Low Temperature Physics/Фізика низьких температур, 2019, т. 45, № 1, с. 111–116

К теории магнитных квантовых фазовых переходов первого рода в ван-флековском изинговском антиферромагнетике

Т.И. Ляшенко[1], В.М. Калита[1,2], В.М. Локтев[1,3]

[1]*Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского» пр. Победы, 37, г. Киев, 03056, Украина*
E-mail: vmkalita@ukr.net

[2]*Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев, 03680, Украина*

[3]*Институт теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова НАН Украины, ул. Метрологическая, 14 б, г. Киев, 03143, Украина*

Статья поступила в редакцию 4 июля 2018 г., после переработки 9 октября 2018 г., опубликована онлайн 26 ноября 2018 г.

Исследованы индуцированные внешним магнитным полем квантовые фазовые переходы в ван-флековском парамагнетике со спином ионов $S = 1$ при конкуренции легкоплоскостной одночастичной анизотропии и изинговских межспиновых взаимодействий. Для описания фазовых превращений использована функция Лагранжа, минимизация которой осуществляется по коэффициентам линейной комбинации спиновых волновых функций, определяющих основное состояние. Показано, что такой подход согласуется с теорией Ландау фазовых переходов I рода. Получено, что переход из ван-флековской парамагнитной (синглетной) фазы в ферромагнитную фазу осуществляется путем образования промежуточного состояния с только одной намагниченной спиновой подрешеткой.

Ключевые слова: магнитный квантовый фазовый переход, магнитная анизотропия, ферро- и антиферромагнетики.

1. Введение

Внешнее магнитное поле в ван-флековском магнетике с равной нулю при температуре $T = 0$ К намагниченностью способно индуцировать упорядоченные ферро- или антиферромагнитные (ФМ и АФМ соответственно) состояния, переходы в которые называются магнитными квантовыми фазовыми переходами (КФП) [1]. Они могут быть непрерывными (II рода, КФП-II) [2–6] или осуществляться скачком (I рода, КФП-I) [2,7–11].

В случае магнитных КФП-I скачок параметра порядка, например намагниченности, может быть равен его предельной величине. Для фазовых переходов I рода (ФП-1), когда параметр порядка может достигать насыщения, если речь идет о КФП, не всегда очевидно определение конкретного вида термодинамического потенциала [12], с помощью которого находят величины критических полей. Кроме этой, существует еще одна особенность магнитных КФП: в теории Ландау на границе устойчивости фазы при ФП-1 происходит непрерывный переход от стабильного неравновесного решения к нестабильному. В квантовой шредингеровской теории получаемые квантовые состояния всегда должны быть стабильными, а неустойчивые образовываться не могут [13].

В работах [8,14–16] границы стабильности фаз (а не поля перехода между ними) для магнитных КФП при $T = 0$ К находили с помощью спектра спиновых возбуждений, для расчета которых использовалась техника Хаббарда (как известно, соответствующие операторы строятся с помощью одночастичных волновых функций, рассчитанных в приближении самосогласованного поля). Однако в этом случае границы стабильности, которые находят исходя из условия равенства нулю мягких мод спектра, не дают чего-либо нового в сравнении с методом среднего поля, так как очевидно, что потеря стабильности в любом случае определяется потерей устойчивости одночастичных состояний — иного этой теорией не предусмотрено [8].

В работах [10,17] для описания магнитных КФП предложен другой способ: использование функции Лагранжа, зависящей от вида волновой функции основного состояния магнитных ионов. Такой подход, как было прямо показано, отвечает теории Ландау, если речь идет об основном состоянии, но формально отличается от нее, поскольку вариационными являются параметры волновой функции, которая должна при этом удовлетворять условию нормировки. Другими словами, речь идет о применении метода Ритца [13] для описания магнитных КФП. В результате удается получить аналитические выражения, которые отвечают термодинамической теории фазовых переходов, чего не содержали более ранние работы [4,18–20].

В работах [4,8–11,18–20] для описания КФП использовали волновую функцию основного состояния, вариационные коэффициенты смешивания в которой записывали через тригонометрические функции, что также позволяет описать магнитные КФП. В этом случае поиск фаз и фазовых переходов осуществляется минимизацией энергии основного состояния по аргументам этих тригонометрических функций. Однако общее правило их выбора не предложено, а их использование усложняет описание, тогда как функция Лагранжа по своему виду оказывается похожей на потенциал Ландау. Заметим, что путь минимизации энергии основного состояния по параметрам волновой функции недавно был использован для нахождения состояний в сильно негейзенберговском магнетике [21].

Ниже для описания КФП в модельной системе спинов с $S = 1$, характеризующейся сильной одноионной анизотропией легкоплоскостного типа, величина которой обеспечивает в качестве основного ненамагниченное ван-флековское состояние, использована функция Лагранжа. Чтобы в такой системе существовали магнитные КФП, необходимо учесть межспиновые взаимодействия. Исключительно из соображений простоты последние выбираются в изинговском виде (см., например, [22,23]), для которых учитываются составляющие, содержащие только перепендикулярные легкой плоскости проекции спинов. Если к такой системе с конкуренцией одночастичных и парных анизотропных взаимодействий приложить магнитное поле, то оно, как показано в [23], способно индуцировать скачки намагниченности. Будет показано, что если такие межспиновые взаимодействия ФМ и АФМ типа, то переход из ван-флековского парамагнитного состояния в ФМ фазу происходит через промежуточное состояние, в котором одна спиновая подрешетка является магнитоупорядоченной, а другая сохраняет парамагнитное состояние.

Следует заметить, что подобная задача рассматривалась также в работе [24], где среди решений допускалось существование стабильной неколлинеарной спиновой конфигурации, для возникновения которой, казалось бы, нет достаточных оснований, хотя переходы I рода также имели место. Наконец, в недавней работе [25], где изучались состояния гамильтониана с одноионной анизотропией и конкурирующим с ней изинговским обменом, упомянутое выше промежуточное состояние было пропущено. Тем не менее в настоящей работе показано, что в случае продольного поля в ван-флековской системе фаза, которая отвечает неколлинеарной структуре, формально возникнуть может, однако она оказывается либо неравновесной, либо неустойчивой.

Таким образом, ниже путем использования функции Лагранжа будут исследованы индуцированные внешним магнитным полем магнитные КФП I рода в ван-флековском АФМ с изинговским обменом.

2. Гамильтониан и функция Лагранжа

Рассмотрим одноосную систему спинов с $S=1$ с одноионной анизотропией легкоплоскостного типа и изинговским обменом. Ось симметрии обозначим Z, а магнитное поле направим вдоль нее, $\mathbf{H} \parallel Z$. Гамильтониан такой системы имеет вид [23]

$$H=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta} J_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta} S^{(z)}_{\mathbf{n}_\alpha} S^{(z)}_{\mathbf{m}_\beta} + D\sum_{\mathbf{n}_\alpha}(S^{(z)}_{\mathbf{n}_\alpha})^2 - H_z\sum_{\mathbf{n}_\alpha} S^{(z)}_{\mathbf{n}_\alpha}, \tag{1}$$

где α, β = 1, 2 — номера подрешеток, $\mathbf{n}_\alpha$, $\mathbf{m}_\beta$ — векторы позиций спинов, константа изинговского обмена $J_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta} > 0$ $(\alpha \neq \beta)$ и $J_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta} < 0$ $(\alpha = \beta)$, величина константы одночастичной анизотропии $D > 0$, H_z — проекция магнитного поля.

Энергию основного состояния системы в пересчете на одну ячейку можно легко рассчитать:

$$E=-\frac{1}{2}J_{11}(s_{1z}^2+s_{2z}^2)+J_{12}s_{1z}s_{2z}+D(q_{1z}+q_{2z})-$$

$$-H_z(s_{1z}+s_{2z}), \tag{2}$$

где s_{1z}, s_{2z} — средние величины операторов z-проекций спинов в первой и второй подрешетках, q_{1z}, q_{2z} — средние величины операторов квадратов z-проекций (квадрупольных моментов) спинов в этих подрешетках. Константы J_{11}, J_{12} для случая приближения ближайших соседей определяются произведениями констант обмена на число ближайших соседей $J_{11}=-J_{\mathbf{n}_1\mathbf{m}_1}z_{11}$, $J_{12}=J_{\mathbf{n}_\alpha\mathbf{m}_\beta}z_{12}$. Магнитное поле и другие параметры в (2) предполагаются записанными в энергетических единицах.

Средние величины в (2) рассчитываются с помощью волновой функции основного состояния, которую в приближении эквивалентных состояний каждого из спинов в своей подрешетке, можно записать в виде линейной комбинации

$$\psi=\sum_{m_j} C_{\alpha m_j}\left|m_j\right\rangle, \tag{3}$$

где числа m_j принимают значения 0, ± 1, а коэффициенты $C_{\alpha m_j}$ для каждой $\alpha = 1, 2$ нормированы:

$$\sum_{m_j} C^2_{\alpha m_j} = 1 .$$

С помощью (3) найдем средние, которые входят в выражение (2):

$$s_{\alpha z} = C_{\alpha 1}{}^2 - C_{\alpha -1}{}^2 , \qquad q_{\alpha z} = C_{\alpha 1}{}^2 + C_{\alpha -1}{}^2 . \quad (4)$$

Поскольку в основном состоянии энергия (2) должна быть минимальной, коэффициенты $C_{\alpha m_j}$ должны находиться из этого условия. Вследствие нормировки нужно иметь в виду, что речь идет об условном экстремуме энергии (2), который можно исследовать с помощью функции Лагранжа. Выражение для нее имеет стандартный вид:

$$L = -\frac{1}{2} J_{11}((C^2_{11} - C^2_{1-1})^2 + (C^2_{21} - C^2_{2-1})^2) +$$

$$+ J_{12}(C^2_{11} - C^2_{1-1})(C^2_{21} - C^2_{2-1}) + D(C^2_{11} + C^2_{1-1} +$$

$$+ C^2_{21} + C^2_{2-1}) - H_z(C^2_{11} - C^2_{1-1} + C^2_{21} - C^2_{2-1}) +$$

$$+ \lambda_1(1 - (C^2_{11} + C^2_{10} + C^2_{1-1})) + \lambda_2(1 - (C^2_{21} + C^2_{20} + C^2_{2-1})) , \quad (5)$$

где λ_1, λ_2 — множители Лагранжа.

Для поиска минимума энергии (2) с помощью функции (5) необходимо в итоге исследовать систему из 8-ми алгебраических уравнений, которые можно рассматривать как аналогичные уравнениям состояния в теории Ландау: шесть из них — уравнения $\partial L / \partial C_{\alpha m_j} = 0$ и два — условия нормировки.

3. Магнитные состояния

Анализируя уравнения состояния, которые вследствие их громоздкости не приводим, обсудим решения, которые отвечают разным состояниям, и выпишем критические поля их устойчивости.

I. *Ван-флековское* состояние, в котором $s_{1z} = 0$, $s_{2z} = 0$. В нем ненулевыми являются только два параметра волновой функции $C_{10} = C_{20} = 1$. С помощью гессиана найдем, что границей стабильности этого состояния будет точка $H^{(1)}_{\text{cr}} = D$.

II. *Промежуточное состояние*, в котором одна подрешетка намагничена $s_{1z} = 1$, а вторая остается в ван-флековском парамагнитном состоянии $s_{2z} = 0$. В этом состоянии ненулевых коэффициентов также два, но $C_{11} = C_{20} = 1$. Границы стабильности этого состояния по полю $H^{(2)}_{\text{cr}} = -J_{11} + D$ и $H^{(3)}_{\text{cr}} = J_{12} + D$.

III. *ФМ состояние* с $s_{1z} = 1$, $s_{2z} = 1$. Ему отвечают ненулевые коэффициенты $C_{11} = C_{21} = 1$. Полем стабильности этого состояния будет критическая точка $H^{(4)}_{\text{cr}} = -J_{11} + J_{12} + D$.

IV. *Состояние с сокращенной z-проекцией первой подрешетки*, в котором конечными оказываются коэффициенты и

$$C^2_{11} = \frac{D - H_Z}{J_{11}} , \quad C^2_{10} = 1 - \frac{D - H_Z}{J_{11}} , \; C_{2-1} = 1 . \quad (6)$$

Из (6) нетрудно установить, что

$$s_{1z} = C^2_{11} = (D - H_Z)/J_{11} ,$$

$$s_{1x} = \sqrt{2} C_{11} C_{10} = \sqrt{2}(D - H_Z)\left(1 - \frac{D - H_Z}{J_{11}}\right) / J_{11} ,$$

а величина квадрата модуля среднего спина меньше единицы и равна

$$s^2_{1z} + s^2_{1x} = (D - H_Z)^2 \left(1 + 2\left(1 - \frac{D - H_Z}{J_{11}}\right)^2\right) / J^2_{11} .$$

Такое решение существует в интервале полей [$H^{(2)}_{\text{cr}}$, $H^{(1)}_{\text{cr}}$]. При этом производная $\partial s_{1z} / \partial H_z < 0$ и, следовательно, это состояние нестабильно.

V. *Состояние с сокращенными z-проекциями обеих подрешеток*, в котором четыре коэффициента конечны: $C_{11} \neq 0$, $C_{10} \neq 0$, $C_{21} \neq 0$, $C_{20} \neq 0$. В нем *z*-проекции спинов $s_{1z} = s_{2z} = C^2_{11} = C^2_{21} = (D - H_Z)/(J_{11} - J_{12}) < 1$. В этом состоянии ненулевыми также являются *x*-проекции среднего спина. Когда они имеют противоположные знаки, такое состояние подобно неколлинеарной АФМ фазе. Границы существования этого решения определяются полями $H^{(1)}_{\text{cr}}$, $H^{(4)}_{\text{cr}}$, а производные $\partial s_{1z} / \partial H_z = \partial s_{2z} / \partial H_z = -(J_{11} - J_{12})^{-1}$ могут быть как отрицательными, так и положительными.

VI. *Состояние с сокращенной z-проекцией второй подрешетки*, в котором $C_{11} = 1$, $C_{21} \neq 0, C_{20} \neq 0$. В нем намагниченность первой подрешетки насыщена $s_{1z} = C^2_{11} = 1$, а второй зависит от поля $s_{2z} = C^2_{21} = (D + J_{12} - H_Z)/J_{11}$ и, соответственно, $s_{2x} \neq 0$. Границы существования этого решения определяются полями $H^{(3)}_{\text{cr}}, H^{(4)}_{\text{cr}}$. Видно, что производная $\partial s_{2z} / \partial H_Z < 0$, следовательно, это состояние также неустойчиво.

Отметим, что из уравнений состояния можно дополнительно получить решения со смешанными векторами $|1\rangle$ и $|-1\rangle$. Однако такие состояния актуальны для изинговской системы, не имеющей одноионной анизотропии легкоплоскостного типа, при ее перемагничивании с изменением знака магнитного поля. Для исходно ненамагниченного ван-флековского изинговского антиферромагнетика актуальными являются фазовые переходы, которые происходят при намагничивании, а не при изменении знака поля.

Для исследования равновесности полученных решений и для нахождения полей фазовых переходов необходимо исследовать, как энергия (2) зависит от величины магнитного поля H_Z.

4. Фазовые переходы и намагничивание

Как известно, равновесными являются состояния с наименьшей энергией, причем в точках фазовых переходов энергии разных фаз становятся равными. На рис. 1 показана полевая зависимость энергии (2), включая состояния I–VI, нормированная на константу D, и полевая зависимость намагниченности $m = (s_{1z} + s_{2z})/2$ этих состояний для численных значений: $J_{11}/D = 0,5$, $J_{12}/D = 0,8$. На рис. 1(а) видно, что состояние I равновесно до поля H_{I}, состояние II — в интервале полей $[H_{\mathrm{I}}, H_{\mathrm{II}}]$, а состояние III — в полях $H_Z > H_{\mathrm{II}}$. Для выбранных значений параметров в намагниченности присутствуют два гистерезиса, которые на рис. 2(б) обозначены пунктирными линиями со стрелками. Кривая равновесного намагничивания обозначена сплошной линией. На этом рисунке пунктиром показана зависимость намагниченности состояния V. Магнитная восприимчивость в этом состоянии положительная. С учетом рис. 1(а) приходим к выводу, что состояние V формально стабильно, но неравновесно, так как его энергия не является наименьшей.

С помощью решения V гипотетически можно осуществить непрерывный переход из ван-флековского парамагнитного состояния в ФМ состояние. В этом случае между этими состояниями могла бы существовать неколлинеарная АФМ фаза с решением V. Такое состояние, в принципе, может наблюдаться в системах с преобладающим изотропным межспиновым обменом [4]. Для систем с преимущественным изинговским взаимодействием (1) между ван-флековской и ФМ фазами устойчивой будет промежуточная фаза с только одной намагниченной подрешеткой.

На рис. 2 приведены полевые зависимости энергии и намагниченности для случая $J_{11}/D = 0,7$, $J_{12}/D = 0,4$, когда обмен внутри подрешеток возрос, а межподрешеточный стал слабее. При этих значениях параметров критическое поле $H_{\mathrm{cr}}^{(4)} < H_{\mathrm{cr}}^{(1)}$ и эти поля находятся внутри интервала $[H_{\mathrm{I}}, H_{\mathrm{II}}]$. Это приводит к тому, что гистерезисы в полевой зависимости для намагниченности перекрываются.

На рис. 2 намагниченность состояния V имеет отрицательную восприимчивость, поэтому для параметров

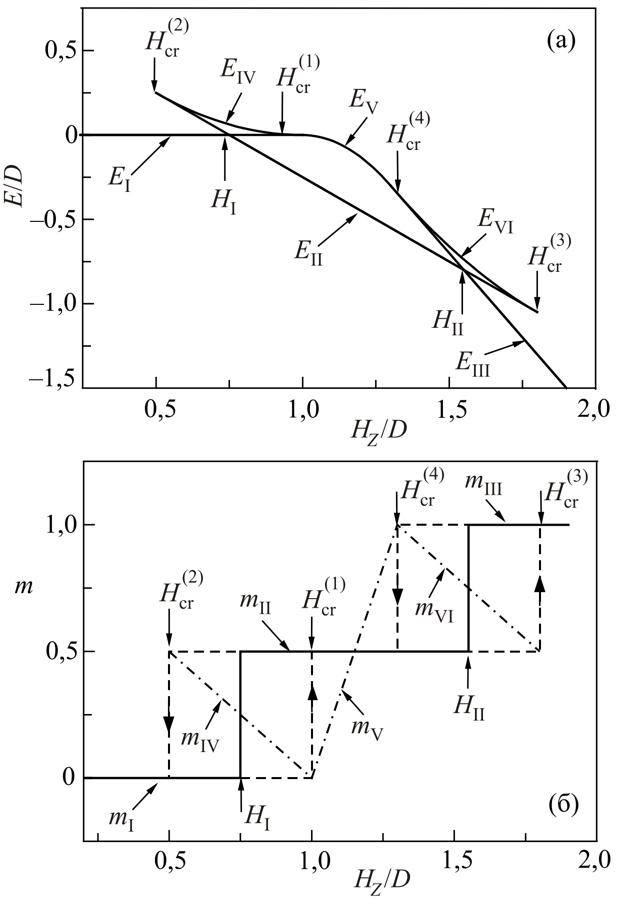

Рис. 1. Полевые зависимости энергии состояний E_{I}–E_{VI} (а) и их намагниченности m_{I}–m_{VI} (б) для параметров модели $J_{11}/D = 0,5$, $J_{12}/D = 0,8$. Энергии состояний и поле H_Z нормированы на константу анизотропии D. Равновесное намагничивание обозначено сплошной линией, а гистерезисы — пунктиром.

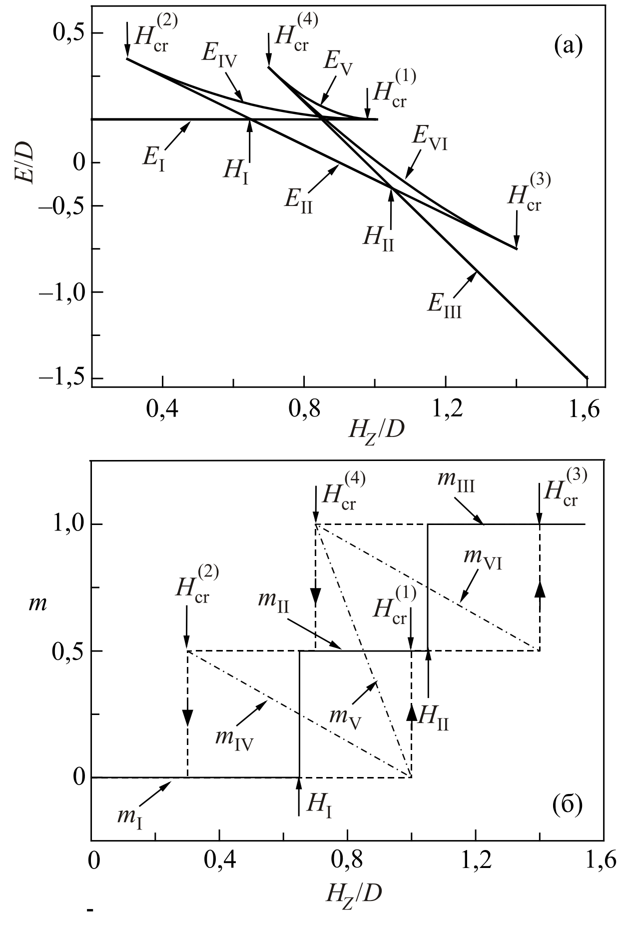

Рис. 2. Полевые зависимости энергии состояний E/D (а) и их намагниченности m (б) для параметров модели $J_{11}/D = 0,7$, $J_{12}/D = 0,4$. Равновесное намагничивание обозначено сплошной линией, петли гистерезиса — пунктиром.

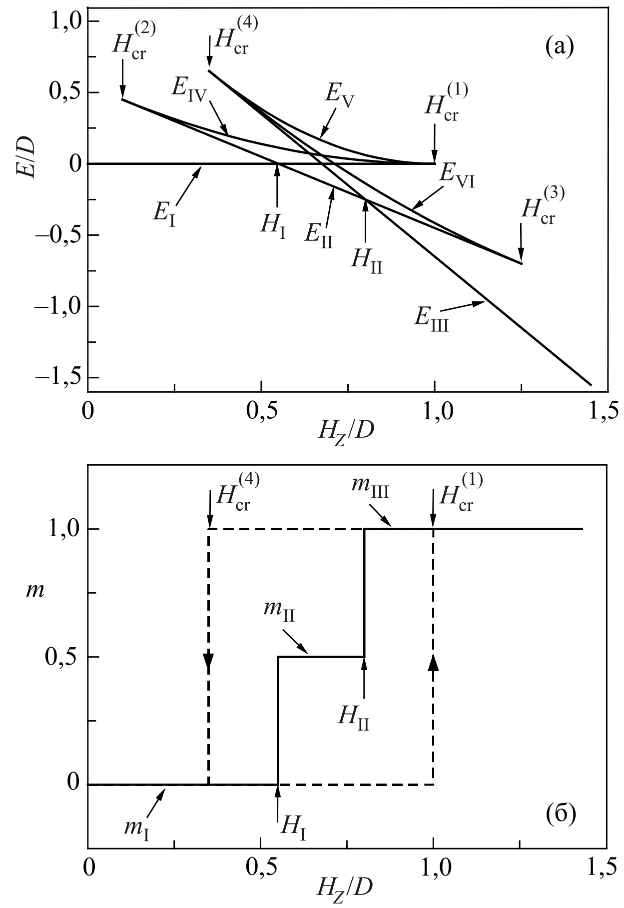

Рис. 3. Полевые зависимости энергии состояний E/D (а) и их намагниченности m (б) для параметров модели J_{11}/D = 0,9, J_{12}/D = 0,25. Равновесное намагничивание обозначено сплошной линией, гистерезис — пунктиром.

изинговских межспиновых взаимодействий, когда $H_{\rm cr}^{(4)} < H_{\rm cr}^{(1)}$, состояние V превращается в нестабильное.

На рис. 3 показан ход полевых зависимостей энергии и намагниченности для случая, когда J_{11}/D = 0,9, J_{12}/D = 0,25, межподрешеточный обмен становится еще меньше. При этих значениях параметров точки фазовых превращений $H_{\rm I}$ и $H_{\rm II}$ лежат между критическими полями $H_{\rm cr}^{(4)}$ и $H_{\rm cr}^{(1)}$. Теперь равновесное намагничивание имеет два скачка с одной петлей гистерезиса (общей для двух фазовых превращений), который подобен гистерезису негейзенберговского ферромагнетика [26] при температурах выше точки Кюри.

5. Заключение

Проведено описание магнитных квантовых фазовых переходов, индуцированных внешним магнитным полем, в двухподрешеточной спиновой системе с легкоплоскостной одночастичной анизотропией, которая конкурирует с изинговскими межспиновыми взаимодействиями. Показано, что использование функции Лагранжа с вариационными параметрами волновой функции основного состояния системы сводит описание таких переходов к виду, подобному теории фазовых переходов Ландау. Как и в этой теории, удается установить, что устойчивые решения сосуществуют с неустойчивыми (например, на рис. 1(б) состояния с $m_{\rm I}$ и $m_{\rm II}$ разделены неустойчивым решением $m_{\rm IV}$). Получено также, что полевые зависимости для намагниченности при КФП при T = 0 К имеют зависимость от магнитного поля, которая отвечает s-подобному ходу намагниченности при ФП-1 в теории Ландау. В волновых функциях состояний нестабильных решений смешаны функции спиновых состояний $|1\rangle$ и $|0\rangle$. В квантовой (шредингеровской) задаче такое смешение для рассматриваемой системы невозможно.

Попутно решена задача нахождения критических полей устойчивости фаз и точек КФП переходов между ними. Продемонстрировано, что, когда межподрешеточные взаимодействия сильнее внутриподрешеточных, переход из основного ван-флековского состояния в ФМ происходит с образованием промежуточного состояния, в котором намагниченной оказывается только одна из двух подрешеток. При этом переход из ван-флековского состояния в промежуточное является переходом I рода, как и переход из последнего в ФМ состояние. На кривой намагничивания этим переходам отвечают две петли гистерезиса. При уменьшении величины параметра межподрешеточного заимодействия эти петли начинают перекрываться. При малой величине межподрешеточного взаимодействия гистерезис перемагничивания может иметь только одну петлю, как у ФМ.

В целом можно надеяться, что предложенный подход может оказаться успешным и при описании КФП в других магнетиках, а также может быть обобщен на случаи величин спинов, больших единицы.

Работа В.М.Л. частично поддерживается Программой фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии Национальной академии наук Украины (гранты № 0117U000236 и № 0117U000240).

1. S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, John Wiley & Sons, Ltd. (2007).
2. E.M. Chudnovsky and D.A. Garanin, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4469 (1997).
3. Ch. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, H.-U. Güdel, K. Krämer, H. Mutka, A. Wildes, K. Habicht, and P. Vorderwisch, *Nature* **423**, 62 (2003).
4. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *JETP Lett*. **93**, 592 (2011).
5. R. Yu, L. Yin, N.S. Sullivan, J.S. Xia, C. Huan, A. Paduan-Filho, N.F. Oliveira Jr, S. Haas, A. Steppke, C.F. Miclea, F. Weickert, R. Movshovich, E.-D. Mun, B.L. Scott, V.S. Zapf, and T. Roscilde, *Nature* **489**, 379 (2012).
6. A. Zheludev, S.M. Shapiro, Z. Honda, K. Katsumata, B. Grenier, E. Ressouche, L.-P. Regnault, Y. Chen,

P. Vorderwisch, H.-J. Mikeska, and A.K. Kolezhuk, *Phys. Rev. B* **69**, 054414 (2004).
7. C. Pfleiderer, G.J. McMullan, S.R. Julian, and G.G. Lonzarich, *Phys. Rev. B* **55**, 8330 (1997).
8. В.М. Локтев, В.С. Островский, *ФНТ* **20**, 983 (1994) [*Low Temp. Phys.* **20**, 775 (1994)].
9. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФНТ* **32**, 317 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 236 (2006)].
10. G.Yu. Lavanov, V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, *J. Magn. Magn. Mater.* **416**, 466 (2016).
11. A. Kolezhuk, R. Roth, and U. Schollwöck, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5142 (1996).
12. E.I. Kut'in, V.L. Lorman, and S.V. Pavlov, *Sov. Phys. Uspekhi* **34**, 497 (1991).
13. A.S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Oxford Pergamon Press (1965).
14. V.V. Val'kov, T.A. Val'kova, and S.G. Ovchinnikov, *JETP* **61**, 323 (1985).
15. V.S. Ostrovskii, *JETP* **64**, 999 (1986).
16. Yu.N. Mitsai and Yu.A. Fridman, *Theor. Math. Phys.* **81**, 1194 (1989).
17. Т.И. Ляшенко, В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФНТ* **43**, 1243 (2017) [*Low Temp. Phys.* **43**, 1002 (2017)].
18. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *Phys. Solid State* **45**, 1523 (2003).
19. V.M. Kalita and V.M. Loktev, *JETP Lett.* **91**, 183 (2010).
20. V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, *Theor. Math. Phys.* **173**, 1620 (2012).
21. О.А. Космачев, Ю.А. Фридман, Б.А. Иванов, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 444 (2017).
22. V.M. Kalita, G.Y. Lavanov, and V.M. Loktev, *Phys. Solid State* **50**, 295 (2008).
23. В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФНТ* **31**, 815 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 619 (2005)].
24. Ph.N. Klevets, O.A. Kosmachev, and Yu.A. Fridman, *J. Magn. Magn. Mater.* **330**, 91 (2013).
25. A.G. Meleshko, P.N. Klevets, G.A. Gorelikov, O.A. Kosmachev, and Y.A. Fridman, *Phys. Solid State* **59**, 1739 (2017).
26. Г.Ю. Лаванов, В.М. Калита, В.М. Локтев, *ФНТ* **44**, 424 (2018) [*Low Temp. Phys.* **44**, 322 (2018)].

До теорії магнітних квантових фазових переходів першого роду в ван-флеківському ізінгівському антиферомагнетику

Т.І. Ляшенко, В.М. Калита, В.М. Локтєв

Досліджено індуковані зовнішнім магнітним полем квантові фазові переходи у ван-флеківському парамагнетику зі спінами іонів $S = 1$ при конкуренції легкоплощинної одноіонної анізотропії та ізінгівських міжспінових взаємодій. Для опису фазових перетворень використано функцію Лагранжа, мінімізація якої здійснюється по коефіцієнтах лінійної комбінації спінових хвильових функцій основного стану. Показано, що такий підхід узгоджується з теорією Ландау фазових переходів I роду. Отримано, що перехід від ван-флеківської (синглетної) парамагнітної фази до феромагнітної фази здійснюється шляхом утворення проміжного стану з тільки однією намагніченою спіновою підграткою.

Ключові слова: магнітний квантовий фазовий перехід, магнітна анізотропія, феро- та антиферомагнетики.

On the theory of the magnetic quantum phase transitions of the 1st kind in van Vleck Ising antiferromagnet

T.I. Lyashenko, V.M. Kalita, and V.M. Loktev

Quantum phase transitions induced by an external magnetic field in a Van Vleck paramagnet with ion spin $S = 1$ and competition of an easy-plane one-particle anisotropy and Ising spin-spin interactions are investigated. To describe the phase transformations we use the Lagrange function, whose minimization is performed by the coefficients of a linear combination of the spin wave functions that determine the magnet ground state. It is shown that such an approach agrees with the Landau theory of phase transitions of the 1st kind. It is obtained that the transition from the Van Vleck paramagnetic (singlet) phase to the ferromagnetic one is realized by forming an intermediate state with only one magnetized spin sublattice.

Keywords: magnetic quantum phase transition, magnetic anisotropy, ferro- and antiferromagnetics.