Письма в ЖЭТФ, том 21, вып. 6, стр. 360 – 364. *20 марта 1975 г.*

ПЕРЕХОД ПЕРВОГО РОДА В MnO И РЕНОРМАЛИЗАЦИОННАЯ ГРУППА ("СКЕЙЛИНГ")

С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский

Показано, что флуктуации вблизи точки фазового перехода в MnO, CoO, NiO и т. д. превращают возможный переход второго рода в переход первого рода. Вычисления сделаны в рамках ϵ-разложения Вилсона с учетом реальной кубической симметрии кристалла.

Недавно [1] было экспериментально показано, что антиферромагнитный переход в MnO является переходом первого рода. Мы покажем ниже, что учет флуктуаций приводит к тому, что в MnO, CoO, FeO, NiO и т. д. переход данного типа не может быть фазовым переходом второго рода ни при каких значениях, входящих в теорию постоянных. Хотя вычисления проделаны нами лишь в рамках ϵ-разложения Вилсона, т. е. фактически в гипотетическом четырехмерном пространстве, можно надеяться, что с переходом к трехмерному пространству структура ренормализационной группы не изменится и качественный вывод о характере перехода останется в силе.

Антиферромагнитный переход в MnO и изоморфных с ним CoO, FeO, NiO давно известен. Эти окислы имеют кубическую гранецентрированную решетку с ионами переходных металлов в узлах и центрах граней. При переходе возникает антиферромагнитная структура с двумя подрешетками: спины одинаковы в плоскостях типа (111), перпендикулярных пространственным диагоналям (111) куба, а знаки их чередуются при переходе от одной плоскости к соседней. С точки зрения теории Ландау (см., например, [2]) структуры такого типа входят в двенадцатимерное представление группы O_h^5, задаваемое четырьмя "векторами" $\mathbf{s}_1$, $\mathbf{s}_2$, $\mathbf{s}_3$, $\mathbf{s}_4$. При преобразованиях симметрии из группы O_h^5, в том числе и при трансляциях, "векторы" $\mathbf{s}_i$ преобразуются как[1])

$$\mathbf{s}_1 \sim \mathbf{s}_0 \cos\pi(x+y+z), \qquad \mathbf{s}_2 \sim \mathbf{s}_0 \cos\pi(-x+y+z),$$
$$\mathbf{s}_3 \sim \mathbf{s}_0 \cos\pi(x-y+z), \qquad \mathbf{s}_4 \sim \mathbf{s}_0 \cos\pi(x+y-z). \qquad (1)$$

Двухподрешеточная структура, наблюдавшаяся в MnO, FeO, NiO, CoO, возникает, когда отличен от нуля лишь один из "векторов" $\mathbf{s}_i$. Одна-

[1]) Формулы (1) следует понимать (ср.[2]) так, что аргументы косинусов преобразуются в соответствии с преобразованиями координат (ребро куба равно единице), а S_0 (осуществляющий так называемое "малое" представление) преобразуется лишь при поворотах как аксиальный вектор.

ко в принципе возможны и более сложные структуры, когда отличны от нуля все четыре "вектора".

Представление (1) приводимо. Неприводимыми являются четырех- и шестимерные представления. В первое входят проекции s_{11}, s_{22}, s_{33}, s_{44} векторов $\mathbf{s}_i$ на соответствующие диагонали куба ([111], [$\bar{1}$11] и т. д.), а в шестимерное – остальные проекции. Ответ на вопрос о том, определяется переход приводимым двенадцатимерным представлением (1) или одним из неприводимых, зависит от соотношения между обменными силами и силами магнитной анизотропии. При очень слабой анизотропии существенны будут лишь обменные силы и переход будет определяться всем представлением (1), которое является "неприводимым" относительно поворотов всех спинов на произвольный угол в неподвижной решетке. При сравнительно большой анизотропии переход будет определяться уже одним из неприводимых представлений. Мы рассмотрим здесь наиболее простой математический случай, когда переход описывается четырехмерным представлением.

В нашем случае наиболее общее допускаемое симметрией выражение для энергии в теории Ландау [2] имеет вид[2)] ($\eta_i \equiv s_{ii}$)

$$\Phi = \frac{1}{2}\tau\,(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 + \eta_4^2) + \frac{1}{24}\,\gamma_1(\eta_1^4 + \eta_2^4 + \eta_3^4 + \eta_4^4) +$$

$$+ \frac{1}{4}\gamma_2(\eta_1^2\eta_2^2 + \eta_1^2\eta_3^2 + \eta_1^2\eta_4^2 + \eta_2^2\eta_3^2 + \eta_2^2\eta_4^2 + \eta_3^2\eta_4^2) + \gamma_3\eta_1\eta_2\eta_3\eta_4. \quad (2)$$

Флуктуации делают выражение (2) непригодным вблизи непосредственной окрестности перехода; оно справедливо лишь в так называемой области молекулярного поля при достаточной малости констант γ. Вблизи перехода ситуация описывается ренормализационной группой ("скейлингом"). Структура ренормализационной группы (РГ) очень сложна и ее связь с (2) фактически не может быть установлена. Связь РГ с энергией Ландау делается простой и явной лишь в так называемом ϵ-разложении Вилсона [4], когда мы работаем в фиктивном пространстве размерности $4 - \epsilon$ при $\epsilon \to 0$ и экстраполируем результаты к $\epsilon = 1$. В этом случае уравнения РГ превращаются в уравнения Гелл-Манна и Лоу [5] обычной теории поля. Более того, в этом случае удается явно вычислить и уравнение состояния (т. е. Φ как функцию от параметров порядка η) [6, 7].

В линейном приближении по ϵ для энергии сохранится выражение (2), с той только разницей, что заряды γ_i в (2) сами начинают зависеть от τ и η_i и заменяются на инвариантные заряды $\gamma_i(\xi)$, где

$$\xi \sim \frac{1}{\epsilon}\left[\left(\frac{\Lambda}{max\{\tau,\ \eta^2\}}\right)^{\epsilon} - 1\right], \quad (3)$$

[2)] Энергия такого вида рассматривалась Лифшицем [3] в его работе о переходах в упорядочивающихся сплавах, поэтому наши результаты пригодны и для этой задачи.

где Λ – параметр обрезания. С достаточной точностью в (3) можно положить $\epsilon = 0$, тогда для ξ имеем

$$\xi \sim \ln \frac{\Lambda}{max\,(\tau,\ \eta^2)} \qquad (3')$$

и формула (2) обобщает результат Ларкина и Хмельницкого [8], полученный для простого случая[3)] $\gamma_1 = 3\gamma_2$, $\gamma_3 = 0$.

Инвариантные заряды $\gamma_1(\xi)$ удовлетворяют уравнениям РГ, которые в нашем случае имеют вид (ср. [8]):

$$-\frac{d\gamma_1}{d\xi} = 3\gamma_1^2 + 9\gamma_2^2, \quad -\frac{d\gamma_3}{d\xi} = 12\gamma_2\gamma_3, \quad -\frac{d\gamma_2}{d\xi} = 12\gamma_1\gamma_2 + 6\gamma_2^2 + 4\gamma_3^2. \qquad (4)$$

Переходам второго рода соответствуют стационарные точки уравнений РГ. Вблизи них $\gamma_i \sim 1/\xi$. В точке перехода ξ обращается в бесконечность ($\tau \to 0$), вдали от области перехода $\xi \to 0$ и мы переходим к "голым" зарядам γ_i (0) в (2).

Однако Вилсон и Фишер [9], рассматривая простой случай двух полей ($\eta_3 = \eta_4 \equiv 0$ в (2)), показали, что при определенном соотношении между затравочными зарядами $\gamma_1(0)$ и $\gamma_2(0)$ решение с ростом $\xi \to \infty$ не будет входить ни в одну из двух возможных в этом случае стационарных точек, а напротив при конечном $\xi = \xi_0$ будут достигнуты такие значения $\gamma_1(\xi_0)$ и $\gamma_2(\xi_0)$, при которых члены четвертого порядка потеряют положительную определенность. Ясно, что в этом случае произойдет переход первого рода в точке $\tau_0 \sim \eta_0^2$ (с логарифмической точностью), определяемой формулами (3) с $\xi = \xi_0$ Расчет свойств фазового перехода первого рода в случае двух полей был недавно проделан Люксютовым и Покровским [10].

Система (4) имеет 4 стационарные точки:

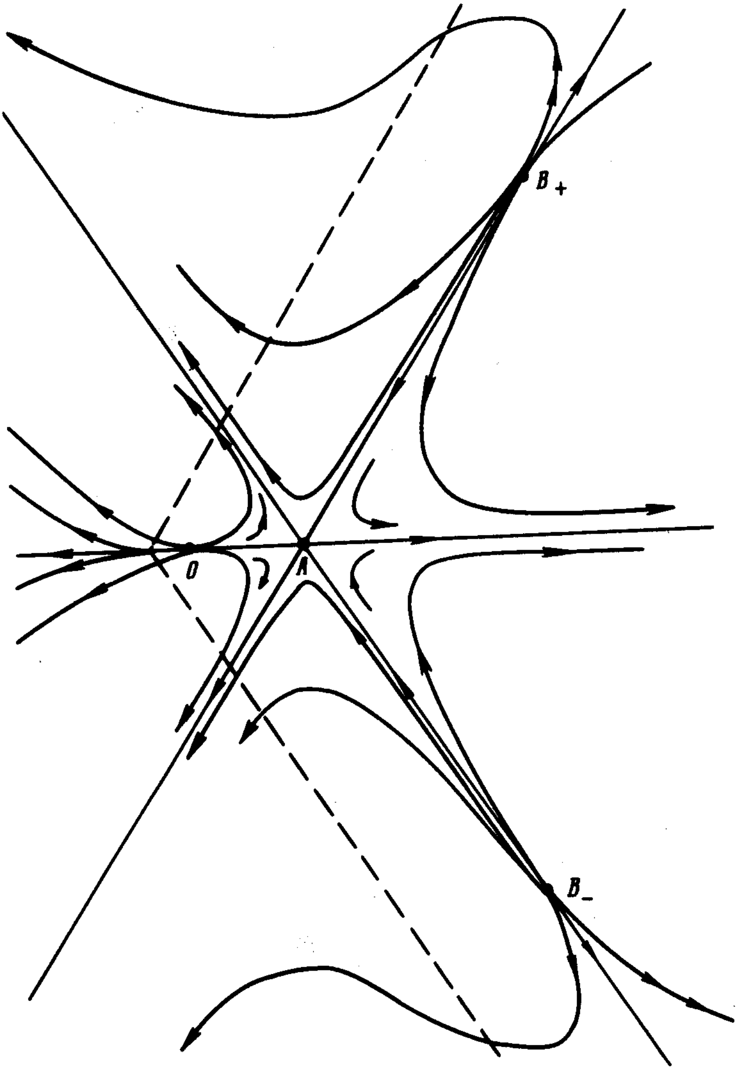
$$O : \gamma_1 = 1/3\xi, \quad \gamma_2 = \gamma_3 = 0,$$
$$A : \gamma_1 = 1/4\xi, \quad \gamma_2 = 1/12\xi, \quad \gamma_3 = 0,$$
$$B_\pm : \gamma_1 = \gamma_2 = \pm\gamma_3 = 1/12\xi.$$

На рисунке сплошными линиями изображены интегральные кривые системы в переменных $u = \gamma_2/\gamma_1$, $v = \gamma_3/\gamma_1$. Координаты соответствующих особых точек есть $O(0,\ 0)$, $A(1/3,\ 0)$, $B_\pm(1,\ \pm 1)$.

Характерной чертой уравнений РГ (4) является то, что заряд γ_1, может только убывать с ростом ξ. Ясно с другой стороны, что при $\gamma_1 < 0$ члены четвертого порядка теряют положительную определенность, поэ-

[3)] Величина τ в (2) также заменяется на $\tau\mathcal{T}(\xi)$, где функция $\mathcal{T}$ сама находится по инвариантным зарядам $\gamma(\xi)$ (ср. [8]), однако для определения линии фазовых переходов с логарифмической точностью эта замена несущественна.

тому смысл рассматривать только положительный затравочный заряд $\gamma_1(0)$ и оставаться в области $0 < \gamma_1(\xi) < \gamma_1(0)$. Направление движения по траекториям с ростом показано стрелками. Видно, что переход второго невозможен никогда, так как точка A вообще неустойчива, а из устойчивых точек O, $B_\pm$ траектории всегда выходят.



Остается описать область положительной определенности членов четвертого порядка в (12). Она находится справа внутри угла образуемого пересечением прерывистых линий (их уравнения $1 + 9u - 6|v| = 0$). Переход первого рода происходит либо в точках пересечения траектории с прерывистой линией, либо в результате ухода траекторий направо на бесконечность (это соответствует обращению γ_1 в нуль). Учитывая еще, что прерывистые линии параллельны сепаратрисам $AB_\pm$ (их уравнения $-1 + 3u \pm 2v = 0$) можно сделать следующие окончательные выводы:

1)Из области лежащей справа внутри угла B_+AB_- образованного сепаратрисами происходит переход первого рода, когда инвариантный заряд $\gamma_1(\xi)$ обратится в нуль в некоторой точке ξ_0 В точке перехода возникнет состояние, в котором отличен от нуля только один из четырех параметров η_i, т. е. как раз состояние, наблюдаемое на опыте.

2)Из области лежащей в шевроне, образованном прерывистыми линиями и сепаратрисами B_+AB_-,т. е. из области затравочных констант происходит переход первого рода, когда при конечном $\xi = \xi_0$ обращается в нуль комбинация инвариантных зарядов $\gamma_1(\xi) + 9\gamma_2(\xi) - 6|\gamma_3(\xi)|$. В точке перехода образуется сложная магнитная структура, в которой все четыре параметра η_i равны по абсолютной величине. Такая структура, по-видимому, еще никогда не наблюдалась.

Величины температуры перехода τ_0 и величина параметра порядка η_0 с логарифмической точностью определяются формулой (3), т. е. $\eta_0^2 \sim \sim \tau_0 \sim \Lambda e^{-\xi_0}$. Нахождение ξ_0 требует численного интегрирования системы (4) и будет описано в другом месте.

В случае малой анизотропии, когда существенны только обменные силы и в задачу входят все 12 компонент "векторов" $\mathbf{s}_i$ и выражение для энергии и уравнения РГ существенно сложнее. Ситуация будет описана в другом месте. Здесь лишь отметим, что и там возможны лишь переходы первого рода, поскольку как и в рассмотренном здесь случае траектории выходят с ростом ξ из всех устойчивых стационарных точек РГ.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
3 февраля 1975 г

Литература

[1] D.Bloch, R.Maury, C.Vetter, W.B.Gelon. Phys. Lett., A49, 354, 1974.

[2] Л.Д.Ландау. Е.М.Лифшиц, Статистическая физика, глава XIV, М., 1964

[3] Е.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 11, 269, 1941.

[4] K.G.Wilson. Phys. Rev. Lett., 28, 548, 1972.

[5] M.Gell-Mann, F.E.Low. Phys. Rev., 95, 1300, 1954; см. также Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков. Введение в теорию квантованных полей", М., 1957.

[6] Г.М.Авдеева, А.А.Мигдал. Письма в ЖЭТФ, 16, 253, 1972; Г.М.Авдеева. ЖЭТФ, 64, 741, 1973.

[7] E.Brèzin. D.J.Wallace, K.G.Wilson. Phys. Rev. Lett., 29, 591, 1972; Phys. Rev., B7, 232, 1973.

[8] А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий. ЖЭТФ, 56, 2087, 1969.

[9] M.K.G.Wilson, M.E.Fisher. Phys. Rev. Lett., 28, 240, 1972.

[10] И.Ф.Люксютов, В.Л.Покровский. Письма в ЖЭТФ, 21, 22. 1975.