

Таким образом, анализ спектра неупругого рассеяния нейтронов на обменных кластерах может послужить методом определения параметра АС взаимодействия.

Л и т е р а т у р а

- [1] Güdel H. U., Furer A. Mol. Phys., 1977, vol. 33, № 5, p. 1335—1344; Helvetica Physica Acta, 1977, vol. 50, p. 439—446.
- [2] Цукерблат Б. С., Белинский М. И. Магнетохимия и радиоспектроскопия обменных кластеров. Кишинев: Штиинца, 1983. 280 с.
- [3] Дзялошинский И. Е. ЖЭТФ, 1957, т. 32, с. 1547; т. 33, с. 1454.
- [4] Morya T. Phys. Rev., 1960, vol. 117, p. 635; vol. 120, p. 91.
- [5] Илюмов Ю. А., Озеров Р. П. Магнитная нейтронография. М.: Наука, 1966.
- [6] Marshall W., Lovesey S. W. Theory of thermal neutron scattering. Oxford: Clarendon Press, 1971. 280 p.
- [7] Файнзильберг В. Е., Белинский М. И., Цукерблат Б. С. ФТТ, 1978, т. 20, с. 3156; ЖЭТФ, т. 79, с. 619.

Институт химии АН МССР
Кишинев

Поступило в Редакцию
10 января 1984 г.

УДК 548:537.621

Физика твердого тела, том 26, в. 4, 1984
Solid State Physics, vol. 26, № 4, 1984

О ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ЛЕГКОПЛОСКОСТНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА В ПРОДОЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Ю. В. Переверзев, В. Г. Борисенко

В последнее время активно исследуется ряд магнитных соединений [1], одноионная анизотропия β которых сравнима или даже значительно превосходит величину обменного взаимодействия J_0 . Особого внимания заслуживают легкоплоскостные (ЛП) магнетики с большой анизотропией, интересные свойства которых обусловлены возможностью изменения магнитного основного состояния в магнитном поле (пересечение энергетических уровней). Нас будет интересовать фазовая диаграмма ЛП ферромагнетиков (ФМ) в продольном магнитном поле H . Отметим здесь кратко те работы, в которых затрагивалась эта проблема и проводился точный учет одноионной анизотропии. Для спина $S=1$ при $H=0$ в приближении молекулярного поля Мория [2] было показано, что при $\beta \gg J_0$ такие ФМ не упорядочиваются даже при температуре $T=0$. Цунети и Мурао [3] для $S=1$ при $\beta \gg J_0$ в продольном H получили уравнение линии фазовых переходов второго рода, которая в $H-T$ плоскости имела своеобразный вид (на рис. 1 кривая 4). Экспериментально такие диаграммы получены в [4]. Розенфельд [5] для произвольной величины спина S при $T=0$ показал, что в ЛП ФМ (также предполагалось $\beta \gg J_0$) при определенных величинах H имеют место скачки продольной и всплески поперечной намагниченности. Из дальнейшего будет видно, что эти особенности в намагниченности соответствуют переходу в плоскости $H-T$ из области, отвечающей «парамагнитной» фазе (ПФ), в области угловой фазы (УФ).

Нашей задачей является найти для ЛП ФМ в продольном магнитном поле с произвольным S и при любом соотношении между β и J_0 уравнение линии, разделяющей эти фазы в плоскости $H-T$. Решение задачи проводится в приближении молекулярного поля при точном учете части гамильтониана, описывающей одноионную анизотропию. В таком приближении гамильтониан выделенного узла в системе, связанной со средней намагниченностью, имеет вид

$$\mathcal{H} = -J_0 \sigma S_z + \frac{\beta}{2} (S_z^2 \cos^2 \theta + S_x^2 \sin^2 \theta) - \mu H S_z \cos \theta + V, \quad (1)$$

где через V обозначена часть гамильтониана, линейная относительно оператора S_x ,

$$V = -\frac{\beta}{4} (S_z S_x + S_x S_z) \sin 2\theta + \mu H S_x \sin \theta,$$

θ — угол между направлением оси анизотропии и средней намагниченностью $\sigma = \langle S_z \rangle$, $\mu = g\mu_B$ — произведение g -фактора на магнетон Бора. Угол θ найдем из естественного для данной системы координат условия $\langle S_x \rangle = 0$. Это уравнение путем унитарного преобразования, соответствующего повороту вокруг оси z на угол π , можно преобразовать к виду

$$\left\langle \int_0^\tau e^{\mathcal{H}u} V e^{-(\mathcal{H}-2V)u} S_x du \right\rangle = 0, \quad \tau = 1/T. \quad (2)$$

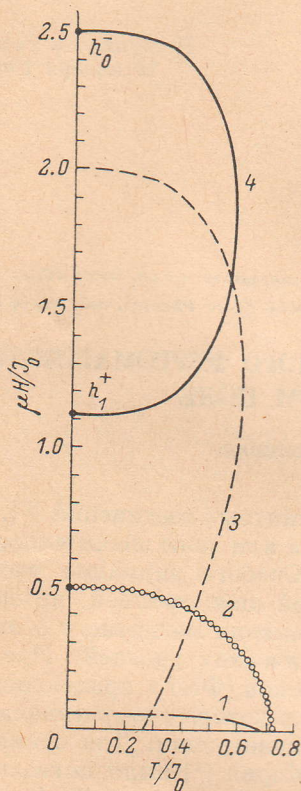


Рис. 1. Фазовые диаграммы ($S=1$) при различных значениях β/J_0 .
1 — 0.1, 2 — 1, 3 — 3.99, 4 — 5.

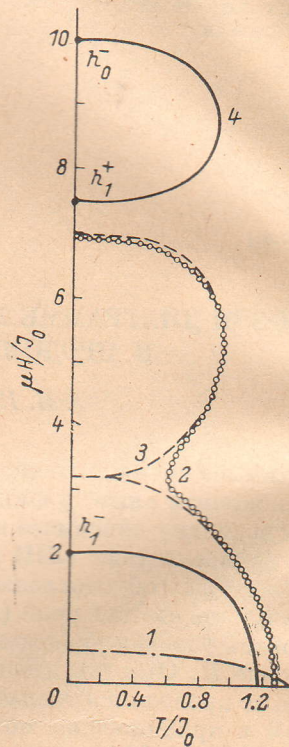


Рис. 2. Фазовые диаграммы ($S=3/2$) при различных значениях β/J_0 .
1 — 0.5, 2 — 6.9, 3 — $(\frac{7}{2} + 2\sqrt{3}) = \beta_1/J_0$, 4 — 10.

Из (2) видно, что решение $\theta = 0$, отвечающее ПФ, выделяется тривиально, поскольку $V \sim \sin \theta$. Решение для УФ должно находиться из уравнения

$$\left\langle \int_0^\tau e^{\mathcal{H}u} \left[-\frac{\beta}{2} (S_z S_x + S_x S_z) \cos \theta + \mu H S_x \right] e^{-(\mathcal{H}-2V)u} S_x du \right\rangle = 0.$$

Полагая здесь $\theta = 0$, что соответствует выходу непосредственно на фазовую кривую, после некоторых преобразований, получим

$$J_0 \left\langle \int_0^\tau e^{\mathcal{H}u} S_x e^{-\mathcal{H}u} S_x du \right\rangle = 1. \quad (3)$$

Гамильтониан в (3), с которым здесь и ниже проводится усреднение, равен

$$\mathcal{H} = -\mu H_M S_z + \frac{\beta}{2} S_z^2, \quad (4)$$

где $\mu H_M = J_0 \sigma + \mu H$. Это уравнение совместно с

$$\sigma = \langle S_z \rangle \quad (5)$$

самосогласованным образом в приближении молекулярного поля описывает линию фазовых переходов второго рода в ЛП ФМ с произвольным отношением β/J_0 . Проводя усреднение в (3), (5) на волновых функциях гамильтониана (4), преобразуем эту систему к виду

$$\left. \begin{aligned} \sum_{m=-S}^S \left[\frac{(S+m)(S-m+1)J_0}{\varepsilon_{m-1} - \varepsilon_m} - \frac{(S-m)(S+m+1)J_0}{\varepsilon_m - \varepsilon_{m+1}} - 2 \right] \exp(-\varepsilon_m/T) = 0, \\ \mu H = \mu H_M - J_0 \sum_{m=-S}^S m \exp(-\varepsilon_m/T) \Big/ \sum_{m=-S}^S \exp(-\varepsilon_m/T), \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где $\varepsilon_m = -m\mu H_M + \frac{\beta}{2} m^2$ и предполагается $\varepsilon_m - \varepsilon_{m+1} \neq 0$. Система уравнений (6) позволяет численно построить фазовую диаграмму ЛП ФМ для произвольной величины S .

На рис. 1, 2 изображены результаты такого расчета для $S=1$ и $S=3/2$ соответственно при различных соотношениях между β и J_0 . Представленные на рисунках кривые разделяют ПФ (над кривой) и УФ (под кривой). Обратим внимание на то, что для $S=3/2$ с ростом анизотропии область УФ перестает быть односвязной (см. рис. 2). Как будет показано ниже, это свойство является общим для таких систем с $S > 1$.

Общее поведение фазовой диаграммы для произвольной величины можно получить, проанализировав систему (6) при $T=0$. В этом случае из (6) получим следующие значения магнитного поля, которые характеризуют фазовую кривую,

$$\mu H_n^\pm = \left(\beta - \frac{J_0}{2} \right) (S - n) \pm J_0 \left\{ \frac{\beta}{2J_0} \left[\frac{\beta}{2J_0} - (2S - n)n - S \right] + \left(\frac{S - n}{2} \right)^2 \right\}^{1/2},$$

где целое число n принимает значения в пределах $0 \leq n \leq S$ для целых S и $0 \leq n \leq S - 1/2$ для полуцелых S . При $n=0$ смысл имеет только поле $\mu H_0 = \beta(S - 1/2)$, выше которого расположена лишь ПФ. Для целых S и $n=S$ имеет смысл только поле $\mu H_S^\pm = \sqrt{\beta/2} [\beta/2 - S(S+1)J_0]$, ниже которого расположена ПФ. Отметим, что это поле существует, когда $\beta \geq 2S(S+1)J_0$. Последнее неравенство является критерием Мориа (магнитное упорядочение отсутствует даже при $T=0$) для таких систем с произвольным целочисленным S . При других значениях n и произвольном S μH_n^\pm существуют, если $\beta \geq \beta_n$, где

$$\beta_n = J_0 \{ (2S - n)n + S + \sqrt{[(2S - n)n + S]^2 - (S - n)^2} \}.$$

При выполнении этого условия в области полей $H_{n-1}^- > H > H_n^+$ существует УФ, а в $H_n^+ > H > H_n^-$ ПФ. Для $\beta = \beta_n$ имеем $H_n^+ = H_n^-$, а при меньших β в этом поле происходит «отрыв» фазовой кривой от оси полей (см. рис. 2). Смысл полей H_n^\pm ясен из рис. 1, 2, где они для $\beta/J_0 = 5$ и $\beta/J_0 = 10$ соответственно обозначены через $h_n^\pm = \mu H_n^\pm / J_0$. Необходимо отметить, что для полуцелого спина при любой величине β к началу $H - T$ координат примыкает область УФ, чего нет при целых S и $\beta > 2S(S+1)J_0$.

Авторы благодарят А. И. Звягина за полезные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

- [1] Барьяхтар В. Г., Витебский И. М., Галкин А. А. и др. ЖЭТФ, 1983, т. 84; Friedberg S. A., Karnes M., Meier P. L. Proc. LT14, Otaniemi, Finland, 1975, p. 224; Carlin R. L., Van Duynvelt A. J. Accounts. Chem. Res., 1980, vol. 13, p. 231.
[2] Morija T. Phys. Rev., 1960, vol. 117, p. 635.

- [3] Tsuneto T., Murao T. Physica, 1971, vol. 51, p. 185.
 [4] Myers B. E., Polgar L. G., Friedberg S. A. Phys. Rev., 1972, vol. 6, p. 3488; Bos W. G., Klassen T. O., Poulis N. J., Carlin R. L., J. Magn. and Magn. Materials, 1980, vol. 15—18, Part I, p. 464.
 [5] Розенфельд Е. В. Письма ЖЭТФ, 1976, т. 24, с. 60.

Физико-технический институт
 низких температур АН УССР
 Харьков

Поступило в Редакцию
 10 января 1984 г.

УДК 539.21

Физика твердого тела, том 26, в. 4, 1984
 Solid State Physics, vol. 26, № 4, 1984

МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ АКСИАЛЬНО КАНАЛИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ НА ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЯХ И ЭЛЕКТРОНАХ

М. А. Иванов, Л. Б. Квашина

Теория осевого каналирования в рамках классической теории рассеяния была развита в ряде работ (см., например, [1-3]). Однако коэффициенты кинетического уравнения, полученного в этих работах, вводились феноменологически, поэтому в настоящей работе предлагается микроскопический вывод кинетического уравнения, описывающего аксиальное каналирование. Такой подход позволяет в каждом отдельном акте рассеяния налетающей частицы на атоме в кристалле последовательно разделить регулярную (направленную от центра) часть рассеяния, которая формирует поперечный потенциал цепочки $U(r)$ и флуктуации, ответственные, в частности, за деканалирование. Последние процессы определяются как прямым выбиванием частиц из канала, так и диффузией частиц внутри канала.

Считая, что в поперечной плоскости установилось статистическое равновесие, получено (в пренебрежении неупругими потерями энергии) уравнение детального баланса, связывающее плотности частиц $n(r, \theta, z)$ в двух поперечных плоскостях, отстоящих друг от друга на постоянную решетки d

$$n(r, \theta, z + d) = \iiint n(r', \theta', z) w(\rho) \delta\left(r' - r + d\left[\theta - \frac{1}{2}\varphi\left(\left|r - \frac{1}{2}d\theta - \rho\right|\right)\right]\right) \times \\ \times \delta\left(\theta' - \theta - \varphi\left(\left|r - \frac{1}{2}d\theta - \rho\right|\right)\right) d\rho dr' d\theta'. \quad (1)$$

Здесь r, r' — координаты налетающей частицы в поперечной плоскости; θ, θ' — углы, описывающие направление движения частицы в канале; $\varphi(|R|)$ — угол, полученный при рассеянии на атоме частицы с прицельным параметром R ; $w(\rho)$ — поперечная функция распределения рассеивающих атомов, которую в дальнейшем будем считать гауссовской.

Поскольку приращение угла в каждом отдельном акте рассеяния мало, в уравнении детального баланса (1) может быть проведено разложение по этому приращению. Кроме того, будем считать, что на достаточно больших глубинах z функция $n(r, \theta, z)$ зависит только от поперечной энергии $E_{\perp} = E\theta^2 + U(r)$ и z . В результате приходим к дифференциальному уравнению второго порядка в частных производных (типа уравнения Фоккера—Планка)

$$\frac{\partial F(E_{\perp}, z)}{\partial z} = A_0(E_{\perp}) F(E_{\perp}, z) + A_1(E_{\perp}) \frac{\partial F(E_{\perp}, z)}{\partial E_{\perp}} + \\ + g_0^{-1}(E_{\perp}) \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left(D(E_{\perp}) g_0(E_{\perp}) \frac{\partial (F(E_{\perp}, z)/g_0(E_{\perp}))}{\partial E_{\perp}} \right), \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} F(E_{\perp}, z) &= g_0(E_{\perp}) n(E_{\perp}, z) = \iint n(r, \theta, z) \delta(E_{\perp} - U(r) - E\theta^2) dr d\theta, \\ g_0(E_{\perp}) &= \iint \delta(E_{\perp} - U(r) - E\theta^2) dr d\theta = \frac{\pi S(E_{\perp})}{E}. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$