 \dots u_l \bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2} | u_m \rangle\rangle_\omega + \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2}' \mathcal{K}_{(2)}(\bar{x}_{m_1} - \bar{x}_{m_2}) \cdot \right.$$

$$\left. \left. \langle\langle u_1 \dots u_l (\bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2})^2 | u_m \rangle\rangle_\omega \right] \right\}.$$

(4.5.12)

W równaniu tym zastosujemy przybliżenie pseudoharmoniczne [81, 84]:

$$\langle\langle u_1 \dots u_l | u_m \rangle\rangle_\omega = \sum_{i=1}^l \langle\langle u_i | u_m \rangle\rangle_\omega \left\langle \prod_{j \neq i}^l u_j \right\rangle \quad (4.5.13)$$

oraz przybliżenie słabego sprzężenia między podukładem fononowym i spinowym [54]:

$$\begin{aligned} \langle\langle u_1 \dots u_l (\bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2})^k | u_m \rangle\rangle_\omega &= \\ &= \langle (\bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2})^k \rangle \langle\langle u_1 \dots u_l | u_m \rangle\rangle_\omega \end{aligned} \quad (4.5.1.4)$$

gdzie $k = 1, 2$

Jeśli dla spinowych funkcji korelacji $\langle (\bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2})^k \rangle$ ($k = 1, 2$), zastosować następujące przybliżenia:

$$\langle \bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2} \rangle = \langle S_{m_1}^z \rangle \langle S_{m_2}^z \rangle, \quad (4.5.1.5)$$

$$\begin{aligned} \langle (\bar{S}_{m_1} \bar{S}_{m_2})^2 \rangle &= 2 - \frac{1}{2} \langle S_{m_1}^z \rangle \langle S_{m_2}^z \rangle + \\ &+ \frac{3}{2} \langle (S_{m_1}^z)^2 \rangle \left(\langle (S_{m_2}^z)^2 \rangle - \frac{4}{3} \right), \end{aligned} \quad (4.5.1.6)$$

to otrzymamy rezultaty dotyczące podukładu fononowego, analogiczne do otrzymanych w paragrafie 4.2 (wyrażenia (4.2.4), (4.2.5) oraz (4.2.10)).

Występujące w tych równaniach wartości średnie $\langle S^z \rangle$ i $\langle (S^z)^2 \rangle$, wyznaczmy w następnym paragrafie.

4.5.2. Podukład magnetyczny.

W celu wyprowadzenia wzorów na $\langle S^z \rangle$ i $\langle (S^z)^2 \rangle$ zastosujemy efektywny hamiltonian, który wybieramy tak, aby efekty drgań sieci zostały uwzględnione w przybliżeniu pseudoharmonicznym:

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{H}}_{S=1} = & -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} \left[\widetilde{J}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) + \widetilde{K}_{(2)}(\bar{x}_n - \bar{x}_{n'}) \bar{S}_n \bar{S}_{n'} \right] \\ & \cdot \bar{S}_n \bar{S}_{n'} - \mu_B \hbar \sum_n S_n^z, \end{aligned} \quad (4.5.2.1)$$

gdzie $\widetilde{J}$ i $\widetilde{K}_{(2)}$ zostały zdefiniowane w paragrafie 4.2 (patrz wyrażenia (2.2.14) oraz (4.2.3)).

Zastosujemy dalej formalizm termodynamicznych funkcji Greena, sformułowany przez Haley'a i Erdösa [172]. Wprowadzamy standardową bazę operatorów

$$L_{\alpha\beta}^i | \gamma^i \rangle = \delta_{\beta\gamma} | \alpha^i \rangle, \quad (4.5.2.2)$$

$$L_{\alpha\beta}^i L_{\gamma\delta}^i = \delta_{\beta\gamma} L_{\alpha\delta}^i, \quad (4.5.2.3)$$

gdzie $\alpha = 1, 2, 3$; $\beta = 1, 2, 3$ odpowiadają stanom własnym operatora S^z dla $m = 1, 0, -1$ i

$$S_n^z = L_{11}^n - L_{33}^n, \quad (4.5.2.4a)$$

$$S_n^+ = \sqrt{2} (L_{12}^n + L_{23}^n), \quad (4.5.2.4b)$$

$$S_n^- = \sqrt{2} (L_{21}^n + L_{32}^n). \quad (4.5.2.4c)$$

W tej reprezentacji, hamiltonian (4.5.2.1) przyjmuje postać :

$$\widetilde{\mathcal{H}}_{S=1} = - \sum_{n, \alpha, \beta} \widetilde{W}_{\alpha\beta} L_{\alpha\beta}^n -$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ \alpha, \beta \\ \gamma, \delta}} \widetilde{V}_{\alpha\beta, \gamma\delta}(n, n') L_{\alpha\beta}^n L_{\gamma\delta}^{n'},$$

(4.5.2.5)

gdzie

$$\widetilde{W}_{11} = -\widetilde{W}_{33} = \mu_B \hbar, \quad V_{11,11} = V_{33,33} = \widetilde{J}(\bar{n}-\bar{n}') + \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}'),$$

$$\widetilde{V}_{22,21} = 2 \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}'), \quad \widetilde{V}_{11,22} = \widetilde{V}_{22,33} = \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}'),$$

$$\widetilde{V}_{13,31} = \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}'), \quad \widetilde{V}_{11,33} = 2 \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}') - \widetilde{J}(\bar{n}-\bar{n}'),$$

$$\widetilde{V}_{12,21} = \widetilde{V}_{32,23} = \widetilde{J}(\bar{n}-\bar{n}'), \quad \widetilde{V}_{12,32} = \widetilde{J}(\bar{n}-\bar{n}') - \widetilde{K}_{(2)}(\bar{n}-\bar{n}')$$

a inne elementy $\widetilde{W}$ i $\widetilde{V}$ są równe zeru.

Równanie ruchu dla transformaty Fouriera $G_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\bar{q}, E)$
funkcji Greena

$$G_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(n,n'; t-t') = \langle\langle L_{\alpha\alpha'}^n(t) | L_{\beta\beta'}^{n'}(t') \rangle\rangle =$$

$$-i \Theta(t-t') \langle [L_{\alpha\alpha'}^n(t), L_{\beta\beta'}^{n'}(t')] \rangle =$$

$$= \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\bar{q}} G_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\bar{q}, E) e^{i\bar{q}(\bar{n}-\bar{n}') - iE(t-t')} dE$$

(4.5.2.6)

ma postać:

$$(E - E_{\alpha} + E_{\alpha'}) G_{\alpha\alpha', \beta\beta'}(\bar{q}, E) + \\ + \sum_{\gamma\gamma'} \widetilde{V}_{\alpha'\alpha, \gamma\gamma'}(\bar{q}) G_{\gamma\gamma', \beta\beta'}(\bar{q}, E) =$$

$$\frac{\delta_{\alpha\beta'} \delta_{\beta\alpha'}}{2\pi} (C_{\alpha} - C_{\alpha'}) \quad (4.5.2.7)$$

Równanie (4.5.2.7) otrzymano stosując relacje komutacyjne [172]:

$$[L_{\alpha\beta}^{\ell}, L_{\beta\delta}^m] = \delta_{\ell m} (\delta_{\beta\gamma} L_{\alpha\delta}^{\ell} - \delta_{\alpha\delta} L_{\beta\gamma}^m) \quad (4.5.2.8)$$

oraz rozszczenie funkcji Greena odpowiadające przybliżeniu faz przypadkowych (RPA) [172] :

$$\langle\langle L_{\gamma\alpha'}^l L_{\delta\delta'}^n | L_{\beta\beta'}^m \rangle\rangle =$$

$$\delta_{\gamma\alpha'} \langle L_{\gamma\alpha'}^l \rangle \langle\langle L_{\delta\delta'}^n | L_{\beta\beta'}^m \rangle\rangle + \delta_{\delta\delta'} \langle L_{\delta\delta'}^n \rangle \langle\langle L_{\gamma\alpha'}^l | L_{\beta\beta'}^m \rangle\rangle$$

(4.5.2.9)

Występujące w (4.5.2.7) wielkości C_α , E_α , $\widetilde{V}_{\alpha\alpha',\delta\delta'}(\bar{q})$ są równe:

$$C_\alpha = \langle L_{\alpha\alpha} \rangle, \quad (4.5.2.10)$$

$$E_\alpha = \widetilde{W}_{\alpha\alpha} + \sum_{\delta} V_{\alpha\alpha,\delta\delta}(0) C_\delta, \quad (4.5.2.11)$$

$$\widetilde{V}_{\alpha\alpha',\delta\delta'}(\bar{q}) = \sum_l e^{-i\bar{q}\bar{l}} V_{\alpha\alpha',\delta\delta'}(l). \quad (4.5.2.12)$$

Układ równań (4.5.2.7) dla $(\alpha, \alpha') = (1, 2)$
 $(\alpha, \alpha') = (2, 3)$ i $(\alpha, \alpha') = (1, 3)$ ma postać następującą:

$$[E - \mu_B h + \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0)(C_2 - C_3) - \tilde{\mathcal{J}}(0)(C_1 - C_3) + \\ + \tilde{\mathcal{J}}(\bar{q})(C_1 - C_2)] G_{12,21}(\bar{q}, E) = \frac{C_1 - C_2}{2\pi}, \quad (4.5.2.13)$$

$$[E - \mu_B h + \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0)(C_2 - C_3) - \tilde{\mathcal{J}}(0)(C_1 - C_3) + \\ + \tilde{\mathcal{J}}(\bar{q})(C_1 - C_2)] G_{12,32}(\bar{q}, E) + \quad (4.5.2.14) \\ + (\tilde{\mathcal{J}}(\bar{q}) - \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}))(C_1 - C_2) G_{23,32}(\bar{q}, E) = 0,$$

$$[E - \mu_B h + \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0)(C_1 - C_2) - \tilde{\mathcal{J}}(0)(C_1 - C_3) + \tilde{\mathcal{J}}(\bar{q})(C_2 - C_3)]^* \\ * G_{23,21}(\bar{q}, E) + (\tilde{\mathcal{J}}(\bar{q}) - \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}))(C_2 - C_3) G_{12,21}(\bar{q}, E) = 0, \quad (4.5.2.15)$$

$$[E - \mu_B h + \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0)(C_1 - C_2) - \tilde{\mathcal{J}}(0)(C_1 - C_2) + \tilde{\mathcal{J}}(\bar{q})(C_2 - C_3)]^* \\ * G_{23,32}(\bar{q}, E) + (\tilde{\mathcal{J}}(\bar{q}) - \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}))(C_2 - C_3) G_{12,32}(\bar{q}, E) = \frac{C_2 - C_3}{2\pi}, \quad (4.5.2.16)$$

$$[E - 2\mu_B h + (\tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0) + \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}) - 2\tilde{\mathcal{J}}(0))(C_1 - C_3)] G_{31,21}(\bar{q}, E) = \frac{C_1 - C_3}{2\pi} \quad (4.5.2.17)$$

Z równań (4.5.2.13-17) otrzymujemy wyrażenia na energie wzbudzeń elementarnych :

$$E^+(\bar{q}) = \frac{1}{2} [E_0(\bar{q}) + \mathcal{D}(\bar{q})], \quad (4.5.2.18)$$

$$E^-(\bar{q}) = \frac{1}{2} [E_0(\bar{q}) - \mathcal{D}(\bar{q})], \quad (4.5.2.19)$$

$$E_3(\bar{q}) = 2\mu_B \hbar + [2\tilde{J}(0) - \tilde{K}_{(2)}(0) - \tilde{K}_{(2)}(\bar{q})]m_1, \quad (4.5.2.20)$$

gdzie

$$E_0(\bar{q}) = 2\mu_B \hbar + [2\tilde{J}(0) - \tilde{J}(\bar{q}) - \tilde{K}_{(2)}(0)]m_1, \quad (4.5.2.21)$$

$$\mathcal{D}(\bar{q}) = \{ [\tilde{J}(\bar{q}) - \tilde{K}_{(2)}(0)]^2 m_1^2 - (m_1^2 - m_2^2) [\tilde{J}(\bar{q}) - \tilde{K}_{(2)}(\bar{q})]^2 \}^{1/2}, \quad (4.5.2.22)$$

$$m_1 = \langle S^z \rangle = C_1 - C_3, \quad (4.5.2.23)$$

$$m_2 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - 2 = 1 - 3C_2. \quad (4.5.2.24)$$

Z uwagi na reguły komutacyjne (4.5.2.8) , operatory $L_{\alpha\alpha'}$ powinny spełniać następującą relację ;

$$\langle L_{21} L_{23} \rangle = \langle L_{32} L_{12} \rangle = 0 \quad . \quad (4.5.2.25)$$

Jest to dodatkowy warunek, który nie wynika z dotychczasowych rozważań [171]

Jeśli zażądamy, aby (4.5.2.25) był spełniony (układ w danej chwili znajduje się w jednym z trzech możliwych stanów), to stosując twierdzenie spektralne, otrzymamy:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1 + \bar{\Phi}_{(+)} + \bar{\Phi}_{(-)}}{1 + 2 \bar{\Phi}_{(+)} + \bar{\Phi}_{(-)} + 3 \bar{\Phi}_{(-)} \bar{\Phi}_{(+)}} , \quad (4.5.2.26)$$

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \frac{2}{3} - \frac{1}{3} \frac{1 - \bar{\Phi}_{(+)} + \bar{\Phi}_{(-)}}{1 + 2 \bar{\Phi}_{(+)} + \bar{\Phi}_{(-)} + 3 \bar{\Phi}_{(-)} \bar{\Phi}_{(+)}} , \quad (4.5.2.27)$$

gdzie

$$\tilde{\Phi}_{(\pm)} = \frac{1}{2N} \sum_{\bar{q}, \sigma=\pm} f(E^{\sigma}(\bar{q})) \times \quad (4.5.2.28)$$

$$\times \left\{ 1 + \frac{\sigma}{D(\bar{q})} [(\tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}) - \tilde{\mathcal{J}}(\bar{q}))m_1 \pm (\tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(0) - \tilde{\mathcal{K}}_{(2)}(\bar{q}))m_2] \right\},$$

$$f(E^{\sigma}(\bar{q})) = [\exp(E^{\sigma}(\bar{q})/T) - 1]^{-1}. \quad (4.5.2.29)$$

Jeśli natomiast nie wprowadzimy do teorii RPA dodatkowego warunku (4.5.2.25), to równania na $\langle S^z \rangle$ i $\langle (S^z)^2 \rangle$ będą miały postać :

$$\langle S^z \rangle = \frac{1 + \tilde{\Phi}'_{(+)} + \tilde{\Phi}'_{(-)}}{1 + 2\tilde{\Phi}'_{(+)} + \tilde{\Phi}'_{(-)} + 3\tilde{\Phi}'_{(-)}\tilde{\Phi}'_{(+)}} , \quad (4.5.2.30)$$

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \frac{1 + \tilde{\Phi}'_{(-)} - \tilde{\Phi}'_{(+)}}{1 + 2\tilde{\Phi}'_{(+)} + \tilde{\Phi}'_{(-)} + 3\tilde{\Phi}'_{(-)}\tilde{\Phi}'_{(+)}} , \quad (4.5.2.31)$$

gdzie

$$\tilde{\Phi}_{(\pm)}' = \frac{1}{2N} \sum_{q, \sigma=\pm} \psi [E^{\sigma}(\bar{q})]$$

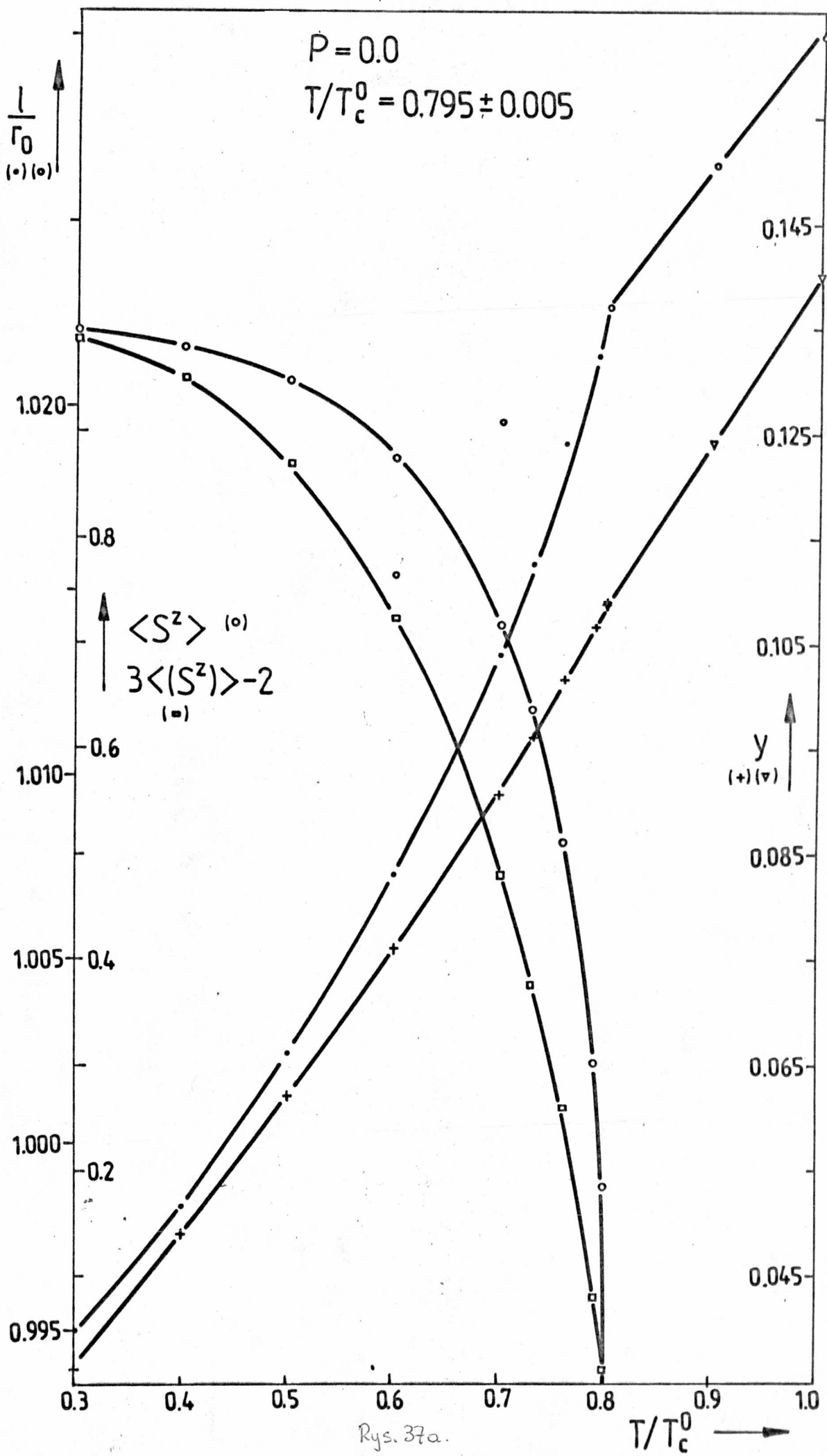
(4.5.2.32)

$$\times \left\{ 1 \pm \frac{\sigma}{D(\bar{q})} [\tilde{K}_2(0) - \tilde{J}(\bar{q})] \right\}.$$

Otrzymane wyniki (4.5.2.26-32), przechodzą w rezultaty pracy Micnasa [171], jeśli pominiemy efekty sprzężenia spinowo-fononowego.

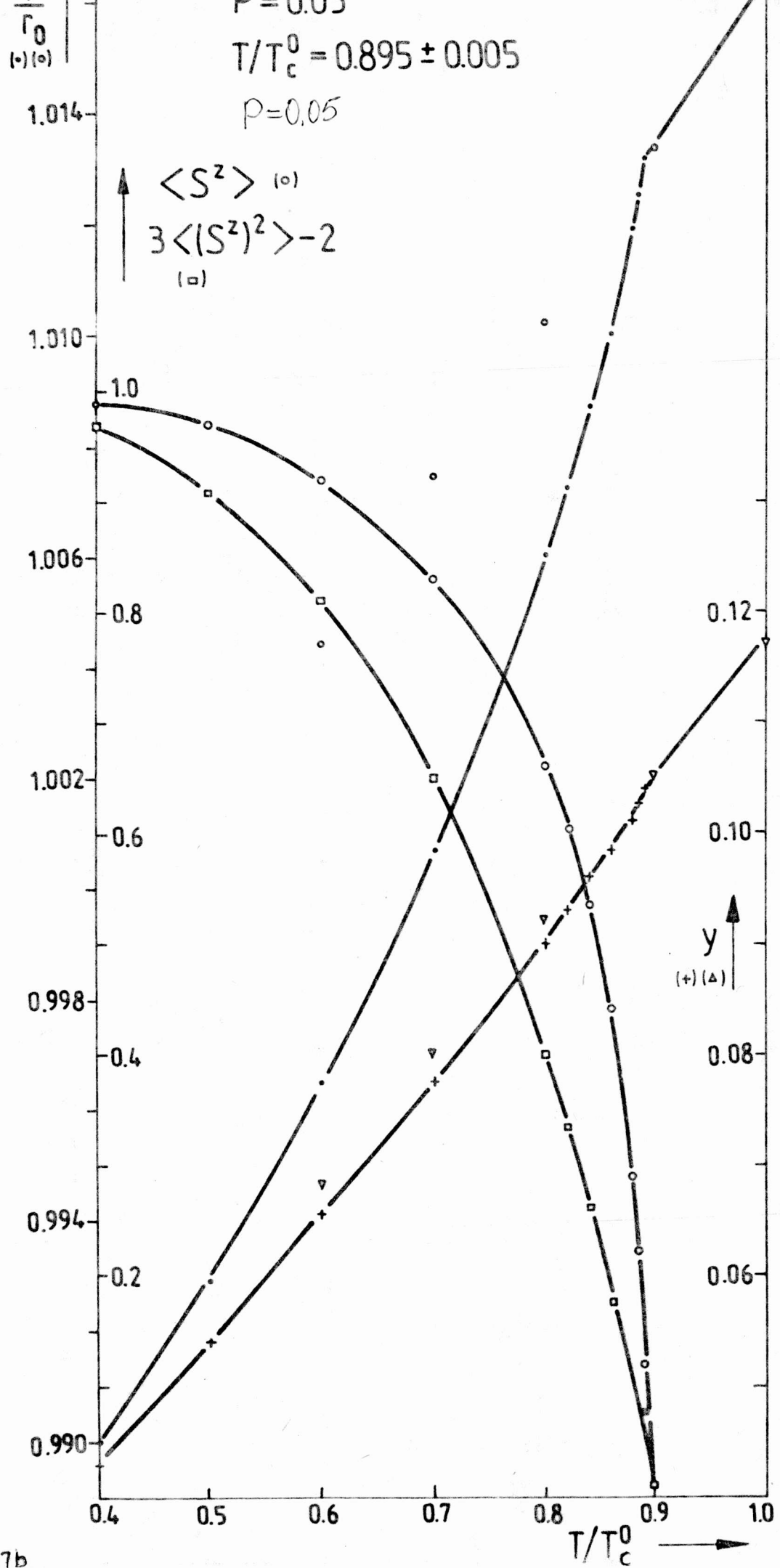
Równania (4.5.2.26-27) lub (4.5.2.30-31) oraz (4.2.5), (4.2.10) wraz z równaniem własnym dla macierzy dynamicznej układu (stałe siłowe określa (4.2.4) tworzą zamknięty układ równań.

Opisuje on własności fizyczne ściśliwego modelu Heisenberga ze spinem $S = 1$ w przybliżeniach: pseudoharmonicznym oraz faz przypadkowych.



Rys. 37a.

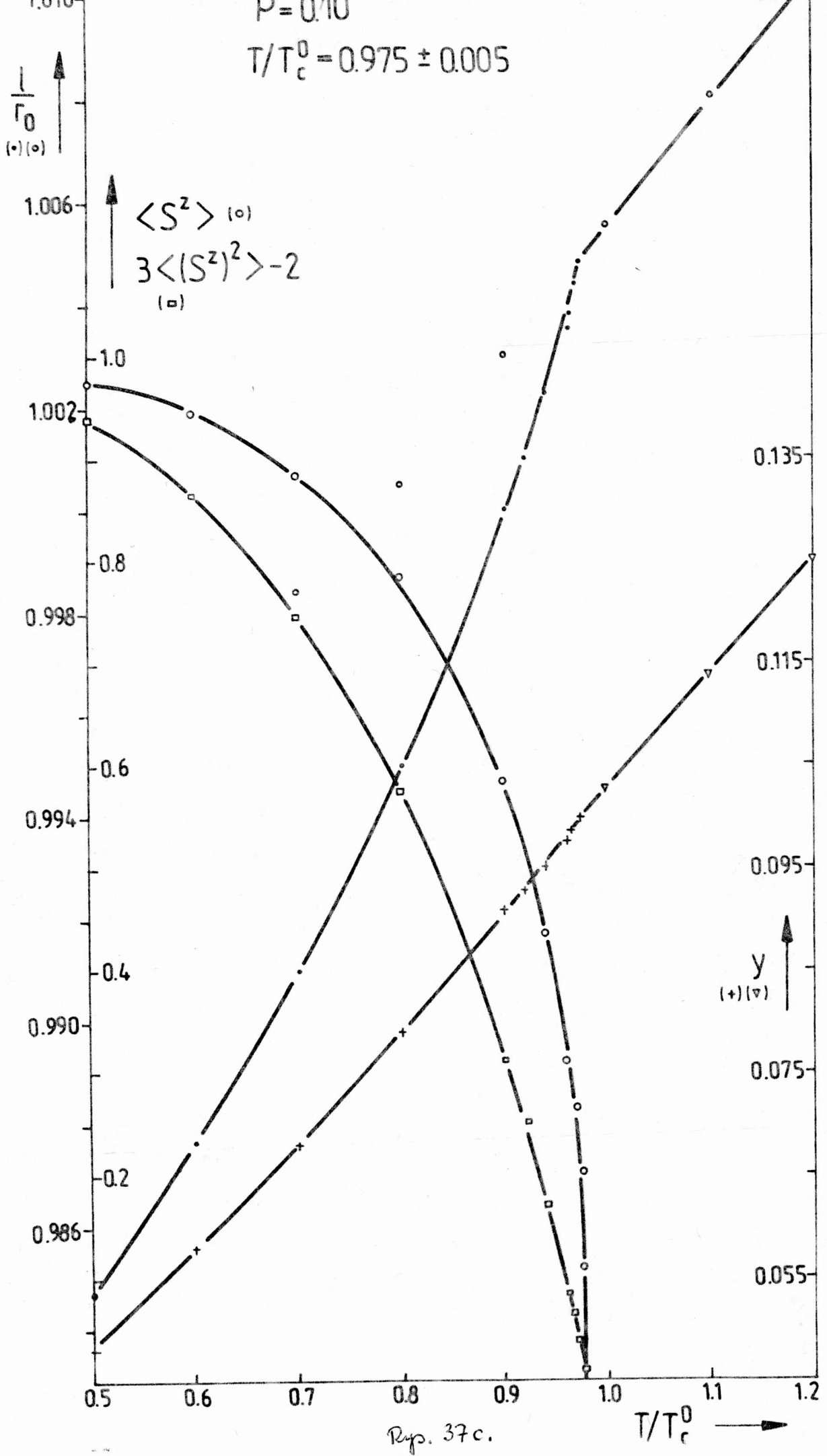
Rys. 37a.



$$P = 0.10$$

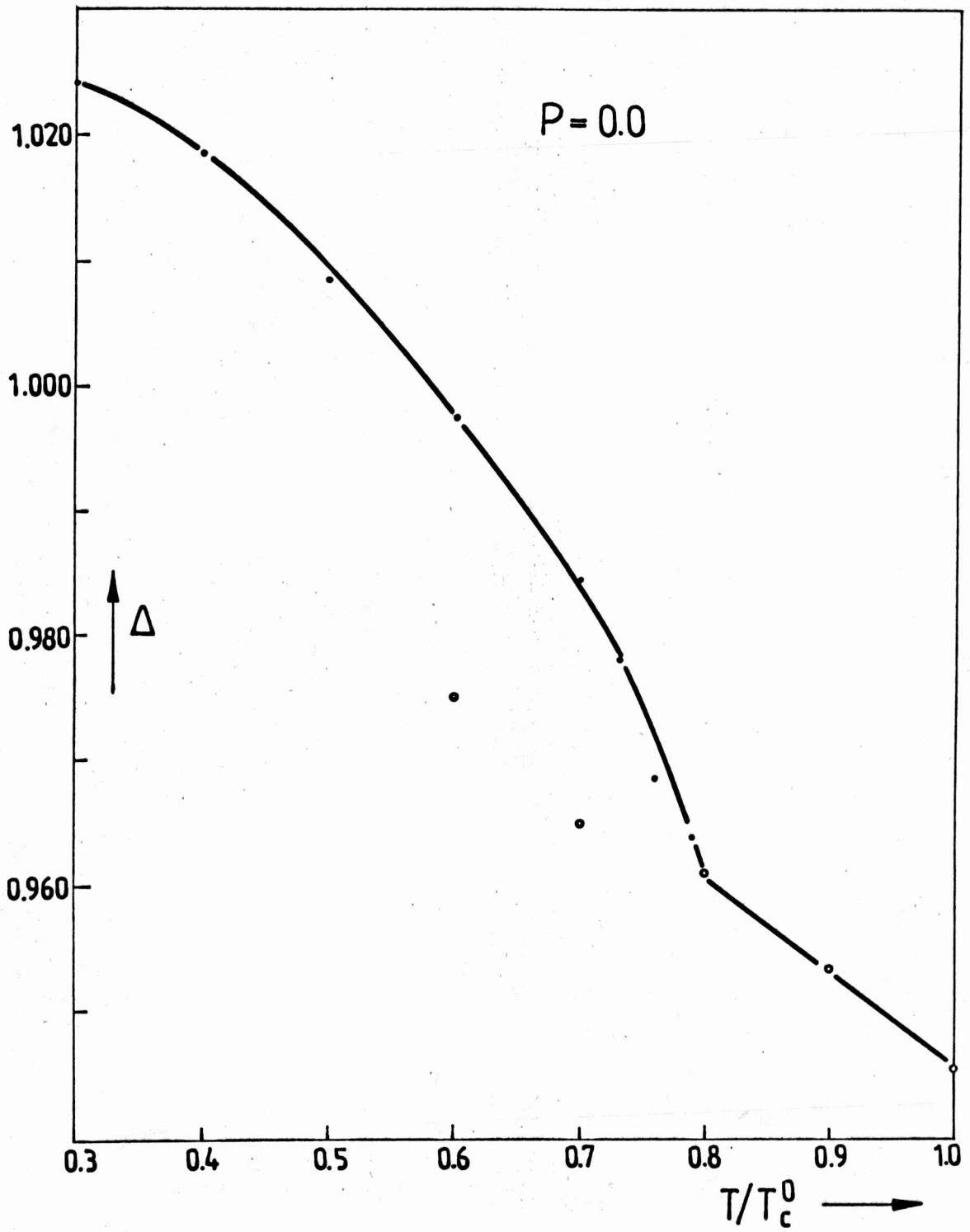
$$T/T_c^0 = 0.975 \pm 0.005$$

-199-

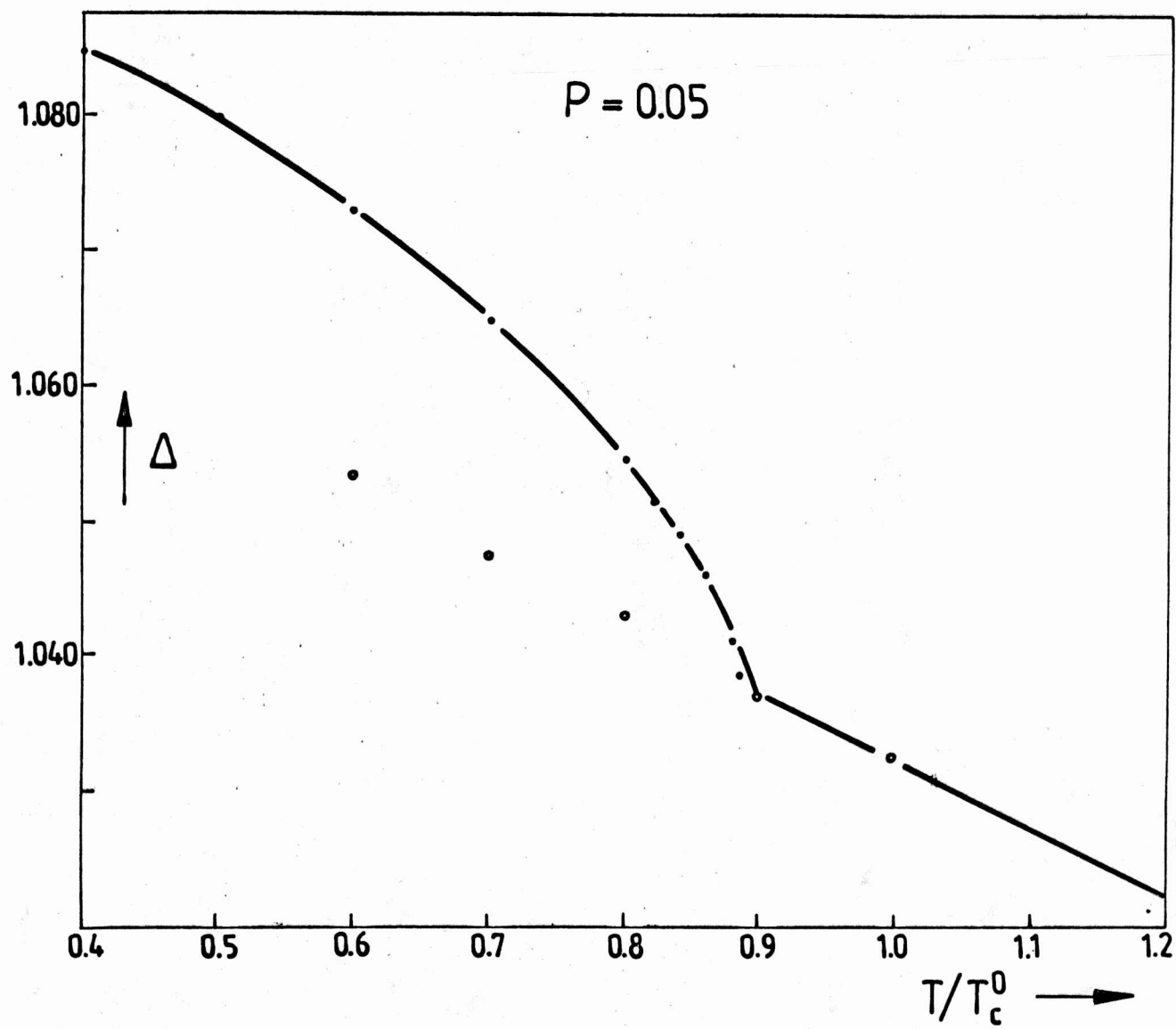


-200-

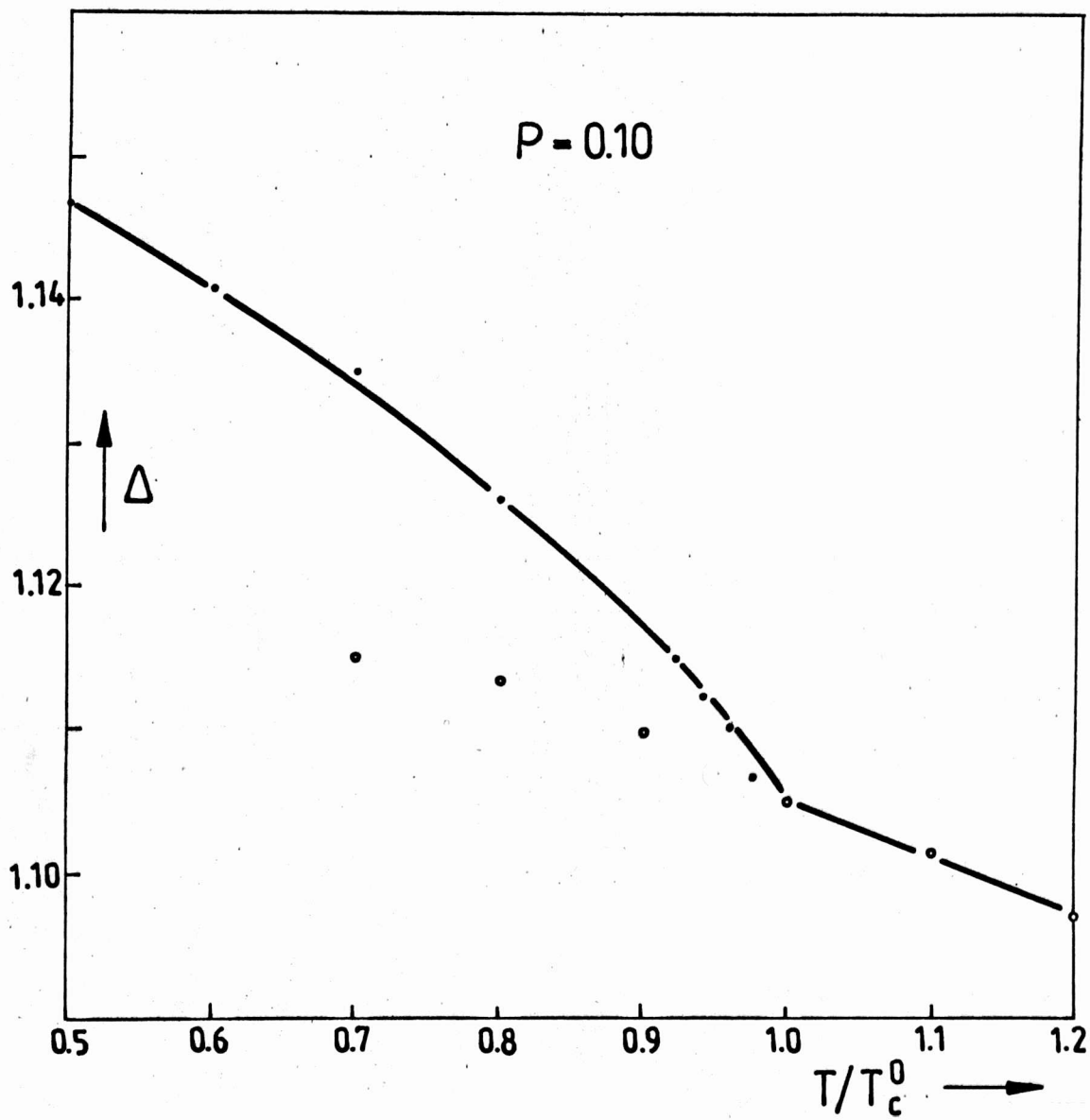
-200-



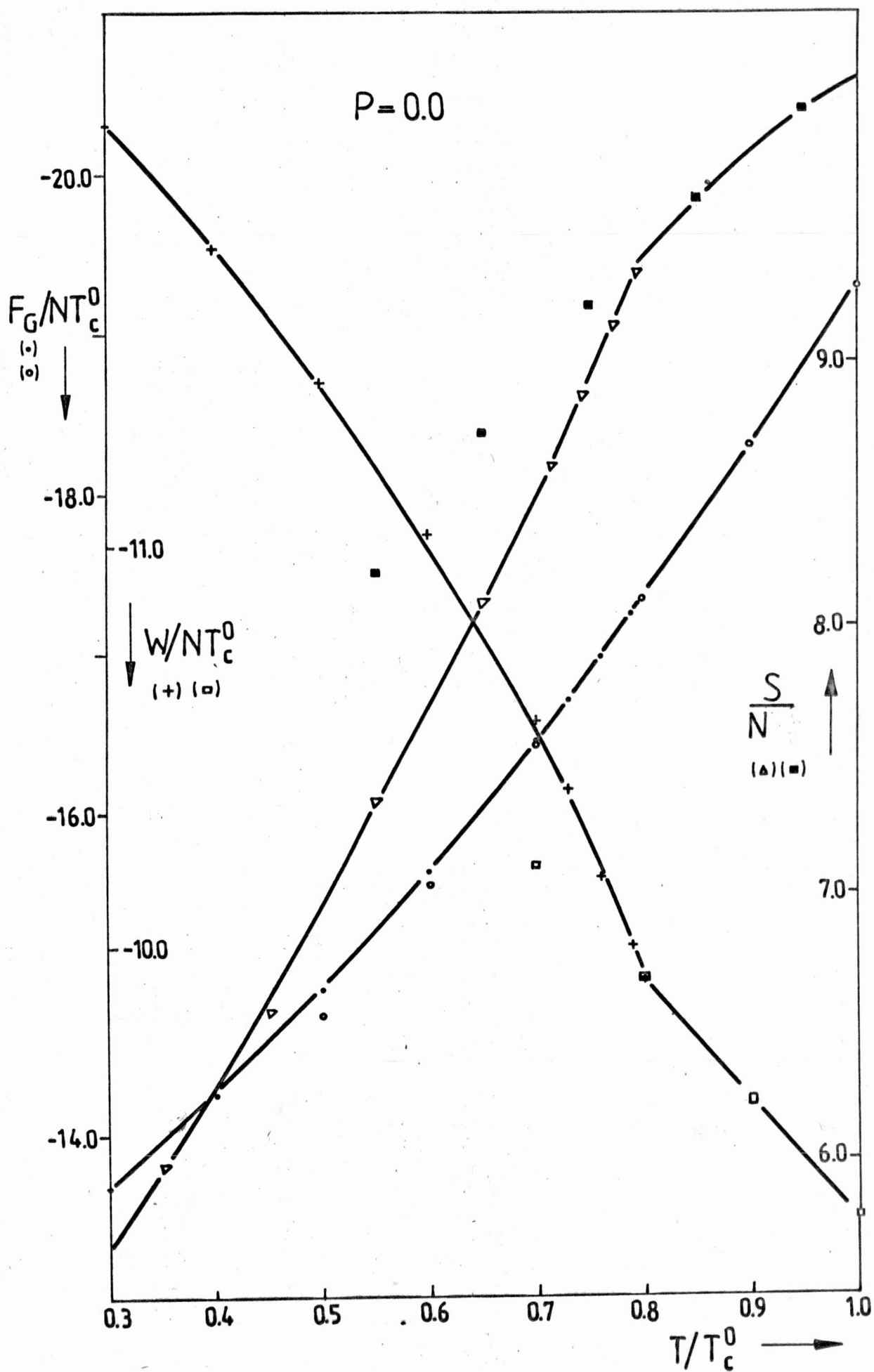
Rys. 38 a.

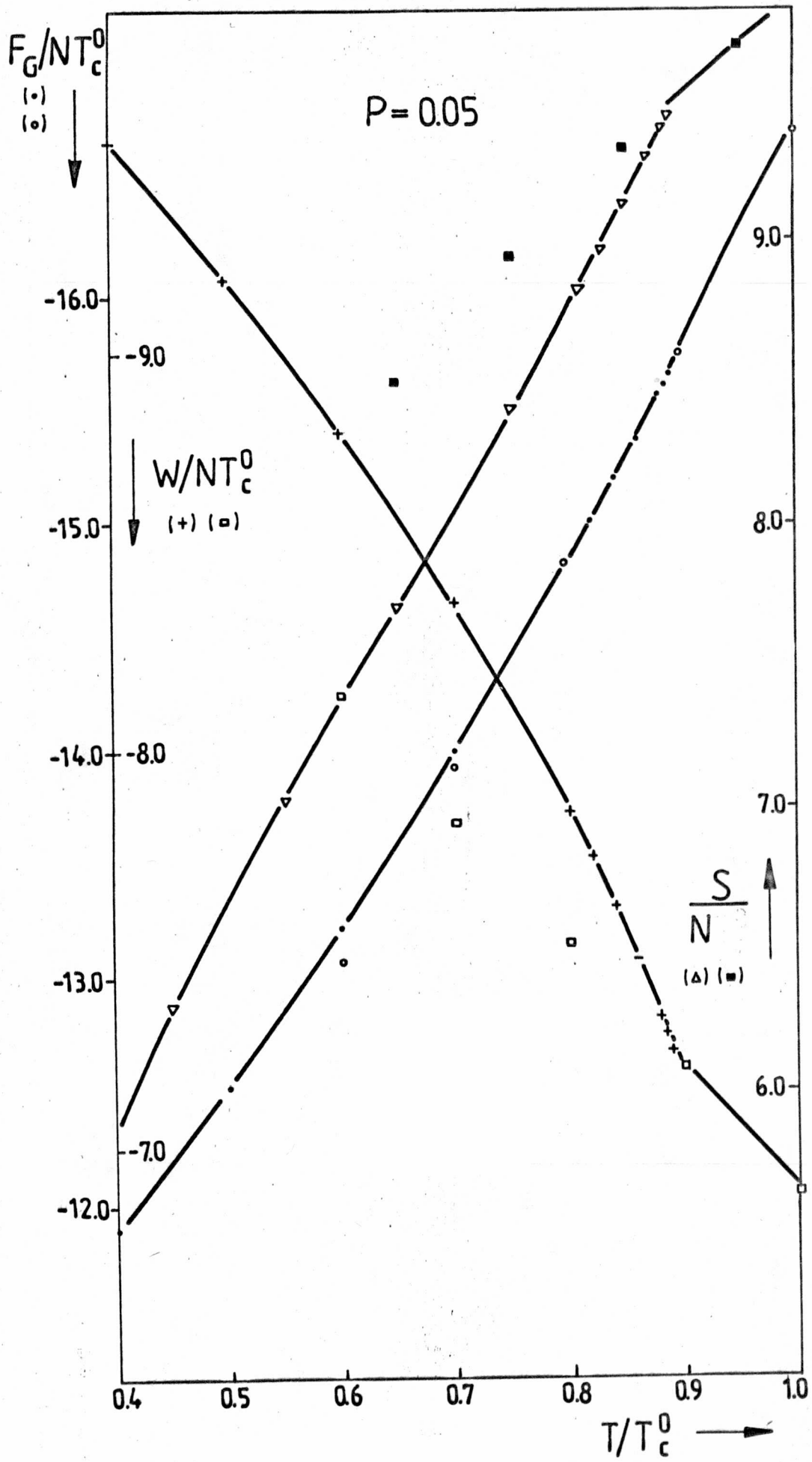


Rys.38 b.

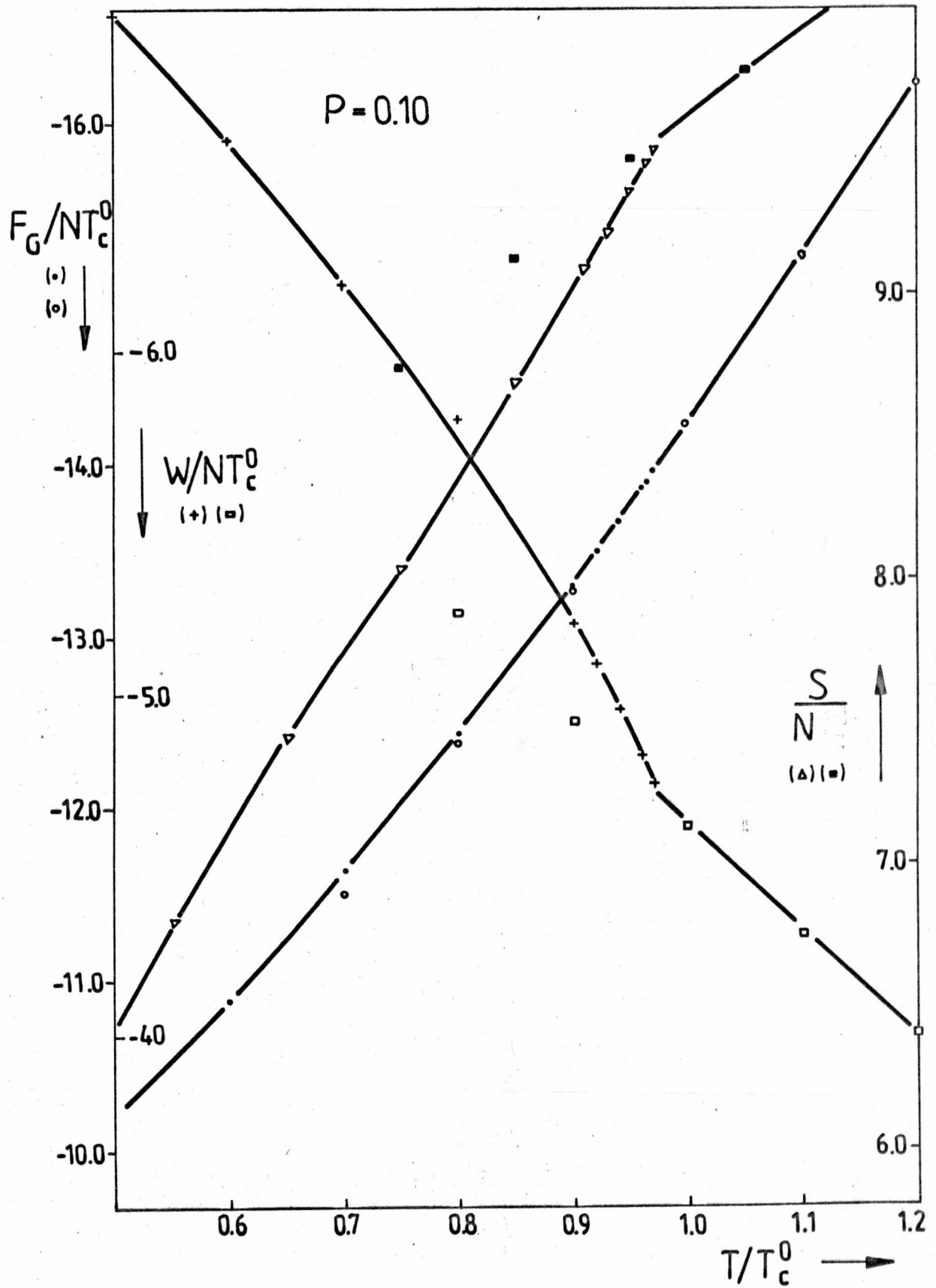


Rys. 38 c.

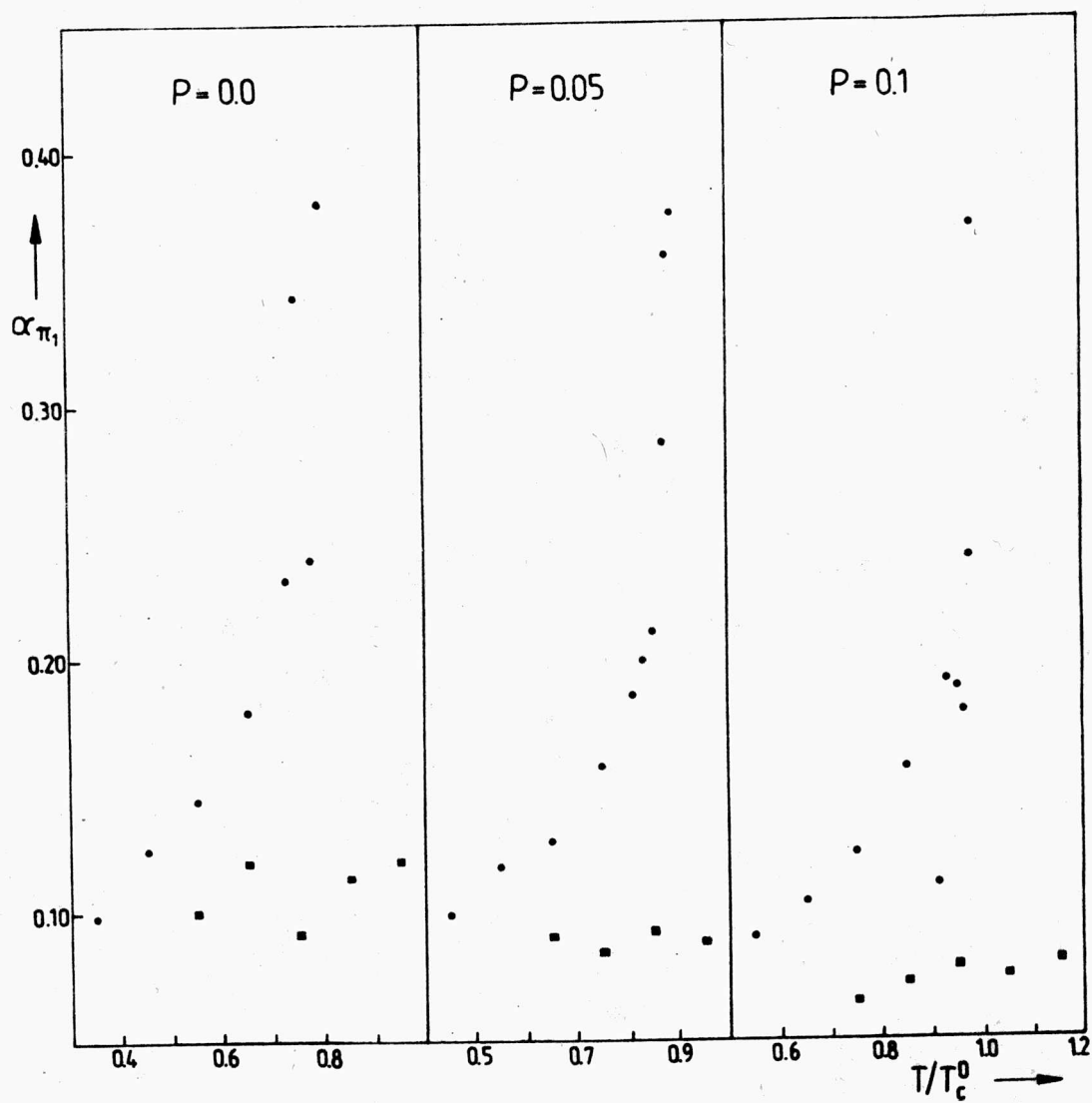




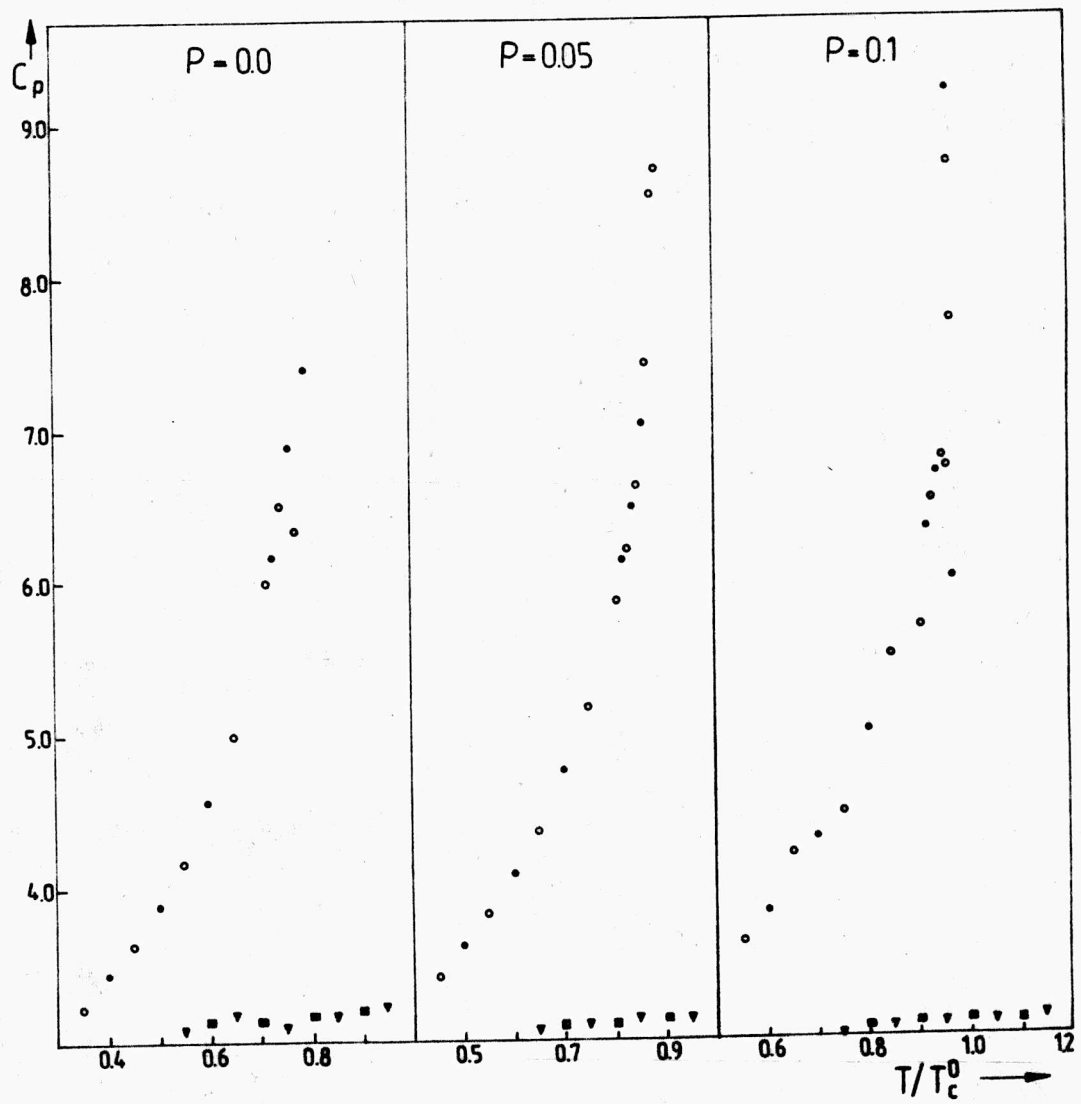
Rys. 39b.



Rys. 39 c.



Rys.40.



Rys.41.

Opis rysunków

Rys. 37a-c. Rozwiązania samouzgodnionego układu równań (4.3.2 - 4.3.5) dla podanych wartości zewnętrznego ciśnienia P przyłożonego do układu.

Rys. 38a-c. Zależności czynnika renormalizacji częstości drgań Δ (4.3.6) od T/T_0^0 dla równych wartości P .

Rys. 39a-c. Wykresy zależności energii swobodnej Gibbsa $\widetilde{F}_G/NT_0^0$, entalpii $\widetilde{W}/NT_0^0$ oraz entropii $\widetilde{S}/N$ od temperatury T/T_0^0 dla podanych wartości P .

Rys. 40. Zależności współczynnika rozszerzalności cieplnej układu od T/T_0^0 dla różnych P .

Rys. 41. Pojemność cieplna układu w obszarze magnetycznej przemiany fazowej; wartości ciśnienia P podano na rysunku; symbole $(\bullet)$, $(\blacksquare)$ oraz $(\circ)$, (∇) oznaczają wartości C_p wyznaczone w oparciu, odpowiednio, o $C_{\pi_1} = \tau \left(\partial \widetilde{S} / \partial \tau \right)_{\pi_1}$ oraz $(\partial W / \partial \tau)_{\pi_1}$.

5. Podsumowanie. Uwagi końcowe.

W pracy przedstawiono wyniki badań dotyczące własności termodynamicznych silnie anharmonicznych kryształów, których własności magnetyczne opisują: model Isinga z polem poprzecznym (rozdział 2), izotopowy model Heisenberga o dowolnym spinie (rozdział 3) oraz model Heisenberga ze spinem $S = 1$ i wymianą bikwadratową (rozdział 4). W obliczeniach zastosowano przybliżenie pola samouzgodnionego (Piakida i Konwent [2,84], Boccara [130]), które odpowiada przybliżeniu pola molekularnego oraz przybliżeniu pseudoharmonicznemu dla podukładów, odpowiednio, magnetycznego i sieciowego.

W rozpatrzonych modelach, zależność efektywnej całki wymiany od chwilowych odległości między atomami, określa sprzężenie między magnetycznymi oraz sprężystymi stopniami swobody.

W obliczeniach uwzględniono wszystkie wyrazy rozwinięcia energii potencjalnej oddziaływań niemagnetycznych oraz całki wymiany na szereg względem wychyleń atomów z położenia równowagi [81, 84]

Dla każdego z wymienionych modeli, sformułowano samouzgodniony układ równań, opisujący jego termodynamiczne własności. Przedstawiono szczegółową dyskusję rozwiązań tych równań dla konkretnych zależności energii potencjalnej (potencjał Morse'a) oraz energii wymiany (funkcja wykładnicza), od odległości.

Analizę numeryczną przeprowadzono dla kryształów o sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej z oddziaływaniem naj-

blizszych sąsiadów, w szerokim zakresie zmienności temperatury oraz zewnętrznego ciśnienia, przyłożonego do układu. Uwzględnienie oddziaływania spinowo-fononowego prowadzi do istotnych (jakościowo oraz ilościowo) modyfikacji zależności od temperatury $\tau = T/T_0^0$ oraz ciśnienia Π następujących wielkości:

- a) odległości między atomami l_{nn} ,
- b) współczynnika rozszerzalności cieplnej układu L_Π ,
- c) częstości drgań sieci krystalicznej Ω ,
- d) namagnesowania $\sigma = \langle S^z \rangle / S$.

W szczególności stwierdzono, że w fazie ferromagnetycznej modulacja całki wymiany przez drgania sieci powoduje zmniejszenie ^{Sredniej} się odległości między najbliższymi sąsiadami. Wielkość omawianego efektu jest tego samego rzędu co poprawki, jakie wnosi w równanie stanu oddziaływanie spinowo-fononowe.

Dla modeli rozpatrzonych w rozdziałach 2 i 3-im poprawki te wynoszą

$$\frac{1}{8} \frac{\partial(\tilde{T}/T_0)}{\partial \tau} \frac{k_B T_c}{k_B T_S} \frac{S}{S+1} \sigma^2(\tau), \quad (5.1)$$

natomiast dla modelu Heisenberga ze spinem $S = 1$ i wymianą bikwadratową

$$\frac{1}{16} \frac{k_B T_c}{k_B T_s} \left\{ \frac{1}{T_0} \frac{\partial \tilde{J}}{\partial r} \sigma_1^2(\tau) + \frac{K_2^0}{T_0} \frac{\partial (\tilde{K}_2 / K_2^0)}{\partial r} \left(\frac{4}{3} - \frac{\sigma_2^2(\tau)}{6} - \frac{\sigma_1^2(\tau)}{2} \right) \right\}, \quad (5.2)$$

gdzie: $k_B T_s$ jest energią sublimacji cząstki, a

$$\sigma_2(\tau) = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 2.$$

Na podstawie (5.2) możemy stwierdzić, że uwzględnienie w obliczeniach zależności całki wymiany bikwadratowej $K_{(2)}$ od odległości, przyczynia się również do zmniejszenia się odległości l_{nn} .

Zazwyczaj stosunek T_0/T_s jest mały ($\sim 10^{-1} - 10^{-2}$), więc z uwagi na (5.1-2), w układach, w których oddziaływania wymienne zmieniają się w sposób istotny wraz z odległością (dostatecznie duże $\frac{\partial(\tilde{J}/T_0)}{\partial r}$ oraz $\frac{\partial(\tilde{K}_2/K_2^0)}{\partial r}$) możemy się spodziewać znacznych zmian $l_{nn}(\tau)$ dla $\tau < \tau_c$. Wielkość diskutowanego efektu rośnie wraz ze wzrostem wartości spinu oraz zewnętrznego ciśnienia przyłożonego do układu.

Omówione wyżej zależności l_{nn} od $\tau = T/T_c^0$ w sposób istotny wpływają na zachowanie się współczynnika rozszerzalności cieplnej układu, przy stałym ciśnieniu, L_π .

Dla $\tau \rightarrow \tau_c^-$, L_π gwałtownie rośnie, a w punkcie przemiany fazowej spada do wartości charakteryzującej anharmoniczny kryształ paramagnetyczny.

Z uwagi na zastosowane przybliżenie wartości skoku jest wielkością skończoną.

Zauważmy, że w ramach teorii spontanicznej magnetostrykoji Callena i Callena [173], [72], zależność J od odległości międzyatomowych prowadzi do zmiany dV w objętości układu, która wynosi

$$dV = -N \cdot z_{nn} \left(\frac{\partial J}{\partial \rho} \right) \langle \bar{S}_n \bar{S}_m \rangle, \quad (5.3)$$

gdzie N jest liczbą magnetycznych jonów w jednostce objętości kryształu, a z_{nn} jest liczbą najbliższych sąsiadów. Z (5.3) otrzymujemy wkład, jaki wnosi spontaniczna magnetostrykoja do współczynnika rozszerzalności układu

$$- N \cdot z_{nn} \cdot d \langle \bar{S}_n \bar{S}_m \rangle / dT. \quad (5.4)$$

Z uwagi na to, że w naszych obliczeniach $d\tilde{J}/d\pi > 0$ oraz $\langle \bar{S}_n \bar{S}_m \rangle = S^2 \sigma^2(\tau)$, otrzymane wyniki dotyczące zależności l_{nn} i L_π od τ pozostają w zgodzie z rezultatami teorii fenomenologicznej [72, 173].

W pracy zbadano wpływ oddziaływania spinowo-fononowego na częstości drgań sieci Ω oraz na ich pochodne względem temperatury $d\Omega/d\tau$.

Wskazano, że w badanych układach, zależność Ω od τ określają:

- i) anharmonizm drgań sieci,
- ii) oddziaływanie spinowo-fononowe.

Dla przejrzystości dalszego ciągu podsumowania wprowadzimy dwa oznaczenia: $\Omega^{anh-para}(\tau)$ i $\Omega^{anh-ferro}(\tau)$, które określają częstość drgań sieci kryształu w fazie ferromagnetycznej ($\tau < \tau_c$), w przypadkach, gdy, odpowiednio, nie uwzględniamy ($\sigma^2 \partial \tilde{J} / \partial r = 0$) lub uwzględniamy ($\sigma^2 \partial \tilde{J} / \partial r \neq 0$) w obliczeniach, zależność całki wymiany od odległości.

Stwierdzono, że dla małych wartości $\frac{1}{J_0} \partial \tilde{J} / \partial r$ (w naszym przypadku dla małych wartości parametru B) pierwsza z wyżej wymienionych zależności przeważa i $\Omega^{anh-ferro}(\tau) > \Omega^{anh-para}(\tau)$.

Jest to zaskakujący rezultat, bo z uwagi na jawną postać zależności czynnika renormalizacyjnego częstości drgań od namagnesowania, należałoby się spodziewać odwrotnego efektu. Jednakże, dla dostatecznie dużych wartości $\frac{1}{J_0} \partial \tilde{J} / \partial r$, istotną rolę zaczyna odgrywać sprzężenie spinowo-fononowe, które powoduje, że:

- a) w bezpośrednim sąsiedztwie punktu przemiany fazowej, istnieje obszar temperatur (τ_{min}, τ_c), w którym $\Omega^{anh-ferro}(\tau_{min}) < \Omega^{anh-ferro}(\tau) < \Omega^{anh-ferro}(\tau_c)$ ($\tau_{min} < \tau < \tau_c$),

$$b) \Omega_{anh-ferro}(\tau) < \Omega_{anh-para}(\tau) .$$

Tak więc nierówność $\Omega_{anh-ferro}(\tau) < \Omega_{anh-para}(\tau)$, zgodną z istniejącymi oszacowaniami [71, 72, 81], otrzymujemy (w ramach stosowanego przybliżenia) w przypadku dostatecznie silnego oddziaływania spinowo-fonowego.

W zależności od tego, który z wymienionych ((i) lub (ii)) mechanizmów przeważa, zależność pochodnej czynnika renormalizacji częstości drgań względem temperatury

o) anomalnie maleje ($\frac{1}{\omega_0} \partial J / \partial r$ małe)

oo) anomalnie rośnie ($\frac{1}{\omega_0} \partial J / \partial r$ duże)

przy $\tau \rightarrow \tau_c^-$.

Szczegółową analizę tego zagadnienia przeprowadzono dla ściśliwego modelu Heisenberga o dowolnym spinie. Pokazano, że:

z) dla dostatecznie dużych wartości $\partial \tilde{J} / \partial r$, wielkość $\frac{d\Delta}{d\tau}$ (tym samym również zależność pochodnych częstości drgań sieci względem temperatury) może zmieniać znak z ujemnego na dodatni przy $\tau \rightarrow \tau_c^-$;

zz) w punkcie przemiany fazowej $\frac{d\Delta}{d\tau}$ zmienia się skokowo o wartość $\delta\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)$, która wynosi:

$$\delta\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right) = \frac{1}{\Delta(\tau_c)} \left\{ Q_0(\tau_c) \mathcal{L} - Q_x(\tau_c) \cdot \delta \mathcal{L}_\pi(\tau_c) \right\},$$

(5.5)

gdzie $\mathcal{L} = \lim_{\tau \rightarrow \tau_c^-} \left[\sigma(\tau) \frac{d\sigma(\tau)}{d\tau} \right]$, a $\delta \mathcal{L}_\pi(\tau_c)$ oznacza wartość skoku współczynnika rozszerzalności cieplnej układu w temperaturze Curie (patrz paragraf 3.7 wzory (3.7.9-13)) .

W pracy rozpatrzono wpływ oddziaływania spinowo-fononowego oraz zewnętrznego ciśnienia π na własności magnetyczne rozważanych modeli.

Stwierdzono, że anharmonizm drgań (duże wartości funkcji korelacji y) sprzyja procesom termicznego rozuporządkowania w podukładzie spinowym. Oznacza to, że dla $\pi = 0$ przejście fazowe w SMS-ym zachodzi w temperaturze T_0 , która jest mniejsza od temperatury Curie T_0^0 charakterystycznej dla modelu sztywnego. Wynik ten jest zgodny z rezultatami prac [58, 71] .

Przyłożenie do układu zewnętrznego ciśnienia $\pi > 0$, istotnie wpływa na własności magnetyczne. Nasze obliczenia wskazują na to, że magnetyzacja oraz temperatura Curie T_0 rosną wraz ze wzrostem π (tj $d\sigma/d\pi > 0$ i $dT_c/d\pi > 0$).

Prowadzi to do interesującego efektu w przypadku modelu Isinga z polem poprzecznym.

Jak wiadomo [24, 25] w modelu tym istnieje taka wartość całki tunelowania Γ_m , że dla $\Gamma_0 > \Gamma_m$ układ nie wykazuje spontanicznego uporządkowania. Jednakże w ściślejm IMTF dla $\Gamma_0 > \Gamma_m$ może pojawić się uporządkowanie magnetyczne (będące efektem uwzględnienia zależności całki wymiany od odległości), po przyłożeniu do układu dostatecznie dużego ciśnienia π .

Należy zauważyć, że na otrzymane w pracy wyniki, w sposób istotny wpłynęło zastosowanie przybliżenia pola samouzgodnionego [84, 130] . Dotyczy to zwłaszcza zależności od temperatury: współczynnika rozszerzalności cieplnej i pojemności cieplnej układu oraz pochodnej względem temperatury częstości drgań sieci kryształu. W rozpatrzonych przez nas SMS-ych wielkości te wykazują skończoną wartość skoku, jakiego doznają w punkcie magnetycznej przemiany fazowej - II-go rodzaju .

Tym niemniej należy podkreślić, że rezultaty przedstawione w pracy dają jakościowo poprawny opis tendencji zmian badanych charakterystyk termodynamicznych przy $T \rightarrow T_c^-$ (poza obszarem krytycznym).

W ostatnich latach w pracach poświęconych SMS-ym szeroko dyskutowano zwłaszcza nad:

- j) własnościami krytycznymi [93-99] ,
- jj) właściwościami widma wzbudzeń elementarnych [68-90, 174-6] .

Jak zauważyli Barjachtar i Jabłonski [174] , oraz Turov i Szavrov [175] , drugie z wymienionych wyżej zagadnień (jj) wykazuje wiele cech wspólnych z własnościami modeli rozpatrywanych w kwantowej teorii pola.

Ngai, Ruvalds, Economou i inni [90] , [176] zwrócili uwagę na to, że w SMS-ych w przypadku dostatecznie silnego oddziaływania spinowo-fononowego, możliwa jest jednoczesna kondensacja w energetycznie niższym stanie związanym magnonu i fononu (tzw. mieszany stan związany magnonowo-fononowy).

Problem zbadania własności widma wzbudzeń elementarnych, jak również dokładniejsza jakościowa i ilościowa analiza badanych w pracy charakterystyk termodynamicznych ŚMS-ych, wymaga użycia bardziej zaawansowanych metod.

Otrzymane tutaj rezultaty mogą się stać punktem wyjścia do dalszych badań właściwości anharmonicznych kryształów magnetycznych, opartych na rozwiniętym przez Konwenta i Płakidę formalizmie teorii oddziaływania spinowo-fononowego [79-87]

Wyniki niniejszej pracy pokazują, że jest to nie tylko pożyteczne, ale również konieczne.

DODATEK A.

Wpływ parametrów modelu na rodzaj przemiany

fazowej w ściśliwym modelu Heisenberga.

W tym dodatku, na prostym przykładzie, zbadamy wpływ parametrów modelu, charakteryzujących drgania sieci i sprzężenie tych drgań ze spinami, na charakter przejścia fazowego.

Rozpatrujemy model Heisenberga ze spinem $S=1/2$ przy warunku, że zewnętrzne ciśnienie $\mathcal{T}$ jest równe zero.

Efektywna całka wymiany ma postać (patrz (3.3.2), (2.3.5)):

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_0(y) \left(1 + \frac{\mathcal{I}_0}{2\mathcal{D}_0} \left(\frac{B}{A} \right)^2 \frac{\sigma^2}{4} \right), \quad (A.2)$$

gdzie

$$\mathcal{I}_0(y) = \mathcal{I}_0 \exp \left[\frac{B}{2A} \left(\frac{B}{A} - 3 \right) y \right].$$

Po podstawieniu (A.2) do równania na σ (3.3.3) lub (3.5.9) otrzymujemy

$$\sigma = \tanh \left[\frac{\sigma}{\tau (1 - \gamma \sigma^2 / 4)} \right] \quad (A.3)$$

gdzie

$$\tau = 3\mathcal{I}_0(y) / \mathcal{T}, \quad \gamma = (\mathcal{I}_0 / 2\mathcal{D}_0) \cdot (B/A)^2.$$

W celu zbadania zachowania się rozwiązań (A.3) w funkcji τ , rozwiązywano numerycznie to równanie, przy sparame-tryzowanych wartościach stałej oddziaływania spinowo-fononowego γ .

Wyniki przedstawiono na rysunkach A1 - A3.

Rys. A1.a,b przedstawia zależność σ od τ przy różnych wartościach parametru γ .

Rysunki A2a oraz A2.b przedstawiają wykresy obu stron równania (A.3), jako funkcje σ przy podanych wartościach γ i τ . Ilustrują one istotę zmiany rodzaju przejścia fazowego, które jest przemianą drugiego lub pierwszego rodzaju dla, odpowiednio, $\gamma < \frac{4}{3}$ lub $\gamma > \frac{4}{3}$.

Rysunki A3 a-d zawierają zależności $\sigma(\tau)$ oraz wykresy obu stron (A.3) ^{jako} funkcji σ dla $\gamma > 4$. W tym obszarze rozważany model prowadzi do niefizycznych rezultatów ($\sigma > 0$ dla $\tau > \tau_c$ i $\sigma = 0$ dla $0 \leq \tau \leq \tau_c$).

Przeprowadzona tutaj stosunkowo prosta analiza problemu charakteru przemiany fazowej prowadzi do następujących wniosków:

1^o Przemiana fazowa jest przemianą ciągłą jeśli

$$\frac{J_0}{2D_0} \left(\frac{B}{A} \right)^2 < C(s) \quad (A.4)$$

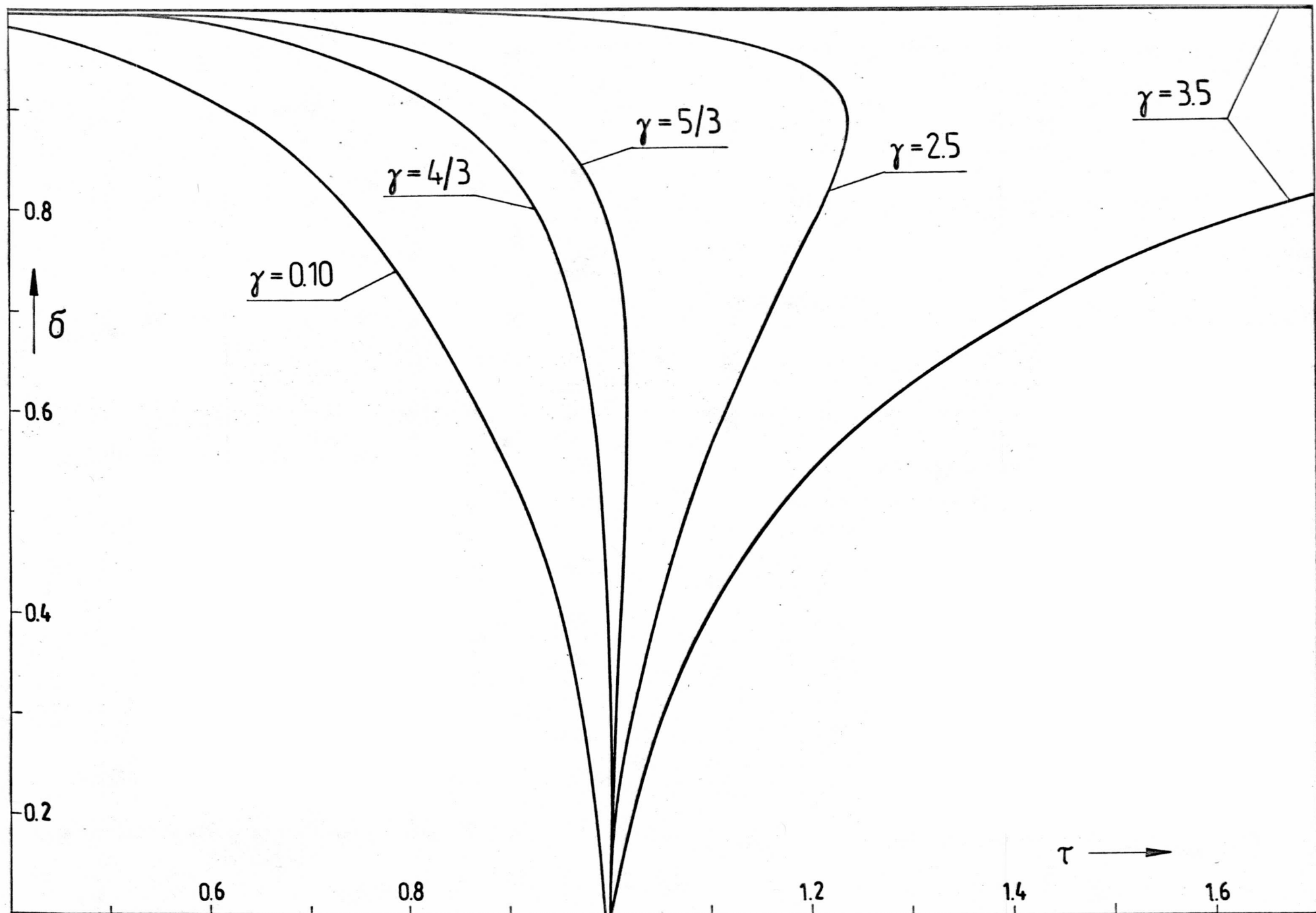
2^o W ściślimym modelu Heisenberga przemiana fazowa może być pierwszego rodzaju jeśli

$$\frac{J_0}{2D_0} \left(\frac{B}{A} \right)^2 > C(s)$$

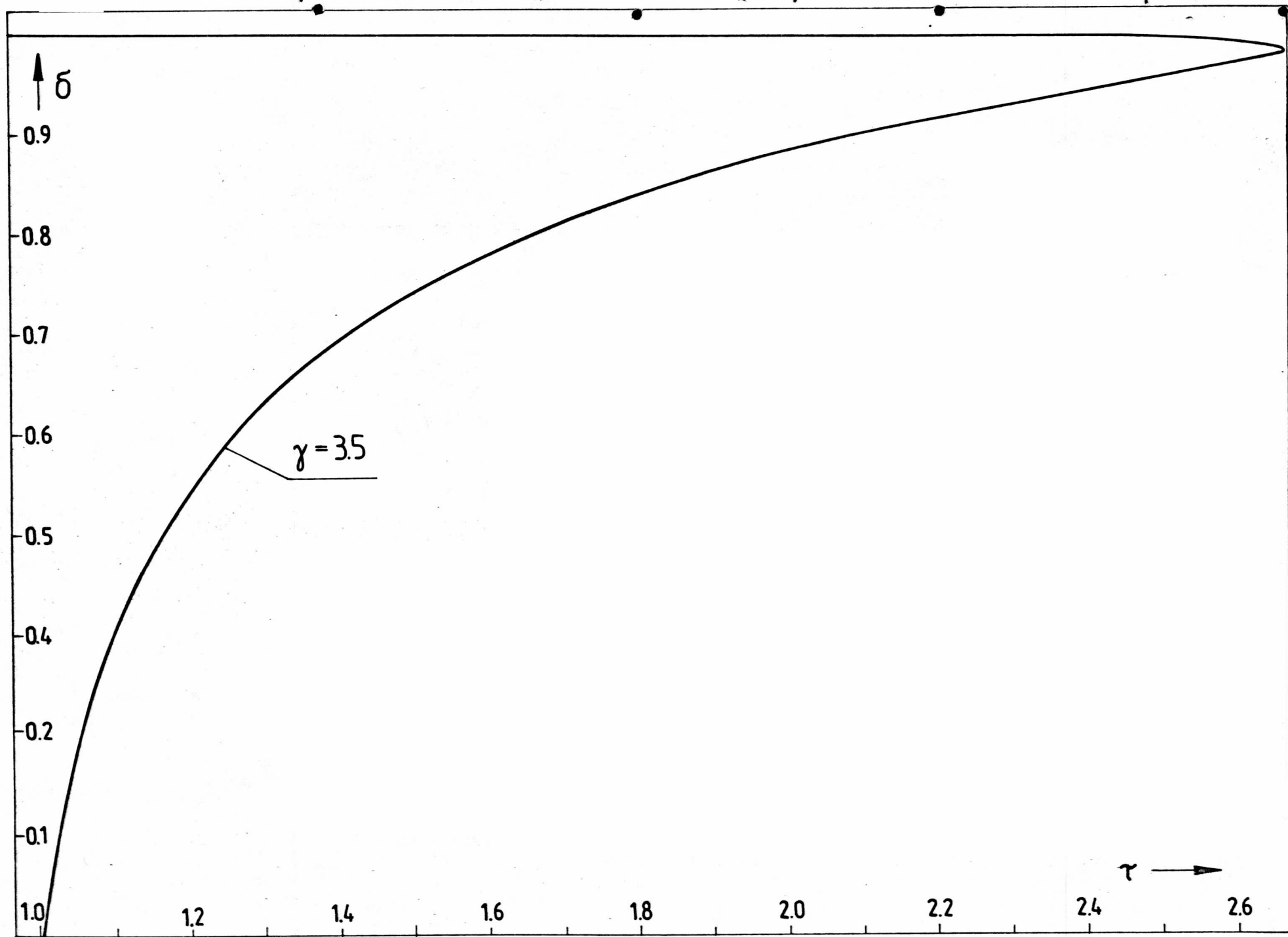
gdzie $C(s)$ oznacza pewną stałą liczbę, która dla $s = \frac{1}{2}$ przyjmuje wartość $C\left(s = \frac{1}{2}\right) = \frac{4}{3}$.

Łatwo sprawdzić, że stosowane w naszych obliczeniach wartości parametrów, leżą w obszarze przejść fazowych II-go rodzaju.

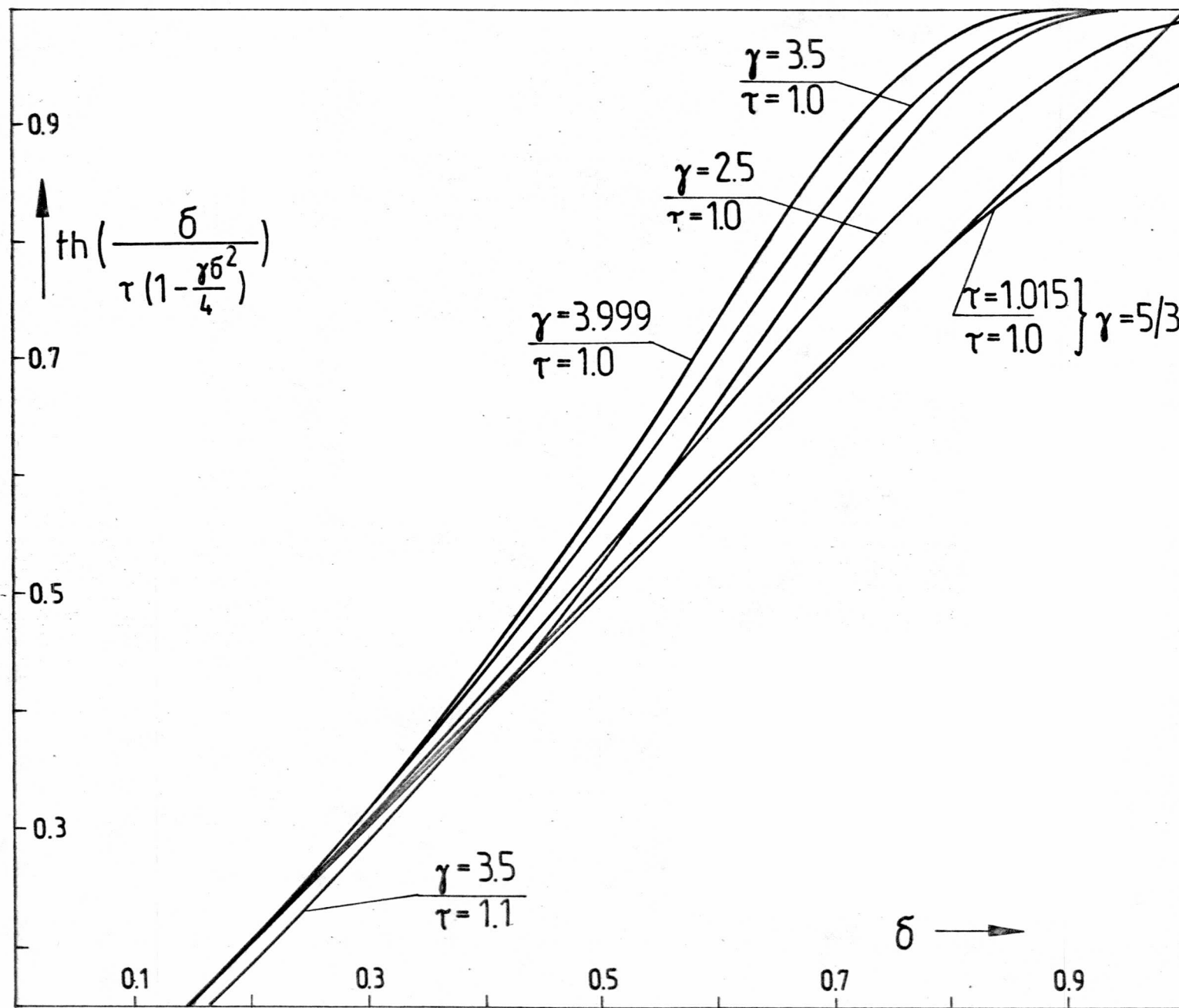
Przedstawione oszacowania potwierdzają sformułowaną w paragrafie 3.7 sugestię o tym, że wzrost parametru B może spowodować zmianę charakteru przemiany fazowej.

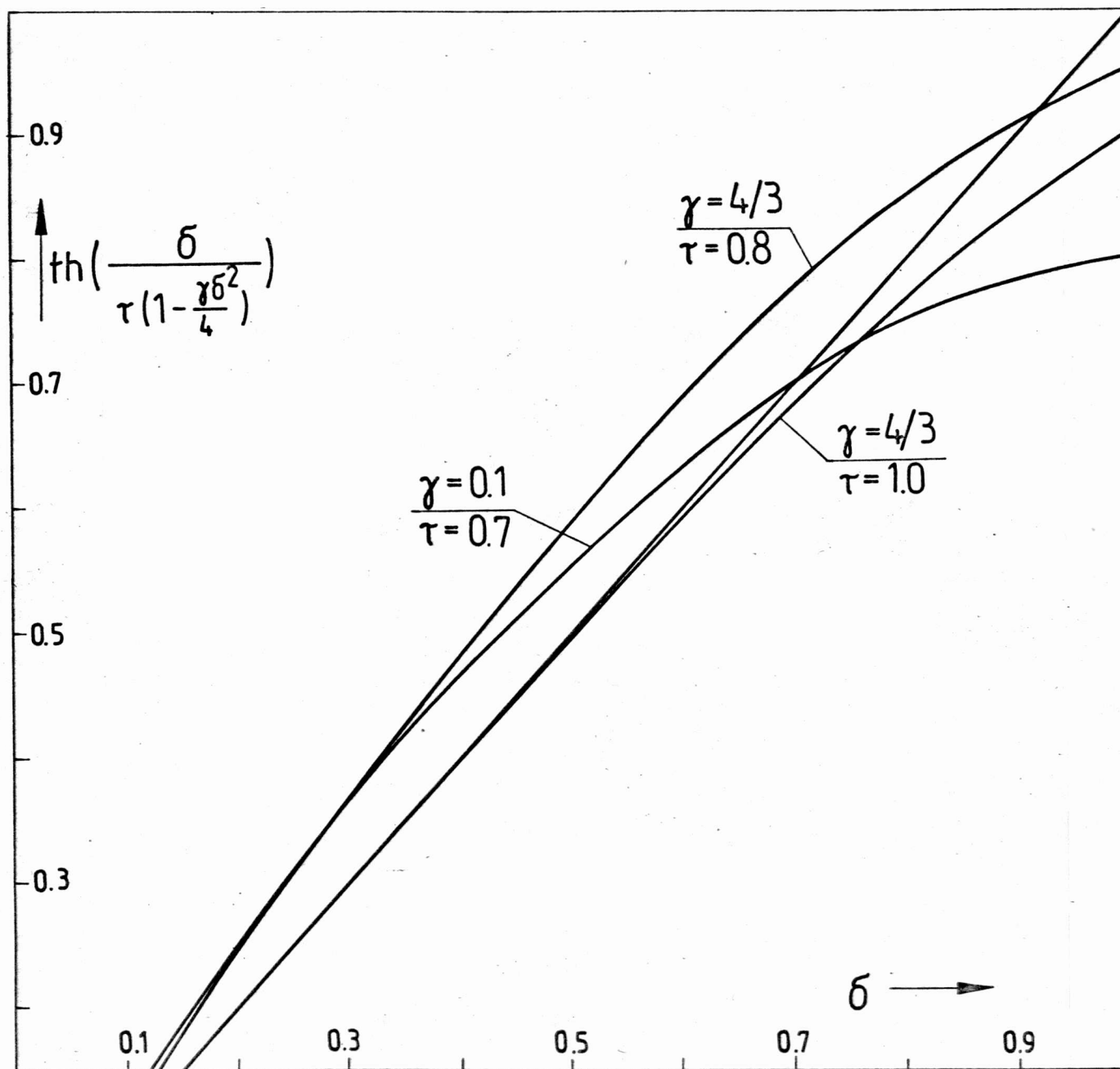


Rys. A1.a

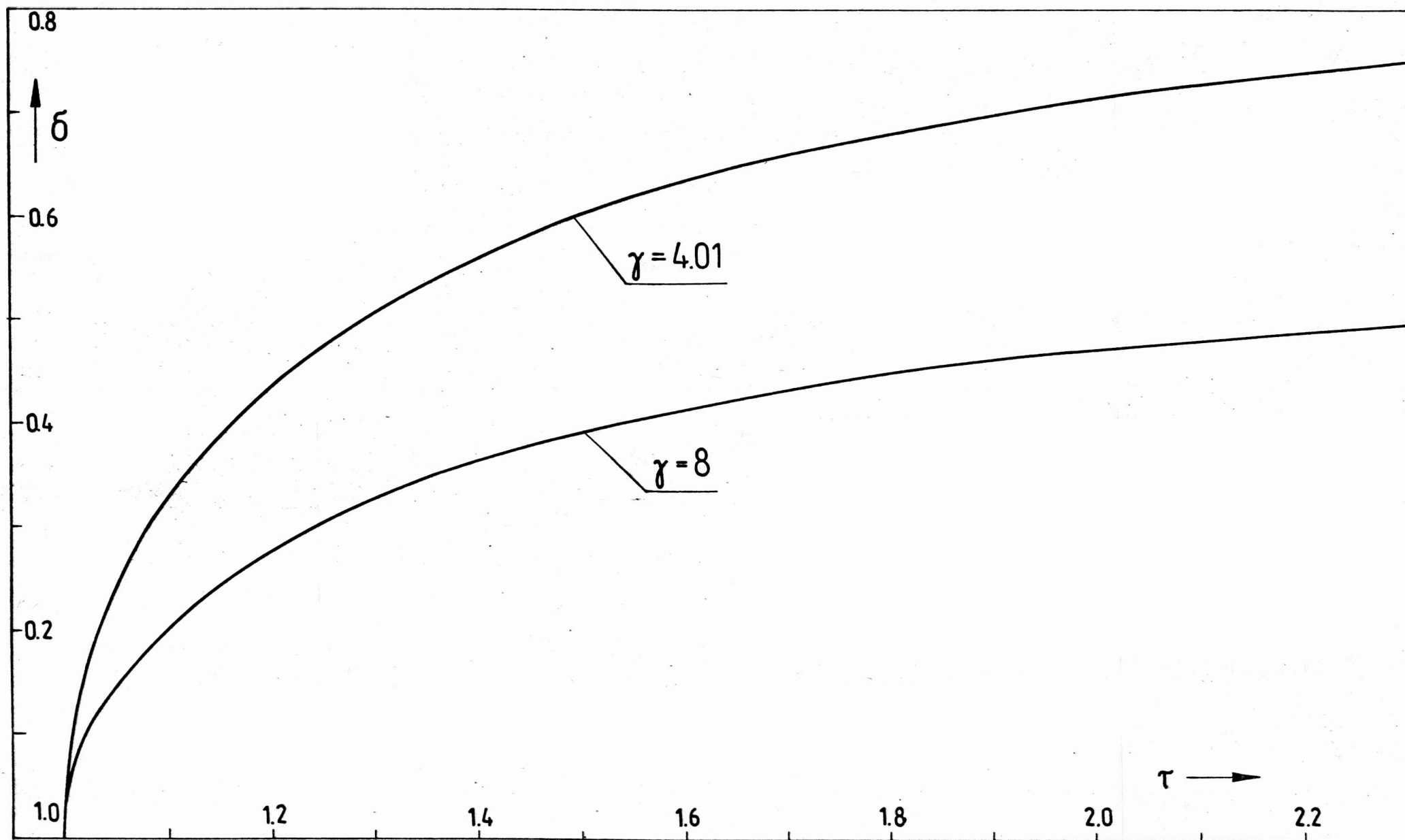


Rys. A1.b

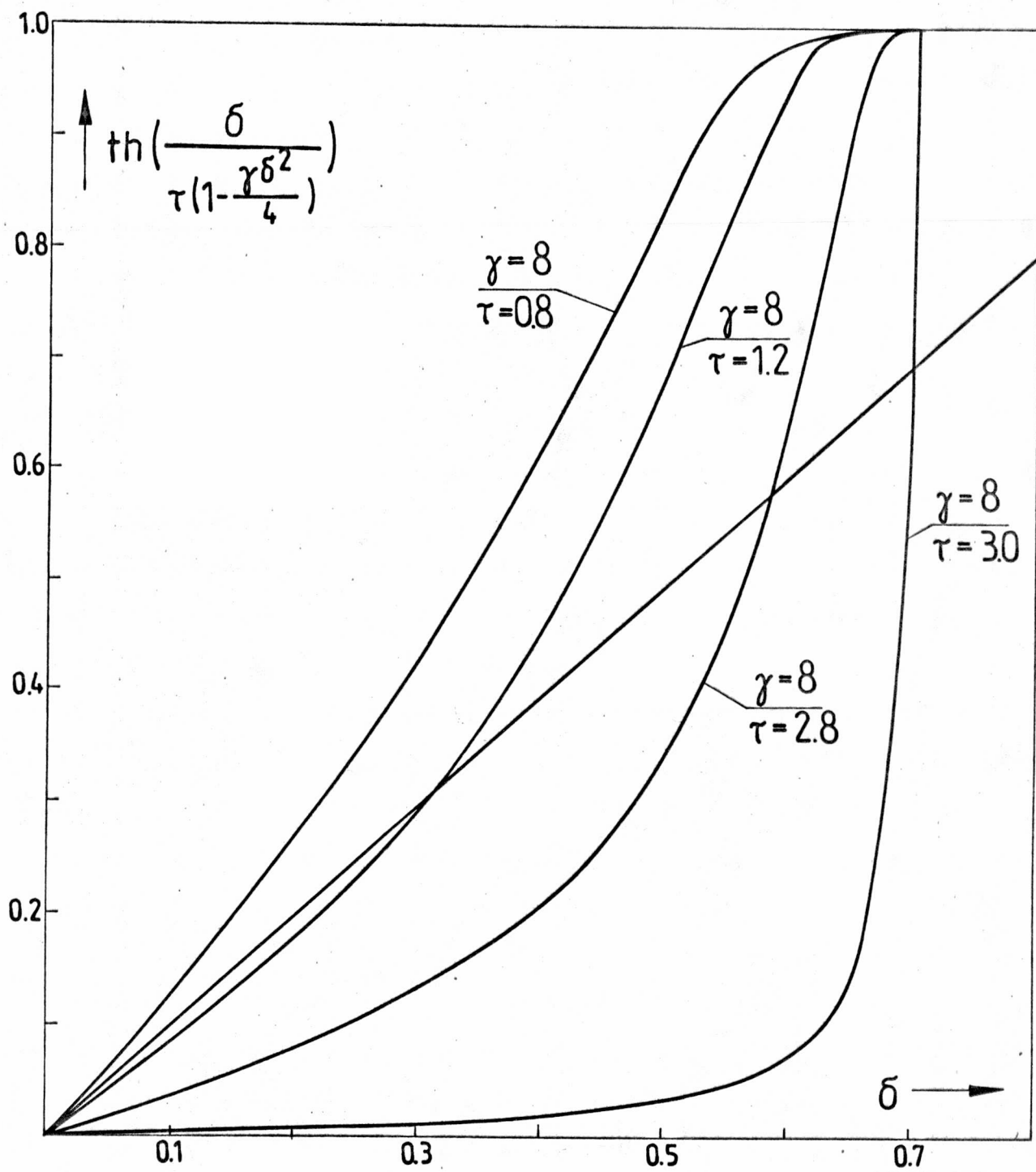




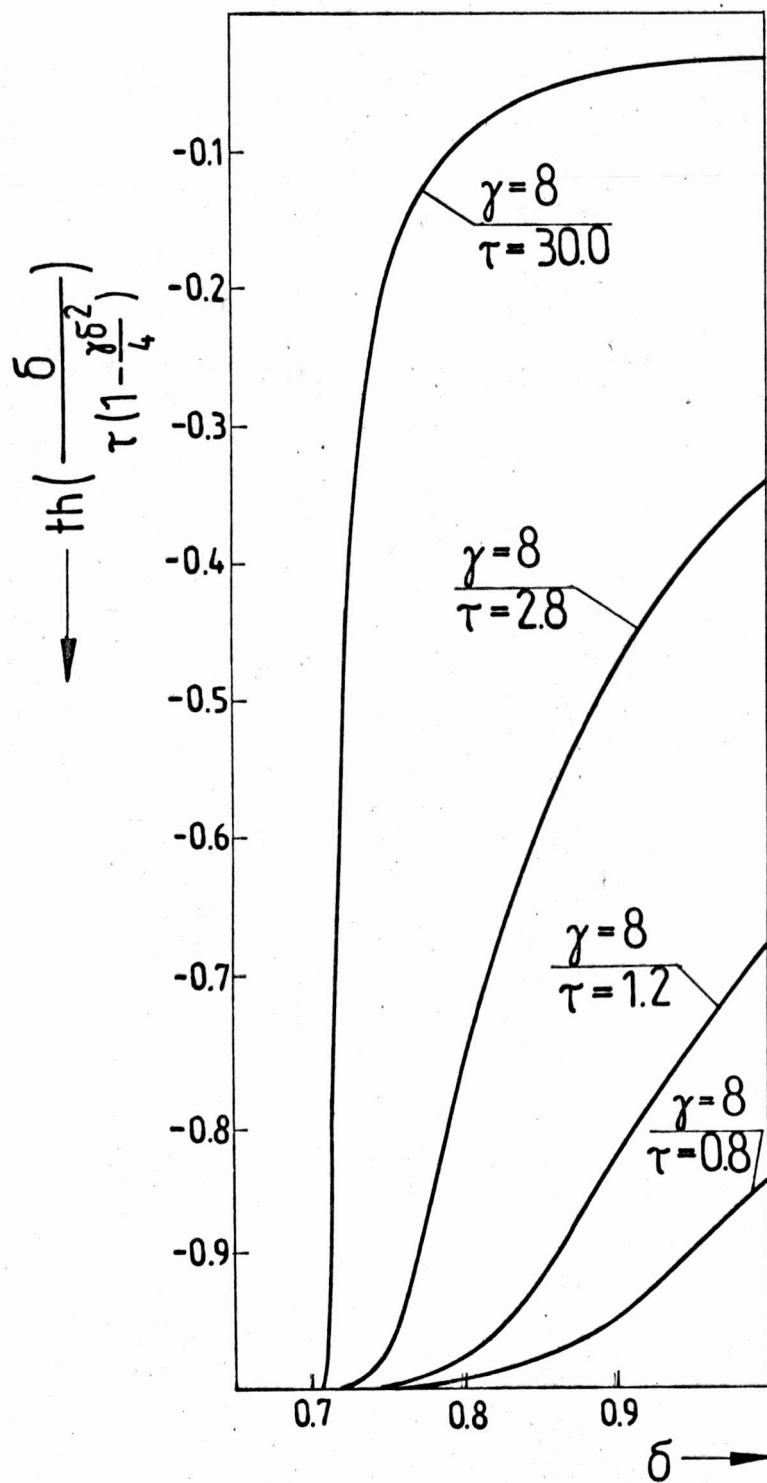
Rys.A2.b



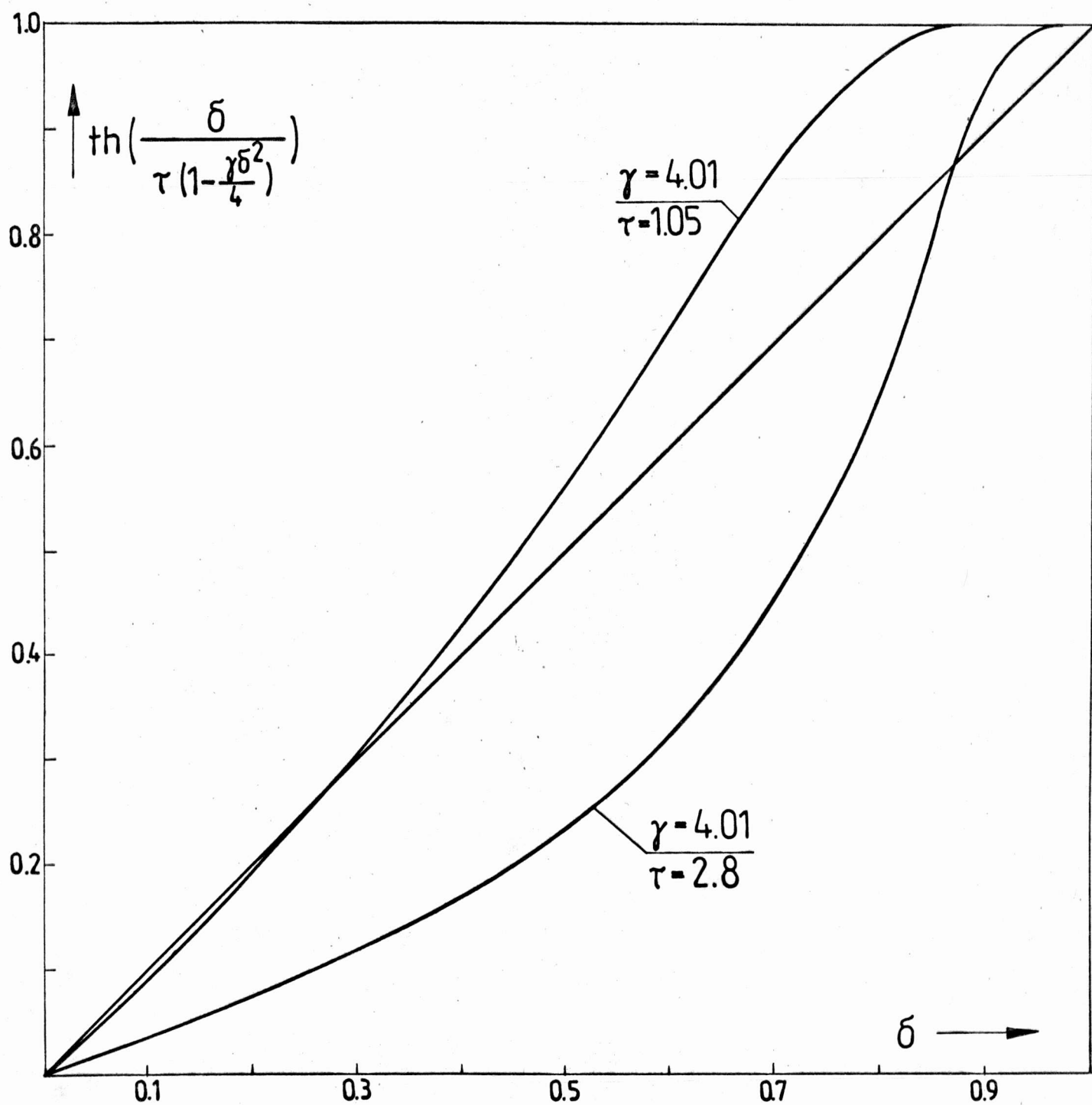
Rys. A3. a



Rys. A3. b



Rys.A3.c



Rys. A3.d

Opis rysunków

Rys. A1a,b. Rozwiązania równania (A.3) dla podanych wartości stałej oddziaływania spinowo-fononowego .

Rys. A2a,b. Wykresy obu stron równania (A.3) jako funkcje $\sigma = 2 \langle S^Z \rangle$ (przy podanych wartościach δ i $\tau = T/T_0^0$).

Rys. A3a. Rozwiązania równania (A.3) dla $\delta > 4.0$.

Rys. A3b-d. Wykresy obu stron równania (A.3) jako funkcje σ dla $\delta > 4.0$ i podanych wartości τ .

6. SPIS LITERATURY

- 1 D.C. Mattis, The Theory of Magnetism, Harper and Row Ed., 1965
- 2 S.V. Tjablikov, Metody kvantovoj teorii magnetizma, Nauka, Moskwa, 1975
- 3 K.W.H. Stevens, Spin Hamiltonions, [w]:Magnetism, G.T.Rado i H.Suhl Ed. vol I, strony 1 - 24, Acad.Press, New York, 1963
- 4 C. Domb, Statistical Mechanics of Critical Behaviour in Magnetism Systems, ibid., vol.II A, strony 2 - 42, Acad.Press, New York, 1965
- 5 R. Brout, Statistical Mechanics of Ferromagnetism, ibid., vol.III A, strony 43 - 104, Acad.Press, New York, 1965
- 6 H.E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971
- 7 R.P. Feynman, Statistical Mechanics, W.A. Benjamin, Inc. Massachusetts, 1972
- 8 C. Domb, Ising Model, [w]:Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.3A, strony 357 - 485, Acad.Press, 1974
- 9 S.V. Vonsovskij, Magnetizm, Nauka, Moskwa 1971 .
- 10 L.D. Landau, E.M. Lifszic, Statisticeskaja Fizika, cz.I, Nauka, Moskwa, 1976
- 11 J.S. Smart, Effective Field Theories of Magnetism, W.B. Saunders Comp. 1966
- 12 F. Keffer, Spin Waves, [w]:Handbuch der Physik, t.XVIII/2, strony 1 - 273, Springer-Verlag, 1966

- 13 G.S. Rushbrooke, G.A. Baker, P.J. Wood, Heisenberg Model, [w]:Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.3, Acad.Press, strony 246 - 356, 1974
- 14 G.A. Smolenskiĭ, W.W. Lemanov i inni, Fizika Magnitnykh Dielektrikov, Nauka, Leningrad, 1974
- 15 K.P. Sinha, N. Kumar, Interactions in Magnetically Ordered Solids, Oxford University Press, 1980
- 16 J.C. Slater, The Self-Consistent Field for Molecules and Solids, t.IV monografii: Quantum Theory of Molecules and Solids, Mc Graw-Hill Book Company, 1974
- 17 E.A. Zavadskij, V.I. Volkov, Magnitnyje fazovyje perechody, Naukova Dumka, Kiev, 1980
- 18 Yu.A. Izjumov, V.E. Najsz, R.P. Ozjerov, Neutrony i tverdoe telo, t.II, Moskwa, Atomizdat, 1981
- 19 A.J. Akhiezer, W.G. Borjakhtar, S.V. Poletminskij, Spinovyje Volny, Nauka, Moskwa, 1967
- 20 A.P. Cracknell, Magnetyzm kryształów, PWN, Warszawa 1982
- 21 P.G. de Gennes, Solid State Comm.1, 132 (1963)
- 22 A. Abragam, B. Bleaney, Electron Paramagnetic Resonance of Transitions Ions, Clarendon Press, Oxford, 1970
- 23 V.G. Vaks, Vvedenie v mikroskopическую теорию сегнето-электриков, Nauka, Moskwa, 1973
- 24 R.B. Stinchcombe, J.Phys. C4, 2459 (1973); ibid. C4, 2484 (1973); ibid. C4, 2507 (1973)
- 25 R. Blinc, B. Žeks, Soft Modes in Ferroelectrics, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1974

- 26 L. Novaković, The Pseudo-Spin Method in Magnetism and Ferroelectricity, vol.77 International Series of Monographs in Natural Philosophy, General Editor D.Ter Haar, Pergamon Press, 1975
- 27 D.D. Betts, X-Y Model, [w]. Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.3, Acad.Press, strony 569-652, 1974
- 28 H.E. Stanley, D-vector Model or, Properties of Isotropically-Interacting D-Dimensional Classical Spins, ibid. strony 485-567, vol.3, Acad.Press, 1974
- 29 E.L. Nagaev, Fizika Magnitnykh Poluprovodnikov, Nauka, Moskwa 1979
- 30 E.L. Nagaev, Usp. Fiz. Nauk 136, 61 (1982)
- 31 E. Pytte, Ann.Phys. (N.Y) 32, 377 (1965)
- 32 O.K.Rice, J.Chem.Phys. 22, 1535 (1954)
- 33 C.Domb, ibid. 25, 783 (1956)
- 34 W.N. Kascheev, Fiz.Tverd.Tela 3, 759 (1961)
- 35 J. Szaniecki, Acta Phys.Pol. 22, 125 (1962)
- 36 C.P.Been, D.S. Rodbell, Phys.Rev. 126, 104 (1962)
- 37 E.N. Jakovlev, Fiz.Tverd.Tela 4, 594 (1962)
- 38 D.C. Mattis, T.D. Schultz, Phys.Rev. 129, 175 (1963)
- 39 H.S. Bennett, E. Pytte, Phys.Rev. 155, 553 (1967);
ibid. 164, 712 (1967)
- 40 H. Okamoto, Progr.Theor.Phys. 37, 1348 (1967)
- 41 K. Toni, H. Mori, ibid., 39, 876 (1968)
- 42 N. Matsudaïra, J.Phys.Soc.Jap. 25, 1225 (1968)
- 43 N.P. Graždankina, Usp.Fiz.Nauk, 26, 291 (1968)
- 44 G.E. Laramore, L.P. Kadanoff, Phys.Rev. 187, 619 (1969)
- 45 A.I. Larkin, S.A. Pikin, Zhurn.Eksp.Teor.Fiz. 56, 1664 (1969)

- 46 H.C. Bolton, B.S. Lee, J.Phys. C3, 1435 (1970)
- 47 H. Wagner, J. Swift, Z.Physik, 239, 182 (1970)
- 48 G.A. Baker, J.W. Essam, Phys.Rev.Lett 24, 447 (1970)
- 49 L.A. Coplan, M. Dresden, Phys.Rev.Lett 25, 785 (1970)
- 50 G.A. Baker, J.W. Essam, J.Chem.Phys. 55, 861 (1971)
- 51 D. Jasnow, H. Wagner, Z. Physik, 249, 101 (1971)
- 52 B.S. Lee, H.C. Bolton, J.Phys.C4, 1178 (1971)
- 53 H.C. Bolton, B.S. Lee, J.W.L. Miller, J.Phys. C5,
2445 (1972)
- 54 V.A. Zagrebnov, V.N. Fedjanin, Teor.Mat.Fiz. 10, 127 (1972)
- 55 H. Horner, Z.Physik 251, 202 (1972)
- 56 J.W. Tucker, V.W. Rampton, Microwave Ultrasonics in Solid
State Physics, North-Holland Publ.Comp., 1972
- 57 V.N. Kasehev, Acta Phys.Pol. 43A, 493 (1973)
- 58 V.N. Kasehev, Phys.St.Sol. 57B, K211 (1973)
- 59 D.J. Bergman, Y. Imry, L. Gunther, J.Stat.Phys. 7, 337
(1973)
- 60 S.R. Salinas, J.Phys. A6, 1527 (1973)
- 61 M. Luban, Phys.Rev. B7, 2203 (1973)
- 62 K.A. Penson, ibid. B8, 2119 (1973)
- 63 N. Theodorakopoulos, Sol.St.Comm. 12, 955 (1973)
- 54 J. Oitmaa, J.Phys. C7, L140 (1974)
- 55 T. Ottinsen, Phys.Rev. B10, 3858 (1974)
- 56 S.R. Salinas, J.Phys. C7, 241 (1974)

- 67 D.J. Bergman, O. Entin-Wohlman, Y. Imry, *ibid.*, C7, 1621 (1974)
- 68 J. Oitmaa, M.N. Barber, *J. Phys.* C8, 3653 (1975)
- 69 G.K. Roy, B.K. Chakrabarti, *Phys. Lett.* 58A, 197 (1976)
- 70 V.G. Kamensky, Sound Absorption in Magnetics, w *Magnetism in Metals and Metallic Compounds*, J.T. Lopuszański, A. Pękalski i J. Przystawa Ed. Plenum Press, New York, London, strony 601-9, 1976
- 71 W. Jezewski, *Acta Phys. Pol.* A51, 703 (1977); *ibid.* A54, 323 (1978)
- 72 M.E. Lines, *Phys. Rep.* 55, 133 (1979)
- 73 J. Fizez, B. De Raedt, H. De Raedt, *Phys. Rev.* B21, 5330 (1980)
- 74 J. Fizez, B. De Raedt, H. De Raedt, *J. Phys.* C14, 2923 (1981)
- 75 J. Fizez, *Z. Phys.* B42, 209 (1981); *ibid.* B43, 283 (1981)
- 76 J. Fizez, *Phys. Rev.* B26, 6169 (1982)
- 77 S.V. Tjablikov, H. Konwent, *Phys. Lett.* 27A, 130 (1968)
- 78 H. Konwent, *ibid.* 28A, 237 (1968)
- 79 H. Konwent, N.M. Płakida, *Teor. Mat. Fiz.* 3, 135 (1970); *ibid.* 8, 119 (1971)
- 80 H. Konwent, N.M. Płakida, *Phys. Lett.* 37A, 173 (1971)
- 81 H. Konwent, Efekty oddziaływania spinowo-fononowego w kryształach anharmonicznych, Instytut Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Wrocławskiego, Preprint Nr 247, Wrocław 1972
- 82 F. Vukajlovic, H. Konwent, N.M. Płakida, *Teor. Mat. Fiz.*, 19, 115 (1974)
- 83 H. Konwent, N.M. Płakida, *Acta Phys. Pol.* A47, 589 (1975)

- 84 N.M. Płakida, H. Konwent, "The Spin-Phonon Interaction in Anharmonic Ferromagnetic Crystals", [w]: "Magnetism in Metals and Metallic Compounds", praca zbiorowa pod redakcją: J.T. Łopuszański, A. Pękalski, J.A. Przy-
stawa, New York - London, 1976, strony 543 - 72
- 85 H. Konwent, N.M. Płakida, Oddziaływanie spinowo-fononowe w kryształach antyferromagnetycznych oraz ferrima-
gnetycznych, Instytut Fizyki Politechniki Wrocław-
skiej, Komunikat Nr 365/76, Wrocław 1976
- 86 K. Konwent, "Metoda wariacyjna w teorii oddziaływania spinowo-fononowego w kryształach magnetycznych, Instytut Fizyki Politechniki Wrocławskiej, Raport
Nr 277/77, Wrocław 1977
- 87 H. Konwent, "On the Self consistent Theory of Compressible Heisenberg Ferromagnet with Spin = $1/2$ ", Instytut
Fizyki Politechniki Wrocławskiej, Komunikat No 178/80,
Wrocław 1980
- 88 J.B. Torrance, J.C. Slonczewski, Phys.Rev. B5, 4648 (1972)
- 89 S.W. Lovesey, J.Phys. C5, 2769 (1972)
- 90 E.N. Economou, K.L. Ngai, T.L. Reinecke, J. Ruvalds,
R.Silberglitt, Phys.Rev. B13, 3135 (1976)
- 91 Yu.A. Izjumov, O.B. Gurin, J.Magn.Magn.Mat. 24, 291 (1981)
- 92 A.J. Akhiezer, J.Phys. U.S.R.R. 10, 217 (1946)
- 93 D.J. Bergman, B.I. Halperin, Phys.Rev. B13, 2145 (1976)
- 94 M.A.de Moura, T.C. Lubensky, Y.Imry, A. Aharony, ibid.
B13, 2176 (1976)
- 95 K.K. Murata, ibid. B15, 4328 (1977)
- 96 S. Melosovic, L. Sasvari, B. Tadić, Z.Phys. B29, 139 (1978)

- 97 J. Bruno, J. Sak, Phys.Rev. B22, 3302 (1980)
- 98 J.F. Nicoll, ibid. B24, 388 (1981)
- 99 L. Sasvari, B. Tadic, Z.Phys. B43, 163 (1981)
- 100 W. Salejda, Acta Phys.Pol. A59, 465 (1981)
- 101 H. Konwent, W. Salejda, ibid. A60, 79 (1981)
- 102 W. Salejda, The Self-Consistent Calculations of the Lattice Dynamics and Thermodynamics of the Anharmonic Heisenberg Ferromagnet. Numerical Results, Instytut Fizyki Politechniki Wrocławskiej, Raport Nr 110/82, Wrocław, 1982
- 103 W. Salejda, The Spin-Phonon Interaction in Spin-One Heisenberg Model with Biquadratic Exchange. The Self-Consistent Field and Random Phase Approximations-General Formulae, Instytut Fizyki Politechniki Wrocławskiej, Raport Nr 115/82, Wrocław, 1982
- 104 A.A. Maradudin, P.A. Flinn, R.A. Coldwell-Horsfall, Ann.Phys. (N.Y) 15, 360 (1961)
- 105 P. Choquard, The Anharmonic Crystal, W.A. Benjamin Inc., New York - Amsterdam (1967)
- 106 T.R. Koehler, Lattice Dynamics of Quantum Crystals, w Dynamical Properties of Solids, G.K. Horton i A.A. Moradudin Ed. vol II, strony 1-104, North Holland Publ.Comp. (1974)
- 107 N.M. Plakida, T.Siklos, phys,st.sol. 33b, 103 (1969); ibid.33b, 113 (1969); ibid. 39b, 171 (1970)
- 108 N.P.Gupta, A.K. Dave, Ann.Phys. 57, 386 (1970)
- 109 V.V.Kondrat'ev, Fiz.Tverd.Tela 16, 384 (1974)

- 110 N.M. Płakida, T. Siklos, Acta Phys. Hung, 45, 37 (1978)
- 111 C. Malinowska-Adamska, M. Owsiejszyk, T. Wojt ozak, phys. st. sol. (b) 115, 335 (1983)
- 112 P.W. Anderson, Exchange in Insulators, [w:] Magnetism, G.T. Rado i H. Suhl Eds. t. I, Acad. Press, 1963
- 113 P.W. Anderson, Solid State Physics 14, 99 (1953)
- 114 C. Herring, Direct Exchange between Well-Separated Atoms, [w:] Magnetism, G.T. Rado i H. Suhl Eds. t. IIb, strony 2-177, Acad. Press, 1966
- 115 R.B. Griffiths, Phys. Rev. 124, 1023 (1961)
- 116 R. Blinc, R. Żeks, Adv. Phys. 21, 693 (1972)
- 117 J. Oitmaa, M. Plischke, J. Phys. C9 2093 (1976)
- 118 R. Jullien, P. Pfeuty, J.N. Fields, S. Doniach, Phys. Rev. B18, 3568 (1978)
- 119 K.K. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn. 24, 497 (1968)
- 120 K. Nordvedt, Phys. Rev. 173, 547 (1968)
- 121 G.D. Houston, H.C. Bolton, J. Phys. C4, 2097 (1971); J. Phys. C4, 2894 (1971)
- 122 M.A. Moore, H.C.W.L. Williams, J. Phys. C5, 3168 (1972)
- 123 K.N. Pak, Phys. Status Solidi. (b) 60, 233 (1973)
- 124 P.I. Konsin, N.N. Kristofel, Fiz. Tver. Tela 14, 2873 (1972)
- 125 P.I. Konsin, Phys. Status Solidi (b) 70, 451 (1975)
- 126 R.E. Nettleton, J. Phys. C7, 3785 (1974); J. Phys. C8, 943 (1975)
- 127 M. Maćkowiak, J. Stankowski, B. Żeks, R. Blinc, Acta Phys. Pol. A57, 575 (1980)
- 128 L. Kowalewski, "Wpływ fluktuacji energii spinowej na mechanizm przejść fazowych w układach singlet-singlet i singlet-triplet"; wykłady IV Sympozjum

"Przejścia fazowe i zjawiska krytyczne", Instytut
Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN,
Wrocław 1983.

- 129 J.M.Vesselinova, phys.st.sol.(b) 116 , 71 (1983)
- 130 N.Boocara, phys.stat.sol.(b) 43 , K11 (1971)
- 131 N.M.Plakida, Fiz.Tverd.Tela 11, 700 (1969)
- 132 B.P.Demidovio, I.A.Maron, The Fundamental Principles
of Numerical Mathematics, Nauka, Moskva 1970
(in Russian)
- 133 Y-L.Wang, B.R.Cooper, Phys.Rev. 172, 539 (1968)
- 134 J.M.Ortega, W.C.Rheinbold, Iterative Solution of
Nonlinear Equations in Several Variables, Computer
Science and Applied Mathematics, Academic
Press, New York and London 1970
- 135 V.Janovec, J.Chem.Phys. 45, 1974 (1966)
- 136 L.R.Testardi, Phys.Rev. B12, 3849 (1975)
- 137 L.Passell, D.W.Dietrich, J.Als-Nielsen, Phys.Rev.
B14, 4897 (1976)
- 138 A.M.de Graaf, R.M.Xavier, Phys.Lett 18, 225 (1965)
- 139 R.M.Xavier, ibid. 25, 244 (1967)
- 140 J.Smit, J.Appl.Phys.37, 1455 (1966)
- 141 A.A.Berdyshev, B.M.Letfulov, Fiz.Tverd.Tela 11,
2759 (1969)
- 142 A.A.Kozakov, ibid. 12, 2021 (1970)
- 143 A.N.Kocarjan, D.I.Chomskij, ibid. 17, 462 (1975)
- 144 L.D.Falkovskaya, V.A.Sapozhnikov, phys.st.sol.(b)
71, 469 (1975)
- 145 S.Lara, R.M.Xavier, C.A.Taft, Sol.St.Comm. 24,
635 (1977)
- 146 S.Lara, R.M.Xavier, C.A.Taft, phys.st.sol.(b) 82,
K21 (1977)

- 147 S.Lara, R.M.Xavier, C.A.Taft, J.Phys.Chem.Solids 38,
795 (1977)
- 148 A.N.Kocarjan, P.S.Ownanjon, Zurn.Eksp.Teor.Fiz.74,
620 (1978)
- 149 Y.Ousaka, O.Sakai, M.Tachiki, J.Phys.Soc.Japan 48,
1269 (1980)
- 150 J.Als-Nielsen, D.W.Dietrich, L.Passell, Phys.Rev.
B14, 4908 (1976)
- 151 R.C.Maheshwari, M.M.Shukla, Indiana J.Pure Appl.
Phys. 13, 136 (1975)
- 152 A.Kornblit, G.Ahlers, Phys.Rev. B11, 2678 (1975)
- 153 G.Ahlers, A.Kornblit, ibid. B12, 1938 (1975)
- 154 O.W.Dietrich, A.J.Henderson, H.Majer, ibid. B12,
2844 (1975)
- 155 A.Kornblit, G.Ahlers, E.Buehler, ibid. B17,
282 (1978)
- 156 G.K.Sokolova, K.M.Demchuk, K.P.Rodinov, A.A.Samokhva-
lov, Zurn.Eksp.Teor.Fiz. 22, 317 (1966)
- 157 D.B.Mc Whan, P.C.Souers, G.Jura, Phys.Rev. 143,
385 (1966)
- 158 Y.Hidaka, H.Fujii, E.Tatsumoto, J.Phys.Soc.Japan 29 ,
515 (1970)
- 159 B.E.Argyle, N.Miyata, T.D.Schultz, Phys.Rev. 160,
413 (1967); ibid. 171, 555 (1968)
- 160 G.A.de Witt, B.N.Brookhouse, J.Appl.Phys. 39,
451 (1968)
- 161 V.P.Michalozenko, V.P.Michajliuk, Fiz.Met.Metallv.
1118 (1971).

- 162 F.C.Nix, D.Mac Nair, Phys.Rev.60 , 597 (1941)
- 163 N.Singh, J.Singh, S.Prakash, Phys.Rev. B12,
5415 (1975)
- 164 M.Blume, Y.Y.Hsieh, J.Appl.Phys. 40 , 1249 (1969)
- 165 H.H.Chen, P.M.Levy, Phys.Rev. B7, 4267 (1973); *ibid.*
B7, 4284 (1973)
- 166 V.M.Matveev, Zh.Eksp.Teor.Fiz., 65 , 1626 (1973)
- 167 M.Barma, Phys.Rev. B10 , 4650 (1974)
- 168 H.A.Brown, Phys.Rev. B7 , 4725 (1975)
- 169 L.Biegała, Acta Phys.Polon. A47 , 129 (1975)
- 170 J.Sivardiere, Dipolar and Quadrupolar Ordering in
Magnetic Crystals, [*in*]: ^{*in Metals*} Magnetism and Metallic
Compounds, J.T.Lopuszański, A.Pekalski, J.Przy-
stawa Ed., Plenum Press, New York-London 1976,
pp. 411-433.
- 171 R.Mionas, J.Phys. C9 , 3307 (1976)
- 172 S.B.Haley, P.Erdős, Phys.Rev. B5 , 1106 (1972)
- 173 E.R.Callen, H.B.Callen, Phys.Rev. 129, 578 (1963)
- 174 V.G.Barjachtar, D.A.Jablonski, Fiz.Met.Metall. 43,
645 (1977)
- 175 E.A.Turov, V.G.Szavrov, Usp.Fiz.Nauk 140 , 429 (1983)
- 176 K.L.Ngai, J.Ruvalds, E.N.Economou, Phys.Rev.Lett. 31 ,
166 (1973)

	* N *		
	Harce, pr.	Harce, pr.	Harce, pr.
	$\phi 281$		$I\phi 9$
	Symbol UKD	$I\phi 9/P-366/84$	84:Inst.Fiz. PWr MNSzWiT
			pol.

Opis bibliograficzny

Salejda Włodzimierz

Termodynamika ściśliwych modeli Isinga i Heisenberga z silnym anharmonizmem drgań sieci krystalicznej i z silnym sprzężeniem spinowo-fononowym.

Raporty Inst.Fiz.PWr 1984 ser.PRE
nr 366

239 s. 4 rys. 105 wykr. bibliogr. 176
poz./maszyn.powiel./

Rozprawa doktorska /
Politechnika Wrocławska, Instytut
Fizyki, Wrocław

Promotor: doc.dr hab. Henryk Konwent
239,6

Charakter pracy
Materiały oplatne

Rozpowazecznienie

Analiza dokumentacyjna.

<D

Stosując teorię oddziaływania spinowo-fononowego sformułowaną przez Konwenta i Plakidę / w przybliżeniu pola samouzgodnionego/ zbadano własności termodynamiczne następujących modeli: Isinga z polem poprzecznym, Heisenberga o dowolnym spinie oraz Heisenberga z wymianą bikwadratową i spinem $s=1$, w silnie anharmonicznej sieci krystalicznej i z silnym oddziaływaniem spinowo-fononowym. W szczególności wyznaczono zależności: energii swobodnej, entalpii, entropii, pojemności cieplnej, współczynnika rozszerzalności cieplnej i częstości drgań sieci kryształu od temperatury i ciśnienia / w fazach ferro- i paramagnetycznej/.

Imię i Nazwisko autora analizy

Włodzimierz Salejda

Słowa kluczowe

<S

termodynamika, model Isinga, model Heisenberga, kryształy anharmoniczne, oddziaływanie spinowo-fononowe.

***0480*00*

<A _____ *B _____ *C _____ *D _____

*E _____ *F _____ *G _____ *H _____

tylko PRL	CINTE	APW	Podpis red.	Podpis asyst. d/s badań	Potwierdzenie przyjęcia poprawki.	Potwierdzenie przyjęcia karty w Oddziale Dokumentacji.
Wpisać TAK lub NIE						