

**ІНСТИТУТ МАГНЕТИЗМУ  
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ ТА  
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**

**Лаванов Геннадій Юрійович**

УДК 536.42: 538.94:537.638

**ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ ОПИС ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ В  
СИЛЬНО НЕГЕЙЗЕНБЕРГІВСЬКИХ МАГНЕТИКАХ З  
ОДНОІОННОЮ АНІЗОТРОПІЄЮ**

01.04.11 – «Магнетизм»

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико – математичних наук

Київ – 2020

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Національному Авіаційному Університеті.

**Науковий керівник:** доктор фізико – математичних наук, професор  
**КАЛИТА Віктор Михайлович,**  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря  
Сікорського», професор кафедри загальної та  
теоретичної фізики

**Офіційні опоненти:** доктор фізико - математичних наук  
**ЗОЛОТАРІЮК Ярослав Олександрович,**  
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова  
НАН України, провідний науковий співробітник  
відділу теорії нелінійних процесів в конденсованих  
середовищах

доктор фізико – математичних наук,  
**РЕШЕТНЯК Сергій Олександрович,**  
Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря  
Сікорського», професор кафедри загальної та  
експериментальної фізики

Захист відбудеться “9” квітня 2020р. о 14<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.248.01 при Інституті магнетизму НАН України та МОН України за адресою: м. Київ, бульвар Вернадського, 36-б, конференц-зал Інституту магнетизму НАН України та МОН України.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України за адресою: 03142, м. Київ, бульвар Вернадського, 36.

Автореферат розісланий “\_\_” березня 2020р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 26.248.01  
кандидат фізико – математичних наук

Л. Є Козлова

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Термодинамічний опис магнетиків, в яких відбуваються фазові перетворення, є актуальною задачею. Зокрема визиває інтерес вивчення поведінки магнетиків з конкуруючими взаємодіями та магнетиків з негейзенбергівським типом взаємодії. Цікавість цих магнетиків пояснюються достатньо незвичною їх поведінкою при фазових перетвореннях.

Складний характер обмінної взаємодії чи коли вона може бути негейзенбергівською призводить у феро- чи антиферомагнетиках до нетривіальних особливостей їх поведінки при їх впорядкуванні в критичних точках. Наявність досить складного обміну у магнітних системах з одноіонним типом магнітної анізотропії може привести, як відомо, до появи магнітної квадрупольної фази, до появи неколінеарних станів в антиферомагнетиках, індукованих магнітним полем у ван - Флеківських парамагнетиках, призводити до зміни роду та типу фазового переходу та, наприклад, до появи магнітного ізоструктурного фазового переходу. У всіх перелічених випадках поведінка параметра порядку від зовнішніх чинників (таких як зовнішнє магнітне поле  $H$ , температура  $T$ ) виявляється достатньо складною. Викликають інтерес систем з конкуренцією взаємодій, коли параметри білінійного обміну та параметрами, які описують негейзенбергівські внески у гамільтоніан, виявляються співрозмірними за величиною. Цій проблемі присвячена велика кількість статей теоретичного та експериментального характеру. Однак дотепер проблема побудови фазових  $H - T$  діаграм для таких систем далека від закінчення. Причиною є не тільки використання феноменологічної теорії фазових переходів Ландау, яка може лише якісно відобразити поведінку складних систем, що накладає обмеження на її використання. Теорія Ландау, наприклад, не враховує, що сильно негейзенбергівський магнетик з великою одноіонною анізотропією потребує врахування термодинамічного середнього від квадрата оператора проекції спіну, бо в теорії Ландау обмежуються розглядом тільки середніх від лінійних комбінацій оператора спіну.

Спираючись на результати термодинамічного аналізу магнетиків з негейзенбергівським типом взаємодії, можна описати їх калоричну поведінку, проблема якої залишається достатньо актуальною на сьогоднішній день. Актуальність вивчення магнітокалоричного ефекту викликана, насамперед, можливістю створення альтернативи нинішнім холодильним машинам. Розробка магнітних рефрижераторів на основі магнітокалоричного ефекту дозволить в майбутньому вирішити важливі проблеми енергозбереження та екології.

**Мета дослідження.** Мета дисертаційної роботи полягає у теоретичному описі термодинаміки фазових переходів в сильно негейзенбергівських магнетиках з одноіонною анізотропією. Відповідно до основної мети були поставлені й розв'язані наступні задачі:

1. Встановлення особливостей впорядкування у ізінгівському антиферромагнетикі з одноіонною анізотропією типу “ легка площина ” та побудова фазової  $D - T$  діаграми станів.

2. Дослідження поведінки магнітокалоричного ефекту для магнітних фазових переходів індукованих магнітним полем у ізінгівському антиферромагнетикі.

3. Дослідження індукованих магнітним полем магнітних квантових переходів та магнітокалоричного ефекту у ван – Флеківському магнетикі, побудова фазової  $H - T$  діаграми станів.

4. Описати вплив магнітного поля на фазовий перехід першого роду у негейзенбергівському ізотропному ферромагнетикі, побудова фазової  $H - T$  діаграми. Розрахунок впливу магнітного поля на стрибок ентропії при фазовому переході першого роду між парамагнітним та ферромагнітним станами.

5. Дослідження послідовності двох магнітних квантових фазових переходів у ізінгівському антиферромагнетикі з легкоплощиною константою одноіонної анізотропії зі спіном  $S = 1$ , індукованих магнітним полем та побудова фазової  $H - T$  діаграми станів.

**Об’єктом дослідження** є анізотропні та ізотропні негейзенбергівські магнетики.

**Предметом дослідження** є фазові стани магнетиків з урахуванням різних типів взаємодій в них та фазові діаграми.

**Методи дослідження.** Для дисертаційного дослідження використовувалася теорія фазових переходів, теорія Ландау фазових переходів, теорія ізоструктурного фазового переходу, теорія квантових фазових переходів. Для розрахунків модельних систем використовувалися чисельні методи. Отримані результати порівнювалися з експериментальними даними, які були одержані багатьма авторами і наведені у науковій літературі.

### **Наукова новизна отриманих результатів.**

- Показано, що магнітне впорядкування в ізінгівському антиферромагнетикі з легкоплощиною одноіонною анізотропією може відбуватися завдяки фазовим переходам першого роду типу порядок-безлад, або типу зміщення: порядок-порядок.

- Отримано, що ізоструктурний магнітний фазовий перехід індукований магнітним полем у ізінгівському антиферромагнетикі супроводжується зміною знаку стрибка величини ентропії.

- Отримано, що у ван - Флеківському ізінгівському парамагнетикі магнітне поле при  $T \neq 0$  індукує фазовий перехід першого роду типу зміщення з синглетного до ферромагнітного стану, який супроводжується значним магнітокалоричним ефектом.

- Побудовано фазову  $H-T$  діаграму негейзенбергівського ізотропного ферромагнетика. Встановлений вплив магнітного поля на величину стрибка

ентропії при фазовому переході першого роду між парамагнітним та феромагнітним станами.

- Для ізінгівського антиферомагнетика з легкоплощинною анізотропією побудовано фазову Н-Т діаграму з двома фазовими переходами першого роду: з антиферомагнітної фази до проміжного стану, в якому спіни однієї з підграток перебувають у ван - Флеківському парамагнітному стані, та фазовий перехід першого роду з проміжного стану до феромагнітного стану.

**Практичне значення отриманих результатів.** Застосування термодинамічного підходу для описання фазових переходів у магнетиках з сильною негейзенберзькою взаємодією дозволяє більш детально виявити причини та механізми виникнення фазових переходів у магнетиках. Це дає змогу краще зрозуміти спряжене питання таке як магнітокалоричний ефект, актуальність якого розглядалося вище.

Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними даними, які були отримані іншими авторами, та можуть бути використані при проектуванні та створенні магнітних матеріалів заздалегідь визначеними властивостями.

Окрім того, отримані результати можуть бути використані у навчальному процесі при підготовці спеціальних курсів по магнетизму, фізики твердого тіла ті інших.

**Особистий внесок автора.** У дисертації викладено результати досліджень, виконаних здобувачем у співпраці з іншими співавторами.

У **роботах** [1\*, 2\*, 4\*, 5\*] автор брав участь у обговоренні та постановці задач, виконував аналітичні та чисельні розрахунки та виконував побудови фазових діаграм.

У **роботі** [3\*] автор брав участь у обговоренні та постановці задач, виконував аналітичні та чисельні розрахунки для випадку  $T \neq 0$  та виконував побудови фазових діаграм. Аналітичні розрахунки для випадку  $T = 0$  були проведені науковим керівником проф. Калитою В.М. (Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»).

**Апробація результатів дисертації.** Результати, які описані в дисертації доповідались на міжнародних конференціях:

- Г.Ю.Лаванов, В.М. Калита, В.М. Локтев, Сучасні проблеми фізики конденсованого стану. Збірник праць IV – ї міжнародної конференції 07-10 жовтня 2015 р., м. Київ.: матер. конф. . – К., 2015. – с. 22–23.

- Г. Ю. Лаванов, В.М. Калита, В.М. Локтев, І.М. Іванова, Фізичні явища в твердих тілах. Матеріали XII Міжнародної конференції 01-04 грудня 2015 р. м. Харків.: матер. конф. . – Х., 2015. – с. 60.

- Г.Ю. Лаванов, В.М. Калита, В.М. Локтев, Сучасні проблеми фізики конденсованого стану. Збірник праць V – ї міжнародної конференції 03-06 жовтня 2018 р., м. Київ.: матер. конф. . – К., 2018. – с. 80.

**Публікації.** Результати, які увійшли до дисертаційної роботи, були опубліковані у 5 статтях у провідних фахових наукових виданнях, та в 3 доповідях на наукових міжнародних конференціях.

**Структура та об'єм дисертації.** Дисертація складається зі вступу, 6 розділів, висновків, і списку використаних джерел посилань 203. Загальний обсяг 134 сторінки тексту та 53 рисунки.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У дисертації розглянуто вплив одноіонної, парної анізотропії та негейзенбергівського обміну на фазові переходи індуквані магнітним полем у всьому інтервалі температур, від нуля до критичної температури. Також розглядається вплив цих фазових переходів на магнітокалоричний ефект у таких магнетиках.

У **вступі** наводиться стислий огляд сучасного стану термодинаміки магнітних фазових переходів у магнетиках з сильною негейзенбергівською взаємодією, та явищ, які пов'язані з термодинамічними процесами у них. На підставі такого огляду робиться обґрунтування актуальності та важливості даного напрямку. Визначено об'єкт, предмет і основну мету досліджень, вказано наукову новизну та особистий внесок здобувача у зазначених роботах. Наведені відомості про публікації, апробацію результатів та обсяг дисертаційного дослідження.

У **першому** розділі проаналізовані літературні джерела для обґрунтування актуальності стану проблеми, яка існує на теперішній час [1,2]. Розглянуті основні експериментальні та теоретичні досягнення стосовно обраної теми. Окремими підпунктами розглядаються питання: квантових фазових переходів (QPT) [3-6], проблематика термодинамічного опису QPT, магнетиків з сильною одноіонною анізотропією, та магнетиків з негейзенбергівським типом взаємодії. Виходячи з огляду літературних джерел, зроблено висновок щодо актуальності та перспективності подальших досліджень магнетиків з одноіонною анізотропією та негейзенбергівським типом міжспінових взаємодій.

У **другому** розділі з використанням методів нерівноважної термодинаміки досліджується магнітне впорядкування двохпідґраткового ізінгівського антиферромагнетика з легкоплосинною одноіонною анізотропією (модель Блюма – Капеля [7,8]) гамільтоніан якого може бути записаний у вигляді:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} I_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} S_{\mathbf{n}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\beta}^z + D \sum_{\mathbf{n}_\alpha} (S_{\mathbf{n}_\alpha}^z)^2, \quad (1)$$

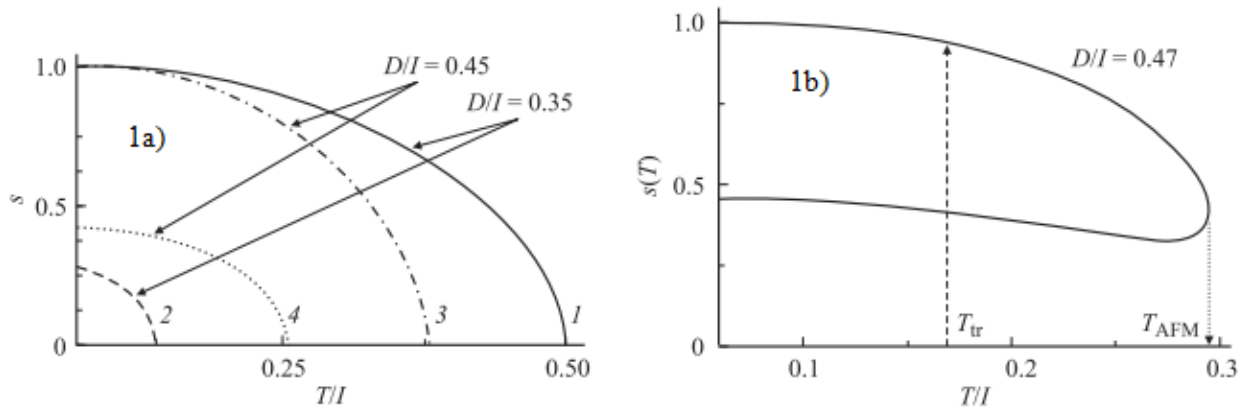
де перша сума відповідає ізінгівському обміну, а друга – одноіонній анізотропії,  $\alpha, \beta = 1, 2$  – номери підґраток (у (1)  $\alpha \neq \beta$ ), а  $n, m$  – нумерують комірки;  $S_{\mathbf{n}_\alpha}^z$  - Z – та проекція оператора спіну,  $I_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta}$  - константа міжіонного обміну ( $I_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} > 0$ ), константа одноіонної анізотропії  $D > 0$  –

легкоплосинного типу,  $z$  – координатна вісь, спрямована вздовж кристалографічної вісі. Розглядається випадок цілого спіну на вузлі  $S = \pm 1, 0$ .

Використовуючи наближення середнього поля та враховуючи еквівалентність підґраток для системи (1), записано вираз для вільної енергії:

$$F = -\frac{1}{2} I s^2 + DQ + T \left[ \frac{Q+s}{2} \ln \frac{Q+s}{2} + \frac{Q-s}{2} \ln \frac{Q-s}{2} + (1-Q) \ln(1-Q) \right], \quad (2)$$

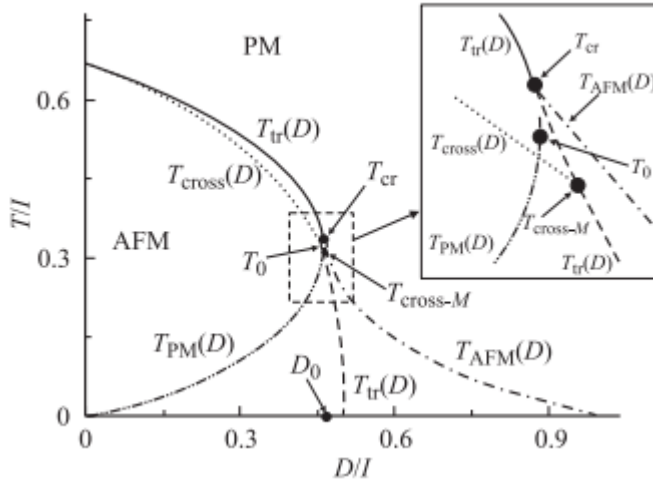
де величина  $Q$  – термодинамічне середнє квадрупольного спінового моменту,  $T$  – температура,  $I$  – константа обміну з урахуванням числа сусідів у іонів,  $s$  – модуль термодинамічного середнього для проекції спінів підґраток, які направлені взаємно протилежно, а  $Q$  однакові для підґраток. Мінімізуючи (2) по параметрам порядку системи, отримаємо рівняння самоузгодження. Для прикладу чисельні розв’язки рівнянь самоузгодження для довільного обраних значень параметрів одноіонної анізотропії  $D/I = 0.35, 0.45, 0.47$  наведені на рисунку 1(a,b).



**Рис. 1а, б.** Чисельні розв’язки  $s(T)$  для довільно обраних значень параметрів одноіонної анізотропії  $D/I = 0.35, 0.45, 0.47$  відповідно. На рисунку 1а) – лінії 1,3 – стійкого розв’язку, 2,4 – не стійкого розв’язку. На рисунку 1б) – точка  $T_{tr}$  – точка фазового переходу першого роду (ФП I) між антиферомагнітною (АФМ) та парамагнітною (ПМ) фазами.

Для випадку наведеного на рисунку 1а маємо неперервний фазовий перехід між АФМ та ПМ фазами. При збільшенні величини  $D/I$ , наприклад  $D/I=0.47$  (рисунок 1б), розв’язок рівняння самоузгодження має вигляд “ язика ” зі стрибком величини спіну в точці фазового переходу майже рівній максимально можливій. Точка фазного переходу першого роду між АФМ та ПМ станами на рисунку 1б позначена  $T_{tr}$ .

Таким чином, розв’язуючи рівняння самоузгодження для різних значень параметра  $D/I$ , знаходячи межі стійкості та з вільної енергії визначаючи для кожного розв’язку точку фазового переходу  $T_{tr}$  побудовано фазову  $D - T$  діаграму, яку наведено на рисунку 2. Фазова діаграма містить лінії та



**Рис. 2.** Фазова  $D - T$  діаграма ізінгівського антиферромагнетика з одноіонною анізотропією типу “легка площина”. На вставці показана частина фазової діаграми поблизу трикритичної точки.

позначення:  $T_{tr}(D)$  - лінія фазових переходів між ПМ та АФМ станами, яка позначена суцільною кривою для фазових переходів другого роду (ФП II) і пунктиром для ФП I,  $T_{cross}(D)$  - лінія кросовера іонних поляризованого та синглетного станів, яку позначено точками, лінії стійкості АФМ та ПМ фаз  $T_{AFM}(D)$  та  $T_{PM}(D)$ , що позначені штрих-пунктиром та подвійним штрих-пунктиром, відповідно. Для температур між  $T_{cross-M}$  та  $T_{cr}$  (трикритична температура) в точці фазового переходу (ФП) основний стан іона не змінюється, що відповідає фазовому переходу першого роду типу порядок-безлад. При температурах нижчих  $T_{cross-M}$  основний стан іона стає поляризованим і фазовий перехід першого роду відбувається як фазовий перехід типу зміщення, при якому величина середнього спіну підґратки змінюється майже на максимально можливу його величину. На вставці на рис. 2 показана більш детальніша поведінка фазової діаграми поблизу трикритичної точки.

У **третьому** розділі розглядається поведінка двохпідґраткового ізінгівського антиферромагнетика у зовнішньому магнітному полі (модель В.Г. Бар'яхтара [9]), гамільтоніан якого має вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n_\alpha m_\alpha} I_{n_\alpha m_\alpha} s_{n_\alpha}^z s_{m_\alpha}^z + \sum_{n_\alpha m_\beta} I_{n_\alpha m_\beta} s_{n_\alpha}^z s_{m_\beta}^z - \sum_{n_\alpha m_\beta} H (s_{n_\alpha}^z + s_{m_\beta}^z), \quad (3)$$

де  $\alpha, \beta = 1, 2$  які нумерують підґратки, а  $n$  та  $m$  – номери іонів, з проекціями спіну  $\pm 1$  (дворівнева система). Першою сумою позначено ФМ внутрішній підґратковий обмін, другою сумою позначено – міжпідґратковий обмін ( $\alpha \neq \beta$ ) АФМ, третій доданок – зейманівський внесок.

Вільна енергія (3) має вигляд:

$$F = -\frac{1}{2} I_1 (s_1^2 + s_2^2) + I_2 s_1 s_2 - H (s_1 + s_2) + T \sum_{\alpha} (p_{\alpha}^{+1} \ln p_{\alpha}^{+1} + p_{\alpha}^{-1} \ln p_{\alpha}^{-1}), \quad (4)$$

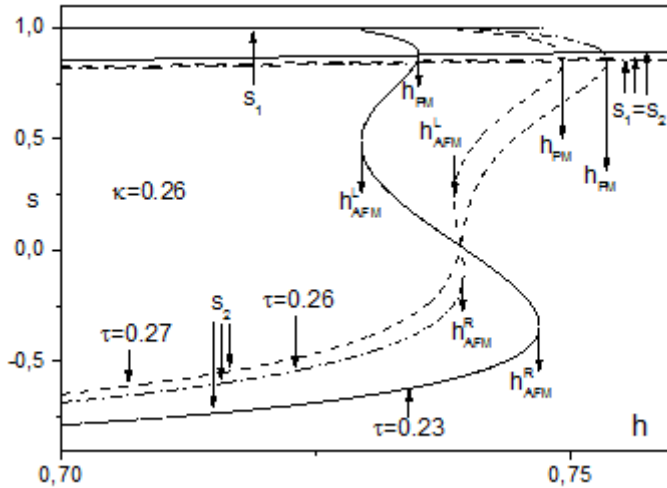
де  $T$  – температура,  $H$  – магнітне поле,  $s_1$  та  $s_2$  – проекції середніх значень проекцій спінів підґраток у власних системах відліку,  $p_{\alpha}$  – термодинамічні імовірності станів іона, які пов'язана з термодинамічними середніми значеннями спінів підґраток,  $I_1$  та  $I_2$  – параметри взаємодії, які визначаються через параметри (3).

Мінімізація (4) по параметрам порядку системи дає два нелінійні рівняння стану, чисельними розв'язками яких знайдено залежності параметру



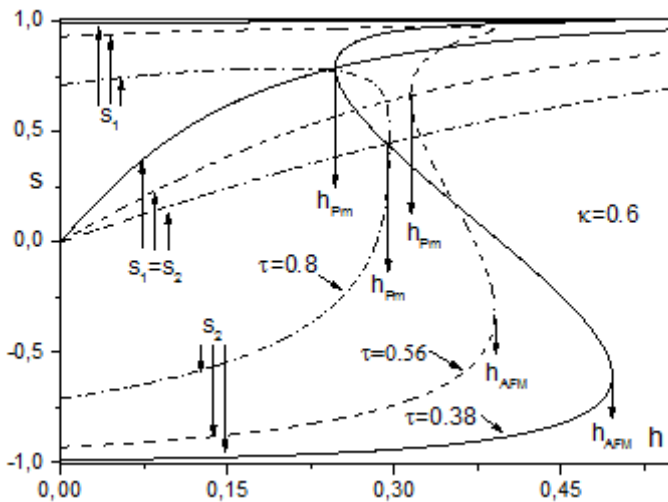
порядку (ПП) від  $T$  та нормованого поля,  $h=H/T_N$ , де  $T_N$  - температура Неєля. Розглядаються два випадки, коли параметр взаємодії у підґратки більший за міжпідґратковий, чи навпаки, які розрізняються значенням параметру  $\kappa = I_1/(I_1+I_2)$ .

Для прикладу, для  $\kappa = 0.26$ , коли міжпідґраткова взаємодія переважна, розв'язок рівняння станів для довільно обраних значень нормованих температур  $\tau = T/T_N = 0.23, 0.26, 0.27$  показано на рисунку 3. Для усіх розглянутих значень температур маємо два види розв'язків:  $s_1=s_2$  (що відповідає ПМ стану), та  $s_1 \neq s_2$  (що відповідає АФМ станам). З рисунку видно, що при високій температурі, точка де збігаються



**Рис. 3.** Польові залежності спінів підґраток при значенні параметру  $\kappa = I_1/(I_1+I_2) = 0.26$  та довільно обраних значень температур  $\tau = T/T_N = 0.23, 0.26, 0.27$ .

розв'язки  $s_1=s_2$  з  $s_1 \neq s_2$ , відповідає фазовому переходу другого роду між АФМ та ПМ станами. При зменшенні температури польова



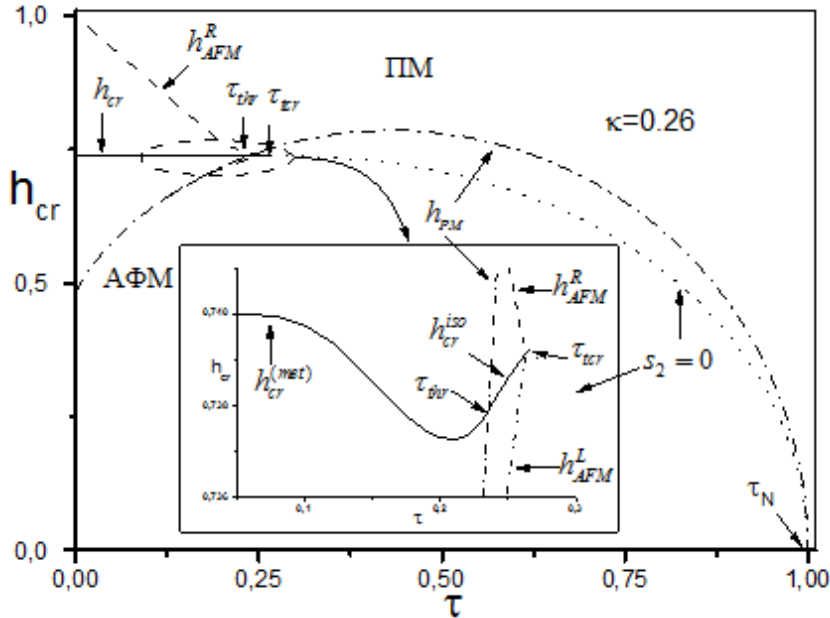
**Рис. 4.** Польові залежності спінів підґраток при значенні параметру  $\kappa = I_1/(I_1+I_2) = 0.6$  та довільно обраних значень температур  $\tau = T/T_N = 0.38, 0.56, 0.8$ .

залежність для спінів  $s_1$  та  $s_2$  має S подібний тип, а границі стійкості знайдемо з визначника

Гессе [10]. Поведінка вільної енергії показує, що при  $\tau = 0.26$  та  $\tau = 0.23$  S подібному ходу відповідає фазовий перехід першого роду між двома однієї симетрії АФМ станами, який у феноменологічній теорії називають – ізоструктурним фазовим переходом [11].

При більших значеннях параметра  $\kappa$ , наприклад, при  $\kappa = I_1/(I_1+I_2) = 0.6$  спостерігається звичайний метамагнітний фазовий перехід між АФМ та ПМ станами. Розв'язки рівняння стану для цього випадку при температурах  $\tau = T/T_N = 0.38$  (другий ряд),  $0.56, 0.8$  (перший ряд), які наведені на рисунку 4.

Фазова Н – Т діаграма для випадку  $\kappa = 0.26$  наведена на рисунку 5, яка збігається своїм виглядом з отриманою В. Г. Бар'яхтаром зі співавторами [9]. На діаграмі позначені *лінії*:  $h_{cr}^{met}$  позначає лінію низькотемпературного

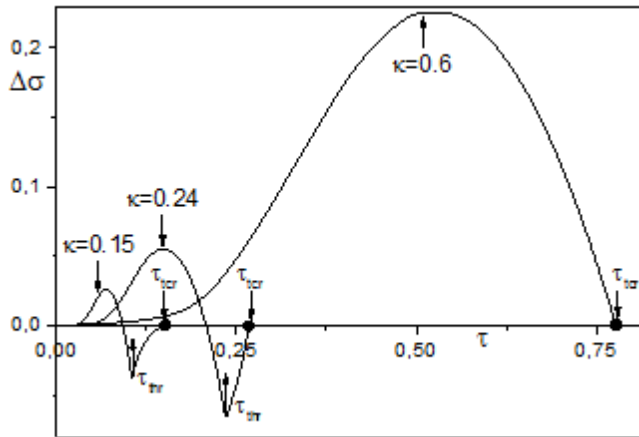


**Рис. 5.** Фазова діаграма ізінгівського АФМ для значення параметра  $\kappa = 0.26$ . Позначено:  $h_{cr}^{met}$  лінія метамагнітного ФП,  $h_{cr}^{iso}$  лінія ізоструктурного ФП, лінії границь стійкості  $h_{AFM}^L$  та  $h_{AFM}^R$ , лінія коли  $s_2$  – дорівнює нулю

метамагнітного ФП першого роду, яка переходить у лінію ізоструктурного ФП -  $h_{cr}^{iso}$  область існування якої обмежена температурами  $\tau_{thr}$  та  $\tau_{tc}$ ,  $h_{AFM}^L$  та  $h_{AFM}^R$  – відповідно ліва та права границя стійкості АФМ стану. Також на діаграмі показана лінія при якій  $s_2$  – дорівнює нулю, що відповідає випадку, коли друга підгратка повністю розмагнічена і ентропія за цієї умови набуває мінімального значення. Позначені *точки*:  $\tau_{thr}$  – потрійна точка для трьох фаз ПМ та двох АФМ фаз,  $\tau_{tc}$  – трикритична точка, де закінчується ізоструктурний ФП I, та починається ФП II. Важливим виявився уточнення ходу критичного поля  $h_{cr}$ , який більш детально показано на вставці на рис. 5. Видно, що ізоструктурний фазовий перехід існує лише у малому проміжку температур, між потрійною  $\tau_{thr}$  та трикритичною  $\tau_{tc}$  точками, де величина критичного поля зростає з температурою. Також з графіка видно, що на лінії ФП першого роду є спадаюча ділянка та мінімум.

Для  $\kappa = 0.6$  критичне поле  $h_{cr}$  спадає з ростом температури до трикритичної точки.

На рис. 6 показано графіки температурної залежності величини зміни ентропії в критичному полі  $h_{cr}$  для різних значень  $\kappa$ . При малих значеннях параметра  $\kappa$  ( $\kappa = 0.15, 0.26$ ), коли має місце ізоструктурний фазовий перехід, спостерігається знакозмінна залежність для величини стрибка ентропії при фазовому переході. При збільшенні значення параметру  $\kappa$  ( $\kappa = 0.6$ ) зміни знаку стрибка ентропії не відбувається, але сама величина стрибка стає значно більшою порівняно з малим  $\kappa$ .



**Рис. 6.** Величини стрибків ентропії системи для різних значень параметрів  $\kappa$  у точках фазового переході першого роду.

Таким чином, отримано, що при метамагнітному ФП першого роду приріст ентропії завжди додатній і його

величина у декілька разів більша порівняно з приростом ентропії при ізоструктурному фазовому переході.

У **четвертому** розділі розглянуто магнітні квантові фазові переходи (QPT) у ван – флеківському парамагнетика (VVRM), та досліджується поведінка магнітокалоричного ефекту в ньому. Розглядається конкуренція міжчастинкових білінійних взаємодій феромагнітного типу між спінами, величини яких  $S = 1$ , та легкоплощинної одноіонної анізотропії. Гамільтона має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n,m} I_{n,m} s_n^z s_m^z + D \sum_n (s_n^z)^2 - h \sum_n s_n^z, \quad (5)$$

де перша сума відповідає обмінній взаємодії, друга - одноіонній анізотропії легкоплощинного типу ( $D > 0$ ), третя – зейманівський доданок,  $S_n^z$  - проекція спіна, положення якого задає вектор  $\mathbf{n}$ .

Для опису станів та фазових переходів при  $T = 0$  використано функцію Лагранжа з додатковою умовою нормування хвильової функції спінових станів. З процедури її мінімізації функції Лагранжа по параметрам хвильової функції записано систему трьох алгебраїчних рівнянь стану, розв'язки яких та гессіан дозволяють знайти стабільні та не стабільні стани системи при  $T = 0$ :

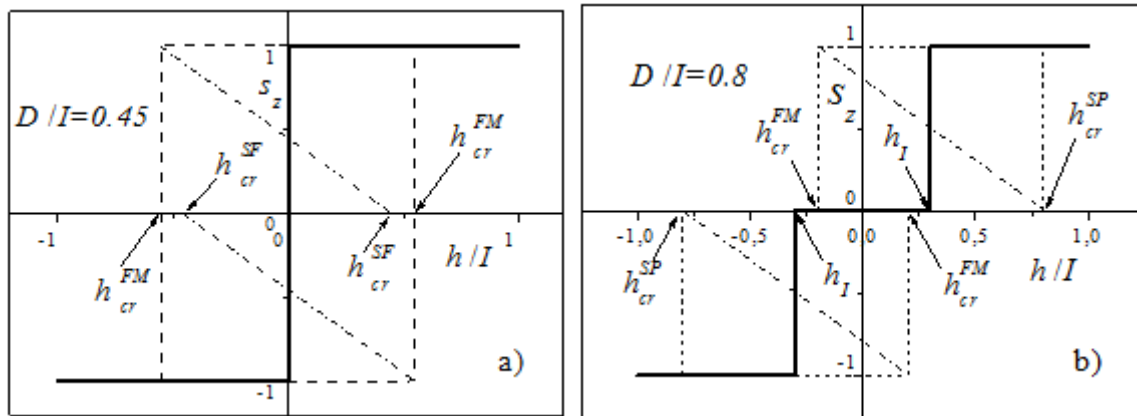
**I.** Феромагнітна фаза з хвильовою функцією  $\psi = |1\rangle$ , енергія якої  $E_+ = -1/2I + D - h$ , де  $E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ , а  $I$  визначається з параметрів обміну (5).

**II.** Феромагнітна фаза з хвильовою функцією  $\psi = |-1\rangle$ , та значенням енергії  $E_- = -1/2I + D + h$  і намагніченість спрямована протилежно випадку **I**. Для розв'язків **I** та **II** може виконуватися умова збігу енергій  $E_+ = E_-$ . За цієї умови енергії феромагнітних станів з  $s_z = 1$  та  $s_z = -1$  збігаються при  $h = 0$ . Тому, фазовий перехід між цими станами проходить у полі  $h_f(T = 0) = 0$ . При цьому квантовому фазовому переході стрибком змінюється величина та знак початкового обмінного поля.

III. VVPM стан з хвильовою функцією  $\psi = |0\rangle$ , та значенням енергії  $E_0 = 0$ .

IV. Стан з  $\psi = C_+|+1\rangle + C_0|0\rangle + C_-|-1\rangle$  при  $C_0=0$ , для якого розв'язками є  $s_z = C_+^2 = (D-h)/I$  та  $s_z = -C_-^2 = -(D+h)/I$ , що існує в інтервалі полів  $[-|h_{cr}^{FM}|, |h_{cr}^{SF}|]$  (або  $[-|h_{cr}^{SF}|, |h_{cr}^{FM}|]$ ), завдяки якому відбувається неперервний перехід з ФМ стану у VVPM стан. Інтервали меж існування цього розв'язку відповідають межами стійкості феромагнітного та синглетного станів.

На рисунках 7 а, б, для прикладу, наведені польові залежності проекції середнього спіну для  $D/I = 0.45, 0.8$ . Суцільними лініями позначено хід рівноважних кривих, пунктиром – нерівноважних. Відмінність між ними у положенні точки фазового переходу, у першому випадку QPT відбувається у  $h = 0$ , а у другому випадку  $h \neq 0$ .



**Рис. 7.** Залежності  $s_z(h)$  при  $T=0$  для випадків  $D/I = 0.45, 0.8$ . Суцільними лініями позначено хід рівноважної намагніченості, а пунктиром – нерівноважні намагнічування у межах полів стійкості феромагнітної  $h_{cr}^{FM}$  та синглетної  $h_{cr}^{SP}$  фаз.

Для опису при  $T \neq 0$  використана вільна енергія можна записати у вигляді:

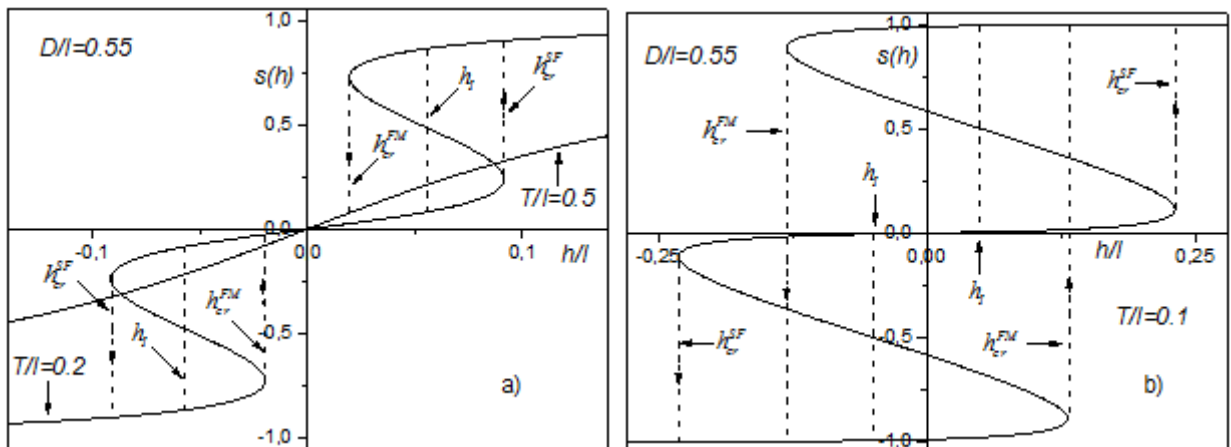
$$F = -\frac{1}{2} I s_z^2 + D q_{zz} + T \left[ \frac{q_{zz} + s_z}{2} \ln \frac{q_{zz} + s_z}{2} + \frac{q_{zz} - s_z}{2} \ln \frac{q_{zz} - s_z}{2} + (1 - q_{zz}) \ln(1 - q_{zz}) \right] - h s_z \quad (6)$$

де  $q_{zz}$  – термодинамічне середнє значення квадрупольного моменту,  $s_z$  – термодинамічне середнє значення спіну.

Для прикладу для температур  $T/I = 0.1, =0.2, =0.5$  на рис. 8 наведені чисельні розв'язки, які пораховані для  $D/I = 0.55$ , коли основним в  $h=0$  є синглетний стан. При високій температурі при  $T/I = 0.5$  намагнічування парамагнітне, величина  $s_z(h)$  змінюється неперервно. При більш низьких значеннях безрозмірної температури, наприклад при  $T/I = 0.2$  залежність  $s_z(h)$  має дві S-подібних ділянки (одна у додатних полях, а друга у від'ємних), границі стійкості яких не перетинаються. Аналіз розв'язків з

використанням (6) дозволяє визначити точку ФП I між VVPM та ФМ станом. Це фазовий перехід першого роду типу зміщення, при якому відбувається стрибкоподібна зміна основного стану іона з синглетного до поляризованого, тому такий ФП виявляється квантовим ФП I (QPT I) при  $T \neq 0$ .

При більш низькій температурі залежність  $s_z(h)$  наведена на рис. 8 б. У цьому випадку величина критичного поля границі стійкості ФМ фази більша величини  $h_I$  поля ФП. При рівноважному перемагнічуванні для цієї температури буде спостерігатися два фазових переходи першого роду через ван - Флеківський парамагнітний стан, але гістерезис при перемагнічуванні має одну прямокутну петлю, як у феромагнетика з коерцитивним полем  $h_{cr}^{FM}$ .

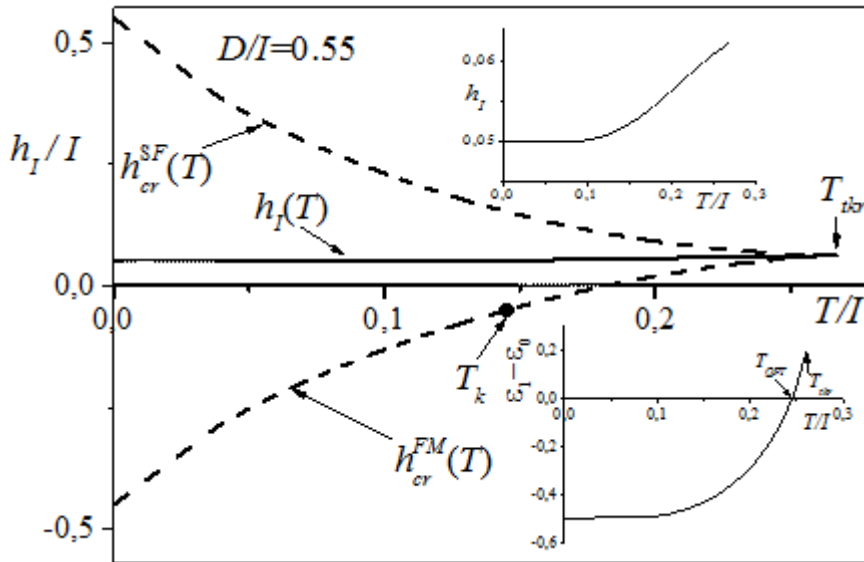


**Рис. 8 а,б.** Польові залежності  $s_z(h)$  для ван – флеківського парамагнетика з параметром одноіонної анізотропії  $D/I = 0.55$  при температурах  $T/I = 0.1, 0.2, 0.5$ . Гістерезис перемагнічування позначений стрілками.

На рисунку 9 наведена фазова  $h - T$  діаграма VVPM для значення константи одноіонної анізотропії  $D/I = 0.55$ . На діаграмі показано:  $h_I(T)$  – лінія QPT I між VVPM та ФМ фазою, лінії границь стійкості фаз їх критичних полів  $h_{cr}^{FM}(T)$  і  $h_{cr}^{SF}(T)$ . На *верхній* вставці наведена більш детальна поведінка лінії фазового переходу. На *нижній* вставці показана поведінка різниці енергій першого збуреного та основного стану іона від нормованої температури, що дозволяє визначити межу (по температурі) квантового ФП I, яка позначена точкою  $T_k$ .

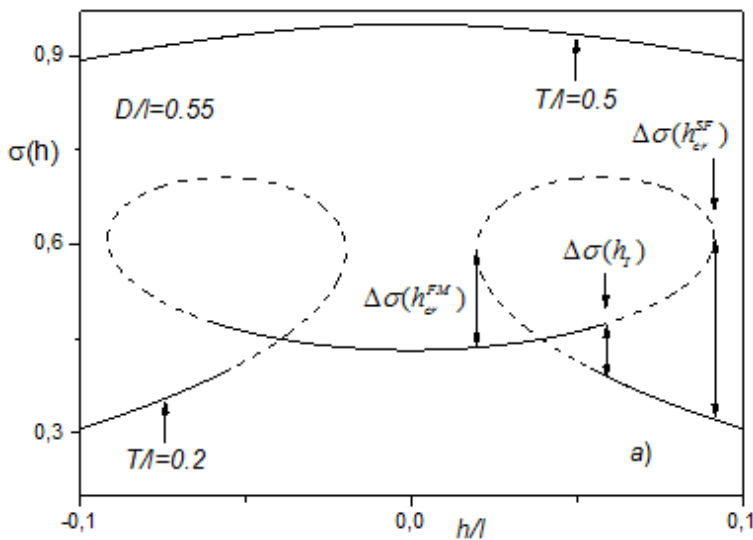
Поведінка магнітної ентропії системи для VVPM з  $D/I = 0.55$  для температур  $T/I = 0.2, 0.5$  наведена на рис. 10. Для  $T/I = 0.5$  залежність  $\sigma(h)$  виявляється традиційною для парамагнетика, її величина зменшується з збільшенням поля за рахунок зростання ступеня впорядкування магнітних іонів зовнішнім магнітним полем.

За більш низької температури при  $T/I = 0.2$  магнітна ентропія має більш складну польову залежність, яка також наведена на рисунку 10. Суцільними лініями позначена рівноважна поведінка, пунктиром – не рівноважна,  $\Delta\sigma(h_I)$  – величина стрибка ентропії



**Рис. 9.** Фазова  $h$ - $T$  діаграма VVPM для  $D/I = 0.55$ .  $h_I(T)$  – поле QPT I. На верхній вставці: детальніша поведінка  $h_I(T)$  до трикритичної точки. На нижній вставці: зміна різниці енергій станів від температури.

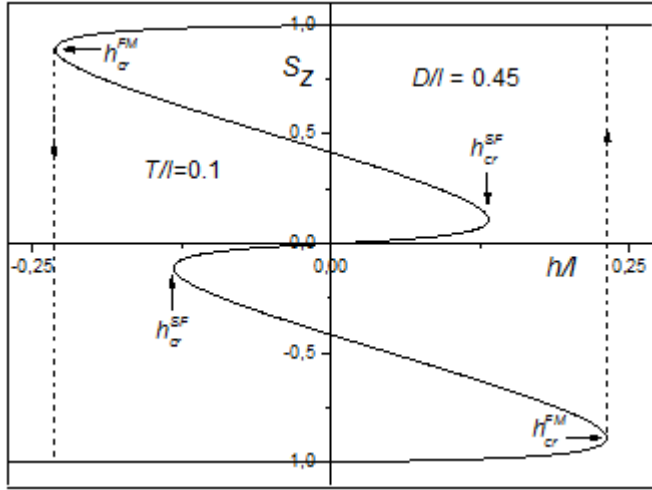
при QPT I,  $\Delta\sigma(h_{cr}^{SF})$  та  $\Delta\sigma(h_{cr}^{FM})$  – величини стрибків ентропії при нерівноважному перемагнічуванні. При цій температурі спочатку при зростанні магнітного



**Рис. 10.** Поведінка  $\sigma(h)$  магнітної ентропії VVPM для  $T/I = 0.2, =0.5$  при  $D/I = 0.55$ . Суцільні лінії позначають ділянки рівноважного намагнічування, а пунктир – не рівноважного, *подвійними* стрілками позначені – стрибки ентропії при QPT  $\Delta\sigma(h_I)$ , та стрибки ентропії при нерівноважному перемагнічуванні.

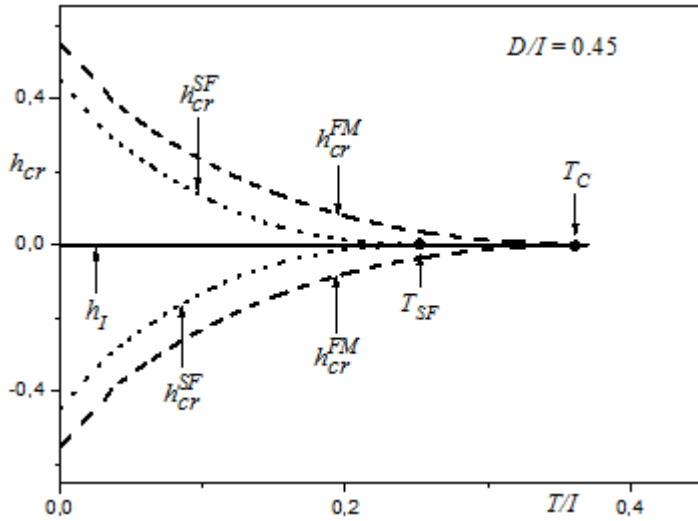
поля величина магнітної ентропії парамагнітного стану зростає, що указує на зміну знаку магнітокалоричного ефекту у порівнянні з намагнічуванням при великій температурі. Така зміна ентропії схожа на поведінку магнітної ентропії при намагнічуванні антиферромагнетиків.

Якщо величина константи одноіонної анізотропії порівняна але менша критичного значення і дорівнює, наприклад,  $D/I = 0.45$ , то розв’язок рівняння стану для температури  $T/I = 0.1$  набуває вигляду, який наведений на рисунку 11. Нижче температури Кюрі рівняння стану дає у якості розв’язку VVPM стан і не рівноважні стани, які при умові  $T \rightarrow 0$  відповідають розв’язку IV квантової задачі при  $T=0$ . З розв’язків рівняння стану для різних значень температур, та знаходячи границі стійкості, отримано фазову діаграму.



**Рис. 11.** Залежність  $s_z(h)$  для ізнгівського ФМ для  $D/I = 0.45$  та температури  $T/I = 0.1$ .  $h_{cr}^{SF}$ ,  $h_{cr}^{FM}$  – значення критичних полів SF та FM фаз відповідно. Пунктиром показаний гістерезис.

Фазова діаграма ізнгівського ФМ з легкоплщинною обмінною взаємодією для випадку  $D/I = 0.45$  показана на рис. 12.



**Рис. 12.** Фазова діаграма ізнгівського ФМ з легкоплщинним типом одноіонної анізотропії для  $D/I = 0.45$ . Суцільна лінія  $h_T = 0$  – це лінія ФП I, пунктир –  $h_{cr}^{FM}(T)$  критичне поле границі стійкості ФМ фази,  $h_{cr}^{SF}(T)$  критичне поле границі стійкості VVPM стану.

У п'ятому розділі розглянуто термодинамічну поведінку негейзенбергівського ФМ з ізотропною взаємодією другого та четвертого порядку по спіну, гамільтоніан якого записано у вигляді:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{nm} I_{nm} (s_n s_m) - \frac{1}{4} \sum_{nmpq} K_{nmpq} (s_n s_m)(s_p s_q) - \mathbf{H} \sum_n s_n, \quad (7)$$

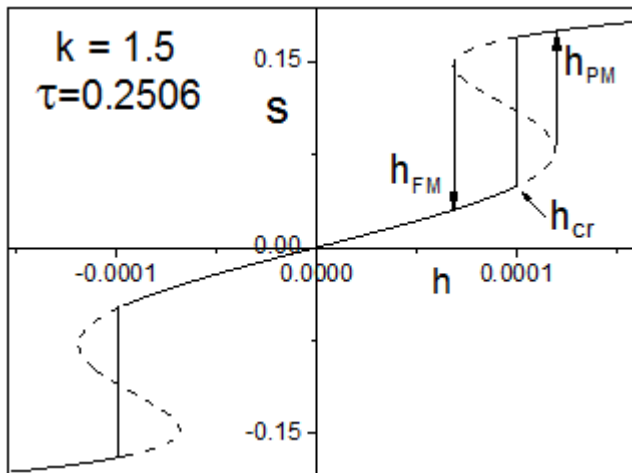
де  $\mathbf{n}, \mathbf{m}, \mathbf{p}, \mathbf{q}$  – вектори позицій вузлів у решітці,  $s_n$  – оператор спіну  $\mathbf{n}$  – го вузла,  $\mathbf{H}$  – вектор напруженості магнітного поля, величина спінів вузлів  $S = 1/2$ . Константи  $I_{nm}$ , та  $K_{nmpq}$  – відповідають білінійним та чотирьох спіновим обмінним взаємодіям, причому розглядаються пари та четвірки спінів ближчих сусідів. Вільну енергію яка припадає на один вузол ФМ системи (7) запишемо у вигляді:

$$F = -\frac{1}{2} I s^2 - \frac{1}{4} K s^4 - \mathbf{H} \mathbf{s} - T \sigma(\mathbf{s}), \quad (8)$$

де  $\mathbf{s}$  – вектор середньої величини спіна вузла,  $T$  – температура,  $\sigma(\mathbf{s})$  – магнітна ентропія системи. Величини  $I = \sum_m I_{nm}$ ,  $K = \sum_{mpq} K_{nmpq}$ , а також  $\mathbf{H}$  і  $T$  виражені

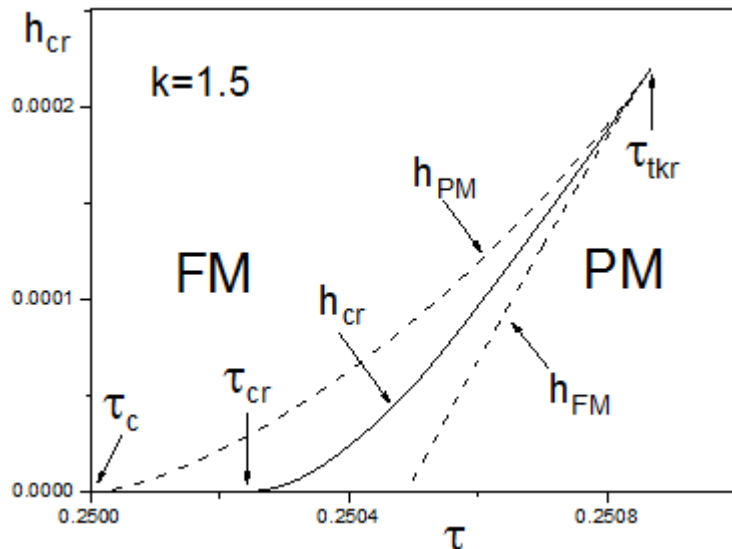
у енергетичних одиницях. Мінімізуючи (8) по параметру порядку отримаємо рівняння стану. Досліджено випадок, при якому величина параметру чотирьох спінової взаємодії  $\kappa = K/I$  є більшою критичного значення, тобто випадок сильно негеїзенбергівського ФМ. Саму величину критичного значення  $\kappa_{cr}$  ( $\kappa_{cr}=4/3$ ) можна отримати з розкладу вільної енергії (8) у ряд по ступеням малості по ПП. Чисельний розв’язок для середнього спіну для довільно обраного значення, наприклад,  $\kappa = 1.5$  та безрозмірної температури  $\tau = T/I = 0.2506$ , яка не на багато вище за критичну  $\tau_{cr} \approx 0.250266$  (точка Кюрі в  $h=0$ ), наведено на рисунку 13. Критичне поле ФП з ПМ у ФМ фазу, знайдено з умови рівності вільних енергій обох фаз. Видно, що критичне поле ФП виявляється малим (вертикальні суцільні лінії), на багато меншим (на чотири порядки) за обмінне поле. Пунктирні лінії відповідають нерівноважній поведінці спінів, у наслідок чого може виникати гістерезис.

На рисунку 14 наведена фазова Н – Т діаграма сильно негеїзенбергівського ФМ для випадку  $\kappa = 1.5$ . На діаграмі позначені **лінії**:  $h_{cr}(\tau)$  - лінія ФП І з ПМ у ФМ стан,  $h_{PM}(\tau)$  – лінія границі стійкості ПМ фази,  $h_{FM}(\tau)$  – лінія границі стійкості ФМ фази.



**Рис. 13.** Розв’язок рівняння стану сильно негеїзенбергівського ФМ при температурі  $\tau = 0.2506$  та параметра  $\kappa = 1.5$ .  $h_{PM}$  та  $h_{FM}$  – поля границь стійкості, які відповідають межі гістерезису,  $h_{cr}$  – поле ФП І з ПМ у ФМ стан. Пунктирна лінія – не рівноважна поведінка ПП.

На діаграмі позначені **точки**:  $\tau_{tkr}$  – трикритична точка де збігаються лінії границь стійкості ПМ та ФМ фаз,  $\tau_c$  – температура Кюрі,  $\tau_{cr}$  – критичне значення температури, яке було отримано з розкладу (8) у степеневий ряд.



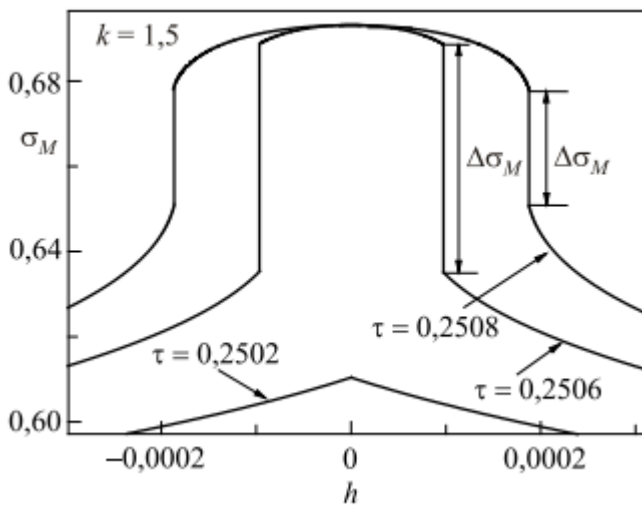
**Рис. 14.** Фазова Н – Т ( $h - \tau$ ) діаграма сильно негеїзенбергівського ФМ для випадку  $\kappa=1.5$ . Позначено:  $h_{cr}$  – поле ФП з ПМ у ФМ стан,  $h_{PM}$  і  $h_{FM}$  поля границь стійкості,  $\tau_{tkr}$  – трикритична точка.



Зауважимо, що положення трикритичної точки, а також поведінку  $h_{PM}$  і  $h_{FM}$  знаходили за допомогою визначника Гессе [10].

Польові залежності магнітної ентропії у випадку сильно негейзенбергівського ФМ для температур  $\tau=0.2502$ ,  $\tau=0.2506$ ,  $\tau=0.2508$  наведено на рисунку 15. За умови  $\tau < \tau_c$ , (наприклад  $\tau=0.2502$ ) поведінка ентропії не має особливостей, оскільки при цій температурі в  $h=0$  відбувається лише зміна напрямку ПП без зміни його модуля. При  $\tau_{tkr} > \tau > \tau_c$ , наприклад,  $\tau=0.2506$ ,  $\tau=0.2508$  вже у  $h \neq 0$  відбувається ФП I зі зміною величини модуля ПП.

Польова залежність магнітної ентропії показана на рис. 15, суцільні лінії на якому відповідають рівноважному намагнічуванню, вертикальними стрілками показано стрибки ентропії. Видно, що при наближенні  $\tau$  до  $\tau_{tkr}$  величина стрибка ентропії зменшується.



**Рис. 15.** Залежність магнітної ентропії негейзенбергівського ФМ ( $k = 1.5$ ) для значень безрозмірних температур  $\tau=0.2502$ ,  $\tau=0.2506$ ,  $\tau=0.2508$  відповідно. Суцільними лініями позначено рівноважну поведінку ентропії, вертикальними лініями позначено стрибки ентропії при ФП I.

У шостому розділі розглянуто ізінговський антиферромагнетик з легкоплощинною константою одноіонної анізотропії в магнітному полі гамільтоніан, якого має вигляд [12-14]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} I_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} S_{\mathbf{n}_\alpha}^z S_{\mathbf{m}_\beta}^z + D \sum_{\mathbf{n}_\alpha} (S_{\mathbf{n}_\alpha}^z)^2 - h \sum_{\mathbf{n}_\alpha} S_{\mathbf{n}_\alpha}^z, \quad (9)$$

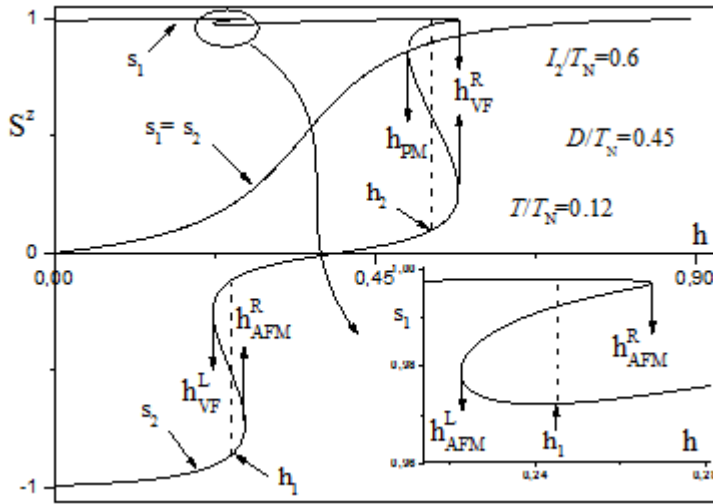
де  $I_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta}$  - константи обмінної взаємодії між магнітними іонами, положення яких задається векторами  $\mathbf{n}_\alpha$  та  $\mathbf{m}_\beta$ ,  $\alpha$  та  $\beta$  - нумерують магнітні підгратки, другий доданок у (9) - внесок анізотропії легкоплощинного типу ( $D > 0$ ), третій - зейманівський внесок,  $S^z$  - оператор проекції спіна. Усі константи виражені у енергетичних одиницях, проекції спіну іону  $\pm 1, 0$ .

Для кінцевих температур вільна енергія, яка припадає на два спіни магнітної комірки, може бути записана у вигляді:

$$\begin{aligned}
F = & I_1 s_1 s_2 - \frac{1}{2} I_2 (s_1^2 + s_2^2) + D(q_{zz}^{(1)} + q_{zz}^{(2)}) - h(s_1 + s_2) + \\
T \left( & \frac{q_{zz}^{(1)} + s_1}{2} \ln \frac{q_{zz}^{(1)} + s_1}{2} + \frac{q_{zz}^{(1)} - s_1}{2} \ln \frac{q_{zz}^{(1)} - s_1}{2} + \right. \\
& \left. \frac{q_{zz}^{(2)} + s_2}{2} \ln \frac{q_{zz}^{(2)} + s_2}{2} + \frac{q_{zz}^{(2)} - s_2}{2} \ln \frac{q_{zz}^{(2)} - s_2}{2} + (1 - q_{zz}^{(1)}) \ln(1 - q_{zz}^{(1)}) + (1 - q_{zz}^{(2)}) \right)
\end{aligned} \tag{10}$$

де  $I_1$  – константа міжпідграткової взаємодії,  $I_2$  – константа внутрішньопідграткової взаємодії,  $s_1, s_2, q_{zz}^{(1)}$  та  $q_{zz}^{(2)}$  – термодинамічні середні  $z$  – проекцій спінів та  $zz$  – проекцій компонент спінових квадрупольних моментів підграток.

Використовуючи процедуру мінімізації вільної енергії по параметрам порядку, отримаємо систему чотирьох рівнянь, чисельний розв'язок яких повністю описує поведінку станів. Для довільно обраного значення температури  $T/T_N=0.12$  та параметра одноіонної анізотропії  $d = D/T_N=0.45$  і константи обміну  $k = I_2/T_N=0.6$  чисельні розв'язки рівняння станів наведені на рисунку 16.



**Рис. 16.** Польові залежності середніх значень спінів  $s_1(h)$  та  $s_2(h)$  для  $D/T_N = 0.45$  та  $T/T_N=0.12$ . Константа обміну  $I_2/T_N = 0.6$ , де  $T_N = I_1+I_2$ . Стрілками позначені границі стійкості розв'язків рівняння станів. Пунктиром позначені точки рівноважного QPT. На вставці показана залежність  $s_1(h)$  поблизу QPT.

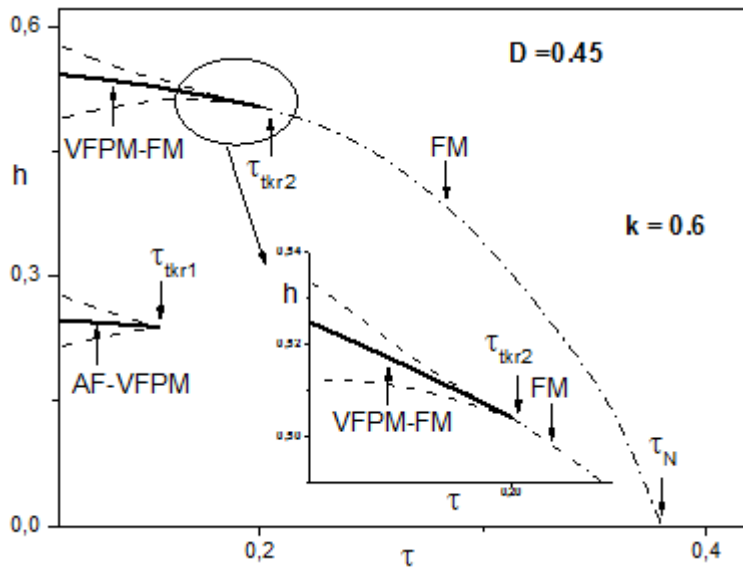
З наведеного рисунку бачимо, що для розглянутого випадку розв'язки системи станів мають види:

**I. Антиферромагнітний (АФМ) стан.** У відсутності магнітного поля стійким виявляється АФМ стан  $s_1(\tau, h=0) = -s_2(\tau, h=0)$ . При зростанні магнітного поля величина середнього спіну  $s_1$  першої підгратки, яка орієнтована вздовж поля, змінюється слабо, залишаючись майже увесь час близької до насиченості. Більш суттєво змінюється величина середнього спіну другої підгратки  $s_2$  ( $s_2 < 0$ ) яка початково спрямована проти зовнішнього поля.

**II. Проміжний стан** з утворенням плато у намагнічуванні спостерігається у інтервалі полів  $h_{VF}^L < h < h_{VF}^R$ . На рисунку 15 положення QPT в проміжний стан, в якому основний стан іона неполяризований, зображено

пунктирною вертикальною лінією. Поле QPT – I знаходили з умови збігу енергій стійких розв’язків АФМ фази та проміжної фази. При такому переході величина середнього спіну  $s_1$  першої підґратки практично не змінюється, а величина  $s_2$  середнього спіну після переходу становиться близькою до нуля. При QPT друга підґратка переходить у парамагнітний ван – флеківський стан, з основним станом  $|0\rangle$  для спінів цієї підґратки.

**III. Феромагнітний стан.** У сильних полях, які перевищують  $h > h_{FM}$ , з рівняння стану отримаємо ФМ розв’язок з  $s_1 = s_2$ . Перехід у ФМ стан також виявляється QPT – I. При цьому QPT основний стан спінів другої підґратки змінюється з  $|0\rangle$  на  $|1\rangle$ . Поле  $h_H$  цього QPT – I знаходили також з умови збігу енергій проміжного стану та ФМ фази. Гістерезис у намагніченості при цьому QPT належить інтервалу границь стійкості проміжної фази та ФМ фази  $h_{FM} < h < h_{VF}^R$ .



**Рис. 17.** Фазова Н – Т ( $h$ - $\tau$ ) діаграма ізінгівського двох підґраткового АФМ з додатнім значенням одноіонної анізотропії  $D = 0.45$ , константи обміну  $k = I_2/T_N = 0.6$ . На вставці показана поведінка ФП поблизу другої трикритичної точки.

На рис. 17 наведена фазова Н – Т діаграма станів ізінгівського антиферомагнетика з одноіонною анізотропією. На діаграмі позначені **лінії**:  $h_{AF-VFPM}$  – лінія QPT I (суцільна лінія) між AF та VFPM станами, який відбувається у малих полях,  $h_{VFPM-FM}$  – лінія QPT I (суцільна лінія) між VFPM та FM станами, який відбувається у великих полях,  $h_{FM}$  – лінія фазового переходу другого роду (штрих пунктирна лінія), яка закінчується у точці Нееля; пунктирні лінії – лінії границі стійкості фаз, які отримали завдяки розв’язку матриці Гессе. На діаграмі позначені **точки**:  $\tau_{tkr1}$  – перша трикритична точка, де кінчається фазовий перехід який має квантову природу і є QPT I,  $\tau_{tkr2}$  – друга трикритична точка, у якій лінія QPT I переходить у лінію фазових переходів другого роду, яка закінчується у точці Нееля  $\tau_N$ .

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

Таким чином, у даній дисертаційній роботі проведено широкий цикл теоретичних досліджень термодинаміки фазових переходів в сильно

негейзенберґівських магнетиках з одноіонною анізотропією. З отриманих в роботі результатів можна зробити наступні висновки:

1. Для ізінґівського антиферромагнетика з легкоплощинною одноіонною анізотропією побудовано фазову діаграму та отримано, що при фазових переходах першого роду між впорядкованим і невпорядкованим станами одноіонна анізотропія, яка виморожує іонні стани з ненульовими проєкціями спіну в парафазі, може змінити тип фазового переходу, який біля трикритичної точки відноситься до фазового переходу першого роду типу порядок – безлад, який при подальшому зростанні константи одноіонної анізотропії стає фазовим переходом типу зміщення, тобто порядок – порядок.

2. Для ізінґівського антиферромагнетика показано, що при метамагнітному фазовому переході першого роду з антиферромагнітного до парамагнітного стану температурна залежність критичного поля є спадаючою з температурою функцією, завдяки чому величина стрибка ентропії в точці фазового переходу додатна. У випадку переважаючого міжпідґраткового обміну, коли стає можливим ізоструктурний магнітний фазовий перехід, температурна залежність критичного поля фазового переходу першого роду містить точку перегину і має мінімум, що призводить до знакозмінної поведінки ентропії. При магнітному ізоструктурному фазовому переході в ізінґівському антиферромагнетикі стрибок ентропії від'ємний.

3. Побудована фазова Н-Т діаграма для ван-Флеківського парамагнетика зі спінами іонів  $S=1$  з ізінґівським обміном та легкоплощинною одноіонною анізотропією. Отримано, що всі індуковані магнітним полем стани: - рівноважні, нерівноважні стійкі, та нестійкі, отримані при  $T \neq 0$  з мінімізації нерівноважної вільної енергії, у граничному випадку, коли  $T \rightarrow 0$  переходять у розв'язки, що отримані при  $T = 0$  за допомогою функції Лагранжа, мінімізація якої здійснювалася по параметрам хвильової функції основного стану іонів. Показано, що при перемагнічуванні початково ненамагніченого ван - Флеківського парамагнетика петля гістерезису може бути феромагнітного типу, а фазовий перехід між синґлетною та феромагнітною фазами відноситься до фазового переходу першого роду типу зміщення.

4. Побудована фазова Н-Т діаграма феромагнетика з білінійним та чотирьохспіновим ізотропним обміном. Отримано, що магнітне поле призводить до зростання критичної температури фазового переходу першого роду до феромагнітної фази. Показано, що величина стрибка ентропії при фазовому переході найбільша, коли магнітне поле прямує до нуля. Отримано, що величина стрибка ентропії тим більша, чим більший внесок в обмінне поле від негейзенберґівського обміну.

5. Побудовано фазову Н-Т діаграму для ізінґівського антиферромагнетика зі спіном іонів  $S=1$  з легкоплощинною одноіонною анізотропією, у якого магнітне поле при  $T \neq 0$  індукує два фазових переходи

першого роду: магнітний квантовий фазовий перехід першого роду з антиферромагнітного стану у проміжний, у якого друга підгратка знаходиться у ван – флеківському парамагнітному стані та магнітний квантовий фазовий перехід першого роду з проміжного стану у ферромагнітний стан.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

- 1\*. Особенности спинового упорядочения в изинговском антиферромагнетике с одноионной анизотропией типа “легкая плоскость” / В.М. Калита, **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Локтев // ФТТ. -2008. –т. 50. №2. –с. 285-291.
- 2\*. Изоструктурный магнитный фазовый переход и магнитокалорический эффект в изинговском антиферромагнетике / **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Калита, В.М. Локтев // ФНТ. – 2014. –т.40.№9.-с. 1053-1061.
- 3\*. Magnetic quantum transitions and entropy in Van Vleck magnet / **G. Yu. Lavanov**, V.M. Kalita, I.M. Ivanova, V.M. Loktev // JMMM. – 2016. –v.416. –р. 466-474.
- 4\*. Изменение энтропии при индуцированном магнитным полем фазовом переходе первого рода в негейзенберговском изотропном ферромагнетике / **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Калита, В.М. Локтев // ФНТ. – 2018. –т.44.№4. –с. 424-431.
- 5\*. The double metamagnetic phase transition in an Ising antiferromagnet with light-plane single-ion anisotropy and with ion spin  $S=1$  / **G. Yu. Lavanov** // Dopr. Nac. akad. nauk Ukr. – 2018. -№9. –р. 64-69.
- 6\*. **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Калита, В.М. Локтев, Сучасні проблеми фізики конденсованого стану. Збірник праць IV – ї міжнародної конференції 07-10 жовтня 2015 р., м. Київ.: матер. конф. . – К., 2015. – с. 22–23.
- 7\*. **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Калита, В.М. Локтев, І.М. Іванова, Фізичні явища в твердих тілах. Матеріали XII Міжнародної конференції 01-04 грудня 2015 р. м. Харків.: матер. конф. . – Х., 2015. – с. 60.
- 8\*. **Г.Ю. Лаванов**, В.М. Калита, В.М. Локтев, Сучасні проблеми фізики конденсованого стану. Збірник праць V – ї міжнародної конференції 03-06 жовтня 2018 р., м. Київ.: матер. конф. . – К., 2018. – с. 80.

## СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. В. М. Локтев. Особенности статики и динамики магнитных диэлектриков с одноионной анизотропией / В. М. Локтев, В. С. Островский // ФНТ.- 1994. – т. 20, №10. – с. 983-1016.
2. Э. Л. Нагаев, Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. – М. Наука, 1988, 240с.
3. John A. Hertz. Quantum critical phenomena / John A. Hertz // Phys. Rev. B. – 1976. – vol. 14, №3. – p. 1165-1184.

4. A.J. Millis. Effect of a nonzero temperature on quantum critical points in itinerant fermion systems / A.J. Millis // Phys. Rev. B. – 1993. – vol. 48, №10. – p. 7183-7196.
5. В.Ф. Гантмахер. Квантовые фазовые переходы “локализованные – делокализованные электроны” / В.Ф. Гантмахер, В.Т. Долгополов // УФН. – 2008. – т.51, №1. –с. 3-24.
6. С.М. Стишов. Квантовые фазовые переходы / С.М. Стишов // УФН. – 2004. – т. 47, №8. – с. 789-860.
7. H. W. Capel. On the possibility of first – ordered transition in Ising systems of triplet ions with zero – field splitting II / H. W. Capel // Physica. – 1967. – vol. 33. – p. 295-331.
8. M. Blume. Ising model for the  $\lambda$  transitions and phase separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> mixtures / M. Blume, V. J. Emery // Phys. Rev. A. – 1971. – vol. 4.- p. 1071-1077.
9. В.Г. Барьяхтар. К теории метамагнитных фазовых переходов / В.Г. Барьяхтар, И.Н. Витебский, Д.Н. Яблонский // ФТТ. – 1977. – т. 19, №7. – с. 2135-2142.
10. Е. И. Кутьин. Методы теории особенностей в феноменологии фазовых переходов / Е. И. Кутьин, В. Л. Лорман, С. В. Павлов // УФН. – 1991. – т. 161, №6. – с. 109-147.
11. Ю.М. Гуфан. Структурные фазовые переходы. – М. Наука, 1971, 304 с.
12. В. М. Калита. О последовательности квантовых (мета) магнитных переходов в изинговских антиферромагнетиках с одноионной анизотропией / В. М. Калита, В.М. Локтев // ФНТ. – 2005. – т. 31, №7. –с. 815-819.
13. E. Aydiner. Magnetic and thermal behavior of one-dimensional antiferromagnetic spin – 1 Ising chain at low temperatures / E. Aydiner, C. Akyuz // Chin. Phys. Lett. – 2005. – vol. 22, №9. – p. 2382-2385.
14. E. Aydiner. Magnetization and quadrupolar plateaus in the one dimensional antiferromagnetic spin – 3/2 and spin – 2 Blume – Capel model / E. Aydiner, C. Akyuz, M. Gonulol, and H. Polat // Phys. Stat. Sol. B. – 2006. – vol. 234, №12. – p. 2901-2912.

## АНОТАЦІЯ

**Лаванов Г.Ю.** Термодинамічний опис фазових переходів в сильно негейзенбергівських магнетиках з одноіонною анізотропією. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.11 – магнетизм. – Інститут Магнетизму Національної Академії Наук України та Міністерство Освіти і Науки України.

Дисертаційна робота присвячена термодинамічному опису фазових переходів у магнетиках з одноіонною анізотропією, які відносяться до типу негейзенбергівських. Розглядається вплив зовнішнього магнітного поля, температури, одноіонної анізотропії, та параметрів обміну на термодинаміку

фазових переходів у магнетиках в умовах їх конкуренції. Використовуючи вираз для нерівноважної вільної енергії, розраховуються (чисельно) та аналізуються фазові Н-Т (D-T) діаграми станів, та досліджуються калоричні властивості (магнітокалоричний ефект) при фазових переходах першого та другого роду. На підставі вищезазначеного:

- досліджено особливість магнітного впорядкування ізінгівського антиферромагнетика у випадку конкуренції константи взаємодії з константою одноіонної анізотропії;

- розглянуто магнітокалоричний ефект ізінгівського двохпідграткового антиферромагнетика при конкуренції міжпідграткового обміну і зовнішнього магнітного поля при ізоструктурному фазовому переході;

- розглянуто впорядкування та магнітокалоричний ефект у ван – Флеківському парамагнетиках зі спіном  $S = 1$  при умові конкуренції обміну, магнітного поля та одноіонної анізотропії для двох граничних значень температур;

- розглянуто вплив магнітного поля на магнітне впорядкування та магнітокалоричний ефект в ізотропному ферромагнетиках з білінійним та чотирьох спіновим ізотропним обміном по спіну;

- розглянуто термодинамічний опис фазових переходів у двохпідгратковому ізінгівському антиферромагнетиках з додатною константою анізотропії (легкоплощинного типу) зі спіну іону  $S = \pm 1$  при умові конкуренції констант обмінної взаємодії, одноіонної анізотропії та магнітного поля.

**Ключові слова:** фазові переходи, квантові фазові переходи, ентропія, одноіонна анізотропія, магнітокалоричний ефект.

## АННОТАЦІЯ

**Лаванов Г.Ю.** Термодинамическое описание фазовых переходов в сильно негеизенберговских магнетиках с одноионной анизотропией. – Квалификационная научная работа на правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.11 – магнетизм. – Институт Магнетизма Национальной Академии Наук Украины и Министерство Образования и Науки Украины.

Диссертационная работа посвящена термодинамическому описанию фазовых переходов в магнетиках с одноионной анизотропией, которые относятся к типу негеизенберговских. Рассматривается влияние внешнего магнитного поля, температуры, одноионной анизотропии и параметров обмена на термодинамику поведения фазовых переходов первого и второго рода в магнетиках при условии их конкуренции. Для описания таких систем используется выражение для неравновесной свободной энергии, исходя из которой, производятся численные расчеты фазовых Н-Т (D-T) диаграмм состояний, анализа кривых намагничивания, магнитокалорического эффекта. На основании вышесказанного:

- исследована особенность магнитного упорядочения изинговского антиферромагнетика в случае конкуренции константы взаимодействия с константой одноионной анизотропии;

- изучен магнитокалорический эффект в изинговском двухподрешеточном антиферромагнетике при условии конкуренции межподрешеточного обмена и внешнего магнитного поля при изоструктурном фазовом переходе;

- исследовано магнитное упорядочение и магнитокалорический эффект в ван-Флековском парамагнетике для спина  $S = 1$  при условии конкуренции параметров обмена и магнитного поля и одноионной анизотропии для двух предельных значений температур;

- показано влияние магнитного поля на магнитное упорядочение и магнитокалорический эффект в изотропном ферромагнетике с билинейным и четырехспиновым изотропным обменом по спине;

- исследовано термодинамическое описание фазовых переходов в двухподрешеточном изинговском антиферромагнетике с положительной константой одноионной анизотропии (легкоплоскостного типа) с спином иона  $S = \pm 1$  при условии конкуренции констант обменных взаимодействий, одноионной анизотропии и магнитного поля.

**Ключевые слова:** фазовые переходы, квантовые фазовые переходы, энтропия, одноионная анизотропия, магнитокалорический эффект.

## ABSTRACT

**Lavanov G. Yu. Thermodynamic description of phase transitions in the strongly non-Heisenberg magnets with single-ion anisotropy.** - Qualifying scientific paper accepted as monograph.

Dissertation for the degree of a candidate of physical and mathematical sciences on a specialty 01.04.11 - magnetism. - Institute of Magnetism of the National Academy of Sciences of Ukraine and the Ministry of Education and Science of Ukraine.

The dissertation is devoted to the thermodynamic description of phase transitions in magnets with single-ion anisotropy, which are of the type of non-Heisenberg ones. The influence of the external magnetic field, temperature, single-ion anisotropy, and parameters of the exchange on the thermodynamics of phase transitions in magnets in the conditions of their competition is considered. Using the expression for the nonequilibrium free energy, the phase diagrams of the states are calculated (numerically) and analyzed H-T (D-T), and the caloric properties (magneto-caloric effect) of the first- and second-order phase transitions are investigated. Based on the above:

- the peculiarity of magnetic ordering of an Ising antiferromagnet in the case of competition of the interaction constant with the single-ion anisotropy constant is investigated;



- the magnetocaloric effect of the Ising two-sublattice antiferromagnet in competition between sublattice exchange and the external magnetic field in the isostructural phase transition is considered;

- the ordering and magnetocaloric effect in van - Fleck paramagnet with spin  $S = 1$  are considered under the condition of competition of exchange, magnetic field and single - ion anisotropy for two temperature limits;

- influence of magnetic field on magnetic ordering and magnetocaloric effect in isotropic ferromagnet with bilinear and four spin isotropic exchange on spin is considered;

- the thermodynamic description of phase transitions in a two-lattice Ising antiferromagnet with a positive anisotropy constant (easy-plane type) from an ion spin  $S = \pm 1$  is considered under the condition of competition of exchange interaction constants, one-ion anisotropy and magnetic field.

**Keywords:** phase transition, quantum phase transition, entropy, single - ion anisotropy, magnetocaloric effect.