

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
КРЫМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. В.И. ВЕРНАДСКОГО

На правах рукописи

Космачев Олег Александрович

**СПИНОВЫЕ НЕМАТИКИ И
СИЛЬНОАНИЗОТРОПНЫЕ МАГНЕТИКИ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант:
Фридман Юрий Анатольевич,
доктор физико-математических наук,
профессор

СИМФЕРОПОЛЬ – 2020

Оглавление

Введение.....	6
Раздел 1. Сверхтвердая магнитная фаза в антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией.....	36
1.1. Сверхтвердая магнитная фаза в легкоплоскостном сильно анизотропном антиферромагнетике с $S = 1$	39
1.1.1. Случай «продольного» внешнего поля.....	39
1.1.2. Случай «поперечного» внешнего поля.....	50
1.2. Сверхтвердая магнитная фаза в легкоплоскостном изингоподобном антиферромагнетике.....	58
1.2.1. Случай «продольного» внешнего поля.....	58
1.2.2. Случай «поперечного» внешнего поля.....	67
1.3. Формирование сверхтвердой фазы в анизотропном двумерном антиферромагнетике с изингоподобным взаимодействием	75
1.3.1. Исследования пространственно однородных фаз.....	75
1.3.2. Реализация пространственно неоднородной фазы.....	80
Основные результаты первого раздела.....	88
Раздел 2. Исследование температурной зависимости статических и динамических свойств анизотропных ферримагнетика и ферромагнетика.....	89
2.1. Исследование двухподрешеточного коллинеарного магнетика с нескомпенсированными магнитными моментами подрешеток.....	92
2.1.1. Компенсация магнитных моментов подрешеток в случае низких температур.....	92
2.1.2. Температурная зависимость намагниченностей подрешеток и спектров элементарных возбуждений анизотропного ферримагнетика....	98
2.2. Температурная зависимость намагниченностей подрешеток и спектров элементарных возбуждений анизотропного ферромагнетика с $S=1$	106
Основные результаты второго раздел.....	115
Раздел 3. Негейзенберговские магнетики со спином $S=1, 3/2$ и изотропным обменным взаимодействием.....	116

3.1 Спиновые нематические и ортогонально нематические состояния в изотропном негейзенберговском магнетике с $S=1$	121
3.1.1. Устойчивость фазовых состояний, при различных соотношениях констант обменных интегралов.....	121
3.1.2. Анализ спектров магнонов в окрестности линий фазовых переходов негейзенберговского магнетика.....	127
3.2. Статические и динамические свойства изотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $3/2$	134
3.2.1. Фазовые состояния и анализ плотности свободной энергии.....	134
3.2.2. Анализ спектров возбуждения в ферромагнитной и нематической фазах.....	141
3.3. Двумерные солитоны в нематической фазе изотропных магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$	164
3.3.1. Модель и выбор переменных.....	164
3.3.2. Структура вихрей в континуальном приближении.....	172
3.3.3. Анализ вихрей в дискретной модели.....	177
Основные результаты третьего раздела.....	184
Раздел 4. Особенности статики и динамики анизотропных негейзеберговских магнетиков.....	185
4.1. Анализ фазовых состояний и спектров возбуждения ферромагнетика с биквадратичным обменным взаимодействием и гексагональной одноионной анизотропией.....	189
4.1.1. Решение одноузельной задачи и определение фазовых состояний, реализующихся в системе в случае малой анизотропии.....	189
4.1.2. Спектры возбуждений и фазовые состояния в ферромагнетике с учетом немалой одноионной анизотропии.....	195
4.2. Фазовые состояния негейзенберговского магнетика с обменно-анизотропным взаимодействием.....	202
4.2.1. Анализ спектров возбуждения.....	202
4.2.2. Температурные фазовые переходы	209

4.3. Влияние внешнего поля на фазовые состояния изингоподобного негейзенберговского ферромагнетика.....	218
4.3.1. Анализ свободной энергии и спектров элементарных возбуждений.....	218
4.3.2. Поведение магнетика во внешнем поле.....	230
4.3.3. Влияние температуры на фазовые переходы.....	235
4.4. Фазовые состояния и спектры обменно анизотропного негейзенберговского ферромагнетика.....	239
4.4.1. Ферромагнитное упорядочение и ориентационные фазовые переходы.....	239
4.4.2. Нематическое упорядочение и ориентационные фазовые переходы.....	245
4.4.3. Фазовые переходы по модулю магнитного момента.....	250
4.4.4. «Изингоподобный» негейзенберговский магнетик.....	255
4.5. Двухподрешеточный негейзенберговский магнетик со сложной межионной анизотропией.....	259
4.5.1. Анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений в антиферромагнитных фазах.....	259
4.5.2. Исследования ортогональных квадрупольных фаз.....	265
4.5.3. Фазовые переходы по модулю.....	271
Основные результаты четвертого раздела.....	276
Раздел 5. Динамические и статические свойства изотропного негейзенберговского магнетика с $S=2$	277
5.1. Фазовые состояния, реализующихся в изотропном негейзенберговском магнетике с $S=2$	280
5.1.1. Гамильтониан негейзенберговского магнетика с $S=2$	280
5.1.2. Определение одноподрешеточных фазовых состояний магнетика.....	283
5.1.3. Определение двухподрешеточных фазовых состояний магнетика.....	288

5.2. Дисперсионное уравнение и спектры возбуждения в исследуемых фазах.....	296
5.3. Анализ устойчивости фаз относительно произвольных малых возмущений при различных соотношениях обменных интегралов.....	305
5.3.1. Сечения фазовой диаграммы магнетика с $S=2$ при различных соотношениях констант обменных интегралов и $F>0$	305
5.3.2. Исследование сечений фазовой диаграммы магнетика с $S=2$ при различных соотношениях констант обменных интегралов и $F<0$	310
Основные результаты пятого раздела.....	316
Заключение.....	318
Литература.....	322

Введение

Актуальность темы исследования. Магнетизм обнаруживается во всем окружающем мире: от микроструктурных элементов вещества – электроны, протоны, нейтроны и пр., которые являются элементарными носителями магнитного момента до бескрайних просторов вселенной, пронизанных магнитными полями. Магнетизм можно определить, как особую форму материальных взаимодействий, возникающих между движущимися электрически заряженными частицами [1]. Магнитные свойства присущи всем веществам – внешнее магнитное поле оказывает влияние на орбитальные и спиновые моменты. Всякое вещество, будет реагировать на изменение внешнего магнитного поля. При внесении магнетика во внешнее магнитное поле в результате прецессии атомы приобретают обратный полю магнитный момент – в этом заключается объяснение диамагнетизма. В случае отличного от нуля собственного магнитного (орбитального и/или спинового) момента у атома внешнее магнитное поле будет стремиться ориентировать этот момент вдоль своего направления. В результате возникает суммарный магнитный момент вдоль направления поля, который называют парамагнитным. Однако в некоторых случаях на магнитные свойства вещества может оказывать весьма значительные силы взаимодействия между атомными магнитными моментами, зависящими от взаимной ориентации их моментов. И возникает такая ситуация, в которой оказывается энергетически выгодным становится существование самопроизвольного магнитного порядка (даже в отсутствие внешнего магнитного поля). Такое упорядочение носит название ферромагнитного. Внутренне взаимодействие атомных магнитных моментов может приводить к противоположной ситуации, в которой энергетически выгодным является антипараллельная ориентация атомных моментов – антиферромагнитное упорядочение. Как ферромагнитное, так и антиферромагнитное упорядочение возникают за счет сильного внутреннего взаимодействия. Физическая природа ферромагнетизма может быть объяснена только на основе квантовомеханического подхода. Ферромагнетизм невозможен в классическом

пределе – при стремлении постоянной Планка к нулю [2]. Качественно ферромагнетизм получил свое принципиальное объяснение на основе простой обменной модели с локализованными моментами, в которой энергия кристалла зависит от упорядочения спиновых моментов за счет энергии обмена [3,4] что послужило толчком для построения микроскопической теории магнетизма в основе которой лежала модель Гейзенберга. Но чем больше появлялось результатов исследований, тем яснее становилась недостаточность данной модели для описания реальных задач физики твердого тела. Строго говоря гейзенберговский гамильтониан был получен для системы электронов, частиц со спином $S=1/2$. В теоретических расчетах данная модель используется для расчета систем, полный спин которых может превосходить значение равное $1/2$, например, для атомов с незаполненной d - и f - оболочками. Однако, как показывает опыт, возникает необходимость учета всех высших обменных инвариантов вида $(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^{2S}$, где S – величина спина магнитного иона. Ограничение степеней обменных инвариантов связано с тем, что спиновые операторы степени выше $2S$ выражаются через линейные комбинации спиновых операторов степеней $2S$ и ниже.

Если идти по пути обобщения изотропной модели Гейзенберга, то можно предположить, что кроме модели двухспинового обменного взаимодействия должны существовать и системы с многоспиновым взаимодействием [5,6]. При этом гамильтониан должен оставаться инвариантным относительно поворотов в спиновом пространстве, поэтому в него входят только произведения четного числа спинов, но не выше, чем $4S$: $(\mathbf{S}_{n_1} \mathbf{S}_{n_2}) \dots (\mathbf{S}_{n_{4S-1}} \mathbf{S}_{n_{4S}})$. При этом номера спиновых операторов n_i могут совпадать друг с другом.

Имеется множество моделей [7-10], в которых имеются различные механизмы возникновения слагаемых с обменным взаимодействием сложнее, чем гейзенберговское, делаются оценки обменных интегралов. При этом численные расчеты из первых принципов не всегда дают правильную оценку знака интеграла гейзенберговского взаимодействия. Поэтому с помощью этих

моделей можно получить лишь качественные оценки негейзенберговских слагаемых [11-16]. На самом деле надежную оценку интегралов негейзенберговского обмена можно получить только из сравнения экспериментальных данных с теоретическими моделями. Таким образом, наиболее оптимальное направление теоретических исследований негейзенберговских магнетиков это всестороннее изучение статических и динамических свойств выбранной модели, наиболее подходящей для описания экспериментально обнаруженных данных.

В данной работе основное внимание будет сосредоточено с одной стороны на выявлении новых свойств моделей, с другой стороны – построению общего подхода к исследованию целого класса т.н. негейзенберговских магнетиков с парным взаимодействием. При этом не будет никаких ограничений на соотношения и знак различных материальных параметров рассматриваемых задач. Отдельное внимание будет уделено исследованию магнетиков с одноионной и обменной анизотропией.

На протяжении последних нескольких десятков лет наблюдается устойчивый интерес к изучению новых фазовых состояний спиновых магнетиков, возникающих благодаря учету высших по спинам обменных слагаемых [17-22]. Для них установлена возможность существования магнитных фаз со средним значением спина отличным от нуля, но и фаз с $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, характеризующимися мультипольными параметрами порядка. Состояние спинового нематика может возникать из-за корреляции спинов на различных узлах, такой, что симметрия относительно отражения времени для всей системы не нарушена [18]. Вероятно, такие состояния обнаружены для низкоразмерного магнетика LiCuVO_4 [23,24]. Не менее интересна возможность реализации нематических состояний за счет существования спиновых мультипольных параметров порядка, в которые входят произведения средних значений проекций оператора спина на одном и том же узле. Такой порядок обусловлен нетривиальными средними вида $\langle S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} \dots S_{\alpha_n} \rangle$, для спина S имеет

смысл рассматривать переменные $n \leq 2S$. Здесь $n=1$ соответствует дипольному параметру порядка, то есть среднему значению спина $\langle \mathbf{S} \rangle$, $n=2$ – квадрупольному, $n=3$ – октупольному и т.д. В работе [18] был рассмотрен пример спинового нематика с квадрупольным порядком для системы со спином $S=1$. Проблема спиновых нематиков такого типа одноузельных тесно связана с проблемой квадрупольного упорядочения и специфической квадрупольной динамики, которая достаточно давно обсуждается в литературе [16,17,24-30].

Нематический порядок, связанный с нетривиальными спиновыми мультипольными параметрами порядка на одном узле при $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, являются исключительно квантовым явлением. Его описание связано с выходом за рамки так называемых спиновых когерентных состояний, или когерентных состояний группы Ли $SO(3) \sim SU(2)$ [29,30]. Для этих состояний модуль среднего значения оператора спина всегда отличен от нуля; причем для магнитного иона со спином $S=1/2$ величина $|\langle \mathbf{S} \rangle| = S$. Спиновые когерентные состояния дают точное описание системы для гамильтониана, содержащего только слагаемые, линейные по операторам спина на данном узле, в частности, для обычного билинейного обменного взаимодействия вида $-J(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})$. Для такого гамильтониана в случае, когда начальное состояние является $SU(2)$ – когерентным состоянием, динамика спина определяется системой уравнений Ландау-Лифшица для спинов [29,30]. Поэтому для реализации нематических состояний гамильтониан системы со спином $S=1$ должен, кроме билинейного взаимодействия, включать в себя и высшие по спиновым инвариантам слагаемые. Для изотропной системы со спином $S=1$ необходимо учитывать вклад биквадратичного обменного взаимодействия вида $K(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2$, K – константа биквадратичного обменного взаимодействия [18].

Состояние спинового нематика с $S=1$, в котором параметр дипольного спинового упорядочения равен нулю, $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, характеризуется спонтанным нарушением вращательной симметрии, которое связано с квадрупольными

параметрами порядка $S_{mn} = \langle S_m S_n + S_n S_m \rangle$, $m, n = x, y, z$ [14,31]. Такое упорядочение инвариантно при отражении времени, но для него имеет место спонтанное нарушение симметрии, связанное с квадрупольными средними. В качестве геометрического образа этих средних можно выбрать квадрупольный эллипсоид, то есть эллипсоид с направлениями главных осей, выбранных таким образом, чтобы недиагональные компоненты $\langle S_i S_k + S_k S_i \rangle = 0$ при $i \neq k$, и полуоси которого равны $\langle S_1^2 \rangle, \langle S_2^2 \rangle, \langle S_3^2 \rangle$. При нулевой температуре $T=0$ состояния спина на каждом узле определяется чистыми квантовыми состояниями спина $S=1$, при этом квадрупольный эллипсоид вырождается в плоский диск, $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = 1$, $\langle S_z^2 \rangle = 0$. При температуре, отличной от нуля, но меньшей критической температуры $T < T_C$, величина $0 < \langle S_z^2 \rangle < \langle S_{x,y}^2 \rangle$; при $T > T_C$ восстанавливается вращательная симметрия $S_{ik} = 0$ [17,32,33]. Вопрос о стабильности нематической фазы при выходе за рамки приближения среднего поля в двумерном случае (или в одномерном случае при нулевой температуре) является открытым, см. [20,31,34,35]. Поскольку в силу изотропии спиновых взаимодействий направление оси квантования OZ произвольно, состояние спинового нематика можно описать введением вектора-директора \mathbf{n} , который направлен вдоль оси вращения квадрупольного эллипсоида. Понятно, что состояния с \mathbf{n} и $-\mathbf{n}$ неразличимы, и величина $S_{\alpha\beta}$ соответствует параметру Де Жена, характеризующего жидкие нематические кристаллы [36]. При отрицательных значений обменных интегралов в системе реализуется состояние ортогонального нематика, для которого в двух подрешетках (в случае разбиения на две эквивалентные подрешетки) направления \mathbf{n} ортогональны [19,20,22]. Иногда это состояние трактуется как не полностью упорядоченное (semioordered) [19], хотя устойчивость двухподрешеточной фазы в рамках приближения среднего поля доказана для квадратной решетки [22], а трехподрешеточного – для треугольной решетки [37,38]. Для низкоразмерных

систем вопрос до сих пор открыт; численное моделирование одномерных систем указывает на состояния с тримеризацией [39,40].

Таким образом, результаты исследования модели спинового нематика позволяют сделать вывод, что такие системы обнаруживают ряд новых свойств. Такие состояния на протяжении последних двадцати лет активно изучались в магнетиках [14,15], в том числе в низкоразмерных системах [20,31,34,35]. В последнее время возобновился интерес к исследованию модели спинового нематика в связи с изучением нейтральных ультрахолодных газов атомов щелочных металлов, в частности, конденсацией Бозе-Эйнштейна для таких газов с целым значением спина [41-43]. Поэтому нематические состояния достаточно широко изучены, для них исследованы процессы взаимодействия элементарных возбуждений и процессы релаксации [20,44-46], найдены нелинейные возбуждения – солитоны [47-50]. Получены как одномерные солитоны [47,48], которые похожи на либовские состояния неидеального бозе-газа [51], так и топологические двумерные солитоны [49,50]. Эти солитоны похожи на соответствующие возбуждения в антиферромагнетиках [52,53], но они имеют уникальные свойства около точки перехода нематик-ферромагнетик и в самой этой точке [50].

Вопрос о существовании нематических состояний в системах со спинами $S > 1$ является более сложным, хотя и он изучается достаточно давно [20,54-66]. Наиболее интересной особенностью таких систем является возможность появления нетривиальных корреляторов от нечетного числа спинов (например, трех) [67], которые не инвариантны относительно отражения времени даже при $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$. Хотя обычно спиновыми нематиками называют состояния, инвариантные при замене $t \rightarrow -t$ [18,67], использование термина «спиновый нематик» для таких состояний [20,62] не приведет к недоразумениям. Не менее интересна возможность существования спиновых нематических состояний для систем с полуцелым спином (минимальная величина полуцелого спина, допускающая негейзенберговское взаимодействие и, следовательно, такие состояния, есть $S=3/2$). Такие состояния изучены хуже, хотя этот вопрос имеет

важное значение для исследования физических свойств ферми-газов при сверхнизких температурах, таких как ^{132}Cs , ^9Be , ^{135}Ba со значением спина $S=3/2$ в оптических ловушках [55-58].

Исследование магнетика со спином $S=3/2$ позволило сделать вывод об отсутствии инвариантности относительно отражения времени в нематическом состоянии благодаря нетривиальным свойствам средних от произведения трех спиновых операторов [67]. Благодаря этому для магнетика со спином $S=3/2$ возможно существование антинематической фазы [62,64]. Для системы со спином $S=2$ по сравнению с $S=1$ или $S=3/2$ опять возникает новая физика: получены несколько различных типов нематических состояний [63,65], в том числе и состояние с нарушенной инвариантностью относительно отражения времени.

Интерес к изучению спиновых систем с $S \geq 1$ также связан с описанием бозе-эйнштейновского конденсата в оптических ловушках [59-61]. Теоретически и экспериментально исследуются конденсаты, полученные на ультрахолодных атомах щелочных металлов со спином $S=1$ и $S=2$; также был получен конденсат на атомах Cr со спином $S=3$. Конденсат атомов со спином $S=2$ по сравнению с $S=1$ имеет дополнительный параметр порядка и как следствие – возможность реализации трех типов фазового упорядочения (вместо двух как для случая $S=1$) [59,60,65]. В теоретических работах по исследованию состояний бозе-эйнштейновского конденсата эффективный гамильтониан взаимодействия записывается через операторы проекторов на состояния с общим спином S . Там же указывается возможность написания эффективного гамильтониана в виде ряда по степеням $(S_i S_j)^{2S}$, где S -величина спина магнитного иона.

Как показывают исследования эффективного гамильтониана с $S=2$, состояния, полученные в [63,65], соответствуют одноподрешеточному изотропному магнетику со спином $S=2$ и учетом всех нетривиальных слагаемых спиновых инвариантов [59,60]. Известно, что при отрицательных значениях

констант обменного взаимодействия реализуются двухподрешеточные структуры: антиферромагнитная и ортогонально нематическая фазы для $S=1$ [22] и антиферромагнитная и антинематическая фазы для $S=3/2$ [62,64,66]. Естественно, в магнетике с $S=2$ кроме антиферромагнитной фазы возможно существование большого разнообразия двухподрешеточных нематических фаз различной симметрии [65].

В магнитоупорядоченных веществах на формирование спектральных и термодинамических свойств существенное влияние оказывает магнитная одноионная анизотропия: энергия магнитного иона зависит от ориентации орбитального момента относительно кристаллографических осей, а значит – и от ориентации спина относительно этих осей в результате спин-орбитального взаимодействия [68-70].

Как известно [68,69], в магнитоупорядоченных средах, в которых источником магнетизма является ион металла переходной группы, энергия кристаллического поля преобладает над энергией спин-орбитального взаимодействия. При достаточно низкой симметрии кристаллического поля происходит снятие орбитального вырождения основного состояния, а это приводит к тому, что в первом приближении орбитальный момент равен нулю или, как говорят, замораживается [70].

Несколько иная ситуация имеет место в кристаллах с ионами редкоземельных элементов. Влияние кристаллического поля на неспаренные 4-f электроны экранируется внешней электронной оболочкой, что приводит к слабому расщеплению мультиплета и, соответственно, орбитальное облако является сильно анизотропным. Взаимодействие анизотропного кристаллического поля с орбитальным моментом, вследствие сильной спин-орбитальной связи, приводит к большим величинам констант магнитной одноионной анизотропии, способным конкурировать с константами обменного взаимодействия.

Как отмечено в [70], энергия одноионной анизотропии в соединениях редкоземельных элементов может быть сравнима с энергией обменного

взаимодействия. Это приводит к тому, что в ряде случаев в магнетиках отсутствует ферромагнитное упорядочение даже при очень низких температурах [71-78].

В работе [79] впервые было показано, что в нулевом внешнем магнитном поле наличие одноионной анизотропии, сравнимой либо превосходящей обменное взаимодействие, приводит к тому, что упорядочение дипольных моментов невозможно даже при $T = 0$, однако имеется квадрупольное упорядочение [15,16]. Реализация такого состояния является специфически квантовым эффектом.

Дальнейшие исследования легкоосных ферромагнетиков [80-83] показали, что результаты квантового описания не совпадают с результатами феноменологического подхода. При феноменологическом описании магнитоупорядоченных систем в результате того, что релятивистские взаимодействия заменяются некоторым эффективным полем анизотропии, теряется информация о структуре энергетического спектра магнитного иона; в таком подходе вид энергии магнитной анизотропии не зависит от величины спина магнитного иона и определяется только симметрией кристаллической решетки

Указанные затруднения феноменологического подхода устранимы лишь при построении последовательной микроскопической теории, в которой адекватно учитывались бы релятивистские эффекты, в частности, одноионная анизотропия.

В работах [79-83], в которых строилась такая теория, были получены результаты, качественно не согласующиеся с результатами квазиклассической теории [84], а также микроскопических теорий, в которых одноионная анизотропия учитывается приближенно.

Исследование систем, в которых точно учитывалась одноионная анизотропия, было проведено в [85-88]. В приближении молекулярного поля было показано, что в такой системе возникает чисто квантовый эффект «сокращения спина», заключающийся в уменьшении намагниченности у

ферромагнетиков [88] либо уменьшении намагниченности подрешётки антиферромагнетиков [86,87]. Также найдено основное состояние и спектры возбуждения.

Изучение магнитоупорядоченных систем, в которых константы одноионной анизотропии и обменного взаимодействия сравнимы, проводилось в [27,28,89-96]. В частности, в [28] было показано, что при $T=0$ в отсутствие упорядочения дипольных степеней свободы происходит упорядочение квадрупольных степеней свободы, приводящее к стабилизации квадрупольной фазы. Данное немагнитное состояние принципиально отличается от парамагнитной фазы тем, что включение поперечного магнитного поля не приводит к появлению магнитного момента – квадрупольное упорядочение остаётся устойчивым по отношению к нарастанию внешнего поля до определённой границы.

Конкуренция эффективного поля (внешнее магнитное поле совместно со средним спином) и поля квадрупольных моментов приводит к интересным особенностям в поведении одноосного ферромагнетика, а именно, к полному подавлению каждого из механизмов, влияющих на формирование соответствующих упорядоченных состояний. В зависимости от соотношений внешнего магнитного поля и материальных параметров системы устойчивыми могут быть ферромагнитное состояние, характеризующееся дипольным параметром порядка или квадрупольное состояние, характеризующееся мультипольным параметром порядка.

Исследование негейзенберговских ферромагнетиков при точном учёте одноионной анизотропии показало, что, действуя одновременно, одноионная анизотропия и биквадратичное обменное взаимодействие формируют особенности основного состояния и спектральные характеристики данных систем, а также стимулируют возникновение квадрупольной фазы.

Наряду с исследованием влияния одноионной анизотропии на свойства изотропных спиновых систем с учетом высших инвариантов, представляет интерес исследование обменно-анизотропных моделей. Одна из простых

моделей, содержащая в гамильтониане тензорные взаимодействия – это обобщение модели Изинга с учетом биквадратичного взаимодействия – т.н. модель Блюма-Эмери-Гриффитса [97]. Эта модель была предложена для описания термодинамических свойств смеси He(III) и He(IV) в окрестности критической точки. В работах [98,99] обобщена модель Блюма-Эмери-Гриффитса на негейзенберговские магнетики с $S=1$. Было показано, что учет анизотропного обменного взаимодействия (типа модели Изинга или XY-модели) оказывает существенное влияние обменной анизотропии на динамику системы, а также формирование специфических фазовых состояний.

В работах [100,101] исследовалось влияние как межоионной, так и однооионной анизотропий на свойства негейзенберговских магнетиков. Наиболее полно фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений магнетиков с межоионной анизотропией были рассмотрены в работах [102-104]. В этих работах было показано, что межоионная анизотропия биквадратичного обменного взаимодействия снимает вырождение квадрупольных (нематических) фаз, реализуемых на состояниях $|0\rangle$ и $(|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$. В изотропном негейзенберговском магнетике фазовые состояния, реализуемые на этих состояниях, вырождены. Кроме того, межоионная анизотропия приводит к реализации так называемой угловой нематической фазы, в которой главные оси квадрупольного эллипсоида ориентированы под некоторым углом к оси квантования [102-104]. Необходимо отметить, что анизотропные негейзенберговские магнетики в строгом смысле не являются спиновыми нематиками. Так, большая константа анизотропии (сравнимая с обменным взаимодействием) также приводит к квантовому сокращению спина. Однако для таких фаз симметрия квадрупольных средних иная, чем в изотропных негейзенберговских магнетиках. Именно поэтому анизотропные негейзенберговские магнетики в строгом смысле нельзя считать спиновыми нематиками, а фазы в которых средняя намагниченность на узле равна нулю в таких системах носят название квадрупольных фаз [15].

Рассмотрение дополнительных возможностей симметрии билинейного и биквадратичного обменного взаимодействий, приведет к более разнообразной структуре фазовых состояний, а также динамических свойств системы.

В последнее время, повышенный интерес вызывают исследования магнитных материалов, в которых имеет место конкуренция обменного взаимодействия и одноионной анизотропии. Это связано с поиском необычных упорядочений, реализующихся в магнетиках, теоретическая возможность реализации которых была показана для бозе-газов. В недавней работе [105] сообщалось об обнаружении сверхтвердой фазы ^4He . Хотя позже это открытие было опровергнуто самими авторами [106], работа [105] не только стимулировала разнообразные экспериментальные исследования в этом направлении, но и реанимировала работу по поиску новых квантовых состояний в магнетиках. Аналогом сверхтвердой фазы в Бозе конденсате для спиновых систем является промежуточное состояние между спин-флоп и антиферромагнитной фазой, в котором параметры порядка обеих фаз отличны от нуля, что было теоретически показано еще в 1970 г. [107]. Сорок лет спустя экспериментальные исследования газа рубидия показали, что он может находиться в сверхтвердом состоянии [108]. Следует отметить, что термин «сверхтвердый» описывает не твердое тело, а скорее кристалл, обладающий сверхтекучестью. В данном случае [108] газообразный рубидий распределился по ячейкам периодического поля оптической решетки, то есть атомы были вынуждены образовать кристалл, по сути оставаясь разреженным газом. Помимо газов в оптических решетках сверхтвердую магнитную фазу можно обнаружить и в других квантовых магнетиках [109-112]. После того, как была доказана возможность реализации сверхтвердой фазы в двухподрешеточных спиновых системах [113,114], такие системы стали одними из самых перспективных кандидатов для обнаружения данного состояния [115-119]. К таким системам относится низкоразмерный антиферромагнетик с одноионной анизотропией и спином магнитного иона равным единице, [115]. Магнитными материалами, имеющими подобное строение, могут быть

$\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{HO}(\text{ClO}_4)$ и $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{Ni}(\text{CN})_4$, с анизотропией типа легкой плоскости [120,121]. В данных материалах «сверхтвердое» состояние не реализуется так как одно из условий образования сверхтвердого состояния это наличие большой легкоплоскостной одноионной анизотропии. А данные соединения при температурах меньше температуры Нея, обладая малой анизотропией, спонтанно упорядочены. Магнитные моменты таких систем во внешнем поле ориентируются по направлению поля, и при минимальном значении поля они станут ферромагнитно упорядоченными. Материалами с немалой одноионной анизотропией являются антиферромагнетики CsFeBr_3 и CsFeCl_3 , [122-124]. Квантовые свойства спинов в таких магнетиках играют определяющую роль статики и динамики системы. Во фрустрированных магнетиках также может быть обнаружена «сверхтвердая» магнитная фаза [125,126]. Одним из примеров такой системы может быть антиферромагнетик, в котором обменное взаимодействие в подрешетках отличается от обменного взаимодействия между подрешетками. В работах [114,115,127,128] было показано, что в такой системе могут возникать необычные фазовые состояния: сверхтвердая магнитная фаза, спиновая жидкость, магнитное плато. Так в случае изинговского антиферромагнетика, которому соответствует, например, $\text{NiCl}_2\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ со спином магнитного иона Ni_2 равным единице, могут быть обнаружены указанные фазовые состояния [128]. Однако границы устойчивости фаз, а также род фазового перехода при этом может иметь значительные отличия. Также можно отметить, что величина и вид одноионной анизотропии оказывают существенное влияние на реализацию указанных выше состояний [114,115,126-128]. Необходимо отметить, что в большинстве теоретических исследований, указанных выше, используются численные расчеты, в то время, как подход, предлагаемый нами, подразумевает получение аналитических результатов, которые можно обобщить на различные магнитные материалы с разной структурой. Существует довольно много исследований «сверхтвердого» магнитного состояния в двухподрешеточных антиферромагнетиках с большой легкоплоскостной одноионной анизотропией

в трехмерном случае [108, 114,115,126-131]. В случае пониженной размерности системы (например двумерная) нельзя пренебречь влиянием магнитодипольного взаимодействия, учет которого приводит к усилению одноионной анизотропии и возникновению пространственно-неоднородных фаз, например вихревых структур [132,133] или плоско параллельных доменов [134-136]. Такие состояния реализуются как в ферромагнитных соединениях, так и в антиферромагнитных [137,138].

В последние десятилетия возник новый раздел прикладной и фундаментальной областей физики магнетизма – фемтомагнетизм [139]. В его основе лежит возможность управления магнитным моментом магнетиков при помощи сверхкоротких (фемтосекундных) импульсов лазера [140,141]. Не так давно для ферримагнетика $GdFeCo$, представляющего сплав переходных и редкоземельного металлов, было обнаружено сверхбыстрое (за промежуток времени примерно нескольких пикосекунд) перемагничивание подрешеток под действием импульсов лазера длительностью несколько десятков фемтосекунд [142].

Выводы, которые удалось сделать в результате данной [142] работы оказались достаточно необычными и неожиданными и они соответствуют для ферримагнетиков. В результате исследования получено, что эффект переориентации связан не с поляризацией света, а определяется только мгновенным (но сильным, с температурами больше температуры точки Кюри T_C) нагревом образца. Причина переориентационного эффекта на микроскопическом уровне полностью пока не ясна, хотя различные его аспекты широко обсуждаются в литературе [143-148]. Установлено, что в существовании эффекта определяющую роль играет изменение абсолютных значений магнитных моментов подрешеток $|\vec{M}_{1,2}|$ в температурном интервале, в котором значения $\vec{M}_1(t)$ и $\vec{M}_2(t)$ много меньше по отношению к их максимальных значений[142]. Таким образом, для описания эффекта определяющей является эволюция продольной составляющей магнитных

моментов подрешеток ферромагнетика, так как стандартная спиновая динамика поперечных компонент магнитных моментов (описываемая с помощью уравнения Ландау–Лифшица) не может эффективно проявляться при таких коротких временных промежутках. В связи с этим имеет интерес к анализу магнитно упорядоченных состояний ферромагнетика в области высоких температур близких к температурам Кюри при условии малости значений \vec{M}_1 и \vec{M}_2 .

Использование фемтосекундных лазерных импульсов позволяет возбуждать спиновые колебания с частотами порядка терагерц в прозрачных антиферромагнетиках [140, 149], а также обнаружить сверхбыстрое (за короткий промежуток времени – примерно нескольких пикосекунд) обращение знаков магнитных моментов подрешеток в ферромагнитных сплавах, например, в сплаве GdFeCo [142]. В настоящее время известны следующие способы сверхбыстрой эволюции спиновых моментов: для антиферромагнетиков – обменно-релятивистская, а для ферромагнетиков и ферритов – продольная. В работе [150] установлено, что продольные высокочастотные колебания спинового момента с частотой, определяющейся значением обменного интеграла, реализуются в негейзенберговских магнетиках с учетом квантового эффекта сокращения спина. В недавнем исследовании [151] обнаружено подавление магнитного порядка фемтосекундным импульсом в антиферромагнетике – манганите. Авторы данной работы объясняют данный эффект на основе представлений о связанной динамике орбитальных и спиновых моментов при учете значительного спин-орбитального взаимодействия. Оксид кобальта CoO с не полностью замороженным орбитальным моментом является одним из примеров быстрой динамики спин-орбитальных моментов, в котором получены резонансные магнитные линии в диапазоне частот порядка нескольких ТГц [152,153]. Однако в настоящий момент не существует общей теории, позволяющей описывать спектр резонансных частот, как в ферро-, так и в антиферромагнетиках.

Известно, что учет большой одноионной анизотропии приводит к проявлению квантовых эффектов, невозможных в стандартных феноменологических подходах. Для исследования подобных эффектов необходим учет динамики тензорных параметров порядка, представляющих собой средние от квадратов спиновых операторов, что выходит за границу области применения уравнения Ландау–Лифшица [14,15]. В частности, для магнетика с ферромагнитным взаимодействием эквивалентных спинов и большой одноионной анизотропией показана возможность эффекта квантового сокращения спина, при этом намагниченность меньше номинальной даже при нулевой температуре [154]. Этот эффект возникает при значении спина магнитного иона $S=1$, но в принципе возможен и для магнетиков со спином, $S=2$ [59], а также и для систем с полуцелым значением спина $S=3/2$ [62]. Эффект квантового сокращения спина характерен для магнетиков с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», но не наблюдается в магнетиках с одноионной анизотропией типа «легкая ось», что обусловлено структурой основного состояния [155,156]. Как предельный случай реализации таких эффектов отметим существование так называемых нематических фаз магнетика со средним значением спина равным нулю [59,62,154].

Случай двухподрешеточного ферримагнетика, в котором одна из подрешеток которых – изотропна, а во второй подрешетке учтена большая одноионная анизотропия, важен для экспериментальных исследований [142], но при этом недостаточно изучен. Недавно было получено, что эффект сокращения спина анизотропной подрешетки при низкой температуре значительно уменьшен действием поля обменного взаимодействия изотропной подрешетки [157]. При этом, будет вполне ожидаемо, что в области высоких температурах, когда обменное поле и намагниченность изотропной подрешетки уменьшаются, на магнитные свойства магнетика существенное влияние окажет эффект квантового сокращения средних спинов подрешетки с одноионной анизотропией [158,159]. Знание специфики роли квантового эффекта сокращения спина при температуре отличной от нуля может стать

определяющим при понимании эффекта переориентации магнитных моментов подрешеток в ферромагнетиках, так как основная часть процесса переориентации происходит в отрезок времени, когда температура медленно меняется, и имеет значение порядка T_C .

Одним из наиболее существенных проявлений эффекта квантового сокращения спина является появление дополнительной ветви спиновых колебаний, для которой характерны осцилляции длины вектора намагниченности [12]. В интересующей нас ситуации, когда константа одноионной анизотропии существенно меньше константы обменного взаимодействия, следует ожидать, что частота этой моды будет достаточно высокой. Однако в условиях быстрой эволюции спинового состояния системы, такого типа, как в эксперименте [3], можно надеяться на достаточно активное проявление этой моды. Необходимо отметить, что экспериментально наблюдаемая зависимость намагниченностей подрешеток от времени демонстрирует определенную немонотонность, напоминающую осцилляции с периодом порядка 0,3 пс, на фоне плавного изменения намагниченности, в интервале $0,5 < t < 3$ пс [3]. В то же время данные численного моделирования этого процесса, проведенные в рамках модели, не учитывающей квантового сокращения спина, такого поведения не показывают.

Степень разработанности темы исследования. В течение последних трех десятков лет наблюдается неугасаемый интерес к изучению новых фазовых состояний магнетиков, возникающих благодаря учету высших по спинам обменных слагаемых [14-22, 160-162]. Для них установлена возможность существования как фаз с магнитным порядком, в которых среднее значение спина отлично от нуля, так и фаз, в которых среднее значение спина равно нулю и при этом вращательная симметрия спонтанно нарушена. Для ферромагнетиков со спином магнитного иона равным единице было установлено нематическое спиновое состояние, в котором среднее значением спина магнитного иона равно нулю, спонтанное нарушение симметрии связано с отличными от нуля значениями квадрупольных средних. Также было указано

на возможность существования фаз с так называемым «скрытым порядком», в которых отсутствует магнитный порядок, но чьи свойства не могут быть объяснены в рамках простых нематических фаз.

Вопрос о существовании нематических состояний в системах со спинами $S > 1$ является более сложным, хотя и он изучается достаточно давно [18,54-58,62,64,66,163]. Для изотропного магнетика со спином $S=3/2$ найдены условия существования нематического состояния [20,54]. Установлено, что в нематических фазах имеется нарушение симметрии относительно обращения времени за счет нетривиальных свойств трехспиновых средних [67]. Кроме того для системы со спином $S=3/2$ возможно существование антинематической фазы [62,64].

Системы со спином $S=2$ являются менее изученными. В настоящее время появился определенный интерес к изучению таких систем в связи с исследованием ультрахолодных атомных газов с целым значением спина [59-61, 163-171], особенно с Бозе-Эйнштейновской конденсацией для таких газов в оптических ловушках. Как показывают исследования эффективного гамильтониана с $S=2$, состояния, полученные в [59,60], соответствуют одноподрешеточному изотропному магнетик со спином $S=2$ и учетом всех нетривиальных слагаемых спиновых инвариантов [63,65]. Естественно, в магнетике с $S=2$ кроме одноподрешеточных фаз возможно существование большое разнообразие двухподрешеточных фаз различной симметрии в зависимости от соотношений материальных констант.

Для описания термодинамических свойств смеси ^3He и ^4He в окрестности критической точки была предложена модель, учитывающая в обменном гамильтониане анизотропное тензорное взаимодействие – модель Блюма-Эмери-Гриффитса [97]. Это т.н. решеточная модель и для нее найдены точные решения [172-175]. Естественное обобщение с одной стороны модели с изотропным гамильтонианом учитывающим биквадратичное взаимодействие и модели Блюма-Эмери-Гриффитса – это модель негейзенберговского магнетика со сложной межюнной анизотропией [100-104]. Такое обобщение имеет

оправданный интерес в связи с существенной анизотропией обменного взаимодействия на границе раздела ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочения в слоистых структурах [176-182]. В работах [100-104] исследовалось влияние как межионной, так и одноионной анизотропий на свойства негейзенберговских магнетиков. Показано, в частности, что межионная обменная анизотропия приводит к реализации так называемой угловой нематической фазы, в которой главные оси квадрупольного эллипсоида ориентированы под некоторым углом к оси квантования.

Теоретическое исследование ферромагнетиков с двумя неэквивалентными подрешетками, одна из которых изотропна, а вторая – анизотропна, важно для эксперимента [142], практически не исследовано. Недавно было показано, что эффект сокращения спина анизотропной подрешетки при низкой температуре значительно подавлен действием обменного поля изотропной подрешетки [157]. Знание специфики роли квантового эффекта сокращения спина при температуре отличной от нуля может оказаться определяющим при понимании эффекта переориентации намагниченностей подрешеток в ферромагнетиках.

В настоящее время известно достаточно много исследований «сверхтвердой» магнитной фазы для трехмерных двухподрешеточных антиферромагнетиков с большой легкоплоскостной одноионной анизотропией [126-131,183,184], но без учета магнитодипольного взаимодействия. Магнитодипольное взаимодействие оказывает существенное влияние на свойства не только обычных кристаллов, но и спиновых конденсатов [129]. Такие системы (с существенным магнитодипольным взаимодействием) являются перспективными с точки зрения квантовой обработки информации [185,186] и квантовых вычислений [187].

Объект, предмет, цели и задачи исследования.

Объектом исследования являются: изотропные и анизотропные негейзенберговские магнетики с различным значением спина магнитного иона и учетом полного набора спиновых инвариантов.

Предметом проведенных исследований являются: модельные гамильтонианы, соответствующие объектам исследования; кроме того, к предмету исследования следует отнести изучение фазовых состояний и спектров возбуждения магнитоупорядоченных систем.

Цель диссертационной работы – теоретическое исследование статических и динамических свойств негейзенберговских магнетиков: изотропных и анизотропных с различным видом магнитной анизотропии.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Исследовать особенности устойчивости сверхтвёрдого магнитного состояния в фрустрированном изингоподобном антиферромагнетике со спином $S=1$ и учетом большой одноионной анизотропии типа легкой плоскости во внешнем поле.

2. Исследовать модель двухподрешеточного коллинеарного магнетика с неэквивалентными магнитными моментами подрешеток, при конечных температурах с учетом эффекта квантового сокращения спина.

3. Изучить фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений изотропного негейзенберговского магнетика с $S=1$ при различных соотношениях обменных интегралов.

4. Провести исследование статических и динамических свойства магнетика со спином $S=3/2$ и негейзенберговским изотропным взаимодействием с учетом всех спиновых инвариантов.

5. Изучить топологически устойчивые двумерные солитоны - вихри для состояния спинового нематика; на примере моделей со спином $S = 1$ и $S = 3/2$ выяснить общие закономерности их структуры и динамики.

6. Рассмотреть эффекты связанные с влиянием анизотропии гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий на статику и динамику одно и двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со спином $S=1$.

7. Исследовать влияние межионной и одноионной анизотропий на фазовые переходы ферромагнетика со спином $S=1$ по материальным параметрам системы и температуре.

8. Изучить фазовые состояния и их устойчивость относительно произвольных возмущения для модели изотропного магнетика со спином $S=2$ в приближении среднего поля с взаимодействием ближайших соседей на решетке, допускающей разбиение на две подрешетки.

Научная новизна. Все результаты, полученные в диссертационной работе, являются решением оригинальных научных задач, которые впервые были сформулированы и решены в данной работе, а именно:

1. Исследованы особенности реализации сверхтвердого магнитного состояния во фрустрированном изингоподобном антиферромагнетике со спином $S=1$ и учетом большой одноионной анизотропией типа легкой плоскости во внешнем поле. Впервые показана возможность реализации «сверхтвердой» магнитной фазы в «продольном» внешнем поле. Определено, что «сверхтвердая» магнитная фаза является неустойчивой в исследованной модели в «поперечном» внешнем поле.

2. Выяснена роль квантовых эффектов в простейшей модели анизотропного ферромагнетика при температуре отличной от нуля. Показано, что даже малая одноионной анизотропией (значительно меньшая внутриподрешеточного и межподрешеточного обменного взаимодействия) при высоких температурах приводит к сокращению среднего значения спина ионов анизотропной подрешетки. Также показано, что эффект квантового сокращения спина оказывает существенное влияние не только на статические, но и динамические свойства ферромагнетика.

3. Исследованы все фазовые состояния и спектры элементарных возмущений негейзенберговского магнетика с $S=1$ при различных соотношениях обменных интегралов. Проведенный анализ показал, что в рассматриваемой системе возможна реализация четырех фазовых состояний. Впервые в результате исследования динамики системы показано, что фазовый

переход ферромагнитная фаза – ортогональный нематик и антиферромагнитная фаза - ортогональный нематик являются вырожденными переходом первого рода.

4. Впервые полностью изучены свойства магнетика со спином $S=3/2$ и негейзенберговским изотропным взаимодействием с учетом всех спиновых инвариантов. Показано, что при различных соотношениях материальных констант в исследованной системе будут устойчивыми четыре фазовых состояния: ферро- и антиферромагнитная фазы с максимальным значением среднего спина, и состояния с тензорными параметрами порядка – нематическая и антинематическая фазы.

5. Впервые показано, что для магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$, в которых реализуется состояние спинового нематика, существуют двумерные топологические солитоны – вихри. Обнаружены несколько типов таких вихрей, с сингулярностью в центре и с несингулярным ядром, в котором разрушен нематический порядок. Ядро характеризуется восстановлением магнитного порядка, который может быть ферромагнитным или антиферромагнитным.

6. Исследована модель негейзенберговского ферромагнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий. Учет анизотропных обменных взаимодействий приводит к снятию вырождения по направлению вектора магнитного момента в ферромагнитной фазе и вектора-директора в нематическом состоянии. Показано, что учет анизотропного биквадратичного обменного взаимодействия более сложного вида приводит к реализации угловых ферромагнитной и нематической фаз.

7. Впервые изучены свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий. Анализ динамических и статических свойств системы в случае реализации только тензорных фаз показал, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам. Также показано, что фазовые переходы сопровождающиеся изменением модуля намагниченности могут быть как первого так и второго рода.

8. Впервые проведен полный анализ фазовых состояний и спектров элементарных возбуждений негеизенберговского изотропного магнетика с значением спина $S=2$, с возможностью разбиения на две подрешетки. Этот анализ позволяет утверждать, что учет высших спиновых инвариантов является существенным, и приводит к возникновению магнитоупорядоченных состояний с более сложной структурой, нежели ферро- или антиферромагнитная.

9. Определены конфигурации всех нематических состояний, как в случае одноподрешеточного магнетика, так и в случае разбиения магнетика на две подрешетки. Кроме того, исследованы фазы характеризуется высшими мультипольными моментами: тетраэдрическая и анти тетраэдрическая фазы. Определено, что такие состояния характеризуются значением псевдоспина, параметром порядка, который при преобразовании времени $t \rightarrow -t$ поворачивается как вектор истинного спина.

10. В результате анализа свободной энергии было впервые установлено, что в магнетике с $S=2$ могут реализовываться двухподрешеточные структуры с неэквивалентными подрешетками. Эти фазы характеризуются насыщенным значением среднего спина одной из подрешеток и ненасыщенностью среднего спина второй подрешетки. Причем, направления магнитных моментов подрешеток либо коллинеарны, либо антиколлинеарны.

Научная и практическая значимость результатов работы. В данной работе исследованы свойства различных магнитоупорядоченных систем, изучение которых на сегодняшний день является актуальным в связи с получением систем, в которых могут существовать разнообразные типы фазовых упорядочений: «сверхтвердая» фаза, магнитные плато, спиновая жидкость и т.п. Некоторые результаты, полученные в настоящей работе, качественно согласуются с недавними экспериментальными наблюдениями и могут использоваться для объяснения экспериментальных результатов. Исследование эффектов квантового сокращения спина в ферримагнетиках при температурах отличных от нуля является актуальным в связи с обнаружением в ферримагнитном сплаве переходных и редкоземельного металлов $GdFeCo$

сверхбыстрый переворот магнитных моментов подрешеток при воздействии импульса лазера длительностью порядка нескольких десятков фемтосекунд.

Интерес к исследованию свойств изотропных негејзенберговских магнетиков с различным значением спина магнитного иона связан с появлением целого ряда экспериментальных и теоретических работ по исследованию ультрахолодных атомных газов с целым и полуцелым значением спина, и получением Бозе-Эйнштейновского конденсата для газов щелочных металлов в оптических ловушках.

Методология и методы исследования. В теоретическом исследовании использовался метод унитарных преобразований и диаграммная техника для операторов Хаббарда, которые позволяют адекватно описывать систему с многокомпонентным параметром порядка, в частности, когда средние значения спина на узле не сохраняются. Применение диаграммной техники для операторов Хаббарда позволило разработать регулярную процедуру вычисления термодинамических и спектральных свойств одно- и двухподрешеточных магнетиков с произвольным видом релятивистских взаимодействий. Системы с парным взаимодействием в представлении хаббардовских операторов имеют одну и тот же вид, что целесообразно при развитии общего подхода. Практически все результаты исследования являются решениями, полученными в аналитическом виде, и можно провести сравнение с известными результатами разных авторов, полученными, как в результате экспериментальных исследований, так численного анализа. В части исследований использовались несложные численные расчеты и простой численный анализ найденных аналитических результатов.

Положения, выносимые на защиту:

- Особенности образования «сверхтвердого» магнитного состояния во фрустрированном изингоподобном антиферромагнетике со спином $S=1$ и учетом большой одноионной анизотропией типа легкой плоскости во внешнем поле.

- Влияние большой одноионной анизотропии в области высоких температур, приводящий к существенной редукции спина анизотропной подрешетки.
- Фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений негейзенберговского магнетика с $S=1$ при различных соотношениях обменных интегралов.
- Особенности формирования фазовых состояний негейзенберговского магнетика со спином $S=3/2$ и изотропным взаимодействием с учетом всех спиновых инвариантов.
- Существование двумерных топологических солитонов в магнетиках со спином $S=1$ и $S=3/2$, которые реализуются в состоянии спинового нематика.
- Эффекты, связанные с анизотропией биквадратичного обменного взаимодействия ферромагнетика со спином $S=1$.
- Свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий.
- Возможность ориентационных фазовых переходов между фазами характеризующимися только тензорными параметрами порядка.
- Влияние симметрии граничащих фаз на тип фазового перехода, сопровождающиеся изменением модуля намагниченности для модели негейзенберговского магнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий.
- Свойства магнитоупорядоченных состояний с более сложной структурой, нежели ферро- или антиферромагнитная в негейзенберговском изотропном магнетике со спином $S=2$, с возможностью разбиения на две подрешетки.
- Возможность реализации двухподрешеточных структур с некомпенсированными средними значениями спинового момента подрешеток в магнетике со спином $S=2$.

Степень достоверности и апробация результатов диссертации. Достоверность полученных в диссертации теоретических результатов обусловлена корректным применением проверенных математических методов и

использованием достоверных физических принципов в качестве основы для исследований. Верификация результатов, полученных в работе, проводилась серией предельных переходов к известным ранее результатам. Результаты, представленные в диссертационной работе, прошли апробацию на 16-ти международных научных конференциях среди широкого круга ученых, специалистов по вопросам физики магнитных явлений и физики конденсированного состояния. Результаты работы докладывались на следующих конференциях:

XIX международная школа-семинар «Новые магнитные материалы микроэлектроники», Москва, Россия, 2004; Euro-Asian symposium “Trends in magnetism”, Krasnoyarsk, Russia, 2004; Statistical Physics 2005: Modern Problem and New Applications. Annual Conference in Ukraine, Lviv, Ukraine, 2005; "Statistical Physics 2006. Condensed Mater Physics: Theory and Applications" (СМРТ 2006), Kharkov, Ukraine, 2006; XX международная школа-семинар «Новые магнитные материалы микроэлектроники» (НМММ-20), Москва, Россия, 2006; International Conference on the Functional Materials, Partanit, Crimea, Ukraine, 2007; Сборник трудов XXI Международной конференции НМММ, Москва, Россия, 2009; Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv, Ukraine, 2009; International Conference «Functional Materials» (ICFM 2009), Partanit, Crimea, Ukraine, 2009; International Conference «Functional Materials», (ICFM -2011), Partanit, Crimea, Ukraine, 2011; International Conference «Functional Materials», (ICFM-2013), Gaspra, Crimea, Ukraine, 2013; «Spin Waves 2015» International Symposium, Ioffe Physical-Technical Institute Saint Petersburg, Russia, 2015; Moscow International Symposium on Magnetism, Moscow, 2018; Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-XXXVII», 2018.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 20 статьях в рецензируемых научных журналах [22,62-65,98,99,102-104,114,130,131,133,156-159,188-191] и в виде тезисов [191-209].

Связь работы с научными программами, планами, темами.

Исследования, составляющие содержание диссертации, выполнялись в рамках конкурсных тем Министерства образования и науки Украины:

- Проект Т. 235/03 «Дальний магнитный порядок и фазовые состояния в двух- и трехмерных негейзенберговских магнетиках» – 2003-2005 гг.
- Проект Т. 250/06 «Исследование влияния релятивистских взаимодействий на свойства магнетиков и магнитных полупроводников» – 2006-2009 гг.
- Проект Т. 269/09 «Переориентационные фазовые переходы и фазовые состояния двумерных и квазидвумерных гейзенберговских и негейзенберговских магнетиков» – 2009-2011 гг.

Часть исследований была выполнена в рамках проекта поддержки молодых ученых Украины – грант Автономной Республики Крым «Влияние сложной одноионной анизотропии на фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений магнитоупорядоченных систем» – 2012 г.

Работа выполнена в рамках следующих программ и грантов Российской Федерации:

- проект РФФИ № 14-42-01527 «Динамика и статика изотропных и анизотропных негейзенберговских магнетиков» – 2014 г.
- проект РФФИ № 15-42-01007 «Сверхтвердое магнитное состояние в 2D негейзенберговских антиферромагнетиках с $S=1$ » – 2015 г.
- проект РФФИ № 16-02-00069 «Линейная и нелинейная динамика негейзенберговских магнетиков» – 2016-2018 гг.
- проект РФФИ № 16-42-910441 «Фазовые состояния анизотропных двухподрешеточных негейзенберговских магнетиков» – 2016 г.
- проект РФФИ № 17-42-92007 «Фазовые состояния негейзенберговских многоподрешеточных магнетиков» – 2017 г.

Личный вклад автора. Основные результаты исследований по материалам диссертационной работы в 20 научных статьях, в которых соискатель брал непосредственное участие на всех этапах проведения исследований: постановке задач, разработке методов расчета, проведения

расчетов и написания статей. Большинство аналитических расчетов было получено лично соискателем.

В работах по исследованию «сверхтвердой» магнитной фазы в изингоподобном антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией [114,130,131,191] автор участвовал в постановке задачи и выполнил часть аналитических расчетов.

В работах по исследованию свойств анизотропного ферримагнетика [157-159] соискатель участвовал в постановке задачи, выполнил аналитические расчеты, целью которых являлось получение и анализ спектров элементарных возбуждений.

В цикле работ по исследованию негейзенберговских магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$ [22,62,64,189,190] автор участвовал в постановке задачи и выполнил аналитические расчеты, в результате которых получены и проанализированы спектры элементарных возбуждений.

В цикле работ по исследованию свойств негейзенберговского магнетика с обменной и одноионной анизотропией [98,99,102-104,108] соискателем сформулирована задача, была обоснована модель и сделана часть аналитических расчетов.

В цикле работ по изучению негейзенберговского магнетика со спином $S=2$ [63,65] соискатель предложил теоретическая модель, а также выполнил некоторый объем аналитических расчетов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 разделов, выводов и списка использованных источников из 299 наименований. Общий объем диссертации составляет 351 страниц текста с 62 рисунками.

Во **Введении** проведен анализ состояния проблемы на сегодняшний день, раскрывается ее значимость; сформулированы цели и поставлены задачи исследований; обсуждается достоверность полученных результатов и область их применения.

В **первом разделе** изучается устойчивость фазовых состояний и спектры возбуждения фрустрированного антиферромагнетика со спином единица, в

котором определяющую роль выполняет одноионная анизотропия типа легкой плоскости. Получено, что в такой системе «сверхтвердая» фаза, будет устойчива в продольном магнитном поле. Кроме того исследуются фазовые переходы в зависимости от направления внешнего поля в изингоподобном антиферромагнетике.

Во **втором разделе** исследуется роль квантовых эффектов простейшей модели анизотропного ферромагнетика и легкоплоскостного ферромагнетика со спином $S=1$ при температуре отличной от нуля. Показывается, что при описании анизотропных ферромагнетиков, в частности высокочастотных мод в таких системах, эффекты квантового сокращения спина могут быть существенны даже при относительно малых (порядка 5–10% от обменного интеграла) значениях константы одноионной анизотропии.

В **третьем разделе** исследуются фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений изотропного негейзенберговского магнетика с $S=1$ и $S=3/2$ с учетом всех спиновых инвариантов. Показывается, что в рассматриваемых системах при различных соотношениях обменных интегралов возможна реализация ферро- и антиферромагнитной фаз с насыщенным значением спина, и состояний с тензорными параметрами порядка – нематического и– ортонематического для магнетика с $S=1$, а для магнетика с $S=3/2$ антинематического. Кроме того, для магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$ обнаруживается несколько типов таких вихрей, с сингулярностью в центре и с несингулярным ядром, в котором разрушается нематический порядок.

В **четвертом разделе** исследуется влияние анизотропии обменного взаимодействия на фазовые состояния негейзенберговского магнетика. Показывается, что учет анизотропного биквадратичного обменного взаимодействия приводит к реализации угловых ферромагнитной и нематической фаз. В результате анализа динамических и статических свойств системы в случае реализации только тензорных фаз показывается, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам, а фазовые переходы сопровождающиеся

изменением модуля намагниченности могут быть как первого так и второго рода.

Пятый раздел посвящен изучению фазовых состояний и их устойчивости относительно произвольных возмущения для модели изотропного магнетика со спином $S=2$ в приближении среднего поля с взаимодействием ближайших соседей на решетке, допускающей разбиение на две подрешетки. Показывается, что учет высших спиновых инвариантов является существенным, и приводит к возникновению магнитоупорядоченных состояний с более сложной структурой, нежели ферро- или антиферромагнитная.

В **Заключении** приведены результаты и основные положения впервые сформулированные и решенные в диссертационном исследовании.

Раздел 1. «Сверхтвердая» магнитная фаза в антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией

В последнее время возрос интерес к изучению антиферромагнетиков в связи с поиском новых состояний, реализация которых в бозе-газе доказана, и такие состояния могут существовать в магнитоупорядоченных системах. В недавней работе [105] сообщалось об обнаружении сверхтвердой фазы ${}^4\text{He}$. В теории магнетизма сверхтвердое состояние можно понимать как промежуточное состояние между антиферромагнитной и спин-флоп фазами, в котором параметры порядка обеих фаз отличны от нуля.

Экспериментальные исследования газа из ионов рубидия, охлажденного до сверхнизких температур, показали, что он может находиться в сверхтвердом состоянии [108]. Термин «сверхтвердый» описывает не твердое тело, а скорее кристалл, обладающий сверхтекучестью. В данном случае [108] газообразный рубидий распределялся по ячейкам периодического поля оптической решетки, т. е. атомы находятся в упорядоченном состоянии, по сути оставаясь разреженным газом. Кроме газов в оптических решетках сверхтвердую магнитную фазу можно обнаружить и в других квантовых магнетитных системах [112,210,211]. Вслед за тем как была доказана возможность существования «сверхтвердой» фазы в антиферромагнитных системах [113,114], такие системы стали одними из перспективных кандидатов для обнаружения данного состояния [115-119,212,213]. К такого рода системам относится низкоразмерный антиферромагнетик с одноионной анизотропией и спином магнитного иона равным единице [115]. Существует некоторое число магнетиков, которые можно отнести к данному классу: например CsNiCl_3 [214] представляющий линейную цепочку, со слабой одноосной анизотропией, а также более сложные материалы, например $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{Ni}(\text{CN}_4)$ и $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{HO}_2(\text{ClO}_4)$, с анизотропией типа легкой плоскости [215,216].

Однако, в указанных материалах сверхтвердая фаза не реализуется, поскольку одно из условий образования сверхтвердого состояния является

существование в системе немалой легкоплоскостной одноионной анизотропии, в то время как указанные материалы являются слабо анизотропными, т. е. при температурах, меньших температуры Нееля, они находятся в спонтанно упорядоченном состоянии. Во внешнем поле магнитные моменты подрешеток в таких системах ориентируются по полю, а при отличных от нуля значениях поля система переходит в ферромагнитное состояние. Материалы, в которых одноионная анизотропия немала – это антиферромагнетики CsFeBr_3 [122,124], RbFeBr_3 [123], в которых при величине псевдоспина иона Fe^{2+} $S = 1$ константа обменного взаимодействия между ближайшими ионами в соседних плоскостях составляет 3-5 К, а константа обменного взаимодействия между ближайшими ионами в плоскости составляет – 0,3-0,4 К, при этом константа одноионной анизотропии достигает 20-30 К [122-124]. Нижайшим состоянием из всех возможных состояний одноузельной задачи является состояние с нулевой проекцией спина $S^z = 0$. В эффективном магнитном поле квантовые свойства спинов в таких магнитных системах имеют определяющую роль при формировании динамических и статических свойств [217,218]. Влияние большой одноионной анизотропией проявляется, в том числе, в квантовом сокращении спина, приводящем к тому, что среднее значение намагниченности на узле равно нулю, и в системе реализуется дальний магнитный порядок тензорного типа — квадрупольная фаза. Кроме того в фрустрированных магнетиках также может быть обнаружена «сверхтвердая» магнитная фаза [125,126].

Одним из примером такой системы является антиферромагнетик, в котором обменное взаимодействие внутри подрешеток отличается от обменного взаимодействия между подрешетками. В работах [114,115,127,128] было показано, что в такой системе могут возникать разнообразные фазовые состояния: сверхтвердая магнитная фаза, спиновая жидкость, магнитное плато. В частном случае изинговского двухподрешеточного антиферромагнетика, например $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$, то все перечисленные фазовые состояния в нем могут быть обнаружены [126,127]. Однако линии устойчивости и тип фазового

перехода могут не совпадать. Кроме того условия существования данных состояний также зависят от вида и значения одноионной анизотропии [115,126-128]. В настоящее время известно достаточно много исследований «сверхтвердой» магнитной фазы для трехмерных двухподрешеточных антиферромагнетиков с большой легкоплоскостной одноионной анизотропией [126-131,184], но без учета магнитодипольного взаимодействия. Магнитодипольное взаимодействие может оказать существенное влияние на свойства не только обычных кристаллов, но и спиновых конденсатов [129]. Такие системы (с существенным магнитодипольным взаимодействием) являются перспективными с точки зрения квантовой обработки информации [185,186] и квантовых вычислений [187].

В **первом** подразделе исследуются фазовые состояния и спектры фрустрированного гейзенберговского антиферромагнетика со спином единица, в котором определяющую роль имеет одноионная анизотропия типа легкой плоскости.

Во **втором** подразделе рассматриваются фазовые переходы в зависимости от ориентации внешнего поля в изингоподобном антиферромагнетике по отношению к плоскости легкого намагничивания.

В **третьем** подразделе исследуются фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений в ультратонкой (двумерной) сильно анизотропной антиферромагнитной пленке со спином единица и фрустрированным изингоподобным обменным взаимодействием.

1.1. «Сверхтвердая» магнитная фаза в легкоплоскостном сильно анизотропном антиферромагнетике с $S = 1$.

1.1.1. Случай «продольного» внешнего поля.

В качестве исследуемой системы будем рассматривать антиферромагнетик с двумя эквивалентными подрешетками. Величина одноионной анизотропии в рассматриваемом магнетике превосходит константу обменного взаимодействия. Спин магнитного иона равен единице $S=1$. Вначале будем рассматривать случай «продольного» внешнего поля поскольку оно коллинеарно оси OZ , в соответствие с работами [219,220], и ортогонального плоскости легкого намагничивания. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n_i, m_j} J_{n_i m_j}^{zz} S_{n_i}^z S_{m_j}^z + \frac{1}{2} \sum_{n_i, m_j} J_{n_i m_j} \vec{S}_{n_i} \vec{S}_{m_j} - H \sum_{n_i} S_{n_i}^z + D \sum_{n_i} (S_{n_i}^z)^2, \quad (1.1)$$

где n, m – номера узлов спинов в подрешетках $i, j = 1, 2$ – номера магнитных подрешеток. $J_{n_1 m_1} = J_{n_2 m_2} = J$ и $J_{n_1 m_1}^{zz} = J_{n_2 m_2}^{zz} = \tilde{J}$ – константы изотропного и анизотропного обменных взаимодействий в подрешетках; при этом $J, \tilde{J} < 0$. $J_{n_1 n_2} = J^{(12)}$ и $J_{n_1 n_2}^{zz} = \tilde{J}^{(12)}$ – константы межподрешеточного изотропного и анизотропного обменных взаимодействий; $J^{(12)}, \tilde{J}^{(12)} > 0$. Константа одноионной анизотропии $D > 0$ – типа «легкой плоскости». Кроме того – $D \gg J, J^{(12)}, \tilde{J}, \tilde{J}^{(12)}$. Исследование системы будем проводить при $T \rightarrow 0$.

Использование техники операторов Хаббарда [221-223] позволяет точно учесть влияние одноионной анизотропии, поскольку в данной задаче представляют интерес эффекты, связанные с немалым значением констант одноионной анизотропии.

Пусть величина внешнего поля такова, что рассматриваемая система будет находиться в состоянии с неколлинеарной ориетацией магнитных моментов в подрешетках и направлены под углами θ и $-\theta$ к оси OZ . Не теряя

общности для простоты вычислений можно предполагать, что магнитные моменты подрешеток лежат в плоскости XOZ. Сделаем поворот вокруг оси OY на угол θ системы координат в первой подрешетке, а во второй – на угол $-\theta$. Тогда направления магнитных моментов подрешеток будут направлены вдоль оси OZ.

Применяя такие преобразования для гамильтониана (1.1), выделяя средние поля в обменных слагаемых, одноузельный гамильтониан примет вид:

$$\begin{aligned} H_{0i} = -D \sum_{i=1,2} \left[\frac{(-1)^i}{2} (S_i^x S_i^z + S_i^z S_i^x) \sin 2\theta - (S_i^z)^2 \cos^2 \theta - (S_i^x)^2 \sin^2 \theta \right] + \\ + \sum_{i=1,2} (H_{zi} S_i^z + H_{xi} S_i^x), \end{aligned} \quad (1.2)$$

где

$$\begin{aligned} H_{zi} = -H \cos \theta + J_0 \langle S_i^z \rangle + \tilde{J}_0 \langle S_i^z \rangle \cos^2 \theta + J_0^{(12)} \langle S_j^z \rangle \cos 2\theta + \tilde{J}_0^{(12)} \langle S_j^z \rangle \cos^2 \theta, \\ H_{xi} = (-1)^i H \cos \theta + (-1)^{i+1} \left(\frac{\tilde{J}_0}{2} \langle S_i^z \rangle + J_0^{(12)} \langle S_j^z \rangle + \frac{\tilde{J}_0^{(12)}}{2} \langle S_j^z \rangle \right) \sin 2\theta, \quad (i \neq j). \end{aligned}$$

Здесь J_0 и \tilde{J}_0 – нулевые фурье-компоненты обменных интегралов. Для решения одноузельной задачи с гамильтонианом (1.2), используем связь спиновых операторов с операторами Хаббарда. Для данной системы эту связь можно представить в виде:

$$S^z = X^{11} - X^{-1-1}, \quad S^+ = \sqrt{2} (X^{10} - X^{0-1}), \quad S^- = (S^+)^{\dagger}. \quad (1.3)$$

Гамильтониан (1.2) в представлении операторов Хаббарда имеет вид:

$$H_{0i} = \sum_M \varepsilon_M^{(i)} H_i^M + \sum_{M \neq M'} V_{MM'}^{(i)} X_i^{M'M}, \quad H_i^M \equiv X_i^{MM}, \quad (1.4)$$

где $\varepsilon_{\pm 1}^{(i)} = \pm H_{zi} + D(1 - \sin^2 \theta_i/2)$, $\varepsilon_0^{(i)} = D \sin^2 \theta_i$, $V_{1-1}^{(i)} = D \sin^2 \theta_i/2$,

$$V_{10}^{(1)} = (H_{x1} + D \sin 2\theta_1/2)/\sqrt{2}, \quad V_{10}^{(2)} = (H_{x2} - D \sin 2\theta_2/2)/\sqrt{2},$$

$$V_{0-1}^{(1)} = (H_{x1} - D \sin 2\theta_1/2)/\sqrt{2}, \quad V_{0-1}^{(2)} = (H_{x2} + D \sin 2\theta_2/2)/\sqrt{2}, \quad V_{MM'} = V_{M'M}.$$

Для диагонализации гамильтониана (1.4) необходимо в каждой подрешетке совершить по три унитарных преобразования

$$\tilde{H}_0 = \sum_{i=1,2} U^{(i)} H_0^{(i)} (U^{(i)})^+ = \sum_{i=1,2} \sum_{M=1,0,-1} E_M^{(i)} X_i^{MM}. \quad (1.5)$$

Здесь $U^{(i)} = U_{1-1}(\alpha_i) U_{10}(\gamma_i) U_{0-1}(\beta_i)$, $U_{kl}(\varphi) = \hat{1} + (\cos \varphi - 1)(X^{kk} + X^{ll}) + \sin \varphi(X^{kl} - X^{lk})$ – операторы унитарных поворотов. Для первой подрешетки спектр собственных значений магнитного иона имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \frac{D}{2} \sin 2\alpha \sin^2 \theta + H_{z1} \cos 2\alpha, \\ E_{0,-1}^{(1)} &= -\frac{1}{2} \left[H_{z1} \cos 2\alpha + D \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \right) + \frac{D}{2} \sin^2 \theta \sin 2\alpha \right] \pm \\ &\pm \left[H_{x1} \cos(\alpha + \pi/4) - \frac{D}{2} \sin 2\theta \sin(\alpha + \pi/4) \right] \sin 2\beta \pm \\ &\pm \left[H_{z1} \cos 2\alpha - D \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \right) + \frac{D}{2} \sin^2 \theta \sin 2\alpha \right] \cos 2\beta. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Энергетические уровни для второй подрешетки аналогичны (1.6) при замене индексов в H_{z1} , H_{x1} с 1 на 2. Не теряя общности параметры γ_i можно положить равными нулю, так являются произвольными. Система уравнений определяющая другие параметры унитарных преобразований имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{D}{2} \sin^2 \theta_i \cos \alpha_i &= H_{zi} \sin \alpha_i, \\ \left[D \left(\frac{3}{2} \sin^2 \theta_i - 1 \right) + H_{zi} \cos 2\alpha_i + \frac{D}{2} \sin^2 \theta_i \sin 2\alpha_i \right] \sin \beta_i &= \\ = \frac{1}{2} \left[H_{xi} \cos(\alpha + \pi/4) - \frac{D}{2} \sin 2\theta_i \sin(\alpha + \pi/4) \right] \cos \beta_i \end{aligned} \quad (1.7)$$

Между параметрами системы и углами поворота в подрешетках имеется связь:

$$D(1 - \tan \alpha_i) \sin 2\theta_i = \pm 2H_{xi} (1 + \tan \alpha_i). \quad (1.8)$$

Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом (1.5), определим его собственные функции

$$\begin{aligned}
|\Psi_1\rangle &= \cos\alpha|1\rangle + \sin\alpha|-1\rangle, \\
|\Psi_0\rangle &= \sin\beta(-\sin\alpha|1\rangle + \cos\alpha|-1\rangle) + \cos\beta|0\rangle, \\
|\Psi_{-1}\rangle &= \cos\beta(-\sin\alpha|1\rangle + \cos\alpha|-1\rangle) - \sin\beta|0\rangle.
\end{aligned} \tag{1.9}$$

В собственном базисе (1.9) связь оператора S^z с операторами Хаббарда можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
S^z &= \cos 2\alpha \tilde{X}^{11} - \cos 2\alpha \cos^2 \beta \tilde{X}^{-1-1} - \cos 2\alpha \sin^2 \beta \tilde{X}^{00} - \\
&\quad - \sin 2\alpha \cos \beta (\tilde{X}^{1-1} + \tilde{X}^{-11}) - \sin 2\alpha \sin \beta (\tilde{X}^{10} + \tilde{X}^{01}) - \\
&\quad - \frac{1}{2} \cos 2\alpha \sin 2\beta (\tilde{X}^{0-1} + \tilde{X}^{-10}).
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Из этой связи следует, что модуль магнитного момента при низких температурах определяется следующим образом:

$$\langle S_i^z \rangle = \cos 2\alpha_i = \frac{DH_{xi} \sin 2\theta_i}{H_{xi}^2 + \frac{D^2}{4} \sin^2 2\theta_i}. \tag{1.11}$$

Из связи соотношений (1.7), (1.8) и (1.11) удается получить связь между углами поворота подрешеток и параметрами унитарного преобразования

$$\cos \theta_i = \frac{H_{zi} \sin\left(\alpha_i + \frac{\pi}{4}\right)}{\left(\tilde{J}_0 + 2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0^{(12)}\right)_i \sin\left(\alpha_i + \frac{\pi}{4}\right) \cos 2\alpha + D \cos\left(\alpha_i + \frac{\pi}{4}\right)}. \tag{1.12}$$

Из анализа выражений (1.11) и (1.12) следует, что в зависимости от соотношения поля H и материальных констант D и J в системе реализуются следующие типы фазовых упорядочений. При большом ($H > D > J$) значении поля система находится в ферромагнитном состоянии, при этом направления магнитных моментов подрешеток ориентрованы вдоль направления внешнего поля $\theta_i = 0$ и имеют насыщенное значение $\langle S_i^z \rangle = 1$. В случае малых значений поля ($H < D$) магнетик ведет себя существенно иначе: углы поворота в подрешетках равны $\pm\pi/2$. В этом состоянии подрешетки не антиферромагнитно упорядочены, так как константы одноионной анизотропии не малы ($D > J$) и начинает проявляться эффект квантового

сокращения спина [32,156]. В итоге, в области малых значений поля магнитные моменты подрешеток обращаются в ноль $\langle S_i^z \rangle = 0$, и имеет место упорядочение квадрупольного $q_2^0 = 3 \langle (S_i^z)^2 \rangle - 2$ параметра порядка [32,156,220]. В области промежуточных значениях поля возникает неколлинеарная фаза, в которой магнитные моменты подрешеток при изменении внешнего поля меняются по направлению и модулю. В этой фазе магнитные моменты определены в интервале $0 < \langle S_i^z \rangle < 1$, $\pm \frac{\pi}{2} < \theta_i < \pi$, а квадрупольный момент лежит в пределах $-2 < q_2^0 < 1$. Данная фаза представляет магнитную «сверхтвердую» (СТ) фазу.

Рассмотрим поведение антиферромагнетика в сверхтвердой фазе. Для этого необходимо исследовать свободную энергию системы. Ограничимся учетом энергии основного уровня энергии E_1 , так как рассматривается случай низких температур. В этом случае свободную энергию можно представить $F = E_1$. Подставляя выражение для E_1 и среднего поля H_{z1} в явном виде, и условие $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$, запишем выражение для свободной энергии

$$F = -H \cos 2\alpha \cos \theta + \frac{1}{2} \left[\left(2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right) \cos^2 \theta + J_0 - J_0^{(12)} \right] \cos^2 2\alpha + \frac{D}{2} \left[\sin 2\alpha + (1 - \sin 2\alpha) \cos^2 \theta \right]. \quad (1.13)$$

Это выражение совпадает с выражением свободной энергии для антиферромагнетика, которое было получено в работах [219,220].

Используя связь (1.12) выражение для свободной энергии (1.13) можно представить в виде:

$$F = -\frac{1}{2} \frac{H^2 \cos^2 2\alpha}{\left(2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right) \cos^2 2\alpha + D(1 - \sin 2\alpha)} + \frac{1}{2} \left(J_0 - J_0^{(12)} \right) \cos^2 2\alpha + \frac{D}{2} \sin 2\alpha. \quad (1.14)$$

Проведем анализ свободной энергии в окрестностях переходов в ферромагнитную и квадрупольную фаз.

С ростом значения магнитного поля магнитные моменты в подрешетках увеличиваются по модулю и стремятся к значению насыщения $\langle S^z \rangle \rightarrow 1$. Соответственно параметр $\alpha \rightarrow 0$ и значит, магнитные моменты в подрешетках изменяется как по направлению так и по модулю. Отсюда следует, что параметром малости удобно выбрать в данном случае величину $\sigma^2 = \sin 2\alpha$. Тогда, вблизи перехода в ферромагнитную фазу свободную энергию можно представить в виде ряда по малому параметру σ :

$$\begin{aligned}
 F = & \frac{D}{2} \left[1 - \frac{H^2}{\left(D + 2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right)^2} \right] \sigma^2 + \\
 & + \frac{1}{2} \left[\frac{H^2 \left[\left(2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right)^2 + D^2 \right]}{\left(D + 2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right)^3} + |J_0| + J_0^{(12)} \right] \sigma^4 - \\
 & - \frac{H^2 \left(2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right)^2}{\left(D + 2J_0^{(12)} + \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} \right)^4} \sigma^6.
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

Из (1.15) можно определить линия устойчивости сверхтвердой фазы:

$$H_{c1} = \tilde{J}_0 + \tilde{J}_0^{(12)} + 2J_0^{(12)} + D. \tag{1.16}$$

Как видно из выражения (1.16), что множители при степенях η^2 и η^4 в области значения полей $H < H_{c1}$ – положительны, а множитель при η^6 – отрицателен для тех же значений поля. Такое поведение свободной энергии в сверхтвердой фазы в окрестности критического поля H_{c1} является свидетельством того, что поле, определяемое из выражения (1.16) представляет собой поле устойчивости сверхтвердой фазы, а переход сверхтвердая ферромагнитная фазы является фазовым переходом I рода [224,225].

Проанализируем окрестность малых значений поля, оставаясь в сверхтвердой фазе. Уменьшение величины поля приводит к уменьшению модулей магнитных моментов в подрешетках, при этом параметр α стремится

к значению $-\pi/4$, а углы θ_i стремятся к $\pm\pi/2$. Тогда параметром малости можно выбрать модули магнитных моментов подрешеток $\sigma_i = \langle S_i^z \rangle$. Разложим выражение для свободной энергии (1.14) в ряд по малости σ_i

$$F = \frac{1}{4} \left(D - 2|J_0| - 2J^{(12)} - \frac{H^2}{D} \right) \sigma^2 + \frac{1}{16} \left(D - \frac{H^2 (D - 2\tilde{J} - 4J^{(12)} - 2\tilde{J}^{(12)})}{D^2} \right) \sigma^4. \quad (1.17)$$

Отсюда следует, что критическое поле перехода из сверхтвердой фазы в квадрупольную равно

$$H_{c2} = \sqrt{D(D - 2|J| - 2J^{(12)})}. \quad (1.18)$$

Также из выражения (1.17) можно сделать вывод, что при полях $H \geq H_{c2}$ множитель при σ^2 отрицателен, а при σ^4 – больше нуля. Таким образом, фазовый переход сверхтвердая– квадрупольная фазы является фазовым переходом II рода.

Перейдем к исследованию поведения системы в интервале полей, меньших H_{c2} , т.е. система находится в квадрупольно упорядоченном состоянии, характеризуясь параметрами порядка следующего вида:

$$\langle S_i^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = 3 \langle (S_i^z)^2 \rangle - 2 = 1, \quad q_2^2 = \langle (S_i^x)^2 \rangle - \langle (S_i^y)^2 \rangle = -1. \quad (1.19)$$

При этом основным уровнем энергии магнитного иона будет является E_1 (1.6), а функция основного состояния имеет вид:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |-1\rangle). \quad (1.20)$$

Эта функция не будет соответствовать парамагнитному состоянию, поскольку

$$\langle (S_i^z)^2 \rangle = \langle (S_i^y)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S_i^x)^2 \rangle = 0, \quad (1.21)$$

т.е. учет одноионной анизотропии приводит к выделению в квадрупольной фазе плоскости YOZ, в которой ориентирована проекция эллипсоида квадрупольных моментов.

Перейдем к исследованию спектра возбуждений в квадрупольной фазе. Спектр возбуждений сильно коррелированных систем находится из полюсов функции Грина [32,156,226-228]. Спектры магнонов в квадрупольной фазе (параметры порядка, параметры α_i , β_i и угол θ_i подставляются в явном виде) для одной из подрешеток имеют вид (вид спектров во второй подрешетке аналогичен первой при замене знаков параметров поворота):

$$\varepsilon_{1,2}^2(k) = D^2 + H^2 + 2J(k)D \pm 2\sqrt{D\left[H^2(D + 2J(k)) + D\left(J^{(12)}(k)\right)^2\right]}. \quad (1.22)$$

Ветвь $\varepsilon_1(k)$ выражения (1.22), соответствует высокочастотной ветви возбуждения. Из обращения щели низкочастотного возбуждения в ноль $\varepsilon_2(k)$ легко найти поле фазового перехода из квадрупольного в сверхтвердое состояние:

$$\tilde{H}_{c2} = \left[D\left(D - 2\left(J_0^{(12)} + |J_0| \right) \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.23)$$

Из сравнения выражений (1.18) и (1.23) следует, что линии переходов сверхтвердое–квадрупольное состояния и квадрупольное–сверхтвердое состояния совпадают. Это говорит о том, что фазовый переход между этими фазами является фазовым переходом II рода. Также следует отметить, что на линии фазовых переходов происходит изменения направления магнитных моментов подрешеток, а также изменение их модулей.

Из выражения (1.23) можно заметить, что квадрупольная фаза устойчива при следующем соотношении между константами обменного взаимодействия и одноионной анизотропии

$$D_c > 2\left(J_0^{(12)} + |J_0| \right) \quad (1.24)$$

Рассмотрим противоположный рассмотренному выше случаю— область больших значений внешнего поля ($H > J, D$). В случае больших значений поля углы поворота подрешеток и параметры α, β , как можно заметить из выражения (1.7), стремятся к нулю. Поэтому, при больших значениях поля векторы магнитных моментов подрешеток направлены в одну сторону и сориентированы вдоль оси OZ, а их модули имеют насыщенные значения ($\langle S_i^z \rangle = S = 1$). Отсюда следует, что в интервале больших полей магнетик будет находиться в ферромагнитно упорядоченном состоянии, с параметрами порядка следующего вида:

$$\langle S_i^z \rangle = 1, q_2^0 = 1, q_2^2 = 0. \quad (1.25)$$

Основным уровнем энергии, как и в квадрупольной фазе будет являться E_1 с соответствующим вектором состояния $\Psi_1 = |1\rangle$.

Спектр возбуждений в ферромагнитной фазе определяется выражениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= 4(J_0 + J_0^{(12)} - \tilde{J}_0 - \tilde{J}_0^{(12)} + H), \\ \varepsilon_2(k) &= \sqrt{2} \begin{pmatrix} J_0 + J_0^{(12)} - \tilde{J}_0 - \tilde{J}_0^{(12)} - \\ -J(k) - J^{(12)}(k) + \tilde{J}(k) + \tilde{J}^{(12)}(k) + H - D \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Как легко можно заметить из (1.26), ветвь $\varepsilon_1(k)$ является бездисперсионной, а ветвь $\varepsilon_2(k)$ является низкочастотным щелевым спектром. Из обращения щели в низкочастотном спектре в ноль можно найти выражение для линии поля потери устойчивости фазы:

$$\tilde{H}_{c1} = D. \quad (1.27)$$

Таким образом, выражение (1.27) определяет поле неустойчивости ферромагнитной фазы. Сравнение выражений (1.16) и (1.27) показывает, что переход сверхтвердая–ферромагнитная фазы фазовый переход I рода, а поля \tilde{H}_{c1} и H_{c1} являются полями устойчивости ферромагнитной и сверхтвердой фаз, соответственно. Данный фазовый переход, так как $\tilde{H}_{c1} < H_{c1}$, происходит с гистерезисом.

На рис. 1.1 в переменных (H, D) приведена фазовая диаграмма антиферромагнетика в продольном внешнем поле. Следует отметить, что приведенная фазовая диаграмма практически полностью совпадает с фазовой диаграммой, полученной в работе [229]. При этом следует отметить, что авторы работы [229] исследовали случай малой анизотропии – D/J порядка 0,2, и сверхтвердая фаза (в работе [229] биконическая фаза) будет устойчива в узком интервале значений магнитного поля. В рассмотренном выше случае, границы устойчивости сверхтвердой фазы значительно больше, так как исследовалась возможность большой одноионной анизотропии, т.е. D/J может превосходить единицу. Уменьшение отношения D/J в исследованной системе, позволяет получить результаты работы [229].

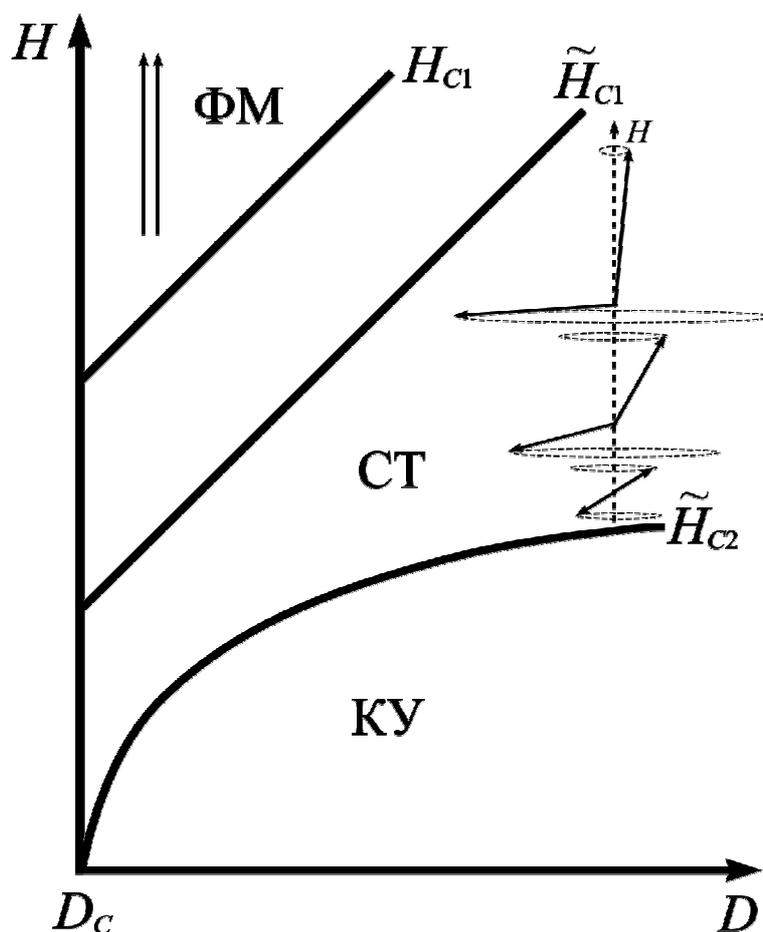


Рис. 1.1. Фазовая диаграмма легкоплоскостного анизотропного антиферромагнетика в продольном поле. Стрелками отмечена динамика магнитных моментов подрешеток в зависимости от изменения поля.

Также следует отметить, что существование сверхтвердой фазы, связано прежде всего с эффектом сокращением спина, т.е. с уменьшением величины среднего спина в подрешетках. При этом уменьшение среднего спина непосредственно зависит от соотношения между константами обмена и одноионной анизотропии (1.11) и (1.12)).

Результаты проведенных здесь исследований совпадают с результатами исследований [113], в которой получено, что сверхтвердая фаза может существовать в системах с низкой размерностью. На рис. 1.2 приведено сравнение результатов работы [113] – рис. 1.2 (а) и результаты наших расчетов – рис. 1.2 (б).

Подчеркнем, в нашем исследовании анализировался случай существенно немалой одноионной анизотропии, т.е. превосходящей константу обменного взаимодействия $D/J_0 \geq 4$ – что являлось главным условием реализации квадрупольной фазы. В то время работе [113] исследовался случай значительно меньшей одноионной анизотропией $D/J_0 \geq 1,5$.

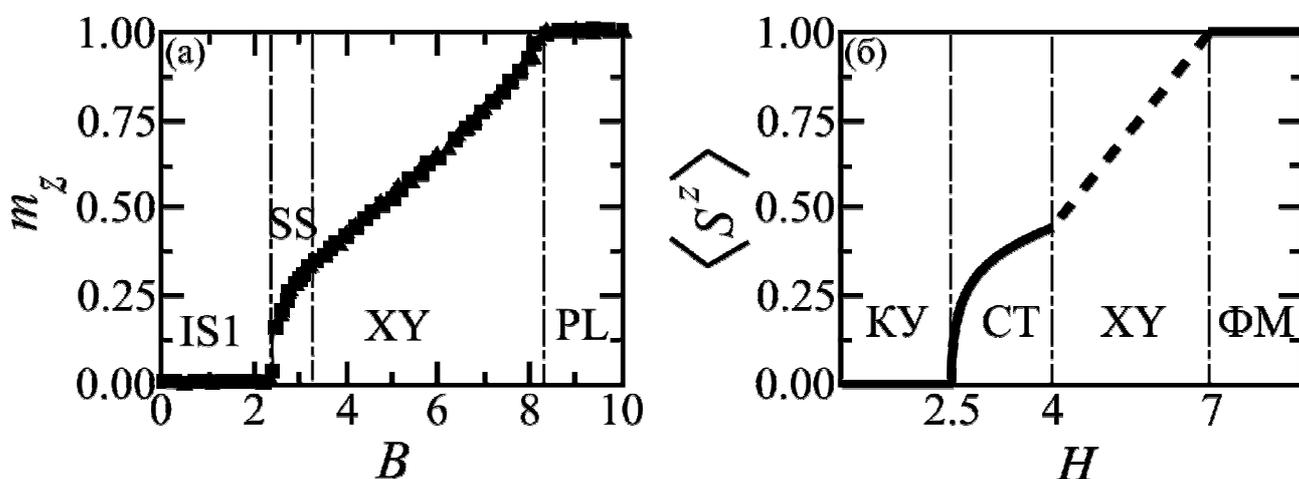


Рис. 1.2. Зависимость намагниченности системы от величины внешнего магнитного поля перпендикулярного базисной плоскости.

Из сравнения зависимостей намагниченностей от величины поля КУ квадрупольная, сверхтвердая СТ и ферромагнитная ФМ фаз (соответственно IS1, SS PL фазы в работе [113]) реализуются в исследованной системе. В

проведенном здесь исследовании не были получены условия реализации XY фазы, однако, следует отметить, фазовый переход сверхтвердая–ферромагнитная фазы является фазовым переходом I рода, с полями устойчивости соответствующих фаз \tilde{H}_{c1} и H_{c1} . Линии устойчивости фаз \tilde{H}_{c1} и H_{c1} определяют область сосуществования ферромагнитной и сверхтвердой фаз. С ростом внешнего поля ориентация магнитных моментов в подрешетках остаются неизменными в этой области, но при этом модули магнитных моментов подрешеток растут. Такое поведение системы может соответствовать полученной в работе [113] XY фазе.

Можно также добавить, что результаты наших исследований имеют хорошее согласие с результатами исследования [230], где в частности было получено, что в случае если соотношение одноионной анизотропии и обменного взаимодействия D/J будут составлять порядка единицы в рассмотренной в [230] системе может реализоваться квадрупольное упорядочение (или синглетное состояние).

1.1.2. Случай «поперечного» внешнего поля.

Перейдем к рассмотрению случая, когда внешнее поле лежит в базисной плоскости XOY (для определенности направим поле вдоль OX). В этом случае внешнее поле будем называть «поперечным», так как его направление ортогонально оси OZ [219,231]. Как и в случае рассмотренном выше будем исследовать реализацию фазовых состояний антиферромагнетика с учетом большой одноионной анизотропии при температурах близких к нулю.

Анализ термодинамических свойств данной системы проделан в работах [219,220]. При этом исследование динамических свойств системы в этих работах не проводилось. Также требует точного учета влияние немалой одноионной анизотропии.

Гамильтониан рассматриваемой здесь системы совпадает с гамильтонианом (1.1) случая рассмотренного выше, с учетом замены зеемановского оператора

$$-H \sum_{n_i} S_{n_i}^x \rightarrow -H \sum_{n_i} S_{n_i}^z .$$

Вначале, рассмотрим случай область больших значений поля, при этом магнитные моменты подрешеток лежат в плоскости XOZ и совпадают с направлением поля, т.е. коллинарны оси OX.

Выделим среднее поле только x-ую компоненту. Одноузельный гамильтониан системы (с точностью до не зависящей от средних констант) можно представить в виде:

$$H_0 = D \sum_{i=1,2} (S_i^z)^2 - \tilde{H}_{xi} \sum_{i=1,2} S_i^x , \quad (1.28)$$

где $\tilde{H}_{x1} = H + |J_0| \langle S_1^x \rangle - J_0^{(12)} \langle S_2^x \rangle$, $\tilde{H}_{x2} = H + |J_0| \langle S_2^x \rangle - J_0^{(12)} \langle S_1^x \rangle$.

Одноузельный гамильтониан (1.28) запишем в представлении операторов Хаббарда, которые строятся на собственных состояниях оператора S^x

$$|\pm\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{2}|-1\rangle, \quad |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle). \quad (1.29)$$

Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда имеет следующий вид:

$$S^x = H^+ - H^-, \quad S^z = (X^{\tilde{0}+} + X^{\tilde{0}} + X^{\tilde{0}-} + X^{\tilde{0}-}) / \sqrt{2}. \quad (1.30)$$

Используя представление (1.30), одноузельный гамильтониан (1.28) принимает следующий вид:

$$H_{0i} = \tilde{H}_{xi} (H_i^{++} - H_i^{--}) + D (\hat{1} + X_i^{\tilde{0}\tilde{0}} + X_i^{+-} + X_i^{-+}) / 2. \quad (1.31)$$

Для диагонализации (1.31) необходимо провести обобщенное u - v преобразование [154,226]

$$\tilde{H}_0 = U^+(\alpha) H_0 U(\alpha), \quad (1.32)$$

где $U_{+-}(\alpha) = \exp[\alpha(X^{+-} - X^{-+})]$.

Спектр собственных значений имеет вид

$$E_{+,-}^{(i)} = \mp \tilde{H}_{xi} \cos 2\alpha_i + D(1 - \sin 2\alpha_i)/2, \quad E_0^{(i)} = D, \quad (1.33)$$

и собственные функции

$$\begin{aligned} |\Psi_+\rangle &= \cos \alpha |+\rangle + \sin \alpha |-\rangle, |\Psi_0\rangle = |\tilde{0}\rangle, \\ |\Psi_-\rangle &= -\sin \alpha |+\rangle + \cos \alpha |-\rangle. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Построим операторы Хаббарда $\tilde{X}^{m'm} = |\Psi_{m'}\rangle\langle\Psi_m|$ ($m=+, \tilde{0}, -$) на собственных функциях (1.34). Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда определяется

$$S^x = \cos 2\alpha (\tilde{H}^+ - \tilde{H}^-) + \sin 2\alpha (\tilde{X}^{-+} + \tilde{X}^{+-}). \quad (1.35)$$

Как следует из (1.33) основным энергетическим уровнем является E_+ , следовательно в области низких температур т.е. $T \rightarrow 0$ и из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда следует $\langle S^x \rangle = \cos 2\alpha$. Уравнение определяющее параметр α u - v преобразование имеет следующий вид:

$$\left(H + (|J_0| - J_0^{(12)}) \cos 2\alpha \right) \sin 2\alpha + (D/2) \cos 2\alpha = 0. \quad (1.36)$$

Как показало численное исследование уравнения (1.36), что при достаточно больших значениях поля средний спин в узлах подрешеток не имеет насыщенное значение. Однако направления магнитных моментов подрешеток совпадают с направлением внешнего поля (коллинеарны оси OX). Зависимость модулей магнитного момента подрешеток в зависимости от величины поля (при различных значениях одноионной анизотропии) приведена на рис. 1.3.

Намагниченности подрешеток, как легко видеть, достигает насыщенного значения в двух случаях: либо в случае большого поля $H \rightarrow \infty$, либо при отсутствия анизотропии $D = 0$.

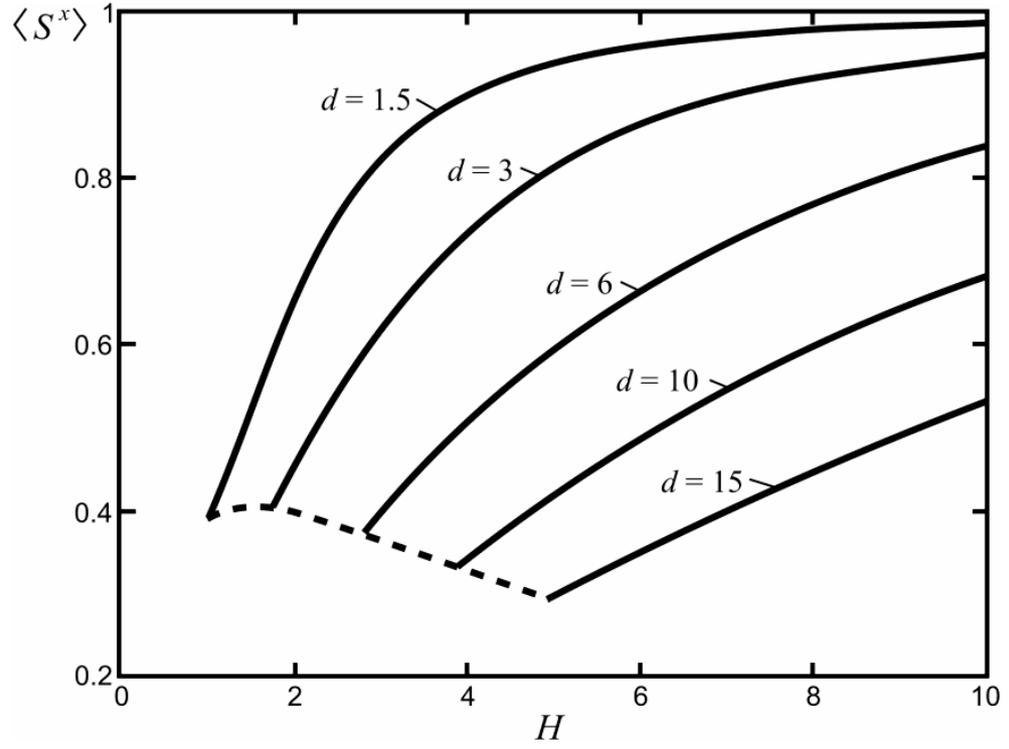


Рис. 1.3. Зависимость магнитных моментов подрешеток анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика от значения внешнего поля и фиксированного соотношения констант анизотропии и обмена $d = D / (|J_0| + J_0^{(12)})$.

Спектр возбуждения в данном состоянии можно представить в виде:

$$\varepsilon_1^2(k) = \varepsilon_{+-} \left(\varepsilon_{+-} + 2(|J_k| - J_k^{(12)}) \sin^2 2\alpha \right), \quad (1.37)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_2^2(k) = & \left\{ \varepsilon_{+0}^2 - \varepsilon_{+0} \left(\tilde{J}_k - \tilde{J}_k^{(12)} \right) (1 - \sin 2\alpha) + \xi + \right. \\ & \left. + \left(\varepsilon_{+0} + (|J_k| + J_k^{(12)}) (1 - \sin 2\alpha) \right) \left(\varepsilon_{+0} + (|J_k| + J_k^{(12)}) (1 + \sin 2\alpha) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

где

$$\varepsilon_{+-} = E_+ - E_- = (D/2)(1 - \sin 2\alpha) / \sin 2\alpha, \quad \varepsilon_{+0} = E_+ - E_0 = D / \sin 2\alpha,$$

$$\begin{aligned} \xi^2 = & \left(\varepsilon_{+0} \left(\tilde{J}_k - \tilde{J}_k^{(12)} \right) (1 + \sin 2\alpha) + 2\varepsilon_{+0} \left(\tilde{J}_k - \tilde{J}_k^{(12)} \right) - (|J_k| + J_k^{(12)})^2 (1 - \sin^2 2\alpha) \right)^2 + \\ & + 4\varepsilon_{+0}^2 (|J_k| + J_k^{(12)}) \left(\tilde{J}_k - \tilde{J}_k^{(12)} \right) (1 - \sin^2 2\alpha). \end{aligned}$$

Исследование спектров возбуждения показало, что ветвь (1.37) является высокочастотной ветвью– щель ни обращается в ноль ни при одном условии. Спектр (1.38) определяет низкочастотную ветвь. Из обращения щели в ноль в можно найти поле неустойчивости рассматриваемого состояния:

$$H_{c1} = 2J_0^{(12)} \sqrt{1 - \left(\frac{D}{2(|J_0| + J_0^{(12)})} \right)^2}. \quad (1.39)$$

При значении поля $H = H_{c1}$, параметр

$$\sin 2\alpha = -D/2(|J_0| + J_0^{(12)}),$$

а значения среднего спина в узлах решетки принимают вид

$$\langle S^x \rangle = \cos 2\alpha = \sqrt{1 - \left(D/2(|J_0| + J_0^{(12)}) \right)^2} \quad (1.40)$$

Тогда выражение для поля (1.39) с учетом (1.40) принимает вид $H_{c1} = 2J^{(12)} \langle S^x \rangle$.

При уменьшении значения поля меньше критического поля определяемого выражением (1.39) направление магнитных моментов подрешеток не совпадает с направлением внешнего поля, и становятся направленными под углом θ для одной подрешетки и $-\theta$ для второй подрешетки к направлению внешнего поля. Значение угла θ будет определяться величиной магнитного поля $\theta = \pi/2$ при $H = 0$ и до $\theta = 0$ при $H = H_{c1}$. Кроме направления намагниченности в зависимости от величины поля изменяются и абсолютные значения магнитных моментов подрешеток при $H = H_{c1}$ достигают значения (1.40). Такое состояние определяется как СФ– спин-флоп фаза. Таким образом при изменении направления внешнего поля с продольного на поперечное вместо сверхтвердой фазы будет реализовываться спин-флоп фаза.

Проведем исследование системы при низких температурах $T \rightarrow 0$.

Основным уровнем энергии магнитного иона в подрешетке имеет вид:

$$E_+ = -H \cos \theta \cos 2\alpha - |J_0| \cos^2 2\alpha + J_0^{(12)} \cos 2\theta \cos^2 2\alpha + D(1 + \sin 2\alpha). \quad (1.41)$$

Волновая функция основного состояния:

$$|\Psi_+\rangle = \cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle. \quad (1.42)$$

Вид функций (1.41) и (1.42) такой как и работах [219,220].

Так как проводятся исследования в случае низких температур $T \rightarrow 0$, то выражения для плотности свободной энергии будут определяются выражением энергии нижайшего энергетического уровня (1.41).

Используя выражение для магнитного момента подрешеток

$$\langle S^x \rangle = H / \left(2J_0^{(12)} \cos \theta \right), \quad (1.43)$$

и то, что значение $\sin 2\alpha$ – отрицательно, можно записать выражение для плотности свободной энергии рассматриваемого случая:

$$F = \left(J_0^{(12)} \cos 2\theta + J_0 \right) \left(\frac{H}{2J_0^{(12)} \cos \theta} \right)^2 - D \sqrt{1 - \left(\frac{H}{2J_0^{(12)} \cos \theta} \right)^2}. \quad (1.44)$$

Исследуем выражение (1.44) в окрестности линии перехода спин-флоп–коллинеарная квадрупольно ферромагнитная фазы. В этом случае $\theta \rightarrow 0$, и выражение для свободной энергии принимает вид:

$$F = \left[\frac{D}{2} \frac{H^2}{4(J_0^{(12)})^2 - H^2} \sqrt{1 - \left(\frac{H}{2J_0^{(12)}} \right)^2} - \frac{H^2 (J_0^{(12)} + |J_0|)}{4(J_0^{(12)})^2} \right] \theta^2 + \left[\frac{DH^2}{H^2 - 4(J_0^{(12)})^2} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{8} \frac{H^2}{H^2 - 4(J_0^{(12)})^2} \right) \sqrt{1 - \frac{H^2}{4(J_0^{(12)})^2}} - H^2 \frac{(J_0^{(12)} + |J_0|)}{6(J_0^{(12)})^2} \right] \theta^4. \quad (1.45)$$

Отсюда можно получить выражение для поля перехода из спин-флоп фазы :

$$H_{c2} = 2J_0^{(12)} \sqrt{1 - \left(\frac{D}{J_0^{(12)} + 2(|J_0|)} \right)^2}. \quad (1.46)$$

Это выражение имеет точно такой же вид, как и поле перехода из коллинеарной квадрупольно ферромагнитной фазы (1.39). Отсюда можно сделать вывод, что переход спин-флоп–коллинеарная квадрупольно ферромагнитной фазы фаза – фазовый переход II рода. Это также следует из того, что в выражении для плотности свободной энергии (1.45) множитель при θ^2 – меньше нуля, а при θ^4 – больше нуля, что также свидетельствует, что данный фазовый переход II рода. Из выражения (1.45) можно определить зависимость угла θ от соотношения материальных параметров системы:

$$\theta_0^2 = \frac{1}{4} \left\{ -\frac{|J_0| + J_0^{(12)}}{2(J_0^{(12)})^2} + \frac{D}{4(J_0^{(12)})^2 - H^2} \sqrt{1 - \left(\frac{H}{2J_0^{(12)}} \right)^2} \right\} \times$$

$$\times \left\{ -\frac{|J_0| + J_0^{(12)}}{6(J_0^{(12)})^2} + \frac{D}{4(J_0^{(12)})^2 - H^2} \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{8} \frac{H^2}{4(J_0^{(12)})^2 - H^2} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{H}{2J_0^{(12)}} \right)^2} \right\}^{-1}. \quad (1.47)$$

Выражение (1.47) определяет зависимость абсолютного значения угла и соответствует обеим подрешеткам с учетом различия знака для разных подрешеток.

Как можно отметить из сравнения (1.39) и (1.45), спин-флоп фаза является устойчивой, если значение одноионной анизотропии, находится в пределах

$$J_0, J_0^{(12)} < D < 2(|J_0| + J_0^{(12)}). \quad (1.48)$$

При дальнейшем стремлении поля к нулю, углы θ_i стремятся к антипараллельной ориентации $\pm\pi/2$, как направление магнитных моментов намагниченности подрешеток. И при значении поля $H = 0$, магнетик перейдет в КАФМ– квадрупольно-антиферромагнитное состояние.

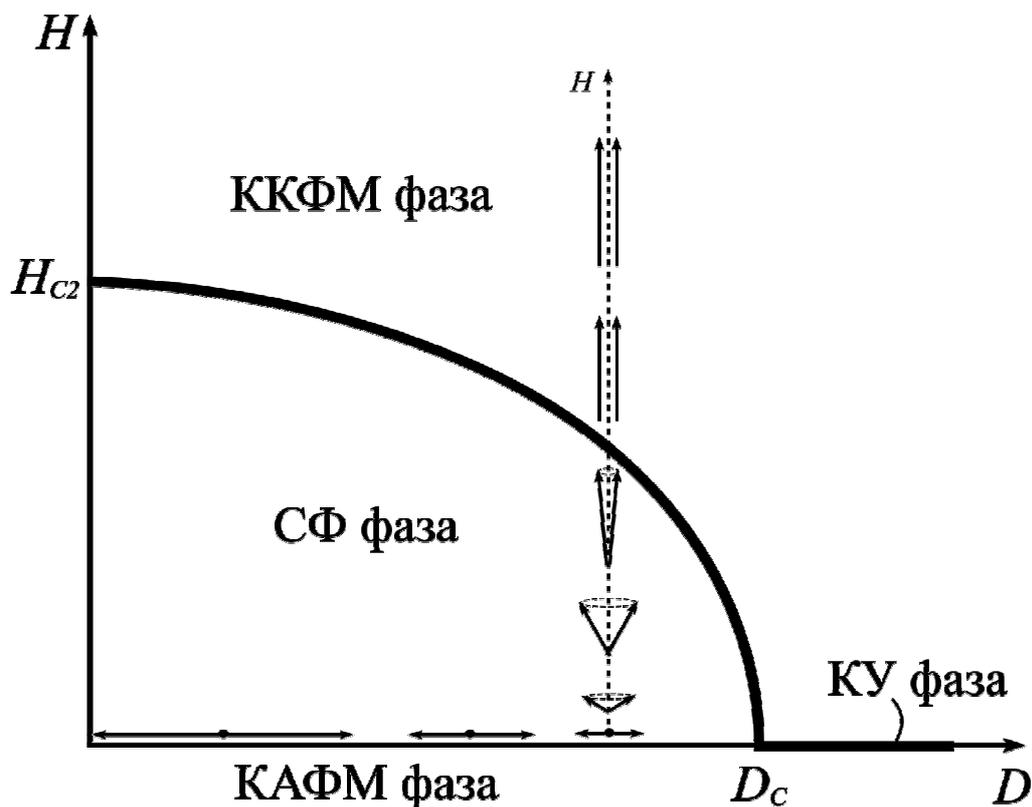


Рис. 1.4. Фазовая диаграмма легкоплоскостного анизотропного антиферромагнетика с ориентацией поля вдоль оси Ox .

В этом состоянии абсолютные значения магнитных моментов подрешеток зависят от соотношения между константами обменных взаимодействий и одноионной анизотропии.

Проведенные исследования позволяют сделать вывод, что если внешнее поле ориентируется в плоскости легкого намагничивания, то ферромагнитная и квадрупольная фазы в анизотропном антиферромагнетике не реализуются.

Как легко можно увидеть из (1.24), квадрупольная фаза реализуется только при $H = 0$ и, когда $D_c > 2(|J_0| + J_0^{(12)})$.

1.2. «Сверхтвердая» магнитная фаза в легкоплоскотном изингоподобном антиферромагнетике

1.2.1. Случай «продольного» внешнего поля.

Данный раздел посвящен изучению влияния внешнего поля на формирование свойств изингоподобного антиферромагнетика со спином $S=1$ с анизотропией типа легкой плоскости. Несмотря на то, что изинговское обменное взаимодействие содержит только одну спиновую z -компоненту, оператор спина при этом содержит все компоненты – $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$. Будем исследовать несколько возможностей ориентации внешнего поля: ориентация поля выбирается в плоскости легкого намагничивания или ортогонально легкой плоскости. Как и в предыдущих подразделах будет рассматриваться низкотемпературный интервал – $T \ll T_N$.

При всем при том, что рассматриваемая система представляет собой модельное упрощение, существуют действительные магнитоупорядоченные системы, характеристики которых максимально близки к изучаемой модели. Хорошим примером является антиферромагнитно упорядоченное соединение $\text{NiCl}_2\text{4SC}(\text{NH}_2)_2$ со спином ионов Ni^{++} $S=1$, а при этом учет немалой одноионной анизотропии типа легкой плоскости приводит к возможности существования синглетного основного состояния, в котором z -ая проекция спина равна нулю [220].

Гамильтониан в случае ориентации внешнего поля ортогонально плоскости легкого намагничивания можно представить в следующем виде:

$$H = -H \sum_{n_i} S_{n_i}^z + D \sum_{m_i} (S_{m_i}^z)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m_i, m_j \\ (i \neq j)}} \tilde{J}_{m_i m_j} S_{m_i}^z S_{m_j}^z + \frac{1}{2} \sum_{m_i, n_i} J_{m_i n_i} S_{m_i}^z S_{n_i}^z, \quad (1.49)$$

здесь все введены те же обозначения, что и для гамильтониана (1.1).

Вначале рассмотрим случай, когда внешнее поле превосходит константы обмена и анизотропии. Направления магнитных моментов в подрешетках

совпадают с направлением поля. В этом случае устойчива ферромагнитная фаза. В гамильтониане (1.49) выделим средние поля. Тогда одноузельный гамильтониан одной из подрешеток имеет вид:

$$H_0(n_1) = D(S_{n_1}^z)^2 - \bar{H}S_{n_1}^z, \quad (1.50)$$

где $\bar{H} = H + (|J_0| - \tilde{J}_0/2)\langle S^z \rangle$, $J_0 = \sum_{n_1} J_{n_1 m_1}$, $\tilde{J}_0 = \sum_{n_1} \tilde{J}_{n_1 n_2}$.

Вид нулевого гамильтониана второй подрешетки такой как и (1.50) с заменой индекса 1 на 2.

Уровни энергии магнитного иона найдем из решения операторного уравнения с гамильтонианом (1.50):

$$E_1 = -\bar{H} + D, \quad E_0 = 0, \quad E_{-1} = \bar{H} + D. \quad (1.51)$$

Вид собственных функций:

$$\Psi_1 = |1\rangle, \quad \Psi_{-1} = |-1\rangle, \quad \Psi_0 = |0\rangle. \quad (1.52)$$

Применяя метод функций Грина для операторов Хаббарда, определим спектр возбуждений для ферромагнитной фазы:

$$\varepsilon_1(k) = |J| - \tilde{J}/2 - D + H, \quad \varepsilon_2(k) = 2|J| - \tilde{J} + 2H. \quad (1.53)$$

Как видно из выражения (1.53) обе ветви является бездисперсионными, что связано с тем, что в исследуемой системе рассматривается случай немалой одноосной анизотропии обменного взаимодействия, поэтому прецессия магнитного момента вокруг эффективного направления отсутствует.

Влияние одноионной анизотропии начнет возрастать с уменьшением внешнего поля и когда

$$H_1 = D - |J_0| + \tilde{J}_0/2 \quad (1.54)$$

в магнонном спектре $\varepsilon_1(k)$ щель обратится в ноль, что свидетельствует о потере устойчивости ферромагнитной фазы. Междоузельное обменное взаимодействие как можно увидеть из (1.54), приводит к увеличению влияния одноионной анизотропии в легкой плоскости. Это является понятным, если вспомнить, что это отвечает антиферромагнитно ориентрованному направлению магнитных моментов подрешеток. Если попытаться развернуть

магнитный момент одной из подрешеток противоположно направлению поля то это приведет к уменьшению суммарного магнитного момента магнетика. Учет немалой одноионной анизотропии ведет к проявлению эффекта квантового сокращения спина. Таким образом одноионная анизотропия значительно уменьшает суммарный магнитный момент магнетика, причем, что природа этого эффекта – другая. При этом оба эффекта, конкурируя с внешним полем, а также с эффективным обменным полем, работая в паре, дополняют и усиливают друг друга.

Представляет интерес рассмотреть область малых значений внешнего поля, т.е. $D \gg H, |J|, \tilde{J}$. Учет влияния немалой одноионной анизотропии приводит к уменьшению среднего спина в каждом узле до нуля и реализации КУ квадрупольного упорядочения. Одноузельный гамильтониан магнетика в КУ фазе имеет тот же вид, что (1.50) при учете равенства нулю среднего значения спина $\langle S^z \rangle = 0$ в узлах решетки. При этом вид энергетического спектра магнитного иона остается тем же. Набор собственных функций одноузельного гамильтониана (1.50) в квадрупольной фазе не изменяется. Основным уровнем энергии в квадрупольной фазе будет являться E_0 . Следовательно, учет немалой одноионной анизотропии типа легкой плоскости приводит к инверсии энергетических уровней. В результате, спектр возбуждений в квадрупольной фазе имеет вид:

$$\varepsilon_1(k) = D - H, \quad \varepsilon_2(k) = D + H. \quad (1.55)$$

Спектр магнонов в квадрупольной фазе, как можно увидеть из (1.55) также как и в ферромагнитной фазе является бездисперсионным.

Увеличение внешнего поля приводит к тому, что щель одной $\varepsilon_1(k)$ из ветвей спектра обращается в ноль на линии

$$H_2 = D, \quad (1.56)$$

т.е. квадрупольная фаза теряет устойчивость при этом значении поля.

Рассмотрим область промежуточных значений магнитного поля, когда H лежит в пределах $H_1 > H > H_2$, при $D > |J|, \tilde{J}$. Магнитный момент первой

подрешетки с направлением внешнего поля в системе координат, связанной с подрешетками (см. рис. 1.5), образует угол ϑ_1 . Направление магнитного момента второй подрешетки будет составлять угол ϑ_2 с направлением поля. Для определенности можно положить, что магнитные моменты подрешеток лежат в плоскости XOZ, что приводит к некоторым математическим упрощениям не уменьшая при этом общности исследуемой задачи.

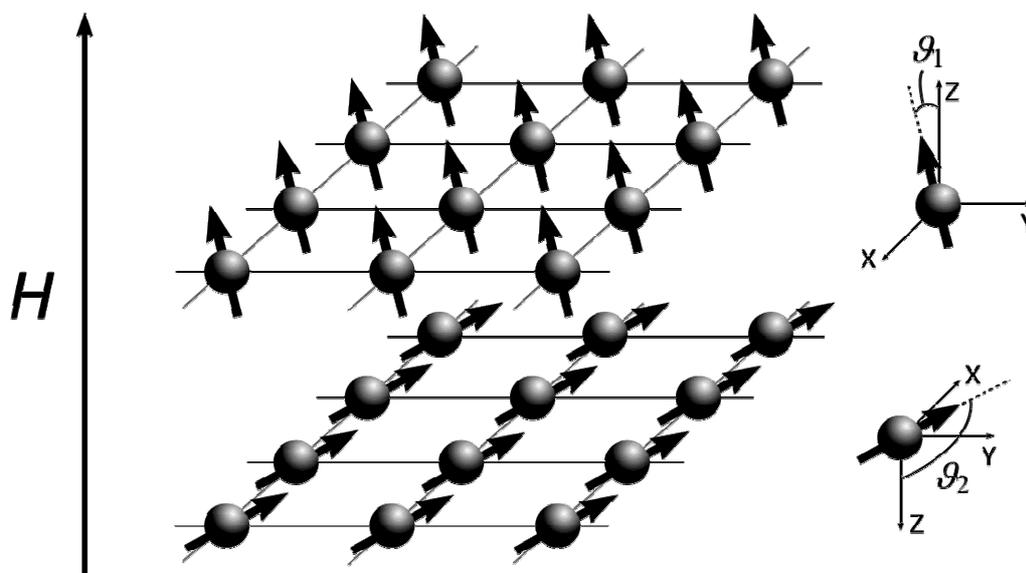


Рис. 1.5. Распределение магнитных моментов в узлах решеток во внешнем поле. Внешнее поле лежит в пределах критических полей $H_1 > H > H_2$.

Последующий анализ можно проводить в собственной системе координат, в которых магнитные моменты подрешеток имеют только z-ую компоненту. Развернем вокруг оси OY систему координат привязанную к первой подрешетке на угол ϑ_1 , а базис связанный со второй подрешеткой повернем на угол ϑ_2 . В итоге, одноузельный гамильтониан в собственной системе координат принимает вид:

$$H_0(m_i) = -\bar{H}_i^z S_{m_i}^z - \bar{H}_i^x S_{m_i}^x + \\ + D \left[\left(S_{m_i}^z \right)^2 \cos^2 \vartheta_i + \left(S_{m_i}^x \right)^2 \sin^2 \vartheta_i + \left(S_{m_i}^x S_{m_i}^z + S_{m_i}^z S_{m_i}^x \right) \sin 2\vartheta_i / 2 \right], \quad (1.57)$$

где $\bar{H}_i^z = \left(H - \tilde{J} \cos \vartheta_j / 2 \langle S_j^z \rangle - |J| \cos \vartheta_i \langle S_i^z \rangle \right) \cos \vartheta_i$,

$\bar{H}_i^x = \left(H - \tilde{J}_0 \cos \vartheta_j \langle S_j^z \rangle + |J_0| \cos \vartheta_i \langle S_i^z \rangle \right) \sin \vartheta_i$, при $i \neq j$.

Чтобы найти спектр собственных значений и собственных функций гамильтониана (1.57) проведем обобщенное u - v преобразование [226,232] для операторов Хаббарда. В результате спектр собственных значений одноузельного гамильтониана имеет вид:

$$\begin{aligned}
 E_{1,0}(i) &= \frac{1}{2} \left\{ -\bar{H}_i^z \cos 2\alpha + \frac{D}{2} \left(2 + \sin^2 \vartheta_i (1 + \sin 2\alpha) \right) \pm \right. \\
 &\pm \left(2\bar{H}_i^x \sin(\alpha + \pi/4) + D \cos(\alpha + \pi/4) \sin 2\vartheta_i \right) \sin 2\beta \pm \\
 &\left. \pm \left(-\bar{H}_i^z \cos 2\alpha + \frac{D}{2} \left(2 - \sin^2 \vartheta_i (3 - \sin 2\alpha) \right) \right) \cos 2\beta \right\}, \\
 E_{-1}(i) &= \bar{H}_i^z \cos 2\alpha + \frac{D}{2} \left(1 - \sin^2 \vartheta_i \sin 2\alpha + \cos^2 \vartheta_i \right),
 \end{aligned} \tag{1.58}$$

α и β параметры обобщенного u - v преобразования, и которые находятся из решений системы уравнений:

$$\begin{cases}
 \tan \beta = \frac{\bar{H}^x \cos(\alpha + \pi/4) - (D/2) \sin(\alpha + \pi/4) \sin 2\vartheta}{(D/2) \cos 2\alpha \sin^2 \vartheta + \bar{H}^z \sin 2\alpha}, \\
 \tan 2\beta = \frac{(D/2) \cos(\alpha + \pi/4) \sin 2\vartheta + \bar{H}^x \sin(\alpha + \pi/4)}{(D/2) (\sin 2\alpha \sin^2 \vartheta + 3 \cos^2 \vartheta - 1) - 2\bar{H}^z \cos 2\alpha}.
 \end{cases} \tag{1.59}$$

Исследуем фазовое состояние реализующееся в рассматриваемой системе в области промежуточных значений внешнего поля, когда H лежит в пределах $H_1 > H > H_2$, применяя ландаувскую теорию фазовых переходов. Будем исследовать выражение для свободной энергии, раскладывая его в ряд в окрестности линий потери устойчивости ферромагнитной и квадрупольной фаз, по соответствующим малым параметрам порядка. Исследуем функцию энергии в двух крайних случаях:

1. Если рассматривать область больших значений магнитного поля, но меньших критического значения поля перехода в ферромагнитную фазу $H < H_1$,

то увеличение внешнего поля приводит к тому, значение среднего спина $\langle S^z \rangle$ в каждом узле приближается к насыщенному значению. Тогда, параметром малости в этой области значений поля будет параметр $\sigma \sim \left(1 - \langle S^z \rangle^2\right)$. Так как среднее значение спина в узлах решетки определяется выражением $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$, то параметр малости σ в окрестности линии перехода в ферромагнитную фазу можно представить в виде $\sigma^2 = \sin 2\alpha$.

2. В противоположном случае, находясь в неколлинеарной магнитоупорядоченной фазе, внешнее поле будет уменьшаться, приближаясь к критическому значению H_2 . Тогда, параметром малости в этой области значений поля можно выбрать среднее значение спина в узлах решетки $\sigma = \langle S^z \rangle$, так как в окрестности линии фазового перехода в квадрупольную фазу именно величина среднего спина близка к нулю.

Проминимизируем функцию плотности свободной энергии. Это позволит определить равновесного состояния рассматриваемой системы. Хорошо известно, что для антиферромагнетика имеются некоторые сложности в определении функция основного состояния, и значение энергии соответствующее данному состоянию может не отвечать равновесному состоянию [1]. Более корректно будет исследовать на экстремум функцию плотности свободной энергии, имеющую в общем случае вид:

$$F = -T \ln Z, \text{ где } Z = \sum_{M=-1,0,1} \exp(-E_M/T).$$

Для обеих подрешеток вид функции плотности свободной энергии имеет одинаковый вид. В случае низких температур $T \rightarrow 0$, ограничимся учетом энергии нижайшего уровня энергии E_1 . В этом случае функцию плотности свободной энергии можно представить в виде:

$$F = -\bar{H}^z \sigma + (D/2) \left(2 + \sin^2 \vartheta \left(\left(\sqrt{1 - \sigma^2} - 1 \right) \right) \right). \quad (1.60)$$

При получении выражения (1.60) было учтена связь $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$. Параметр α для исследуемого случая как это было показано в работе [114] меняется в интервале между $-\pi/4$ и 0. Это соответствует изменению среднего значения спина на узле между 0 и 1. Следовательно, неколлинеарная фаза при уменьшении внешнего магнитного поля характеризуется не только изменением направления векторов магнитного момента подрешеток, но и уменьшением среднего значения спина в узлах решеток, но и уменьшается по модулю. И при стремлении поля H к H_2 $\langle S^z \rangle$ стремится к нулю, что связано с эффектом сокращения спина.

Минимизируя функцию (1.60) по переменной ϑ_i , можно записать функцию ориентации угла магнитного момента в подрешетках в зависимости от соотношений констант обменного взаимодействия, одноионной анизотропии и внешнего поля:

$$\tilde{J}\sigma^2 \sin \vartheta_2 \cos \vartheta_1 = 0, \quad \cos \vartheta_1 = \frac{\left((\tilde{J}/2) \cos \vartheta_2 - H \right) \sigma}{2|J|\sigma^2 - D\left(1 - \sqrt{1 - \sigma^2}\right)} \quad (1.61)$$

Вполне очевидно одно из решений системы (1.61):

$$\vartheta_1 = \vartheta_2 = 0. \quad (1.62)$$

Подставляя эти решения в выражения для плотности свободной энергии находим, что в окрестности линии фазового перехода в квадрупольную фазу т.е. $\langle S^z \rangle \rightarrow 0$:

$$F_{\vartheta_i=0} = D, \quad i = 1, 2. \quad (1.63)$$

Другое решение системы уравнений (1.62) имеет:

$$\vartheta_2 = 0, \quad \cos \vartheta_1 = \left((\tilde{J}/2) \cos \vartheta_2 - H \right) \sigma / \left(2|J|\sigma^2 - D\left(1 - \sqrt{1 - \sigma^2}\right) \right) \quad (1.64)$$

Представляет интерес проанализировать функцию свободной энергии (1.60) в случае, когда углы ϑ_i удовлетворяют условиям (1.64) и внешнее поле имеет величину близкую к значению поля перехода в квадрупольную фазу.

Можно записать выражение свободной энергии в окрестности квадрупольной фазы. Для этого разложим функцию (1.60) в ряд по параметру малости σ и, учитывая слагаемые не выше второй степени по σ , получаем

$$F = D - \frac{H^2}{D - 4|J|} + \frac{\tilde{J}H}{D - 4|J|}\sigma + \frac{1}{4} \left[\frac{4|J|\tilde{J}^2 + D(H^2 - \tilde{J}^2)}{(D - 4|J|)^2} - D \right] \sigma^2. \quad (1.65)$$

Переходя к пределу $\sigma \rightarrow 0$ значение свободной энергии (1.65) на линии перехода в квадрупольную фазу имеет вид:

$$F = D - H^2 / (D - 4|J_0|). \quad (1.66)$$

Сравнивая выражения свободных энергий (1.63) и (1.66) нетрудно заметить, что во втором случае энергия будет меньше. Следовательно, фаза с неколлинеарной ориентацией магнитных моментов подрешеток является энергетически более выгодной, чем упрядочение с коллинеарной ориентацией магнитных моментов. Вполне естественно допустить, что фаза с неколлинеарной ориентацией магнитных моментов подрешеток – это сверхтвердая магнитная фаза. Но при этом ориентация магнитного момента одной из подрешеток будет всегда совпадать с направлением внешнего поля.

Из (1.65) определим поле перехода в квадрупольное состояние:

$$H_3 = \left[1 + \frac{\tilde{J}^2}{D(D - 4|J|)} \right]^{\frac{1}{2}} (D - 4|J_0|) \approx D - 4|J|. \quad (1.67)$$

Из исследования плотности свободной энергии следует, что переход квадрупольная – сверхтвердая фазы – это фазовый переход I рода, а поле H_3 соответствует границе устойчивости сверхтвердого состояния при переходе в квадрупольную фазу.

Раскладывая (1.60) в ряд по $\sigma^2 = \sin 2\alpha$ получим выражение:

$$\begin{aligned}
F = & \frac{D}{2} - \frac{(2H - \tilde{J}_0)^2}{8(D - 2|J_0|)} + \frac{D}{2} \left[1 - \frac{(2H - \tilde{J}_0)^2}{4(D - 2|J_0|)^2} \right] \eta^2 + \\
& + \left[\frac{D(2H^2 + \tilde{J}_0^2) - H\tilde{J}_0(3D - 2|J_0|) - |J_0|\tilde{J}_0^2}{4(D - 2|J_0|)^2} - \frac{D^2(2H - \tilde{J}_0)^2}{8(D - 2|J_0|)^3} \right] \eta^4 + \\
& + \left\{ \frac{D(2H - \tilde{J}_0)(H - \tilde{J}_0)}{4(D - 2|J_0|)^2} + \frac{D|J_0|(2H - \tilde{J}_0)(4H - 3\tilde{J}_0)}{2(D - 2|J_0|)^3} + \right. \\
& \left. + \frac{D(2H - \tilde{J}_0)^2}{8(D - 2|J_0|)^4} [24|J_0|(D - 2|J_0|) - 9D^2] \right\} \eta^6.
\end{aligned} \tag{1.68}$$

Поле перехода в ферромагнитную фазу:

$$H_4 = D - 2|J_0| + \tilde{J}_0/2. \tag{1.69}$$

Если $H < H_4$, то множители при η^2 и η^4 разложения (1.68) положительны, а множитель при η^6 меньше нуля. Это свидетельствует о том, что переход сверхтвердая – ферромагнитная фаза есть фазовый переход I рода. Выражение (1.69) соответствует полю потери устойчивости сверхтвердого состояния при переходе в ферромагнитное.

Из проведенных исследований следует, что сверхтвердое состояние энергетически выгодно, чем коллинеарно упорядоченная фаза. Следует отметить, что в сверхтвердой фазе магнитные моменты подрешеток имеют необычную взаимную ориентацию, а именно, направление магнитных моментов одной из подрешеток не меняется и коллинеарно направлению внешнего поля. Несмотря на необычность такого поведения, имеется совпадение результатами работы [229]. Так в [229] установлена зависимость углов ориентации магнитных моментов антиферромагнетика с анизотропией обменного взаимодействия в подрешетках неколлинеарной фазы:

$$\cos \theta_2 = \left(\sqrt{1 - \Delta^2} - \cos \theta_1 \right) / \left(1 - \cos \theta_1 \sqrt{1 - \Delta^2} \right). \tag{1.70}$$

Параметр анизотропии обменного взаимодействия Δ , как отмечено в [229] равен нулю, если антиферромагнетик является изинговским. В этом случае

второе уравнение (1.64) совпадает с выражение (1.70). Таким образом, в изинговском антиферромагнетике определяющую роль имеет учет немалой анизотропии обменного взаимодействия. Следствием этого является то, что направление магнитных моментов одной из подрешеток совпадает с направлением внешнего поля; кроме того обменная анизотропия и одноионная анизотропия действуя совместно, усиливают друг друга приводят к заметному различию направлений внешнего поля и направления магнитного момента второй подрешетки.

1.2.2. Случай «поперечного» внешнего поля.

Исследуем поведение системы, когда внешнее магнитное поле будет коллинеарно плоскости легкого намагничивания. Гамильтониан системы в этом случае имеет следующий вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{m_i, m_j \\ (i \neq j)}} \tilde{J}_{m_i, m_j} S_{m_i}^z S_{m_j}^z - \frac{1}{2} \sum_{m_i, n_i} J_{m_i, n_i} S_{m_i}^z S_{n_i}^z - H \sum_{m_i} S_{m_i}^x + D \sum_{m_i} (S_{m_i}^z)^2. \quad (1.71)$$

Как и для продольной ориетации внешнего поля, исследуем случаи: малой и большой величины поле. Вначале остановимся на случае, когда величина поля существенно больше значения констант одноионной анизотропии и обменного взаимодействия. В исследуемой системе реализуется в этом случае будет реализовываться ферромагнитное упорядочение.

Дальнейший анализ выгодно провести находясь в локальной системе координат, ось квантования в которой коллинеарна с направлением магнитных моментов подрешеток, а также с ориентацией внешнего поля. Гамильтониан системы (1.71) в этом случае имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{m_i, m_j \\ (i \neq j)}} \tilde{J}_{m_i, m_j} S_{m_i}^x S_{m_j}^x - \frac{1}{2} \sum_{m_i, n_i} J_{m_i, n_i} S_{m_i}^x S_{n_i}^x - H \sum_{m_i} S_{m_i}^z + D \sum_{m_i} (S_{m_i}^x)^2. \quad (1.72)$$

Так как слагаемые в гамильтониане (1.72), которые соответствуют энергии обменного взаимодействия, не имеют зависимости от проекции оператора спина на ось квантования, то одноузельный гамильтониан можно представить в виде:

$$H_0 = -HS^z + D(S^x)^2. \quad (1.73)$$

Решение одноузельной задачи для (1.73) позволяет определить уровни энергии магнитного иона:

$$E_{\pm 1} = \frac{D}{2} \mp \kappa, \quad E_0 = D, \quad \kappa^2 = H^2 + (D/2)^2. \quad (1.74)$$

Спектр собственных волновых функции гамильтониана (1.73):

$$\Psi_1 = \cos \varphi |1\rangle - \sin \varphi |-1\rangle, \quad \Psi_0 = |0\rangle, \quad \Psi_{-1} = \sin \varphi |1\rangle + \cos \varphi |-1\rangle, \quad (1.75)$$

где $\sin 2\varphi = D/2\kappa$.

Построим операторы Хаббарда на собственных функциях (1.75):

$$\begin{aligned} S^z &= \cos 2\varphi (H^1 - H^{-1}) + \sin 2\varphi (X^{-11} + X^{1-1}), \\ S^+ &= \sqrt{2} \sin \varphi (X^{-10} - X^{01}) + \sqrt{2} \cos \varphi (X^{01} + X^{-10}). \end{aligned} \quad (1.76)$$

Проводя бозонизацию операторов Хаббарда [233], определим спектр возбуждений в ферромагнитной фазе:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \left(\frac{D}{2} + \kappa - (2J_k - |\tilde{J}_k|) \left(1 - \frac{D}{2\kappa} \right) \right) \left(\frac{D}{2} + \kappa \right), \\ \varepsilon_2^2(k) &= 4H^2 + D^2, \end{aligned} \quad (1.77)$$

Значение поля неустойчивости ферромагнитной фазы можно определить из обращения щели спектра $\varepsilon_1(k)$ в ноль:

$$H_1 = \sqrt{2D_C (D_C - D) - \frac{D^2}{8} + 2 \left(\frac{D}{4} - D_C \right) \left(D_C^2 + \frac{D^2}{16} - \frac{3}{2} D_C D \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.78)$$

здесь введено $D_C = J - |\tilde{J}|/2$. Дальнейший анализ покажет, что значение D_C определяет точку перехода из антиферромагнитного в квадрупольное состояние.

Из связи (1.76) спиновых операторов S^i с операторами Хаббарда X^{ij} можно определить вид среднего значения спина на один узел:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\varphi, \quad (1.79)$$

и в пределе при $T \rightarrow 0$

$$\langle S^z \rangle \approx H / \left(H^2 + \left(\frac{D}{2} \right)^2 \right). \quad (1.80)$$

Следовательно, величина среднего значения спина на узле имеет насыщенное значение только, когда константа одноионной анизотропии равна нулю, что совпадает с выводами работы [114]. Это связано с тем, что z-ая проекция спинового оператора не коммутирует с оператором одноосной одноионной анизотропии (1.73). Следовательно, z-ая компонента спинового оператора не будет интегралом движения (т.е. не сохраняется), а значит для среднего значения спина отсутствует возможность достигнуть насыщения во внешнем поле конечной величины. Таким образом данное фазовое состояние будет ферромагнитным, но с $\langle S \rangle < 1$.

Рассмотрим поведение системы в области слабого магнитного поля, т.е. когда энергия обменного взаимодействия и энергия одноионной анизотропии заметно превосходит энергию внешнего поля. Тогда учет немалого значения одноионной анизотропии приводит к проявлению эффекта квантового сокращения спина и к возможности реализации квадрупольной фазы.

В этом случае одноузельный гамильтониан имеет такой вид как и (1.73), а значит квадрупольной фазе совпадают спектры возбуждения с (1.77). В отличие от случая немалого внешнего поля в данной ситуации реализации том, квадрупольной фазы отношение $D/2\kappa$ стремится к 1. Следовательно, средний спин $\langle S \rangle$ тогда и только тогда, когда значение внешнего поля H тоже станет равным нулю, что легко понять из выражения (1.80).

Следовательно поле перехода в квадрупольное состояние $H = 0$. Чтобы понять, какой вид спинового упорядочения будет устойчив при промежуточных значениях поля, т.е. в области между ферромагнитной и квадрупольной фазами

необходимо провести анализ поведения системы в области значений поля между нулем и значением поля перехода в ферромагнитную фазу. Прежде чем переходить к исследованию этого случая, представляет интерес уделить внимание случаю, когда внешнее поле равно нулю.

Одноузельный гамильтониан в отсутствие внешнего поля можно представить в виде:

$$H_0 = (-1)^{i+1} \bar{H} S^z + D (S^z)^2, \quad (1.81)$$

где $\bar{H} = (J - |\tilde{J}|/2) \langle S^z \rangle$.

В зависимости от соотношения констант одноионной анизотропии и обменных констант, как следует из выражения (1.81), в рассматриваемом магнетике при $D < J$ устойчива антиферромагнитная фаза, а при $D > J$ квадрупольная фаза. Антиферромагнитное упорядочение в данном случае не реализуется, так как рассматривается ситуация немалой одноионной анизотропии.

Определим спектр собственных значений и вид собственных функций магнитного иона, решая волновое уравнение с гамильтонианом (1.81). Собственные значения и собственные функции имеют вид (1.51) и (1.75) соответственно, при условии, что $\cos 2\varphi = 1$ в нулевом внешнем поле. Тогда, связь между операторами Хаббарда и спиновыми операторами имеет более простой вид:

$$S^z = H^1 - H^{-1}, \quad S^+ = \sqrt{2} X^{0-1} + \sqrt{2} X^{10}. \quad (1.82)$$

Проводя процедуру бозонизации для операторов Хаббарда, можно определить вид спектра возбуждений для квадрупольной фазы:

$$\varepsilon_1(k) = D - J_k + |\tilde{J}_k|/2, \quad \varepsilon_2(k) = J_k - |\tilde{J}_k|/2, \quad (1.83)$$

которые соответствуют большим величинам одноионной анизотропии, т.е., когда $D \gg J, |\tilde{J}|$.

Можем определить величину константы одноионной анизотропии при котором квадрупольная фаза теряет устойчивость из условия равенства нулю щели низкочастотной ветви спектра возбуждения:

$$D_0 = J - |\tilde{J}|/2.$$

Как легко заметить вид данного выражения аналогичен выражению для D_C , которое было введено при получении выражения для поля фазового перехода из неколлинеарной фазы в ферромагнитную (1.78).

Рассмотрим вопрос о конфигурации спинового состояния, которое может реализоваться в области значений внешнего поля $0 < H < H_1$. Можно найти выражения средних. Выше такие выражения были получены для случая произвольных значений поля, когда среднее значение спина было отлично от нуля, и зависел от величины поля. Исследуем плотность свободной энергии, чтобы найти состояния, реализующиеся в системе.

Нулевые гамильтонианы для различных подрешеток можно представить в следующем виде:

$$H_0(n_i) = -H \sin \theta_i S_{n_i}^x + (-1)^i H \cos \theta_i S_{n_i}^z + D (S_{n_i}^y)^2. \quad (1.84)$$

Выражение (1.84) получено в самом общем виде, предполагая, что ориентации магнитных моментов подрешеток не совпадают и направлены под разными углами θ_1 и θ_2 к оси квантования. Проводя диагонализацию гамильтонана (1.84), найдем выражения для уровней энергии обеих подрешеток:

$$\begin{aligned}
E_1^{(i)} &= (-1)^i \frac{H}{2} \cos \theta_i \cos 2\alpha_i (1 + \cos 2\beta_i) - \frac{H}{2} \sin \theta_i \sin(\alpha_i + \pi/4) \sin 2\beta_i + \\
&+ \frac{D}{4} (1 - \cos 2\beta_i) - \frac{D}{4} \sin 2\alpha_i (1 + \cos 2\beta_i), \\
E_{0,-1}^{(i)} &= \frac{1}{4} \left\{ \frac{D}{2} (1 + \sin 2\alpha_i) + (-1)^{i+1} H \cos \theta_i \cos 2\alpha_i + \left[(-1)^{i+1} H \cos \theta_i \cos 2\alpha_i + \right. \right. \\
&\left. \left. \frac{D}{2} (1 + \sin 2\alpha_i) \right] \cos 2\beta_i + H \sin \theta_i \sin(\alpha_i + \pi/4) \sin 2\beta_i \right\} \pm \\
&\pm \frac{1}{4} \left\{ \frac{D}{2} (1 - 3 \sin 2\alpha_i) + (-1)^i 3H \cos \theta_i \cos 2\alpha_i + H \sin \theta_i \sin(\alpha_i + \pi/4) \sin 2\beta_i + \right. \\
&\left. + \left[\frac{D}{2} (1 + \sin 2\alpha_i) + (-1)^{i+1} H \cos \theta_i \cos 2\alpha_i \right] \cos 2\beta_i \right\} \cos 2\gamma_i \mp \\
&\mp \left\{ \left[(-1)^{i+1} H \cos \theta_i \sin 2\alpha_i - \frac{D}{2} \cos 2\alpha_i \right] \sin \beta_i + \right. \\
&\left. \left[H \sin \theta_i \cos(\alpha_i + \pi/4) \cos \beta_i \right] \right\} \sin 2\gamma_i,
\end{aligned} \tag{1.85}$$

где α , β и γ – параметры унитарных преобразований, которые определяются следующими уравнениями:

$$\begin{aligned}
&\left\{ -H \sin \theta_i \sin(\alpha_i + \pi/4) \sin 2\beta_i + (-1)^{i+1} H \cos \theta_i \cos 2\alpha_i (3 - \cos 2\beta_i) - \right. \\
&\left. - \frac{D}{2} (1 + \cos 2\beta_i) + \frac{D}{2} \sin 2\alpha_i (3 - \cos 2\beta_i) \right\} \sin 2\gamma_i = \\
&= \left\{ H \sin \theta_i \cos(\alpha_i + \pi/4) \cos \beta_i + 2 \left[(-1)^{i+1} 2H \cos \theta_i \sin 2\alpha_i - D \cos 2\alpha_i \right] \sin \beta_i \right\} \cos 2\gamma_i. \\
\tan \beta_i &= \frac{(-1)^{i+1} H \cos \theta_i \sin 2\alpha_i - \frac{D}{2} \cos 2\alpha_i}{H \sin \theta_i \cos(\alpha_i + \pi/4)}, \\
\tan 2\beta_i &= \frac{H \sin \theta_i \sin(\alpha_i + \pi/4)}{D(1 + \sin 2\alpha_i) + (-1)^{i+1} 2H \sin 2\alpha_i \cos \theta_i},
\end{aligned} \tag{1.86}$$

В рассматриваемом нами случае низких температур основным уровнем энергии будет E_1 . Тогда функция плотности свободной энергии подрешетки с номером i может представлена в виде: $F_i = E_1^{(i)}$.

Значения равновесных углов ориентации магнитных моментов подрешеток определяются уравнениями:

$$\frac{\partial F_i}{\partial \theta_i} = \frac{\partial E_1^{(i)}}{\partial \theta_i} = 0. \quad (1.87)$$

Из совместного решения уравнений (1.85)-(1.87), можно определить значения углов ориентации магнитных моментов подрешеток:

$$\sin \theta_1 = \frac{1}{H} \left(\frac{D}{4} - \sqrt{H^2 + \left(\frac{D}{4} \right)^2} \right), \quad \sin \theta_2 = \frac{1}{H} \left(-\frac{D}{4} + \sqrt{H^2 + \left(\frac{D}{4} \right)^2} \right). \quad (1.88)$$

Т.е. равновесные углы связаны соотношением $\theta_1 = -\theta_2$. Отсюда следует, что в изингоподобном антиферромагнетике с немалой одноионной анизотропией типа легкой плоскости в поперечном внешнем поле промежуточное состояние является спин-флоп фаза, а не сверхтвердое состояние, как это было в продольном внешнем поле.

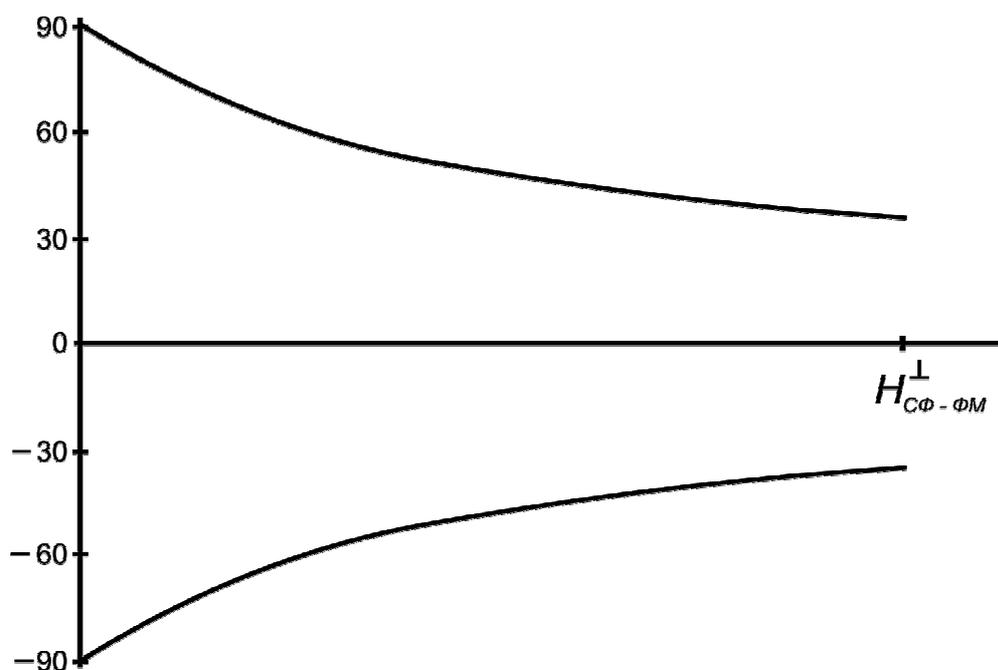


Рис. 1.6. График зависимостей углов ориентации магнитных моментов в подрешетках как функций внешнего поля.

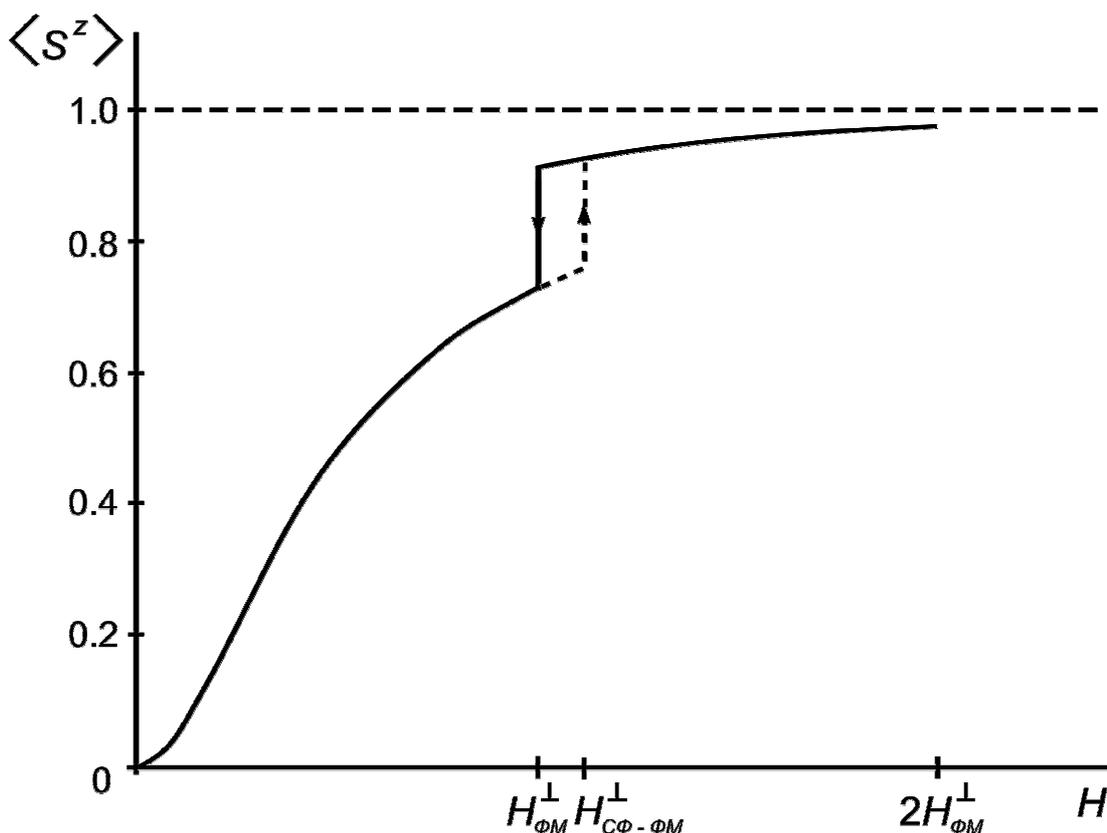


Рис. 1.7. Зависимость среднего значения спина в узлах решетки от значения внешнего поля.

Отсюда следует, что фазовый переход из ненасыщенной ферромагнитной фазы в спин-флоп фазу происходит при значении поля H_1 , а фазовый переход спин-флоп – квадрупольная фазы – при значении поля $H = 0$.

На рис. 1.6 представлен график зависимости углов ориентации магнитных моментов подрешеток как функции внешнего поля. На рис. 1.7 приведена зависимость среднего спина в узлах решеток от значения внешнего поля.

1.3. Формирование сверхтвёрдой фазы в анизотропном двумерном антиферромагнетике с изингоподобным взаимодействием.

1.3.1. Исследования пространственно однородных фаз.

Перейдем к исследованию фазовых состояний и спектров элементарных возбуждений ультратонкой сильно анизотропной пленки со спином единица и фрустрированным изингоподобным обменным взаимодействием. В данном исследовании рассматривается анизотропия типа «легкой плоскости», в базисной плоскости XOY . Внешнее магнитное поле параллельно оси OZ . Гамильтониан системы представим в следующем виде:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} J_{mm'} S_m^z S_{m'}^z - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \tilde{J}_{mn} S_m^z S_n^z - \frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} V_{mm'}^{ij} S_m^i S_{m'}^j - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \tilde{V}_{mn}^{ij} S_m^i S_n^j - H \sum_m S_m^z + D \sum_m (S_m^z)^2 \end{aligned}, \quad (1.89)$$

где $J_{nn'}$ и \tilde{J}_{nm} – подрешеточный (ферромагнитный) и межподрешеточный (антиферромагнитный) обменные интегралы, соответственно, причем $J_{nn'} < \tilde{J}_{nm}$, $V_{nn'}^{ij}$ и \tilde{V}_{nm}^{ij} – компоненты тензоров подрешеточного и межподрешеточного магнитодипольного взаимодействия, D – константа одноионной анизотропии, H – внешнее магнитное поле в энергетических единицах, S_n^i – i -я проекция оператора спина в узле n . Фурье-компоненты тензоров магнитодипольного взаимодействия внутри подрешетки имеют вид [234]

$$\begin{aligned} V^{zz}(k) = & -\frac{2}{3} A_0 + \Omega_0 k, \quad V^{xx}(k) = \frac{A_0}{3} - \Omega_0 k \cos^2 \varphi, \quad V^{yy}(k) = \frac{A_0}{3} - \Omega_0 k \sin^2 \varphi, \\ V^{xy}(k) = & -\frac{\Omega_0 k}{2} \sin 2\varphi, \quad V^{xz}(k) = V^{yz}(k) = 0, \end{aligned} \quad (1.90)$$

где $A_0 = \frac{3}{2}(g\mu_B)^2 \sum_{R \neq 0} R^{-3}$, $\Omega_0 = \frac{2\pi}{a^2}(g\mu_B)^2$ — параметры магнитодипольного взаимодействия, g — гиромагнитное отношение; μ_B — магнетон Бора; a^2 — «площадь» плоской элементарной ячейки подрешетки, k — волновой вектор, φ — угол, образуемый волновым вектором с осью OX в базисной плоскости XOY . Такой выбор способа задания ориентации волнового вектора в базисной плоскости произволен и не снижает общности рассматриваемой задачи. Он был сделан с единственной целью упростить последующие вычисления. Выражения для Фурье-компонент тензора магнитодипольного взаимодействия между подрешетками имеют вид, аналогичный (1.90), при замене констант магнитодипольного взаимодействия на \tilde{A}_0 и $\tilde{\Omega}_0$, характеризующие межподрешеточное магнитодипольное взаимодействие. Причем, как было отмечено выше, имеют место следующие соотношения: $\tilde{A}_0 > A_0$ и $\tilde{\Omega}_0 > \Omega_0$.

В дальнейшем мы предполагаем, что энергия обменных взаимодействий много меньше энергии одноионной анизотропии. Таким образом, имеет место следующее соотношение материальных параметров системы: $D \gg \tilde{J}_0 > J_0 \gg \tilde{A}_0 > A_0$. При этом величина внешнего магнитного поля является варьируемым параметром. Кроме того, мы рассматриваем случай низких температур ($T \rightarrow 0$).

Предположим, что величина внешнего поля настолько большая, что зеемановская энергия преобладает над энергиями других взаимодействий $H \gg D \gg \tilde{J}_0 > J_0 \gg \tilde{A}_0 > A_0$. Очевидно, что в таком случае магнитные моменты всех узлов ориентируются вдоль поля, т. е. поведение системы можно свести к поведению ферромагнетика.

Выделяя среднее поле, гамильтониан (1.89) можно представить в следующем виде: $H = H_0 + H_{\text{int}}$, где H_{int} — гамильтониан взаимодействия, а H_0 — одноузельный гамильтониан, который в данном случае имеет следующий вид:

$$H_0 = - \left[H + \left(J_0 - \frac{2}{3}A_0 - \frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{1}{3}\tilde{A}_0 \right) \langle S^z \rangle \right] \sum_n S_n^z + D \sum_n (S_n^z)^2. \quad (1.91)$$

В рассматриваемом случае использование приближения среднего поля вполне обосновано, поскольку рассматривается случай низких температур, когда температурные флуктуации малы и практически не влияют на состояние системы. Что же касается квантовых флуктуаций, то они конечны, поскольку сходимость интеграла флуктуаций для всех однородных состояний обеспечивается учетом магнитодипольного взаимодействия [234-237] и влиянием внешнего магнитного поля. Поэтому теорема Мермина–Вагнера о реализации дальнего магнитного порядка в двумерных системах не применима для рассматриваемой модели. Таким образом, можно утверждать, что приближение среднего поля можно использовать при рассмотрении данной модели. Кроме того, как было доказано в [217,218], приближение среднего поля можно использовать при рассмотрении систем любой размерности. Также необходимо отметить работу [109], где было показано, что приближение среднего поля дает правильные результаты для модели Гейзенберга с фрустрированным обменным взаимодействием для спина 1/2, в частности при исследовании сверхтвёрдой магнитной фазы.

Решая волновое уравнение с гамильтонианом (1.91), определим энергетические уровни магнитного иона, а также собственные функции

$$E_{1,-1} = \mp H + D \mp \left(J_0 - \frac{2}{3} A_0 - \frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{1}{3} \tilde{A}_0 \right) \langle S^z \rangle, E_0 = 0; \quad (1.92)$$

$$\Psi(1) = |1\rangle, \Psi(0) = |0\rangle, \Psi(-1) = |-1\rangle. \quad (1.93)$$

Как видно из (5.92), когда энергия внешнего магнитного поля превосходит энергию всех других взаимодействий в системе, нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а, следовательно, $|1\rangle$ основное состояние системы. На базисе собственных функций системы построим операторы Хаббарда, имеющие вид (1.82).

При этом среднее значение намагниченности на узле $\langle S^z \rangle = 1$. Данное значение параметра порядка справедливо для ферромагнитного упорядочения, реализация которого обусловлена сильным внешним полем.

Чтобы определить границы существования ферромагнитного состояния, исследуем его динамические особенности, а именно рассмотрим спектры элементарных возбуждений, которые можно найти, рассмотрев полюса функции Грина системы [221,222,232].

Решение дисперсионного уравнения для ферромагнитной фазы позволяет найти спектр элементарных возбуждений, который в длинноволновом пределе имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{FM}^2(k) = & \left(H - D + J_0 - A_0 - \frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{2}{3}\tilde{A}_0 \right)^2 + \\ & + \left(H - D + J_0 - A_0 - \frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{2}{3}\tilde{A}_0 \right) (\Omega_0 + \tilde{\Omega}_0) k \end{aligned} \quad (1.94)$$

Прежде всего отметим, что в спектре (1.94) имеется корневая зависимость от волнового вектора, обусловленная учетом магнитодипольного взаимодействия. Такая зависимость приводит к сходимости интеграла флуктуаций, а, следовательно, и к стабилизации дальнего магнитного порядка в двумерной системе. Очевидно, спектр (1.94) становится бездисперсионным, если пренебречь магнитодипольным взаимодействием, что характерно для систем, в которых учитывается только изингоподобное обменное взаимодействие. Необходимо отметить, что если внешнее магнитное поле нарушает симметрию системы, например поле перпендикулярно оси OZ (что не соответствует рассматриваемому случаю, так как поле параллельно оси OZ), то изинговское обменное взаимодействие также может приводить к дисперсии магнонов.

Кроме того, видно, что энергия магнонов не зависит от ориентации волнового вектора и принимает минимальное значение при $k = 0$. Линия устойчивости ферромагнитной фазы определяется из обращения в ноль энергетической щели в спектре (1.94) и имеет вид

$$H_{FM}^C = D - J_0 + \frac{\tilde{J}_0}{2} + A_0 + \frac{2}{3}\tilde{A}_0. \quad (1.95)$$

Таким образом, учет магнитодипольного взаимодействия изменяет закон дисперсии элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе, однако не приводит к возникновению неоднородного состояния. Т. е. влияние магнитодипольного взаимодействия сводится к статической перенормировке линии устойчивости ферромагнитной фазы – уменьшению области существования ферромагнитного состояния по сравнению с результатами, полученными для трехмерных моделей без учета магнитодипольного взаимодействия [131].

Теперь исследуем случай, когда энергия внешнего магнитного поля много меньше энергии одноионной анизотропии ($H \ll D$). В этом случае магнитным моментам энергетически выгодно ориентироваться в базисной плоскости. Одноузельный гамильтониан в этом состоянии совпадает с одноузельным гамильтонианом (1.91). Решение уравнения Шредингера дает энергетический спектр магнитного иона (1.92) и собственные функции (1.93). Однако, в исследуемом случае нижайшим энергетическим уровнем является E_0 , т. е. в системе происходит инверсия энергетических уровней. При этом состояние $|0\rangle$ является основным состоянием системы. Это приводит к тому, что среднее значение спина в узлах решетки равно нулю.

Таким образом реализуется новое состояние с нулевой намагниченностью, не являющееся при этом парамагнитным, поскольку для него отличны от нуля компоненты тензора квадрупольных моментов, и параметры порядка имеют следующий вид:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 3 \langle S^z \rangle^2 - 2, q_2^t = 0, t=2, xy, yz, zx.$$

Геометрическим образом этого состояния является эллипсоид, главная ось которого лежит в плоскости XOY .

Решая дисперсионное уравнение в квадрупольном состоянии, найдем спектр элементарных возбуждений, который в длинноволновом пределе имеет следующий вид:

$$\varepsilon_{QU}^2(k) = D^2 + H^2 - 4D \left(\frac{2}{3}(A_0 + \tilde{A}_0) + (\Omega_0 + \tilde{\Omega}_0)k \right) -$$

$$-2 \left[H^2 D \left(D - \frac{8}{3}(A_0 + \tilde{A}_0) + 4(\Omega_0 + \tilde{\Omega}_0)k \right) + \right. \\ \left. + \frac{4}{9} D^2 (A_0 - \tilde{A}_0) \left((A_0 - \tilde{A}_0) + 3(\Omega_0 - \tilde{\Omega}_0)k \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (1.96)$$

Видно, что спектр (1.96) имеет корневую зависимость от волнового вектора и не зависит от его ориентации. Причем, как и в ферромагнитной фазе, зависимость от волнового вектора возникает благодаря учету магнитодипольного взаимодействия. Минимум энергии элементарных возбуждений наблюдается при нулевом значении k . Линию устойчивости квадрупольного состояния получим из обращения в ноль энергетической щели в спектре (1.96):

$$H_{QU}^C = D - \frac{2}{3}(A_0 + 3\tilde{A}_0). \quad (1.97)$$

В данном случае, как и в случае сильного магнитного поля, влияние магнитодипольного взаимодействия также не приводит к появлению пространственно неоднородных фазовых состояний, но проявляется в статической перенормировке спектров, уменьшая область существования квадрупольной фазы, по сравнению с результатами, полученными для объемных систем [131].

1.3.2. Реализация пространственно неоднородной фазы.

Теперь рассмотрим случай промежуточных полей, когда $H_{QU}^C < H < H_{FM}^C$. В этом случае конкуренция легкоплоскостной анизотропии, усиливаемой магнитодипольным взаимодействием, внешнего магнитного поля и обменных взаимодействий приводит к тому, что магнитные моменты подрешеток ориентированы под некоторым углом к направлению внешнего поля. Предположим, что в разных подрешетках отклонение магнитных моментов от

оси квантования различно, т. е. система находится не в спин-флоп фазе, а в «сверхтвердом» состоянии [108,114,127,128].

Введем системы координат, привязанные к подрешеткам (рис. 1.8). Магнитный момент первой подрешетки с направлением внешнего поля в системе координат, связанной с подрешетками (см. рис. 1.5), образует угол ϑ_1 . Направление магнитного момента второй подрешетки будет составлять угол ϑ_2 с направлением поля. Для определенности можно положить, что магнитные моменты подрешеток лежат в плоскости XOZ , что приводит к некоторым математическим упрощениям не уменьшая при этом общности исследуемой задачи.

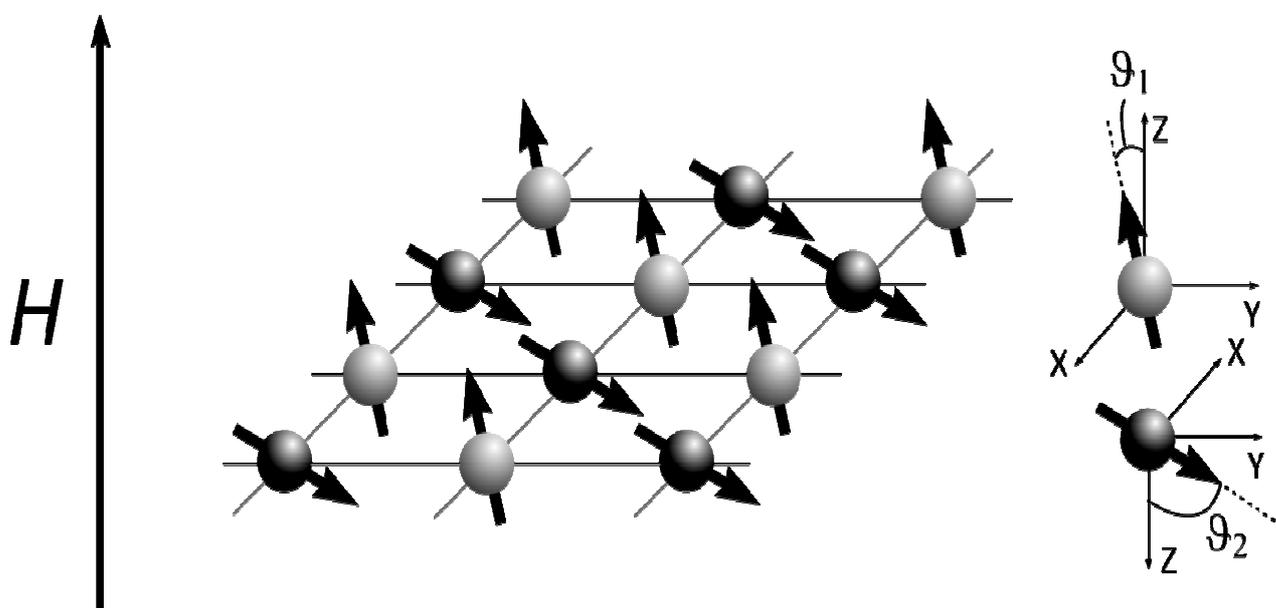


Рис. 1.8. Направление моментов в подрешетках в «сверхтвердой» магнитной фазе.

Исследование данного состояния удобно проводить в повернутой системе координат, когда намагниченности подрешеток ориентированы вдоль оси OZ . Повернем оси координат, связанные с первой подрешеткой на угол θ_1 вокруг OY , а оси координат, связанные со второй подрешеткой повернем на угол θ_2 . При этом гамильтониан (1.89) можно представить в виде суммы двух слагаемых, одно из которых диагонально в терминах операторов Хаббарда, а

второе— содержит члены, пропорциональные недиагональным операторам Хаббарда.

В данном случае удобно диагонализировать гамильтониан, применяя бозонизацию для операторов Хаббарда [233]. В основе метода лежит идея построения бозевского аналога гамильтониана системы, т. е. некоторым образом связать операторы рождения и уничтожения с операторами Хаббарда так, чтобы определенная часть матричных элементов совпадала с матричными элементами гамильтониана (1.89). Однако, проблема состоит в том, что размерность физического пространства операторов Хаббарда равна трем (для $S = 1$), тогда как гильбертово пространство операторов рождения и уничтожения бесконечномерное. Эту проблему удастся решить путем построения псевдо хаббардовских операторов, которые действуют в бесконечномерном гильбертовом пространстве состояний и определенным образом связаны как с операторами Хаббарда, так и с операторами рождения и уничтожения. Используя данный подход, мы можем представить гамильтониан (1.89) через бозе-операторы рождения и уничтожения, в результате чего для i -той подрешетки получим

$$H_i = H_i^{(1)} + H_i^{(2)}, \quad (1.98)$$

где $H_i^{(1)}$ содержит только слагаемые, линейные по операторам рождения и уничтожения магнонов, а $H_i^{(2)}$ представляет собой гамильтониан идеального газа магнонов. Поскольку среднее от линейных слагаемых обращается в ноль, то они не несут никакого физического смысла, и можно положить амплитуды при этих слагаемых равными нулю, что приводит к системе уравнений на равновесное значение углов ориентации магнитных моментов подрешеток φ_1 и φ_2 :

$$\begin{aligned}
H + (J_0 - A_0) \cos^2 \varphi_1 - D \cos \varphi_1 &= -\frac{1}{2} \left(\tilde{J}_0 - \frac{2}{3} \tilde{A}_0 - \tilde{A}_0 \frac{\sin \varphi_2}{6 \sin \varphi_1} \right) \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \\
H + (J_0 - A_0) \cos^2 \varphi_2 - D \cos \varphi_2 &= \frac{1}{2} \left(\tilde{J}_0 + \frac{2}{3} \tilde{A}_0 + \tilde{A}_0 \frac{\sin \varphi_1}{6 \sin \varphi_2} \right) \cos \varphi_1 \cos \varphi_2
\end{aligned} \tag{1.99}$$

Диагонализуя гамильтониан $\mathbf{H}_i^{(2)}$ с помощью стандартного $u-v$ преобразования [154,226], получим

$$\mathbf{H}_i^{(2)} = \sum_k \varepsilon_{SS_1}^i(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k \varepsilon_{SS_2}^i(k) \beta_k^+ \beta_k, \tag{1.100}$$

где $\varepsilon_{SS_2}^i$ и $\varepsilon_{SS_1}^i$ — спектр высокочастотных и низкочастотных возбуждений i -ой подрешетки, β^+ и β — бозе-операторы, отвечающие переходам из состояния E_{-1} в состояние E_1 и обратно, α^+ и α — отвечают переходам иона из состояния E_0 в состояние E_1 и обратно. Аналитически невозможно найти точный вид спектров, но можно найти выражения для спектров по теории возмущений вблизи линий устойчивости ферромагнитного состояния. Вблизи этой линии низкочастотный спектр для i -ой подрешетки можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
\left(\varepsilon_{SS_1}^i \right)^2 &= \left[H - D + J_0 - (-1)^i \frac{\tilde{J}_0}{2} - A_0 - \frac{\tilde{A}_0}{6} + \right. \\
&+ \frac{1}{4} \left[3(\Omega_0 \cos \varphi_i - \tilde{\Omega}_0 \cos \varphi_{i+1}) \cos \varphi_i \cos^2 \psi + \right. \\
&+ \left. \frac{3}{8} (J_0 \sin \varphi_i + (-1)^i \tilde{J}_0 \sin \varphi_{i+1}) k^2 + (\Omega_0 + \tilde{\Omega}_0) \sin^2 \psi \right] k \left. \right] \cdot \\
&\cdot \left[H - D - A_0 - \frac{2}{3} \tilde{A}_0 + J_0 - (-1)^i \frac{\tilde{J}_0}{2} + \right. \\
&+ \frac{1}{4} \left[(\Omega_0 \cos \varphi_i - \tilde{\Omega}_0 \cos \varphi_{i+1}) \cos \varphi_i \cos^2 \psi + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{8} (J_0 \sin \varphi_i + (-1)^i \tilde{J}_0 \sin \varphi_{i+1}) k^2 + 3(\Omega_0 + \tilde{\Omega}_0) \sin^2 \psi \right] k \left. \right]
\end{aligned} \tag{1.101}$$

Рассмотрим эти спектры вблизи линии фазового перехода в ферромагнитную фазу, когда \mathcal{S}_i практически равны нулю. В этом случае линия

потери устойчивости «сверхтвердой» фазы определяется уравнением (1.101) для второй подрешетки ($i = 2$)

$$H_{SS}^C = D - J_0 + \frac{\tilde{J}_0}{2} + A_0 + \frac{2}{3}\tilde{A}_0. \quad (1.102)$$

Видно, что выражение (1.102) совпадает с (1.95), что свидетельствует о том, что переход из «сверхтвердого» состояния в ферромагнитную фазу является фазовым переходом второго рода, а поле (1.95) или (1.102) – это поле фазового перехода. Это также видно из системы уравнений (1.99). Угол отклонения намагниченности φ_2 от направления внешнего магнитного поля становится равным нулю при $H = H_{FM}^C$, в то время как намагниченность первой подрешетки ориентируется по полю раньше. Очевидно, что поведение спектров (1.101) определяется углом ориентации ψ в базисной плоскости волнового вектора. Знак при слагаемом линейного от волнового вектора может меняться в зависимости от значения угла ψ . Если это слагаемое будет меньше нуля, то знаки при квадратичных и линейных по волновому вектору слагаемыми будут различаться, следовательно спектр элементарных возбуждений будет соответствовать неоднородному случаю [132]. Минимуму энергии спектра возбуждения будет соответствовать не $k = 0$, а некоторое конечное значение волнового вектора $k=k^*$, которое для спектра (1.101) имеет вид

$$k_i^* = \left[H - D + J_0 - (-1)^i \frac{\tilde{J}_0}{2} - A_0 - \frac{7}{12}\tilde{A}_0 \right] \cdot \left(\tilde{\Omega}_0 \cos 2\psi - \Omega_0 \right) / \left[\left(\tilde{J}_0 + (-1)^i J_0 \right) \sin^2 \theta_i + \frac{3 \left(\Omega_0 - \tilde{\Omega}_0 \cos 2\psi \right)^2 + \left(\Omega_0^2 - \tilde{\Omega}_0^2 \right) \sin^2 2\psi}{4 \left(H - D + J_0 + \frac{\tilde{J}_0}{2} - A_0 - \frac{7}{12}\tilde{A}_0 \right)} \right] \quad (1.103)$$

Из соотношения (1.103) следует, что период неоднородности, обратно пропорциональный k^* , существенно зависит не только от угла ориентации волнового вектора, но и от соотношений между параметрами

магнитодипольного взаимодействия. Анализ этого выражения показывает, что критическое значение волнового вектора k_i^* для обеих подрешеток принимает положительное значение, если $\Omega_0 < \tilde{\Omega}_0 \cos 2\psi$. Из этого соотношения легко получить условие на угол ориентации волнового вектора в базисной плоскости, при выполнении которого $k_i^* > 0$

$$\cos 2\psi > \frac{\Omega_0}{\tilde{\Omega}_0}, \quad \tilde{\Omega}_0 \geq \Omega_0. \quad (1.104)$$

Таким образом, при выполнении условия (1.104) минимум энергии элементарных возбуждений (1.101) наблюдается при отличных от нуля значениях волнового вектора, при этом система находится в неоднородной магнитной фазе с периодом неоднородности $1/k^*$. Чтобы найти линию устойчивости «сверхтвердого» магнитного состояния вблизи ферромагнитной фазы, положим энергетическую щель в спектрах (1.101) равной нулю. Учитывая (1.103), получаем для первой и второй подрешеток соответственно

$$H_{IN_1}^C = D - J_0 - \frac{\tilde{J}_0}{2} + A_0 + \frac{2}{3}\tilde{A}_0 - \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{D - J_0 + A_0}{\tilde{J}_0 - J_0}}(\tilde{\Omega}_0 \cos 2\psi - \Omega_0), \quad (1.105)$$

$$H_{IN_2}^C = D - J_0 + \frac{\tilde{J}_0}{2} + A_0 + \frac{2}{3}\tilde{A}_0 - \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\frac{D - J_0 + A_0}{\tilde{J}_0 + J_0}}(\tilde{\Omega}_0 \cos 2\psi - \Omega_0), \quad (1.106)$$

Видно, что $H_{IN_1}^C < H_{IN_2}^C$, т. е. вторая подрешетка переходит в пространственно-неоднородное состояние при больших полях. Следовательно, поле перехода из ферромагнитной фазы в неоднородное состояние определяется выражением (1.106) с периодом неоднородности $1/k^*$.

Реализация пространственно-неоднородной фазы в рассматриваемой модели определяется z -ой проекцией намагниченности: чем больше эта проекция намагниченности, тем больше влияние магнитодипольного взаимодействия, определяющего реализацию пространственно-неоднородной магнитной фазы. Однако, рост значения внешнего поля (а значит z компоненты магнитного момента) из-за конкуренции между значениями внешнего поля и легкоплоскостной анизотропией совместно с изингоподобным обменным

взаимодействием приведет к переходу между однородной сверхтвердой и пространственно-неоднородной фазой при $H > H_{IN_2}^C$. В этом случае линия устойчивости (1.106) реализуется вблизи ферромагнитной фазы как видно из выражений (1.95) и (1.106), значения H_{FM}^C и $H_{IN_2}^C$ близки. При этом вопрос о фазовых состояниях вблизи линии устойчивости квадрупольной фазы (1.97) остается открытым. Магнитный момент отличен от нуля при $H \geq H_{QU}^C$, но все еще слишком мал благодаря сильному влиянию немалой одноионной анизотропии. В результате этого, влияние магнитодипольного взаимодействия пренебрежимо мало вблизи линии устойчивости квадрупольной фазы.

Поэтому аналитический анализ области устойчивости пространственно-неоднородной фазы вблизи H_{QU}^C невозможен. Этот анализ можно провести только численно, но это выходит за рамки настоящего аналитического исследования.

Используя полученные результаты, можно построить качественную фазовую диаграмму рассматриваемой системы (рис. 1.9). Пунктирная линия обозначает фазовый переход второго рода из сверхтвердой магнитной фазы в ферромагнитную фазу, в то время как сплошные линии обозначают фазовые переходы первого рода.

Необходимо напомнить, что мы рассматриваем случай большой легкоплоскостной одноионной анизотропии, энергия которой превосходит энергию обменного взаимодействия, что приводит к реализации квадрупольной фазы в слабом внешнем магнитном поле. Минимальное значение константы анизотропии, позволяющее реализоваться квадрупольной фазе, было найдено, например в [130,131]: $D^* = 2J_0 - \tilde{J}_0/2$. При меньших значениях константы одноионной анизотропии в системе может реализоваться антиферромагнитная или квадрупольно-антиферромагнитная фаза, но мы не рассматриваем этот случай.

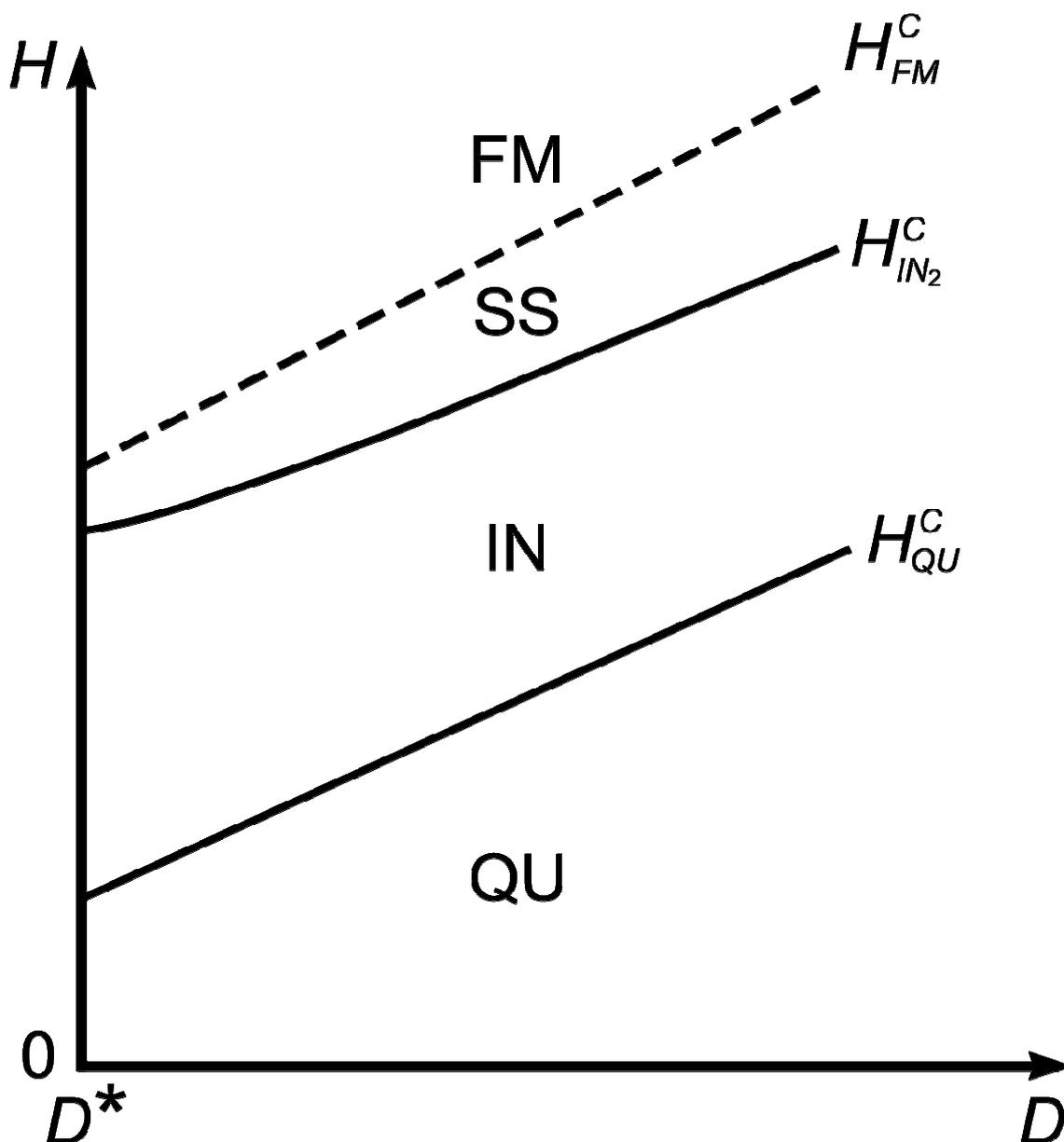


Рис. 1.9. Качественная фазовая диаграмма исследуемой системы. FM обозначает ферромагнитное состояние, QU – квадрупольную фазу, SS – «сверхтвердую» магнитную фазу, IN – пространственно-неоднородное состояние. $D^* = 2J_0 - \tilde{J}_0/2$ [130,131]. Сплошные линии обозначают фазовые переходы первого рода, пунктирные – фазовый переход второго рода.

Основные результаты первого раздела

1. Впервые исследовано поведение сильноанизотропного фрустрированного антиферромагнетика со спином единица, в котором возможно существование сверхтвердой магнитной фазы. Показано, что вместо сверхтвердой фазы в поперечном внешнем поле существует спин-флоп фаза. Доказана возможность существования в продольном магнитном поле сверхтвердой фазы.

2. Впервые исследованы особенности реализации сверхтвердой фазы во фрустрированном изинговском антиферромагнетике со спином единица во внешнем магнитном поле и учетом немалой одноионной анизотропией типа легкой плоскости. Предсказана возможность существования сверхтвердой магнитной фазы в продольном внешнем поле. Показано, что в случае поперечного внешнего поля в рассматриваемой системе сверхтвердая магнитная фаза не реализуется.

3. Исследована модель Изинга с фрустрированным обменным взаимодействием для ультратонкой сильно анизотропной антиферромагнитной пленки в среднеполевом приближении при низкой температуре. Получены условия на материальные константы системы для реализации сверхтвердой магнитной фазы. Исследованы статических и динамических свойства реализующихся фаз в результате учета магнитодипольного.

Раздел 2. Исследование температурной зависимости статических и динамических свойств анизотропных ферримагнетика и ферромагнетика

В последнее время возник новый раздел прикладной и фундаментальной областей физики магнетизма – фемтомагнетизм [139]. В его основе лежит возможность управления магнитным порядком магнетиков с помощью сверхкоротких (фемтосекундных) лазерных импульсов [140,141]. Не так давно для ферримагнетика $GdFeCo$, представляющего сплав переходных и редкоземельного металлов, было обнаружено сверхбыстрое (за промежуток времени примерно нескольких пикосекунд) перемагничивание подрешеток под действием импульсов лазера длительностью несколько десятков фемтосекунд [142].

Выводы в результате данной [142] работы оказались достаточно необычными и неожиданными и они соответствуют для ферримагнетиков. В результате исследования получено, что эффект переориентации связан не с поляризацией света, а определяется только мгновенным (но интенсивным, с температурами больше температуры точки Кюри T_C) нагревом образца. Причина переориентационного эффекта на микроскопическом уровне полностью пока не ясна, хотя различные его аспекты широко обсуждаются в литературе [143-148]. Установлено, что в существовании эффекта определяющую роль играет изменение абсолютных значений магнитных моментов подрешеток $|\vec{M}_{1,2}|$ в температурном интервале, в котором значения $\vec{M}_1(t)$ и $\vec{M}_2(t)$ много меньше по отношению к их максимальных значений [142]. Таким образом, для описания эффекта определяющей является эволюция продольной составляющей магнитных моментов подрешеток ферримагнетика, так как стандартная спиновая динамика поперечных компонент магнитных моментов (описываемая с помощью уравнения Ландау–Лифшица) не может эффективно проявляться при таких коротких временных

промежутках. В связи с этим имеет интерес к анализу магнитно упорядоченных состояний ферримагнетика в области высоких температур близких к температурам Кюри при условии малости значений \vec{M}_1 и \vec{M}_2 .

Известно, что учет большой одноионной анизотропии приводит к проявлению квантовых эффектов, не возможных в стандартных феноменологических подходах. Для исследования подобных эффектов необходим учет динамики тензорных параметров порядка, представляющих собой средние от квадратов спиновых операторов, что выходит за границу области применения уравнения Ландау–Лифшица [14,15]. В частности, для магнетика с ферромагнитным взаимодействием эквивалентных спинов и большой одноионной анизотропией показана возможность эффекта квантового сокращения спина, при этом намагниченность меньше номинальной даже при нулевой температуре [154]. Этот эффект возникает при значении спина магнитного иона $S=1$, но в принципе возможен и для магнетиков со спином, $S=2$ [59], а также и для систем с полуцелым значением спина $S=3/2$ [62]. Эффект квантового сокращения спина характерен для магнетиков с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», но не наблюдается в магнетиках с одноионной анизотропией типа «легкая ось», что обусловлено структурой основного состояния [155,156]. Как предельный случай реализации таких эффектов отметим существование так называемых нематических фаз магнетика со средним значением спина равным нулю [59,62,154].

Случай двухподрешеточного ферримагнетика, в котором одна из подрешеток которых – изотропна, а во второй подрешетке учтена большая одноионная анизотропия, важен для экспериментальных исследований [142], но при этом недостаточно изучен. Недавно было показано, что эффект сокращения спина анизотропной подрешетки при низкой температуре значительно подавлен действием обменного поля изотропной подрешетки [157]. При этом, будет вполне ожидаемо, что в области высоких температурах, когда обменное поле и намагниченность изотропной подрешетки уменьшаются, на магнитные свойства магнетика существенное влияние окажет эффект

квантового сокращения средних спинов подрешетки с одноионной анизотропией [158,159]. Знание специфики роли квантового эффекта сокращения спина при температуре отличной от нуля может стать существенным при понимании эффекта переориентации намагниченностей подрешеток в ферримагнетиках, так как основная часть процесса переориентации происходит в отрезок времени, когда температура медленно меняется, и имеет значение порядка T_C .

В **первом** подразделе исследованы температурные зависимости намагниченностей подрешеток и спектров элементарных возбуждений анизотропного ферримагнетика.

Во **втором** подразделе исследована динамика легкоплоскостного ферромагнетика со спином $S=1$ при конечных температурах и с учетом эффекта квантового сокращения спина.

2.1. Исследование двухподрешеточного коллинеарного магнетика с нескомпенсированными магнитными моментами подрешеток.

2.1.1. Компенсация магнитных моментов подрешеток в случае низких температур

В качестве исследуемой системы будем рассматривать коллинеарный магнетик с двумя подрешетками. Магнитные моменты подрешеток – нескомпенсированы. Для определенности считаем значение спина магнитных ионов первой подрешетки равны– единице ($S_1 = 1$), а второй– $1/2$ ($s_2 = 1/2$). Кроме того, первая подрешетка является анизотропной и имеет легкоплоскостную анизотропию. Гамильтониан такой системы имеет следующий вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_{nn'}^{(1)} \vec{S}_n \vec{S}_{n'} - \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{mm'}^{(2)} \vec{s}_m \vec{s}_{m'} - \sum_{n,m} J_{nm}^{(12)} \vec{S}_n \vec{s}_m + \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^x)^2, \quad (2.1)$$

где $J_{nn'}^{(1)} > 0, J_{mm'}^{(2)} > 0, J_{nm}^{(12)} < 0$ – параметры обменного взаимодействия внутри подрешеток и межподрешеточного обменного взаимодействия; m, n – номера узлов подрешеток; S_n – оператор спинов первой подрешетки; s_m – оператор спинов второй подрешетки; $\beta > 0$ – константа одноионной анизотропии типа „легкая плоскость“ (ZOY – базисная плоскость). Вычисления будем проводить для случая низких температур.

Операторы второй подрешетки развернем для того, чтобы в обеих подрешетках совпали ориентации осей квантования. В результате унитарного поворота на угол π вокруг оси OX $U(\varphi) = \prod_n \exp(i\varphi S_n^x)$ компоненты оператора спина для второй подрешетки принимают вид:

$$s_m^x \rightarrow s_m^x, s_m^y \rightarrow -s_m^y, s_m^z \rightarrow -s_m^z.$$

Необходимо отметить, что при таких преобразованиях сохраняются стандартные коммутационные соотношения между компонентами спиновых операторов.

Будем использовать технику операторов Хаббарда для точного рассмотрения одноионной анизотропии. Данные операторы будем строить на базисе собственных волновых функций нулевого гамильтониана. Выделяя в обменных частях гамильтониана (2.1) средние поля в соответствующих подрешетках, для одноузельного гамильтониана получим

$$H_0 = -\bar{H}_1 S_n^z - \bar{H}_2 s_m^z + \beta (S_n^x)^2, \quad (2.2)$$

где $\bar{H}_1 = J_0^{(1)} \langle S_n^z \rangle + |J_0^{(12)}| \langle s_m^z \rangle$, $\bar{H}_2 = J_0^{(2)} \langle s_m^z \rangle + |J_0^{(12)}| \langle S_n^z \rangle$; $J_0^{(1)}, J_0^{(2)}, J_0^{(12)}$ – Фурье-образы констант обменного взаимодействия.

Решение одноузельной задачи с гамильтонианом (2.2) позволяет получить уровни энергии магнитных ионов для обеих подрешеток

$$E_{1,-1} = \mp \bar{H}_1 \cos 2\alpha \pm \frac{\beta}{2} \sin 2\alpha, E_0 = \frac{\beta}{2}, \quad (2.3)$$

$$\tilde{E}_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \mp \bar{H}_2 \quad (2.4)$$

а также вид собственных функций магнитного иона обеих подрешеток

$$\Psi(1) = \cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle, \Psi(0) = |0\rangle, \Psi(-1) = -\sin \alpha |1\rangle + \cos \alpha |-1\rangle, \quad (2.5)$$

$$\Phi\left(\frac{1}{2}\right) = \left|\frac{1}{2}\right\rangle, \Phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle. \quad (2.6)$$

В решениях введено следующее обозначение: E_k ($k=1,0,-1$)– уровни энергии магнитных ионов для первой подрешетки со значением спина $S = 1$; \tilde{E}_k ($k=1/2, -1/2$)– уровни энергии магнитных ионов для второй подрешетки со спина $s = 1/2$; $\Psi(M)$, $\Phi(M)$ — собственные функции магнитных ионов разных подрешеток. Параметр унитарного поворота [154,226] α может быть найден из решения уравнения

$$J_0^{(1)} \sin 4\alpha + |J_0^{(12)}| \sin 2\alpha + \beta \cos 2\alpha = 0. \quad (2.7)$$

На волновых функциях (2.5) и (2.6) строятся операторы Хаббарда [155,221,232] $Y^{MM} = |\Phi(M')\rangle\langle\Phi(M)|$ и $X^{MM} = |\Psi(M')\rangle\langle\Psi(M)|$ для обеих подрешеток. Связь с операторами спина имеет следующий вид:

$$S^+ = \sqrt{2} \cos \alpha (X^{10} + X^{0-1}) + \sqrt{2} \sin \alpha (X^{01} - X^{-10}), S^- = (S^+)^+,$$

$$S^z = \cos 2\alpha (X^{11} - X^{-1-1}) - \sin 2\alpha (X^{1-1} - X^{-11}), \quad (2.8)$$

и

$$s^z = \frac{1}{2} \left(Y^{\frac{11}{22}} - Y^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} \right), s^+ = Y^{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}, s^- = (s^+)^+. \quad (2.9)$$

Из вида (2.8) и (2.9) можно легко определить среднее значение намагниченности (на один узел) в каждой подрешетке при низких температурах

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha, \langle s^z \rangle = \frac{1}{2}. \quad (2.10)$$

Как следует из соотношения (2.10) и уравнения (2.7), намагниченность первой подрешетки существенно зависит от соотношения между обменными интегралами и константой одноионной анизотропии. Рассмотрим подробнее различные предельные случаи соотношений между материальными константами, предполагая температуру низкой.

1) Предположим, что материальные константы таковы, что намагниченность первой подрешетки близка к максимально возможной, т. е. $\langle S^z \rangle \approx 1$. Тогда из уравнения (2.7) получаем

$$\sin 2\alpha \approx -\frac{2\beta}{2J_0^{(1)} + |J_0^{(12)}|}.$$

При $\beta \ll J_0^{(1)}, |J_0^{(12)}|$ $\sin 2\alpha \ll 1$, а $\cos 2\alpha \approx 1$ и как следует из (2.10), $\langle S^z \rangle \approx 1$.

2) Предположим теперь, что материальные константы таковы, что намагниченность первой подрешетки мала. Тогда

$$\cos 2\alpha \approx \frac{|J_0^{(12)}|}{2(\beta - J_0^{(1)})}.$$

Это означает, что при $\beta \gg J_0^{(1)}, |J_0^{(12)}|$ намагниченность первой подрешетки становится существенно меньше максимально возможного значения, т. е. происходит квантовое сокращение спина [14]. Этот эффект связан со структурой волновой функции основного состояния магнитного иона, которая в данном случае, как следует из (2.5), имеет вид

$$\Psi(1) = \cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle$$

Как видно из этого выражения, эффект квантового сокращения спина связан с „перепутыванием“ состояний $|1\rangle$ и $|-1\rangle$ в волновой функции основного состояния. Это „перепутывание“ вызвано наличием большой одноионной анизотропии.

3) Рассмотрим, наконец, самый интересный для нас случай, когда магнитный момент первой подрешетки (на один узел) становится равным намагниченности второй подрешетки, т. е. $1/2$. Из уравнения (2.7) и связи спиновых операторов с операторами Хаббарда (2.8) можно получить

$$\cos 2\alpha \approx \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta, \quad (2.11)$$

$$\Delta \approx \frac{\beta - \sqrt{3} \left(J_0^{(1)} + |J_0^{(12)}| \right)}{2J_0^{(1)} - |J_0^{(12)}| + \sqrt{3}\beta}$$

Как следует из (2.10) и (2.11), намагниченность первой подрешетки совпадает с намагниченностью второй подрешетки при $\Delta = 0$, т. е. при

$$\beta = \sqrt{3} \left(J_0^{(1)} + |J_0^{(12)}| \right) \quad (2.12)$$

суммарная намагниченность рассматриваемого ферримагнетика становится равной нулю. Таким образом, анизотропный ферримагнетик с анизотропией, определяемой выражением (2.12), находится в точке компенсации.

Перейдем к анализу спектров элементарных возбуждений в зависимости от величины суммарной намагниченности. Спектры элементарных возбуждений (как и ранее) определяются полюсами функций Грина.

$$\varepsilon_1^2(k) = E_{1-1} \left(E_{1-1} + 2J_k^{(1)} \sin^2 2\alpha \right), \quad (2.14)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = \left(E_{10} + J_k^{(1)} \right)^2 + \left(E_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \frac{J_k^{(2)}}{2} \right)^2 - \left(J_k^{(1)} \right)^2 \sin^2 2\alpha + \left(J_k^{(12)} \right)^2 \cos 2\alpha, \quad (2.15)$$

где $E_{1-1} = E_1 - E_{-1} = -2J_0^{(1)} \cos^2 2\alpha - \left| J_0^{(12)} \right| \cos 2\alpha + \beta \sin 2\alpha$,

$$E_{10} = -\frac{\beta}{2} (1 - \sin 2\alpha) - J_0^{(1)} \cos^2 2\alpha - \frac{\left| J_0^{(12)} \right|}{2} \cos 2\alpha,$$

$$E_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = -\frac{J_0^{(2)}}{2} - J_0^{(12)} \cos 2\alpha.$$

Следует отметить, что существует еще одна ветвь магнонов, которая в длинноволновом пределе ($k \rightarrow 0$) является бесщелевой, $\varepsilon_3^2(k \rightarrow 0) = 0$.

Проанализируем решения дисперсионного уравнения в частных случаях.

1) $\langle S^z \rangle \approx 1$ – случай малой анизотропии ($\beta \ll J_0^{(1)}, \left| J_0^{(12)} \right|$):

$$\varepsilon_1^2(k) \approx \left(2J_0^{(1)} + \left| J_0^{(12)} \right| \langle S_1^z \rangle \right)^2;$$

$$\varepsilon_2^2(k) \approx \left(\frac{\beta}{2} + J_0^{(1)} + \frac{\left| J_0^{(12)} \right|}{2} - J_k^{(1)} \right)^2 + \left(\frac{J_0^{(2)}}{2} + \left| J_0^{(12)} \right| \langle S_1^z \rangle - \frac{J_k^{(2)}}{2} \right)^2 + \left(J_k^{(12)} \right)^2 \approx$$

$$\underset{k \rightarrow 0}{\approx} \left(\frac{\beta}{2} + \frac{\left| J_0^{(12)} \right|}{2} \right)^2 + \left(J_0^{(12)} \right)^2 \left(1 + \langle S_1^z \rangle^2 \right).$$

2) $\langle S^z \rangle \ll 1$ – случай большой анизотропии ($\beta \gg J_0^{(1)}, \left| J_0^{(12)} \right|$):

$$\varepsilon_1^2(k \rightarrow 0) \approx \beta \left(\beta + 2 \left| J_0^{(12)} \right| \right) - \beta \langle S_1^z \rangle \left(\beta \langle S_1^z \rangle - 2 \left| J_0^{(12)} \right| \right),$$

$$\varepsilon_2^2(k \rightarrow 0) \approx \beta \left(\beta + 2 \left| J_0^{(12)} \right| \right) - \frac{\beta}{2} \langle S_1^z \rangle \left(\beta \langle S_1^z \rangle - 2 \left| J_0^{(12)} \right| \right).$$

$$3) \langle S^z \rangle \approx 1/2, \text{ при } k \rightarrow 0 \text{ и } \Delta=0$$

$$\varepsilon_1^2(0) \approx \frac{1}{4} \left(\left| J_0^{(12)} \right| + J_0^{(1)} + \sqrt{3}\beta \right) \left(\left| J_0^{(12)} \right| + 2J_0^{(1)} + \sqrt{3}\beta \right),$$

$$\varepsilon_2^2(0) \approx \left(-\frac{\left| J_0^{(12)} \right|}{4} + \frac{3}{4} J_0^{(1)} - \frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right)^2 - \frac{3}{4} \left(J_0^{(1)} \right)^2 + \frac{3}{4} \left(J_0^{(12)} \right)^2.$$

Во всех случаях щели в спектрах магнонов не обращаются в нуль при любых положительных значениях константы одноионной анизотропии. Это означает, что при любых значениях одноионной анизотропии спектры элементарных возбуждений остаются устойчивыми, т. е. система не испытывает фазовых переходов.

Таким образом, наличие достаточно большой одноионной анизотропии в одной из подрешеток ферромагнитного кристалла может приводить к эффекту компенсации магнитных моментов подрешеток. Причем эта точка определяется не только обменным взаимодействием анизотропной подрешетки, но и межподрешеточным взаимодействием. Как следует из поведения спектров элементарных возбуждений, точка компенсации магнитных моментов подрешеток не является точкой фазового перехода.

Необходимо подчеркнуть, что возникновение точки компенсации по константе анизотропии связано с эффектом квантового сокращения спина. Этот эффект обусловлен структурой волновой функции основного состояния и существенно проявляется для систем с целым спином магнитного иона. Также отметим, что для систем с полуцелым спином эффект квантового сокращения спина не наблюдается, что связано со структурой волновой функции основного состояния [14]. Так, например, если рассматривать неэквивалентные

подрешетки $S = 1$ и $S = 3/2$ (анизотропная подрешетка), то волновая функция основного состояния анизотропной подрешетки имеет вид

$$\Psi\left(\frac{3}{2}\right) = \cos \mu \left| \frac{3}{2} \right\rangle + \sin \mu \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

В этом случае намагниченность анизотропной подрешетки имеет вид

$$\langle S_{3/2}^z \rangle = 1/2 + \cos 2\mu$$

где параметр μ определяется уравнением

$$\left(J_0^{(1)} \left(\frac{1}{2} + \cos 2\mu \right) + \left| J_0^{(12)} \right| \right) \sin 2\mu + \frac{\beta}{2} \sin 2\mu + \frac{\sqrt{3}}{2} \beta \cos 2\mu = 0$$

Точка компенсации в этом случае должна наблюдаться при $\cos 2\mu = 1/2$. Однако, как видно из последнего уравнения, не существует таких положительных значений константы одноионной анизотропии, при которых выполнялось бы это условие. Таким образом, в анизотропном ферримагнетике с полуцелым спином магнитного иона компенсация интегральной намагниченности не произойдет из-за слабой зависимости намагниченности в подрешетке с полуцелым спином от величины одноионной анизотропии [14,232].

Отметим также, что эффект квантового сокращения спина в данном случае не приводит к обращению в ноль намагниченности первой подрешетки и возникновению фазы с тензорным параметром порядка (квадрупольной фазы), как это наблюдается в ферромагнетиках с большой одноионной анизотропии [188,232,238]. Это связано с влиянием второй подрешетки, которая в данном случае выполняет роль подмагничивающего поля.

2.1.2. Температурная зависимость намагниченностей подрешеток и спектров элементарных возбуждений анизотропного ферримагнетика.

Задачей данного подраздела является изучение роли квантовых эффектов для простой модели ферримагнетика с учетом анизотропии, с возможностью сокращения среднего значения спина при отличной от нуля температуре. Будем

рассматривать модель двухподрешеточного магнетика с различным значением спинов магнитных ионов в подрешетках. Повышенное внимание имеет выяснение роли эффекта квантового сокращения среднего значения спина. Для этих целей будет рассматриваться модель, для которой наиболее ярко будет проявляться данный эффект. Как и в случае рассмотренном выше, полагаем значение спина S_1 магнитного иона одной из подрешеток равным 1; значение спина s_2 во второй подрешетке будем рассматривать равным $1/2$. Для первой подрешетки будем рассматривать легкоплоскостную одноионную анизотропию. Гамильтониан такой системы имеет вид (2.1). В качестве оси квантования выбирается ось OZ : направление магнитных моментов первой подрешетки коллинеарно оси OZ , а направление магнитных моментов второй подрешетки также коллинеарно оси OZ , но имеет противоположное направление. Для удобства проведения исследования развернем направление магнитных моментов второй подрешетки так, чтобы направление магнитных моментов подрешеток совпадали. Аналогичный поворот сделан в предыдущем подразделе. Для описания эффектов квантового сокращения спина необходимо учесть влияние одноионной анизотропии точно. Этого можно достичь, используя технику операторов Хаббарда. Связь различных представлений дана в выражениях (2.8) и (2.9).

Из соотношений (2.1)-(2.3) в рамках стандартного приближения молекулярного поля легко определить значения средних спинов в узлах решеток от температуры

$$\langle S_1^z \rangle = \cos 2\alpha \frac{2 \sinh \left[(2\bar{H}_1 \cos 2\alpha - \beta \sin 2\alpha) / 2T \right]}{\exp(-\beta/2T) + 2 \cosh \left[(2\bar{H}_1 \cos 2\alpha - \beta \sin 2\alpha) / 2T \right]}; \quad (2.16)$$

$$\sin 2\alpha = -\frac{\beta}{\sqrt{\beta^2 + 4\bar{H}_1^2}}; \quad \langle s_2^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh(\bar{H}_2/2T). \quad (2.17)$$

Здесь температура измеряется в энергетических единицах (постоянная Больцмана $k_B = 1$), и введены обозначения

$$\bar{H}_1 = J_0^{(1)} \langle S_1^z \rangle + \left| J_0^{(12)} \right| \langle s_2^z \rangle, \quad \bar{H}_2 = J_0^{(2)} \langle s_2^z \rangle + \left| J_0^{(12)} \right| \langle S_1^z \rangle,$$

здесь $J^{(1)}, J^{(2)}, J^{(12)}$ – нулевые Фурье образы констант обмена.

Соотношения (2.16) и (2.17) описывают поведение магнитных моментов подрешеток при различных температурах. Нетрудно заметить, что выражение для магнитного момента первой подрешетки зависит как от величины интегралов обменного взаимодействия так и от величины одноионной анизотропии. В рассматриваемой здесь ситуации значение одноионной анизотропии относительно невелико, т.е. $\left(\beta < J_0^{(2)}, \left|J_0^{(12)}\right|\right)$. Поэтому ее влияние на величину магнитного момента первой подрешетки незначителен. Для феррита такое же поведение наблюдается при низких температурах. Анализ приведенных выше формул показывает, что при $T \rightarrow 0$ величина $\cos 2\alpha \rightarrow 1$, а среднее значение спина первой подрешетки близко к единице. Но с увеличением температуры ситуация будет иной. Из выражения для $\sin 2\alpha$ и формулы (2.16) видно, что величина одноионной анизотропии может быть сравнима ни с величинами констант обменного взаимодействия, а со значением эффективного поля \bar{H}_1 , которое самосогласованно зависит от температуры. И при определенных значениях температуры значение одноионной анизотропии сравнивается и далее может превзойти значение поля \bar{H}_1 . Следовательно, мы переходим в область эффективно «немалой» анизотропии, т.е. $\beta \geq \bar{H}_1$. Поведение магнитного момента первой подрешетки в этой области температур будет связано как с нарастанием тепловых флуктуаций, так и с проявлением эффекта сокращения спина [14,154]. Что касается величины среднего спина во второй подрешетке, то при температурах близких к нулю его величина будет равна 1/2. При этом анизотропия будет влиять на температурную зависимость намагниченности второй подрешетки, так как эффективное поле \bar{H}_2 зависит и от значения $\langle S_1^z \rangle$.

Уравнения (2.16) и (2.17) является нелинейными, и имеют точное аналитическое решение только при температурах близких к нулю [156,157]. Численно найденная зависимость намагниченностей подрешеток от

температуры (в единицах $J_0^{(2)}$) для значений параметров $\left|J_0^{(12)}\right|/J_0^{(2)}=0.5$, $J_0^{(1)}, J_0^{(2)}=0.05$ и различным величинам константы анизотропии представлена на рис. 2.1. Диаграмма на рис. 2.1a отвечает значению $\beta/J_0^{(2)}=0.05$, а на рис. 2.1b – значению $\beta/J_0^{(2)}=0.1$. На этом же рисунке символами представлены эти же зависимости для изотропного случая ($\beta=0$), для которого квантовые эффекты отсутствуют.

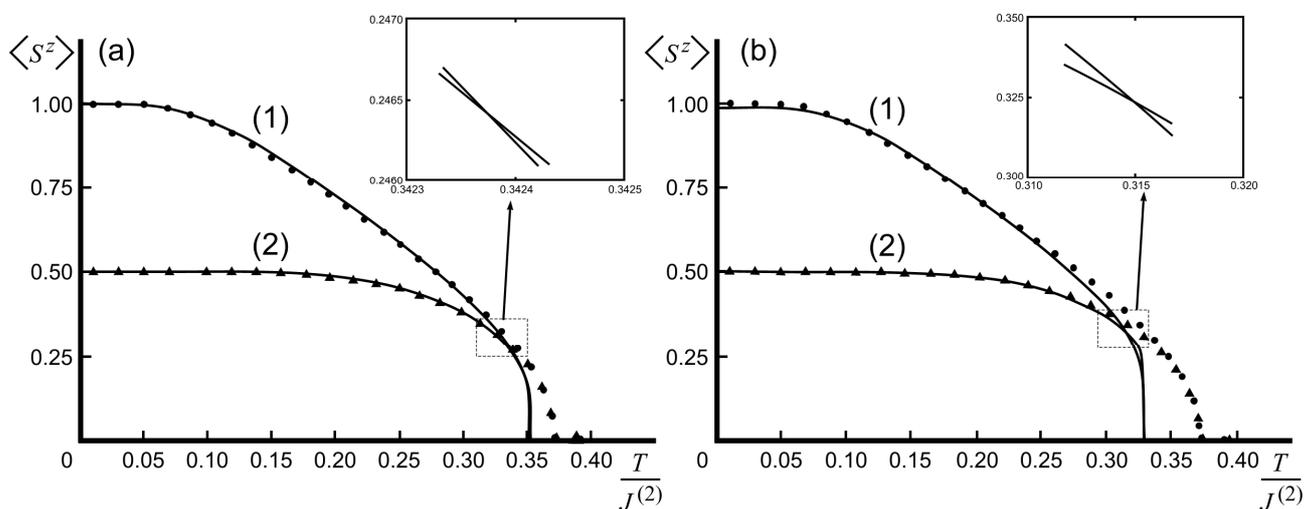


Рис. 2.1(a,b). Зависимость магнитных моментов подрешеток от температуры. Линии 1 и 2 соответствуют поведению магнитных моментов подрешеток ферримагнетика при $\beta/J^{(2)}=0.05$ (рис. 2.1a) и $\beta/J^{(2)}=0.1$ (рис. 2.1b). Точки и треугольники описывают поведение намагниченностей подрешеток изотропного ферримагнетика ($\beta=0$) (первой и второй подрешеток, соответственно). На вставках показаны детали поведения намагниченностей подрешеток вблизи температуры компенсации.

Как видно из рисунка, при низких температурах отличие изотропного и анизотропного случаев практически отсутствует. Однако при повышении температуры, примерно до значений температуры компенсаций значений

магнитных моментов подрешеток (порядка 0.324 для случая $\beta/J_0^{(2)}=0.05$ и 0.315 для $\beta/J_0^{(2)}=0.1$), эффект сокращения спинов начинает заметно проявляться. При дальнейшем увеличении температуры средние значения спинов подрешеток быстро уменьшаются и при $T/J_0^{(2)}=0.328$ – в случае $\beta/J_0^{(2)}=0.1$ и $T/J_0^{(2)}=0.352$ – в случае $\beta/J_0^{(2)}=0.05$ резко срываются к нулю, что может свидетельством фазового перехода I рода по температуре.

Перейдем к анализу спектров магнонов, для получения которых использовалась техника температурных функций Грина [32,156,226-228].

Анализ спектров показывает, что в данной задаче число ветвей возбуждений равно трем. Из этих ветвей две определяют стандартные «поперечные» возбуждения феррита [239], а дополнительная третья мода полностью связана с эффектами сокращения спина анизотропной подрешетки. Спектр одной из поперечных мод магнонов является безактивационным, и в длинноволновом пределе имеет стандартный вид $\varepsilon_1^2(k) \sim k^2$, типичный для легкоплоскостных ферритмагнетиков. Вид закона дисперсии этой моды не связан ни с квантовыми эффектами, ни даже с подрешеточной структурой феррита [239], далее обсуждаться не будет. Что касается двух остальных ветвей возбуждений, то для них ситуация более сложная.

Прежде всего рассмотрим продольную моду магнонов, связанную с осцилляцией длины вектора намагниченности. Спектр имеет вид

$$\varepsilon_2^2(k) = 4 \left(\frac{\beta}{2} \sin 2\alpha - \bar{H}_1 \cos 2\alpha - J_k^{(1)} \frac{1 - \cos 2\alpha}{\cos 2\alpha} \langle S_1^z \rangle \right) \cdot \left(\frac{\beta}{2} \sin 2\alpha - \bar{H}_1 \cos 2\alpha \right) \quad (2.18)$$

Возбуждения, описываемые выражением (2.18), связаны не с прецессией магнитного момента, а с колебанием его модуля [156,157], т. е. ветвь возбуждений связана с эффектом квантового сокращения спина. Как видно, данная мода является высокочастотной. Температурная зависимость этой ветви

возбуждений имеется в неявном виде не только в средней намагниченности, но в выражении для среднего поля \bar{H}_1 , а следовательно, и в функциях $\cos 2\alpha$, $\sin 2\alpha$.

Обсудим подробнее дисперсию магнонов (2.18) в зависимости от температуры. Легко видеть, что при низких температурах эта ветвь возбуждений является практически бездисперсионной. Действительно, как уже отмечалось выше, при $T \rightarrow 0$ намагниченность анизотропной подрешетки $\langle S_1^z \rangle \rightarrow 1$, следовательно, $\cos 2\alpha \rightarrow 1$. Поэтому слагаемое, описывающее дисперсию в (2.18), $J_k^{(1)} \langle S_1^z \rangle (1 - \cos 2\alpha) / \cos 2\alpha$, при низких температурах стремится к нулю, а спектр (2.18) практически совпадает с энергетической щелью. С ростом температуры намагниченность $\langle S_1^z \rangle$ уменьшается (рис. 2.1), но при этом уменьшается и $\cos 2\alpha$ так, что вклад дисперсии в энергию продольных колебаний намагниченности становится достаточно существенным. На рис. 2.2, *a*, *b* приведена относительная дисперсия продольной моды (2.18) при различных значениях константы одноионной анизотропии и различных значениях температуры.

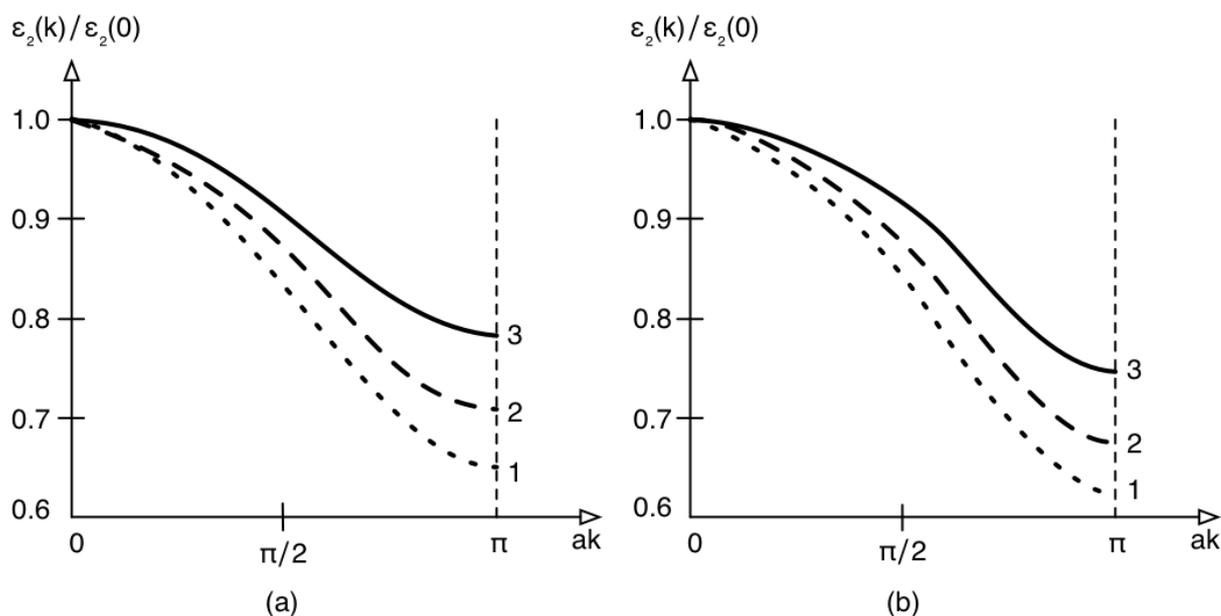


Рис.2.2 (а,б). Относительная дисперсия продольной магнонной моды (2.18) при $\beta / J^{(2)} = 0.05$ (рис.2.2 а) и $\beta / J^{(2)} = 0.1$ (рис.2.2 б). Линии 1 на рис. 2.2 а и б

соответствуют температуре $T/J^{(2)} \approx 0,0017$, линии 2 на рис. 2.2 а и б - температуре $T/J^{(2)} \approx 0,167$, линия 3 на рис. 2.2 а - температуре $T/J^{(2)} = 0.333$, а на рис.2.2 б - температуре $T/J^{(2)} = 0.328$.

Вторая ветвь возбуждений анизотропной подрешетки описывает прецессионные колебания связанных магнитных моментов подрешеток и может быть представлена в виде

$$\varepsilon_3^2(k) = \frac{A(k)}{2} - \sqrt{\left(\frac{A(k)}{2}\right)^2 - B(k)}, \quad (2.19)$$

где

$$\begin{aligned} A(k) &= \left(\bar{H}_2 - J_k^{(2)} \langle s_2^z \rangle\right)^2 + E_{10}^2 + E_{0-1}^2 + \left(J_k^{(1)} \langle S_1^z \rangle\right)^2 + \\ &+ 2\left(J_k^{(12)}\right)^2 \langle S_1^z \rangle \langle s_2^z \rangle + J_k^{(1)} (b_1 E_{10} + b_3 E_{0-1}) \\ B(k) &= E_{10}^2 E_{0-1}^2 + \left(\bar{H}_2 - J_k^{(2)} \langle s_2^z \rangle\right)^2 (E_{10}^2 + E_{0-1}^2) + 4\left(J_k^{(1)}\right)^2 b_1 b_3 E_{10} E_{0-1} + \\ &+ \langle S_1^z \rangle^2 \left(J_k^{(1)} \left(\bar{H}_2 - J_k^{(2)} \langle s_2^z \rangle\right) - \left(J_k^{(12)}\right)^2 \langle s_2^z \rangle \right)^2 + \left(J_k^{(1)}\right)^2 (b_1 E_{0-1} - b_3 E_{10})^2 \cos^2 2\alpha + \\ &+ 2J_k^{(1)} E_{10} E_{0-1} (b_1 E_{0-1} + b_3 E_{10}) + 2\left(J_k^{(12)}\right)^2 \langle s_2^z \rangle (b_1 E_{0-1}^2 - b_3 E_{10}^2) \cos 2\alpha + \\ &+ 2\left(J_k^{(1)} \left(\bar{H}_2 - J_k^{(2)} \langle s_2^z \rangle\right) - \left(J_k^{(12)}\right)^2 \langle s_2^z \rangle \right) (b_1 E_{10} + b_3 E_{0-1}); \\ E_{10} &= -\bar{H}_1 \cos 2\alpha + \frac{\beta}{2} (\sin 2\alpha - 1), \quad E_{10} = -\bar{H}_1 \cos 2\alpha + \frac{\beta}{2} (\sin 2\alpha + 1); \\ b_1 &= \frac{\exp\left(\frac{\bar{H}_1}{T} \cos 2\alpha - \frac{\beta}{2T} \sin 2\alpha\right) - \exp\left(-\frac{\beta}{2T}\right)}{2 \cosh\left(\frac{\bar{H}_1}{T} \cos 2\alpha - \frac{\beta}{2T} \sin 2\alpha\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{2T}\right)}, \end{aligned}$$

$$b_3 = \frac{\exp\left(-\frac{\beta}{2T}\right) - \exp\left(-\frac{\bar{H}_1}{T} \cos 2\alpha + \frac{\beta}{2T} \sin 2\alpha\right)}{2 \cosh\left(\frac{\bar{H}_1}{T} \cos 2\alpha - \frac{\beta}{2T} \sin 2\alpha\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{2T}\right)}.$$

Это выражение достаточно громоздкое, но его анализ легко может быть проведен численно. Как и для стандартного феррита, активация магнонов этой ветви не мала. Температурная зависимость энергетических щелей спектров магнонов (2.18) и (2.19) для различных значений константы анизотропии приведена на рис. 2.3, *a*, *b*. Анализ показывает, что величина щели для продольной моды всегда выше, чем для обычной высокочастотной ветви магнонов в двухподрешеточном феррите. Из выражений (2.18) и (2.19), а также рис. 2.3 следует, что все моды существуют вплоть до критической температуры.

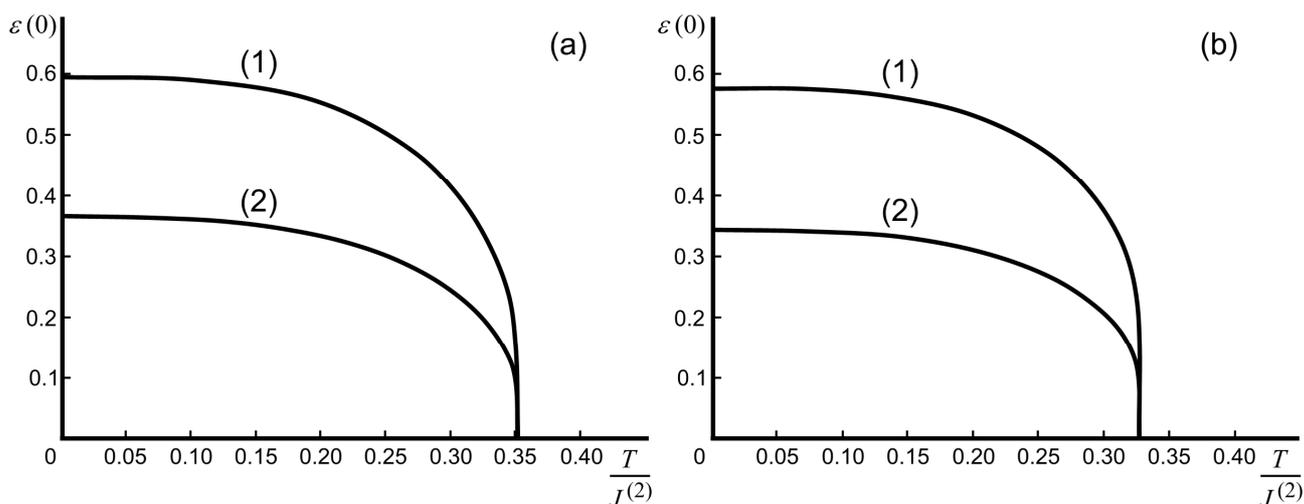


Рис.2.3 (а,б). Температурная зависимость энергетических щелей спектров анизотропной подрешетки ферримагнетика. Линии 1 и 2 описывают поведение щелей спектров (2.18) и (2.19), соответственно, при $\beta/J^{(2)} = 0.05$ (рис.2.3а) и $\beta/J^{(2)} = 0.1$ (рис.2.3б).

Как видно из рис. 2.3, анизотропный ферримагнетик при температуре Кюри испытывает фазовый переход первого рода. Это следует из того, что низкочастотная ветвь (2.19) вблизи температуры Кюри размягчается (линия 2 на рис.2.3), а в высокочастотной ветви (2.18) довольно долго сохраняется

энергетическая щель, которая скачком обращается в ноль при T_C . Таким образом, при описании анизотропных ферромагнетиков, в частности, высокочастотных мод в таких системах, эффекты квантового сокращения спина могут быть существенны даже при относительно малых (порядка 5-10 % от обменного интеграла) значениях константы одноионной анизотропии.

2.2. Температурная зависимость намагниченностей подрешеток и спектров элементарных возбуждений анизотропного ферромагнетика с $S=1$.

Рассмотрим ферромагнетик с анизотропией типа «легкая плоскость». Спин магнитного иона полагаем $S=1$ – минимальное величина спина, при котором возможен учет одноионной анизотропии. Для определенности базисной плоскостью может быть выбрана плоскость YOZ . Соответственно ось квантования определяем OZ . В этой геометрии гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} J(n-n') (S_n S_{n'}) + \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^x)^2, \quad (2.20)$$

где $J > 0$ – интеграл обменного взаимодействия между соседними ионами, S_n^i – компонента оператора спина на узле n , $\beta > 0$ – константа одноионной анизотропии.

Поскольку нас интересует влияние одноионной анизотропии на температурную зависимость намагниченности, то эффекты связанные с учетом одноионной анизотропии необходимо рассмотреть точно. Для этого необходимо выйти из рамок полуфеноменологического подхода. Эти эффекты будут точно учитываться, методом $SU(3)$ –когерентных состояний [31,46,50] или формализмом операторов Хаббарда [221-223]. Использование представления операторов Хаббарда дает возможность работать в большой температурной

области, и является одним из приемлемых математических способов исследования данного рода задач.

Операторы Хаббарда могут быть построены на полном наборе собственных волновых функций нулевого гамильтониана, который для данной модели записывается в виде:

$$H_0(n) = -\bar{H}S_n^z + \frac{\beta}{2}(S_n^x)^2, \quad (2.21)$$

где $\bar{H} = J_0 \langle S^z \rangle_0$, $J_0 = \sum_{n'} J_{nn'}$.

Решая одноузельную задачу с гамильтонианом (2.21), получим энергетические уровни магнитных ионов

$$\begin{aligned} E_1 &= -\bar{H} \cos 2\alpha + \frac{\beta}{4} \sin 2\alpha, \\ E_0 &= \frac{\beta}{4}, \\ E_{-1} &= \bar{H} \cos 2\alpha - \frac{\beta}{4} \sin 2\alpha, \end{aligned} \quad (2.22)$$

и волновые функции

$$\begin{aligned} |\Psi(1)\rangle &= \cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle, \\ |\Psi(0)\rangle &= |0\rangle, \\ |\Psi(-1)\rangle &= -\sin \alpha |1\rangle + \cos \alpha |-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Параметр α диагонализации гамильтониана (2.21) определяется выражением вида:

$$\sin 2\alpha = -\frac{\beta}{\sqrt{\beta^2 + (2\bar{H})^2}} \quad (2.24)$$

На полном наборе собственных состояний (2.23) определим операторы Хаббарда $X^{M'M} = |\Psi(M')\rangle \langle \Psi(M)|$. Связь между спиновыми и хаббардовскими операторами имеет вид (6.8).

Из (6.8) можно найти выражение для среднего значения спина:

$$\langle S^z \rangle = \frac{\bar{H}}{\sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)^2}} \frac{2 \sinh \left(\sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)^2} / T \right)}{2 \cosh \left(\sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)^2} / T \right) + \exp \left(-\frac{\beta}{4T} \right)}. \quad (2.25)$$

Используя (2.25) можно достаточно просто определить зависимость температуры Кюри T_C от константы одноионной анизотропии, учитывая, что при $T=T_C$ намагниченность становится равной нулю

$$\left(\langle S^z \rangle = 0 \right), \quad \frac{T_C}{J_0} = \frac{\beta}{2J_0} \left(\ln \frac{1 + \frac{\beta}{2J_0}}{1 - \frac{\beta}{4J_0}} \right)^{-1}.$$

Здесь и далее предполагается, что температура измеряется в энергетических единицах, т.е. постоянная Больцмана равна единице. Из последнего соотношения следует, что при $\beta < 4J_0$ температура Кюри принимает известное значение $T_C \approx 2J_0/3$

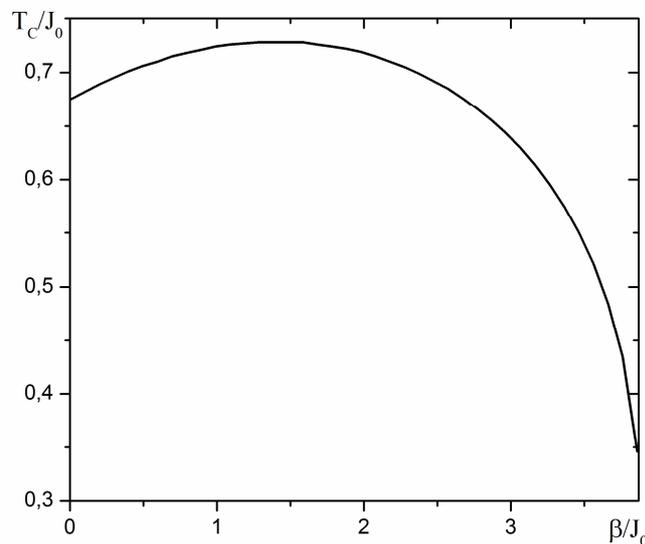


Рис.2.4. Температурная зависимость относительной температуры Кюри (T_C/J_0) от относительной константы анизотропии (β/J_0).

График зависимости температуры Кюри от константы анизотропии приведен на рис. 2.4. Как видно из этого рисунка температура Кюри возрастает

с ростом константы анизотропии и достигает своего максимального значения при $\beta/J \approx 1,5$, а затем быстро убывает. Такое поведение температуры Кюри связано с эффектом квантового сокращения спина.

Перейдем теперь к исследованию спектров элементарных возбуждений. Для получения спектров элементарных возбуждений мы воспользуемся модифицированным методом функций Грина, а именно методом функций Грина для операторов Хаббарда.

Так как в диаграммной технике для операторов Хаббарда одноузельные корреляции учитываются точно, следовательно решения дисперсионного уравнения истинны в большом температурном интервале, за исключением флуктуационной области. Таким образом, решение дисперсионного уравнения при отличных от нуля температурах будет определять спектр возбуждения:

$$\left[1 + \frac{E_{10}^2 + b_1^2 J_k^2 \sin^2 2\alpha - (E_{10} + b_1 J_k)^2}{\varepsilon_k^2 - E_{10}^2} + \frac{E_{0-1}^2 + b_3^2 J_k^2 \sin^2 2\alpha - (E_{0-1} + b_3 J_k)^2}{\varepsilon_k^2 - E_{0-1}^2} + \right. \\ \left. + 2J_k^2 b_1 b_3 \frac{E_{10} E_{0-1} (1 + \sin^2 2\alpha) - \varepsilon_k^2 \cos^2 2\alpha}{(\varepsilon_k^2 - E_{10}^2)(\varepsilon_k^2 - E_{0-1}^2)} \right] \cdot \left[1 + b_5 \frac{2E_{1-1} J_k \sin^2 2\alpha}{\varepsilon_k^2 - E_{1-1}^2} \right] = 0, \quad (2.26)$$

где $E_{ij} = E_i - E_j$ – разности уровней энергии определяются соотношениями (2.22);

$$b_1 = \frac{e^{-E_1/T} - e^{-E_0/T}}{Z} = \frac{e^{\xi/T} - e^{-\beta/4T}}{2ch\xi/T + e^{-\beta/4T}}, \\ b_3 = \frac{e^{-E_0/T} - e^{-E_{-1}/T}}{Z} = \frac{e^{-\beta/4T} - e^{-\xi/T}}{2ch\xi/T + e^{-\beta/4T}}, \\ b_5 = \frac{e^{-E_1/T} - e^{-E_{-1}/T}}{Z} = -\frac{2sh\xi/T}{2ch\xi/T + e^{-\beta/4T}}, \\ Z = \sum_{M=1,0,-1} e^{-E_M/T}, \quad \xi = \sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)^2}, \\ \langle S \rangle = \cos 2\alpha (b_1 + b_3) = -b_5 \cos 2\alpha.$$

Легко видеть, что уравнение (2.26) распадается на два уравнения, решения которых определяют спектры магнонов, и имеют следующий вид:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{E_{1-1} \left(E_{1-1} - 2b_5 J_k \sin^2 2\alpha \right)}, \quad (2.27)$$

$$\varepsilon_{2,3}^2(k) = a(k) \pm \sqrt{a^2(k) - b(k)}, \quad (2.28)$$

где для сокращения записи обозначено

$$a(k) = \frac{E_{10}^2 + E_{0-1}^2}{2} + \frac{J_k^2 \langle S \rangle^2}{2} + J_k (b_1 E_{10} + b_3 E_{0-1}),$$

$$b(k) = \left(E_{10} E_{0-1} + J_k (b_1 E_{0-1} + b_3 E_{10}) \right)^2 - J_k^2 (b_1 E_{0-1} - b_3 E_{10})^2 \sin^2 2\alpha.$$

Как видно из (2.27) и (2.28) при конечных температурах в системе реализуются три ветви элементарных возбуждений. Этот результат является неожиданным, поскольку стандартным результатом является $2S$ ветвей элементарных возбуждений, и поскольку в данном случае $S=1$, то число ветвей должно быть равно двум. Чтобы понять этот результат рассмотрим случай низких температур. При $T \rightarrow 0$ система находится в основном состоянии, т.е. максимально «заселенным» является нижайший энергетический уровень E_1 (2.22). При этом вероятность перехода магнитного иона в возбужденные состояния E_0 и E_{-1} определяется концевыми множителями b_1 и b_5 . Вероятность перехода между возбужденными уровнями E_0 и E_{-1} определяется концевым множителем b_3 . При низких температурах $b_1=1$, $b_5=-1$, а концевой множитель $b_3=0$. Тогда решения дисперсионного уравнения (2.26) примут вид:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{E_{1-1} \left(E_{1-1} - 2J_k \sin^2 2\alpha \right)}; \quad (2.29)$$

$$\varepsilon_{2,3}^2(k) = a(k) \pm \sqrt{a^2(k) - b(k)}, \quad (2.30)$$

где

$$a(k) = \frac{1}{2} \left[E_{10}^2 + 2J_k E_{10} + J_k^2 (1 - \sin^2 2\alpha) + E_{0-1}^2 \right],$$

$$b(k) = E_{0-1}^2 \left[E_{10}^2 + 2J_k E_{10} + J_k^2 (1 - \sin^2 2\alpha) \right].$$

Здесь учтено, что в случае низких температур $\langle S^z \rangle^2 = \cos^2 2\alpha = 1 - \sin^2 2\alpha$.

Прежде всего, рассмотрим продольную моду магнонов (2.29), связанную с осцилляцией длины вектора намагниченности. Эта мода связана с эффектом сокращения спина, возникающего из-за наличия легкоплоскостной анизотропии [46, 150, 157, 221]. Ее спектр в длинноволновом пределе можно представить в следующем виде:

$$\varepsilon_1(k) = 2\sqrt{\bar{H}^2 + \left(\frac{\beta}{4}\right)^2 \cdot \left(1 - \frac{J_k}{J_0}\right)}. \quad (2.31)$$

Как видно, данная мода является высокочастотной.

Решение дисперсионного уравнения ε_2 представляет собой голдстоуновскую моду и имеет вид:

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\left[\frac{\beta}{4} + J_0 - J_k(1 - \sin 2\alpha)\right] \left[\frac{\beta}{4} + J_0 - J_k(1 + \sin 2\alpha)\right]}. \quad (2.32)$$

Учитывая, что при низких температурах $\sin 2\alpha = -\beta/4J_0$, ветвь ε_2 в длинноволновом пределе можно представить в виде:

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\alpha k^2 \left(\alpha k^2 + \frac{\beta}{2}\right)}.$$

Наконец, решение $\varepsilon_3 = E_{0-1}$ представляет собой локализованное состояние. Таким образом, при $T \rightarrow 0$ в системе остаются только две ветви элементарных возбуждений, одна из которых представляет «стандартную» голдстоуновскую моду (2.32), а вторая представляет собой колебания модуля намагниченности (2.31) и связана с эффектом квантового сокращения спина.

Теперь вернемся к случаю конечных температур. В этом случае продольная ветвь возбуждений ε_1 имеет вид (2.31), но при этом среднее поле $\bar{H} = J_0 \langle S^z \rangle$ зависит от температуры (2.25). График зависимости $\varepsilon_1(k)$ при различных температурах и значениях константы анизотропии приведен на рис. 2.5 (а, б, в). Как видно из этих графиков, эта ветвь является высокочастотной со

слабой дисперсией. Причем, как видно из графиков с ростом анизотропии и температуры дисперсия возрастает, что соответствует формуле (2.31). Из этого видно, что дисперсионный член «усилен» константой анизотропии, и, следовательно, с ростом анизотропии растет вклад дисперсионного слагаемого.

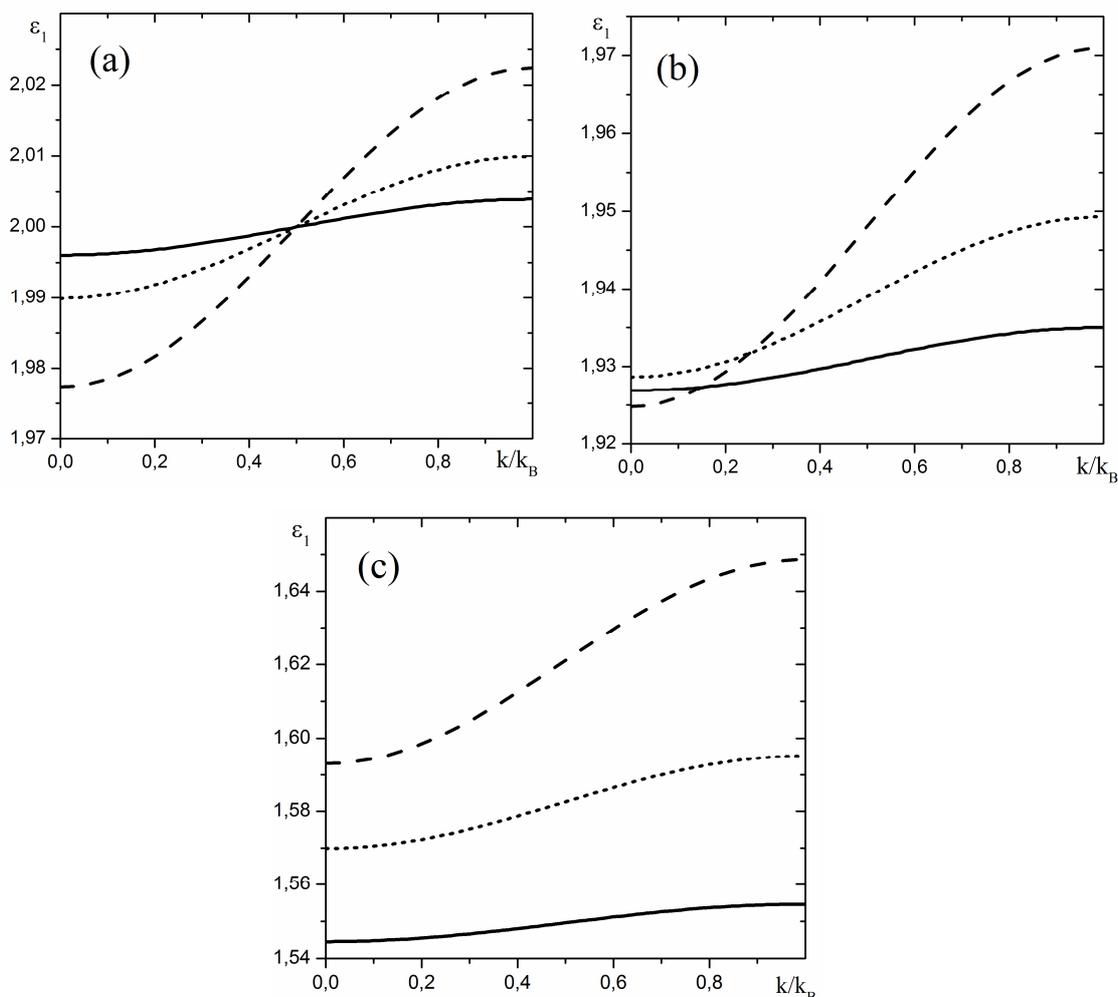


Рис.2.5.а. Закон дисперсии ε_1 при $T/J=0.1$ и $\beta/J=0.25$ (сплошная кривая); $\beta/J=0.4$ (точечная кривая); $\beta/J=0.6$ (пунктирная кривая). Рис.2.5.б. Закон дисперсии ε_1 при $T/J=0.3$ и тех же соотношения константы анизотропии и обменного интеграла. Рис.2.5.с. Закон дисперсии ε_1 при $T/J=0.5$ и тех же соотношения константы анизотропии и обменного интеграла.

Теперь рассмотрим решения (2.30) дисперсионного уравнения. Поскольку эти решения достаточно громоздки, их аналитический анализ представляется

достаточно сложным. Поэтому проведем его графически. На рис.2.6 представлена зависимость энергий ε_2 (сплошная линия) и ε_3 (пунктирная линия) от волнового вектора при различных значениях константы одноионной анизотропии и температуры.

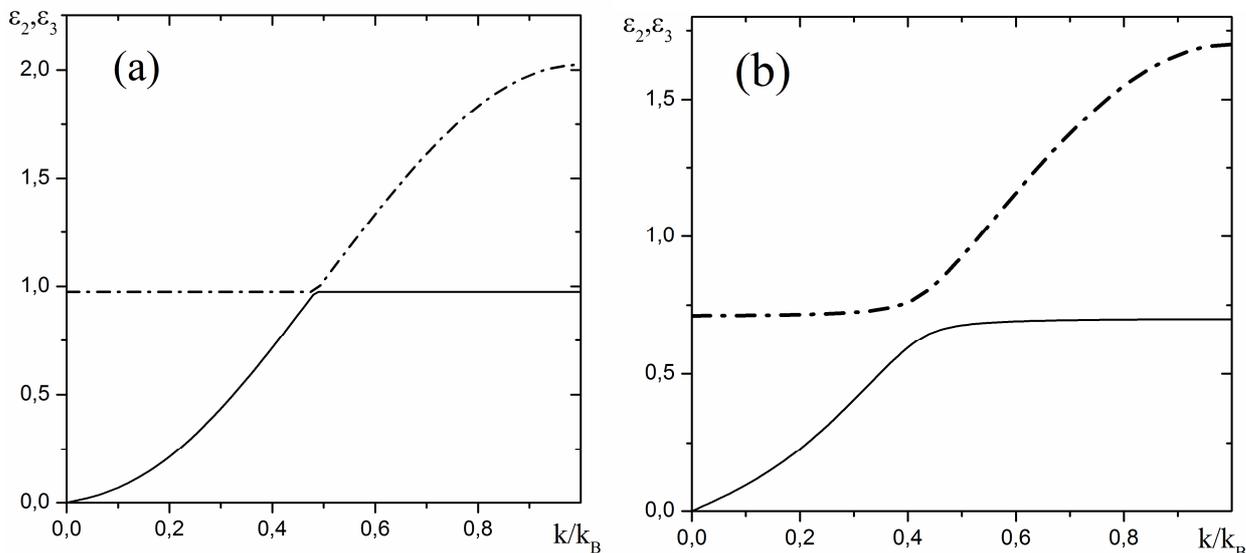


Рис.2.6.a. Законы дисперсии ветвей ε_2 и ε_3 $T/J = \beta/J = 0.1$. Рис.2.6.b. Законы дисперсии ветвей $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ $T/J = \beta/J = 0.5$.

Как видно из этих графиков при низких температурах и малых значениях константы анизотропии имеет место кроссовер, т.е. пересечение голдстоуновской моды и локализованного состояния. С ростом температуры и константы анизотропии между этими состояниями возникает «расталкивание», и в результате возникают еще две ветви элементарных возбуждений. Причем, как видно из приведенных графиков величина расталкивания ветвей и точка кроссовера существенно зависит от константы одноионной анизотропии. Так, при $\beta=0$ точка кроссовера находится при $k / k_B = \pi / 2$.

Причину такого поведения спектров элементарных возбуждений системы легко понять из следующих простых соображений. При температурах, близких к нулю, магнитный ион находится в основном состоянии с энергией E_1 , а вероятность перехода в возбужденные состояния E_0 и E_2 отлична от нуля и определяется величинами b_1 и b_5 . Именно с этими переходами связано возникновение голдстоуновской моды $\varepsilon_2(k)$ и моды $\varepsilon_1(k)$, связанной с

колебаниями длины вектора магнитного момента. Вероятность перехода магнитного иона из одного возбужденного состояния в другое возбужденное ($E_0 \leftrightarrow E_{-1}$) при низких температурах экспоненциально мала. С ростом температуры возрастает «заселенность» возбужденных энергетических уровней иона, и, следовательно, возрастает вероятность перехода магнитного иона $E_0 \leftrightarrow E_{-1}$. Причем, вероятность такого перехода определяется величиной b_3 , которая с ростом температуры существенно отличается от нуля. Именно этим обстоятельством объясняется возникновение ветви элементарных возбуждений $\varepsilon_3(k)$ в случае конечных температур.

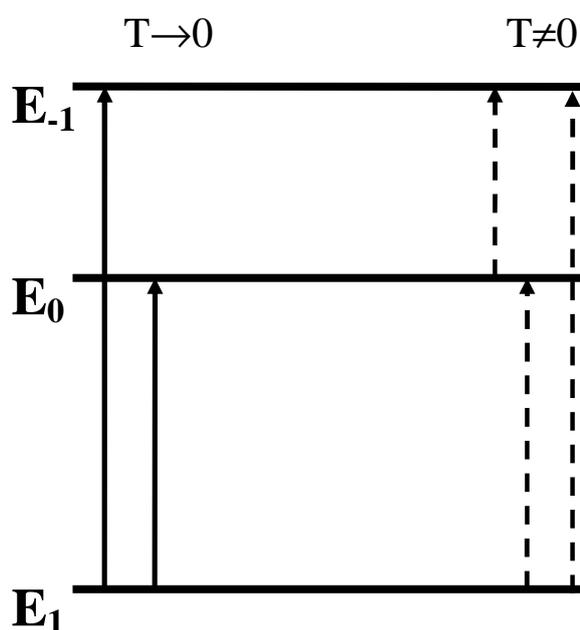


Рис.2.7. Схема возбужденных состояний магнитного иона при $T \rightarrow 0$ и $T \neq 0$.

Схематично данную ситуацию можно проиллюстрировать рис.2.7. Необходимо отметить, что с ростом температуры щель между возбужденными энергетическими уровнями E_0 и E_{-1} уменьшается.

Таким образом, отличная от нуля, при конечных температурах, вероятность переходов между возбужденными состояниями приводит к возникновению существенного расталкивания ветвей в точке кроссовера реализации состояния ε_3 как модового состояния. Однако, дополнительная ветвь возбуждений, по всей видимости, обладает большим затуханием [240].

Основные результаты второго раздела

1. Изучена модель двухподрешеточного коллинеарного магнетика с нескомпенсированными магнитными моментами подрешеток. В результате исследований показано, что учет большой одноионной анизотропией в одной из подрешеток ферримагнитного кристалла приводит к эффекту компенсации магнитных моментов подрешеток. Причем эта точка определяется константами обменного взаимодействия анизотропной подрешетки и межподрешеточного взаимодействия. Из анализа спектров элементарных возбуждений следует, что точка компенсации магнитных моментов подрешеток не является точкой фазового перехода.

2. Исследована роль квантовых эффектов в простейшей модели анизотропного ферримагнетика при температуре отличной от нуля. Показано, что относительно небольшое значение одноионной анизотропии, при температурах отличных от нуля приводит к заметному уменьшению среднего значения спина в узлах решеток. Также показано, что эффект квантового сокращения спина оказывает существенное влияние не только на статические, но и динамические свойства ферримагнетика.

3. Исследована динамика легкоплоскостного ферромагнетика со спином $S=1$ при конечных температурах и с учетом квантового сокращения спина. Показано, что в рассматриваемом случае в системе, помимо известных двух мод стандартной поперечной и продольной, возникает дополнительная ветвь возбуждений, наличие которой связано с ненулевой вероятностью переходов между возбужденными уровнями магнитного иона при конечных температурах. Эта мода дает немалый вклад в поглощение энергии и обладает существенной дисперсией.

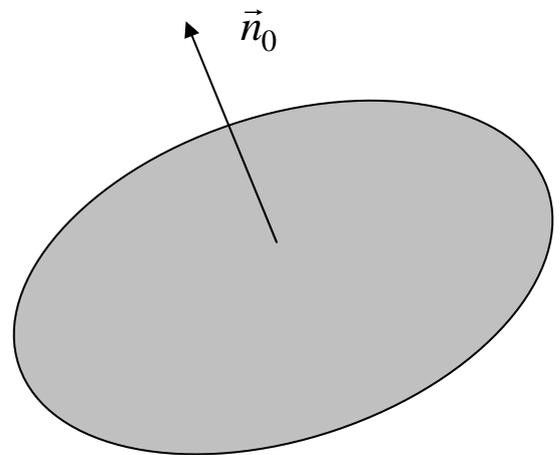
Раздел 3. Негейзенберговские магнетики со спином $S=1$, $3/2$ и изотропным обменным взаимодействием.

Упорядочение в спиновых системах обычно ассоциируется со стандартным магнитным порядком, для которого средние значения спинов $\langle \mathbf{S}_n \rangle$ на узлах отличны от нуля и образуют различные магнитные структуры [224,241]. Основным свойством магнитоупорядоченных систем является нарушение симметрии относительно отражения времени, $\langle \mathbf{S}_n \rangle \rightarrow -\langle \mathbf{S}_n \rangle$ при $t \rightarrow -t$. Однако, уже достаточно давно была указана возможность существования состояния спинового нематика, для которого средние значения спинов на узлах $\langle \mathbf{S}_n \rangle$ равны нулю, но спонтанное нарушение симметрии спиновой системы связано с анизотропией некоторых высших корреляторов проекций спина [18]. Состояние спинового нематика может возникать из-за корреляции спинов на различных узлах, такой, что симметрия относительно отражения времени для всей системы не нарушена [18]. Вероятно, такие состояния обнаружены для низкоразмерного магнетика LiCuVO_4 [23,24]. Не менее интересна возможность реализации нематических состояний за счет существования спиновых мультипольных параметров порядка, в которые входят произведения средних значений проекций оператора спина на одном и том же узле. Такой порядок обусловлен нетривиальными средними вида $\langle S_{\alpha_1} S_{\alpha_2} \dots S_{\alpha_n} \rangle$, для спина S имеет смысл рассматривать переменные $n \leq 2S$. Здесь $n = 1$ соответствует дипольному параметру порядка, то есть среднему значению спина $\langle \mathbf{S} \rangle$, $n=2$ – квадрупольному, $n = 3$ – октупольному и т.д. В работе [61] был рассмотрен пример спинового нематика с квадрупольным порядком для системы со спином $S=3$. Проблема спиновых нематиков такого типа одноузельных тесно связана с проблемой квадрупольного упорядочения и специфической квадрупольной динамики, которая достаточно давно обсуждается в литературе [25-33,242,243].

Нематический порядок, связанный с нетривиальными спиновыми мультипольными параметрами порядка на одном узле при $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, являются исключительно квантовым явлением. Его описание связано с выходом за рамки так называемых спиновых когерентных состояний, или когерентных состояний группы Ли $SO(3) \sim SU(2)$ [29,30]. Для этих состояний модуль среднего значения оператора спина всегда отличен от нуля; причем для спина $S=1/2$ величина $|\langle \mathbf{S} \rangle| = S$. Спиновые когерентные состояния дают точное описание системы для гамильтониана, содержащего только слагаемые, линейные по операторам спина на данном узле, в частности, для обычного билинейного обменного взаимодействия вида $-J(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})$. Для такого гамильтониана в случае, когда начальное состояние является $SU(2)$ – когерентным состоянием, динамика спина определяется системой уравнений Ландау-Лифшица для спинов [29,30]. Поэтому для реализации нематических состояний гамильтониан системы со спином $S=1$ должен, кроме билинейного взаимодействия, включать в себя и высшие по спиновым инвариантам слагаемые. Для изотропной системы со спином $S=1$ возможно биквадратичное обменное взаимодействие вида $K(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2$, K – константа биквадратичного обменного взаимодействия, определяющая наличие нематического состояния [18].

Состояние спинового нематика с $S=1$, в котором параметр дипольного спинового упорядочения равен нулю, $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, характеризуется спонтанным нарушением вращательной симметрии, которое связано с появлением отличных от нуля квадрупольных средних $S_{mn} = \langle S_m S_n + S_n S_m \rangle$, $m, n = x, y, z$ [14,31]. Такое упорядочение характеризуется инвариантностью по обращению времени, но для него имеет место спонтанное нарушение симметрии, связанное с квадрупольными средними. В качестве геометрического образа этих средних можно выбрать квадрупольный эллипсоид, то есть эллипсоид с направлениями главных осей, выбранных таким образом, чтобы недиагональные компоненты $\langle S_i S_k + S_k S_i \rangle = 0$ при $i \neq k$, и полуоси которого равны $\langle S_1^2 \rangle, \langle S_2^2 \rangle, \langle S_3^2 \rangle$. При

нулевой температуре $T=0$ состояния спина на каждом узле определяется чистыми квантовыми состояниями спина $S=3$. В приближении среднего поля нематическая фаза магнетика с билинейным и биквадратичным обменным взаимодействием ближайших соседей устойчива при $J < K$ и $J > 0$. Используя состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ с заданной проекцией спина на некоторую ось квантования OZ , можно показать, что этом приближении фазе спинового нематика при $T=0$ отвечает состояние на узле $|\psi_{SN}\rangle = |0\rangle$ [18]. Квадрупольный эллипсоид вырождается в плоский диск, $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = 1$, $\langle S_z^2 \rangle = 0$. Поскольку в силу изотропии спиновых взаимодействий направление оси квантования OZ произвольно, состояние спинового нематика можно описать введением вектора-директора \vec{n}_0 , который направлен вдоль оси вращения квадрупольного эллипсоида.



Понятно, что состояния с \vec{n}_0 и $-\vec{n}_0$ неразличимы. Параметр $S_{\alpha\beta}$ характеризует состояние спинового нематика, который по симметричным свойствам аналогичен параметру порядка, характеризующего нематическое состояние в жидких кристаллах [36].

В случае, константа обменного интеграла J становится отрицательно в магнитоупорядоченном кристалле возможна реализация двухподрешеточных фаз. Если гейзенберговское обменное взаимодействие превосходит биквадратичное, то в системе реализуется стандартная антиферромагнитная фаза. В случае, когда константа биквадратичного обмена превосходит билинейный обмен, ситуация является более интересной и вопрос об основном состоянии является нетривиальным, поскольку состояния с \vec{n}_0 и $-\vec{n}_0$ тождественны. Однако, в рамках приближения среднего поля можно показать,

что в системе реализуется состояние ортогонального нематика, для которого в двух подрешетках направления \mathbf{n} ортогональны [19,20,22].

Таким образом, в результате исследований изотропной модели магнетика со спином единица можно сделать вывод, что такие системы должны характеризоваться целым рядом нетривиальных свойств.

Такие состояния в последние десятилетия активно изучались в кристаллических магнетиках [14,15], в том числе и в системах с пониженной размерностью [20,31,34,35]. В настоящее время интерес к изучению, в том числе и нематических состояний, снова повышен в связи с изучением ультрахолодных атомных газов, в частности, конденсацией Бозе-Эйнштейна для таких газов с целым значением спина [41,42,244,245]. Поэтому нематические состояния достаточно широко изучены, для них исследованы процессы взаимодействия элементарных возбуждений и процессы релаксации [20,44-46], найдены нелинейные возбуждения – солитоны [47-50]. Получены как одномерные солитоны, которые похожи на либовские состояния неидеального бозе-газа [51], так и топологические двумерные солитоны [49,50]. Эти солитоны похожи на соответствующие возбуждения в антиферромагнетиках [49,50], но они имеют уникальные свойства около точки перехода нематик-ферромагнетик и в самой этой точке [50,247].

Вопрос о существовании нематических состояний в системах со спинами $S > 1$ является более сложным, хотя и он изучается достаточно давно [20,54,67]. Наиболее интересной особенностью таких систем является возможность появления нетривиальных корреляторов от нечетного числа спинов (например, трех), которые не инвариантны относительно отражения времени даже при $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$. Хотя обычно спиновыми нематиками называют состояния, инвариантные при замене $t \rightarrow -t$ [18,67], использование термина «спиновый нематик» для таких состояний [20,62] не приведет к недоразумениям.

Не менее интересна возможность существования спиновых нематических состояний для систем с полуцелым спином (минимальная величина полуцелого спина, допускающая негейзенберговское взаимодействие и, следовательно,

такие состояния, есть $S=3/2$). Такие состояния изучены хуже, хотя этот вопрос имеет важное значение для исследования физических характеристик ультрахолодных ферми-газов, такие как ^{132}Cs , ^9Be , ^{135}Ba спин которых равен $S=3/2$ в оптических ловушках [55-57].

Особенности статических свойств нематических фаз магнетика со спином $S=3/2$, в частности, антинематических фаз, позволяют надеяться на существование нетривиальных свойств коллективных возбуждений в таких системах. Однако вопрос о динамических свойствах негейзенберговских магнетиков, особенно о физическом смысле различных ветвей спектра, практически не исследован.

В **первом** подразделе исследованы фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений изотропного негейзенберговского магнетика с $S=1$ при различных соотношениях обменных интегралов.

Второй подраздел посвящен изучению статических и динамических свойств магнетика со спином $S=3/2$ и негейзенберговским изотропным взаимодействием с учетом всех спиновых инвариантов.

В **третьем** подразделе изучены топологически устойчивые двумерные солитоны - вихри для состояния спинового нематика; на примере моделей со спином $S = 1$ и $S = 3/2$ выяснены общие закономерности их структуры и динамики.

3.1 Спиновые нематические и ортогонально нематические состояния в изотропном негейзенберговском магнетике со спином единица.

3.1.1. Устойчивость фазовых состояний, при различных соотношениях констант обменных интегралов.

Спиновые системы являются прекрасным объектом для поиска необычных фазовых состояний. В них был обнаружен целый ряд экзотических состояний, наиболее замечательным из которых, является знаменитая фаза Халдейна в антиферромагнитных цепочках с целым спином [248]. Совсем недавно, другое экзотическое состояние – спиновый нематик – предположительно было обнаружено в одномерном LiCuVO_4 [23,24]. В спиновом нематическом состоянии параметр дипольного спинового упорядочения равен нулю $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, но имеет место спонтанное нарушение вращательной симметрии благодаря параметрам квадрупольного спинового упорядочения $\langle S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \rangle$. В общем случае в система со спином S может характеризоваться мультипольными параметрами порядка $\langle S_{\alpha 1} S_{\alpha 2} \dots S_{\alpha n} \rangle$, где $n = 1$ соответствует дипольному параметру порядка, $n = 2$ – квадрупольному, $n = 3$ – октопольному и т.д. [18]. Состояния с нулевой намагниченностью на узел, и отличными от нуля мультипольными параметрами порядка, являются исключительно квантовым явлением. В последние десятилетия активно изучались в магнитоупорядоченных соединениях [14,15], в том числе и в системах с пониженной размерностью [31,34,35].

В качестве исследуемой системы рассмотрим модель изотропного ферромагнетика с биквадратичным обменным взаимодействием. Гамильтониан негейзенберговского магнетика с $S=1$ имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left(J_{nn'} \vec{S}_n \vec{S}_{n'} + K_{nn'} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^2 \right), \quad (3.1)$$

где J и K – константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, S_n^i – i -ая компонента оператора спинового момента на n -м узле.

Рассмотрим фазовые состояния системы, описываемой гамильтонианом (3.1) в зависимости от соотношения обменных интегралов. Будем предполагать, что магнетик находится при низких температурах. Хотя модели, аналогичные (3.1) рассматривались многими авторами [14,17,19,21,22,25,28,31], тем не менее, динамические свойства спиновых нематиков при всех возможных соотношениях обменных интегралов изучены не полностью в связи с определенными математическими сложностями. Для описания динамических свойств модели (3.1) будет использоваться представление операторов Хаббарда [221-223]. Формализм операторов Хаббарда является наиболее удобным способом вычисления статических и динамических характеристик магнетиков с тензорным взаимодействием. Как было отмечено в [221], модели с обменным взаимодействием в представлении данных операторов имеют одинаковый вид, что выгодно при развитии общего подхода.

Дальнейшие вычисления удобнее проводить, перейдя к неприводимым тензорным операторам. Тогда гамильтониан (3.1) можно представить в виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left(J_{nn'} - \frac{1}{2} K_{nn'} \right) \bar{S}_n \bar{S}_{n'} - \frac{1}{4} \sum_{n \neq n'} K_{nn'} O_{2n} O_{2n'}, \quad (3.2)$$

где $O_{2n} O_{2n'} = \frac{1}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + O_{2n}^1 O_{2n'}^1 + \tilde{O}_{2n}^1 \tilde{O}_{2n'}^1 + O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + \tilde{O}_{2n}^2 \tilde{O}_{2n'}^2$;

$$O_2^0 = 3(S^z)^2 - S(S+1), \quad O_2^1 = \frac{1}{2} \left[S^z, (S^+ + S^-) \right]_+, \quad O_2^2 = \frac{1}{2} \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right),$$

$$\tilde{O}_2^1 = \frac{1}{2i} \left[S^z, (S^+ - S^-) \right]_+, \quad \tilde{O}_2^2 = \frac{1}{2i} \left((S^+)^2 - (S^-)^2 \right).$$

Учитывая наличие средних полей в гамильтониане (3.2), существование которых связано с упорядочением дипольного и более высших моментов, одноузельный гамильтониан можно представить в следующем виде:

$$H_0 = \Delta - \bar{H} S^z - B_2^2 O_2^2 - B_2^0 O_2^0, \quad (3.3)$$

где

$$\Delta = \frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{4} \left(\frac{(q_2^0)^2}{3} + (q_2^2)^2 \right); \quad \bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle;$$

$$B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0; \quad B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2; \quad q_2^0 = \langle O_{2n}^0 \rangle \quad \text{и} \quad q_2^2 = \langle O_{2n}^2 \rangle - \text{квадрупольные средние};$$

$$J_0 = \sum_{n'} J_{nn'} \quad \text{и} \quad K_0 = \sum_{n'} K_{nn'} - \text{Фурье образы обменных интегралов.}$$

В выражении для одноузельного гамильтониана (3.3) учтено то обстоятельство, что недиагональные квадрупольные средние q_2^i ($i=xy, yz, zx$) равны нулю (так как квадрупольные средние являются компонентами симметричного тензора второго ранга, который всегда можно привести к диагональному виду). Поскольку, нашей главной задачей является исследование основного состояния при нулевой температуре, и приближение средних полей вполне приемлемо.

Определим уровни энергии магнитного иона, решив с гамильтонианом (3.3) одноузельную задачу

$$E_1 = \Delta - B_2^0 - \bar{H} \cos 2\alpha - B_2^2 \sin 2\alpha,$$

$$E_0 = \Delta + 2B_2^0, \tag{3.4}$$

$$E_{-1} = \Delta - B_2^0 + \bar{H} \cos 2\alpha + B_2^2 \sin 2\alpha;$$

и собственные функции

$$|\psi_1\rangle = \cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle,$$

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle, \tag{3.5}$$

$$|\psi_{-1}\rangle = -\sin \alpha |1\rangle + \cos \alpha |-1\rangle.$$

Параметр α , входящий в выражения (3.4), (3.5), является параметром обобщенного u - v - преобразования, и определяется формулой

$$B_2^2 \cos 2\alpha = \bar{H} \sin 2\alpha. \tag{3.6}$$

Полный набор собственных волновых функций (3.5) одноузельного гамильтониана (3.3) позволяет определить операторы Хаббарда $X^{tt'} = |\psi_t\rangle\langle\psi_{t'}|$, которые связаны с компонентами операторов:

$$\begin{aligned} S^z &= (H^1 - H^{-1})\cos 2\alpha + (X^{-11} - X^{1-1})\sin 2\alpha; \\ S^+ &= \sqrt{2}(X^{0-1} + X^{10})\cos \alpha + \sqrt{2}(X^{-10} + X^{01})\sin \alpha, \end{aligned} \quad (3.7)$$

где $H^M = X^{MM}$ – диагональные операторы Хаббарда.

В терминах операторов Хаббарда одноузельный гамильтониан (3.3) становится диагональным

$$H_0 = \sum_{M=1,0,-1} E_M H^M,$$

Далее будем рассматривать два случая:

1. $J_0 > 0$. При таком значении гейзенберговского обменного взаимодействия в системе реализуется одноподрешеточная магнитная структура;

2. $J_0 < 0$. В этом случае в системе реализуется двухподрешеточная магнитная структура.

Рассмотрим однородрешеточный магнитный диэлектрик с $J_{nn'} > 0$. Как следует из выражения (3.4) в этом случае основным уровнем энергии магнитного иона будет E_1 . Тогда, параметры порядка (при $T \rightarrow 0$), как следует из (3.7) принимают вид:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = \sin 2\alpha. \quad (3.8)$$

Учитывая соотношения (3.8) и что нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , плотность свободной энергии (на один узел) в пределе низких температур можно представить в виде:

$$F = -\frac{1}{2}(J_0 - K_0)\cos^2 2\alpha. \quad (3.9)$$

В (3.9) учтены только слагаемые, зависящие от параметра α . Минимизируя плотность свободной энергии (3.9) по параметру α , определим спиновые состояния, реализующиеся в одноподрешеточном магнетике:

При $\alpha=0$ и $J_0 > K_0$ получаем, что $\langle S^z \rangle = 1$, $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = 0$. Очевидно, что такой вид параметров порядка соответствует ферромагнитному (*FM*) упорядочению. Соответствующая волновая функция имеет вид: $|\psi_1\rangle = |1\rangle$.

В случае, если $J_0 < K_0$ параметр α равен $\pi/4$. Соответственно, параметры порядка имеют значения: $\langle S^z \rangle = 0$, $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = 1$.

Хорошо известно [31], такое состояние, называют– тензорным; таким образом в магнетике устойчивым состоянием становится (*N*) нематическое состояние. Как легко понять из вида квадрупольных средних,

$$S_{ik} = \langle S_i S_k + S_k S_i \rangle, \quad i, k = x, y, z$$

такое состояние характеризуется спонтанным нарушением вращательной симметрии, а также является инвариантным относительно обращения времени. Волновая функция основного состояния для значения параметра $\alpha = \pi/4$:

$$|\psi(1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle).$$

Как отмечено во введении к данному разделу, геометрическим образом тензорного параметра порядка является квадрупольный эллипсоид. Легко понять, что в *N* – фазе квадрупольный эллипсоид вырождается в плоский диск, $\langle S_x^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle = 1$, $\langle S_y^2 \rangle = 0$, а направление вектора \vec{n} коллинеарно оси *OY*.

Рассмотрим теперь двухподрешеточную систему, полагая $J_0 < 0$. Прежде всего рассмотрим случай $K < |J|$. В качестве оси квантования можно взять ось *OZ*. Ориентация магнитного момента первой подрешетки будет совпадать с направлением оси *OZ*; магнитный момент второй подрешетки коллинеарен *OZ*, но противоположно направлен. Операторы второй подрешетки развернем для того, чтобы в обеих подрешетках совпали ориентации осей квантования. В

результате унитарного поворота на угол π вокруг оси OY $U(\varphi) = \prod_m \exp(i\varphi S_m^y)$

компоненты оператора спина для второй подрешетки принимают вид:

$$S_m^x \rightarrow -S_m^x, S_m^z \rightarrow -S_m^z, S_m^y \rightarrow S_m^y.$$

Одноузельный гамильтониан в этом случае принимает вид:

$$H_0(n) = \tilde{\Delta} + \bar{H}S_n^z - B_2^0 O_{2n}^0 - B_2^2 O_{2n}^2, \quad (3.10)$$

$$\text{где } \tilde{\Delta} = -\frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{4} \left(\frac{(q_2^0)^2}{3} + (q_2^2)^2 \right).$$

Решение одноузельной задачи с гамильтонианом (3.10) определяет энергетические уровни и собственные функции гамильтониана (3.10), совпадающие с выражениями (3.3) и (3.4) с учетом замены $\bar{H} \rightarrow -\bar{H}$ и $\Delta \rightarrow \tilde{\Delta}$. Плотность свободной энергии в этом случае имеет вид:

$$F = \frac{J_0}{2} \cos^2 2\alpha.$$

Здесь учтены только слагаемые, зависящие от параметра α . Как видно устойчивым будет состояние: $\alpha=0$, $J_0 < 0$, $|J| > |K|$, $\langle S^z \rangle = 1$, $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = 0$.

Очевидно, что такое состояние является антиферромагнитно (*AFM*) упорядоченным.

Рассмотрим теперь устойчивость состояния, в котором $J_0, K_0 < 0$ $|J| < |K|$.

Анализ одноузельной задачи с гамильтонианами (3.3) и (3.10) показывает, что в области $J_0, K_0 < 0$ и $|J| < |K|$ *FM* и *AFM* фазы неустойчивы. Однако, и существование *N* фазы также невозможно, т.к. при $K_0 < 0$ основное состояние вырождено, что позволяет сделать предположение, что система разбита на две подрешетки. Как показано в [17] при $K_0 < 0$ реализуется двухподрешеточное состояние с взаимно ортогональными осями квантования и $\langle S^z \rangle = 0$ в обеих подрешетках. Назовем такое состояние ортогональным нематиком (*ON*). Для упрощения математических выкладок удобно повернуть вторую подрешетку

следующим образом: $U_1(\theta_1) = \exp(i\theta_1 S^y)$, $U_2(\theta_2) = \exp(i\theta_2 O_2^{xy})$, где $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$. В результате, одноузельный гамильтониан примет вид:

$$H_0(n) = \tilde{\Delta}' + \frac{B_2^0}{2} O_{2n}^0 + \frac{B_2^2}{2} O_{2n}^2, \quad (3.11)$$

где $\tilde{\Delta}' = -\frac{K_0}{8} \left(\frac{(q_2^0)^2}{3} + (q_2^2)^2 \right)$.

Решая одноузельную задачу с гамильтонианом (3.11), получим нижайший энергетический уровень магнитного иона:

$$E_1 = \tilde{\Delta}' + \frac{1}{2} (B_2^0 + B_2^2 \sin 2\alpha), \quad (3.12)$$

который при $T \rightarrow 0$ соответствует плотности свободной энергии. Анализ выражения (3.12) показывает, что это состояние устойчиво при $\alpha = \pi/4$. Параметры порядка в первой подрешетке $\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 1$ и основное состояние – $|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle)$. Параметры порядка для второй подрешетки имеют значения $\langle S^z \rangle = q_2^2 = 0, q_2^0 = -2$, а $|\Psi_2\rangle = |0\rangle$ – соответствующая функция основного состояния. Как видно, действительно, в базисе собственных функций оператора S^z основные состояния подрешеток ортогональны, и, следовательно, ортогональными являются направления главных осей тензора квадрупольных моментов подрешеток.

3.1.2. Анализ спектров магнонов в окрестности линий фазовых переходов негейзенберговского магнетика.

Для анализа элементарных возбуждений в магнетике с $S=1$ можно использовать метод функций Грина для операторов Хаббарда [226-228], который в данном случае является наиболее адекватным исследованием сильно

коррелированных систем. В данном случае в таком подходе необходимы громоздкие вычисления, но при использовании некоторых приближений возможно получение аналитических решений для спектров при произвольных соотношениях параметров гамильтониана и волновых векторов. Полюса функции Грина будут определять спектр возбуждений сильно коррелированных систем [226-228]. При использовании теории возмущений параметром малости является обратный радиус взаимодействия [249].

Выражении для функции Грина имеет вид [54]:

$$G^{\mu\mu'}(m, t; m', t') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_m^\mu(t) \tilde{X}_{m'}^{\mu'}(t') \rangle,$$

здесь \hat{T} – виковский оператор; $\mu = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{2S+1}, M_1, M_2, \dots, M_{2S+1}$;
 $\tilde{X}_m^\mu(t) = \exp(Ht) X_m^\mu \exp(-Ht)$ – выражение операторов Хаббарда в представлении Гейзенберга, $H = H_0 + H_{\text{int}}$.

Исследования будут проходить в приближениях средних полей. Тогда в гамильтониане взаимодействия достаточно использовать «динамическую» часть:

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{m, m', \mu, \mu'} \bar{c}(\mu) \hat{A}_{mm'} \bar{c}(\mu') X_m^\mu X_{m'}^{\mu'}.$$

Координаты восьмимерного вектора $\bar{c}(\mu)$ можно найти используя связь операторов Хаббарда и спиновых операторов. Матрица $\hat{A}_{mm'}$ имеет вид:

$$\hat{A}_{mm'} = \left(J_{mm'} - \frac{K_{mm'}}{2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \oplus \frac{K_{mm'}}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

Фурье-образы выражений функций Грина представим в виде:

$$G^{\mu\mu'}(\vec{k}, \omega_n) = \Sigma^{\mu\mu'}(\vec{k}, \omega_n) - \frac{1}{2} \Sigma^{\mu\mu_1}(\vec{k}, \omega_n) \left\{ \bar{c}(-\mu_1), \hat{A}(\vec{k}) \bar{c}(\mu_2) \right\} G^{\mu_2\mu'}(\vec{k}, \omega_n).$$

Здесь фурье-компоненты $G^{\mu\mu'}(\vec{k}, \omega_n)$ не равны нулю для частот ω_n с четным n . Графики неприводимых по Ларкину – следующие:

$$\Sigma^{\lambda\mu}(\vec{k}, \omega_n), \Sigma^{mm'}(\vec{k}, \omega_n), \Sigma^{m\mu}(\vec{k}, \omega_n), \Sigma^{\mu m}(\vec{k}, \omega_n).$$

Система уравнений гриновских функций в нулевом приближении становится более простой, так как:

$$\begin{aligned} \Sigma^{\lambda\mu}(\vec{k}, \omega_n) &= \delta_{\lambda\mu} b(\lambda) G_0^\lambda(\omega_n), \Sigma^{mm'}(\vec{k}, \omega_n) = -\frac{n_{mm'}}{T} \delta_{\omega_n, 0} \\ \Sigma^{m\mu}(\vec{k}, \omega_n) &= \Sigma^{\mu m}(\vec{k}, \omega_n) = 0, \end{aligned}$$

где $G_0^\alpha(\omega_n) = [i\omega_n + \alpha \mathbf{E}]^{-1}$ – нулевая функция Грина, $b(\alpha) = \langle \alpha \mathbf{X} \rangle_0$ – концевой множитель, α – корневой вектор, компоненты которого определяются алгеброй операторов Хаббарда [221]. В итоге дисперсионное уравнение может быть представлено в виде:

$$\det \|\delta_{mn} + X_{mn}\| = 0; \quad m, n = 1, 2, \dots, 8,$$

где $x_{mn} = G_0^\alpha(\omega_n) b(\alpha) c_{mn}(\alpha)$, $c_{mn}(\alpha, \beta) = a_{mk}(\alpha, \beta) A_{kn}$;
 $a_{mn}(\alpha, \beta) = c_m(\alpha) c_n(-\beta)$.

Проанализируем спектры элементарных возбуждений при различных соотношениях обменных интегралов, т.е. в различных фазовых состояниях.

При $J_0 > 0$ и $J_0 > K_0$, как уже отмечалось ранее, в системе реализуется *FM*- фаза. Спектры магнонов в этой фазе имеют вид:

$$\varepsilon_1(k) = (J_0 - J_k); \quad (3.13)$$

$$\varepsilon_2(k) = (2J_0 - K_0 - K_k), \quad (3.14)$$

и в длинноволновом пределе (при $k \rightarrow 0$) получаем:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k \rightarrow 0) &= \delta k^2, \\ \varepsilon_2(k \rightarrow 0) &= 2(J_0 - K_0) + \gamma k^2, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где $\delta = \frac{1}{2} J_0 R_0^2$, $\gamma = \frac{1}{2} K_0 \tilde{R}_0^2$, R_0, \tilde{R}_0 – радиусы гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий, соответственно. Как видно из (3.15) спектр ε_2 становится неустойчивым на линии $J_0 = K_0$, и в окрестности

этой линии ведет себя как k^2 . На границе зоны Бриллюэна при $k \rightarrow \pi$ спектр ε_2 принимает вид:

$$\varepsilon_2(k) = 2J_0 + |\gamma|k^2, \quad (3.16)$$

и становится неустойчивым на линии $J_0 = 0$, а вблизи этой линии также ведет себя как k^2 . Как видно из спектра (3.16) это имеет место при $\gamma < 0$, т.е. в отрицательной области константы K_0 .

При $J_0 > 0$ и $J_0 < K_0$ в системе реализуется N -фаза. Спектры в N - фазе имеют вид:

$$\varepsilon_{1,2}^2(k) = (K_0 - 2J_k + K_k)(K_0 - K_k). \quad (3.17)$$

Как видно из (3.17) спектры магнонов вырождены. Это является следствием равенства значений энергий возбужденных уровней $E_0 = E_{-1}$. При $k \rightarrow 0$ (3.17) принимает вид:

$$\varepsilon_{1,2}^2(k) = \left(2(K_0 - J_0) + (2\alpha - \gamma)k^2\right)\gamma k^2. \quad (3.18)$$

На линии $J_0 = K_0$ спектр (3.18) теряет устойчивость и вблизи этой линии ведет себя как k^2 . На линии $J_0 = K_0$ система испытывает фазовый переход N -фаза – FM -фаза.

На границе зоны Бриллюэна (при $k \rightarrow \pi$) спектр (3.17) имеет вид:

$$\varepsilon_{1,2}^2(k) = \left(2J_0 + (\gamma - 2\alpha)k^2\right)\left(2K_0 + \gamma k^2\right). \quad (3.19)$$

На линии $J_0 = 0$ спектр (3.19) становится линейным по k , и при $J_0 < 0$ система переходит в AFM фазу.

Теперь рассмотрим спектры двухподрешеточной системы, т.е. в случае $J_0 < 0$. Прежде всего исследуем ситуацию $|J| > |K|$, т.е. система находится в AFM -состоянии. В этом спиновом состоянии спектр возбуждения записывается в виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= (J_0 - J_k - K_0 + K_k)(J_0 + J_k - K_0 - K_k); \\ \varepsilon_2^2(k) &= (2J_0 - K_0 - K_k)(2J_0 - K_0 + K_k). \end{aligned} \quad (3.20)$$

В длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ и $J_0 < 0, K_0 > 0$ спектр ε_2 принимает вид:

$$\varepsilon_2^2(k) = 2(|J_0| + K_0)(2|J_0| + \gamma k^2). \quad (3.21)$$

Как видно из (3.21), магنونная ветвь ε_2 размягчается на линии $J_0 = 0$, т.е. эта линия есть линия фазового перехода *AFM*-фаза – *N*-фаза. На границе зоны Бриллюэна $k \rightarrow \pi$ и при $J_0 < 0, K_0 < 0$ из (3.20) получаем:

$$\varepsilon_2^2(k) = 2|J_0| \left[2(|J_0| - |K_0|) + |\gamma|k^2 \right]. \quad (3.22)$$

Как следует из (3.22) щель магنونной ветви обращается в ноль на линии $J_0 = K_0$.

Рассмотрим, наконец, спектры элементарных возбуждений в *ON*-фазе, т.е. при $|J_0| < |K_0|$. В этой фазе спектры имеют вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \frac{1}{4}(K_0 + 2J_k - K_k)(K_0 + K_k), \\ \varepsilon_2^2(k) &= \frac{1}{4}(K_0 - 2J_k + K_k)(K_0 - K_k). \end{aligned} \quad (3.23)$$

При $k \rightarrow 0$ щель в спектре

$$\varepsilon_1^2(k) = \frac{|K_0|}{2} \left[2|J_0| + (|\gamma| - 2|\alpha|)k^2 \right] \quad (3.24)$$

обращается в ноль на линии $J_0 = 0$ и приближается к этой линии как линейно по волновому вектору k , а при $k \rightarrow \pi$ спектр

$$\varepsilon_1^2(k) = \frac{|\gamma|k^2}{4} \left[2(|K_0| - |J_0|) + (2|\alpha| - |\gamma|)k^2 \right] \quad (3.25)$$

размягчается в окрестности линии $J_0 = K_0$, и стремится к ней как k^2 .

Анализ фазовых состояний изотропного негейзенберговского магнетика при различных соотношениях обменных интегралов, а также исследование спектров элементарных возбуждений позволило построить фазовую диаграмму негейзенберговского магнетика (рис.3.1).

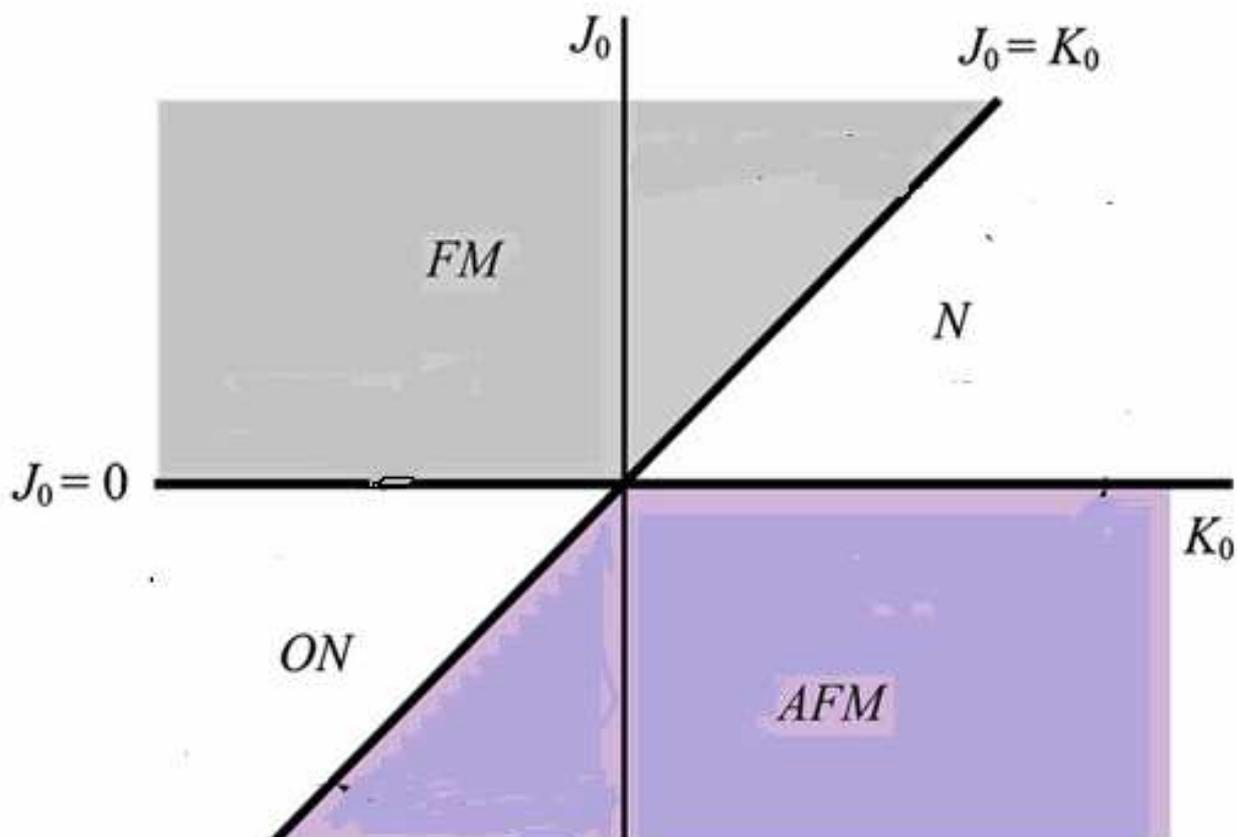


Рис.3.1. Фазовая диаграмма изотропного негейзенберговского магнетика с $S=1$ в переменных J_0, K_0 .

Фазовые переходы ортогональный нематик – ферромагнетик и ортогональный нематик – антиферромагнетик, происходящие при изменении параметра J/K , являются вырожденными переходами первого рода (на линиях фазового перехода параметры порядка характеризующие граничащие фазовые состояния изменяются скачком, но при этом область сосуществования фаз отсутствует. Кроме того, щель в спектрах элементарных возбуждений обращается в ноль на линии фазового перехода).

Как известно, при учете только билинейного обменного взаимодействия, т.е. находясь в рамках стандартной гейзенберговской модели, при $J_0 > 0$ реализуется одноподрешеточное ферромагнитное упорядочение, а при $J_0 < 0$ двухподрешеточное антиферромагнитное упорядочение. В окрестности точки $J_0 = 0$ особо заметным становятся вклад биквадратичного обмена. Учет же

высших спиновых инвариантов существенно изменяет ситуацию. Если $K_0 > 0$ то переход между *FM*- и *AFM*- состояниями происходит не как в гейзенберговском магнетике, а через одноподрешеточную нематическую фазу. В случае отрицательного значения константы биквадратичного обмена $K_0 < 0$ переход *FM*-*AFM*- фазы также протекает через фазу с тензорным параметром порядка (ортогональный нематик), а не непосредственно, как в модели Гейзенберга.

3.2. Статические и динамические свойства изотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона 3/2.

3.2.1. Фазовые состояния и анализ плотности свободной энергии.

Возможность существования спиновых нематических состояний для систем с полуцелым спином (минимальная величина полуцелого спина допускающая такие состояния – $S=3/2$) гораздо менее изучена, хотя этот вопрос имеет важное значение для исследования физических свойств ферми-систем. Согласно теореме Крамерса, для любого полуцелого значения спина возможно нарушение симметрии обращения времени, даже если $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$ [20]. Для изотропного гамильтониана со спином 3/2 было показано [62,64], что нематическое состояние существует в непосредственной окрестности фазового перехода в ферромагнитное состояние. В работе [64] была построена фазовая диаграмма изотропного магнетика со спином магнитного иона 3/2 и найдены антиматические состояния с двумя подрешетками. Состояния спинов в различных подрешетках отличаются, но они переходят друг в друга при обращении времени. Таким образом, все нематические фазы магнетика со спином $S=3/2$, дополнительно к спонтанному нарушению вращательной симметрии, обнаруживают также нарушение симметрии относительно обращения времени. Особенности статических свойств нематических фаз магнетика со спином $S=3/2$, в частности, антиматических фаз, позволяют надеяться на существование нетривиальных свойств коллективных возбуждений в таких системах.

Рассмотрим изотропный магнетик со спином магнитного иона $S=3/2$. В общем случае гамильтониан системы со спином 3/2 и изотропным обменным взаимодействием между ближайшими соседями имеет вид:

$$H = - \sum_{l \neq l'} \left[JS_l S_{l'} + K (S_l S_{l'})^2 + L (S_l S_{l'})^3 \right], \quad (3.26)$$

где S_n – оператор спина в узле n ; J , K и L – константы обменного взаимодействия. Суммирование в гамильтониане (3.26) проводят по ближайшим соседям. Исследование модели будет проводиться при температурах близких к нулю $T \rightarrow 0$. Это несколько упрощает вычисления, но при этом позволит более ярко выявить квантовые свойства рассматриваемой модели. Наиболее удобной формой записи гамильтониана (3.26) является использование неприводимых тензорных операторов O_j^i ($j \leq 2S$, $i \leq j$) [70]. Полный набор операторов O_j^i образует унитарную группу $SU(2S+1)$ и действуют в пространстве собственных векторов $|m\rangle$ оператора S^z ($m = \pm 2, \pm 1, 0$). В основе способа построения этих операторов лежит метод эквивалентных операторов. В случае $S=3/2$ операторы имеют вид:

$$\begin{aligned} O_2^0 &= 3(S^z)^2 - S(S+1), \quad O_2^1 = [S^z, S^x]_+, \quad \tilde{O}_2^1 = [S^z, S^y]_+, \quad O_2^2 = \frac{1}{2} \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right), \\ \tilde{O}_2^2 &= \frac{1}{2i} \left((S^+)^2 - (S^-)^2 \right), \quad O_3^0 = 5(S^z)^3 - 3S(S+1)S^z + S^z, \\ O_3^1 &= \frac{1}{2} \left[\left(5(S^z)^2 - S(S+1) - \frac{1}{2} \right), S^x \right]_+, \quad \tilde{O}_3^1 = \frac{1}{2} \left[\left(5(S^z)^2 - S(S+1) - \frac{1}{2} \right), S^y \right]_+, \\ O_3^2 &= \frac{1}{4} \left[S^z, \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right) \right]_+, \quad \tilde{O}_3^2 = \frac{1}{4i} \left[S^z, \left((S^+)^2 - (S^-)^2 \right) \right]_+, \\ O_3^3 &= \frac{1}{2} \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right), \quad \tilde{O}_3^3 = \frac{1}{2i} \left((S^+)^3 - (S^-)^3 \right), \end{aligned}$$

где $S^\pm = S^x \pm iS^y$, $[A, B]_+ = AB + BA$ означает антикоммутатор соответствующих операторов.

В терминах операторов Стивенса гамильтониан (3.26) с точностью до аддитивной константы можно представить в виде суммы билинейных комбинаций:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ \tilde{J} S_n S_{n'} + \tilde{K} O_{2n} O_{2n'} + L O_{3n} O_{3n'} \right\}, \quad (3.27)$$

где обозначено $\tilde{K} = \frac{1}{2}K - L$, $\tilde{J} = J - \frac{1}{2}K + \frac{587}{80}L$,

$$O_{2n}O_{2n'} = \frac{1}{3}O_{2n}^0O_{2n'}^0 + O_{2n}^1O_{2n'}^1 + \tilde{O}_{2n}^1\tilde{O}_{2n'}^1 + O_{2n}^2O_{2n'}^2 + \tilde{O}_{2n}^2\tilde{O}_{2n'}^2,$$

$$O_{3n}O_{3n'} = \frac{1}{10}O_{3n}^0O_{3n'}^0 + \frac{3}{20}(O_{3n}^1O_{3n'}^1 + \tilde{O}_{3n}^1\tilde{O}_{3n'}^1) + \frac{3}{2}(O_{3n}^2O_{3n'}^2 + \tilde{O}_{3n}^2\tilde{O}_{3n'}^2) + \frac{1}{4}(O_{3n}^3O_{3n'}^3 + \tilde{O}_{3n}^3\tilde{O}_{3n'}^3)$$

Такая запись позволяет использовать представление когерентных состояний для группы $SU(4)$, которые использовались в работе [64].

Рассматриваемая система не имеет выделенного направления, и направление оси квантования (оси OZ) может быть выбрана произвольно.

Учитывая наличие средних полей в гамильтониане (3.27), существование которых связано с упорядочением дипольного $\langle S^i \rangle$ и более высших моментов $q_j^i = \langle O_j^i \rangle$, получим одноузельный гамильтониан в виде:

$$H_0 = -J \langle S^i \rangle S^i - K q_2^i O_2^i - L q_3^i O_3^i. \quad (3.28)$$

Чтобы диагонализировать одноузельный гамильтониан (3.28) требуется провести необходимое число унитарных преобразований – в общем случае это число равно $N(N-1)$. В основе развиваемого подхода используется простота алгебры операторов Хаббарда [154,226]. Операторы Хаббарда определены обычным образом: $X^{mn} \equiv |m\rangle\langle n|$. С операторами спина они связаны следующим соотношением:

$$S^+ = \sqrt{3} \left(X \begin{matrix} 31 \\ 22 \end{matrix} + X \begin{matrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{matrix} \right) + 2X \begin{matrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{matrix}. \quad (3.29)$$

Общая форма записи нулевого гамильтониана (3.28) в представлении операторов Хаббарда следующая:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k H^k + \sum_{k \neq m} D_{km} X^{km}, \quad D_{mk} = (D_{km})^*,$$

где ε_k – энергия исходных состояний, D_{km} – недиагональные части гамильтониана. Нулевой гамильтониан в результате унитарных преобразований

$$\tilde{H}_0 = U H_0 U^+,$$

где оператор унитарных поворотов

$$U = U \begin{pmatrix} \alpha_{1\ 1} & \\ & \alpha_{2\ 2} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \alpha_{1\ 3} & \\ & \alpha_{2\ 2} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \alpha_{1\ 3} & \\ & \alpha_{2\ 2} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \alpha_{31} & \\ & \alpha_{22} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \alpha_{3\ 1} & \\ & \alpha_{2\ 2} \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} \alpha_{3\ 3} & \\ & \alpha_{2\ 2} \end{pmatrix},$$

приводится к диагональному виду

$$\tilde{H}_0 = \sum_{\alpha} E_{\alpha} H^{\alpha}$$

Параметры унитарных преобразований подбираются таким образом, чтобы обеспечить равенство нулю недиагональных матричных элементов

$$\tilde{V}_{mn} = \tilde{V}_{mn} \begin{pmatrix} \alpha_{33} & \dots \\ & \alpha_{22} \end{pmatrix} = 0.$$

Вид унитарного оператора существенно упрощается если учесть, что отличны от нуля только средние вида $\langle S^z \rangle, q_3^0, q_3^3, q_2^0$. Это условие вытекает из симметрии системы и может быть проверено непосредственно. Тогда одноузельный гамильтониан принимает вид:

$$\tilde{H}_0 = -\bar{H} S^z - B_2^0 O_2^0 - B_3^0 O_3^0 - B_3^3 O_3^3, \quad (3.30)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \bar{H} &= z \tilde{J} \langle S^z \rangle, \quad B_2^0 = z \frac{\tilde{K}}{3} q_2^0, \quad B_3^3 = z \frac{L}{4} q_3^3, \quad B_3^0 = z \frac{L}{10} q_3^0, \\ q_2^0 &= \langle O_2^0 \rangle = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - \frac{15}{4}, \quad q_3^3 = \langle O_3^3 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle \right) \\ q_3^0 &= \langle O_3^0 \rangle = 5 \langle (S^z)^3 \rangle - \frac{41}{4} \langle S^z \rangle. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Для диагонализации гамильтониана (3.30) достаточно совершить один «унитарный поворот» $\alpha_{3/2, -3/2}$, который имеет смысл обобщенного u-v преобразования Боголюбова. Анализ показал, что состояния $|\psi(1/2)\rangle$ и

$|\psi(-1/2)\rangle$ никогда не являются «экстремальными»; минимальному и максимальному значению собственных чисел всегда соответствуют состояния, получаемые унитарным поворотом из $|3/2\rangle$ и $|-3/2\rangle$. Выберем состояния $|\psi(3/2)\rangle$ и $|\psi(-3/2)\rangle$ так, чтобы им отвечало наименьшее и наибольшее собственные значения, которые обозначим E_{\min} и E_{\max} , соответственно, и запишем полный набор состояний в виде:

$$\begin{aligned} |\psi(3/2)\rangle &= \cos \alpha |3/2\rangle + \sin \alpha |-3/2\rangle; \\ |\psi(1/2)\rangle &= |1/2\rangle; \\ |\psi(-1/2)\rangle &= |-1/2\rangle; \\ |\psi(-3/2)\rangle &= -\sin \alpha |3/2\rangle + \cos \alpha |-3/2\rangle, \end{aligned} \quad (3.32)$$

где уровни энергии определяются формулами

$$\begin{aligned} E_{3/2} &= -3B_2^0 - \frac{3}{2}(\bar{H} + B_3^0) \cos 2\alpha - 3B_3^3 \sin 2\alpha, \\ E_{1/2} &= 3B_2^0 - \frac{1}{2}(\bar{H} - 9B_3^0), \\ E_{-1/2} &= 3B_2^0 + \frac{1}{2}(\bar{H} - 9B_3^0), \\ E_{-3/2} &= -3B_2^0 + \frac{3}{2}(\bar{H} + B_3^0) \cos 2\alpha + 3B_3^3 \sin 2\alpha. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Параметр α обобщенного u-v преобразования определяется уравнением:

$$(\bar{H} + B_3^0) \sin 2\alpha - 2B_3^3 \cos 2\alpha = 0. \quad (3.34)$$

Из связи между спиновыми и хаббардовскими операторами можно определить вид параметров порядка системы при произвольных соотношениях обменных интегралов:

$$\langle S^z \rangle = q_3^0 = \frac{3}{2}(\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha), \quad q_2^0 = 3, \quad q_3^3 = 6 \sin \alpha \cos \alpha. \quad (3.35)$$

Уравнение (3.34) при учете (3.31) и (3.35) может быть преобразовано к виду $\Lambda_1 \sin 2\alpha \cos 2\alpha = 0$, где введено обозначение

$$\Lambda_1 = J - \frac{K}{2} + \frac{103}{16}L. \quad (3.36)$$

Из полученного уравнения следует, что в случае, когда комбинация обменных интегралов Λ_1 не обращается в ноль, параметр диагонализации гамильтониана α может принимать только значения, кратные $\pi/4$.

Поскольку исследуется случай низких температур, то плотность свободной энергии в точности равна величине энергии основного уровня магнитного иона $E_{3/2}$. В итоге, выражение плотности свободной энергии имеет вид

$$F = -3B_2^0 - \frac{3}{2}(\bar{H} + B_3^0)\cos 2\alpha - 3B_3^3 \sin 2\alpha,$$

что, с учетом формул (3.31) и (3.35), дает

$$F = -\frac{3z}{2}\left(\frac{K}{2} - L\right) - \frac{9z}{8}\left(J - \frac{K}{2} + \frac{119}{16}L\right)\cos^2 2\alpha - \frac{9z}{8}L\sin^2 2\alpha. \quad (3.37)$$

Минимизируя плотность свободной энергии по α приходим вновь к выражению $\Lambda_1 \sin 2\alpha \cos 2\alpha = 0$, см. (3.36), то есть минимуму плотности свободной энергии могут отвечать только значения $\alpha=0$ и $\alpha=\pi/4$.

Если $\Lambda_1 > 0$, то выгодно состояние с $\alpha=0$, а если $\Lambda_1 < 0$ то состояние с $\alpha=\pi/4$. При $\alpha=0$ параметры порядка системы равны $\langle S^z \rangle = 3/2$, $q_2^0 = 3$, $q_3^0 = 3/2$, $q_3^3 = 0$, что соответствует ферромагнитной фазе с максимально возможным значением магнитного момента на узле. Аналогично, значение $\alpha=\pi/2$, получаем такое же насыщенное состояние, но с противоположным направлением спина, $\langle S^z \rangle = -3/2$. Эти состояния эквивалентны, и далее обсуждается только случай $\alpha=0$.

Для состояния с $\alpha=\pi/4$ имеем $\langle S^z \rangle = 0$ и $q_3^0 = 0$. Ненулевое квадрупольное среднее имеет то же значение, как и для ферромагнитной фазы, $q_2^0 = 3$; но при этом возникают нетривиальные средние $\langle (S^+)^3 \rangle$ и $\langle (S^-)^3 \rangle$, величина $q_3^3 = 3$ (3.31). Таким образом, при $\alpha=\pi/4$ реализуется нематическое состояние с равном нулю средним значением магнитного момента на узле. Заметим, что здесь ситуация существенно иная, чем для случая магнетика со спином единица, для

которого ферромагнитная и нематическая фаза отличались не только средним значением спина, но и значениями квадрупольных средних. Как будет показано ниже, это различие статических свойств приводит к принципиальному различию спектров коллективным мод в этих двух случаях.

Таким образом, при $\Lambda_1 \rightarrow \pm 0$ существуют фазы с немалым отличием параметров, в частности, при $\Lambda_1 \rightarrow +0$ в ферромагнитной фазе $\langle S^z \rangle = 3/2$, а при $\Lambda_1 \rightarrow -0$ в нематической $\langle S^z \rangle = 0$, см. (3.35). При $\Lambda_1 = 0$ энергии фаз совпадают. Эти два свойства характерны для фазового перехода первого рода. Данный результат совпадает с тем, что было получено в ранних работах разными методами [20,62], в том числе путем вычисления свободной энергии на основе когерентных состояний группы $SU(4)$. Однако, в отличие от стандартной ситуации, значение параметра α при $\Lambda_1 = 0$ становится неопределенным, то есть в этой точке все состояния с $\alpha = 0$ и $\pi/4$ имеют одинаковую энергию. Также известно, что обе эти фазы теряют устойчивость при подходе к точке $\Lambda_1 = 0$, ферромагнитная – при $\Lambda_1 \rightarrow +0$ и нематическая – при $\Lambda_1 \rightarrow -0$ [62]. На языке стандартных моделей магнетиков это означает наличие вырожденной точки перехода первого рода. Такое вырождение обычно устраняется обобщением модели (обычно путем учета высших инвариантов) в результате чего получается либо конечная область сосуществования фаз, либо «расщепление точки» на два перехода второго рода через промежуточную фазу с низкой симметрией ($\alpha \neq 0, \pi/4$, в нашем случае), см. [225]. Однако для квантовой модели (3.26) такой путь невозможен, поскольку высшие слагаемые типа $(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'})^n$ с $n > 3$ сводятся к уже выписанным в (3.26). Такое поведение не типично для перехода первого рода и определяется повышением симметрии проблемы (от вращательной симметрии $SU(2)$ до, как минимум, $SU(3)$) при $\Lambda_1 = 0$), то есть это значение отвечает квантовой критической точке, см. [62,250]. Та же ситуация реализуется и для переходов между другими фазами в этой модели (антиферромагнитной, антинематической), а также известна для изотропного магнетика со спином $S=1$ [19,22,54].

Для определения области устойчивости определенных выше спиновых состояний воспользуемся диаграммной техникой для операторов Хаббарда. Вид спектра возбуждений определяем из полюсов функции Грина:

$$G^{\alpha\alpha'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_n^\alpha(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где $\tilde{X}_n^\alpha(\tau) = \exp(\mathbf{H}\tau) X_n^\alpha \exp(-\mathbf{H}\tau)$ – оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, \hat{T} – оператор Вика, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\text{int}}$. Поскольку вычисления проводятся в приближении среднего поля, нам необходима лишь «динамическая» часть гамильтониана \mathbf{H}_{int} , которая имеет вид:

$$\mathbf{H}_{\text{int}}^\perp = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \sum_{\alpha, \beta} \{ \bar{c}(\alpha) \hat{A}_{nn'} \bar{c}(\beta) \} X_n^\alpha X_{n'}^\beta,$$

где компоненты 15-и мерного вектора $\bar{c}(\alpha)$ определяются из связи спиновых и тензорных операторов с операторами Хаббарда, а матрица $\hat{A}_{nn'}$ представляет прямую сумму матриц:

$$\hat{A}_{nn'} = \frac{\tilde{J}_{nn'}}{2} (2 \cdot \hat{1} \oplus \hat{I}) \oplus \frac{\tilde{K}_{nn'}}{2} (6 \cdot \hat{1} \oplus \hat{I} \oplus \hat{I}) \oplus \frac{\tilde{L}_{nn'}}{160} (16 \cdot \hat{1} \oplus 3\hat{I} \oplus 30\hat{I} \oplus 20\hat{I}), \quad \hat{I} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

При применении диаграммной техники для операторов Хаббарда можно точно учесть одноузельные корреляторы, а значит решения дисперсионного уравнения не зависят от соотношений констант обменного взаимодействия и будут справедливы во всех фазах. Результаты анализа спектров в различных фазах приведены ниже.

Перейдем непосредственно к анализу спектра возбуждений в различных фазовых состояниях магнетика, соответствующих гамильтониану (3.26).

3.2.2. Анализ спектров возбуждения в ферромагнитной и нематической фазах.

Рассмотрим систему в ферромагнитной фазе. Как отмечалось ранее, этому фазовому состоянию отвечает решение уравнения (3.36) $\alpha=0$. Спиновые средние, характеризующие ферромагнитную фазу, имеют вид:

$$\begin{aligned}\langle S^z \rangle &= \frac{3}{2}, q_2^0 = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1) = 3, \\ q_3^0 &= 5 \langle (S^z)^3 \rangle - [3S(S+1) - 1] \langle S^z \rangle = \frac{3}{2}.\end{aligned}$$

Основным уровнем энергии ферромагнитной фазы будет $E_{3/2}$. Соответствующая волновая функция равна $|\psi(3/2)\rangle = |3/2\rangle$. Главные оси тензора квадрупольных моментов определяются средними вида

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \frac{9}{4}, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{3}{4}.$$

Таким образом, тензору квадрупольных моментов ферромагнитного состояния сопоставляется эллипсоид вращения в пространстве спиновых операторов. Направление магнитного момента коллинеарно главной оси квадрупольного эллипсоида. В отличие от магнетика со спином $S=1$, форма квадрупольного эллипсоида одинакова для ферромагнитной и нематической фазы. Кроме того, нетривиальное октупольное среднее q_3^3 равно нулю, а величина q_3^0 является постоянной величиной и на динамику системы влияния не оказывает. Таким образом, симметрия квадрупольных параметров порядка и магнитного момента в ферромагнитной фазе совпадают. Наличие высших мультипольных средних не влияет на симметрию состояния ферромагнитной фазы.

Однако возможность существования таких «недипольных» средних принципиально меняет динамику системы по сравнению со случаем $S=1$. Используя общее дисперсионное уравнение (3.37), определим спектры возбуждений в ферромагнитной фазе. В низкотемпературном приближении в системе будут существовать три магнонные ветви возбуждений [62,64], спектры которых в приближении ближайших соседей имеют вид:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k) &= \frac{3z}{4} \left[J - J_k + \frac{3}{2}(K - K_k) + \frac{63}{16}(L - L_k) \right], \\ \varepsilon_2(k) &= \frac{3z}{2} \left[K - K_k - \frac{5}{4}(L - L_k) + J - \frac{1}{2}K + \frac{103}{16}L \right],\end{aligned}\quad (3.38)$$

$$\varepsilon_3(k) = \frac{9z}{4} \left[(L - L_k) + J - \frac{K}{2} + \frac{103}{16} L \right].$$

Здесь и далее $J_k = JC(\mathbf{k})$, $K_k = KC(\mathbf{k})$, $L_k = LC(\mathbf{k})$ определяют фурье-компоненты соответствующих обменных интегралов, $zC(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} \cos(\mathbf{a}\mathbf{k})$, суммирование производится по всем z векторам ближайших соседей \mathbf{a} , \mathbf{k} - безразмерный волновой (точнее, квазиволновой) вектор. Для оценок гиперкубической решетки $C(\mathbf{k})=1$ при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ и $C(\mathbf{k})=-1$ на краю зоны Бриллюэна (в одномерной модели это значение $k=k_B=\pi$, в трехмерном это граница зоны в направлении типа (111)), $C(\mathbf{k})=1/3$ и $C(\mathbf{k})=-1/3$ на границе зоны в направлении (100) и (110), соответственно. Отметим общее свойство спектров: значения частот $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_2(k)$ при всех значениях параметров задачи совпадают на краю зоны Бриллюэна, где $C(\mathbf{k})=-1$, см. ниже рис. 3.2.

Из (3.38) следует, что ветвь ε_1 - бесщелевая голдстоуновская мода с параболическим законом дисперсии при малых \mathbf{k} , характерная для ферромагнетика с изотропным взаимодействием. Исследования показали, возмущения спиновой плотности в «поперечной» моде соответствуют переориентации главной оси эллипсоида квадрупольных моментов.

Обсудим теперь остальные моды, с частотами ε_2 и ε_3 . Легко видеть, что в случае равенства нулю константы бикубического взаимодействия ($L=0$) хорошо определенными модами остаются только две ветви возбуждений - ε_1 и ε_2 а частота ε_3 становится чисто локальным состоянием, $\varepsilon_3(k) \rightarrow 9(2J - K)/4$ при $L \rightarrow 0$. Отметим, что для магнетика с $S=1$ при $K=0$, когда специфика негейзенберговского магнетика исчезает (в частности, отсутствует нематическая фаза) ситуация аналогичная: одна из мод теряет дисперсию и становится чисто локальным состоянием. В предельном случае $L=0$ ветви ε_1 и ε_2 имеют тот же вид, что и две коллективные моды спектра для с магнетика с $S=1$ (можно сравнить (3.38) и формулы в [19,31,47]). Все это позволяет сделать вывод, что физический смысл моды ε_2 такой же, как для ферромагнетика со

спином $S=1$, то есть ветвь ε_2 соответствует продольной динамике спиновых моментов [47,53]. Эта ветвь состоит из колебаний вектора магнитного момента по модулю, ориентация которого совпадает с направлением главной оси квадрупольного эллипсоида; также связана с изменением формы квадрупольного эллипсоида и его вращением вокруг направления вектора магнитного момента (подробнее в работе [53] и рис.3.3 в ней). С другой стороны, мода ε_3 определяется спецификой динамики магнетика со спином $S=3/2$, которая обусловлена нетривиальными октупольными средними.

Рассмотрим теперь устойчивость ферромагнитной фазы относительно произвольных возмущений, которые соответствуют спектрам (3.38). Как легко видеть из вида спектров элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе, при $k=0$ магнонные ветви $\varepsilon_{2,3}$ имеют энергетическую щель, пропорциональную величине $\Lambda_1 = J - \frac{1}{2}K + \frac{103}{16}L$. Отсюда следует, что условие устойчивости относительно однородных возмущений имеет вид $\Lambda_1 > 0$, что совпадает с известным результатом [20]. Этот результат получается также из анализа выписанной выше свободной энергии относительно вариации параметра α . Таким образом, линия $\Lambda_1=0$ является линией фазового перехода между ферромагнитной и нематической фазами.

Анализ законов дисперсии (3.38) показывает, что их экстремумы достигаются в симметричных точках зоны Бриллюэна, и потеря устойчивости (изменение знака частоты) связано с поведением спектра или при $\mathbf{k}=0$, или на краю зоны Бриллюэна, где $C(\mathbf{k})=-3$. В этой точке частота моды ε_2 имеет вид:

$$\varepsilon_{3,\text{edge}} = J - \frac{1}{2}K + \frac{135}{16}L = \Lambda_2, \quad (3.39)$$

$\Lambda_2 \rightarrow 0$ значение $\varepsilon_{3,\text{edge}} \rightarrow 0$, при этом другие частоты положительны. Таким образом, условие устойчивости включает неравенство $\Lambda_2 > 0$. Далее мы убедимся, что линия $\Lambda_2=0$ является линией фазового перехода из ферромагнитной в антинематическую фазу.

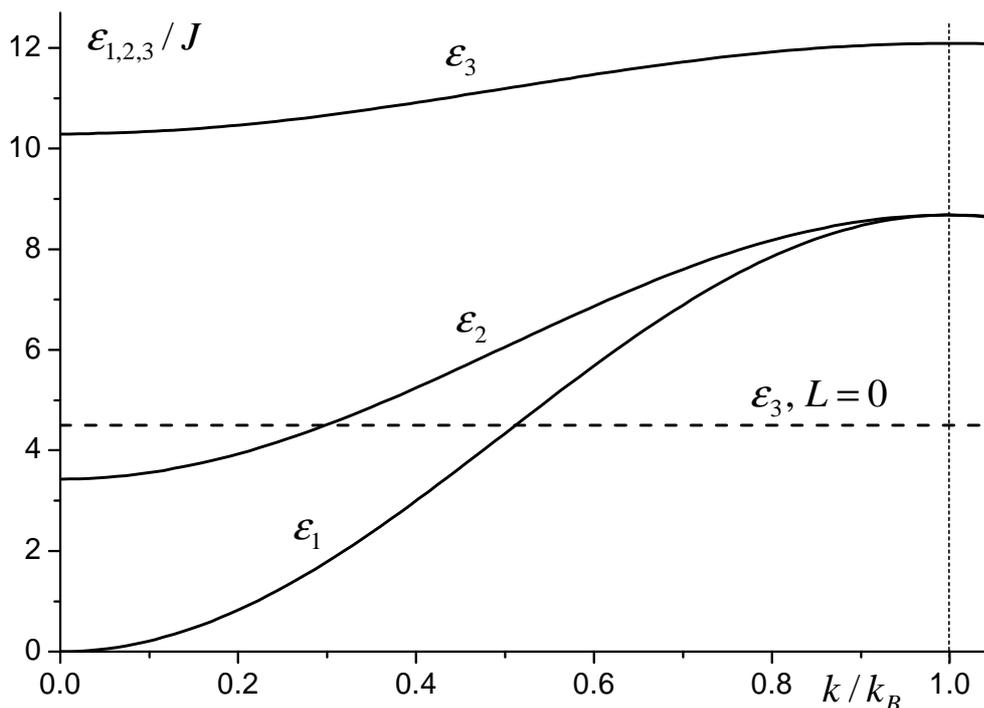


Рис.3.2. Законы дисперсии элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе, значения частот нормированы на величину J , величина k_B определяет границу зоны Бриллюэна. Здесь и далее на рисунках для простоты построение проведено для одномерного случая (выбрано $z=2$), обобщение на случай произвольной размерности при симметричном направлении \mathbf{k} не представляет труда. Жирные линии – спектры элементарных возбуждений в центре области устойчивости ферромагнитной фазы (выбраны значения $K=J$ и $L=J/10$). Штриховая линия изображают демонстрирует отсутствие дисперсии моды с $\varepsilon_3(k)$ при $L=0$.

Таким образом, область устойчивости ферромагнитного состояния определяется следующими неравенствами:

$$\Lambda_1 > 0, \Lambda_2 > 0. \quad (3.40)$$

На рис.3.2 приведена зависимость энергий коллективных возбуждений $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ исследуемой системы от волнового вектора в ферромагнитной фазе вдали от границ области устойчивости ферромагнитной фазы. Видно, что

спектр ε_1 определяет голдстоуновскую моду, а ветви ε_2 , ε_3 являются активационными.

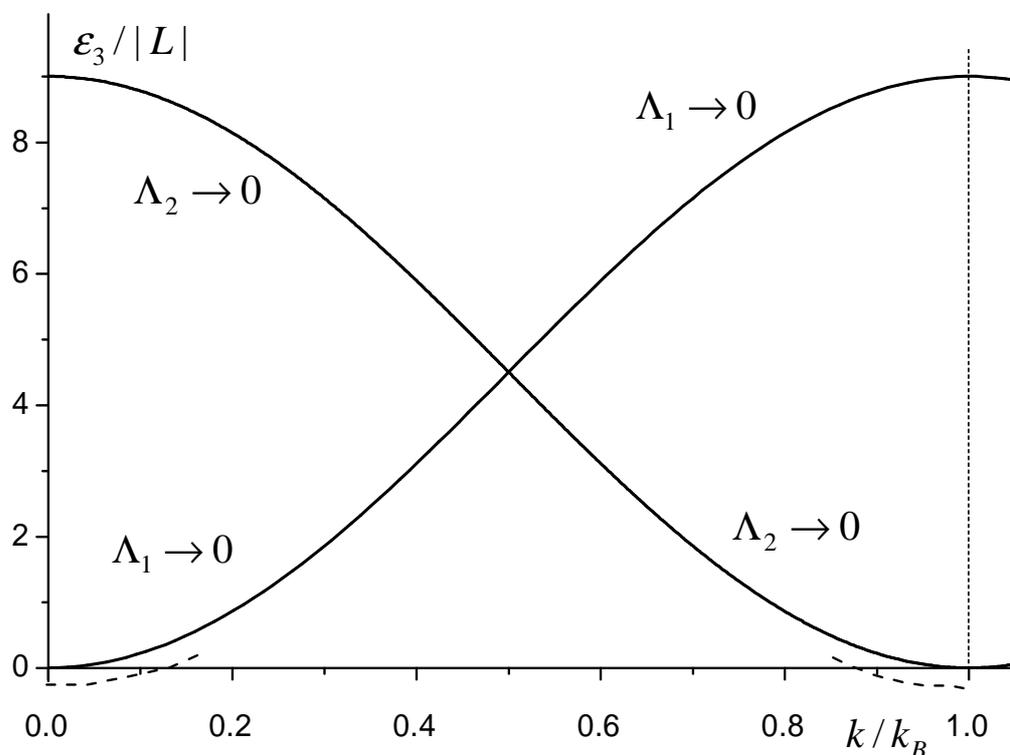


Рис.3.3. Закон дисперсии «октупольной» ветви элементарных возбуждений $\varepsilon_3(k)$ в ферромагнитной фазе в окрестности фазовых переходов в нематическую фазу ($\Lambda_1 \rightarrow 0$) и антинематическую фазу ($\Lambda_2 \rightarrow 0$), соответственно. Для данного случая значения частот удобно нормировать на величину $|L|$ (величина L положительна при $\Lambda_1 \rightarrow 0$ и отрицательна при $\Lambda_2 \rightarrow 0$). Сегменты тонких штриховых линий при $k \sim 0$ и в углу зоны Бриллюэна $k \sim \pi/a$ представляют схематически зависимость $\varepsilon_3^2(k)$ при $\Lambda_1 < 0, L > 0$, и $\Lambda_2 < 0, L < 0$, что отвечает области неустойчивости фазы.

Устойчивость системы вблизи линий фазового перехода описывается «октупольной» модой ε_3 , которая размягчается в окрестности линий потери устойчивости ферромагнитной фазы, а именно, при $\Lambda_2 = 0$ линии фазового перехода в нематическую фазу $\Lambda_1 = 0$ и перехода в антинематическую фазу

$\Lambda_2=0$, что отвечает размягчению спектра в центре зоны Бриллюэна $k \rightarrow 0$ и в углу зоны Бриллюэна (при $C(\mathbf{k})=-1$) (рис. 3.3).

Теперь исследуем динамические свойства системы в нематической фазе. Как уже отмечалось ранее, в этом случае параметр $\alpha=\pi/4$. Как видно из (3.34) параметры порядка в этом состоянии равны:

$$\langle S^z \rangle = q_3^0 = 0, \quad q_2^0 = q_3^3 = 3.$$

Основным уровнем энергии нематической фазы будет $E_{3/2}$. Соответствующая волновая функция:

$$\left| \psi \left(\frac{3}{2} \right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{3}{2} \right\rangle + \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \right).$$

Простой расчет показывает, что квадрупольные средние определяют некоторую анизотропию системы

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \frac{9}{4}, \quad \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{3}{4},$$

и геометрическим образом квадрупольных средних нематического состояния в спиновом пространстве является эллипсоид вращения. Форма этого эллипсоида такая же, как в ферромагнитной фазе. В рамках общего феноменологического подхода [241], для коллективных колебаний системы таких эллипсоидов можно ожидать существования двух вырожденных безактивационных мод. Однако на самом деле симметрия нематического состояния не содержит оси C_∞ ; симметрия ниже, чем симметрия эллипсоида квадрупольных моментов. В отличие от ферромагнитного состояния, в нематической фазе отличны от нуля кубические средние вида:

$$\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle = \frac{3}{4} \cos 3\chi,$$

а среднее значение $\langle S_z^3 \rangle = 0$. Фактически, угол χ определяет поворот спиновой системы вокруг оси OZ , поэтому ненулевые кубические средние определяют ось третьего порядка (а также комбинированное преобразование, то есть поворот на $\pi/6$ в сочетании с инверсией времени). В этом случае можно

ожидать появления еще одной моды, связанной с поворотом «октупольного треугольника». Заметим, что эти же элементы симметрии присутствуют для антиферромагнетика с тремя магнитными подрешетками, расположенными в плоскости и составляющими углы $2\pi/3$, и с макроскопической точки зрения поведение этих существенно различных систем должно быть похожим [54,67].

Определим спектры элементарных возбуждений в нематической фазе. Отметим, что в этом состоянии происходит вырождение двух возбужденных энергетических уровней $E_{1/2} = E_{-1/2}$. В результате этого, хотя в системе реализуются три ветви возбуждений с частотами

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(k) &= \frac{3z}{2\sqrt{2}} \sqrt{\left[K - K_k - \frac{5}{4}(L - L_k) \right] \left[K - \frac{5}{4}L - \frac{1}{2} \left(J_k + \frac{3K_k}{2} + \frac{63}{16}L_k \right) \right]}, \\ \varepsilon_3(k) &= \frac{9z}{4} \sqrt{(L - L_k) \left(L - J_k + \frac{K_k}{2} - \frac{119}{16}L_k \right)}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Законы дисперсии двух первых мод совпадают, их частоты остаются конечными при $L=0$. Из (3.41) следует, что при $L=0$ частота «октупольной» ветви $\varepsilon_3=0$ а для мод с $\varepsilon_{1,2}$ в пределе $L \rightarrow 0$ получается,

$$\varepsilon_{1,2}(k) = (3z/2) \sqrt{(K - K_k) \{2K - (J_k + 3K_k/2)\}},$$

то есть их спектр похож на спектр элементарных возбуждений в нематической фазе магнетика с $S=1$ [19,22]. Таким образом, ветвь $\varepsilon_{1,2}$ соответствует колебаниям эллипсоида квадрупольных моментов, что приводит к вырождению двух ветвей спектра. Таким образом, основная специфика системы со спином $S=3/2$ определяется ветвью ε_3 , которая связана с обменным интегралом L и обусловлена динамикой октупольных параметров q_3^3 . Она связана с поворотом «октупольного треугольника» вокруг оси OZ , см. выше.

На рис. 3.4. приведено поведение спектров элементарных возбуждений в нематической фазе $\varepsilon_{1,2}$, ε_3 вдали от границ устойчивости фазы, а также спектр «квадрупольных» мод вблизи перехода в ферромагнитную фазу (при $\Lambda_1 \rightarrow 0$). Видно, что моды $\varepsilon_{1,2}(k)$ при условии $\Lambda_1 \rightarrow 0$ размягчаются, и при $\Lambda_1 > 0$

определяют нестабильность нематической фазы. Однако полные условия нарушения устойчивости нематической фазы могут быть получены только из исследования «октупольной» ветви $\varepsilon_3(k)$.

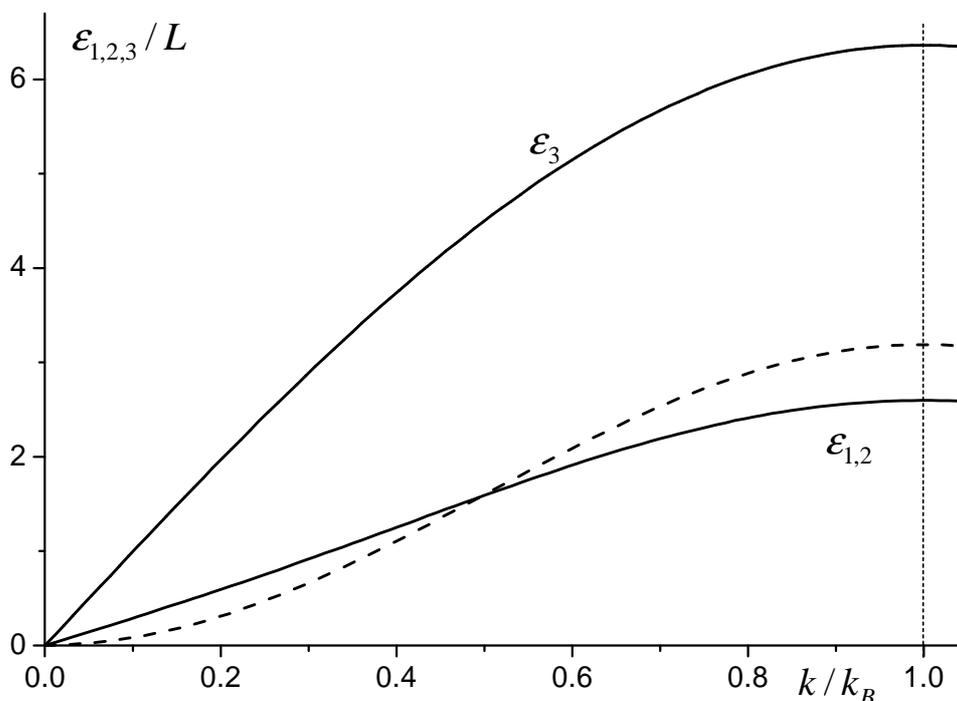


Рис.3.4. Законы дисперсии элементарных возбуждений в нематической фазе (в единицах L , напомним, что эта фаза устойчива только при $L>0$). Спектры элементарных возбуждений в центре области устойчивости нематической фазы, при условии $\Lambda_1+\Lambda_2=0$, то есть $\Lambda_1=-L$ и $\Lambda_2=L$, построены сплошными линиями. При построении функций $\varepsilon_{1,2}(k)$ для определенности выбрано $K=2L$. Штриховая линия изображает спектры мод $\varepsilon_{1,2}(k)$ в окрестности фазового перехода нематик - ферромагнетик при $\Lambda_1 \rightarrow 0$.

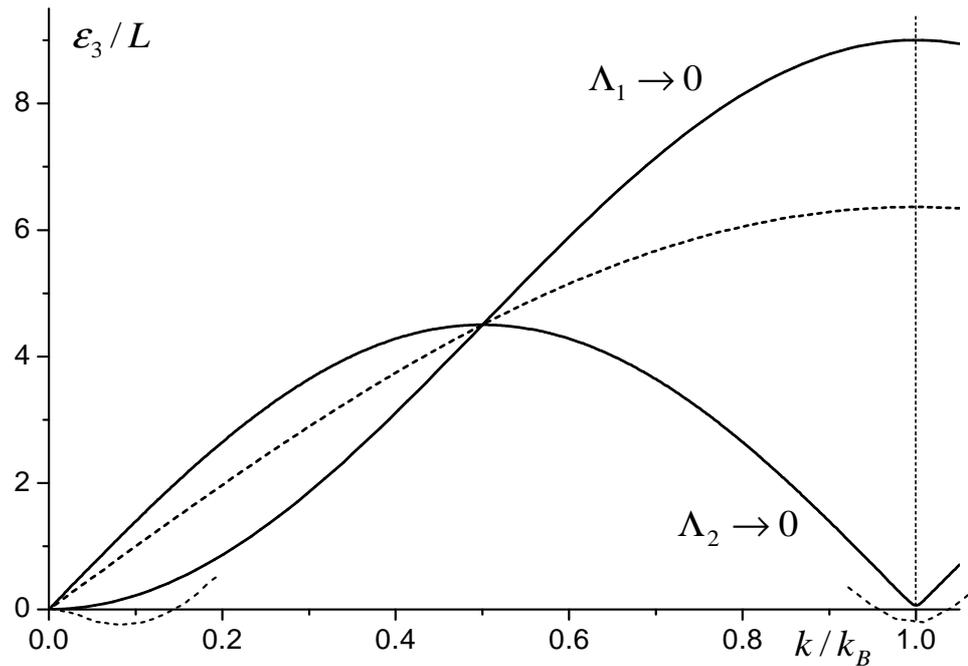


Рис.3.5. Закон дисперсии «октупольной» ветви элементарных возбуждений $\varepsilon_3(k)$ в нематической фазе в окрестности фазовых переходов в ферромагнитную фазу ($\Lambda_1 \rightarrow 0$) и антиферромагнитную фазу ($\Lambda_2 \rightarrow 0$), соответственно, в единицах L (в области устойчивости $L > 0$). Сегменты тонких штриховых линий при $k \sim 0$ и в углу зоны Бриллюэна, при $k \sim \pi/a$, представляют схематически зависимость $\varepsilon_3^2(k)$ при $\Lambda_1 > 0$ и $\Lambda_2 < 0$; отрицательные значения $\varepsilon_3^2(k)$ отвечают неустойчивости нематической фазы. Штриховая линия приведена для сравнения при тех же параметрах, что и на рис. 3.4, и определяет спектр вдали от критических линий.

Моды $\varepsilon_{1,2}(k)$ при условии $\Lambda_1 \rightarrow 0$ размягчаются, и при $\Lambda_1 > 0$ определяют нестабильность нематической фазы. Однако полные условия нарушения устойчивости нематической фазы могут быть получены только из исследования «октупольной» ветви $\varepsilon_3(k)$. Действительно, в центре зоны Бриллюэна законы дисперсии всех мод линейные, $\varepsilon_{1,2,3} \rightarrow c_{1,2,3}$ при $k=0$. Скорость октупольной моды c_3 пропорциональна $|\Lambda_1|^{1/2}$, см. рис. 3.5 (этим же свойством обладает и скорости

$c_1=c_2$, рис. 3.4). Отсюда следует необходимое условие устойчивости нематической фазы $\Lambda_1 < 0$. Кроме того, легко показать, что в угловой точке зоны Бриллюэна (при $C(\mathbf{k})=-1$)

$$\varepsilon_{3,\text{edge}} = \frac{9z}{4} \sqrt{L \left(J - \frac{K}{2} + \frac{135}{16} L \right)}, \quad (3.42)$$

то есть ветвь ε_3 устойчива при L , $\Lambda_2 > 0$ и размягчается вблизи линии перехода в антиферромагнитную фазу, $\Lambda_2=0$, см. рис. 3.5. Учитывая выписанное ранее условие, получаем, что область устойчивости нематической фазы определяется следующими неравенствами:

$$\Lambda_1 < 0, \Lambda_2 > 0 \quad (3.43)$$

что может выполняться только при $L > 0$.

3.2.3. Анализ спектров возбуждения в антиферромагнитной и антинематической фазах.

Возникает вопрос, какое упорядочение имеет место вне областей устойчивости двух описанных выше фаз. В магнетике только с гейзенберговским обменным взаимодействием в случае если константа обмена меньше нуля – т.е. $J < 0$, существует антиферромагнитный порядок, связанный с появлением двух подрешеток. Антиферромагнитное упорядочение имеет место и для негейзенберговских магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$. Для системы со спином $S=3/2$ отмечалась также возможность существования антинематического спинового состояния, которое также связано с формированием двух различных подрешеток. Следовательно, вполне ожидаемо будет, что все состояния в общей модели (3.26) будут являться простыми одноподрешеточными или двухподрешеточными. В исследуемой нами системе возможна реализация как антиферромагнитного, так и антинематического упорядочения [62,64].

Параметры порядка в антинематической фазе имеют вид:

$$\begin{aligned}\langle S_1^z \rangle &= 0, q_{2(1)}^0 = 3, q_{3(1)}^0 = 0, q_{3(1)}^3 = 3, \\ \langle S_2^z \rangle &= 0, q_{2(2)}^0 = 3, q_{3(2)}^0 = 0, q_{3(2)}^3 = -3,\end{aligned}$$

а параметры обобщенного u-v преобразования равны $\alpha_1 = \pi / 4, \alpha_2 = -\pi / 4$, для первой и второй подрешетки, соответственно. Волновые функции основного состояния первой и второй подрешеток в антинематической фазе равны, соответственно

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3/2\rangle + |-3/2\rangle), |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3/2\rangle - |-3/2\rangle).$$

При этом, естественно, квадрупольные средние для каждой подрешетки имеют такой же вид, как и в нематической фазе. Однако для первой и второй подрешеток кубические корреляторы различаются знаком

$$\langle (S_i^x \cos \chi + S_i^y \sin \chi)^3 \rangle = \pm \frac{3}{4} \cos 3\chi, \langle (S_i^z)^3 \rangle = 0,$$

где $i=1,2$ – номера подрешеток. Угол χ определяет поворот в спиновом пространстве вокруг оси OZ . Таким образом, оси третьего порядка для спиновых состояний подрешеток совпадают, а кубические корреляторы, определяющие планарную структуру, переходят друг в друга при повороте на угол $\chi = \pi/3$, что эквивалентно отражению времени.

Исследуем спектры элементарных возбуждений в антинематической фазе.

Ориентация магнитного момента первой подрешетки будет совпадать с направлением оси OZ ; магнитный момент второй подрешетки коллинеарен OZ , но противоположно направлен. Операторы второй подрешетки развернем для того, чтобы в обеих подрешетках совпали ориентации осей квантования.

Операторы второй подрешетки развернем вокруг OZ на угол $\varphi = \pi$, $U(\varphi) = \prod_n \exp(i\varphi S_n^z)$ для того, чтобы в обеих подрешетках совпали ориентации

осей квантования. Этому отвечает преобразованию операторов вида

$$S_{n_2}^x \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^x = -S_{n_2}^x, \quad S_{n_2}^y \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^y = -S_{n_2}^y, \quad S_{n_2}^z \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^z = S_{n_2}^z,$$

что соответствует спиновой структуре подрешеток антинематика.

Одноузельный гамильтониан в терминах новых операторов $\tilde{S}_{n_2}^i$ имеет вид, аналогичный (3.30), с заменой $B_3^3 \rightarrow -B_3^3$. Анализ показал, что для расчетов спектров элементарных возбуждений можно рассматривать гамильтониан в терминах как старых $S_{n_1}^i$, так и новых операторов $\tilde{S}_{n_2}^i$, используя один и тот же квазиимпульс для обоих операторов. Фактически, это означает использование схемы расширенных зон Бриллюэна. В данном случае оказывается, что это представление достаточно удобно и наглядно, поскольку подрешетки эквивалентны. В силу этого на границе «магнитной» зоны Бриллюэна не возникает особенностей, и для спектров всех мод антинематической фазы наличие «магнитной» зоны Бриллюэна вообще не проявляется, см. ниже рис. 3.7 Для задач динамики решетки такая ситуация возникает в том случае, если кристалл состоит из различных частиц, которые, однако, имеют одинаковую массу и константы взаимодействия.

Также, как и в нематической фазе, в этом состоянии происходит вырождение двух возбужденных энергетических уровней $E_{1/2} = E_{-1/2}$ и в результате этого две ветви возбуждений совпадают. В итоге спектры определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(k) &= \frac{3z}{2\sqrt{2}} \sqrt{\left[K + K_k - \frac{11}{4}(L + L_k) \right] \left[K - \frac{11}{4}L + \frac{1}{2} \left(J_k - \frac{5}{2}K_k + \frac{191}{16}L_k \right) \right]}, \\ \varepsilon_3(k) &= \frac{9z}{4} \sqrt{(L - L_k) \left(L + J_k - \frac{1}{2}K_k + \frac{119}{16}L_k \right)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Отметим, что энергия ветви $\varepsilon_3(k)$, связанная с обменным интегралом L , и определяется динамикой октупольных параметров q_3^3 (получается из формулы для нематической фазы изменением знака второй скобки под корнем). Поэтому специфическое поведение этой ветви легко увидеть из графиков для $\varepsilon_3(k)$ для нематической фазы, приведенных выше на рис. 3.5, если на них поменять местами индексы $\Lambda_1 \rightarrow 0$ и $\Lambda_2 \rightarrow 0$. Ясно, что как и во всех предыдущих

примерах, для антинематического состояния устойчивость системы определяется именно этой ветвью. Дополнительно, нестабильность антинематической фазы вблизи критической линии $\Lambda_1=0$ видна и из зависимости $\varepsilon_{1,2}(k)$, (рис. 3.6).

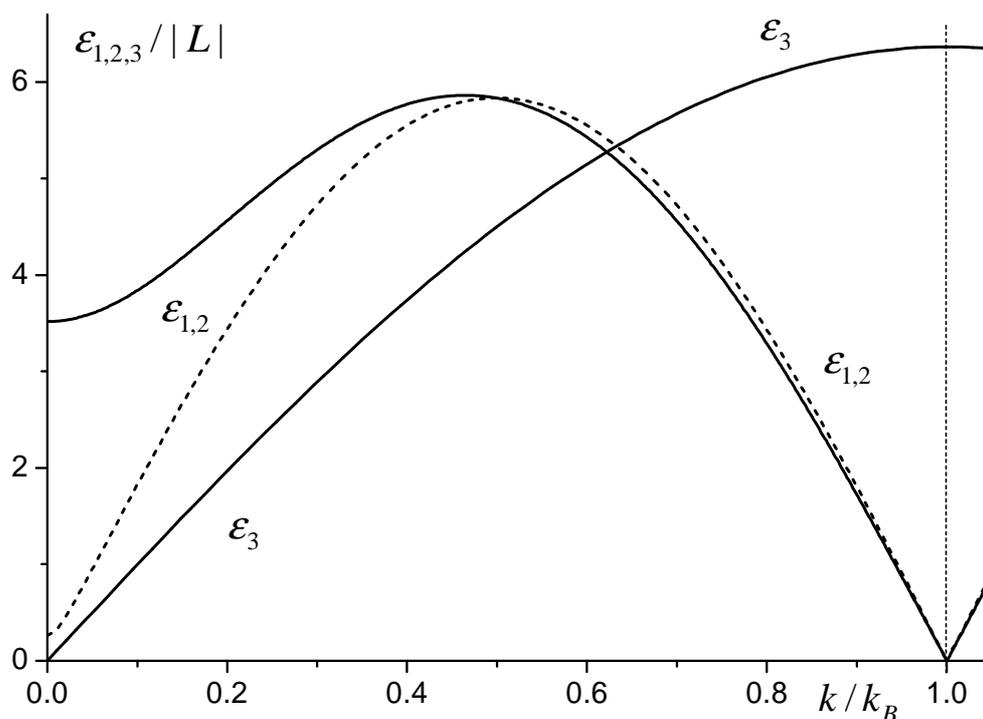


Рис. 3.6. Законы дисперсии элементарных возбуждений в антинематической фазе (в единицах $|L|$, фаза устойчива только при $L < 0$), построенные в схеме расширенных зон в центре области существования антинематической фазы, то есть при условии $\Lambda_1 + \Lambda_2 = 0$, $\Lambda_1 = -L = |L|$ и $\Lambda_2 = L = -|L|$ (сплошные линии). При построении функций $\varepsilon_{1,2}(k)$ для определенности выбрано $K=0$. Штриховая линия представляет закон дисперсии мод с $\varepsilon_{1,2}(k)$ вблизи критической линии $\Lambda_1=0$.

Анализ поведения спектров позволяет определить область устойчивости антинематической фазы в следующем виде

$$\Lambda_1 > 0, \Lambda_2 < 0,$$

что может выполняться только при $L < 0$ (напомним, что нематическая фаза может существовать только при $L > 0$). В модели с $L=0$ обе нематические фазы

отсутствуют (точнее, существуют только на линии $\Lambda_1=\Lambda_2=0$). Если не учитывать этого высшего инварианта, то $\Lambda_1=\Lambda_2$ и фазы с тензорными параметрами порядка не реализуются.

Заметим, что использование схемы расширенных зон проявляется в том, что моды $\varepsilon_{1,2}(k)$ и $\varepsilon_3(k)$ имеют бесщелевое поведение в разных точках зоны Бриллюэна, (рис. 3.6).

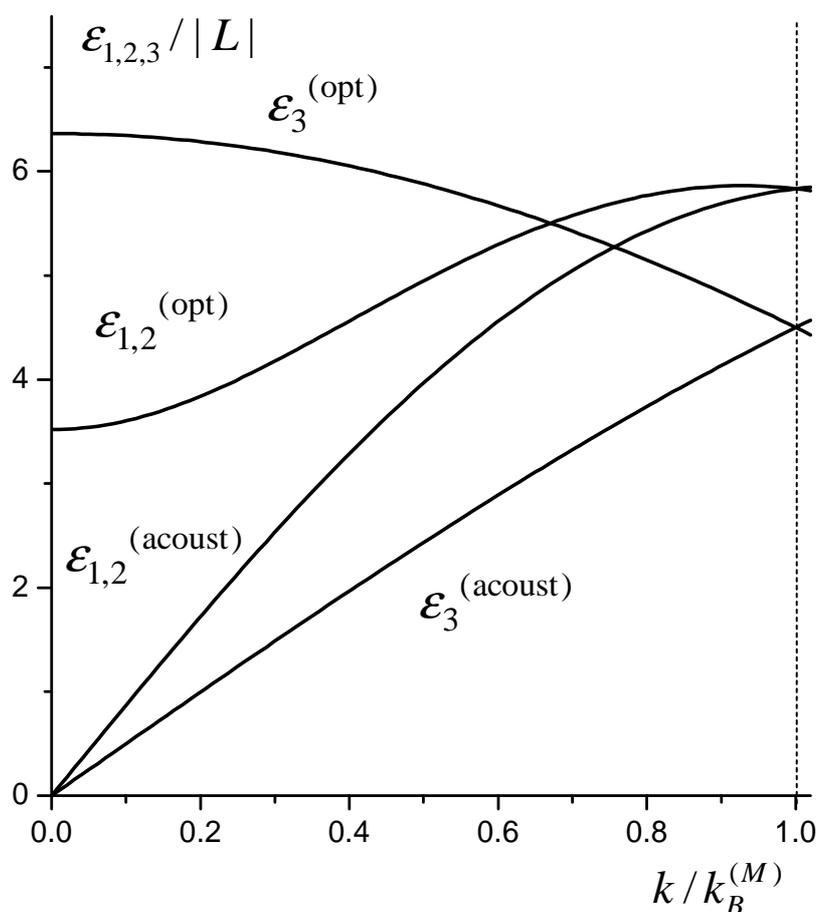


Рис.3.7. Те же законы дисперсии в центре области существования антинематической фазы, что и на рис.3.6, но построенные в схеме приведенных зон, $k_B^{(M)}$ - край магнитной зоны Бриллюэна, в одномерном случае $k_B^{(M)} = \pi / 2a$. Для наглядности использованы обозначения $\varepsilon_{1,2}^{(acoust)}$ и $\varepsilon_{1,2}^{(opt)}$, $\varepsilon_3^{(acoust)}$ и $\varepsilon_3^{(opt)}$.

Ранее такое поведение было установлено для спектров элементарных возбуждений в фазе ортогонального нематика в системе со спином $S=1$ [22]. Понятно, при переходе к естественной для двухподрешеточной системе схеме приведенных зон стандартный вид спектра восстанавливается, (рис. 3.7).

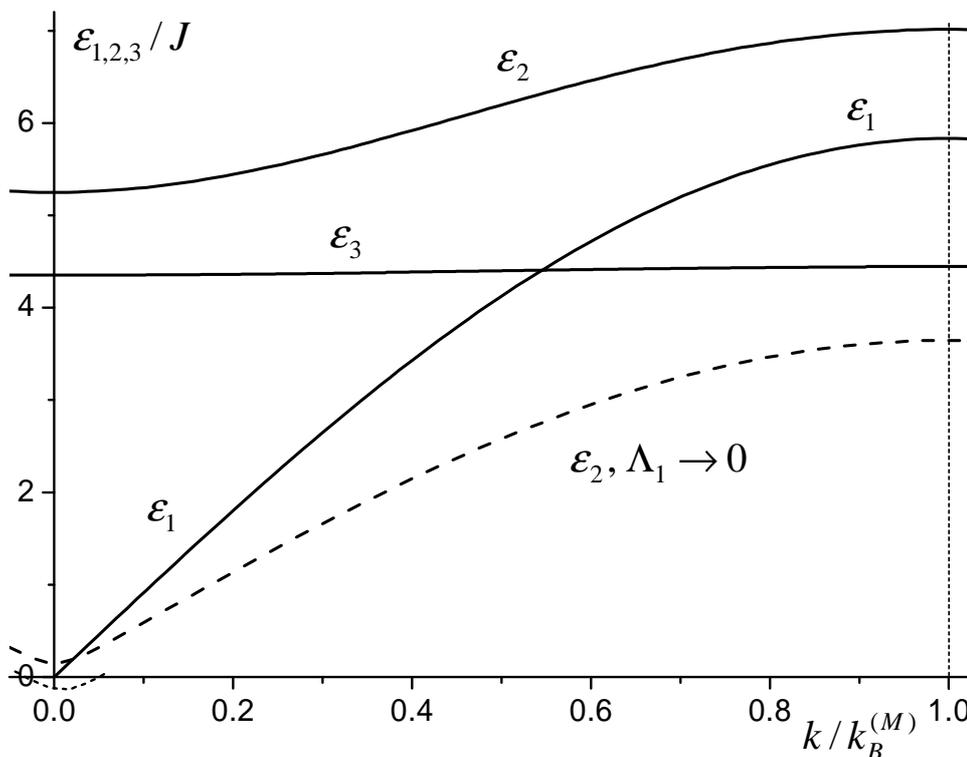


Рис.3.8. Законы дисперсии элементарных возбуждений в антиферромагнитной фазе в схеме приведенных зон, $k_B^{(M)}$. Жирные линии – спектры элементарных возбуждений в области устойчивости этой фазы. (выбраны значения $K=J>0$ и $L=-J/5$). Штриховая линия изображают спектр квадрупольной ветви $\varepsilon_2(k)$ в окрестности переходов антиферромагнетик - антинематик (при $\Lambda_1 \rightarrow 0$, $\Lambda_1 < 0$). Здесь и на следующем рисунке сегмент тонкой штриховой линии в центре зоны Бриллюэна представляют схематически эту зависимость в области неустойчивости фазы (при $\Lambda_1 \rightarrow 0$, $\Lambda_1 > 0$).

Переход к редуцированной “магнитной” зоне Бриллюэна, построенной для одной подрешетки, что представляет собой простую геометрическую задачу, в результате число ветвей удваивается. Как следствие, для обоих типов

коллективных мод восстанавливается голдстоуновское поведение при восстанавливается, и для обеих кривых появляются аналоги “акустических” и “оптических” коллективных мод. Здесь возникает важный вопрос, а именно: следует ли в данном случае переходить к редуцированной “магнитной” зоне Бриллюэна. Иными словами, имеет ли смысл рассматривать колебаний в редуцированной зоне Бриллюэна и говорить о существовании акустических и оптических ветвей, и связанных с последними резонансов при малых волновых векторах.

На языке обычной динамики решетки такой вопрос возникает для кристалла, состоящего из частиц, имеющих одинаковую массу и константы взаимодействия, но физически отличающихся значением какого-то параметра. Ответ на этот вопрос состоит в следующем. Понятно, что если частицы в кристалле отличаются каким-либо физическим свойством, то существует некоторое поле, которое по-разному действует на указанные частицы двух сортов (если такого поля не существует в принципе, то говорить о различии частиц бессмысленно). При воздействии на эту систему переменного поля, однородного в пространстве (волны с нулевым волновым вектором и конечной частотой), приведет к разному действию на частицы из различных подрешеток, и в результате возможно линейное резонансное возбуждение нормальной моды, в которой указанные частицы двух сортов колеблются в противофазе.

Такое поведение хорошо известно для оптических фононов и некоторых типов коллективных мод в магнитных сверхрешетках [251], оно имеет место и в случае антинематика. Различия магнитных состояний подрешеток в антинематике не настолько существенно, чтобы привести к возникновению щели на границе зоны Бриллюэна основной решетки. Однако предложенные в работе [62] оптические методы анализа нематических фаз приводят к различным эффектам для разных подрешеток. Тогда при однородном в пространстве воздействии на систему будут возбуждаться противофазные колебания, отвечающие конечной частоте при $k=0$ (рис. 3.5).

Перейдем теперь к анализу антиферромагнитного состояния, для которого спины в двух подрешетках антипараллельны и коллинеарны оси z . Используя (3.33), легко получить, что в антиферромагнитной фазе параметры порядка подрешеток имеют вид

$$\begin{aligned}\langle S_1^z \rangle &= \frac{3}{2}, \quad q_{2(1)}^0 = 3, \quad q_{3(1)}^0 = \frac{3}{2}, \quad q_{3(1)}^3 = 0, \\ \langle S_2^z \rangle &= -\frac{3}{2}, \quad q_{2(2)}^0 = 3, \quad q_{3(2)}^0 = -\frac{3}{2}, \quad q_{3(2)}^3 = 0,\end{aligned}$$

а параметры обобщенного u-v преобразования для первой и второй подрешетки равны, соответственно, $\alpha_1=0$ и $\alpha_2=\pi/2$. Волновые функции основного состояния подрешеток в этом состоянии имеют вид: $|\psi_1\rangle = \left| \frac{3}{2} \right\rangle$ и $|\psi_2\rangle = \left| -\frac{3}{2} \right\rangle$, соответственно.

Так же как и для случая антинематического состояния, удобно совершить поворот $U(\varphi) = \prod_n \exp(i\varphi S_n^x)$ на угол $\varphi=\pi$ в спиновом пространстве одной из подрешеток (для определенности - второй). Тогда

$$S_{n_2}^x \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^x = S_{n_2}^x, \quad S_{n_2}^y \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^y = -S_{n_2}^y, \quad S_{n_2}^z \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^z = -S_{n_2}^z,$$

и основному состоянию отвечает «однородное» распределение средних значений операторов $\tilde{S}_{n_2}^i$. Одноузельный гамильтониан получается из формулы (5) заменой

$$\bar{H} \rightarrow -\bar{H}, \quad B_3^0 \rightarrow -B_3^0$$

для спинов второй подрешетки. Однако модификация гамильтониана задачи в терминах новых операторов $\tilde{S}_{n_2}^i$ более существенная, чем для рассмотренного выше случая антинематика. В силу различия знаков эффективного поля \bar{H} для двух подрешеток их динамика не эквивалентна (такое свойство имеет места для «стандартных» антиферромагнетиков), и представление приведенных зон возникает естественным образом. Простой, но громоздкий расчет спектров приводит к выражениям

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1(k) &= \frac{3z}{4} \sqrt{\left(\frac{191}{16}L + J - \frac{5}{2}K\right)^2 - \left(\frac{191}{16}L_k + J_k - \frac{5}{2}K_k\right)^2}, \\
\varepsilon_2(k) &= \frac{3z}{2} \sqrt{\left(\frac{147}{16}L + J - \frac{3}{2}K\right)^2 - \left(\frac{11}{4}L_k - K_k\right)^2}, \\
\varepsilon_3(k) &= \frac{9z}{4} \sqrt{\left(\frac{119}{16}L + J - \frac{K}{2}\right)^2 - (L_k)^2}.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Отметим, что во все эти выражения входят только квадраты фурье-образов обменных констант, что и формально и определяет меньший период в зависимостях спектров от значения волнового вектора k . Законы дисперсии элементарных возбуждений в антиферромагнитной фазе представлены на рис.3.8. Жирные линии $\varepsilon_{1,2,3}$ описывают спектры в «центре» области стабильности фазы; штриховая линия описывают размягчение моды $\varepsilon_2(k)$ в окрестности точки фазового перехода в нематическую фазу ($\Lambda_1 \rightarrow 0$).

В использованной схеме приведенных зон видимое число кривых, определяющих ветви спектра, равно трем, как и для одной подрешетки. Это связано с тем обстоятельством, что каждая кривая соответствует двум вырожденным ветвям спиновых возбуждений. В целом, эта картина типична для магнонов в стандартном гейзенберговском антиферромагнетике без внешнего поля. Заметим, что стандартная магنونная ветвь с голдстоуновским поведением при $k \rightarrow 0$ не показывает никаких нестабильностей, что отражает тот факт, что антиферромагнитная фаза, как и ферромагнитная, теряет стабильность по «мультипольному» сценарию. Что касается ветви $\varepsilon_2(k)$, то, как и в случае ферромагнетика, она связана с колебаниями квадрупольного эллипсоида. Именно эта ветвь размягчается в окрестности фазового перехода в антинематическую фазу.

Ветвь возбуждений с $\varepsilon_3(k)$ описывает связанные колебания октупольных параметров q_3^3 для спинов подрешеток, равновесное значение которых в антиферромагнитной фазе, как и в ферромагнитной фазе, равно нулю. Ее

дисперсия, как для других фаз, см. выше, определяется только величиной L .

Отметим, что ее дисперсия при достаточно малых $L \ll J, K$ и далеко от линий потери стабильности весьма слабая, так как она квадратична по малым параметрам L/J и L/K . Однако около линий неустойчивости фазы линейная зависимость от L восстанавливается, причем графики спектра $\varepsilon_3(k)$ совпадают (в схеме приведенных зон) при одинаковых значениях $|\Lambda_1|$ и $|\Lambda_2|$, (рис. 3.9). Эта ветвь определяет неустойчивость антиферромагнитной фазы и при $\Lambda_1 > 0$ и $\Lambda_2 > 0$.

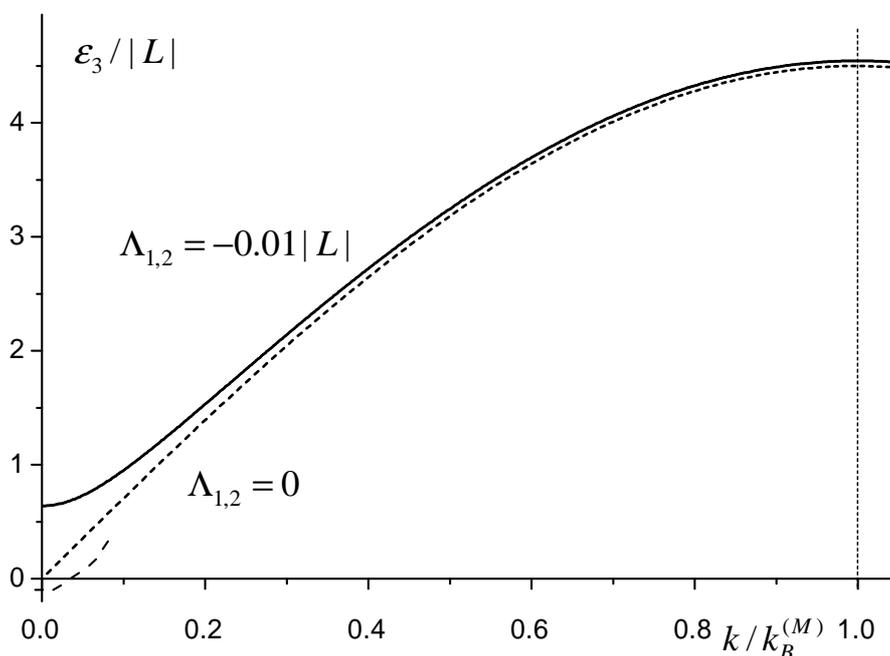


Рис.3.9. Закон дисперсии ветви $\varepsilon_3(k)$ (в единицах $|L|$) в антиферромагнитной фазе в окрестности фазовых переходов (сплошные линии) и на самих линиях, при $\Lambda_1=0$ или $\Lambda_2=0$ (штриховые линии).

Таким образом, анализ спектров подтверждает, что нарушение устойчивости антиферромагнитной фазы связано с центром приведенной (магнитной) зоны Бриллюэна $k=0$. Условие устойчивости антиферромагнитной фазы можно записать в виде двух неравенств:

$$\Lambda_1 < 0, \quad \Lambda_2 < 0 \quad (3.46)$$

Проведенные исследования изотропного магнетика с $S=3/2$ позволяют построить фазовую диаграмму. Для адекватного понимания результатов введем две независимые переменные $\kappa=K/J$, $\lambda=L/J$. Фазовая диаграмма рассмотренного магнетика в переменных (κ, λ) и при $J>0$ изображена на рисунке приведенном ниже (рис.3.10.).

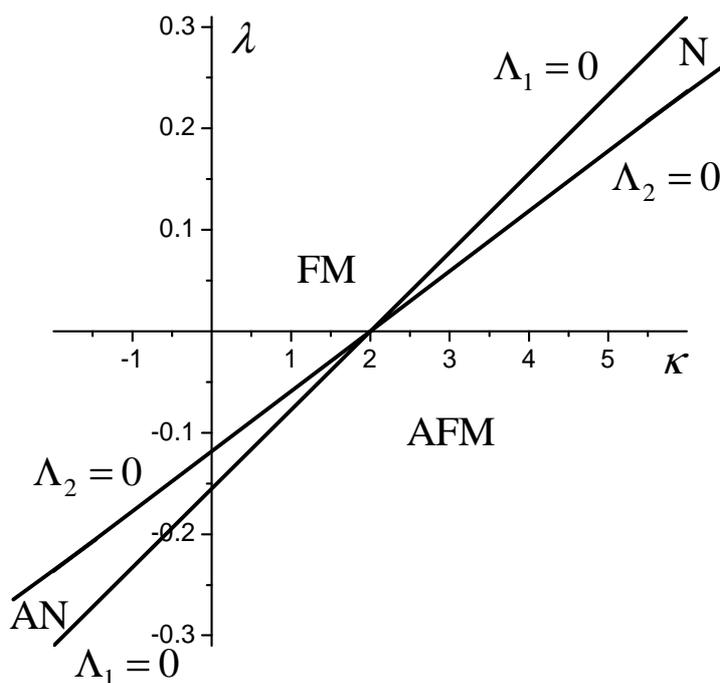


Рис.3.10. Фазовая диаграмма изотропного негеизенберговского магнетика со спином магнитного иона $S=3/2$ в переменных $\kappa=K/J$, $\lambda=L/J$ при $J>0$. Области существования ферромагнитной, антиферромагнитной, нематической и антинематической фаз обозначены FM, AFM, N и AN, соответственно.

Переходы между всеми фазами происходят на различных лучах или линии $\Lambda_1=0$ или линии $\Lambda_2=0$. Ферромагнитная фаза устойчива в области $\Lambda_1>0$, $\Lambda_2>0$, а антиферромагнитная фаза при $\Lambda_1<0$, $\Lambda_2<0$. На рис. 3.10 это области, лежащие выше или ниже обеих линий $\Lambda_1=0$ или $\Lambda_2=0$. Нематической фаза существует в интервале параметров $\Lambda_1<0$, $\Lambda_2>0$ при $L>0$, а антинематическая фаза устойчива в области $\Lambda_1>0$, $\Lambda_2<0$ при $L<0$. Все фазовые переходы по материальным параметрам являются вырожденными переходами первого рода,

то есть линии потери устойчивости мод совпадают с линиями фазовых переходов. Такое же свойство имеет место и для негейзенберговского магнетика со спином $S=1$. Как и в магнетике со спином $S=1$, в исследованном магнетике со спином $S=3/2$ линии фазовых переходов характеризуются повышенной симметрией.

В исследованном магнетике фазы характеризуются соответствующими каждой фазе параметрами порядка: квадрупольными и октупольными. Для магнетика $S=3/2$ квадрупольные параметры являются не главными для определения симметрии фазовых состояний а в фазах с дипольным упорядочением октупольный параметр порядка равен нулю. Однако эти переменные оказывают существенное влияние на динамические (спектральные) свойства магнетика с $S=3/2$ во всех фазах, магнитных и нематических. В результате, во всех фазах присутствуют три ветви элементарных возбуждений. Одна из этих ветвей, октупольная ветвь, энергия которой обозначена выше как $\varepsilon_3(k)$, связана прежде всего с колебаниями октупольного параметра порядка. Эта ветвь описывает положение всех линий неустойчивости фаз, хотя на некоторых из них теряет устойчивость также и квадрупольная ветвь с $\varepsilon_2(k)$. Интересно отметить, что в точке сосуществования четырех фаз $2J=K$, $L=0$ энергия $\varepsilon_3(k)=0$, однако остальные моды имеют конечную жесткость. Спектры возмущений демонстрируют сильное вырождение, для всех фаз $\varepsilon_1(k)=\varepsilon_2(k)$ и имеет место универсальная зависимость от квазиимпульса: в нематической и ферромагнитной фазах $\varepsilon_{1,2}(k) \propto (J - J_k) = J[1 - C(\mathbf{k})]$, а в антинематической и антиферромагнитной фазах $\varepsilon_{1,2}(k) \propto \sqrt{J^2 - J_k^2} = J\sqrt{1 - C^2(\mathbf{k})}$.

Экспериментальная реализация рассмотренных здесь эффектов представляется более сложной, чем для материалов со спином $S=1$, см. обзоры [14,15]. Нам не известны стандартные кристаллические магнитные материалы, для которых установлено достаточно большое значение бикубического обмена, более того, не известны даже работы, где этот параметр измерялся. С другой стороны, в последние годы находят все больше материалов с так называемым

«скрытым порядком», в которых отсутствует магнитный порядок, но свойства не поддаются объяснению также и в рамках простых SN-фаз (в качестве примера приведем URu_2Si_2 , свойства которого остаются неясными уже почти 10 лет) [252,253]. Однако модель (3.26) применима для описания чисто спиновых состояний ультрахолодных ферми-газов со спином $S=3/2$ (^{132}Cs , ^9Be , ^{135}Ba) в оптических ловушках [55-58]. Здесь важно отметить, что стандартной ситуацией для ультрахолодных газов являются немалые значения высших обменных интегралов. В частности, при расчете обменных интегралов для газа со спином $S=3/2$ простейшее приближение приводит к соотношению, близкому к условию $\Lambda_1=0$ [55]. Таким образом, хотя в целом относительная часть областей на фазовой диаграмме, занятых нематическими фазами, невелика по сравнению со случаем системы со спином $S=1$, эти состояния могут быть существенными для анализа ультрахолодных газов атомов со спином $S=3/2$.

3.3. Двумерные солитоны в нематической фазе изотропных магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$.

3.3.1. Модель и выбор переменных.

Адекватный подход к описанию таких негеизенберговских спиновых систем базируется на использовании топологических свойств полного пространства состояний для спина S , которое является комплексным проективным пространством CP_{2S} [14]. Это позволяет построить лагранжиан системы, описывающий энергию системы и спиновую динамику с учетом всех нетривиальных мультипольных степеней свободы. Последовательный учет всех мультипольных степеней свободы представляет собой очень громоздкую задачу, сложность которой растет с ростом величины спина

Теоретико-полевой подход при полном учете состояний спина базируется на использовании когерентных состояний группы Ли $SU(2S+1)$ [29,30]. При нулевой температуре $T=0$ состояния спина определяются чистыми квантовыми состояниями оператора спина \mathbf{S} . Вектор состояния для спина на каждом узле \mathbf{l} , $|\Psi\rangle$ определяется значениями $4S$ параметров $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{4S}$, индекс узла далее опускается. Энергия системы в приближении среднего поля $W\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{4S}\}$ совпадает со средним значением гамильтониана системы, вычисленным на состояниях $|\Psi\rangle$, $W\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{4S}\} = \langle \Psi | \mathbf{H} | \Psi \rangle$, динамика переменных $W\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{4S}\}$ определяется лагранжианом [14]

$$L = \langle \Psi | (-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) | \Psi \rangle - W\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{4S}\} . \quad (3.47)$$

На основе линеаризованной версии этого лагранжиана легко получить спектр линейных возбуждений. Этот подход имеет то преимущество, что он допускает переход к нелинейному случаю и исследование солитонов. Проблема применения этого подхода в том, что увеличение величины спина значительно усложняет расчеты. Однако в нашем случае полезно провести упрощенный анализ, выделив только одну наиболее важную степень свободы.

Начнем с более простого случая «минимального» негейзенберговского изотропного магнетика со спином $S=1$, и обсудим те его свойства, которые допускают перенос на более сложные системы. Гамильтониан этой модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{a}} \left[J (\mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}}) + K (\mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}})^2 \right]. \quad (3.48)$$

Здесь $\mathbf{S}_{\mathbf{l}}$ – оператор спина в узле \mathbf{l} , константы J и K определяют билинейное (гейзенберговское) и биквадратичное по спинам обменное взаимодействие пар ближайших соседей, набор векторов \mathbf{a} определяет положение ближайших соседей, множитель $1/2$ учитывает, что суммирование в (2) производится так, что каждая пара ближайших соседей учитывается один раз. Будем рассматривать случай квадратной решетки, то есть $\mathbf{l} = a(l_1 \mathbf{e}_x + l_2 \mathbf{e}_y)$, l_1, l_2 – целые числа, a – постоянная решетки.

Модель (3.48) обладает указанными выше физическими свойствами, отсутствующими для гейзенберговских магнетиков. В частности, в этой системе возможно нематическое состояние, которое устойчиво при выполнении условия $K > J > 0$ [31]. Основное состояние может быть описано заданием единичного вектора-директора \mathbf{n} , такого, что на каждом узле магнетика $\langle (\mathbf{S}\mathbf{n})^2 \rangle = 0$, а для двух других ортогональных направлений, \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , $\langle (\mathbf{S}\mathbf{e}_1)^2 \rangle = \langle (\mathbf{S}\mathbf{e}_2)^2 \rangle = 1$ [31]. Для описания низкочастотной спиновой динамики было предложено использовать нелинейное уравнение сигма-модели для единичного вектора-директора \mathbf{n} [31]. Однако изотропная сигма-модель не достаточна для анализа топологических дефектов типа вихрей, дисклинаций или ежей, и в данной работе спиновая динамика будет рассмотрена вне рамок этого приближения.

Состояние спинового нематика с $S=1$, в котором среднее значение спина равно нулю, $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, инвариантно относительно обращения времени, но для него имеет место спонтанное нарушение вращательной симметрии, связанное со спиновыми квадрупольными средними S_{ik} , $S_{ik} = \langle S_i S_k + S_k S_i \rangle / 2$, $i, k = x, y, z$.

Параметр $S_{ik}, -\delta_{ik}S(S+1)/3$ характеризует состояние спинового нематика, который по симметричным свойствам схож с параметром порядка, характеризующего нематическое состояние в жидких кристаллах [36].

Введем стандартные состояния с заданной проекцией спина на ось квантования (ось OZ), $|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$. Обсудим выбор вектора состояния для описания нематика, в основном состоянии которого $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$. Выбор $|\psi_{\text{nem}}\rangle = Z_+|+1\rangle + Z_-|-1\rangle$ гарантирует равенство нулю поперечных компонент спина, $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ при любом соотношении комплексных чисел Z_+ и Z_- , связанных условием нормировки $|Z_+|^2 + |Z_-|^2 = 1$. При $|Z_+| = |Z_-|$ получаем состояние $|\psi_{\text{nem}}^{(\text{ground})}\rangle$, для которого $\langle S_z \rangle = 0$ и которое определяет нематическое состояние. В динамике условие $|Z_+| = |Z_-|$ нарушается, и появляются значения с $\langle S_z \rangle \neq 0$. Данный класс состояний годится для описания специфической динамики спинового нематика, для которого имеет место только изменение вектора намагниченности по длине, без его поворота, а также колебания квадрупольных (в общем случае - мультипольных) переменных.

Рассмотрим квадрупольные средние S_{ik} . В общем виде в качестве геометрического образа этих средних можно выбрать квадрупольный эллипсоид, то есть эллипсоид с направлениями главных осей $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$, и \mathbf{e}_3 , полуоси которого равны $\langle S_1^2 \rangle, \langle S_2^2 \rangle, \langle S_3^2 \rangle$, $i, k=1, 2, 3$, а величины $\langle S_i S_k + S_k S_i \rangle = 0$ при $i \neq k$. Легко видеть, что условие нормировки для $|\psi_{\text{nem}}\rangle$ дает $\langle S_z^2 \rangle = 1$, то есть $\langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle = 1$, в силу чего получается $\langle S_x^2 \rangle \leq \langle S_z^2 \rangle = 1$, $\langle S_y^2 \rangle \leq \langle S_z^2 \rangle = 1$. Поскольку изменение фазы вектора состояния не меняет значения наблюдаемых величин, конкретизируем вид вектора состояния следующим образом

$$|\psi_{\text{nem}}\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} |1\rangle + e^{i\beta} \sin \frac{\alpha}{2} |-1\rangle, \quad (3.49)$$

удобство использования переменной $\alpha/2$, а не α , будет видно ниже. Легко видеть, что для этого состояния $\langle S_x S_z + S_z S_x \rangle = 0$, $\langle S_y S_z + S_z S_y \rangle = 0$, но отличны от нуля следующие квадрупольные средние

$$\begin{aligned} \langle S_x^2 \rangle &= \frac{1}{2}(1 + \sin \alpha \cos \beta), \quad \langle S_y^2 \rangle = \frac{1}{2}(1 - \sin \alpha \cos \beta), \\ \langle S_x S_y + S_y S_x \rangle &= \sin \alpha \sin \beta. \end{aligned}$$

в силу чего две главные оси квадрупольного эллипсоида лежат в плоскости XOY , а одна параллельна оси квантования OZ . Нематическому состоянию соответствует $\alpha = \pi/2$, и при $\alpha \approx \pi/2$ можно ввести вектор-директор \mathbf{n} , с компонентами $n_x = \cos \beta$ и $n_y = \sin \beta$, который лежит в плоскости XOY .

Совместно с величиной $\langle S_z \rangle = \cos \alpha$, квадрупольные средние определяют продольную спиновую динамику. Величину $\langle S_z \rangle$ и нетривиальные квадрупольные средние удобно представить в виде

$$\sigma_3 = \langle S_z \rangle, \quad \sigma_1 = \langle S_x^2 - S_y^2 \rangle = \sin \alpha \cos \beta, \quad \sigma_2 = \langle S_x S_y + S_y S_x \rangle = \sin \alpha \sin \beta. \quad (3.50)$$

Формально величины σ_i , $i=1,2,3$, $\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 = 1$, можно рассматривать как компоненты единичного трехмерного вектора. Для этого вектора величины α , β имеют смысл стандартных угловых переменных, что и определяет удобство записи вектора состояния в виде (3.49) или (3.52). Набор переменных σ_i представляет часть восьмимерного вектора n_μ , $\mu=1,2,..,8$, ассоциированного с матрицами Гелл-Мана, который естественным образом возникает при описании динамики этой системы в общем случае [46]. Однако, необходимо отметить, что величины σ_i и n_μ имеют достаточно сложные трансформационные свойства, в частности, для них различные компоненты по-разному трансформируются при отражении времени. Не просты также и преобразования при поворотах, см. ниже общее обсуждение для обоих случаев, $S=1$ и $S=3/2$. Тем не менее, такая формальная аналогия окажется полезной при исследовании как статических, так и динамических свойств спиновых нематиков.

Перейдем теперь к анализу следующего примера, магнетика со спином магнитного иона $S=3/2$. В общем случае гамильтониан системы со спином $3/2$ и изотропным обменным взаимодействием между ближайшими соседями имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{a}} \left[J \mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}} + K (\mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}})^2 + L (\mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}})^3 \right], \quad (3.51)$$

где $\mathbf{S}_{\mathbf{l}}$ – спиновый оператор $S=3/2$ в узле \mathbf{l} . Дополнительно к гамильтониану магнетика со спином $S=1$ (3.48), в данном случае присутствует бикубическое по спинам обменное взаимодействие, определяющееся обменным интегралом L . Специфика динамики и статики этих материалов обусловлена нетривиальными октупольными средними. Кроме стандартных магнитных фаз, упорядочение которых характеризуется отличным от нуля значением среднего спина (ферро- и антиферромагнитная фазы), в магнетике со спином магнитного иона $S=3/2$ учетом всех возможных спиновых инвариантов реализуются упорядочения, характеризуемые высшими мультипольными средними – нематическая и антинематическая фазы [22,54,62,67]. В формировании свойств тензорных фаз определяющая роль принадлежит кубическим средним по операторам спина, т.е. это средние от операторов $\langle (S^{\pm})^3 \rangle$.

Октупольный параметр порядка возможен благодаря учету обменного взаимодействия пропорционального $(\mathbf{S}_{\mathbf{l}} \mathbf{S}_{\mathbf{l}+\mathbf{a}})^3$.

Как и выше для случая $S=1$, выберем одноузельную волновую функцию так, чтобы она соответствовала только продольным колебаниям среднего значения спина и октупольных средних, то есть запишем:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} \left| \frac{3}{2} \right\rangle + e^{i\beta} \sin \frac{\alpha}{2} \left| -\frac{3}{2} \right\rangle. \quad (3.52)$$

Для этого состояния $\langle S_z \rangle = 3/2 \cos \alpha$. Здесь используются те же, что выше для нематика со спином $S=1$, обозначения для «угловых» переменных α, β . Это не может привести к недоразумениям: как будет показано ниже, динамика переменных α, β универсальна для нематиков со спином $S=3/2$ и $S=3$. Легко

также найти нетривиальные значения октупольных переменных; запишем их в виде

$$\begin{aligned}\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle &= 4\sqrt{3} \sin \alpha \cos \beta = 4\sqrt{3} \sigma_1, \\ \langle (S^+)^3 \rangle - \langle (S^-)^3 \rangle &= i4\sqrt{3} \sin \alpha \sin \beta = i4\sqrt{3} \sigma_2\end{aligned}\quad (3.53)$$

Обозначив $\langle S_z \rangle = (3/2)\sigma_3$, можно снова ввести три величины $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, связанные соотношением $\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 = 1$ и формально рассматривать их как единичный вектор. Естественно, как и для случая $S=1$, это можно делать с некоторыми оговорками. Трансформационные свойства величин σ_i иные, чем для реальных векторных величин, скажем, намагниченности. Более того, некоторые физические свойства этих величин различаются для случаев $S=3/2$ и $S=3$. В частности, для нематика с $S=3/2$ все три величины σ_i меняют знак при отражении времени. Параметры σ_1 и σ_2 аналогичны введенным выше для нематика с $S=3/2$ компонентами вектора «псевдоспина» σ [62,64]. В случае $S=1$ они задают вектор-директор \mathbf{n} . Однако для спиновой динамики нематических фаз указанные различия не играют роли. Динамика переменных σ_i (или α, β) универсальна, и анализ структуры солитонов проводится одинаково для нематиков со спином $S=3/2$ и $S=3$. В результате, для этих двух типов нематиков будет отличаться только физическая интерпретация результатов, но не запись решения через σ_i (или α, β).

Легко показать, что обе физические системы, нематик со спином $S=3/2$ и $S=1$, описываются лагранжианом с одинаковой структурой динамической части, его можно записать в виде

$$L = \frac{\hbar}{2} \sum_1 \frac{\partial \beta_1}{\partial t} (1 - \cos \alpha_1) - W\{\alpha, \beta\}, \quad (3.54)$$

где $W\{\alpha, \beta\}$ – энергия системы, которая включает сумму энергий взаимодействия пар ближайших спинов и зависит от переменных α_i и β_i для всех спинов.

Кинетическая часть лагранжиана при записи через величины σ_i принимает вид, известный для ферромагнетика и включающий вектор-

потенциал монополя Дирака с направлением сингулярности (струны Дирака) в направлении отрицательной полуоси оси 3, то есть

$$\frac{\hbar}{2} \frac{\partial \beta}{\partial t} (1 - \cos \alpha) \rightarrow \frac{\hbar}{2(1 + \sigma_3)} \left(\sigma_1 \frac{\partial \sigma_2}{\partial t} - \sigma_2 \frac{\partial \sigma_1}{\partial t} \right) \quad (3.55)$$

Для пары спинов в узлах a и b в приближении среднего поля энергию взаимодействия можно записать в виде суммы дипольного вклада $-\tilde{J} \langle \mathbf{S}_a \rangle \langle \mathbf{S}_b \rangle \propto -\tilde{J} \sigma_{3,a} \sigma_{3,b}$ и мультипольного вклада $-\bar{J} (\sigma_{1,a} \sigma_{1,b} + \sigma_{2,a} \sigma_{2,b})$, где \bar{J} и \tilde{J} - комбинации обменных интегралов в гамильтонианах (3.48) или (3.51). Равенство множителей при $\sigma_{1,a} \sigma_{1,b}$ и $\sigma_{2,a} \sigma_{2,b}$ обеспечивается вращательной инвариантностью системы. Однако величины \bar{J} и \tilde{J} могут быть, вообще говоря, различными.

Легко видеть, что нематическая фаза с одной подрешеткой, в основном состоянии которой $\sigma_{i,a} \sigma_{i,b}$ и $\sigma_3=0$, устойчива при $\bar{J} > 0$ и $-\bar{J} \leq \tilde{J} \leq \bar{J}$. Равенству $\bar{J} = \tilde{J}$ соответствует особая точка системы с повышенной симметрией, формальной вращательной инвариантностью в пространстве σ_i . Например, для магнетика со спином $S=1$ значения $\tilde{J}=J-K/2$ и $\bar{J}=K/2$, и условие $\bar{J} = \tilde{J}$ соответствует $SU(3)$ критической точке $J=K$ [19,31]. Для магнетика со спином $S=3/2$ простой, но громоздкий расчет дает

$$\tilde{J} = \frac{9}{8} \left(J - \frac{K}{2} + \frac{119}{16} L \right), \quad \bar{J} = \frac{9}{8} L, \quad (3.56)$$

так что условия $\tilde{J} \leq \bar{J}$ и $-\bar{J} \leq \tilde{J}$ определяют границы устойчивости нематической фазы, $\Lambda_1 = J - K/2 + 103L/16 \leq 0$ и $\Lambda_2 = J - K/2 + 135L/16 \geq 0$, [62]. При $\Lambda_1 \rightarrow 0$ или $\Lambda_2 \rightarrow 0$ система переходит в ферромагнитную или антиферромагнитную фазу, соответственно [62,64].

Полную энергию системы удобно представить в универсальном виде

$$W\{\alpha, \gamma\} = -\frac{1}{2} \bar{J} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{a}} \left(\sigma_{1,\mathbf{l}} \sigma_{1,\mathbf{l}+\mathbf{a}} + \sigma_{2,\mathbf{l}} \sigma_{2,\mathbf{l}+\mathbf{a}} + \kappa \sigma_{3,\mathbf{l}} \sigma_{3,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \right), \quad (3.57)$$

где величина $\kappa = \tilde{J} / \bar{J}$. Гамильтониан ферромагнетика в таком виде во многих работах использовался при анализе магнитных вихрей в двумерном

анизотропном гейзенберговском ферромагнетике [254,255] или антиферромагнетике [256] с анизотропией типа легкая плоскость. При применении (3.57) к ферромагнетикам величины σ_i имели смысл компонент классических спинов и рассматривался только случай $\kappa > 0$. В угловых переменных

$$\sigma_{1,\mathbf{l}}\sigma_{1,\mathbf{l}+\mathbf{a}} + \sigma_{2,\mathbf{l}}\sigma_{2,\mathbf{l}+\mathbf{a}} = \sin \alpha_1 \sin \alpha_{1+\mathbf{a}} \cos(\gamma_1 - \gamma_{1+\mathbf{a}}), \sigma_{3,\mathbf{l}}\sigma_{3,\mathbf{l}+\mathbf{a}} = \cos \alpha_1 \cos \alpha_{1+\mathbf{a}}.$$

Около $SU(3)$ точки с повышенной симметрией, при $\kappa=1$, система обладает вращательной инвариантностью в пространстве σ_i . Рассмотрим теперь другую критическую точку, $\kappa=-3$. В этом случае энергия в переменных σ_i является предельно анизотропной. Однако если выделить две подрешетки (обозначим их вектора трансляций $\mathbf{l}_1 = a[\bar{l}_1(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) + \bar{l}_2(\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_x)]$, \bar{l}_1, \bar{l}_2 - целые числа, $\mathbf{l}_2 = \mathbf{l}_1 + \mathbf{a}$) и перейти к новой переменной τ_i по правилу

$$\sigma_{i,\mathbf{l}} \rightarrow \tau_{i,\mathbf{l}}, \sigma_{1,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \rightarrow -\tau_{1,\mathbf{l}+\mathbf{a}}, \sigma_{2,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \rightarrow -\tau_{2,\mathbf{l}+\mathbf{a}}, \sigma_{3,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \rightarrow \tau_{3,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \quad (3.58)$$

то знак у первых двух слагаемых в (3.57) изменится. В результате получается лагранжиан относительно переменных τ_i , кинетическая часть которого имеет вид

$$\frac{\hbar}{2(1 + \tau_3)} \left(\tau_1 \frac{\partial \tau_2}{\partial t} - \tau_2 \frac{\partial \tau_1}{\partial t} \right), \quad (3.59)$$

а энергия является изотропной по переменной τ_i в предельном случае $\kappa=-1$ и имеет слабую анизотропию при $1 + \kappa \ll 1$,

$$W = \frac{1}{2} \bar{J} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{a}} \left(\tau_{1,\mathbf{l}}\tau_{1,\mathbf{l}+\mathbf{a}} + \tau_{2,\mathbf{l}}\tau_{2,\mathbf{l}+\mathbf{a}} + |\kappa| \tau_{3,\mathbf{l}}\tau_{3,\mathbf{l}+\mathbf{a}} \right), \quad (3.60)$$

Динамика переменных τ_i может рассматриваться безотносительно к тому, к какой подрешетке относится данный спин, и в энергии по-прежнему можно писать сумму по \mathbf{l} и \mathbf{a} . Здесь принципиально важно, что преобразование (3.58) не меняет гамильтоновой структуры уравнений для τ_i (что произошло бы, если бы поменять знак или у всех трех компонент σ_i , или только у одной компоненты). Насколько нам известно, такой прием был впервые предложен в

работе [257] для исследования сильноанизотропных классических антиферромагнетиков.

Таким образом, преобразование (3.58) в случае $\kappa < 0$ сводит задачу к анализу классического спинового гамильтониана с антиферромагнитным взаимодействием и со слабой (в пределе $1 + \kappa \ll 1$) анизотропией типа легкая плоскость. Статическому состоянию такой системы (как однородному основному, так содержащему вихрь) соответствует состояние с двумя подрешетками в узлах \mathbf{l}_1 и $\mathbf{l}_2 = \mathbf{l}_1 + \mathbf{a}$. Распределение $\sigma_{i,\text{afm}}$ для антиферромагнитного вихря с некоторым значением $\kappa_{\text{afm}} < 0$ получается из решения для ферромагнитного вихря с $\kappa_{\text{fm}} = -\kappa_{\text{afm}}$ преобразованием

$$\sigma_{i,\text{afm}}(\mathbf{l}_1) = \sigma_{i,\text{fm}}(\mathbf{l}_1), \sigma_{3,\text{afm}}(\mathbf{l}_2) = -\sigma_{3,\text{fm}}(\mathbf{l}_2), \sigma_{1,2,\text{afm}}(\mathbf{l}_2) = \sigma_{1,2,\text{fm}}(\mathbf{l}_2), \quad (3.61)$$

что ясно видно из численных данных, (рис. 3.12). Энергия вихрей с $\kappa = |\kappa|$ и совпадают, (рис.3.13). Динамические свойства вихрей с антиферромагнитным ядром и с ферромагнитным ядром являются, однако, принципиально различными.

3.3.2. Структура вихрей в континуальном приближении.

В рамках макроскопического подхода, который мы ниже будем использовать, энергия системы представляет собой функционал полевых переменных $\alpha(\mathbf{r},t)$ и $\beta(\mathbf{r},t)$. Выбирая случай квадратной решетки, запишем лагранжиан, описывающий динамику переменных \mathbf{u}, \mathbf{v}

$$L = \int d^2x \left[\frac{\hbar}{a^2} (1 - \cos \alpha) \frac{\partial \beta}{\partial t} - w \right], \quad (3.62)$$

где w – плотность энергии системы, которая зависит от переменных $\alpha(\mathbf{r},t)$ и $\beta(\mathbf{r},t)$ и их пространственных производных. Для энергии вида (3.57) или (3.60) эту плотность легко представить в виде разложения по градиентам, в основном приближении получается

$$w = \frac{2\bar{J}}{a^2} (1 - \kappa) \cos^2 \alpha + \frac{\bar{J}}{2} (\nabla \alpha)^2 [\cos^2 \alpha + \kappa \sin^2 \alpha] + \frac{\bar{J}}{2} \sin^2 \alpha (\nabla \varphi)^2. \quad (3.63)$$

В рамках макроскопической модели (3.62) можно ввести энергию системы E и полевой импульс \mathbf{P} ,

$$E = \int w d^2x, \quad \mathbf{P} = \frac{\hbar}{a^2} \int (\cos \alpha - 1) (\nabla \beta) d^2x. \quad (3.64)$$

На основе лагранжиана (3.62) в нематической фазе можно провести анализ линейной и нелинейной динамики. Перейдем к анализу двумерных солитонов на основе лагранжиана (3.62). Уравнение Лагранжа $\delta L / \delta \beta = 0$ имеет вид

$$\hbar \frac{\partial \alpha}{\partial t} \sin \alpha = \bar{J} a^2 \nabla [\sin^2 \alpha (\nabla \beta)], \quad (3.65)$$

и в статическом случае из него следует, что двумерное решение может быть выбрано в виде

$$\beta = m\chi + \beta_0, \quad \alpha = \alpha(r), \quad (3.66)$$

где r, χ – полярные координаты в плоскости магнетика, β_0 – произвольный угол. Условие непрерывности дает, что число m должно быть целым, оно имеет тот же смысл, что и топологический заряд завихренность (vorticity) для вихрей в магнетиках.

При выполнении условия (3.66) функция $\alpha(r)$ описывается уравнением в обыкновенных производных,

$$(\cos^2 \alpha + \kappa \sin^2 \alpha) \left(\frac{d^2 \alpha}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\alpha}{dr} \right) + \sin \alpha \cos \alpha \left(\frac{1}{l_0^2} - \frac{m^2}{r^2} - (1 - \kappa) \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)^2 \right) = 0, \quad (3.67)$$

где величина l_0 , $l_0 = (a/2) \sqrt{1/(1-\kappa)}$ имеет смысл характерного масштаба (длины) при малых $1-\kappa$.

В предельном случае $\kappa=1$ величина $1/l_0 \rightarrow 0$, уравнение становится масштабно – инвариантным и имеет решение вида солитона Белавина – Полякова [258]. Обобщить это решение для случая малых, но конечных значений $1-\kappa$ (как это сделано для ферромагнетика с малой анизотропией [259]) не удастся, и оно далее не обсуждается. Однако можно построить решения, описывающие вихрь с ядром. Функция $\alpha = \alpha_0(r)$ с условием, что при $r \rightarrow \infty$ величина $\alpha = \pi/2$, а при $r \rightarrow 0$ отсутствуют сингулярности определяет структуру

ядра вихря. Поведение решения вблизи начала координат определяется величиной l_0 , $\alpha_0(r) \propto (r/l_0)^m$, то есть $\sigma_3 \rightarrow 1$, $\sigma_{1,2} \rightarrow 0$ при $r \ll l_0$. Однако на больших расстояниях важна другая характерная длина, $\bar{l}_0 = l_0 \sqrt{\kappa}$ [254], так что при $r \gg \bar{l}_0$ величина α стремится к равновесному значению экспоненциально, то есть $\cos \alpha_0(r) \propto \exp(-r/\bar{l}_0)$. Таким образом, в центре вихря в спиновом нематике формируется несингулярное насыщенное ядро. В центре ядра $|\langle \mathbf{S} \rangle| = S$, а квадрупольные средние определяются эллипсоидом вращения с избранной осью, параллельной полю, то есть нематический порядок разрушен, но восстановлен магнитный порядок. Отметим, что величины \bar{l}_0 и l_0 близки только при $1 \sim \kappa$. При малых κ их различие велико, в частности, при $\kappa \rightarrow 0$, величина $\bar{l}_0 \rightarrow 0$, а $l_0 = a/2$ остается конечной.

Полное решение уравнение (3.67) может быть получено только численно, например, с использованием метода стрельбы. Как будет показано в рамках дискретной модели, уже при $\kappa < \kappa_c \approx 0.7$ характер вихря принципиально изменяется, и ядро исчезает. Поэтому имеет смысл рассмотреть случай $1 \sim \kappa$, когда (3.67) переходит в универсальное уравнение, определяющее структуру магнитного вихря [260]. Легко показать, что энергия вихря имеет слабую (логарифмическую) расходимость с ростом размера системы L ,

$$E = \pi m^2 \bar{J} \ln(L/A l_0) \quad (3.68)$$

где A – численный множитель порядка единицы.

Таким образом, для статических вихрей в спиновом нематике со спином $S=1$ и $S=3/2$ при описании в терминах переменной σ_i получается универсальное поведение. Поведение проекций спина (величины σ_3) также универсально для рассмотренных моделей. Однако для мультипольных наблюдаемых величин ситуация более сложная, здесь важны средние вида $\langle (S^+)^{2S} \rangle$, $S^+ = S_x + iS_y$, то есть $\langle (S^+)^2 \rangle$ и $\langle (S^+)^3 \rangle$ для случаев $S=1$ и $S=3/2$, соответственно. При повороте на в обычном пространстве вокруг оси OZ на угол φ эти средние изменяются

как $\langle (S^+)^{2S} \rangle \rightarrow \langle (S^+)^{2S} \rangle \exp(2Si\varphi)$, в то время как для «обычного» вектора \mathbf{u} имеет место преобразование $(u_x + iu_y) \rightarrow (u_x + iu_y) \exp(i\varphi)$. Следовательно, получается следующая картина: обход вокруг простейшего вихря с $m=1$ в нематике со спином S соответствует повороту спиновой системы магнетика на угол $\pi m/S$.

Во многих работах для спина $S=1$ использовалось представление через «декартовые» векторы \mathbf{u} и \mathbf{v} [31,247]. В этих терминах для вихря с $m=1$ получаются состояния с разрывами \mathbf{u} , \mathbf{v} вида $(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0) \rightarrow (-\mathbf{u}_0, -\mathbf{v}_0)$. Это дало основание назвать такой вихрь дисклинацией [31], по аналогии с дисклинациями вектора-директора в нематических жидких кристаллах [36]. Для нематика со спином $S=3/2$ величины $\langle (S^\pm)^3 \rangle$ характеризуются наличием оси третьего порядка, перпендикулярной плоскости XOY . Здесь такой простой аналогии с жидкими кристаллами нет, и качестве наглядного образа можно выбрать правильный треугольник, лежащий в этой плоскости. Поворот такого треугольника на угол $2\pi/3$ переводит его в себя, что обеспечивает непрерывность наблюдаемых величин. Сопоставление переменных σ_i и мультипольных переменных достаточно простое, (рис. 3.11), и далее будет использоваться универсальное представление результатов через переменную σ_i .

Статические свойства ферромагнетика и антиферромагнетика для классических спинов (единичных векторов) в рамках модели (3.57) одинаковы. Структура статического вихря спинового нематика вблизи другой критической точки, $\kappa \approx -1$, получается из того же универсального решения $\alpha = \alpha_0(r)$ простой заменой $l_0 \rightarrow (a/2)\sqrt{1/(1+\kappa)}$. Фактически «антиферромагнитное» поведение имеет место только в ядре вихря для компонент $\sigma_{3,1} = \langle S_z \rangle$, см. преобразование (3.61). Это поведение хорошо видно на рисунках, представляющих найденную численно структуру вихря, сравните (рис. 2 (б), (в)).

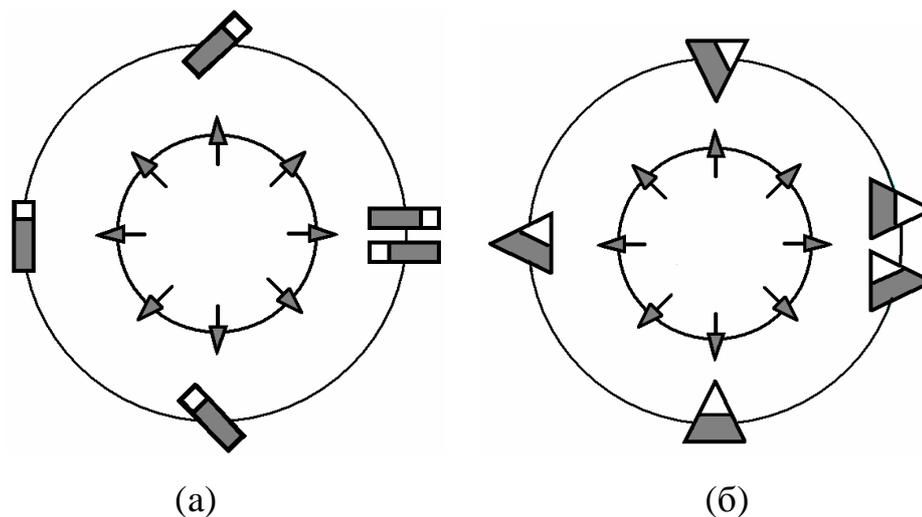


Рис. 3.11. Наглядная картина универсальных переменных σ_i (стрелки) и преобразования мультипольных переменных (для $S=1$ проекции квадрупольного эллипсоида изображены прямоугольниками, для $S=3/2$ использованы правильные треугольники) в вихре с топологическим зарядом $m=1$ при различных значениях спина S ; $S=1$ (а), $S=3/2$ (б). Чтобы легче было проследить за поворотом фигуры, один из ее краев заштрихован.

Динамические свойства топологических солитонов часто являются достаточно нетривиальными. Динамики вихрей в спиновых нематиках наиболее интересна для случая, когда градиенты малы, вихрь имеет развитое ядро и малы эффекты решеточного пиннинга.

В рамках континуального приближения вопрос о вынужденном движении вихря можно рассмотреть на основе анализа полевого импульса спинового нематика \mathbf{P} . Согласно формуле (3.64), как и для ферромагнетика, \mathbf{P} содержится недифференцируемое выражение $\nabla\beta$. Используя метод [261], для вихря в нематике со спином $S=1$ было обнаружено присутствие гиросилы $\mathbf{F}_{\text{giro}} = G[\mathbf{e}_z \times \mathbf{V}]$ [49]. Такая гироскопическая сила эквивалентна силе Лоренца для заряженной частицы в однородном магнитном поле $\mathbf{B} = G\mathbf{e}_z$ и хорошо известна для вихрей в сверхтекучих системах и топологических солитонов в ферромагнетиках. В рамках лагранжиана (3.64) легко показать, что этот результат справедлив и для общей модели, значение гироконстанты

$G = \pi m \hbar / a^2$ не зависит от спина нематика. Нетрудно также показать, что для планарного вихря, в котором $\alpha = \pi/2 = \text{const}$ гироскопические свойства отсутствуют.

Рассмотрим теперь динамику вихрей около антиферромагнитной критической точки, $-1 < \kappa < -\kappa_c$. Как отмечалось выше, в этом случае задача сводится к анализу «спинового гамильтониана» для антиферромагнетика и все компоненты $\tau_i^{(1)}$ и $\tau_i^{(2)}$ в разных подрешетках (узлах \mathbf{l}_1 и $\mathbf{l}_2 = \mathbf{l}_1 + \mathbf{a}$) имеют противоположные знаки. Динамика антиферромагнетика принципиально отличается от динамики ферромагнетика, см. монографии и обзоры [184,262,263]. Удобно ввести неприводимые векторы $\mu_i = (\tau_i^{(1)} + \tau_i^{(2)}) / 2$ и $\lambda_i = (\tau_i^{(1)} - \tau_i^{(2)}) / 2$, которые удовлетворяют условиям $\lambda_i \mu_i = 0$ и $\lambda_i^2 + \mu_i^2 = 1$. μ_i и λ_i аналогичны векторам суммарной намагниченности и вектора антиферромагнетизма для обычного антиферромагнетика, соответственно. Для слабой анизотропии выполнено условие $\mu_i^2 \ll \lambda_i^2 \approx 1$, и вектор λ_i можно считать единичным. В этом случае динамика определяется замкнутым уравнением (уравнением сигма-модели) только для вектора λ_i , а вектор μ_i является вспомогательной переменной, $\mu_i = \hbar \varepsilon_{ijk} [\lambda_j \times \partial \lambda_k / \partial t] / \bar{J}$ [184,262,263]. Лагранжиан сигма-модели для вектора λ_i обладает формальной Лоренц-инвариантностью с характерной скоростью $c = 4\sqrt{2}\bar{J}a / \hbar$. Это обстоятельство существенно упрощает анализ динамики солитонов, позволяя построить решение для движущегося солитона по известному неподвижному решению, см. подробнее анализ двумерных солитонов и вихрей [52] в антиферромагнетиках.

3.3.3. Анализ вихрей в дискретной модели.

Континуальное приближение, строго говоря, применимо только в том случае, когда характерный размер солитона значительно больше межатомного

расстояния, $|\nabla\alpha| \ll 1/a$. Это условие выполняется в предельных случаях $1-\kappa \ll 1$ и $1+\kappa \ll 1$, когда характерные размеры близки и значительно больше постоянной решетки $l_0 \approx \bar{l}_0 \gg a$. Однако в области устойчивости нематической фазы такое условие нарушается. Например, даже для достаточно малого $1-\kappa=0.1$ величина $\bar{l} = 1.5a$ и лишь незначительно превышает постоянную решетки a . Величина $\bar{l}_0/a \approx (1/2)\sqrt{\kappa} \ll 1$ в центре этой области, при $\kappa \rightarrow 0$, обращается в нуль. Поэтому применимость континуального приближения заведомо не ясна и следует ожидать существенных эффектов дискретности.

Рассмотрим дискретную версию модели нематика (3.57) на квадратной решетке. Для анализа статических солитонов будем искать численно минимум энергии $W(\alpha_1, \beta_1)$ по отношению к переменным α_1, β_3 . Использовалась та же программа, что и в [47,264]: энергии минимизировалась с применением стандартного алгоритма Гаусса-Зейделя и затем вычислялись значения энергии и суммарной z - проекции спина. Анализ проведен для приблизительно кругового фрагмента, вырезанного из квадратной решетки размером 20×20 . Такой небольшой размер является вполне достаточным, так как при $\bar{l}_0 \sim a$ размер ядра вихря сильно локализован, а влияние границ на структуру пренебрежимо мало.

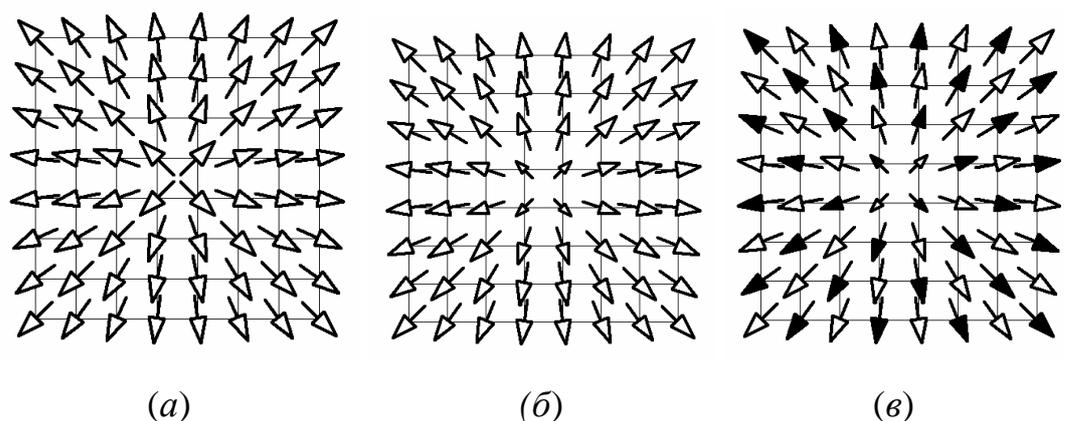


Рис. 3.12. Распределение дискретных переменных $\sigma_{i,1}$ в вихре с топологическим зарядом $m=1$ при различных значениях κ ; а) $\kappa=0$; б) $\kappa=0.9 > \kappa_c$; в) $\kappa=-0.9$. Для наглядности представлена только часть фрагмента, выбранного для численного счета. Величины $\sigma_{i,1}$ для каждого узла представлены двумя

«квадрупольными» компонентами $\sigma_{1,1}$ и $\sigma_{2,1}$, длина плоского вектора $(\sigma_{1,1}, \sigma_{2,1})$ дает представление о величине $\sigma_{3,1}$, положительные или отрицательные значения $\sigma_{3,1}$ показаны светлыми или темными стрелками, соответственно.

Как и следовало ожидать, при малых значениях $(1-\kappa)$ численный анализ показывает практически радиально-симметричное распределение значений α_1 с масштабом в несколько постоянных решетки a . Зависимость $\alpha_1 \approx \alpha(|\mathbf{r}|)$ фактически повторяет кривые $\alpha_0(r)$, полученные в континуальном приближении. В общем же случае ситуация такая же, как для магнитных вихрей – ядро существует только при достаточно малых значениях $(1-|\kappa|)$, (рис.3.12 а). При $\kappa_c < \kappa < 1$ ядро отвечает ферромагнитной ориентации величин σ_3 , то есть компонент спина $\langle S_z \rangle$, а при $-1 < \kappa < -\kappa_c$ имеет место антипараллельная ориентация компонент спина $\langle S_z \rangle$ в соседних узлах, (рис.3.12 в). Такой вихрь можно назвать антиферромагнитным.

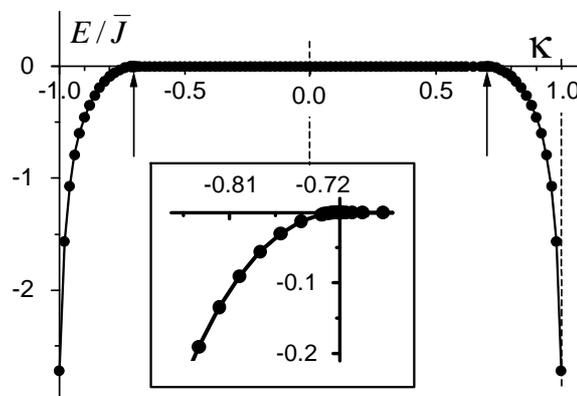


Рис. 3.13. Зависимость энергии вихря E (нормированное на число спинов в системе, в единицах \bar{J}) от параметра κ , символы – значения, полученные численно, линия проведена для наглядности. Вертикальными стрелками обозначены критические точки. На вставке – детали поведения вблизи критической точки появления антиферромагнитного ядра.

Зависимость энергии вихря от параметра κ представлена на рис. 3.13. Так как для планарного распределения σ_i энергия не зависит от κ , это значение энергии вихря выбрано как начало отсчета. При появлении ядра энергия понижается, но конкретную точку появления такой аномалии определить достаточно сложно. Для антиферромагнитной критической точки поведение энергии полностью совпадает с тем, что имеет место для ферромагнитной критической точки.

Следует отметить, что появление вихревого ядра, ферромагнитного или антиферромагнитного, связано с понижением симметрии вихря, подобно стандартному поведению параметра порядка вблизи точки фазового перехода второго рода. Это может быть использовано для симметричного анализа переходов различных вихревых состояний. Такой подход полезен, так как численный анализ вблизи критических точек усложняется из-за «критического замедления» (подобно тому, что имеет место вблизи стандартных фазовых переходов второго рода) что проявляется в сильном возрастании времени численного расчета. Для обоих установленных критических значений κ удобно исследовать те величины, которые определяют симметрию вихря, выбрав их в качестве параметра порядка.

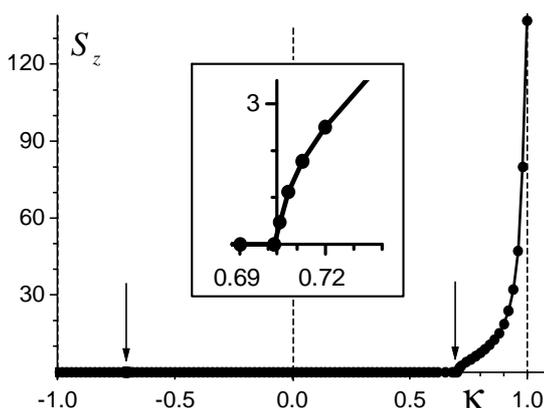


Рис. 3.14. Зависимость суммарного спина в ядре вихря S_z от параметра κ , символы – значения, полученные численно, сплошная линия проведена для наглядности. На вставке – детали поведения вблизи критической точки

появления ферромагнитного ядра, линия – подгонка зависимостью типа $\sqrt{\kappa_c - \kappa}$.

Величина суммарной компоненты спина по оси z является удобной для анализа критического поведения в ферромагнитной критической точке, (рис.3.14) Поведение этой величины в точке появления ядра вихря с хорошей точностью следует корневой зависимости, характерной для параметра порядка в теории фазовых переходов Ландау.

Для антиферромагнитной критической точки в качестве параметра порядка можно выбрать разности средних значений спинов в подрешетках, для конкретного анализа были взяты значения для четырех центральных спинов, (рис. 3.15). Таким образом, появление вихревого ядра, ферромагнитного или антиферромагнитного, можно рассматривать как некоторую механическую аналогию фазового перехода второго рода. Присутствие корневых сингулярностей при $\kappa \rightarrow \kappa_c$ установить гораздо легче (рис. 3.14, 3.15). Найденное значение $\kappa_c=0.7034$ совпадает с найденным ранее путем анализа больших решеточных систем [255].

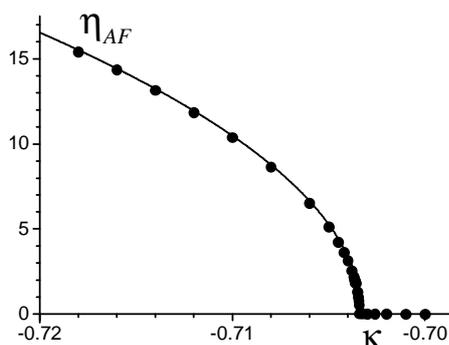


Рис. 3.15. Зависимость антиферромагнитного параметра порядка η_{AF} , $\eta_{AF} = \pi/2 \pm \alpha$, значения для четырех центральных спинов вблизи критической точки появления антиферромагнитного ядра, от параметра κ (символы), линия – подгонка зависимостью типа $\sqrt{-\kappa - |\kappa_c|} = \sqrt{|\kappa| - |\kappa_c|}$.

В заключении отметим, что для магнетика с сильным биквадратичным взаимодействием в состоянии спинового нематика существуют двумерные топологические дефекты – нематические вихри. При обходе вокруг линии такого вихря с целочисленным топологическим индексом m мультипольные средние, описывающие нематический порядок, поворачиваются на угол $2\pi mS$. Значению $m=1$ соответствует минимально возможный угол поворота, обеспечивающий непрерывность всех спиновых средних. Обнаружены несколько типов таких вихрей, с сингулярностью в центре и с несингулярным ядром, в котором разрушен нематический порядок. Ядро характеризуется восстановлением магнитного порядка, который может быть ферромагнитным или антиферромагнитным. Предложено описание, базирующееся на введении «минимального» вектора состояния, определяющегося тремя параметрами σ_i , $i=1,2,3$, которые можно рассматривать как компоненты единичного трехмерного вектора. σ_1 описывают мультипольные переменные и σ_3 определяет среднее значение спина. В рамках этих переменных существует универсальное описание структуры вихря для спинового нематика $S=1$ и $S=3/2$. Более того, показана возможность применение результатов, полученных для различных солитонов классических моделей ферромагнетиков и антиферромагнетиков, для описания спиновых нематиков.

В настоящее время экспериментально реализуются ультрахолодные газы атомов со спином до $S=3$ (для атомов хрома ^{52}Cr) [265]. С точки зрения эксперимента представляет интерес обобщение данного подхода на случай более высоких значений спина, как целых $S=2,3$, так и и полуцелых, например, $S=5/2$. Для магнетика с $S=2$ хорошо изучены различные нематические состояния, [59,266-268]. Среди них есть «квадратное» состояние с осью симметрии C_4 . Наши результаты легко обобщаются для этого состояния, а также для «шестиугольного» состояния с осью симметрии C_6 , описанного в работе [59] для магнетика с до $S=3$. Однако структура «минимального» вектора состояния для нематиков с $S=3/2$ более сложная, чем использованные выше при записи (3.49) и (3.52). Для случая с $S=2$ она включает состояния типа

$|\Psi_T\rangle = Z_1|-2\rangle + Z_2|1\rangle$ или $|\Psi_N\rangle = Z_{(-)}|-2\rangle + Z_0|0\rangle + Z_{(+)}|2\rangle$, симметрия которых ниже, чем в случае (3.49) и (3.52). Для общего состояния $|\Psi_N\rangle$ нужно вводить более сложное представление, чем использованное в данной работе представление через трехкомпонентный параметр порядка σ_i . Применимость указанного подхода для состояния $|\Psi_T\rangle$, определяющего при $|Z_2| = 2|Z_1|$ спиновый нематик с тетрагональной симметрией мультипольных переменных, требует дополнительного исследования.

Основные результаты третьего раздела

1. Исследованы фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений негейзенберговского магнетика с $S=1$ при различных соотношениях обменных интегралов. Проведенный анализ показал, что в рассматриваемой системе возможна реализация четырех фазовых состояний. Показано, что фазовый переход ферромагнитная фаза – ортогональный нематик и антиферромагнитная фаза - ортогональный нематик являются вырожденными переходом первого рода.

2. Изучены статические и динамические свойства магнетика со спином $S=3/2$ и негейзенберговским изотропным взаимодействием с учетом всех возможных обменных интегралов. Также удалось выяснить, что в исследованном магнетике в зависимости от соотношений обменных интегралов устойчивыми являются следующие фазы: ферромагнитная и антиферромагнитная фазы с насыщенным значением спина, и состояния с тензорными параметрами порядка – нематическое и антинематическое. Определены спектры элементарных возбуждений во всех фазах.

3. Показано, что для магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$, в которых реализуется состояние спинового нематика, существуют двумерные топологические солитоны– вихри. Обнаружены несколько типов таких вихрей, с сингулярностью в центре и с несингулярным ядром, в котором разрушен нематический порядок. Ядро характеризуется восстановлением магнитного порядка, который может быть ферромагнитным или антиферромагнитным.

Раздел 4. Особенности статики и динамики анизотропных негейзеберговских магнетиков

Уже достаточно давно в теории магнетизма к анизотропии перестали относиться как к малому и несущественному параметру. Ещё в работах по изучению электронного парамагнитного резонанса [1,70,269,270] было показано, что внутрикристаллическое поле сильно влияет на движение электронов незамкнутых оболочек благодаря учету спин-орбитальной связи. Слагаемые спин-гамильтонианов магнетиков, в особенности редкоземельных, характеризуют, с одной стороны, симметрию кристаллического окружения и внутренние электронные свойства иона, с другой стороны. Это приводит к сильной анизотропии магнитных свойств магнитоупорядоченных соединений в состав которых входят редкоземельные ионы. Спиновые гамильтонианы в общем случае являются инвариантными относительно канонических преобразований, т.е. содержат слагаемые четных степеней по операторам спина. Соответственно, имеются слагаемые относящиеся к разным узлам – т.н. обменные слагаемые (изотропные и анизотропные) и слагаемые соответствующие одному узлу – слагаемые одноионной анизотропии.

Исследования анизотропных ферромагнетиков [271-277] показали, что результаты квантового описания не совпадают с результатами феноменологического подхода. При феноменологическом описании магнитоупорядоченных систем в результате того, что релятивистские характеристики ионов заменяются некоторым эффективным полем анизотропии, теряется информация о структуре энергетического спектра магнитного иона; вид энергии магнитной анизотропии не зависит от величины спина магнитного иона.

Указанные затруднения феноменологического подхода устранимы лишь при построении последовательной микроскопической теории, в которой

адекватно учитывались бы релятивистские эффекты, в частности одноионная анизотропия.

Результатом того, что одноионная анизотропия рассматривалась точно, явилось то, что в спектре спиновых волн появилось несколько ветвей возбуждения; кроме того, было показано, что частота ферромагнитного резонанса может обращаться в нуль до достижения точки фазового перехода в неупорядоченное состояние, а также изменяется величина поля фазового перехода из ферро- или антиферромагнитной фазы в парамагнитную [278].

Однако изучение данных систем проводилось в случае, когда внешнее магнитное поле направлено либо вдоль оси лёгкого намагничивания, либо лежит в лёгкой плоскости. Ситуация усложняется, когда включение магнитного поля приводит к тому, что направление оси лёгкого намагничивания и магнитного момента не совпадают.

Исследование случая, в котором точно учитывалась одноионная анизотропия, было проведено в [279-281]. В приближении молекулярного поля было показано, что в такой системе возникает чисто квантовый эффект «сокращения спина», заключающийся в уменьшении намагниченности у ферромагнетиков [281] либо уменьшении намагниченности подрешётки антиферромагнетиков [279,280]. Также найдено основное состояние и спектры возбуждения.

Изучение магнитоупорядоченных систем, в которых константы одноионной анизотропии и обменного взаимодействия сравнимы, проводилось в [14,25,27,28,282-284]. В частности, в [14] было показано, что при $T=0$ в отсутствие упорядочения дипольных степеней свободы происходит упорядочение высших степеней свободы, приводящее к стабилизации квадрупольной фазы.

Конкуренция эффективного поля (внешнее магнитное поле + средний спин) и поля квадрупольных моментов приводит к интересным особенностям в поведении одноосного ферромагнетика, а именно, к полному подавлению каждого из механизмов, влияющих на формирование соответствующих

упорядоченных состояний. В зависимости от значения внешнего поля и материальных констант реализуется либо ферромагнитная фаза, характеризующаяся только дипольным параметром порядка, либо квадрупольная фаза, характеризующаяся мультипольным параметром порядка.

Исследование негеизенберговских ферромагнетиков при точном учёте одноионной анизотропии [14,94,95,223,285,286] показало, что, действуя одновременно, одноионная анизотропия и биквадратичное обменное взаимодействие формируют особенности основного состояния и спектральные характеристики данных систем, а также стимулируют возникновение квадрупольных фаз. Как отмечено в [14] число слагаемых одноионной анизотропии определяется симметрией системы, а также значением спина магнитного иона. Не вдаваясь в механизм возникновения одноионной анизотропии, представляет интерес изучить влияние этих факторов на динамические и статические свойства магнетиков с изотропным обменным взаимодействием.

Наряду с исследованием влияния одноионной анизотропии на свойства изотропных спиновых систем с учетом высших инвариантов, представляет интерес исследование обменно-анизотропных моделей. Одна из простых моделей, содержащая в гамильтониане тензорные взаимодействия – это обобщение модели Изинга с учетом биквадратичного взаимодействия – т.н. модель Блюма-Эмери-Гриффитса [97]. Эта модель была предложена для описания термодинамических свойств смеси Ne(III) и Ne(IV) в окрестности критической точки. В работах [98,99] обобщена модель Блюма-Эмери-Гриффитса на негеизенберговские магнетики с $S=1$. Было показано, что учет анизотропного обменного взаимодействия (типа модели Изинга или XY-модели) оказывает существенное влияние обменной анизотропии на динамику системы, а также формирование специфических фазовых состояний. Рассмотрение дополнительных возможностей симметрии билинейного и биквадратичного обменных интегралов, приводит к появлению новых типов фазового упорядочения и разнообразию динамического поведения.

В **первом** подразделе изучаются фазы и спектр возбуждений магнетика с гексагональной одноионной анизотропией и учетом биквадратичного обменного взаимодействия.

Во **втором** подразделе исследованы фазовые переходы по материальным константам и температуре ферромагнетика с анизотропией обменных взаимодействий.

В **третьем** подразделе изучены фазовые состояния и фазовые переходы негейзенберговского изингоподобного ферромагнетика во внешнем магнитном поле; также для данной системы исследованы фазовые переходы по температуре.

Четвертый подраздел посвящен исследованию влиянию сложной анизотропии обменного взаимодействия на формирование фаз и динамику магнетика с негейзенберговским обменом.

В **пятом** подразделе изучается статика и динамика негейзенберговского магнетика с двумя подрешетками со сложной анизотропией обменных взаимодействий.

4.1. Анализ фазовых состояний и спектров возбуждения ферромагнетика с биквадратичным обменным взаимодействием и гексагональной одноионной анизотропией.

4.1.1. Решение одноузельной задачи и определение фазовых состояний, реализующихся в системе в случае малой анизотропии.

Учет большой одноионной анизотропией (сравнимой или даже превосходящей обменное взаимодействие) наряду с биквадратичным обменным взаимодействием выявил ряд необычных с точки зрения феноменологической теории свойств. Во-первых, точный учет анизотропии и взаимодействий высших мультиполей для систем с большим спином приводит к существенной неэквидистантности одноионного спектра и появлению дополнительных ветвей в спектре элементарных возбуждений. Во-вторых, к возможности существования квадрупольных фаз, которые реализуются как основные состояния системы, в случае, когда биквадратичный обмен превосходит гейзенберговское обменное взаимодействие.

В качестве исследуемой системы рассмотрим модель ферромагнетика с биквадратичным обменным взаимодействием и гексагональной одноионной анизотропией в отсутствие внешнего поля. Спин магнитного иона S полагаем равным двум. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$H = - \sum_m (B_2^0 O_{2m}^0 + B_4^0 O_{4m}^0) - \frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} \{ J_{mm'} \vec{S}_m \vec{S}_{m'} + K_{mm'} (\vec{S}_m \vec{S}_{m'})^2 \}, \quad (4.1)$$

где J, K – константы гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий, S_n^i – спиновые операторы в узле n , O_{jn}^i – операторы Стивенса [70], B_2^0, B_4^0 – константы одноионной анизотропии.

В общем случае направление магнитного момента системы, описываемой гамильтонианом (4.1), составляет угол φ с осью OZ . Повернем систему

координат так, чтобы направление магнитного момента совпало с направлением OZ :

$$H(\varphi) = UHU^+, \quad U(\varphi) = \prod_n \exp[i\varphi S_n^y]. \quad (4.2)$$

В новых переменных гамильтониан OA примет вид:

$$\begin{aligned} H_{OA} = & -B_2^0 \left(\frac{1}{2} O_2^0 (2 - 3 \sin^2 \varphi) + \frac{3}{2} O_2^2 \sin^2 \varphi - \frac{3}{2} O_2^{zx} \sin 2\varphi \right) - \\ & -B_4^0 \left[\frac{1}{8} O_4^0 (8 - 40 \sin^2 \varphi + 35 \sin^4 \varphi) + \frac{5}{2} O_4^1 (7 \sin^2 \varphi - 4) \sin 2\varphi - \right. \\ & \left. - \frac{5}{2} O_4^2 (7 \sin^2 \varphi - 6) \sin^2 \varphi - \frac{35}{2} O_4^3 \sin^2 \varphi \sin 2\varphi + \frac{35}{8} O_4^4 \sin^4 \varphi \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

где $O_2^0 = 3(S^z)^2 - 6$; $O_2^{ij} = [S^i, S^j]_+$; $O_2^2 = \frac{1}{2} \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right)$;

$$O_4^0 = 35(S^z)^4 - 155(S^z)^2 + 72; \quad O_4^1 = \frac{1}{4} \left[(7(S^z)^3 - 19S^z), (S^+ + S^-) \right]_+;$$

$$O_4^2 = \frac{1}{4} \left[(7(S^z)^2 - 11), \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right) \right]_+; \quad O_4^3 = \frac{1}{4} \left[S^z, \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right) \right]_+;$$

$$O_4^4 = \frac{1}{2} \left((S^+)^4 + (S^-)^4 \right); \quad S^\pm = S^x \pm iS^y.$$

В терминах операторов Стивенса обменная часть гамильтониана представима в виде

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left(J_{nn'} - \frac{1}{2} K_{nn'} \right) \vec{S}_n \vec{S}_{n'} - \frac{1}{4} \sum_{n \neq n'} K_{nn'} \left(\frac{1}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + \sum_{t=2,xy,yz,zx} O_{2n}^t O_{2n'}^t \right). \quad (4.4)$$

После выделения стандартным образом в гамильтониане обменного взаимодействия (4.4) среднего поля $\langle S^z \rangle$, связанного с упорядочением спинового момента, а также квадрупольных полей $q_2^t \equiv \langle O_2^t \rangle$, нулевой гамильтониан с учетом (4.3) примет вид

$$H_0 = \bar{\epsilon}_0 - \bar{H} S^z - \frac{K_0}{2} \left(\frac{1}{3} q_2^0 O_2^0 + \sum_{t=2,xy,yz,zx} q_2^t O_2^t \right) + H_{OA}(\varphi), \quad (4.5)$$

где

$$\bar{\varepsilon}_0 = -6K_0 - \frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{4} \left(\frac{1}{3} (q_2^0)^2 + \sum_{\substack{t=2,xy, \\ yz,zx}} (q_2^t)^2 \right), \quad \bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle.$$

Учет квантовых свойств рассматриваемой системы требует адекватного математического аппарата. Для этой цели диаграмная техника для операторов Хаббарда является наиболее подходящей [221,222]. Использование этого формализма позволяет избежать математических трудностей, возникающих при исследовании статических и термодинамических свойств анизотропных негейзенберговских ферромагнетиков. Как отмечено в [221], использование представления хаббардовских операторов позволяет представить систему с обменными взаимодействиями в едином унифицированном виде, что предпочтительно для развития общего подхода. Поскольку исследуемая модель негейзенберговского магнетика представляет собой систему в которой кроме билинейного обменного взаимодействия учтено биквадратичное обменное взаимодействие и одноионная анизотропия, операторы Хаббарда является удобным математическим подходом, который позволяет точно учесть одноионную анизотропию включения ее в нулевой гамильтониан. Эта процедура дает возможность избежать трудностей, возникающих при использовании спиновых операторов. Кроме того, техника операторов Хаббарда позволяет учесть ряд чисто квантовых эффектов [14,94,95].

Операторы $X^{M'M} = |\Psi_{M'}\rangle \langle \Psi_M|$ [221] соответствует переходу магнитного иона между состояниями M и M' . В рассматриваемом случае $M = -2, -1, 0, 1, 2$. Построим эти операторы на базисе собственных функций оператора S^z . Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда определяется выражением

$$\begin{aligned} S^+ &= 2(X^{21} + X^{-1-2}) + \sqrt{6}(X^{10} + X^{0-1}), \\ S^- &= (S^+)^{\dagger}, S^z = 2(H^2 - H^{-2}) + (H^1 - H^{-1}), \end{aligned} \quad (4.6)$$

где $H^M \equiv X^{MM}$ – диагональные операторы Хаббарда. Алгебра операторов Хаббарда определяется следующими коммутационными соотношениями:

$$\begin{aligned} [H^M, X^{kl}] &= (\delta_{M,k} - \delta_{l,M}) X^{kl} = \vec{\alpha}(k,l) X^{kl}; \\ [X^{pq}, X^{qp}] &= H^p - H^q; [X^\alpha, X^{-\alpha}] = \vec{\alpha}\vec{H}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

где $\vec{\alpha}$ – корневые вектора [221].

В представлении операторов Хаббарда одноузельный гамильтониан (4.5) может быть записан в виде

$$H_0 = \sum_i E_M H^M + \sum_{p,q} V_{pq} X^{pq}, \quad (4.8)$$

где E_M и V_{pq} имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} E_{\pm 2} &= -6(\tilde{B}_2^0 + 2\tilde{B}_4^0) \mp 2\vec{H}, E_{\pm 1} = 3(\tilde{B}_2^0 + 16\tilde{B}_4^0) \mp \vec{H}, \\ E_0 &= 6(\tilde{B}_2^0 - 12\tilde{B}_4^0); \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$V_{21} = -V_{-2-1} = -3(\tilde{B}_2^1 + \tilde{B}_4^1), V_{20} = V_{-20} = -\sqrt{6}(\tilde{B}_2^2 + 3\tilde{B}_4^2),$$

$$V_{2-1} = -V_{-21} = -3\tilde{B}_4^3, V_{10} = -V_{-10} = -\frac{\sqrt{6}}{2}(\tilde{B}_2^1 - 6\tilde{B}_4^1),$$

$$V_{1-1} = -3(\tilde{B}_2^2 - 4\tilde{B}_4^2), V_{2-2} = -12\tilde{B}_4^4;$$

$$\tilde{B}_2^0 = B_2^0(\varphi) + \frac{1}{6}K_0q_2^0, \tilde{B}_2^2 = B_2^2(\varphi) + \frac{1}{2}K_0q_2^2,$$

$$\tilde{B}_2^1 = B_2^1(\varphi) + \frac{1}{2}K_0q_2^{zx},$$

$$\tilde{B}_4^0 = \frac{1}{8}B_4^0(35\sin^4\varphi - 40\sin^2\varphi + 8), \tilde{B}_4^1 = \frac{5}{2}B_4^0\sin 2\varphi(7\sin^2\varphi - 4),$$

$$\tilde{B}_4^2 = \frac{5}{2}B_4^0(6 - 7\sin^2\varphi)\sin^2\varphi, \tilde{B}_4^3 = -\frac{35}{2}B_4^0\sin^2\varphi\sin 2\varphi,$$

$$\tilde{B}_4^4 = \frac{35}{2}B_4^0\sin^4\varphi,$$

$$B_2^0(\varphi) = \frac{1}{2}B_2^0(2 - 3\sin^2\varphi), B_2^1(\varphi) = -\frac{3}{2}B_2^0\sin 2\varphi,$$

$$B_2^2(\varphi) = \frac{3}{2}B_2^0\sin^2\varphi.$$

В общем случае, при произвольном соотношении между обменными интегралами и константами одноионной анизотропией, диагонализация одноузельного гамильтониана (4.8) весьма затруднительна. Однако, при определенных соотношениях между материальными константами эту процедуру удастся осуществить.

Рассмотрим вначале случай, когда константы одноионной анизотропии существенно меньше интегралов обменного взаимодействия, т.е. $B_i^0 \ll J_0, K_0$. Кроме того, будем считать малыми эффекты, связанные с упорядочением мультипольных степеней свободы [14]: гейзенберговский обмен превосходит биквадратичный $J_0 \gg K_0$. В данном приближении модуль намагниченности практически не изменяется и возможные фазовые изменения состояния системы связаны только с поворотом вектора намагниченности. В данном приближении поправка по малому параметру B_i^0 / J_0 к основному состоянию магнитного иона имеет вид

$$E_2^{(1)} = 3(3B_2^0 + 20B_4^0)\sin^2 \varphi - \frac{105}{2}B_4^0 \sin^4 \varphi. \quad (4.10)$$

В рассматриваемом нами случае низких температур ($T \ll T_C, T_C$ – температура Кюри) в выражении для плотности свободной энергии

$$F = -T \ln \left(\sum_{M=-2}^2 \exp \left(-\frac{E_M}{T} \right) \right)$$

достаточно учесть лишь нижайший энергетический уровень:

$$E_2 = -6(\tilde{B}_2^0 + 2\tilde{B}_4^0) - 2\bar{H} + 3(3B_2^0 + 20B_4^0)\sin^2 \varphi - \frac{105}{2}B_4^0 \sin^4 \varphi$$

Из анализа плотности свободной энергии следует, что в случае отрицательного значения константы одноионной анизотропии, т.е. $B_4^0 < 0$, в системе будут устойчивы следующие фазы:

1. Состояние, когда магнитный момент ориентирован вдоль оси OZ (угол $\varphi = 0$). Это фазовое состояние назовем легкоосной ЛО фазой.

2. Состояние, когда вектор магнитный момент ориентирован в плоскости, ортогональной оси OZ (в плоскости XOY , угол $\varphi = \frac{\pi}{2}$). Эту фазу назовем легкоплоскостной ЛП фазой.

3. Угловая УФ фаза, в которой равновесный угол ориентации вектора намагниченности определяется выражением

$$\sin^2 \varphi = \frac{3B_2^0 + 20B_4^0}{35B_4^0}, \quad 3B_2^0 + 20B_4^0 < 0. \quad (4.11)$$

Из анализа плотности свободной энергии можно легко определить линии фазовых переходов из легкоосной фазы в угловую: $3B_2^0 + 20B_4^0 = 0$ и из легкоплоскостной в угловую фазу: $B_2^0 - 5B_4^0 = 0$.

В случае, когда $B_4^0 > 0$, угловая фаза будет не реализоваться и переход между легкоплоскостным и легкоосным состояниями становится фазовым переходом I рода [224]. Из равенства свободных энергий в легкоосной и легкоплоскостной фазах можно найти линию фазового перехода «легкоосная — легкоплоскостная фаза»:

$$6B_2^0 + 5B_4^0 = 0$$

Полученные результаты для случая малой анизотропии позволяют построить фазовую диаграмму (рис.4.1), которая представлена вставкой на диаграмме (рис. 4.2). Угловая фаза устойчива при $5B_4^0 < B_2^0$ и $20B_4^0 < -3B_2^0$; легкоосная фаза устойчива при $20B_4^0 > -3B_2^0$ и $5B_4^0 > -6B_2^0$; легкоплоскостная фаза устойчива при $5B_4^0 > B_2^0$ и $5B_4^0 < -6B_2^0$. В рассмотренном случае фазовые переходы связаны с поворотом вектора намагниченности.

Отметим, что полученные нами результаты полностью соответствуют результатам [224], полученным для гексагонального кристалла с энергией магнитной анизотропии вида

$$U_a = K_1 \sin^2 \varphi + K_2 \sin^4 \varphi.$$

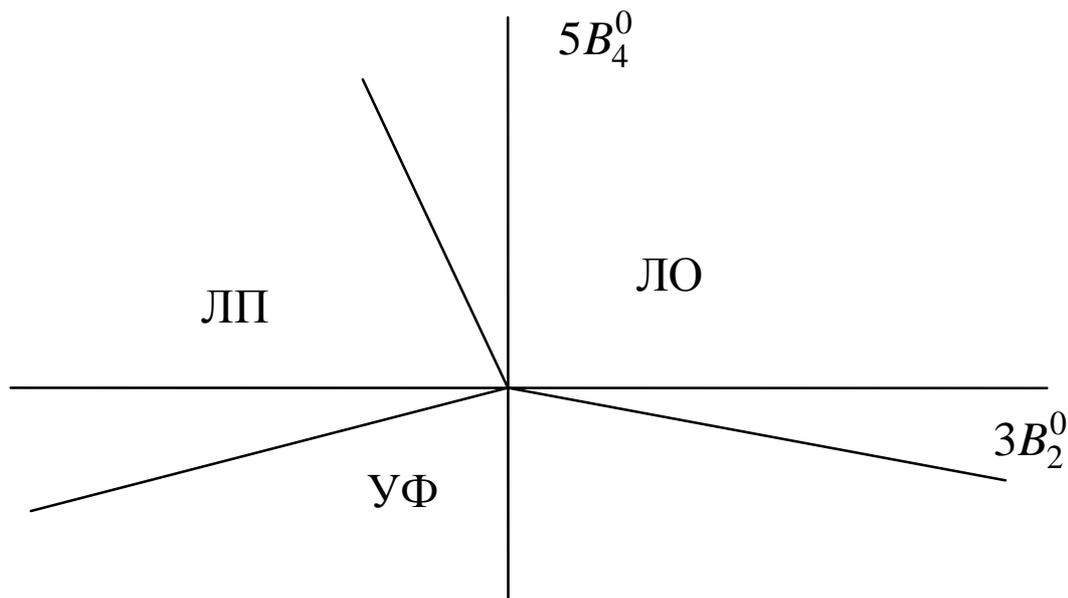


Рис. 4.1. Фазовая диаграмма ферромагнетика в случае малых констант анизотропии.

4.1.2. Спектры возбуждений и фазовые состояния в ферромагнетике с учетом немалой одноионной анизотропии.

Рассмотрим теперь более интересную ситуацию, предполагая, что константы одноионной анизотропии превосходят константы обменного взаимодействия $B_i^0 \gg J_0, K_0$. При этом в системе ярко проявляются квантовые эффекты: во-первых, эффект квантового сокращения спина, при котором намагниченность уменьшается по модулю на узле [94,95], во-вторых, в системе возможна реализация квадрупольных фаз, характеризуемых тензорными параметрами порядка q_2^t [14,28]. Как и ранее, считаем температуры низкими.

Как уже отмечалось выше, учет квантовых эффектов требует точного учета одноионной анизотропией, который можно провести в терминах операторов Хаббарда. Эти операторы строятся на базисе собственных функций

одноузельного гамильтониана (4.8). Для диагонализации этого гамильтониана используем метод унитарных преобразований для операторов Хаббарда [232]:

$$U_{mn}^{\alpha} = \exp(\alpha X^{nm} - \alpha^* X^{mn}), \quad (4.12)$$

где $\alpha = |\alpha| \exp(i\mu)$ – параметр унитарного преобразования. Учитывая коммутационные соотношения (4.7), определим законы преобразований для операторов Хаббарда при унитарном повороте (4.12):

$$X^{pq} \rightarrow U(\alpha, \beta, \gamma, \delta) X^{pq} U^{\dagger}(\alpha, \beta, \gamma, \delta) = X^{pq}(\alpha, \beta, \gamma, \delta).$$

оператор унитарного преобразования в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} U(\alpha, \beta, \gamma, \delta) &= U_{1-1}(\delta) U_{-20}(\gamma) U_{20}(\beta) U_{2-2}(\alpha), \\ U_{ij}(\varphi) &= 1 - (1 - \cos \varphi)(X^{ii} + X^{jj}) + \sin \varphi(X^{ij} - X^{ji}), \\ \varphi &= \alpha, \beta, \gamma, \delta. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Для диагонализации одноионного гамильтониана (4.8) проведем унитарные преобразования (4.12-4.13) и потребуем, чтобы недиагональные матричные элементы $V_{pq}(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ обратились в нуль. Это условие позволяет получить систему уравнений относительно параметров унитарных преобразований $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ решение которой позволяет определить зависимость «углов поворотов» системы от констант одноионной анизотропией и обменных взаимодействий.

Собственные векторы и собственные значения одноионного гамильтониана (4.8) определяются соотношениями

$$\begin{aligned} |\psi_{-2}\rangle &= b|2\rangle - \cos \beta \sin \gamma |0\rangle + a|-2\rangle, \\ |\psi_{-1}\rangle &= -\sin \delta |1\rangle + \cos \delta |-1\rangle, \\ |\psi_0\rangle &= -c|2\rangle + \cos \beta \cos \gamma |0\rangle + d|-2\rangle, \\ |\psi_1\rangle &= \cos \delta |1\rangle + \sin \delta |-1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \cos \alpha \cos \beta |2\rangle + \sin \beta |0\rangle + \sin \alpha \cos \beta |-2\rangle, \end{aligned} \quad (4.14)$$

где

$$\begin{aligned}
a &= \cos \alpha \cos \gamma + \sin \alpha \sin \beta \sin \gamma, \\
b &= \cos \alpha \sin \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma, \\
c &= \cos \alpha \sin \beta \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma, \\
d &= \cos \alpha \sin \gamma - \sin \alpha \sin \beta \cos \gamma.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_2 &= E_2 \cos^2 \alpha \cos^2 \beta + E_0 \sin^2 \beta + E_{-2} \sin^2 \alpha \cos^2 \beta + \\
&+ (V_{20} \cos \alpha + V_{0-2} \sin \alpha) \sin 2\beta + V_{2-2} \sin 2\alpha \cos^2 \beta;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_0 &= E_2 c^2 + E_0 \cos^2 \beta \cos^2 \gamma + E_{-2} d^2 + \\
&+ 2(V_{0-2} d - V_{20} c) \cos \beta \cos \gamma - 2V_{2-2} cd;
\end{aligned} \tag{4.15}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{-2} &= E_2 b^2 + E_0 \cos^2 \beta \sin^2 \gamma + E_{-2} a^2 - \\
&- 2(V_{0-2} a + V_{20} b) \cos \beta \sin \gamma + 2V_{2-2} ab;
\end{aligned}$$

$$\tilde{E}_1 = E_1 \cos^2 \delta + E_{-1} \sin^2 \delta + V_{1-1} \sin 2\delta;$$

$$\tilde{E}_{-1} = E_1 \sin^2 \delta + E_{-1} \cos^2 \delta - V_{1-1} \sin 2\delta.$$

Вид E_M определяются выражениями (4.9). В общем случае явный вид параметров системы достаточно сложен. Однако при температурах близких к нулю наибольший вклад вносит уровень энергии основного состояния, что позволяет получить выражения для параметров порядка системы. Из выражений (4.9) и (4.15) следует, что в рассматриваемом случае низжайшим энергетическим уровнем является уровень E_2 . При этом основное состояние магнитоактивного иона описывается собственным вектором $|\psi_2\rangle$:

$$|\psi_2\rangle = \cos \alpha \cos \beta |2\rangle + \sin \beta |0\rangle + \sin \alpha \cos \beta |-2\rangle.$$

Параметры порядка системы в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned}
\langle S^z \rangle &= 2 \cos 2\alpha \cos^2 \beta, q_2^0 = 6 \cos 2\beta, \\
q_2^2 &= \sqrt{6} \sin 2\beta (\sin \alpha + \cos \alpha).
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Из выражений (4.16) следует, что в случае преобладающего гейзенберговского обмена ($J_0 \gg K_0$) в системе реализуются следующие фазовые состояния.

1. Если параметры унитарных преобразований $\alpha = \beta = 0$, то, как следует из (4.16), параметры порядка принимают следующий вид:

$$\langle S^z \rangle = 2, q_2^0 = 6, q_2^2 = 0. \quad (4.17)$$

Эти значения характерны для ферромагнитного упорядочения в системе, причем данный магнитный порядок является легкоосной фазой.

2. При $\beta = \pi/2$ в системе реализуется фаза с квадрупольным упорядочением (KU_0). Параметры порядка системы в этой фазе имеют вид

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = -6, q_2^2 = 0. \quad (4.18)$$

В случае преобладающего биквадратичного обмена ($K_0 \gg J_0$) магнитные фазы становятся неустойчивыми и в системе устойчивыми являются квадрупольные фазы. В случае $\alpha = \pi/4$ и $\beta = 0$ магнетик переходит в KU_1 квадрупольное состояние, в котором параметры порядка которой имеют вид

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 6, q_2^2 = 0. \quad (4.19)$$

Для построения фазовой диаграммы необходимо определить линии фазовых переходов. Наиболее просто это сделать из исследования спектра возбуждения. Спектр элементарных возбуждений данной системы можно найти из полюсов функции Грина [287]:

$$G^{\alpha\alpha'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \hat{T} X_n^\alpha(\tau) X_{n'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где \hat{T} – оператор Вика, $X_n^\alpha(\tau)$ – оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении; усреднение ведется с полным гамильтонианом.

Дисперсионное уравнение, определяющее спектры элементарных возбуждений, аналогично уравнению Ларкина, и его подробный вывод приведен в [223]. Отметим, что поскольку одноузельные корреляторы нами учитывались точно, дисперсионное уравнение справедливо как при произвольных значениях констант одноионной анизотропии, так и при произвольном соотношении констант обменных взаимодействий. Для исследования спектральных свойств магнетика в окрестности фазовых

переходов ограничимся лишь анализом решений дисперсионного уравнения в соответствующих фазах.

Проанализируем дисперсионное уравнение в случае преобладающего гейзенберговского обменного взаимодействия ($J_0 > K_0$).

Предположим, что параметры системы таковы, что в магнетике реализуется ЛО фаза, так что параметры порядка определяются соотношениями (4.17).

С учетом этого, спектры элементарных возбуждений в ЛО фазе имеют вид

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k) &= 6\gamma k^2 + 4(J_0 + K_0) + 12B_2^0 - 60B_4^0; \\ \varepsilon_2(k) &= 2\alpha k^2 + 9B_2^0 + 60B_4^0,\end{aligned}\tag{4.20}$$

где $\alpha = J_0 R_0^2$, $\gamma = K_0 \tilde{R}_0^2$, а R_0, \tilde{R}_0 – радиусы гейзенберговского и биквадратичного обменных взаимодействий соответственно.

Аналогично в КУ₀ фазе с учетом (4.18), спектры магнонов имеют вид

$$\begin{aligned}\varepsilon_3(k) &= 3\sqrt{(\gamma k^2 - B_2^0 + 40B_4^0)(2\alpha k^2 + 2(K_0 - J_0) - B_2^0 + 40B_4^0)}; \\ \varepsilon_4(k) &= 12\sqrt{(\gamma k^2 - B_2^0 + 5B_4^0)(K_0 - B_2^0 + 5B_4^0)}.\end{aligned}\tag{4.21}$$

Анализ свободной энергии и спектров возбуждения в ЛО и КУ₀ фазах показывает, что фазовый переход между ними является переходом первого рода. Приравнивая выражения для свободной энергии в ЛО и КУ₀ фазах, можно определить линию фазового перехода: $60B_4^0 - 12B_2^0 - 2J_0 + K_0 = 0$.

Как известно, на линии фазового перехода первого рода спектры элементарных возбуждений не имеют никаких особенностей. Однако на линиях потери устойчивости эти спектры размягчаются. Из выражений для $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_4(k)$ получаем для линий устойчивости ЛО и КУ₀ фаз следующие выражения:

$$3B_2^0 - 15B_4^0 + J_0 + K_0 = 0, \quad B_2^0 - 5B_4^0 = 0.\tag{4.22}$$

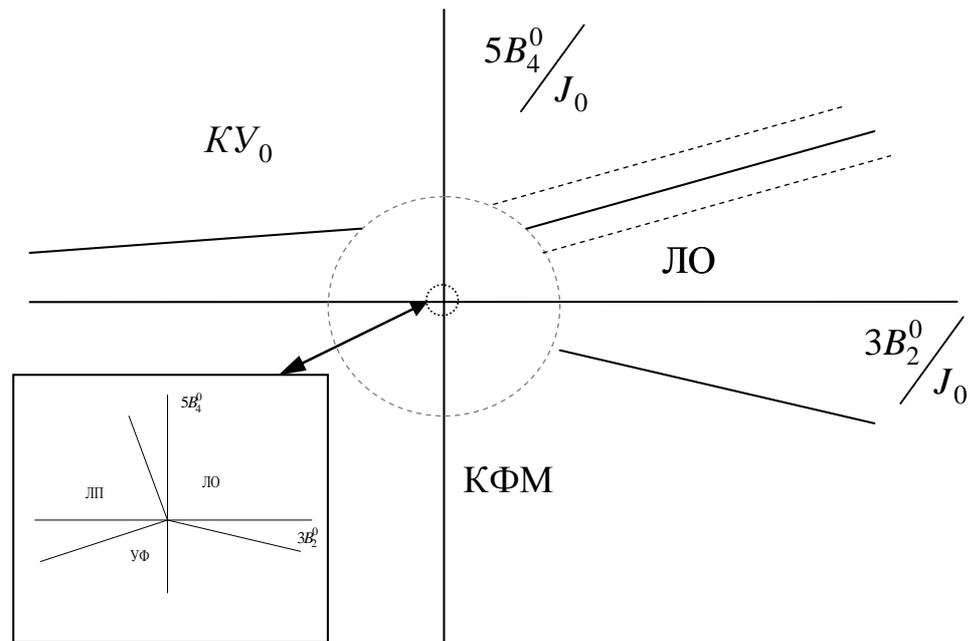


Рис. 4.2. Фазовая диаграмма ферромагнетика в случае больших констант одноионной анизотропии и преобладающего гейзенберговского обмена.

Обращение в нуль энергетической щели в спектре $\varepsilon_2(k)$ позволяет определить линию фазового перехода второго рода ЛО – квадрупольно-ферромагнитная (или угловая) фаза (КФМ):

$$3B_2^0 + 20B_4^0 = 0$$

На линии фазового перехода второго рода KU_0 –КФМ $40B_4^0 - B_2^0 + 2(K_0 - J_0) = 0$ щель в спектре $\varepsilon_3(k)$ обращается в нуль.

Соответствующая фазовая диаграмма приведена на рис. 4.2. Область, ограниченная пунктирной окружностью, соответствует малым значениям констант одноионной анизотропии. Пунктирные линии соответствуют линиям устойчивости фазового перехода первого рода KU_0 –ЛО фаза.

Представляет также интерес рассмотреть случай большого биквадратичного обмена ($K_0 \gg J_0$). Когда преобладающим становится биквадратичный обмен, магнитные фазы с $\langle S^z \rangle \neq 0$ становятся неустойчивыми и энергетически невыгодными, и в системе возможна реализация только

квадрупольных фаз KU_0 и KU_1 . При этом, в отличие от случая преобладающего гейзенберговского обмена, КУ фазы реализуются при произвольных значениях констант одноионной анизотропии.

В KU_1 фазе спектры возбуждений, с учетом параметров порядка (4.19), имеют вид

$$\begin{aligned}\varepsilon_5(k) &= 12\sqrt{(\gamma k^2 + B_2^0 - 5B_4^0)(K_0 + B_2^0 - 5B_4^0)}; \\ \varepsilon_6(k) &= 3\sqrt{(3\gamma k^2 + 3B_2^0 + 20B_4^0)(2\alpha k^2 + 8K_0 - J_0 + 9B_2^0 + 60B_4^0)};\end{aligned}\quad (4.23)$$

На линии фазового перехода KU_1-KU_0 фаз щель в спектре магнонов $\varepsilon_5(k)$ обращается в нуль, а линия этого фазового перехода имеет вид

$$B_2^0 - 5B_4^0 = 0. \quad (4.24)$$

Фазовый переход из KU_0 фазы в KU_1 фазу протекает по магнонной ветви $\varepsilon_4(k)$. Из обращения в нуль щели в спектре $\varepsilon_4(k)$ получаем линию фазового

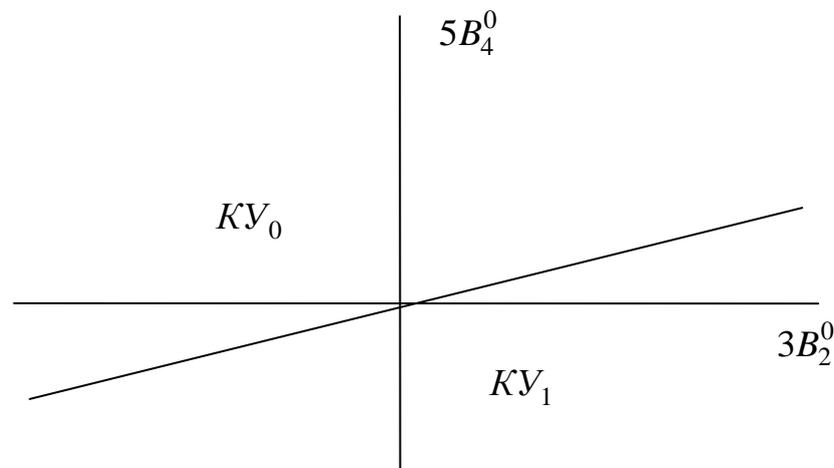


Рис. 4.3. Фазовая диаграмма ферромагнетика с преобладающим биквадратичным обменом

перехода, которая совпадает с (4.24). Это свидетельствует о том, что фазовый переход KU_1-KU_0 фаз является переходом второго рода. Отметим, что рассматриваемый фазовый переход связан с поворотом главных осей тензора квадрупольных моментов. Соответствующая фазовая диаграмма приведена на рис. 4.3.

4.2. Фазовые состояния негейзенберговского магнетика с обменно-анизотропным взаимодействием

4.2.1. Анализ спектров возбуждения

Исследуем негейзенберговский магнетик с обменно-анизотропным взаимодействием и учетом биквадратичного взаимодействия. Гамильтониан такой системы представим в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_{nn'} \left[S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y + \Delta S_n^z S_{n'}^z \right] - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} K_{nn'} \left[\frac{\Delta}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy} + \Delta \left(O_{2n}^{xz} O_{2n'}^{xz} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz} \right) \right] + \Delta \beta \sum_n \left(S_n^z \right)^2. \quad (4.25)$$

В гамильтониане (4.25) параметр анизотропии Δ характеризует наличие анизотропии обменного взаимодействия. Параметр Δ находится в интервале от нуля до единицы.

Одноионная анизотропия рассматривается типа легкой плоскости (так как константа анизотропии $\beta > 0$) Базисной плоскостью является плоскость ХОУ. В случае, если параметр обменной анизотропии положить равным нулю $\Delta=0$, то обменный гамильтониан будет соответствовать изотропной ХУ-модели с учетом биквадратичного обменного взаимодействия. В изотропном случае, т.е. если параметр обменной анизотропии равен единице $\Delta=1$, то гамильтониан рассматриваемой системы (4.25) будет соответствовать изотропному негейзенберговскому магнетику с учетом биквадратичного обмена и легкоплоскостной одноионной анизотропией.

Также можно отметить, что в изотропном случае слагаемое пропорциональное константе биквадратичного обмена при $\Delta=1$ принимает следующий вид:

$$-\frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} K_{mm'} \left(\vec{S}_m, \vec{S}_{m'} \right)^2. \quad (4.26)$$

Здесь будет исследоваться случай, когда значение спина магнитного иона $S=1$, при том, что предлагаемый подход применим и для систем со значением спина $S > 1$.

Предполагаем, что магнитный момент ориентирован в базисной плоскости XOY , так как рассматривается легкоплоскостная одноионная анизотропия. Для определенности можно выбрать его направление коллинеарным оси OX .

После выделения стандартным образом в гамильтониане обменного взаимодействия (4.25) среднего поля $\langle S^x \rangle$, связанного с упорядочением спинового момента, а также квадрупольных полей $q_2^t \equiv \langle O_2^t \rangle$, нулевой гамильтониан можно представить в виде:

$$H_0 = -\bar{H}S^x + \zeta(S^z)^2 - B_2^2 O_2^2 - \Delta B_2^0 O_2^0. \quad (4.27)$$

Здесь введены обозначения: $\zeta = \Delta\beta$, $\bar{H} = J_0 \langle S^x \rangle$, $B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2$, $B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0$.

Остальные средние равны нулю.

Операторы Хаббарда определяются на базисе собственных функций оператора S^x . Базисы собственных векторов оператора S^z и оператора S^x связаны преобразованием

$$|\pm\tilde{1}\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{2}|-1\rangle, \quad |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle). \quad (4.28)$$

Тогда одноузельный гамильтониан (4.27) в представлении операторов Хаббарда можно представить в виде:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k H^k + V_{1-1} (X^{1-1} + X^{-11}), \quad (4.29)$$

где

$$\varepsilon_{\pm 1} = \mp \bar{H} + K_0 (\Delta q_2^0 / 3 - q_2^2) / 2 + \zeta / 2;$$

$$\varepsilon_0 = -K_0 (\Delta q_2^0 / 3 - q_2^2) + \zeta;$$

$$V_{1-1} = K_0 (\Delta q_2^0 + q_2^2) / 2 + \zeta / 2.$$

При помощи u - v преобразований приводим гамильтониан (4.29) к диагональному виду. Спектр собственных значений магнитного иона имеет вид:

$$E_{\pm 1} = \frac{K_0}{2} \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \frac{\zeta}{2} \mp \left(\bar{H} \cos 2\theta + \left(\frac{K_0}{2} (\Delta q_2^0 + q_2^2) - \frac{\zeta}{2} \right) \sin 2\theta \right);$$

$$E_0 = -K_0 \left(\frac{\Delta}{3} q_2^0 - q_2^2 \right) + \zeta.$$
(4.30)

Набор собственных функций:

$$|\Psi_1\rangle = \cos \theta |\tilde{1}\rangle + \sin \theta |-\tilde{1}\rangle, |\Psi_0\rangle = |\tilde{0}\rangle, |\Psi_{-1}\rangle = -\sin \theta |\tilde{1}\rangle + \cos \theta |-\tilde{1}\rangle.$$
(4.31)

Параметр преобразования гамильтониана (4.29) определяется из:

$$2\bar{H} \sin 2\theta = \left(K_0 (\Delta q_2^0 + q_2^2) - \zeta \right) \cos 2\theta.$$
(4.32)

Операторы Хаббарда со спиновыми операторами связаны преобразованием

$$S^+ = (X^{11} - X^{-1-1}) \sin 2\tilde{\theta} + (X^{1-1} + X^{-11}) \cos 2\tilde{\theta} +$$

$$+ (X^{01} - X^{10}) \cos \tilde{\theta} + (X^{-10} - X^{0-1}) \sin \tilde{\theta}, \tilde{\theta} = \theta + \frac{\pi}{4}.$$
(4.33)

В случае низких температур основным уровнем энергии становится уровень E_1 . В этом случае плотность свободной энергии определяется выражением:

$$F \approx E_1.$$

Учет того, что основным уровнем энергии является уровень E_1 , а также зная связь между операторами Хаббарда и компонентами спиновых операторов (4.33) можно определить вид параметров порядка магнетика в общем случае для произвольного значения параметра унитарного поворота – вне зависимости от соотношений между константой анизотропии и обменными интегралами. Анализ свободной энергии позволяет установить фазы реализующиеся в данной системе:

1. ФМ_x – ферромагнитная фаза, характеризующаяся параметрами порядка:

$$\langle S^x \rangle = \cos 2\theta, q_2^2 = \frac{1 + \sin 2\theta}{2} q_2^0 = \frac{3 \sin 2\theta - 1}{2}.$$

2. КУ₁ – квадрупольная фаза, реализующаяся при значении параметра $\theta = \pi/4$. Фаза характеризуется следующими значениями параметров порядка:

$$\langle S^x \rangle = 0, \quad q_2^2 = q_2^0 = 1.$$

3. Ещё одна квадрупольная KY_2 фаза будет устойчива в случае $\theta = -\pi/4$. В этом случае параметры порядка в данной фазе имеют следующий вид:

$$\langle S^x \rangle = q_2^2 = 0, \quad q_2^0 = -2.$$

Перейдем к исследованию спектра возбуждения магнетика находящегося в ферромагнитной фазе. В окрестности температуры близкой к нулю среднее значение спина на одном узле стремится к насыщенному значению, т.е. $\langle S \rangle = \cos 2\theta \rightarrow 1$. Средние от квадратов компонент операторов спина равны:

$$\langle (S^x)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1/2 \quad (4.34)$$

Из уравнения (4.32), определяющего значение параметра θ в ФМ_x-фазе, и условие (4.34) легко определить соотношение на материальные константы устойчивости данной фазы:

$$J - \frac{K}{4}(1 + 3\Delta) > 0. \quad (4.35)$$

Следовательно, ферромагнитное состояние будет устойчиво в случае, когда константы обменного взаимодействия удовлетворяют условию (4.35).

Исследуем спектр элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе.

При произвольном значении параметра спектры магнонов (в длинноволновом пределе) имеют вид:

$$\varepsilon_1^2(k) = 2\Omega_{11}(k)\Omega_{12}(k); \quad \varepsilon_2^2(k) = \Omega_{21}(k)\Omega_{22}(k), \quad (4.36)$$

где $\Omega_{11}(k) = J_0 - \Delta K_0 + \Delta\gamma k^2$,

$$\Omega_{12}(k) = \left(2J - \frac{K}{2}(1 + 3\Delta) \right) \cos 2\theta + \left(\frac{1 + 3\Delta}{2} \gamma k^2 \cos^2 2\theta + 2\alpha k^2 \sin^2 2\theta \right),$$

$$\Omega_{21}(k) = \left(\alpha k^2 (1 + \sin 2\theta) + \gamma k^2 (1 - \sin 2\theta) \right) \Delta + (1 - \Delta) \left(J + 3K/4 \right) - \zeta/2 - \left(\Delta J - (3 + \Delta)K/4 \right) \sin 2\theta,$$

$$\Omega_{22}(k) = \alpha k^2 (1 - \sin 2\theta) + \gamma k^2 (1 + \sin 2\theta) - (1 - \Delta)K/4 - \zeta/2 - \left(\Delta J - (3 + \Delta)K/4 \right) \sin 2\theta,$$

Мягкой модой в ферромагнитном состоянии, как следует из вида спектра возбудений, становится первая ветвь, щель в которой обращается в ноль при условиях:

$$J_0^{(1)} = (1 + \Delta)K_0/2 - \zeta/2; \quad (4.37)$$

$$J_0^{(2)} = \Delta K_0 + \zeta/2. \quad (4.38)$$

Как известно, щель в спектре возбудений обращается в ноль или на линии неустойчивости фазы, и тогда переход из ферромагнитной фазы является фазовым переходом I рода; или на линии фазового перехода – в этом случае переход II рода. Следовательно, переход в квадрупольные фазы происходит на линиях (4.37) и (4.38).

Исследуем поведение спектра возбудений в случаях граничных значений параметра Δ , т.е. при $\Delta=0$ или $\Delta=1$.

В случае $\Delta=0$ одноионная анизотропия в рассматриваемой системе равна нулю и гамильтониан (4.25) становится изотропным в плоскости обменного взаимодействия. В случае равенства нулю константы биквадратичного обмена K_0 , гамильтониан будет соответствовать XY-модели. КУ₂-фаза при $\Delta=0$ – неустойчива. Ветвь $\varepsilon_1(k)$ остается мягкой модой. И тогда в системе остаются устойчивыми ферромагнитная ФМ_x и квадрупольная КУ₁-фаза. Выражение для линии фазового перехода между этими фазами имеет вид:

$$J_0^{(1)} = K_0/2. \quad (4.39)$$

Фазовая диаграмма в случае $\Delta=0$ имеет простой вид и приведена ниже на рис. 4.4.

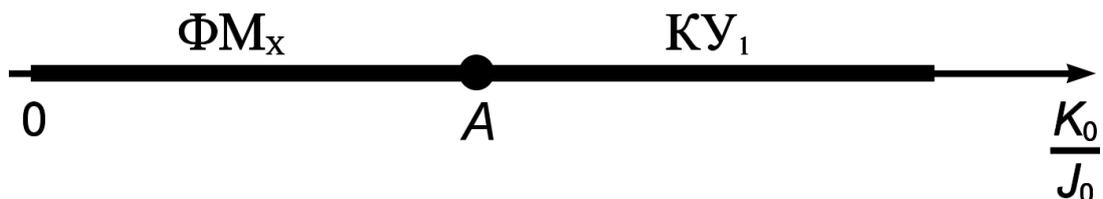


Рис. 4.4. Фазовая диаграмма магнетика при $\Delta=0$. Точка А соответствует фазовому переходу ФМ_x – КУ₁-фазы и определяется из (4.39).

В случае если параметр анизотропии $\Delta=1$ – квадрупольная KY_1 -фаза становится неустойчивой. Выражение для линии перехода ΦM_x – KY_2 -фазы легко определить из выражения (4.38):

$$J_0^{(2)} = K_0 + \zeta/2 \quad (4.40)$$

Фазовая диаграмма в случае $\Delta=1$ изображена на рис. 4.5.

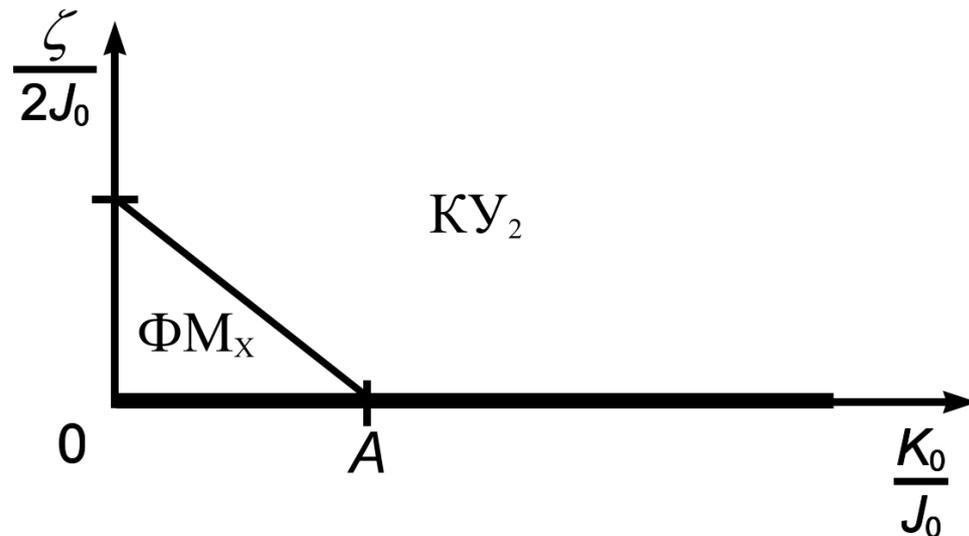


Рис. 4.5. Фазовая диаграмма магнетика при $\Delta=1$. Точка соответствует изотропному случаю $\beta=0$.

В случае $\Delta=1$, то параметр унитарного преобразования определяется выражением

$$\sin 2\theta = -\frac{\beta}{2(J_0 - K_0)}. \quad (4.41)$$

Если же константа одноионной анизотропии равна нулю, как в [22], то $\sin 2\theta = 0$. Следовательно, вид собственных функций нулевого гамильтониана изменится. А значит, изменится связь между операторами Хаббарда и спиновыми операторами.

Перейдем к исследованию спектра возбуждений для случая когда знак в неравенстве (4.35) меняется на противоположный, т.е. $J - K(1 + 3\Delta)/4 < 0$. При заданном соотношении в системе остаются устойчивыми только квадрупольные фазы.

Для начала проведем исследования в квадрупольной КУ₁-фазе. Параметр унитарного преобразования в этой фазе $\theta=\pi/4$. Соответственно, параметры порядка для КУ₁-фазы следующие: $\langle S^x \rangle = 0$, $q_2^0 = q_2^2 = 1$.

Спектры магнонов в длинноволновом пределе определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \left(K(1+\Delta) - 2J + \zeta + 2\alpha k^2 \right) \left(K(1-\Delta) + \zeta + 2\Delta\gamma k^2 \right), \\ \varepsilon_2^2(k) &= 4 \left(K - J\Delta + \Delta\alpha k^2 \right) \gamma k^2. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Переход между КУ₁-ФМ_x- фазами сопровождается обращением в ноль щели спектра $\varepsilon_1(k)$. Щель обращается в ноль на линии:

$$K(1+\Delta) = 2J^{(1)} + \zeta. \quad (4.43)$$

Из сравнения выражений (4.37) и (4.42) можно заметить, что линии неустойчивости ферромагнитной ФМ_x и квадрупольной КУ₁ фаз совпадают. Значит фазовый переход между ферромагнитной и квадрупольной фазами в данном случае является фазовым переходом второго рода.

Перейдем к исследованию спектров возбуждения в КУ₂-фазе. Параметр унитарного преобразования в этой фазе $\theta=-\pi/4$. Параметры порядка в КУ₂-фазе следующие: $\langle S^x \rangle = q_2^2 = 0$, $q_2^0 = -2$. Подставляя значения параметров порядка в выражения для уровней энергии (4.30), можно получить, что значения уровней энергии возбужденных состояний магнитного иона для КУ₂-фазы совпадают, т.е. $E_0 = E_{-1}$. Следовательно спектры в КУ₂-фазе вырождены:

$$\varepsilon_1^2(k) = \varepsilon_2^2(k) = 4 \left[\alpha k^2 - J_0 + \Delta K_0 - \zeta/2 \right] \cdot \left[\Delta\gamma k^2 - \zeta/2 \right]. \quad (4.44)$$

Щель в спектре (4.44) обращается в ноль при условии:

$$J^{(2)} = \Delta K + \frac{\zeta}{2}. \quad (4.45)$$

Это выражение полностью совпадает с выражением (4.38) для линии фазового перехода ФМ_x-КУ₂-фаза. Отсюда можно сделать вывод, что фазовый переход между рассматриваемыми фазами будет I-го рода.

Из равенства свободных энергий в квадрупольных фазах KY_1 и KY_2 можно определить выражение для линии фазового перехода

$$K(1 - \Delta) = 2\zeta. \quad (4.46)$$

Так как на линии (4.46) щели в спектре возбуждений (4.42) и (4.44) не обращаются в ноль, то фазовый переход между квадрупольными фазами KY_1 и KY_2 -фаза– переход I рода.

Из выражений для линий фазовых переходов можно построить фазовую диаграмму рассматриваемого магнетика. Фазовая диаграмма при значении параметра анизотропии $\Delta=0,5$ изображена на рис. 4.6. Как можно увидеть, при стремлении параметра анизотропии к единице, т.е. $\Delta \rightarrow 1$ область устойчивости KY_1 -фазы сужается. В изотропном случае, когда $\Delta = 1$ KY_1 -фаза будет неустойчивой.

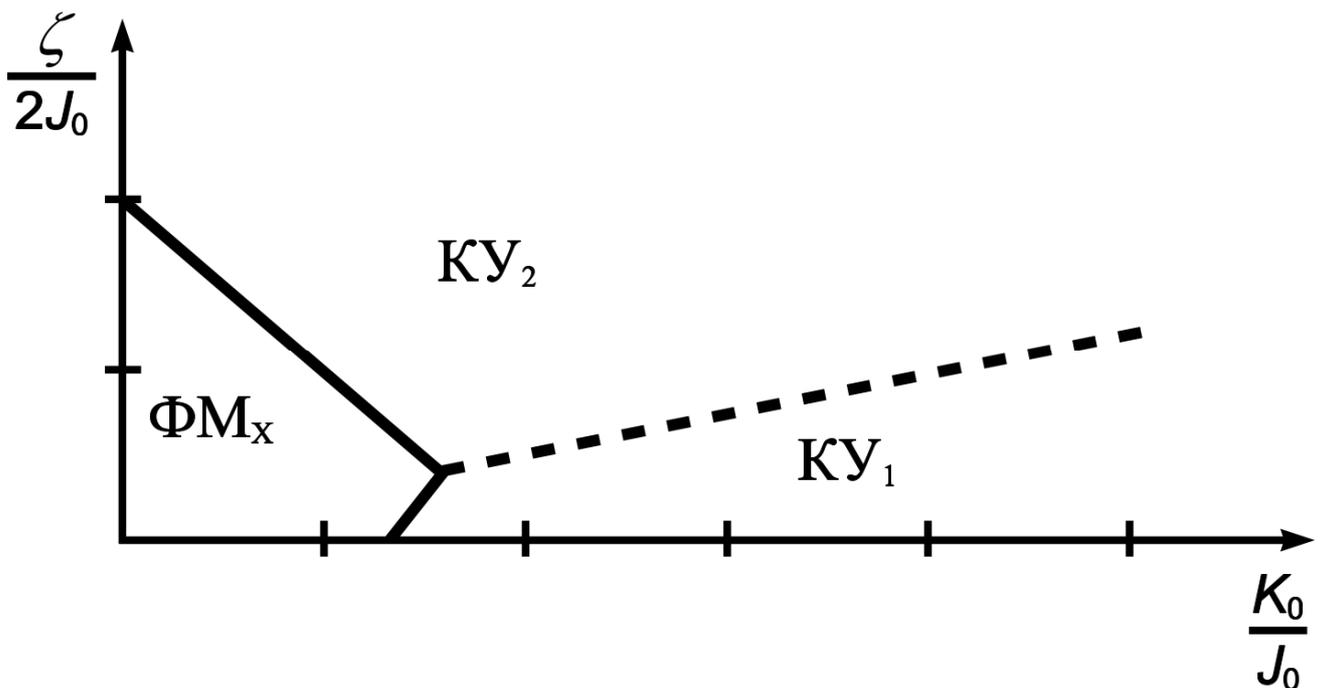


Рис. 4.6. Фазовая диаграмма анизотропного магнетика в случае $\Delta = 0,5$.

4.2.2. Температурные фазовые переходы

Предыдущий подраздел был посвящен исследованию анизотропного негейзенберговского магнетика в окрестности фазовых переходов при $T \rightarrow 0$, происходящих при различных соотношениях констант обмена и анизотропии. Хотя также возможны и температурные фазовые переходы. Хорошо известно,

что температуры переходов определяются в том числе размерностью системы. К стабилизации дальнего магнитного порядка в низкоразмерных системах может привести, например, учет магнитоупругого взаимодействия. Учет энергии взаимодействия упругой и магнитной подсистем приведет появлению связанных магнитоупругих волн. В окрестности линии фазовых переходов размягчается и меняет закон дисперсии квазиакустическая ветвь возбуждения; а квазимагنونная ветвь возбуждения на линии фазового перехода становится щелевой [298,299]. Следствием появления магнитоупругой щели в квазимагنونной ветви возбуждения является сходимость интеграла флуктуаций, а это в свою очередь стабилизирует дальний магнитный порядок в низкоразмерной системе. Добавим в рассмотренную выше задачу магнитоупругую энергию. Гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned}
H = & -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} J_{nn'} \left[S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y + \Delta S_n^z S_{n'}^z \right] - \frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} K_{nn'} \left[\frac{\Delta}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + \right. \\
& + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy} + \Delta \left(O_{2n}^{xz} O_{2n'}^{xz} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz} \right) \left. \right] + \Delta \beta \sum_n \left(S_n^z \right)^2 + \nu \sum_n \left\{ u_{xx}(n) \left(S_n^x \right)^2 + \right. \\
& + u_{yy}(n) \left(S_n^y \right)^2 + u_{xy}(n) O_{2n}^{xy} + \Delta_1 \left[u_{zz}(n) \left(S_n^z \right)^2 + u_{xz}(n) O_{2n}^{xz} + u_{yz}(n) O_{2n}^{yz} \right] \left. \right\} + \quad (4.47) \\
& + \frac{E}{2(1-\sigma^2)} \sum_n \left\{ u_{xx}^2(n) + u_{yy}^2(n) + 2\sigma u_{xx}(n) u_{yy}(n) + 2(1-\sigma) u_{xy}^2(n) + \right. \\
& + \Delta_1 \left[u_{zz}^2(n) + 2\sigma \left(u_{xx}(n) u_{zz}(n) + u_{yy}(n) u_{zz}(n) \right) + \right. \\
& \left. \left. + 2(1-\sigma) \left(u_{xz}^2(n) + u_{yz}^2(n) \right) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Исследования, проведенные в [99] показали, в системе описываемой гамильтонианом (4.47) возникает дальний порядок с упорядочением как дипольных так и квадрупольных параметров порядка. Пусть устойчива ферромагнитная фаза температура $T \approx 0$. При увеличении температуры среднее значение спина на узле начнет уменьшаться и при некотором значении температуры станет равным нулю. Квадрупольный параметр порядка при этом в ноль не обращается. Таким образом, имеет место переход в квадрупольное состояние. Последующий рост температуры ведет к уменьшению значений

квадрупольного параметра порядка. При температуре $T = T_q$ квадрупольный параметр становится равным нулю – система становится парамагнитной. Переходя к представлению бозонных операторов Хаббарда [233] определим значения температур переходов.

Запишем гамильтониан (4.47) в представлении бозе операторов, пренебрегая слагаемыми выше, чем вторая степень от операторов:

$$\mathbf{H}^{(2)} = \sum_k \left[A_k a_k^+ a_k + B_k (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}) + \tilde{A}_k b_k^+ b_k + \tilde{B}_k (b_k^+ b_{-k}^+ + b_k b_{-k}) \right]. \quad (4.48)$$

Здесь введены обозначения

$$A_k = E_0 - E_1 - J_k \left[-(1 - \Delta) \sin 2\theta + 1 + \Delta \right] / 2 - K_k \left[(1 - \Delta) \sin 2\theta + 1 + \Delta \right] / 2;$$

$$B_k = J_k \left[(1 + \Delta) \sin 2\theta + 1 - \Delta \right] / 2;$$

$$\tilde{A}_k = E_{-1} - E_1 - \Delta K_k - (1 + 3\Delta) K_k \cos^2 2\theta / 4 - J_k \sin^2 2\theta;$$

$$\tilde{B}_k = \Delta K_k - (1 + 3\Delta) K_k \cos^2 2\theta / 4 - J_k \sin^2 2\theta,$$

$$K_k = K_0 \gamma_k, \quad J_k = J_0 \gamma_k, \quad \gamma_k = (\cos k_x + \cos k_y) / 2 \quad \text{для двумерного случая}$$

$$\gamma_k = (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) / 3 \quad \text{– для трехмерного случая. Приведем}$$

гамильтониан (4.48) к диагональному виду:

$$\mathbf{H}^{(2)} = \sum_k \varepsilon_\alpha(k) \alpha_k^+ \alpha_k + \sum_k \varepsilon_\beta(k) \beta_k^+ \beta_k. \quad (4.49)$$

Спектры $\varepsilon_{\alpha,\beta}(k)$ имеют вид (4.36).

Температуры перехода ферромагнитная-квадрупольная фазы можно найти из анализ среднего $\langle S^x \rangle$.

$$\langle S^x \rangle = \frac{1}{2N} \sum_n \langle S_n^+ + S_n^- \rangle = \frac{\cos 2\theta}{N} \sum_n \langle 1 - a_n^+ a_n - 2b_n^+ b_n \rangle. \quad (4.50)$$

В выражении (4.50) можно пренебречь вторым слагаемым, поскольку на линии фазового перехода в квадрупольную фазу щель в спектре $\varepsilon_\beta(k)$ обращается в ноль. Тогда выражение (4.50) можно представить в виде:

$$\langle S^x \rangle = \left[1 - \frac{2}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp(\varepsilon_\beta(k)/T) - 1} \right] \cos 2\theta - S(0). \quad (4.51)$$

Число n указывает на размерность системы. $u_k = \sqrt{\frac{\tilde{A}_k + \varepsilon_\beta(k)}{2\varepsilon_\beta(k)}}$,

$v_k = -\frac{\tilde{B}_k}{|\tilde{B}_k|} \sqrt{\frac{\tilde{A}_k - \varepsilon_\beta(k)}{2\varepsilon_\beta(k)}}$ – параметры диагонализации, $S(0)$ – нулевые колебания

$$S(0) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} v_k^2 d^n k. \quad (4.52)$$

Величину температуры фазового перехода T_c из ферромагнитного состояния в квадрупольное состояние определим из обращения интеграла (4.51) в ноль.

На рис. 4.7 приведена зависимость температуры фазового перехода ферромагнитная-квадрупольная фазы от значения параметра анизотропии Δ .

Значения температуры получены при интегрировании выражения (4.51) численными методами для значений констант одноионной анизотропии и билинейного обмена: $\beta = 0,005\Delta J$, $J = 4000$ кЭ [288,289].

Нетрудно заметить, что величина температуры перехода двумерном случае выше, чем в трехмерном при тех же значениях констант обмена и анизотропии. С ростом величины биквадратичного обмена, уменьшается расстояние между кривыми. Анализ также показал, что кривые температур могут пересечься при некоторых значениях констант. Так при $J/K=2$, температура перехода при $\Delta < 0,56$ – больше для d^2 -системы, а при $\Delta > 0,56$ больше для d^3 -системы. Такое необычное поведение сложно понять в рамках проведенного анализа, так как при получении температуры фазового перехода в спектре возбуждения было использовано условие $J \gg K$.

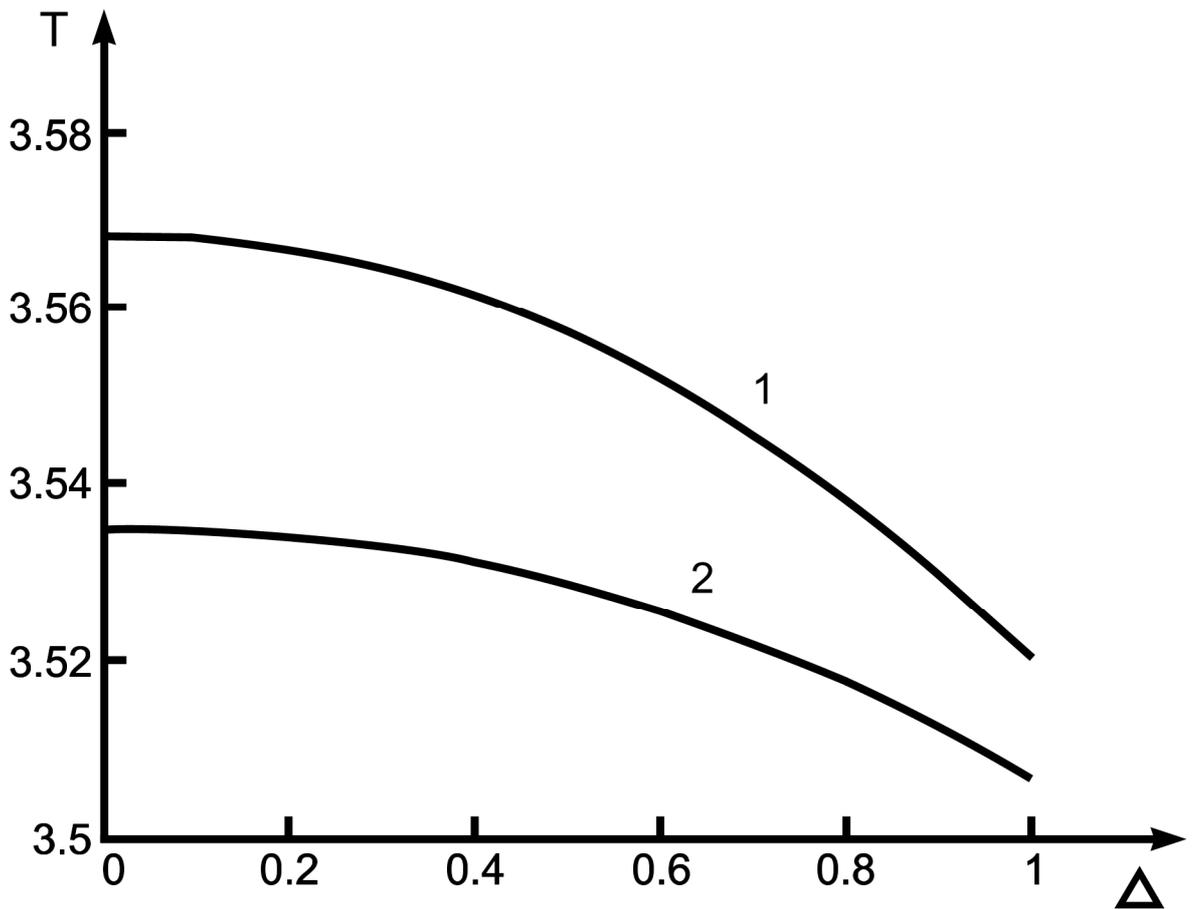


Рис. 4.7. График зависимости температуры перехода ферромагнитная-квадрупольная фазы. Кривая 1 характеризует d^2 -систему, а кривая 2 характеризует d^3 -систему.

Определим температуру фазового перехода из квадрупольного состояния в парамагнитное. Представим гамильтониан (4.25) в квадрупольной фазе через хаббардовские бозе операторы. Вид гамильтониана тот же, что и (4.47). Коэффициенты при операторах определяются выражениями:

$$\begin{aligned} A_k &= E_0 - E_1 - \Delta J_k - K_k; & B_k &= -\Delta J_k + K_k; \\ \tilde{A}_k &= E_{-1} - E_1 - J_k - \Delta K_k; & \tilde{B}_k &= -J_k + \Delta K_k. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Для определения температуры перехода из квадрупольного состояние в парамагнитное запишем квадрупольный параметр:

$$q_2^0 = \frac{1}{N} \sum_n \langle 3(S_n^z)^2 - 2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle 1 - 3b_n^+ b_n \rangle. \quad (4.54)$$

Выражение (4.54) представим в виде:

$$q_2^0 = 1 - \frac{3}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp\left(\frac{\varepsilon_\beta(k)}{T}\right) - 1} - q(0), \quad (4.55)$$

здесь $q(0)$ – нулевые колебания, $\varepsilon_\beta(k)$ – спектр имеет вид (4.42).

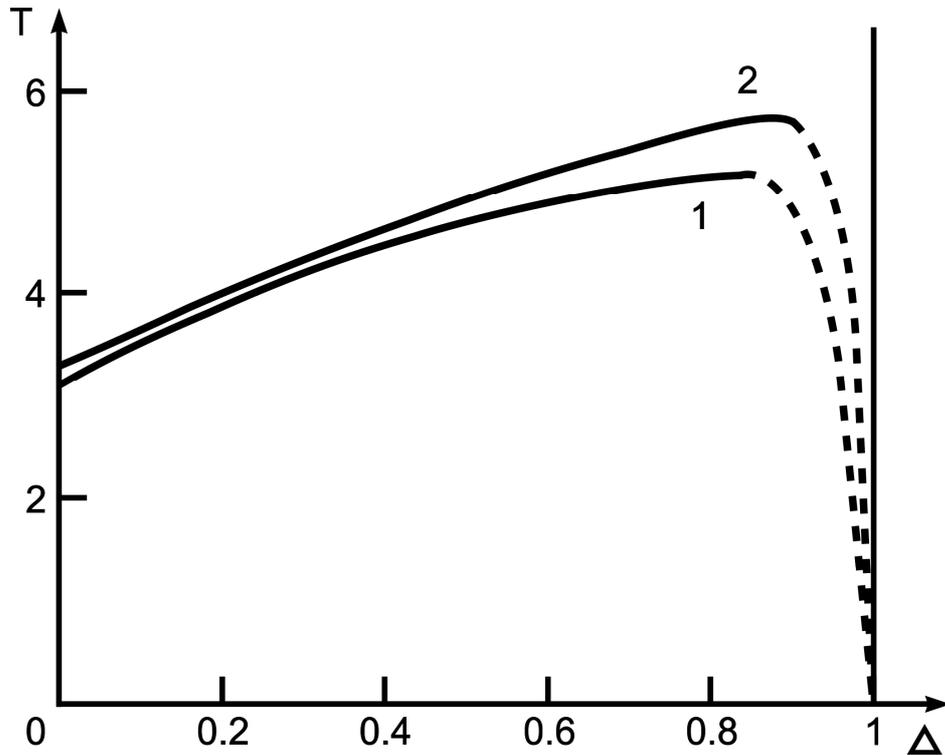


Рис. 4.8. График зависимости температуры перехода квадрупольное КУ₁-парамагнитное состояние. Кривая 1 характеризует d²-случай, а кривая 2 характеризует d³-случай.

Определим температуру T_{q_1} . Для этого численно проинтегрируем выражение (4.55), приравняв к нулю. Зависимости температуры фазового перехода T_{q_1} от значения коэффициента анизотропии Δ изображается в виде графиков приведенных на рис. 4.8. В случае, если значение параметра анизотропии стремится к единице, то кривая температуры обрывается, не достигая значения единицы, по причине того, что квадрупольное КУ₁ состояние является неустойчивым при $\Delta = 1$, а будет реализовываться квадрупольное КУ₂-состояние.

Определим величину температуры фазового перехода T_{q_2} из квадрупольной KU_2 фазы в парамагнитное состояние. Переходя к бозеевскому представлению гамильтониана (4.25) для квадрупольной фазы получаем тот же вид гамильтониана (4.47), но с коэффициентами соответствующими рассматриваемому квадрупольному состоянию KU_2 :

$$\begin{aligned} A_k &= E_0 - E_1 - J_k - \Delta K_k; & B_k &= J_k - \Delta K_k; \\ \tilde{A}_k &= E_{-1} - E_1 - J_k - \Delta K_k; & \tilde{B}_k &= -J_k + \Delta K_k. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Для определения температуры перехода из квадрупольного состояния в парамагнитное запишем квадрупольный параметр:

$$q_2^0 = \frac{1}{N} \sum_n \langle 3(S_n^z)^2 - 2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \langle 6b_n^+ b_n - 2 \rangle. \quad (4.57)$$

Вследствие того, что энергии возбужденных уровней в квадрупольном KU_2 -состоянии равны, т.е. $E_0 = E_{-1}$, то в выражении (4.57) можно приравнять $\langle a_n^+ a_n \rangle = \langle b_n^+ b_n \rangle$. Тогда выражение (4.57) принимает вид:

$$q_2^0 = -2 + \frac{6}{(2\pi)^n} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^n k}{\exp(\varepsilon_\beta(k)/T) - 1} - q(0), \quad (4.58)$$

где \tilde{A}_k определяется (4.56); $\varepsilon_\beta(k)$ – спектр магнонов (4.44) квадрупольного состояния.

На рис. 4.9 приведены графики температуры фазового перехода квадрупольное-парамагнитное состояние от значения коэффициента анизотропии Δ . Температурные кривые получены для значений параметра анизотропии $\Delta \geq 0,4$, вследствие того, что при этом условии реализуется квадрупольная KU_2 -фаза. При обратном условии на коэффициент анизотропии $\Delta < 0,4$ – имеет место только температурный фазовый переход ферромагнитная-квадрупольная KU_1 -фазы. Из графиков температуры фазовых переходов (рис. 4.7 и рис. 4.9) следует, что при значения параметра $\Delta > 0,4$ переход из ферромагнитного состояния в квадрупольное KU_2 состояние может происходить и при значениях $\Delta \sim 1$.

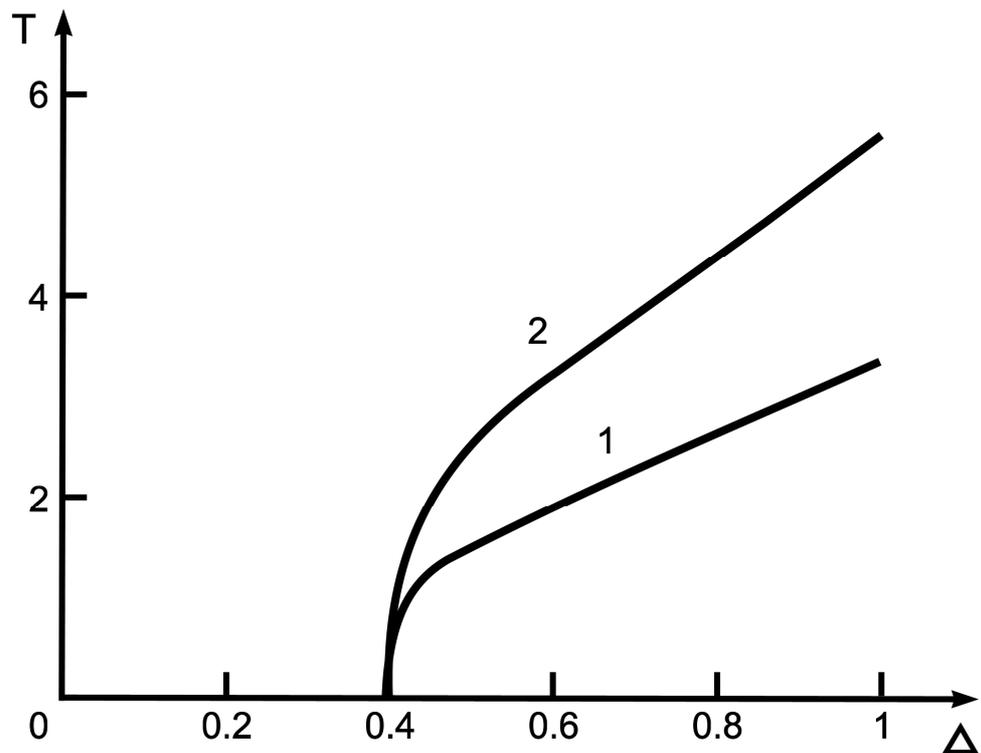


Рис. 4.9. График зависимости температуры перехода квадрупольное KU_2 - парамагнитное состояние. Кривая 1 характеризует d^2 -случай, а кривая 2 характеризует d^3 -случай.

Было проведено сопоставление значений температур перехода из квадрупольного KU_1 состояния в парамагнитное состояние полученных при исследовании данной модели со значением температур, полученных при численном моделировании XY-модели с учетом биквадратичного взаимодействия [290]. Результаты приведены в таблице. 4.1.

Таблица 4.1. Температуры перехода квадрупольная KU_1 -фаза – парамагнитная фаза.

K/J	T_{q1}/J – результаты [290]	T_{q1}/J – расчет по (4.55)
10	11,1	11,33
5	5,625	5,612
3,33	3,88	3,662

Из таб. 4.1 видно хорошее согласие между расчетами по (4.55) и результатами работы [290]. Следует обратить внимание на то, что результаты

могут начать сильно различаться если изменять величины констант билинейного и биквадратичного обменов, оставляя отношение обменов тем же. Вероятно, это расхождение может связано с различием способов расчета температур фазовых переходов. В работе [290] температура фазового перехода определялась из анализа температурных зависимостей магнитной восприимчивости и теплоемкости, которые были получены в результате численного моделирования, используя метод Монте-Карло. Величины температур перехода полученных в данном исследовании определялись из анализа, опирающегося на спектры элементарных возбуждений. На вопрос точности и правильности той или иной методик расчета температур перехода можно ответить при знании количественных значений обменных констант, полученных из реальных экспериментов. Таких экспериментальных данных на сегодняшний день, к сожалению, пока нет. Поэтому при проводимом в данном исследовании расчетах использовались численные оценки обменных интегралов, сделанных из общих идей.

4.3. Влияние внешнего поля на фазовые состояния изингоподобного негейзенберговского ферромагнетика.

4.3.1. Анализ свободной энергии и спектров элементарных возбуждений

Исследования данного подраздела посвящены изучению расширенной модели БЭГ (Блюм, Эмери, Грифитс) [97] с учетом одноионной анизотропными. Данная модель соответствует магнетку с анизотропным обменным взаимодействием. Значение спина магнитного иона полагается равным единице. При таком значении спина учет одноионной анизотропии и биквадратичного обменного взаимодействия приводит изменению свойств основного состояния, а также динамических свойств магнитоупрядоченной системы. В исследуемой магнетике будет включена в рассмотрение одноионная анизотропия типа легкой плоскости с базисной плоскостью – ХОУ. Интегралы констант обменного взаимодействия имеют одноосную анизотропию. Параметр анизотропии рассматривается в интервале $0 \leq \Delta \leq 1$. В случае, когда параметр $\Delta=1$, то обменное взаимодействие является изотропными; в другом крайнем случае $\Delta=0$ можно говорить об изингоподобной системе. Гамильтониан такого магнетика имеет вид:

$$H = \frac{\beta}{2} \sum_m (S_m^z)^2 - \frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} J_{mm'} \left[S_m^z S_{m'}^z + (S_m^x S_{m'}^x + S_m^y S_{m'}^y) \Delta \right] - \frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} K_{mm'} \left[S_m^z S_{m'}^z + (S_m^x S_{m'}^x + S_m^y S_{m'}^y) \Delta \right]^2. \quad (4.59)$$

Значения констант обменного взаимодействия рассматриваются положительными – $J, K > 0$, одноионная анизотропия– легкоплоскостная $\beta > 0$.

Исследование системы с модельным гамильтонианом вида (4.59) было проведено в работе [291]. При этом часть результатов, полученных в [291] находятся в противоречии с хорошо исследованными предельным случаям. Выводы, которые сделаны при анализе системы– не очевидны.

Рассматриваемая система в предельном случае $\Delta=1$ изучалась в работе [292], что позволит провести сравнение результатов данного исследования с известными результатами.

Наиболее подходящим методом описания рассматриваемого магнетика является формализм операторов Хаббарда [221,222]. Прежде, чем переходить к представлению операторов Хаббарда необходимо выделить билинейное по операторам спина слагаемое из биквадратичного слагаемого. Так как обменное взаимодействие исследуемой системы не является изотропным и вращательная инвариантность нарушена, то для выполнения такой операции следует внести коррективы. Обычно при выделении билинейного слагаемого используются операторы Стивенса, которые представляют собой генераторы группы $SO(n)$ [94,95]. Для гамильтониана (4.59) не все операторы Стивенса O_j^i будут генераторами группы вращений. Введем новые операторы спина, которые со старыми связаны преобразованиями:

$$\tilde{S}^x = \sqrt{\Delta} S^x, \quad \tilde{S}^y = \sqrt{\Delta} S^y, \quad \tilde{S}^z = S^z, \quad (\tilde{S}^x)^2 + (\tilde{S}^y)^2 + (\tilde{S}^z)^2 = M^2. \quad (4.60)$$

В этом представлении операторы O_j^i становятся генераторами группы вращений.

Выделив билинейную часть, можно представить гамильтониан (4.59) в следующем виде:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} \left[\left(J_{mm'} - \frac{\Delta^2}{2} K_{mm'} \right) \tilde{S}_m^z \tilde{S}_{m'}^z + \left(J_{mm'} - \frac{K_{mm'}}{2} \right) (\tilde{S}_m^x \tilde{S}_{m'}^x + \tilde{S}_m^y \tilde{S}_{m'}^y) \right] - \\ & -\frac{1}{6} \sum_{m \neq m'} K_{mm'} M_m^2 M_{m'}^2 - \frac{1}{4} \sum_{m \neq m'} K_{mm'} \left(\frac{1}{3} \tilde{O}_{2m}^0 \tilde{O}_{2m'}^0 + \sum_t \tilde{O}_{2m}^t \tilde{O}_{2m'}^t \right) + \frac{\beta}{2} \sum_m (\tilde{S}_m^z)^2 \end{aligned} \quad (4.61)$$

Индекс t пробегает значения $t=2,xy,yz,zx$. Операторы Стивенса в новом представлении: $\tilde{O}_2^2 = (\tilde{S}^x)^2 - (\tilde{S}^y)^2$, $\tilde{O}_2^0 = 3(\tilde{S}^z)^2 - M^2$, $\tilde{O}_2^{kl} = [\tilde{S}^k, \tilde{S}^l]_+$ ($k \neq l = x, y, z$).

Следует обратить внимание на то, что применение «модифицированных» операторов (4.60) устраняет проблему появления дополнительного

одноузельного слагаемого вида $\Delta^2 K_0 \sum (S_n^z)^2$ при выделении билинейного слагаемого из биквадратичной части гамильтониана (4.59) в представлении спиновых операторов до преобразования (4.60).

Изменяя значения констант обменных интегралов и одноионной анизотропии можно определить области устойчивости фаз, реализующихся в системе. Магнитный момент системы может совпадать с направлением оси OZ или быть ориентированным в плоскости легкого намагничивания XOY. При определенных условия имеется возможность перехода в квадрупольное состояние, в котором значение среднего спина на узле равно нулю [32,293]. Кроме того, устойчивыми могут быть смешанные т.н. квадрупольно-ферромагнитные состояния. Исследование статических и динамических свойств системы позволит найти условия реализации таких фазовых состояний.

Пусть соотношение материальных параметров магнетика таково, что устойчивым состоянием системы является ферромагнитная фаза, в которой магнитный момент ориентирован вдоль оси OZ. Эту фазу обозначим как ФМ_z.

Выделив стандартным образом в гамильтониане (4.61) среднее поле $\langle \tilde{S}^z \rangle$, связанное с упорядочением спиновых моментов, а также квадрупольные поля $q_2^t \equiv \langle O_2^t \rangle$ запишем нулевой гамильтониан:

$$H_0(n) = \varepsilon_0^z - \bar{H}_z \tilde{S}_n^z - B_2^0 \tilde{O}_{2n}^0 - B_2^2 \tilde{O}_{2n}^2 - B_2^m M_n^2 + (\beta/2) (\tilde{S}_n^z)^2, \quad (4.62)$$

здесь $\varepsilon_0^z = (J_0 - \Delta^2 K_0/2) \langle \tilde{S}^z \rangle^2 / 2 + K_0 \left[(\tilde{q}_2^0)^2 + 3(\tilde{q}_2^2)^2 + 2m^2 \right] / 12$; $\tilde{q}_2^0 = \langle \tilde{O}_2^0 \rangle$, $\tilde{q}_2^2 = \langle \tilde{O}_2^2 \rangle$, $m = \langle M^2 \rangle$; $\bar{H}_z = (J_0 - \Delta^2 K_0/2) \langle \tilde{S}^z \rangle$, $B_2^0 = K_0 \tilde{q}_2^0 / 6$, $B_2^2 = K_0 \tilde{q}_2^2 / 2$; $B_2^m = K_0 m / 3$.

Учет анизотропии биквадратичного обмена, как можно заметить из вида гамильтониана (4.62) привел к трансформации одноионной анизотропии. Появление дополнительного слагаемого одноионной анизотропии пропорционального m^2 связано только с анизотропией обмена высшего порядка.

При этом её величина напрямую связана со значением коэффициента анизотропии Δ , что находится в согласии с результатами работ [16,292,293].

Определим операторы Хаббарда, используя базис собственных функций оператора \tilde{S}^z [221,227]. Собственные значения одноузельного гамильтониана (4.62) определяются выражениями:

$$\begin{aligned} E_0 &= \varepsilon_0^z + 2(B_2^0 - B_2^m)\Delta, \\ E_{\pm 1} &= \varepsilon_0^z - 2B_2^0 - B_2^m + (B_2^0 - B_2^m)\Delta + \beta/2 \mp (\bar{H}_z \cos 2\gamma + B_2^2 \Delta \sin 2\gamma). \end{aligned} \quad (4.63)$$

Набор собственных векторов определяется

$$\Psi_1 = \cos \gamma |1\rangle + \sin \gamma |-1\rangle, \Psi_{-1} = -\sin \gamma |1\rangle + \cos \gamma |-1\rangle, \Psi_0 = |0\rangle. \quad (4.64)$$

Параметр диагонализации определяется уравнением

$$\bar{H}_z \sin 2\gamma = B_2^2 \Delta \cos 2\gamma.$$

Связь между различными представлениями имеет вид

$$S^+ = \sqrt{2}(X^{10} + X^{0-1})\cos \gamma + \sqrt{2}(X^{01} - X^{-10})\sin \gamma \quad (4.65)$$

Вид параметров порядка в ФМ_z-фазе определяется из связи (4.65). При этом учитывая, что основным уровнем энергии при температурах близких к нулю является E_1 :

$$\langle \tilde{S}^z \rangle = \cos 2\gamma, \tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta, \tilde{q}_2^2 = \Delta \sin 2\gamma, m = 1 + \Delta. \quad (4.66)$$

Следует отметить, что параметры (4.66) соответствуют промежуточному квадрупольно-ферромагнитному состоянию, так как значение среднего спина на узле $\langle \tilde{S}^z \rangle = \cos 2\gamma < 1$, т.е. в общем случае не насыщено. Однако как будет выяснено из анализа свободной энергии, что если магнитный момент системы совпадает с направлением оси OZ, то параметров порядка становятся равными: $\langle \tilde{S}^z \rangle = 1, \tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta, \tilde{q}_2^2 = 0, m = 1 + \Delta$. Что соответствует реализации ФМ_z-состояния.

Исследуем поведение спектров возбуждений в реализующихся фазах.

Найдем выражения для спектров возбуждений в ФМ_z-фазе, решая дисперсионное уравнение:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(k) &= (1 - \Delta)J + (1 - \Delta^2)K - \beta/2 + \Delta\alpha k^2, \\ \varepsilon_2(k) &= 2(J - \Delta^2 K) + \Delta^2 \delta k^2.\end{aligned}\tag{4.67}$$

Здесь $\alpha = JR^2$, $\delta = K\tilde{R}^2$, R и \tilde{R} – радиусы обменных взаимодействий.

Анализ спектров (4.67) показал, что ФМ_z-фаза будет являться неустойчивой в магнетике с одноионной анизотропией типа легкой плоскости, т.е. в случае $\beta > 0$, параметр анизотропии $\Delta=1$: энергия спектра $\varepsilon_1(k)$ – отрицательна. В случае изингоподобного магнетика – параметр анизотропии $\Delta=0$ оба спектра (4.67) являются бездисперсионными. Это вполне естественно, так как флуктуации магнитного момента в изинговской модели малы.

В интервале промежуточных значений параметра анизотропии $0 < \Delta < 1$ ФМ_z-фаза реализуется, но при этом теряет устойчивость на линиях фазового перехода при определенных соотношения между константами обменного взаимодействия и одноионной анизотропии. В окрестности линии фазового перехода ветвь $\varepsilon_1(k)$ становится низкочастотной ветвью. На линии

$$\beta_1^* = 2(1 - \Delta)J + 2(1 - \Delta^2)K\tag{4.68}$$

щель в спектре $\varepsilon_1(k)$ обратится в ноль.

Данное выражение определяет границу области устойчивости ФМ_z-состояния. В случае $\beta < \beta_1^*$ – ФМ_z-фаза является устойчивой; в противоположном случае $\beta > \beta_1^*$ – ФМ_z-фаза – неустойчива.

В проведенном выше анализе неявно предполагалось, что константа одноионной анизотропии мала по отношению к величинам констант обмена. Представляет интерес исследовать ситуацию, в которой константа одноионной анизотропии не мала – $\beta > J, K$. Совершенно естественно предположить, что в этом случае, что магнитный момент будет сориентирован в базисной плоскости. Перейдем к анализу такого состояния.

Для определенности свяжем направление магнитный момента с осью ОХ. Выделяя в обменной части гамильтониана (4.61) среднее поле

пропорциональное $\langle \tilde{S}^x \rangle$ и дополнительные поля квадрупольных моментов, одноузельный гамильтониан представим в виде:

$$H_0 = \varepsilon_0^x - \bar{H}_x \tilde{S}^x + (\beta/2)(\tilde{S}^z)^2 - B_2^2 \tilde{O}_2^2 - B_2^0 \tilde{O}_2^0 - B_2^m M^2. \quad (4.69)$$

Здесь $\varepsilon_0^x = \frac{1}{2} \left(J - \frac{K}{2} \right) \langle \tilde{S}^x \rangle^2 + \frac{K}{12} \left[(\tilde{q}_2^0)^2 + 3(\tilde{q}_2^2)^2 + 2m^2 \right]$; $\bar{H}_x = \left(J - \frac{K}{2} \right) \langle \tilde{S}^x \rangle$.

Операторы Хаббарда построим на системе собственных функций оператора \tilde{S}^x (4.28).

Спектр собственных значений одноузельного гамильтониана (4.69) определяется выражениями:

$$E_{\pm 1} = \varepsilon_0^x + \frac{\beta}{4} - B_2^2 \frac{\Delta}{2} - B_2^0 \frac{2-3\Delta}{2} - B_2^m \frac{1+3\Delta}{2} \mp \left[\sqrt{\Delta} \bar{H}_x \cos 2\gamma + \left(\frac{\beta}{4} - B_2^2 \frac{\Delta}{2} - B_2^0 \frac{2+\Delta}{2} - B_2^m \frac{1-\Delta}{2} \right) \sin 2\gamma \right], \quad (4.70)$$

$$E_0 = \varepsilon_0^x + B_2^2 \Delta - B_2^0 (2-\Delta) - B_2^m (1+\Delta) + \frac{\beta}{2},$$

$$\left(B_2^2 \frac{\Delta}{2} + B_2^0 \frac{2+\Delta}{2} + B_2^m \frac{1-\Delta}{2} - \frac{\beta}{4} \right) \cos 2\gamma = \sqrt{\Delta} \bar{H}_x \sin 2\gamma$$

Вид собственных векторов одноузельного гамильтониана (4.69) совпадает с (4.31). Спиновые операторы связаны с операторами Хаббарда выражением (4.33).

Основным уровнем энергии при температурах близких к нулю становится E_1 . Параметры порядка, характеризующие данное состояние определяются как:

$$\langle \tilde{S}^x \rangle = \sqrt{\Delta} \cos 2\gamma, \quad \tilde{q}_2^0 = 1 - \frac{3\Delta}{2} + \sin 2\gamma \left(1 + \frac{\Delta}{2} \right), \quad (4.71)$$

$$\tilde{q}_2^2 = \frac{\Delta}{2} (1 + \sin 2\gamma), \quad m = \frac{1+3\Delta}{2} + \frac{1-\Delta}{2} \sin 2\gamma.$$

Из исследования свободной энергии следует, что значение среднего спина не достигает насыщенного $\langle \tilde{S}^x \rangle < 1$. Такое состояние назовем квадрупольно-ферромагнитной фазой КФМ_x-фаза.

Спектры возбуждений в КФМ_x-фазе определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \left[E_{10} + \left(J_k - K_k \frac{\Delta(1+\Delta)}{2} \right) \sin 2\gamma + J_k + K_k \frac{\Delta(1-\Delta)}{2} \right] \cdot \\ &\cdot \left[E_{10} - \Delta \left(J_k - K_k \frac{1+\Delta}{2} \right) \sin 2\gamma + \Delta \left(J_k - K_k \frac{1-\Delta}{2} \right) \right], \\ \varepsilon_2^2(k) &= \left(E_{1-1} + \left(2J_k \Delta - K_k \frac{(1-\Delta)^2}{2} \right) \sin^2 2\gamma + K_k \frac{1+\Delta^2}{2} \right) (E_{1-1} + \Delta K_k). \end{aligned} \quad (4.72)$$

Здесь $E_{10(-1)} = E_1 - E_{0(-1)}$ разность уровней энергий (4.70).

Как видно из выражений (4.70-4.71) в случае, когда $\Delta = 0$ КФМ_x-фаза не реализуется. В случае отличного от нуля значения параметра анизотропии $\Delta \neq 0$, В окрестности линии фазового перехода размягчается ветвь $\varepsilon_2(k)$. На линии фазового перехода

$$\beta_2^* = 4\Delta J_0 - 2\Delta(1+\Delta)K_0 \quad (4.73)$$

щель спектре $\varepsilon_2(k)$ обратится в ноль.

По причине того, что на линии фазового перехода размягчается высокочастотная ветвь возбуждения $\varepsilon_2(k)$, то по потеря устойчивости фазы связана не с изменением ориентации вектора магнитного момента, а с эффектом сокращения среднего спина в каждом узле до нуля.

Выражение (4.73) определяет границу области устойчивости КФМ_x-состояния.

Достаточно давно известно [16], что в квадрупольном состоянии средний спин в каждом узле равен нулю. Тогда значение параметра γ в квадрупольных фазах будут :

1. КУ₁-фаза: $\gamma = \pi/4$, параметры порядка $\tilde{q}_2^2 = \Delta$, $\tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta$, $m = 1 + \Delta$.
2. КУ₂-фаза: $\gamma = -\pi/4$, параметры порядка $\tilde{q}_2^2 = 0$, $\tilde{q}_2^0 = -2\Delta$, $m = 2\Delta$.

Перейдем к исследованию спектров возбуждений в квадрупольных состояниях.

Спектр собственных значений магнитного иона в КУ₁-состоянии можно определить из выражений (4.70), подставив соответствующее значение γ :

$$E_1 = \frac{\beta}{2} - \frac{1 + \Delta^2}{2} K, \quad E_0 = \frac{\beta}{2} - \frac{1 - \Delta^2}{2} K, \quad E_{-1} = \frac{1 - \Delta^2}{2} K. \quad (4.74)$$

Спектр возбуждений в КУ₁-состоянии определяется выражениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= \left(\Delta \delta k^2 + K(1 - \Delta) - \frac{\beta}{2} \right) \left(\Delta(2\alpha - \delta)k^2 - \frac{\beta}{2} + K(1 + \Delta) - 2\Delta J \right), \\ \varepsilon_2^2(k) &= \left((2\alpha - \delta \Delta^2)k^2 + 2K\Delta^2 - 2J \right) \Delta^2 \gamma k^2. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Щель в спектре $\varepsilon_1(k)$ становится равной в нулю на линии

$$\beta_3^* = 2(1 - \Delta)K. \quad (4.76)$$

Эта линия определяет границу устойчивости области КУ₁-состояния. В случае $\beta < \beta_3^*$ КУ₁-состояние реализуется; в противоположном случае $\beta > \beta_3^*$ КУ₁-фаза не реализуется. Спектр $\varepsilon_2(k)$ имеет нулевую энергию активации. В случае, когда параметр анизотропии $\Delta=0$ обе ветви спектра (4.74) являются бездисперсионными.

В изотропном случае, т.е. когда параметр анизотропии $\Delta=1$ существование КУ₁-состояния возможно только при $\beta < 0$, что соответствует результатам исследования [292].

Спектр собственных значений магнитного иона в КУ₂-состоянии имеет вид:

$$E_1 = \beta/2 - \Delta^2 K, \quad E_0 = -2\Delta^2 K, \quad E_{-1} = \beta/2 - \Delta^2 K. \quad (4.77)$$

Основным уровнем энергии КУ₂-состоянии становится уровень E_0 , т.е. имеет место инверсия уровней энергии спектра магнитного иона, а значения уровней энергии возбужденных уровней совпадают. И как следствие – спектр магнонов в КУ₂-состоянии вырожден:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^2(k) &= \left(\frac{\beta}{2} - K\Delta(1 - \Delta) + \Delta\delta k^2 \right) \cdot \\ &\cdot \left(\frac{\beta}{2} + K\Delta(1 + \Delta) - 2\Delta J + \Delta(2\alpha - \delta)k^2 \right). \end{aligned} \quad (4.78)$$

Щель в спектре (4.78) становится равной нулю на линии

$$\beta_4^* = 4\Delta J - 2\Delta(1 + \Delta)K. \quad (4.79)$$

Линия определяемая выражением (4.79) соответствует границе устойчивости области КУ₂-состояния. В случае $\beta > \beta_4^*$ КУ₂- состояние реализуется; в противоположном случае $\beta < \beta_4^*$ КУ₂-фаза не реализуется. Область устойчивости КУ₂-состояния существенно зависит от значения параметра анизотропии: необходимое условие существования фазы:

$$\Delta < 2J/K - 1. \quad (4.80)$$

При этом условии $\beta_4^* > 0$. Также легко увидеть, что если $K > 2J$, то КУ₂-фаза не реализуется.

Из исследования спектров возбуждения можно найти условия неустойчивости фаз. А из анализа плотности свободной энергии можно установить тип фазового перехода.

Выражения для свободных энергий в КФМ_x- и ФМ_z-фазах при $T \rightarrow 0$ имеют вид:

$$F_x = \frac{\beta - (1 - \Delta^2)K}{4} \sin 2\gamma + \frac{\Delta J - (1 + \Delta)^2 K/4}{2} \sin^2 2\gamma, \quad (4.81)$$

$$F_z = \frac{\beta - K(1 + \Delta^2)}{2} - \frac{J - K\Delta^2}{2} \cos^2 2\gamma$$

Исследование F_z определяет условие устойчивости ФМ_z-фазы

$$J - \Delta^2 K > 0. \quad (4.82)$$

Параметры порядка фазы: $\langle \tilde{S}^z \rangle = 1$, $m = 1 + \Delta$, $\tilde{q}_2^2 = 0$, $\tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta$.

При обратном неравенстве

$$J - \Delta^2 K < 0, \quad (4.83)$$

реализуется КУ₁-состояние характеризующаяся следующими параметрами:

$$\langle \tilde{S}^x \rangle = 0, m = 1 + \Delta, \tilde{q}_2^2 = \Delta, \tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta.$$

Из анализа F_x выражения (4.81) определяются два условия. Пусть

$$\Delta J - (1 + \Delta)^2 K/4 > 0 \quad (4.84)$$

1. В случае, если $\gamma \neq \pm\pi/4$, реализуется смешанная КФМ_x-фаза характеризующаяся параметрами порядка определяемые (4.71).
2. Если $\gamma = \pm\pi/4$, то магнетик находится либо в состоянии КУ₁ определяемой параметрами $\tilde{q}_2^2 = \Delta$, $\tilde{q}_2^0 = 2 - \Delta$, $m = 1 + \Delta$, либо в состоянии КУ₂ с параметрами порядка $\tilde{q}_2^2 = 0$, $\tilde{q}_2^0 = -2\Delta$, $m = 2\Delta$. Однако КУ₁ состояние реализуется как уже говорилось выше в случае выполнения неравенства (4.83), но это находится в противоречии с (4.84). Следовательно КУ₁-состояние не реализуется.

В противоположном неравенству (4.84) случае

$$\Delta J - (1 + \Delta)^2 K/4 < 0, \quad (4.85)$$

КФМ_x-фаза не реализуется, устойчивой будет лишь КУ₂-фаза.

Полученные условия устойчивости фаз позволяют построить фазовую диаграмму (рис. 4.10). КФМ_x-фаза реализуется в области над линией 1. КУ₂-фаза устойчива в секторе под линией 2. ФМ_z-состояние существует в области между линиями 1 и 2.

Кроме того из фазовой диаграммы (рис. 4.10) можно понять, какие фазы будут устойчивыми в крайних значениях параметра анизотропии:

1. Если $\Delta=0$ – изингоподобный магнетик при учете биквадратичного взаимодействия. Из рис. 4.10 следует, что во всей области значений параметра $K/4J$ устойчивой остается лишь ФМ_z-фаза. КФМ_x-фаза в данном случае является неустойчивой. Это также следует из исследования спектра возбуждений.

2. В другом крайнем случае $\Delta=1$ обменное взаимодействие изотропно. Теперь устойчивыми являются КФМ_x- и КУ₂-фазы. Из рис. 4.10 видно, что область между линиями 1 и 2 при $\Delta=1$ исчезает, что свидетельствует указывает о неустойчивости ФМ_z-состояния. К таким же выводам приводит исследование спектров в ФМ_z-фазе (4.67) и согласуется с результатами [292].

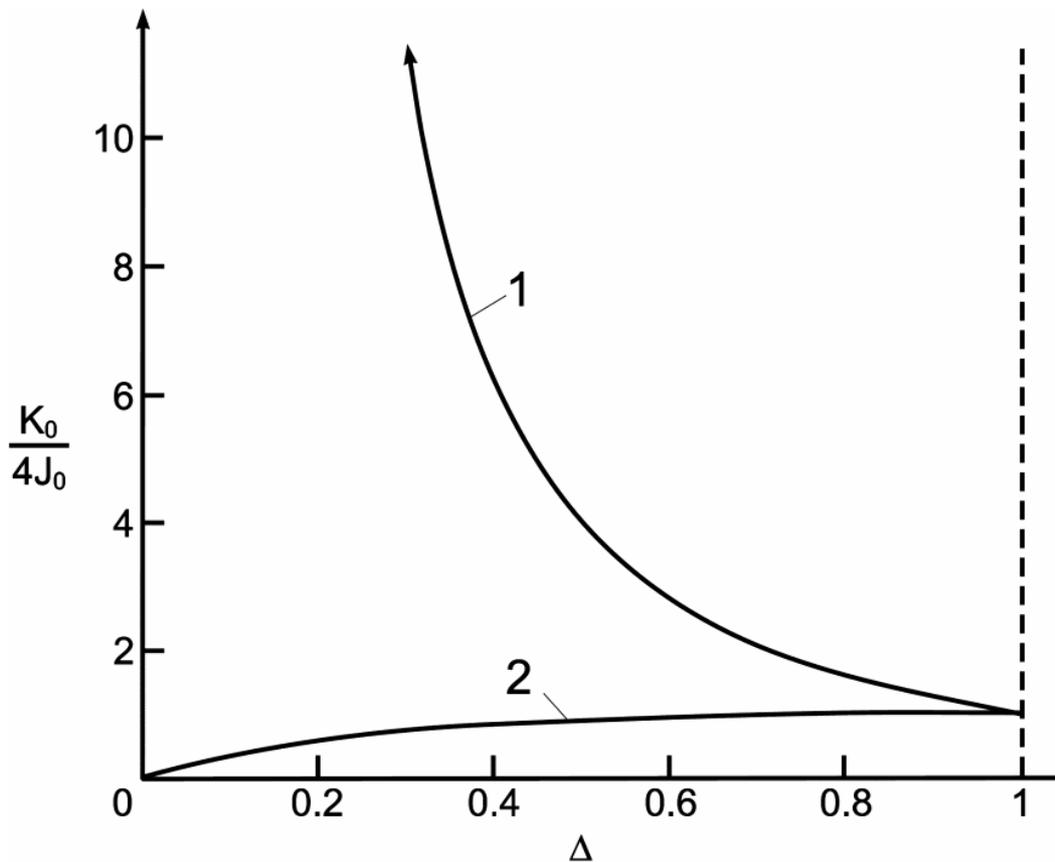


Рис. 4.10. Фазовая диаграмма устойчивости фаз в зависимости от значения параметра анизотропии Δ .

Исследуем выражения (4.82)-(4.85), чтобы найти области устойчивости фаз в зависимости от значения одноионной анизотропии β . Для определенности будем исследовать каждую область рис. 4.10 отдельно.

1. Область над линией 1 $J < K\Delta^2$. Из исследования свободной энергии следует, что в случае $\beta < K(1 - \Delta^2)$ в магнетике устойчива $KУ_1$ -фаза. При выполнении равенства $\beta_1 = K(1 - \Delta^2)$ имеет место фазовый переход в $KУ_2$ -состояние. Этому случаю соответствует рис. 4.11(а).

2. В области между линиями 1 и 2: $4J\Delta < K(1 + \Delta)^2$ и $J > K\Delta^2$. В случае $\beta < J + K(1 - 2\Delta^2)$ реализуется $ФМ_z$ -состояние. Линия

$$\beta_2 = J + K(1 - 2\Delta^2),$$

отвечает фазовому переходу $ФМ_z$ - $KУ_2$ -фазы. Этому случаю соответствует рис. 4.11(б).

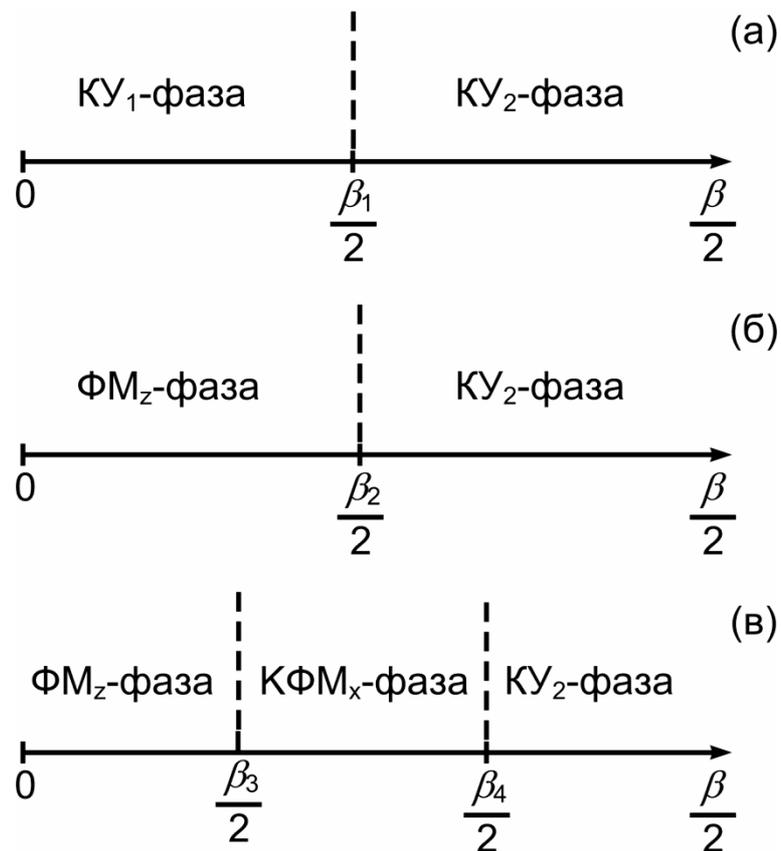


Рис. 4.11. Фазовые диаграммы в зависимости от значения константы одноионной анизотропии.

3. Область под линией $4J\Delta > K(1+\Delta)^2$. Если удовлетворяется неравенство

$$\beta/2 < K(1+\Delta) - 2J + 2\sqrt{(J - K\Delta^2)\left(2J\Delta - K(1+\Delta)^2/2\right)}$$

в магнетике устойчива ФM_z-фаза.

На линии

$$\beta_3 = 2K(1+\Delta) - 4J + 4\sqrt{(J - K\Delta^2)\left(2J\Delta - K(1+\Delta)^2/2\right)}$$

имеет место переход из ФM_z- КФM_x-фазы.

Увеличение значения константы одноионной анизотропии β приводит к уменьшению среднего значения спина на узле, т.е. $\langle \tilde{S}^x \rangle \rightarrow 0$, и на линии

$$\beta_4 = 4J - 2K(1+\Delta)\Delta$$

системе переходит из КФМ_x в КУ₂-состояние. Этому случаю соответствует рис. 4.11(в).

4.3.2. Поведение магнетика во внешнем поле

Исследуем поведение магнетика во внешнем поле направленным вдоль оси OZ. Для этого в исследованном выше гамильтониане с анизотропией обменных взаимодействий (4.59) необходимо учесть зеемановскую энергию $-H \sum_n S_n^z$, где H – внешнее поле имеет только z-ю компоненту. В одноузельном гамильтониане (4.62) необходимо сделать перенормировку в одном из слагаемых – в множителе пропорциональном оператору S^z . Множитель \bar{H}_z перенормируется

$$\bar{H}_z = (J - K\Delta^2/2) \langle \tilde{S}^z \rangle \rightarrow \bar{H}_z = H + (J - K\Delta^2/2) \langle \tilde{S}^z \rangle$$

Весь анализ одноузельной задачи, получение фазовых состояний с учетом внешнего поля аналогичен анализу без учета поля, который был сделан в предыдущем подразделе 4.3.1 вплоть до анализа спектров возбуждения. Запишем выражения для спектров возбуждения с учетом отличного от нуля поля и проведем их исследование в различных фазах.

Спектр возбуждений в ФМ_z-фазе:

$$\varepsilon_1(k) = H + K(1 - \Delta) + K(1 - \Delta^2) - \beta/2 + \Delta\alpha k^2, \quad (4.86)$$

$$\varepsilon_2(k) = 2H + 2J - K\Delta^2 + \Delta^2\delta k^2. \quad (4.87)$$

Спектр возбуждений КФМ_{xz}-фазе:

$$\varepsilon_1^2(k) = \left(J\Delta - K + \frac{\beta}{2} - \Delta\alpha k^2 \right)^2 - (J - K)^2 \frac{(J - K\Delta^2)^2 - H^2}{(J - K\Delta^2)^2} \Delta^2, \quad (4.88)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = \left(\Delta^2\delta k^2 + 2 \frac{H^2 - (J - K\Delta^2)^2}{J - K\Delta^2} \right) \Delta^2\delta k^2. \quad (4.89)$$

Спектр возбуждений КУ₂-фазе:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K(1+\Delta)\Delta - 2J\Delta + \beta/2 + \Delta(2\alpha - \delta)k^2 \right) \cdot \left(\beta/2 - K(1-\Delta)\Delta + \Delta\delta k^2 \right)} \pm H \quad (4.90)$$

Следует обратить внимание, что включение внешнего поля привело к выходу вектора магнитного момента из базисной плоскости XOY , соответственно к возможности реализации угловой $K\Phi M_{xz}$ -фазы с ориентацией магнитного момента под углом к оси OZ . Соответственно плоскостная $K\Phi M_x$ -фаза во внешнем поле становится неустойчивой. Кроме того имеются условия возникновения осевой квадрупольно-ферромагнитной фазы в случае когда величина поля мала, а константа биквадратичного обмена K велика. В $K\Phi M_z$ - и $K\Phi M_{xz}$ фазах среднее значение спина на узле не достигает насыщения $\langle S \rangle < 1$. Кроме того, во внешнем поле KY_1 -фаза будет неустойчива, – реализуется только KY_2 -фаза.

В начале приведем результаты исследования поведения спектров возбуждения при крайних значениях параметра анизотропии: $\Delta=0$ – изингоподобный обмен и $\Delta=1$ – изотропный обмен [32,32,233,292].

Рассмотрим случай, когда параметр анизотропии $\Delta=1$.

Пусть $J>K$, тогда в зависимости от значения одноионной анизотропии и величины поля реализуются следующие фазы: $K\Phi M_{xz}$ -, ΦM_z - и KY_2 -фазы.

На линии фазового перехода ΦM_z - $K\Phi M_{xz}$ -фазы

$$H_{C_1}^{(1)} = \beta/2 \quad (4.91)$$

в ноль обращается щель в спектре (4.86).

KY_2 -фаза становится неустойчивой на линии перехода

$$H_{C_2}^{(1)} = \sqrt{\beta/2 [\beta/2 - 2(J_0 - K_0)]} \quad (4.92)$$

в $K\Phi M_{xz}$ -фазу. При этом щель в спектре (4.90) станет равной нулю.

На рис. 4.12(a) приведена фазовая диаграмма магнетика для случая $J>K$.

Пусть $K>J$, тогда угловая $K\Phi M_{xz}$ -фаза не реализуется. Устойчивым является $K\Phi M_z$ -состояние, в котором средний спин имеет ненасыщенное значение и направлен вдоль оси OZ . Кроме того, реализуются ΦM_z - и KY_2 -

фазы. Приравнивая значения энергий основного состояния в реализующихся фазах, можно определить линии фазовых переходов.

Фазовый переход $K\Phi M_z - KY_2$ фазы – на линии

$$H_{C_1}^{(2)} = \sqrt{\beta(K - J)}. \quad (4.93)$$

Линия перехода $\Phi M_z - KY_2$ фазы

$$H_{C_2}^{(2)} = (K - J + \beta)/2. \quad (4.94)$$

Линия перехода $\Phi M_z - K\Phi M_z$ фазы

$$H = K - J. \quad (4.95)$$

Переход $\Phi M_z - K\Phi M_z$ фазы является фазовым переходом II рода, так как на линии (4.95) обращаются в ноль щели спектров (4.87) и (4.88). На рис. 4.12(б) приведена фазовая диаграмма магнетика при $K > J$.

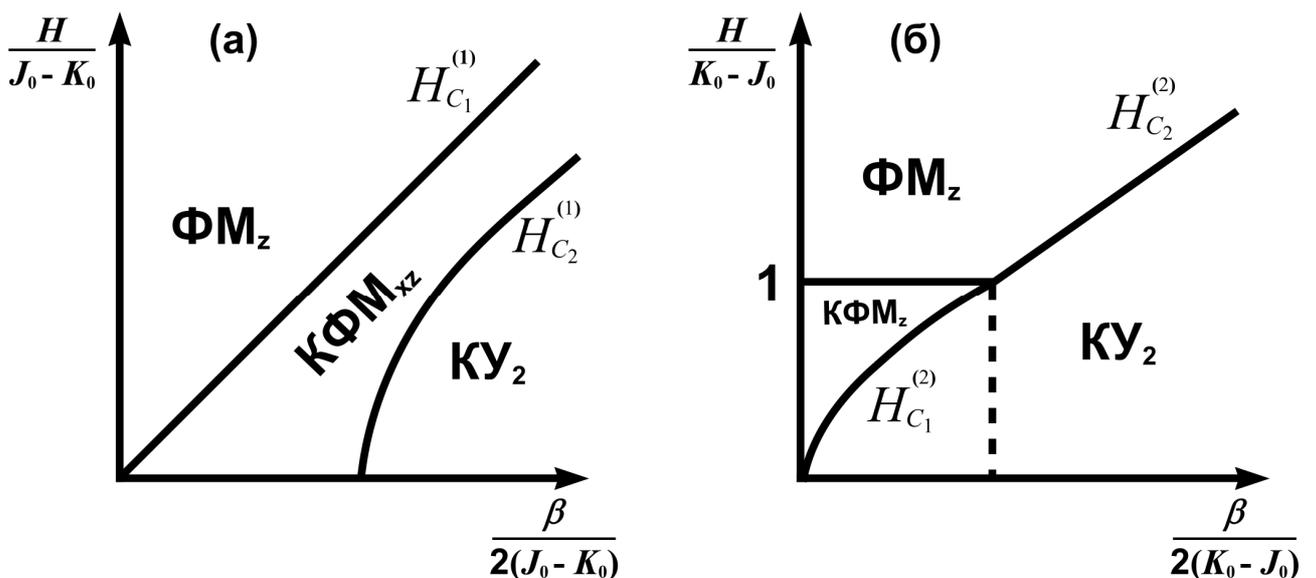


Рис. 4.12. Фазовая диаграмма магнетика во внешнем поле при $\Delta = 1$.

а) $J > K$; б) $K > J$.

Перейдем к исследованию случая $\Delta=0$. Угловая $K\Phi M_{xz}$ -фаза при таком значении параметра анизотропии во внешнем поле не реализуется ни при каких значениях материальных параметров магнетика. Будут существовать лишь ΦM_z - и KY_2 -фазы. Параметры порядка $\langle \tilde{S}^z \rangle$ и \tilde{q}_0^2 , характеризующие данные фазы на линии перехода изменяются скачком. Следовательно фазовый переход

$\Phi M_z - K U_2$ - фазы является переходом I рода. Из равенства свободных энергий можно найти выражение для линии перехода:

$$H_C = (\beta - J)/2. \quad (4.96)$$

Щели в спектрах возбуждения соответствующих фаз обращаются в ноль на линиях потери устойчивости фаз.

Линия потери устойчивости ΦM_z -фазы:

$$H_{y_1} = \beta/2 - J_0 - K_0. \quad (4.97)$$

Линия потери устойчивости $K U_2$ -фазы:

$$H_{y_2} = \beta/2. \quad (4.98)$$

На рис. 4.13 приведена фазовая диаграмма при $\Delta=0$.

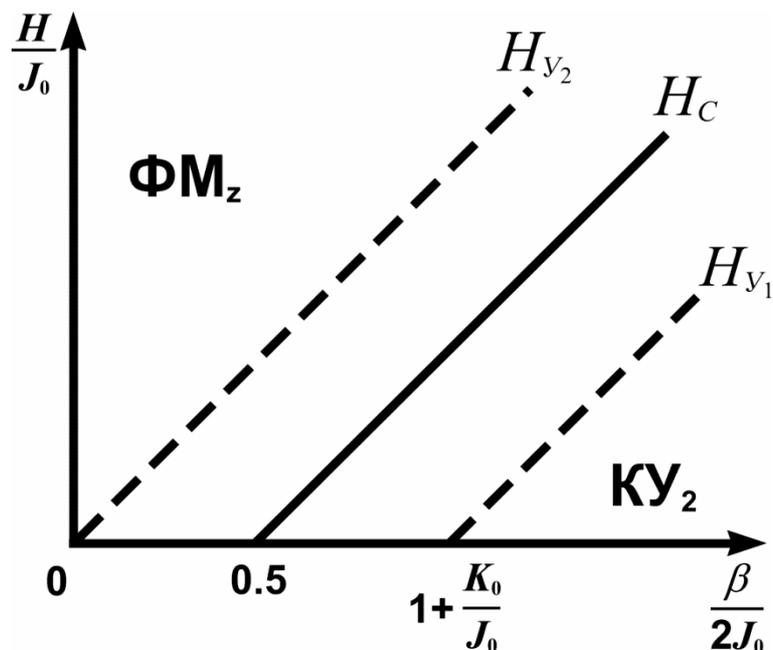


Рис. 4.13. Фазовая диаграмма во внешнем поле изингоподобного магнетика при $\Delta=0$

Рассмотрим случай промежуточного $0 < \Delta < 1$ значения параметра анизотропии. Исследуем три области:

1. $J < \Delta^2 K$;
2. $4J\Delta < K(1 + \Delta)^2$ и $J > K\Delta^2$;
3. $4J\Delta > K(1 + \Delta)^2$.

В первой области являются устойчивыми: ΦM_z -, $K\Phi M_z$ - и KY_2 -состояния. В области значений поля

$$0 \leq H < H_{C_1}, \quad H_{C_1} = \sqrt{(K\Delta^2 - J)(\beta - K(1 - \Delta^2))}$$

устойчиво KY_2 -состояние. При значении поля $H = H_{C_1}$ среднее значение спина на узле становится отличным от нуля и магнетик перейдет в $K\Phi M_z$ -состояние. Увеличение величины поля приводит к росту среднего значения спина на узле. При достижении поля значения: $H_{C_2} = K\Delta^2 - J$ имеет место переход в ΦM_z -состояние.

При значении магнитного поля $H = H_{C_1}$ щель в спектре KY_2 -фазы (4.90) не становится равной нулю. Однако щель в спектре обращается в ноль на линии неустойчивости KY_2 -состояния, которая определяется из равенства нулю щели спектра (4.90).

При значениях внешнего поля $H = H_{C_2}$ щели в спектрах ΦM_z -фазы (4.87) и $K\Phi M_z$ -фазы (4.88) становятся равными нулю. Значения полей линий потери устойчивости ΦM_z - и KY_2 -состояний в окрестности переходов KY_2 - ΦM_z и $K\Phi M_z$ - KY_2 -состояний определяются выражениями:

$$KY_2 - \Phi M_z: \quad H_{Y_1} = \beta/2 - J(1 - \Delta) - K(1 - \Delta^2), \quad (4.99)$$

$$K\Phi M_z - KY_2: \quad H_{Y_2} = \sqrt{[K(1 + \Delta)\Delta - 2J\Delta + \beta/2][\beta/2 - K(1 - \Delta)\Delta]}. \quad (4.100)$$

Во второй области, определяемой неравенствами $4J\Delta < K(1 + \Delta)^2$ и $J > K\Delta^2$ устойчивыми являются ΦM_z - и KY_2 -состояния. Из равенства свободных энергий можно найти линию перехода KY_2 - ΦM_z -фазы:

$$H_C = (\beta - J - K(1 - 2\Delta^2))/2. \quad (4.101)$$

Щели в спектрах (4.86) и (4.90) при $k \rightarrow 0$ на линиях неустойчивости обращаются в ноль: выражение (4.99) определяет линию неустойчивости ΦM_z -состояния, а выражение (4.100) определяет линию неустойчивости KY_2 -фазы.

В третьей области, задающейся неравенством $4J\Delta > K(1 + \Delta)^2$ устойчивыми будут три состояния: ΦM_z -, $K\Phi M_{xz}$ -, KU_2 -фаза. В случае если материальные параметры системы зафиксированы, то при стремлении параметра анизотропии к нулю область существования $K\Phi M_{xz}$ -состояния сжимается. Чтобы это показать не обязательно исследовать магнетик $K\Phi M_{xz}$ -фазе. Достаточно проанализировать свойства $K\Phi M_x$ -фазы, которая существует при условии $4J\Delta > K(1 + \Delta)^2$ без внешнего поля. Параметр анизотропии Δ , при котором исчезает $K\Phi M_x$ -фаза (без поля), а значит $K\Phi M_{xz}$ -фаза (с учетом поля) находится из выражения

$$4J\Delta = K(1 + \Delta)^2. \quad (4.102)$$

Отсюда можно определить значение Δ_C

$$\Delta_C = 2J_0 \left(1 - \sqrt{1 - K_0/J_0}\right) / K_0 - 1, \quad (4.103)$$

меньше которого $K\Phi M_x$ -состояние не реализуется. Из исследования свободной энергии при нулевом значении поля и произвольном значении параметра анизотропии Δ следует, что при переходе $K\Phi M_x$ - ΦM_z -фазы направление вектора магнитного момента и его абсолютное значение меняются скачком. При переходе из $K\Phi M_x$ -фазы в KU_2 -фазу рекого изменения намагниченности не наблюдается: величина магнитного момента стремится к нулю при подходе к линии перехода в KU_2 -состояние и строго равен нулю на линии фазового перехода. Если внешнее поле отлично от нуля, то переход ΦM_z - $K\Phi M_{xz}$ -фазы вероятнее всего становится фазовым переходом I рода, а переход $K\Phi M_x$ - KU_2 -фазы – II рода.

4.3.3. Влияние температуры на фазовые переходы

Представляет интерес исследовать влияние температуры на фазовые переходы. Известно, что на температуру перехода в парамагнитную фазу влияет размерность системы. Задачей данного подраздела является анализ температурных фазовых переходов систем разной размерности. Анизотропия

обменного взаимодействия приводит к тому, что упорядочение спиновых моментов имеет место и в магнетике пониженной размерности. При увеличении температуры магнетик переходит также в упорядоченное состояние, определяющееся квадрупольным параметром порядка. В изотропном же случае в низкоразмерных магнетиках дальнего порядка нет [294].

Начнем исследование с определения температуры перехода из KU_2 состояния в парамагнитное

В пределе $T \rightarrow 0$ отличные от нуля параметры порядка KU_2 -фазы следующие: $\tilde{q}_2^0 = -2\Delta$, $m = 2\Delta$. При этом квадраты средних от спиновых операторов имеют вид:

$$\langle (\tilde{S}^z)^2 \rangle = 0, \text{ но } \langle (\tilde{S}^x)^2 \rangle = \langle (\tilde{S}^y)^2 \rangle = \Delta.$$

Тогда как в парамагнетике

$$\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = 2/3.$$

С ростом температуры значение параметра $\tilde{q}_2^0 \rightarrow 0$, и при $T = T_q$ магнетик перейдет в парамагнитное состояние. Переходя к бозонным операторам Хаббарда определим температуру T_q [33,223].

Гамильтониан (4.59) через бозонные операторы Хаббарда и пренебрегая слагаемыми выше, чем вторая степень от операторов

$$H^{(2)} = 2 \sum_k \left[A_k c_k^+ c_k + B_k (c_k c_{-k} + c_k^+ c_{-k}^+) \right], \quad (4.104)$$

здесь $B_k = -\Delta J_k + \Delta K_k$, $A_k = E_{10} - \Delta J_k$, $K_k = K_0 \gamma_k$, $J_k = J_0 \gamma_k$, $\gamma_k = \frac{1}{d} \sum_d \cos(k_d)$,

где $d=1,2$ или 3 ; уровни энергии определяются (4.77).

Приведем гамильтониан (4.104) к диагональному виду:

$$H^{(2)} = 2 \sum_k \varepsilon(k) \alpha_k^+ \alpha_k, \quad (4.105)$$

спектр $\varepsilon(k)$ определяется (3.68) в третьем разделе.

Параметр \tilde{q}_2^0 имеет следующий вид:

$$\tilde{q}_2^0 = \frac{1}{N} \sum_n \left[3 \langle (S_n^z)^2 \rangle - \langle M_n^2 \rangle \right] = \frac{1}{N} \sum_n \left[2(2 + \Delta) \langle a_n^+ a_n \rangle - 2\Delta \right]. \quad (4.106)$$

Выражение (4.168) можно переписать следующим образом:

$$\tilde{q}_2^0 = -2\Delta + \frac{2(2 + \Delta)}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(u_k^2 + v_k^2) d^d k}{\exp(\varepsilon(k)/T) - 1} - q(0), \quad (4.107)$$

где $u_k = \sqrt{\frac{A_k + \varepsilon(k)}{2\varepsilon(k)}}$, $v_k = -\frac{B_k}{|B_k|} \sqrt{\frac{A_k - \varepsilon(k)}{2\varepsilon(k)}}$ – параметры диагонализации;

$q(0) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} v_k^2 d^d k$ – нулевые колебания.

Приравняв к нулю выражение (4.107) определим температура перехода в парамагнитное. Зависимость температуры перехода как функция параметра Δ приведена на рис. 4.14 при значения констант: $J_0 = 2000$ кЭ, $K_0 = 2J_0$, $\beta = 2J_0$.

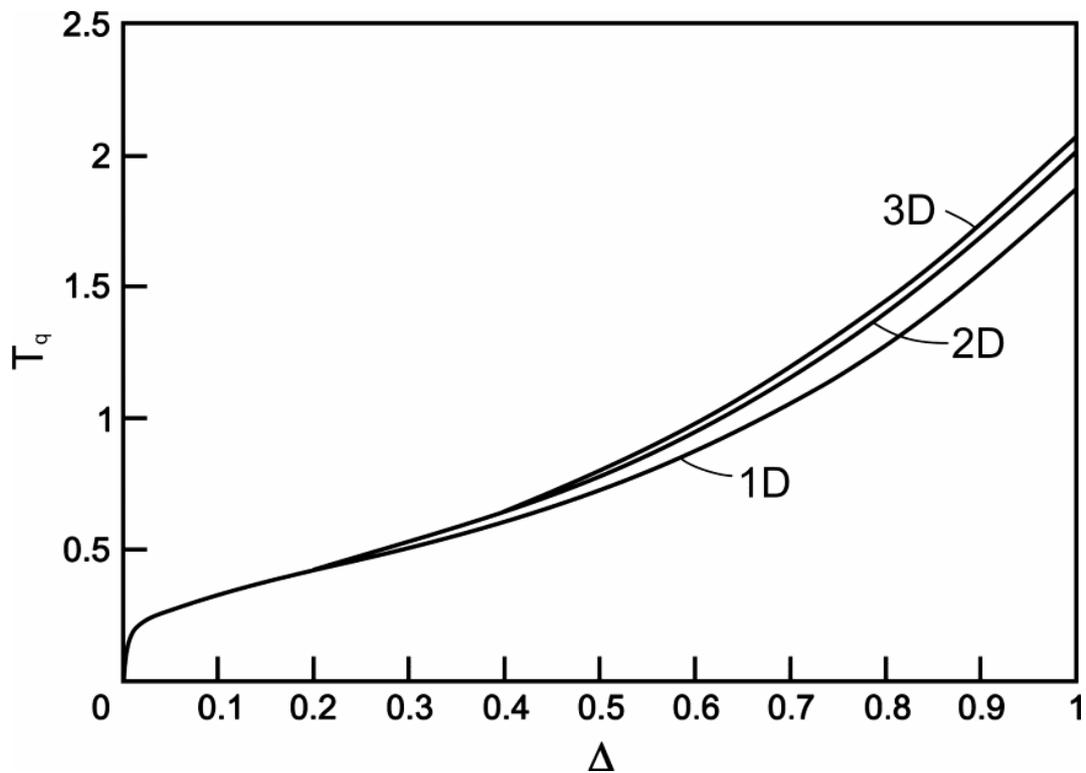


Рис. 4.14. График температуры перехода как функция параметра Δ . Шкала температур – в единицах обмена.

Как следует из пояснений к рис. 4.10 в изингоподобном магнетика, т.е. $\Delta=0$ КУ₂- состояние не существует, то при $\Delta \rightarrow 0$ температура перехода в парамагнитное состояние равна нулю при любой размерности системы. Рост параметра анизотропии Δ приводит к увеличению температуры перехода в парамагнитное состояние, причем температура перехода тем выше при том же значении параметра анизотропии Δ чем больше размерность системы. Расхождение температур перехода в парамагнитное состояние как следует из рис. 4.14 плавно увеличивается с ростом параметра анизотропии Δ . Первым отщепляется график температура для одномерной систем; при больших значениях параметра Δ расслаиваются графики двумерной и трехмерной систем. Известно [31,34], что квантовые флуктуации приводят к неустойчивости квадрупольного состояния в спиновых цепочках изотропного антиферромагнетика, однако в данном исследовании такого эффекта не наблюдалось.

4.4. Фазовые состояния и спектры обменно анизотропного негейзенберговского ферромагнетика

4.4.1. Ферромагнитное упорядочение и ориентационные фазовые переходы

В предыдущих подразделах исследовалось влияние как межионной, так и одноионной анизотропии на свойства негейзенберговских магнетиков. Это наиболее простые модели с межионной анизотропией. Не вдаваясь в природу возникновения межионной анизотропии магнитных взаимодействий, целью данного подраздела является изучение влияния анизотропного межионного взаимодействия, более сложного вида, чем в [98,99], на фазовые состояния негейзенберговского ферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$. Вполне ожидаемо, что исследование более сложных систем будут приводить к выявлению новых необычных свойств магнетиков.

Рассмотрим трехмерный ферромагнетик со спином магнитного иона единица. Такой выбор величины спина позволяет учесть, кроме билинейного (гейзенберговского) обменного взаимодействия, также и биквадратичное обменное взаимодействие. Кроме того, будем рассматривать эти взаимодействия существенно анизотропными, т.е. гамильтониан такой системы можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J_{nn'} \left[S_n^z S_{n'}^z + \Delta \left(S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y \right) \right] + \right. \\
 & \left. + K_{nn'} \left[O_{2n}^0 O_{2n'}^0 / 3 + \Delta_1 \left(O_{2n}^{zx} O_{2n'}^{zx} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz} \right) + \Delta_2 \left(O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy} \right) \right] \right\}
 \end{aligned} \quad (4.108)$$

где $J_{nn'}$, $K_{nn'}$ – константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, соответственно; $\Delta, \Delta_1, \Delta_2$ – параметры межионной анизотропии; O_j^i ($j \leq 2S, i \leq j$) – операторы Стивенса [70].

Исследование магнетика проводятся в при температурах близких к нулю.

Рассмотрим вначале случай, когда все параметры межионной анизотропии положительны ($\Delta, \Delta_1, \Delta_2 > 0$).

Выбором системы координат относительно кристаллографических осей [14,21] можно добиться, чтобы параметры порядка характеризующие систему были действительными, т.е. $\langle S^y \rangle = \langle O_2^{yz} \rangle = \langle O_2^{xy} \rangle = 0$. Учет анизотропного обменного взаимодействия приводит к тому, что в общем случае магнитный момент направлен под углом θ к оси OZ . Унитарный поворот $U(\theta) = \prod_n \exp(i\theta S_n^y)$ позволяет перейти в собственную систему координат для каждого узла, в которой направление оси OZ совпадает с направлением среднего спина. В результате эти преобразований гамильтониан (4.108) будет зависеть от угла θ

$$\tilde{H}(\theta) \rightarrow U(\theta) H U^+(\theta).$$

Выделяя в гамильтониане средние поля, связанные как с векторным параметром порядка $\langle S^z \rangle$, так и с тензорным $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$ получим одноузельный гамильтониан

$$H_0(n) = -H_z S_n^z - H_x S_n^x - B_2^0 O_{2n}^0 - B_2^2 O_{2n}^2 - B_2^{zx} O_{2n}^{zx} \quad (4.109)$$

где $H_z = J_0 \langle S \rangle (\cos^2 \theta + \Delta \sin^2 \theta)$, $H_x = J_0 \langle S \rangle \sin \theta \cos \theta (1 - \Delta)$, коэффициенты B_2^0, B_2^2, B_2^{zx} — пропорциональны K_0 и являются функциями квадрупольных параметров $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$ ($t=0, 2, zx$); $J_0 = \sum_{n'} J_{nn'}$, $K_0 = \sum_{n'} K_{nn'}$.

Решая одноузельную задачу с гамильтонианом (4.109) найдем базис собственных функций:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= (\cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |-1\rangle) \cos \beta + \sin \beta |0\rangle, \\ \Psi_0 &= -(\cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |-1\rangle) \sin \beta + \cos \beta |0\rangle, \\ \Psi_{-1} &= -\sin \varphi |1\rangle + \cos \varphi |-1\rangle, \end{aligned} \quad (4.110)$$

в котором гамильтониан (4.109) становится диагональным. На базисе (4.110) построим операторы Хаббарда, из связи которых со спиновыми операторами определяется вид параметров порядка:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \cos^2 \beta \cos 2\varphi, \quad q_2^2 = \cos^2 \beta \sin 2\varphi, \\ q_2^0 &= 1 - 3\sin^2 \beta, \quad q_2^{zx} = \sqrt{2} \sin 2\beta (\cos \varphi - \sin \varphi)/2. \end{aligned}$$

Кроме того, в результате унитарных преобразований, возникает ещё один параметр [231]

$$\langle S^x \rangle = \sqrt{2} \sin 2\beta (\cos \varphi + \sin \varphi)/2,$$

который в собственной системе координат равен нулю. Из условия $\langle S^x \rangle = 0$ следует, что $\beta = 0$ поскольку, в случае $\varphi = -\pi/4$ или $\beta = \pi/2$ не только $\langle S^x \rangle = 0$, но и $\langle S^z \rangle = 0$, что приводит к потере решений для ферромагнитно упорядоченных состояний. С учетом этого, параметры в собственной системе координат можно представить в виде:

$$\langle S \rangle = \cos 2\varphi, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = \sin 2\varphi, \quad q_2^{zx} = 0. \quad (4.111)$$

В случае низких температур ($T \rightarrow 0$) энергия основного состояния совпадает с плотностью свободной энергии. Анализ плотности свободной энергии

$$\begin{aligned} F &= \frac{K_0}{8} (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2) (1 - \sin 2\varphi)^2 \sin^4 \theta - \frac{1}{2} (J_0 - K_0 \Delta_2) \cos^2 2\varphi + \\ &+ \frac{1}{2} \left[J_0 (1 - \Delta) \cos^2 2\varphi + K_0 (1 - \Delta_1 + (\Delta_1 - \Delta_2) \sin 2\varphi) (1 - \sin 2\varphi) \right] \sin^2 \theta \end{aligned} \quad (4.112)$$

позволяет определить спиновые состояния, реализуемые в системе при различных соотношениях материальных параметров.

Хорошо известно, что в негейзенберговском изотропном магнетике ферромагнитная фаза устойчива при $J_0 > K_0$ [19,47]. Учет анизотропии обменного взаимодействия это условие скорректирует.

Очевидно, что в случае преобладающего билинейного обменного взаимодействия величина среднего спина практически не меняется – $\langle S \rangle \simeq 1$

(параметр $\alpha = 0$). В зависимости от значения анизотропного параметра Δ изменяется направление вектора намагниченности и реализуются ферромагнитно упорядоченные фазы: легкоосная ферромагнитная фаза ΦM_{\parallel} с направлением вектора магнитного момента вдоль оси OZ , устойчивая при $\Delta < 1$, и легкоплоскостная ферромагнитная фаза ΦM_{\perp} фаза с направлением вектора магнитного момента, ортогональным оси OZ , устойчивая при $\Delta > 1$. Кроме того, возникает промежуточное состояние, в котором магнитный момент $\langle S \rangle$ является ненасыщенным. Это обстоятельство связано квантовой редукцией спина [64], т.е. модуль магнитного момента $\langle S \rangle$ может меняться от нуля до единицы, в зависимости от соотношения материальных констант

$$\langle S \rangle = \sqrt{1 - \sin^2 2\alpha_{\perp}}, \quad \sin 2\alpha_{\perp} = K_0 (\Delta_2 - 1) / (4J_0 \Delta - K_0 (3 + \Delta_2)). \quad (4.113)$$

Тогда легкоплоскостная ΦM_{\perp} фаза при $K_0 \neq 0$ трансформируется в квадрупольно-ферромагнитную $K\Phi M_{\perp}$ состояние, в котором векторный и тензорный параметры порядка определяются в зависимости от соотношения материальных параметров системы от минимального до максимального значений. Так, при $\Delta_2 = 1$ намагниченность достигает насыщения и $\langle S \rangle = 1$.

Кроме того, как следует из (4.112), при $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$ возможна реализация угловой квадрупольно ферромагнитной фазы $K\Phi M_{\angle}$ с $\langle S \rangle < 1$, а направление вектора магнитного момента не имеет фиксированной ориентации, и в зависимости от соотношения между материальными константами значение угла θ может меняться от 0 до $\pi/2$:

$$\sin 2\alpha_{\angle} = \frac{K \sin^2 \theta \left((4\Delta_1 - \Delta_2 - 3) \cos^2 \theta + 1 - \Delta_2 \right)}{K \left(\left((4\Delta_1 - \Delta_2 - 3) \cos^2 \theta + 3(1 - \Delta_2) \right) \sin^2 \theta + 4\Delta_2 \right) - 4J \left(\Delta \sin^2 \theta \cos^2 \theta \right)}$$

$$\cos 2\theta = \frac{4J (1 + \sin 2\alpha_{\angle}) (1 - \Delta) + K (1 + 3 \sin 2\alpha_{\angle}) (1 - \Delta_2)}{K (1 - \sin 2\alpha_{\angle}) (4\Delta_1 - \Delta_2 - 3)}. \quad (4.114)$$

Дополнительную информацию об областях существования соответствующих спиновых состояний, и о типах фазовых переходов между ними можно получить из анализа динамических свойств магнетика, т.е. спектров возбуждения. Спектры возбуждений во всех фазах можно получить из полюсов функций Грина [227].

В легкоосной ΦM_{\parallel} и легкоплоскостной $K\Phi M_{\perp}$ фазах спектры магнонов имеют вид, соответственно:

$$\varepsilon_1(k) = 2(J_0 - K_k \Delta_2); \quad (4.115)$$

$$\varepsilon_2(k) = J_0 - J_k \Delta + K_0 - K_k \Delta_1. \quad (4.116)$$

$$\varepsilon_3(k) = 2\sqrt{(J_0 \Delta - K_k \Delta_1) \left\{ (J_0 - J_k) \Delta + \left[J_k \Delta - \frac{K_k (3 + \Delta_2)}{4} \right] (1 - \sin^2 2\varphi_{\perp}) \right\}}; \quad (4.117)$$

$$\varepsilon_4(k) = \sqrt{\Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2)}, \quad (4.118)$$

$$\Omega_1 = (K_0 - K_k) \Delta_2 (1 + \sin 2\varphi_{\perp}) + (J_0 - J_k) \Delta (1 - \sin 2\varphi_{\perp}),$$

$$\Omega_2 = \sin 2\varphi_{\perp} (K_k (\Delta_1 + \Delta_2) - J_k (1 + \Delta)) - J_k (1 - \Delta) - K_k (\Delta_1 - \Delta_2).$$

Исследуем поведение спектров возбуждения в наиболее интересных случаях. Пусть $\Delta_1 > (3 + \Delta_2) / 4$. Фазовые переходы «легкоосная – угловая» и «легкоплоскостная – угловая» фазы являются ориентационными фазовыми переходами второго рода. При приближении к линии фазового перехода «угловая – легкоосная» фазы модуль магнитного момента стремится к значению насыщения $\langle S \rangle = 1$. На линии фазового перехода $J_0 (1 - \Delta) = K_0 (\Delta_1 - 1)$ щель в спектре (4.118) обращается в ноль. Как следует из выражений (4.113-4.114) в легкоплоскостной $K\Phi M_{\perp}$ и угловой $K\Phi M_{\perp}$ фазах $\langle S \rangle \neq 1$. На линии фазового перехода «угловая-легкоплоскостная» фазы

$$J_0 [1 - \Delta + (1 + \Delta) \sin 2\varphi] = K_0 [\Delta_2 - \Delta_1 + \sin 2\varphi_{\perp} (\Delta_2 + \Delta_1)],$$

значения намагниченностей сравниваются т.е.

$$\sin 2\varphi_{\perp} = \sin 2\varphi_{\angle} \text{ при } \theta = \pi/2.$$

На этой же линии обращается в ноль щель в спектре (4.118). В длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ оба спектра (4.116) и (4.118) на линиях фазовых переходов в угловую фазу имеют квадратичный закон дисперсии. Такое поведение спектров соответствует ориентационным фазовым переходам второго рода.

Если параметры межионной анизотропии соотносятся как $\Delta_1 < (3 + \Delta_2) / 4$, то в этом случае угловая фаза становится неустойчивой. Фазовый переход из легкоосной фазы происходит непосредственно в легкоплоскостную фазу и не является чисто ориентационным, т.к. на линии фазового перехода легкоосная- легкоплоскостная фазы вместе с поворотом вектора намагниченности на угол $\pi/2$ скачком изменяется значение модуля вектора намагниченности с $\langle S \rangle = 1$ в легкоосной фазе до $\langle S \rangle < 1$ в легкоплоскостной фазе (4.113). Линия фазового перехода определяется из равенства свободных энергий в легкоосной и легкоплоскостной фазах, и имеет вид:

$$4J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_2)(1 + \sin 2\varphi_{\perp}).$$

В окрестности линии фазового перехода «легкоосная – легкоплоскостная» фазы размягчаются ветви (4.116) и (4.118). Обращение в ноль щелей в спектрах определяют линии потери устойчивости спектров:

$$J_0(1 - \Delta) = K_0(\Delta_1 - 1),$$

$$J_0[1 - \Delta + (1 + \Delta)\sin 2\alpha] = K_0[\Delta_2 - \Delta_1 + \sin 2\alpha(\Delta_2 + \Delta_1)].$$

Эти линии определяют границы области сосуществования рассматриваемых здесь фаз. Такое поведение спектров характерно для фазовых переходов первого рода.

4.4.2. Квадрупольное упорядочение и ориентационные фазовые переходы

Рассмотрим теперь противоположную ситуацию, а именно, константа биквадратичного обмена существенно больше константы билинейного обменного взаимодействия ($K_0 > J_0$). Как было показано в целом ряде работ (например [20,22,27,47]), в изотропном негейзенберговском магнетике с $S=1$, в случае большого биквадратичного обменного взаимодействия ферромагнитное упорядочение становится энергетически невыгодным. Дипольный параметр порядка становится равным нулю, и система характеризуется высшими, по компонентам спинового оператора, мультипольными параметрами порядка. Для исследуемой нами модели нематические фазы, как следует из (4.111), это состояние характеризуются квадрупольными параметрами порядка q_2^0 и q_2^2 , являющиеся диагональными компонентами симметричного тензора второго ранга $q_2^{ij} = \langle S^i S^j + S^j S^i \rangle / 2$.

Анализ плотности свободной энергии (4.111), при соотношении обменных интегралов $K_0 > J_0$, показывает, что в этом случае могут реализоваться следующие фазовые состояния с $\langle S \rangle = 0$:

- нематическая плоскостная N_1 фаза при $\theta = 0$ и $\alpha = -\pi/4$;
- нематическая осевая QU_2 фаза при $\theta = \pi/2$ и $\alpha = -\pi/4$;
- угловая нематическая фаза N_{\angle} при $\cos 2\theta = \frac{1 - \Delta_2}{3 + \Delta_2 - 4\Delta_1}$ и $\alpha = -\pi/4$.

Нематические и квадрупольные состояния характеризуются параметрами порядка, которые являются компонентами симметричного тензора второго ранга; геометрическим образом такого тензора (с положительными компонентами) в трехмерном пространстве является одноосный эллипсоид. Его ориентацию можно задать единичным вектором \vec{n} , ортогональным плоскости квадрупольного эллипсоида (в данном случае диска), и в этом проявляется аналогия с молекулярным нематиком, в котором ориентация молекул в пространстве характеризуется единичным вектором-директором [36]. Также как

и в молекулярном нематике, в спиновом нематике направление векторов \vec{n} и $-\vec{n}$ являются неразличимыми.

Из анализа свободной энергии (4.112) следует, что основное состояние нематических фаз связано с направлением вектора-директора \vec{n} , определяется основной функцией $\psi = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$. В собственной системе координат вектор-директор \vec{n} параллелен оси OX , т.к. «диск» квадрупольного момента имеет отличные от нуля компоненты $\langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = 1$. Угол θ определяет отклонение вектора \vec{n} от оси OX лабораторной системы координат. Для определения вида собственных функций в лабораторной системе координат необходимо провести обратное унитарное преобразование $U(-\theta) = \exp(-i\theta S^y)$. Действуя оператором $U(-\theta) = \exp(-i\theta S^y)$ при $\theta = \pi/2$ на функцию $\psi = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ определяем вид функции основного состояния $\psi = |0\rangle$ квадрупольной фазы QU_2 в лабораторной системе координат. Параметры порядка, характеризующие QU_2 фазу: $q_2^0 = -2$, $q_2^2 = 0$. В нематической N_1 - фазе функция основного состояния: $\psi = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и параметры порядка: $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = -1$. Необходимо отметить, что в изотропном случае состояния N_1 и QU_2 являются вырожденными, т.е. их энергии совпадают, а соответствующие им волновые функции переходят друг в друга непрерывным поворотом. Для обменно анизотропного магнетика ситуация иная: как следует из (4.112), различным состояниям соответствует различная свободная энергия, и, следовательно, обменная анизотропия снимает вырождение этих спиновых состояний. Кроме того, необходимо отметить, что квадрупольное состояние QU_2 аналогично квадрупольному состоянию, возникающему в магнетике с большой легкоплоскостной одноионной анизотропией [14,114]. Нематические состояния N_1 и N_\perp , в отличие от QU_2 характеризуются спонтанным нарушением симметрии: спектры возбуждения в этих фазах (4.119-4.122) являются безщелевыми.

Одним из интересных свойств данной модели является возникновение угловой нематической фазы [100,101]. Функция основного состояния данной фазы в лабораторной системе координат

$$\psi = \cos \theta (|1\rangle - |-1\rangle) / \sqrt{2} + \sin \theta |0\rangle,$$

представляет суперпозицию двух векторов нематических состояний $(|1\rangle - |-1\rangle) / \sqrt{2}$ и $|0\rangle$. Как видно из фазовой диаграммы в плоскости (Δ_1, Δ_2) , при фиксированных параметрах Δ и $J_0/K_0 < 1$ (рис. 4.15), нематическая угловая фаза N_{\angle} переходит при $\Delta_2 < 1$ и $\Delta_1 = 1$ в осевую QU_2 фазу, а при $\Delta_2 < 1$ и $\Delta_1 = (1 + \Delta_2) / 2$ в плоскостную нематическую N_1 фазу.

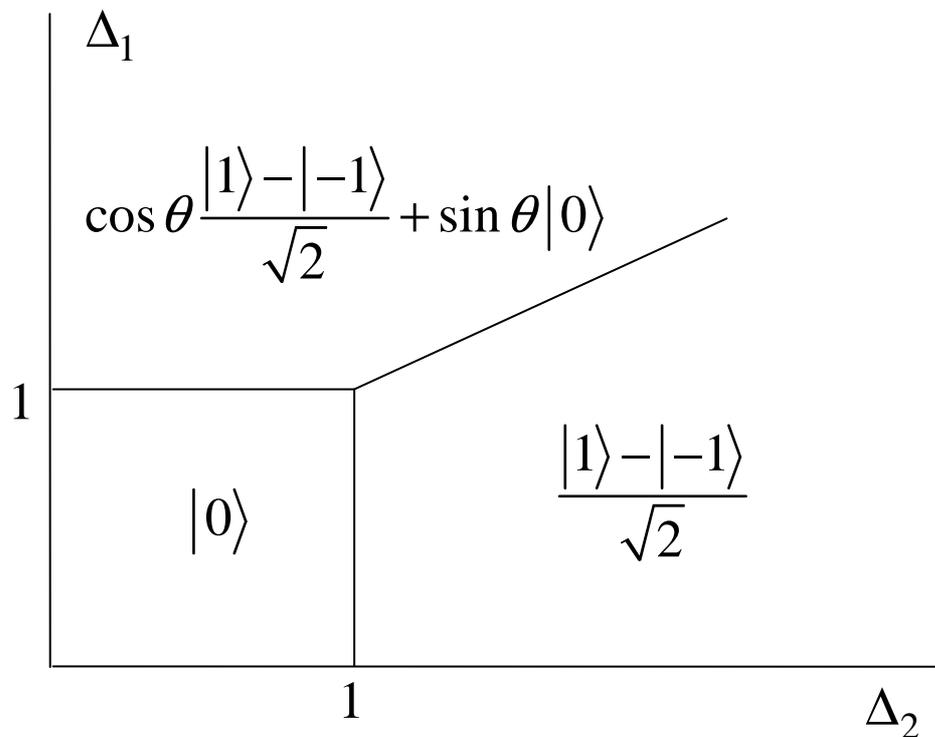


Рис. 4.15. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости (Δ_1, Δ_2) при $J_0/K_0 < 1$.

Особо следует подчеркнуть, что необходимое условие устойчивости угловой нематической фазы, возникающее из анализа свободной энергии (4.112), аналогично условию существования угловой ферромагнитной фазы, а

именно $\Delta_1 > (3 + \Delta_2) / 4$. Для понимания особенностей формирования спиновых конфигураций необходимо исследовать динамику спиновых возбуждений. Приведем решения дисперсионного уравнения в нематических фазах.

Спектры элементарных возбуждений в угловой N_\perp фазе имеют вид:

$$\varepsilon_1(k) = 2\sqrt{(K_0\Delta_1 - J_k\Delta)\left((K_0 - K_k)\Delta_1 + K_k \frac{4\Delta_1 - 3 - \Delta_2}{4}(1 - \cos^2 2\theta)\right)}; \quad (4.119)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\tilde{\Omega}_1(\tilde{\Omega}_1 + \tilde{\Omega}_2)}, \quad (4.120)$$

$$\tilde{\Omega}_1 = (\cos 2\theta(\Delta_2 - \Delta_1) + \Delta_1 + \Delta_2)(K_0 - K_k),$$

$$\tilde{\Omega}_2 = \cos 2\theta(J_k(\Delta - 1) + K_k(\Delta_2 - \Delta_1)) + K_k(\Delta_1 + \Delta_2) - J_k(1 + \Delta),$$

а в N_1 состоянии спектры имеет вид:

$$\varepsilon_3(k) = 2\sqrt{(K_0\Delta_2 - K_k\Delta_2)(K_0\Delta_2 - J_k)}; \quad (4.121)$$

$$\varepsilon_4(k) = \sqrt{(K_0(1 + \Delta_2) - 2J_k\Delta)(K_0(1 + \Delta_2) - 2K_k\Delta_1)}. \quad (4.122)$$

В QU_2 фазе, вследствие вырождения возбужденных одноионных состояний, спектры магнонов совпадают:

$$\varepsilon_{5,6}(k) = 2\sqrt{(K_0 - J_k\Delta)(K_0 - K_k\Delta_1)}. \quad (4.123)$$

Необходимо отметить, что при переходе к изотропному случаю ($\Delta = \Delta_1 = \Delta_2 = 1, \theta = 0$) все три фазы N_1 , QU_2 и N_\perp становятся неразличимы, их основное состояние: $\psi = (|1\rangle + |-1\rangle) / \sqrt{2}$, а спектры принимают стандартный вид [21,27,242]:

$$\varepsilon(k) = 2\sqrt{(K_0 - J_k)(K_0 - K_k)}.$$

Таким образом, обменная анизотропия снимает «вырождение» нематических состояний, которое наблюдается в изотропном негейзенберговском магнетике.

Фазовые переходы между нематическими фазами являются ориентационными и происходят по параметрам анизотропии биквадратичного обменного взаимодействия (рис. 4.15). Поскольку в нематических фазах

магнитный момент (на узле) равен нулю, то понятие «переориентации» связано с поворотом вектора-директора \vec{n} . В случае $\Delta_1 > (3 + \Delta_2) / 4$ фазовые переходы между $N_1 - N_{\perp}$ и $N_{\perp} - QU_2$ фазами являются ориентационными фазовыми переходами второго рода. На линии $\Delta_1 = (1 + \Delta_2) / 2$ фазового перехода $N_1 - N_{\perp}$, щели в спектрах (4.119) и (4.122) обращаются в ноль, и на этой линии спектры становятся линейными по волновому вектору \vec{k} в длинноволновом пределе. Аналогично, на линии фазового перехода $QU_2 - N_{\perp}$ $\Delta_1 = 1$ при $k \rightarrow 0$ щели в ветвях (4.119) и (4.123) обращаются в ноль, а спектры также становятся линейными по волновому вектору.

Если $\Delta_1 < (3 + \Delta_2) / 4$, то фазовый переход между N_1 и QU_2 фазами происходит скачком на линии $\Delta_2 = 1$. Такой фазовый переход является ориентационным переходом первого рода – направление вектора \vec{n} меняется скачком, и не сопровождается размягчением спектров магнонов на линии фазового перехода $\Delta_2 = 1$.

Таким образом, имеется существенное отличие в поведении негейзенберговских магнетиков в окрестности фазовых переходов по материальным параметрам для изотропного и анизотропного обменных взаимодействий. Как показало исследование модели негейзенберговского магнетика с изотропным обменным взаимодействием [94], фазовые переходы являются вырожденными переходами первого рода: одновременно на границе фаз скачком меняется симметрия фаз и имеется размягчение спектров элементарных возбуждений. В рассматриваемой модели фазовые переходы между ферромагнитными и нематическими фазами происходят при изменении констант анизотропного обменного взаимодействия, причем могут быть как первого, так и второго рода.

4.4.3. Фазовые переходы по модулю магнитного момента

Рассмотрим поведения системы в окрестности ферромагнитных и нематических фаз. Фазовые переходы такого типа связаны с обращением намагниченности в ноль на одном узле – т.е. эффектом квантового сокращения спина [21,231]. В целом ряде работ, например, [94,286] показано, что одноионная магнитная анизотропия и обменное биквадратичное взаимодействие усиливают друг друга: биквадратичное обменное взаимодействие и одноионная анизотропия приводят к неэквидистантному расталкиванию уровней энергии магнитного иона. Биквадратичный обмен стремится установить нематический порядок в целом с резкой сменой ферромагнитного порядка с $\langle S \rangle = 1$ на нематический $\langle S \rangle = 0$ [19,22]. При этом, рост константы одноионной анизотропии приводит к плавному уменьшению среднего спина на узле и реализации промежуточного квадрупольно-ферромагнитного упорядочения [93,286]. В исследуемой модели квадрупольно-ферромагнитные фазы реализуются благодаря анизотропному обменному взаимодействию.

Поскольку фазовые состояния исследуемой системы зависят от большого числа параметров, то невозможно графически отобразить фазовый портрет системы. Но мы можем построить сечения фазовой диаграммы системы в различных плоскостях.

Вначале рассмотрим случай $\Delta_2 < 1$, $\Delta_1 < 1$ (рис. 4.16). При таком соотношении параметров биквадратичной анизотропии, и в зависимости от соотношения между Δ и J_0/K_0 в системе реализуются ΦM_{\parallel} , $K\Phi M_{\perp}$ и QU_2 фазы. Поведение магнетика в окрестности ориентационного фазового перехода $\Phi M_{\parallel} - K\Phi M_{\perp}$ фаза было исследовано выше.

Рассмотрим теперь поведение системы в окрестности фазовых переходов $\Phi M_{\parallel} - QU_2$ и $K\Phi M_{\perp} - QU_2$. Из равенства свободных энергий в ΦM_{\parallel} и QU_2 фазах удастся определить линию фазового перехода $\Phi M_{\parallel} - QU_2$:

$J_0 = K_0$. При этом, как следует из (4.115) и (4.123) энергетические щели в спектрах магнонов соответствующих фаз обращаются в ноль не на линии $J_0 = K_0$, а на линиях $J_0 = K_0\Delta_2$ в области $J_0/K_0 < 1$, и на линии $J_0\Delta = K_0$ в области $J_0/K_0 > 1$. Эти линии являются линиями потери устойчивости соответствующих фаз, и определяют область сосуществования ΦM_{\parallel} и QU_2 фаз. Таким образом, фазовый переход $\Phi M_{\parallel} - QU_2$ фазы является фазовым переходом первого рода, в результате которого скачком меняется модуль намагниченности с единицы до нуля.

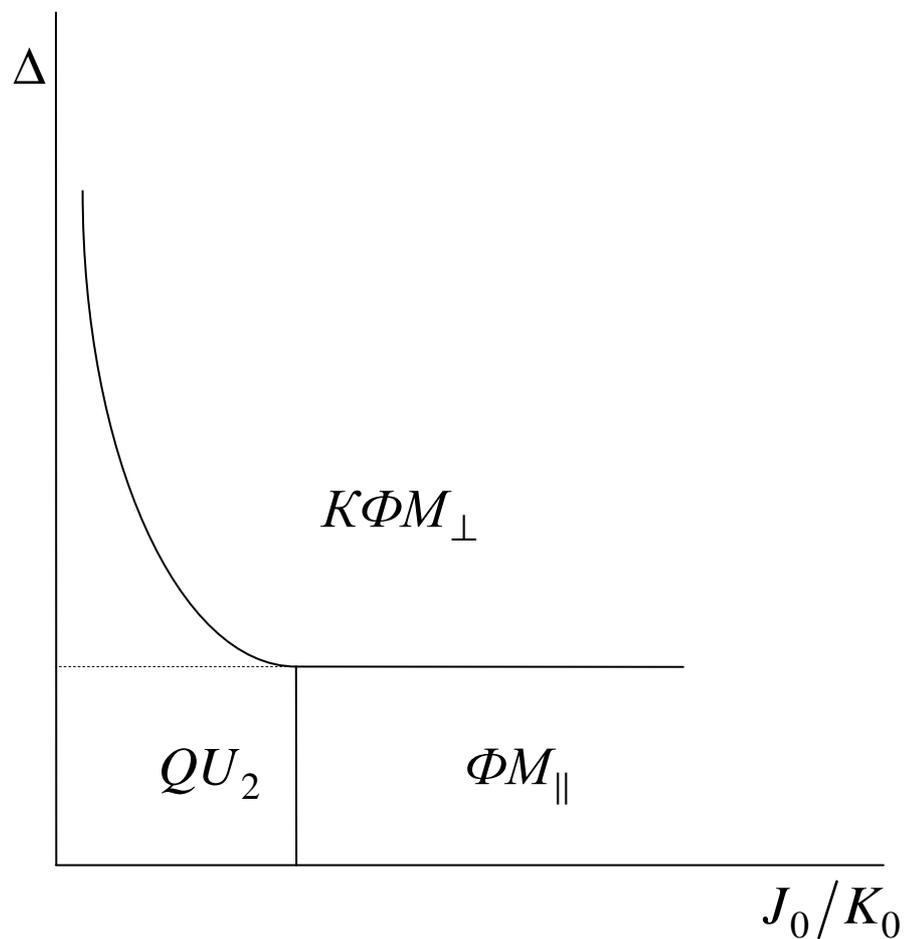


Рис. 4.16. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости $(\Delta, J_0/K_0)$ в случае реализации ферромагнитных и нематических фаз при $\Delta_1 < 1$, $\Delta_2 < 1$.

Линия фазового перехода $K\Phi M_{\perp} - QU_2$ фазы определяется выражением $J_0\Delta = K_0$. На этой же линии обращаются в ноль щели спектров магновов (4.117) и (4.123). Переход является фазовым переходом II рода: при приближении к линии фазового перехода из квадрупольно-ферромагнитной фазы $K\Phi M_{\perp}$ намагниченность непрерывно уменьшается и на линии $J_0\Delta = K_0$ обращается в ноль.

Рассмотрим еще одну ситуацию, когда параметры межионной анизотропии связаны соотношениями $\Delta_2 > 1$ и $\Delta_1 < (1 + \Delta_2)/2$ (рис.4.17). В этом случае в системе в зависимости от соотношений Δ и J_0/K_0 реализуются ΦM_{\parallel} , $K\Phi M_{\perp}$ и N_1 фазы.

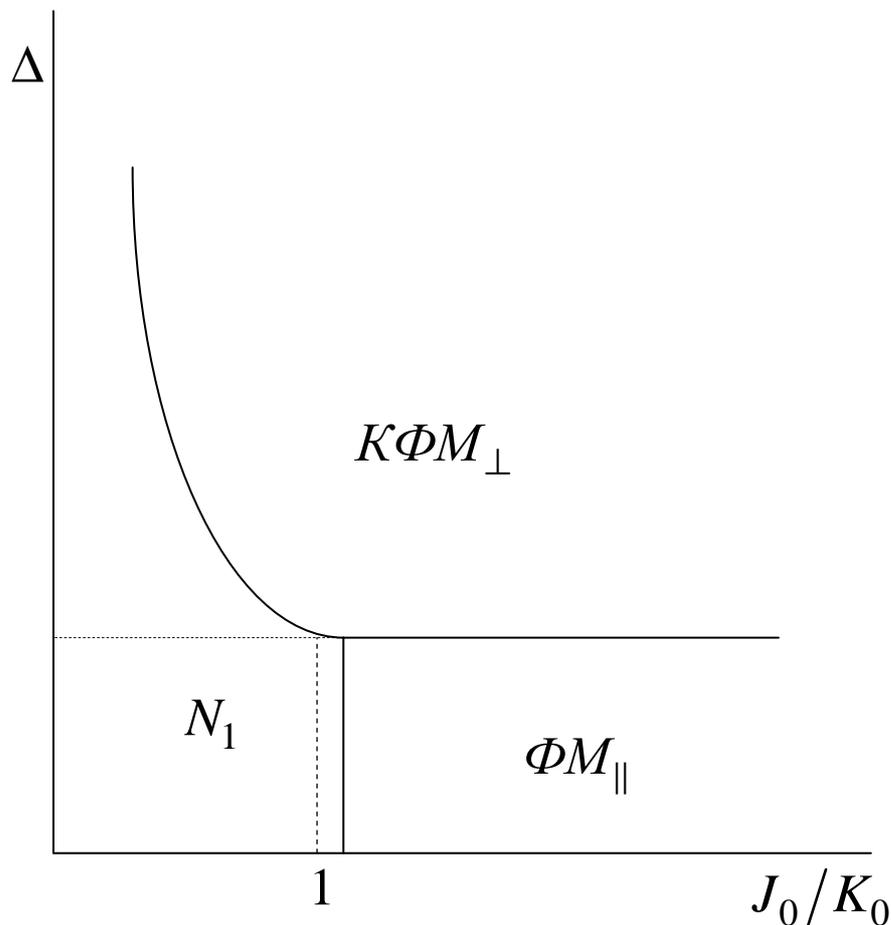


Рис.4.17. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости $(\Delta, J_0/K_0)$ в случае реализации ферромагнитных и нематических фаз при $\Delta_2 > 1$, $\Delta_1 < (1 + \Delta_2)/2$.

Линия фазового перехода $\Phi M_{\parallel} - N_1$ фазы $J_0 = K_0 \Delta_2$ определяется из равенства свободных энергий. На этой линии обращаются в ноль щели ветвей возбуждения (4.115) и (4.121). Переход между фазами сопровождается скачком намагниченности. Данный переход является вырожденным фазовым переходом I рода: симметрия фаз меняется скачком, но, тем не менее, щель в спектрах обращается на линии фазового перехода в ноль. Линия фазового перехода $K\Phi M_{\perp} - N_1$ определяется выражением $2J_0\Delta = K_0(1 + \Delta_2)$. На этой же линии обращаются в ноль щели спектров (4.117) и (4.122). Необходимо отметить следующую особенность: на линии $J_0 = K_0\Delta_2$ в длинноволновом пределе ветви возбуждения (4.115) и (4.121) имеют квадратичный закон дисперсии по волновому вектору; на линии $2J_0\Delta = K_0(1 + \Delta_2)$ спектры (4.117) и (4.122) будут линейны по волновому вектору \vec{k} .

Рассмотрим теперь фазовую диаграмму на плоскости $(\Delta, J_0 / K_0)$ при $\Delta_1 > 1$ и $\Delta_1 > (3 + \Delta_2) / 4$ (рис.4.18). При таком соотношении параметров межионной анизотропии, в зависимости от соотношений Δ и J_0 / K_0 , возможна реализация фаз ΦM_{\parallel} , $K\Phi M_{\perp}$, $K\Phi M_{\angle}$ и N_{\angle} . Анализ спектров ферромагнитных фаз в окрестности линий ориентационных фазовых переходов был проведен выше.

Линия фазового перехода $\Phi M_{\parallel} - N_{\angle}$ определяется равенством свободных энергий

$$J_0 = K_0 \Delta_1 - (K_0/4)(1 - \Delta_2)(1 + \cos 2\theta), \quad (4.124)$$

где $\cos 2\theta = (1 - \Delta_2) / (3 + \Delta_2 - 4\Delta_1)$. В окрестности линии фазового перехода (4.124) образуется область метастабильности, границы которой определяются обращением щелей в ноль в ветвях возбуждения (4.115), (4.120). Фазовый переход сопровождается скачкообразным изменением намагниченности.

Линия фазового перехода $K\Phi M_{\perp} - N_{\angle}$ фазы определяется выражением $J_0\Delta = K_0\Delta_1$. Приближаясь к этой линии из $K\Phi M_{\perp}$ фазы намагниченность

непрерывным образом стремится к нулю, а из N_{\perp} фазы угол θ стремится к $\pi/2$ и на линии фазового перехода принимают свои предельные значения. Таким образом, фазовый переход $K\Phi M_{\perp} - N_{\perp}$ - фазы является фазовым переходом второго рода, сопровождающийся непрерывным изменением намагниченности. Кроме того, на линии фазового перехода обращаются в ноль щели спектров (4.117), (4.119). На самой линии спектры при $k \rightarrow 0$ становятся квадратичными по волновому вектору.

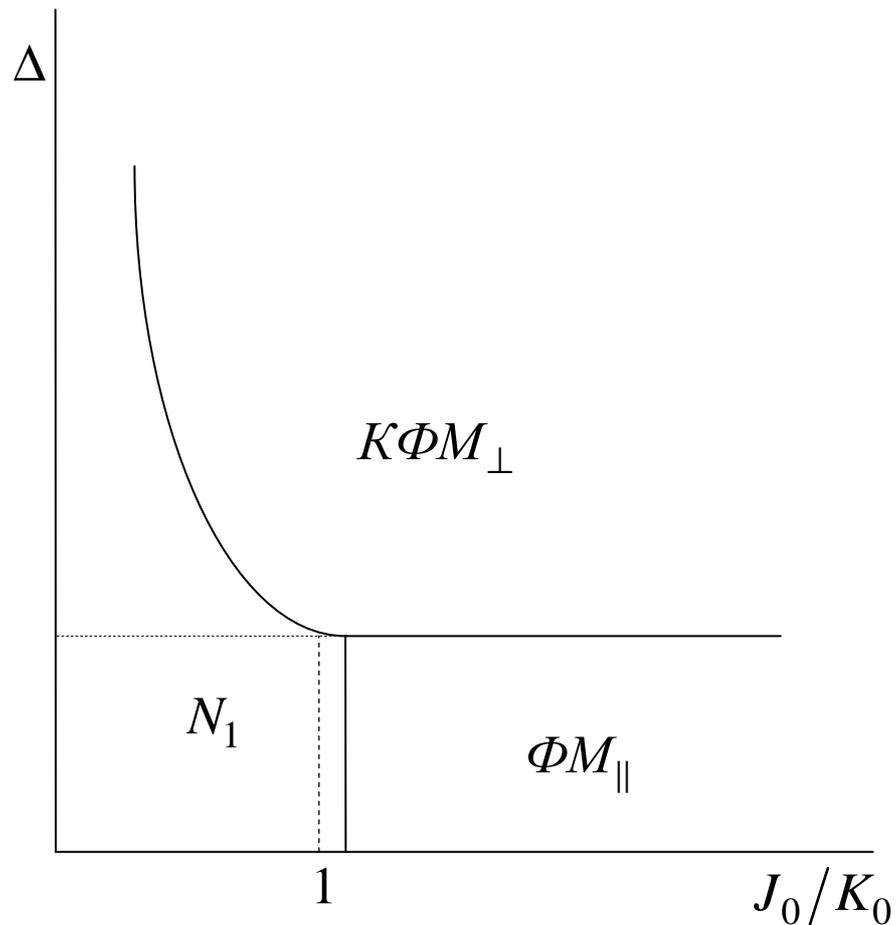


Рис.4.18. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости $(\Delta, J_0/K_0)$ в случае реализации ферромагнитных и нематических фаз при $\Delta_1 > 1$, $\Delta_1 > (3 + \Delta_2)/4$.

Тот же тип фазового перехода $K\Phi M_{\angle} - N_{\angle}$ - фазы. При приближении к линии фазового перехода из $K\Phi M_{\angle}$ - фазы намагниченность стремится нулю.

На линии фазового перехода

$$2(J_0 - K_0\Delta_2)(1 - \Delta_1) + (J_0\Delta - K_0\Delta_1)(1 + \Delta_2 - 2\Delta_1) = 0$$

параметр $\alpha = -\pi/4$, соответственно намагниченность равна нулю, а угол θ как следует из выражений (4.113) при $\alpha = -\pi/4$ можно найти из выражения

$$\cos 2\theta = (1 - \Delta_2) / (4(1 - \Delta_1) - (1 - \Delta_2)),$$

имеющее тот же вид, что и выражение определяющее угол θ в KV_{\angle} - фазе.

Таким образом, на линии фазового перехода происходит непрерывное изменение модуля намагниченности. Щель в спектре (4.120) обращается в ноль, и спектр становится квадратичным по волновому вектору.

4.4.4. «Изингоподобный» негейзенберговский магнетик

Рассмотрим теперь обменно анизотропный негейзенберговский магнетик со спином магнитного иона $S=1$ и отрицательными значениями параметров межионной анизотропии. Как будет показано ниже, такую систему можно рассматривать как негейзенберговский изингоподобный магнетик. Гамильтониан такой системы имеет вид, аналогичный (4.108) с заменой параметров межионной анизотропии $\Delta \rightarrow -\Delta$, $\Delta_1 \rightarrow -\Delta_1$, $\Delta_2 \rightarrow -\Delta_2$:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J_{nn'} \left(S_n^z S_{n'}^z - \Delta \left(S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y \right) \right) - \right. \\ & \left. - K_{nn'} \left(O_{2n}^0 O_{2n'}^0 / 3 - \Delta_1 \left(O_{2n}^{zx} O_{2n'}^{zx} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz} \right) - \Delta_2 \left(O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy} \right) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.125)$$

Далее представляет интерес определить фазовые состояния реализующиеся в системе. Для этого необходимо получить и проанализировать свободную энергию системы. Эта процедура аналогична, проведенной в подразделе 4.4.1.

Разберем отдельно случаи $J_0 > K_0$ и $J_0 < K_0$.

Анализ плотности свободной энергии на экстремум показал, что при $J_0 > K_0$ в системе реализуется лишь ΦM_{\parallel} фаза ($\theta=0$, $\alpha=0$) с вектором магнитного момента, параллельном оси OZ. Дополнительную информацию об области устойчивости однородных фаз можно получить из анализа спектров элементарных возбуждений. Вид спектров магнонов в ΦM_{\parallel} фазе аналогичен (4.115-4.116) с заменой $\Delta \rightarrow -\Delta$, $\Delta_1 \rightarrow -\Delta_1$, $\Delta_2 \rightarrow -\Delta_2$:

$$\varepsilon_1(k) = 2(J_0 + K_0\Delta_2), \quad \varepsilon_2(k) = J_0 + J_0\Delta + K_0 + K_0\Delta_1. \quad (4.126)$$

Спектры (4.126) являются бездисперсионными, а их энергетические щели не обращаются в ноль ни при каких значениях материальных параметров. Следовательно, спектры элементарных возбуждений становятся бездисперсионными и напоминают спектры модели Изинга [131]. На это же обстоятельство указывает вид гамильтониана (4.125), в котором слагаемое

$$-\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} J_{nn'} \left(S_n^z S_{n'}^z - \Delta (S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y) \right)$$

соответствует межионной анизотропии типа «легкая ось». Все слагаемые содержащие параметры межионной анизотропии в гамильтониане (4.125) имеют ту же геометрию, что и изингоподобный гамильтониан. Это означает, что спектры элементарных возбуждений в ΦM_{\parallel} фазе не размягчаются ни при каких значениях параметров межионной анизотропии и, следовательно, фазовый переход из ΦM_{\parallel} фазы не будет являться переориентационным.

Рассмотрим теперь противоположный случай, когда биквадратичное обменное взаимодействие превышает билинейное ($J_0 < K_0$). В этом случае ферромагнитный порядок становится энергетически невыгодным, и в системе реализуется нематическое упорядочение, определяемое квадрупольными параметрами порядка.

Анализ плотности свободной энергии показывает, что единственное нематическое состояние реализуется в случае отрицательных параметров

анизотропии– QU_2 с волновой функцией основного состояния $|\psi\rangle = |0\rangle$. Нематические состояния N_1 и N_2 становятся энергетически не выгодными.

В QU_2 фазе спектры магнонов совпадают с (4.123) с заменой $\Delta \rightarrow -\Delta, \Delta_1 \rightarrow -\Delta_1, \Delta_2 \rightarrow -\Delta_2$:

$$\varepsilon(k) = 2\sqrt{(K_0 + J_k\Delta)(K_0 + K_k\Delta_1)}. \quad (4.127)$$

Так же как и в ΦM_{\parallel} фазе (4.126), спектр (4.127) является бездисперсионным, и его анализ показывает, что он не обращается в ноль ни при каких значениях материальных параметров. Это обстоятельство свидетельствует о том, что фазовый переход в ΦM_{\parallel} фазу связан только с изменением модуля намагниченности.

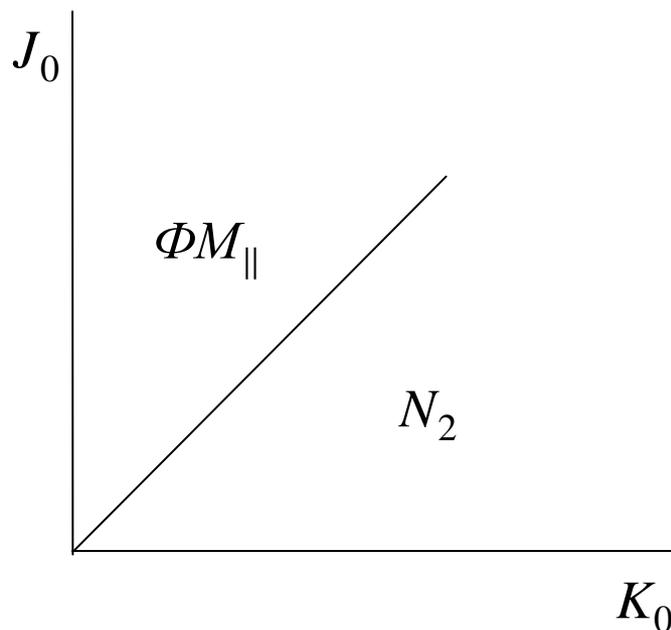


Рис.4.19. Фазовая диаграмма обменно анизотропного изингоподобного негейзенберговского магнетика.

Для определения линий фазового перехода сравним плотности свободных энергий в ΦM_{\parallel} фазе и QU_2 фазе. Из равенства свободных энергий в ΦM_{\parallel} и QU_2 фазах следует, что линией фазового перехода является линия $J_0 = K_0$.

В результате проведенного исследования нами построена фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика с отрицательной межионной анизотропией, которая схематично приведена на рис. 4.19.

Фазовый переход $QU_2 - \Phi M_{\parallel}$, полученный в данной модели, не связан с изменением параметров межионной анизотропии, а определяется лишь соотношением обменных интегралов. Это связано с тем, что данная модель представляет собой изингоподобный магнетик, в котором присутствует очень большая одноосная анизотропия (ось симметрии которой совпадает с осью квантования), которая ни с какими другими взаимодействиями не «конкурирует». Переход же $QU_2 - \Phi M_{\parallel}$ обусловлен конкуренцией билинейного (изинговского) обменного взаимодействия с биквадратичным (также изинговским) обменным взаимодействием (модель Блюма-Эмери-Гриффитца).

4.5. Двухподрешеточный негейзенберговский магнетик со сложной межионной анизотропией.

4.5.1. Анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений в антиферромагнитных фазах.

Представляет интерес исследовать фазовые состояния и динамические свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со сложной межионной анизотропией. Очевидно, что такое разбиение на эквивалентные подрешетки возможно в случае отрицательного билинейного обменного интеграла.

В качестве модели рассмотрим магнетик со спином магнитного иона единица, в котором учтена возможность разбиения на две подрешетки. Такой выбор величины спина позволяет учесть кроме билинейного (гейзенберговского) обменного взаимодействия, также и биквадратичное обменное взаимодействие. Таким образом гамильтониан такой системы можно представить в виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J_{nn'} \left[S_n^z S_{n'}^z + \Delta (S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y) \right] + K_{nn'} \left[O_{2n}^0 O_{2n'}^0 / 3 + \Delta_1 (O_{2n}^{zx} O_{2n'}^{zx} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz}) + \Delta_2 (O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy}) \right] \right\}, \quad (4.128)$$

где $J_{nn'}, K_{nn'} < 0$ константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, соответственно; $\Delta, \Delta_1, \Delta_2 > 0$ параметры межионной анизотропии; n, n' – номера подрешеток; O_j^i – операторы Стивенса

Исследование будем проводить в области низких температур $T=0$, и как отмечалось ранее, предполагается, что в системе возможно разбиение на две эквивалентные подрешетки (индексы n и n' определяют номера подрешеток). Нас интересует реализация различных спиновых состояний системы в зависимости от соотношения материальных параметров системы. Так, в случае преобладающего билинейного обменного взаимодействия $|J| > |K|$ очевидно,

что состояние магнетика будет, в основном, определяться дипольными параметрами порядка подрешеток. В противоположном случае $|K| > |J|$ определяющую роль в формировании фазовых состояний будут играть тензорные параметры порядка (квадратичные по операторам спина), поскольку при таком соотношении обменных интегралов, намагниченности подрешеток равны нулю в силу реализации квантового сокращения спина [22,47]. В изотропных многоподрешеточных негейзенберговских магнетиках, при таких условиях реализуются ортогональные нематические состояния [19,20,22]. Возможность реализации аналогичных состояний в обменно анизотропном негейзенберговском магнетике представляет интерес.

Исследование систем с точным учетом анизотропии необходимо начать с определения основной спиновой конфигурации на каждом узле [14]. Для перехода в собственную систему координат на каждом узле совершим унитарное преобразование вида

$$\tilde{H} \rightarrow U \tilde{H} U^{-1}, \text{ где } U = \prod_k \exp(-i\theta_k S_k^y) \exp(-i\varphi_k S_k^z). \quad (4.129)$$

Унитарное преобразование вида (4.129) соответствует линейному преобразованию спиновых операторов $S_k^\alpha = \sum_\beta u_k^{\alpha\beta} S_k^\beta$, $O_{2k}^{\alpha\beta} = \sum_{\alpha',\beta'} u_k^{\alpha\alpha'} u_k^{\beta\beta'} O_{2k}^{\alpha'\beta'}$, где $u_k^{\alpha\beta} = u_k^{\alpha\beta}(\theta_k, \varphi_k)$ – матрица поворотов, k – номера узлов подрешеток. Необходимо отметить, что преобразование (4.129) позволяет рассматривать двухподрешеточную систему как одноподрешеточную, так называемое сокращенное описание. Для перехода к двухподрешеточному описанию необходимо сделать обратные преобразования.

Дальнейшее рассмотрение будем проводить в приближении среднего поля. Выделяя в гамильтониане (4.128) средние, связанные с упорядочением магнитного момента, а также квадрупольные моменты $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$, запишем одноузельный гамильтониан в виде:

$$H_0(n) = -H_z S_n^z - H_x S_n^x - B_2^0 O_{2n}^0 - B_2^2 O_{2n}^2 - B_2^{zx} O_{2n}^{zx} \quad (4.130)$$

где H_z, H_x – функции $J_0, \langle S \rangle, \Delta, \theta_n, \varphi_n$; коэффициенты B_2^0, B_2^2, B_2^{zx} пропорциональны K_0 и являются функциями параметров и углов $q_2^t, \Delta_1, \Delta_2, \theta_n, \varphi_n$; $J_0 = \sum_{n'} J_{nn'}$, $K_0 = \sum_{n'} K_{nn'}$ – нулевые Фурье-компоненты обменных интегралов.

Для решения одноузельной задачи воспользуемся методом унитарного преобразования N -уровневой системы для операторов Хаббарда.

Одноузельный гамильтониан (4.130) можно представить выраженным через операторы Хаббарда:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k H^k + \sum_{k \neq m} U_{km} X^{km}, \quad U_{mk} = (U_{km})^*, \quad (4.131)$$

здесь ε_k – множители диагональных операторов; U_{km} – множители недиагональных операторов. Проводя процедуру диагонализации гамильтониана (4.131) с помощью обобщенного u - v преобразования [232], базис собственных векторов определяется (4.110).

Вид параметров порядка, входящих в одноузельный гамильтониан (4.131), определяется из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда:

$$\begin{aligned} \langle S^x \rangle &= \sqrt{2} \sin 2\beta (\cos \alpha + \sin \alpha) / 2, \quad \langle S^z \rangle = \cos^2 \beta \cos 2\alpha, \quad q_2^2 = \cos^2 \beta \sin 2\alpha, \\ q_2^0 &= 1 - 3 \sin^2 \beta, \quad q_2^{zx} = \sqrt{2} \sin 2\beta (\cos \alpha - \sin \alpha) / 2. \end{aligned} \quad (4.132)$$

Для получения условий устойчивости фазовых состояний, реализующихся в системе, исследуем плотность свободной энергии. В случае низких температур ($T \rightarrow 0$), энергия основного состояния совпадает с плотностью свободной энергии. Общий вид выражения является довольно громоздким, поэтому отдельно исследуем энергию в случаях: $\langle S \rangle \neq 0$, в котором реализуется дипольное (или, как будет показано ниже, квадрупольно-дипольное) и $\langle S \rangle = 0$ - квадрупольное упорядочение.

В случае реализации антиферромагнитного упорядочения параметр унитарного преобразования $\beta = 0$, поскольку в собственной системе координат

с осью квантования OZ , среднее $\langle S^x \rangle = 0$. Анализ плотности свободной энергии

$$F = \frac{1}{2} \left[-J_0(1-\Delta) \cos^2 2\alpha + K_0(1-\Delta_1 + (\Delta_1 - \Delta_2) \sin 2\alpha)(1 - \sin 2\alpha) \right] \sin^2 \theta + \frac{K_0}{8} (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2)(1 - \sin 2\alpha)^2 \sin^4 \theta + \frac{1}{2} (J_0 + K_0\Delta_2) \cos^2 2\alpha, \quad (4.133)$$

показывает, какие устойчивые фазовые состояния реализуются в системе. Угол θ – угол между вектором намагниченности и осью OZ первой подрешетки; во второй подрешетке этот угол составляет $(\pi - \theta)$; α – параметр унитарного преобразования. В случае изотропного обменного взаимодействия было показано [22], что антиферромагнитная фаза устойчива при $|J| > |K|$. В случае анизотропного обменного взаимодействия это условие будет скорректировано параметрами обменной анизотропии Δ, Δ_1 и Δ_2 .

Очевидно, что в случае $K = 0$ величина среднего спина не меняется – $\langle S \rangle = 1$ (параметр $\alpha = 0$). В зависимости от значения анизотропного параметра Δ изменяется направление вектора намагниченности и реализуются антиферромагнитно упорядоченные фазы: (AFM_z) с направлением вектора магнитного момента вдоль OZ устойчивая при $\Delta < 1$ и плоскостная фаза с направлением вектора магнитного момента ортогональным OZ при $\Delta > 1$. При $K \neq 0$ в плоскостной фазе модуль магнитного момента $\langle S \rangle$ становится меньше единицы, что видно из выражения

$$\langle S \rangle = \sqrt{1 - \sin^2 2\alpha_{\perp}}, \quad \sin 2\alpha_{\perp} = K_0(1 - \Delta_2) / (4J_0\Delta + K_0(3 + \Delta_2)). \quad (4.134)$$

Плоскостную антиферромагнитную фазу в данном случае определим, как квадрупольно-ферромагнитную $(AKFM_x)$: фаза характеризуется не только средним значением спина на узле, но квадрупольными параметрами порядка. Анализ плотности свободной энергии (4.133) показывает, что при условии $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ реализуется промежуточная антиферромагнитная угловая фаза

$AKFM_{\angle}$ с $\langle S \rangle < 1$, в которой векторы магнитных моментов в подрешетках антипараллельны друг другу, и образуют угол θ с осью квантования OZ. Этот угол изменяется в зависимости от соотношения между константами обменного взаимодействия значение от 0 до $\pi/2$:

$$\sin 2\alpha_{\angle} = \frac{K_0 \left((4\Delta_1 - \Delta_2 - 3) \cos^2 \theta + 1 - \Delta_2 \right) \sin^2 \theta}{4J_0 \left(\Delta \sin^2 \theta + \cos^2 \theta \right) + K_0 \left(\left((4\Delta_1 - \Delta_2 - 3) \cos^2 \theta + 3(1 - \Delta_2) + 4\Delta_2 \right) \sin^2 \theta \right)},$$

$$\cos 2\theta = \frac{4J_0 (1 + \sin 2\alpha_{\angle}) (1 - \Delta) - K_0 (1 + 3 \sin 2\alpha_{\angle}) (1 - \Delta_2)}{K_0 (1 - \sin 2\alpha_{\angle}) (3 + \Delta_2 - 4\Delta_1)}. \quad (4.135)$$

Для дальнейшего исследования фазовых состояний нам потребуются данные о динамических свойствах системы. Спектры возбуждений во всех фазах можно получить из полюсов функций Грина [227].

В AFM_z фазе спектр возбуждений определяется выражениями:

$$\varepsilon_1^2(k) = 4(J_0 + K_k \Delta_2)(J_0 - K_k \Delta_2); \quad (4.136)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = (J_0 - K_0)^2 - (J_k \Delta - K_k \Delta_1)^2. \quad (4.137)$$

Спектры в $AKFM_x$ фазе имеют вид:

$$\varepsilon_3^2(k) = 4(J_0 \Delta - K_k \Delta_1) \left\{ (J_0 - J_k) \Delta + [J_k \Delta + K_k (3 + \Delta_2)] / 4 \right\} (1 - \sin^2 2\alpha_{\perp}); \quad (4.138)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = \Omega_1 (\Omega_1 + \Omega_2), \quad (4.139)$$

$$\Omega_1 = (K_k + K_0) (1 + \sin 2\alpha_{\perp}) \Delta_2 + (J_k + J_0) (1 - \sin 2\alpha_{\perp}) \Delta,$$

$$\Omega_2 = [K_k (\Delta_2 - \Delta_1) - J_k (1 - \Delta)] \sin 2\alpha_{\perp} - J_k (1 + \Delta) + K_k (\Delta_2 + \Delta_1).$$

Вначале рассмотрим случай $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ (рис. 4.20.(a)). Как следует из выражений (4.134) и (4.135) в $AKFM_x$ и угловой ($AKFM_{\angle}$) фазах $\langle S \rangle \neq 1$, при этом фазовые переходы $AFM_z - AKFM_x$ и $AKFM_x - AKFM_{\angle}$ фазы являются чисто ориентационными фазовыми переходами второго рода. При приближении к линии фазового перехода $AKFM_{\angle} - AFM_z$ модуль магнитного момента стремится к значению насыщения $\langle S \rangle = 1$. На линии фазового перехода $J_0 (1 - \Delta) = K_0 (1 - \Delta_1)$ щель в спектре (4.137) обращается в ноль. На линии

фазового перехода $AKFM_z - AKFM_x$ фазы

$$K_0(\Delta_1 + \Delta_2) - J_0(1 - \Delta) - \sin 2\alpha_{\perp} [K_0(\Delta_1 - \Delta_2) + J_0(1 + \Delta)] = 0$$

значения намагниченностей сравниваются т.е.

$$\sin 2\alpha_{\perp} = \sin 2\alpha_{\angle} \text{ при } \theta = \pi/2$$

На этой же линии обращается в ноль щель в спектре (4.139). В длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ оба спектра (4.137) и (4.139) на линиях фазовых переходов в угловую фазу имеют линейный по \vec{k} закон дисперсии.

Теперь рассмотрим случай $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$ (рис. 4.20.(б)). Угловая фаза становится неустойчивой. Фазовый переход из AFM_z фазы происходит непосредственно в $AKFM_x$ фазу и не является ориентационным, т.к. на линии фазового перехода $AFM_z - AKFM_x$ фазы вместе с резким поворотом вектора намагниченности на угол $\pi/2$ скачком изменяется значение модуля вектора намагниченности с $\langle S \rangle = 1$ в AFM_z фазе до $\langle S \rangle < 1$ в $AKFM_x$ фазе, определяемого выражением (4.134). Линия фазового перехода определяется из равенства свободных энергий в AFM_z и $AKFM_x$ фазах:

$$4J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_2)(1 + \sin 2\alpha_{\perp}).$$

В окрестности линии фазового перехода $AFM_z - AKFM_x$ размягчаются ветви возбуждений (4.137) и (4.139). Обращение щелей в спектрах в ноль определяет линии неустойчивости спектров:

$$J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_1) \text{ и}$$

$$K_0(\Delta_1 + \Delta_2) - J_0(1 - \Delta) - \sin 2\alpha_{\perp} [K_0(\Delta_1 - \Delta_2) + J_0(1 + \Delta)] = 0.$$

Линии неустойчивости определяют границы области сосуществования рассматриваемых здесь фаз. Такое поведение спектров характерно для фазовых переходов первого рода.

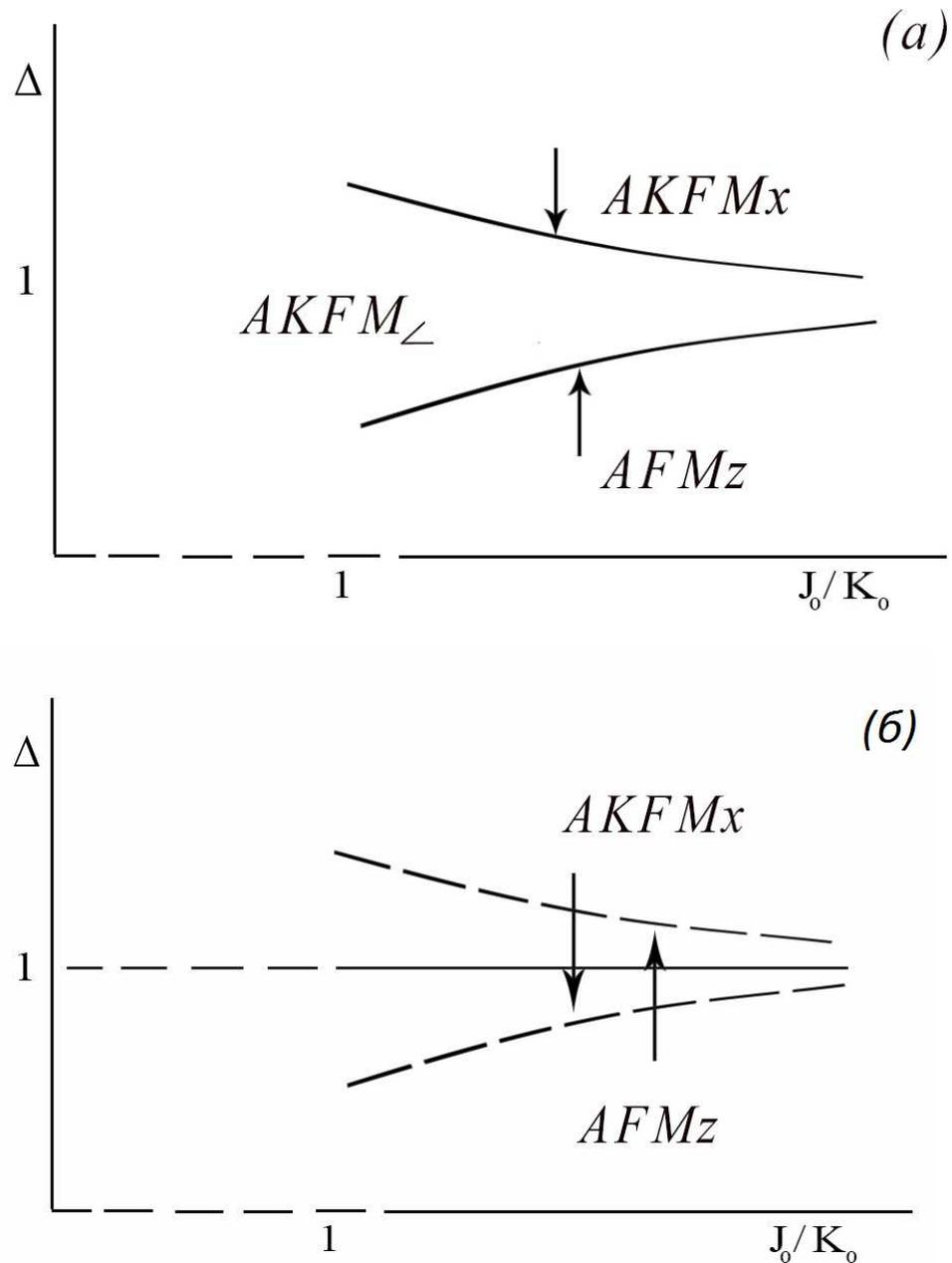


Рис. 4.20. а) Фазовая диаграмма AFM фаз в случае $J > K$ и $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$; б) Фазовая диаграмма AFM фаз в случае $J > K$ и $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$.

4.5.2. Исследования ортогональных квадрупольных фаз

Исследуем статические и динамические свойства нематического упорядочения в двухподрешеточном магнетике. Пусть $|K| > |J|$ и соотношение параметров анизотропии $\Delta, \Delta_1, \Delta_2$ такое, что антиферромагнитное упорядочение становится энергетически невыгодным. Одноподрешеточное нематическое

состояние неустойчиво, т.к. при $K < 0$ основное состояние вырождено, что позволяет сделать вывод, что система разбита на две подрешетки с взаимно ортогональными осями квантования и $\langle S^z \rangle = 0$ в обеих подрешетках. Анизотропия обменного взаимодействия приводит к появлению выделенных направлений ориентации тензора квадрупольного момента подрешеток. Вместо изотропного ортогонального нематического состояния [22] реализуются ортогональные квадрупольные фазы.

Состояния каждой из подрешеток характеризуются параметрами порядка, являющиеся компонентами симметричного тензора второго ранга; геометрическим образом такого тензора является эллипсоид. Из симметрии биквадратичной части гамильтониана (4.128) следует, что главные оси тензора эллипсоидов подрешеток могут быть ориентированы строго в плоскостях XOY , YOZ или XOZ ; причем плоскости YOZ и XOZ – энергетически эквивалентны. В произвольном фазовом состоянии параметры порядка системы определяются выражениями (4.132). Поскольку нас интересуют квадрупольные состояния, в которых средние значения спина в каждом узле решетки равны нулю, параметр α может принимать значения $\pm \pi/4$. Квадрупольные параметры порядка тогда имеют вид:

$$q_2^0 = \cos^2 \beta - 2 \sin^2 \beta, \quad q_2^2 = -\cos^2 \beta, \quad q_2^{zx} = \sin 2\beta.$$

Если параметр $\alpha = -\pi/4$, то плотность свободной энергии имеет вид

$$F = \frac{K_0}{3} + \frac{K_0}{8}(4\Delta_1 - 3 - \Delta_2)\sin^2 2\beta \quad (4.140)$$

Учитывая, что намагниченности подрешеток равны нулю $\langle S_{n_1}^z \rangle = \langle S_{n_2}^z \rangle = 0$, и выполняя преобразование во второй подрешетке

$$q_{2n_2}^i = \langle U(-\theta) O_2^i U^+(-\theta) \rangle, \quad U(\theta) = e^{-i\theta S^y} \quad (\theta = \pi/2), \quad (4.141)$$

обратное (4.129), можно получить параметры порядка подрешеток при различных соотношениях констант межионной анизотропии и параметра β . Из соотношения (4.140) следует, что в зависимости от соотношения параметров

межионной анизотропии возможны реализации ортогональных квадрупольных состояний (OQU).

Так, при $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ и $\beta = 0$ $\langle S_i^z \rangle = \langle S_i^x \rangle = 0$, $i=1,2$, а квадрупольные параметры порядка первой и второй подрешеток равны, соответственно:

$$q_{2(1)}^0 = 1, q_{2(1)}^2 = -1, q_{2(1)}^{zx} = 0 \text{ и } q_{2(2)}^0 = -2, q_{2(2)}^2 = 0, q_{2(2)}^{zx} = 0.$$

Волновые функции основного состояния подрешеток ортогональны, т.е. $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$, и имеют вид $|\psi_1\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle$. Обозначим такое фазовое состояние OQU_1 . В этом состоянии квадрупольные средние в каждой подрешетке определяются выражениями

$$\langle (S_1^x)^2 \rangle = 0, \langle (S_1^y)^2 \rangle = \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1, \langle (S_2^x)^2 \rangle = \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_2^z)^2 \rangle = 0.$$

Следовательно, геометрически эта фаза представляет собой одноосные эллипсоиды, главные оси которых лежат в плоскостях ZOY и XOY

Если $\beta = \pi/4$, а $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$, и учитывая обратное преобразование (4.141), получим волновые функции основного состояния подрешеток:

$$|\psi_1\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/2 + |0\rangle/\sqrt{2}, |\psi_2\rangle = -(|1\rangle - |-1\rangle)/2 + |0\rangle/\sqrt{2}, \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0,$$

а параметры порядка подрешеток равны, соответственно:

$$q_{2(1)}^0 = -1/2, q_{2(1)}^2 = -1/2, q_{2(1)}^{zx} = 1 \text{ и } q_{2(2)}^0 = -1/2, q_{2(2)}^2 = -1/2, q_{2(2)}^{zx} = -1.$$

Это означает, что средние значения квадратов спиновых операторов имеют, соответственно, вид:

$$\begin{aligned} \langle (S_1^x)^2 \rangle = 1/2, \langle (S_1^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1/2, \langle S_1^x S_1^z + S_1^z S_1^x \rangle = 1; \\ \langle (S_2^x)^2 \rangle = 1/2, \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_2^z)^2 \rangle = 1/2, \langle S_2^x S_2^z + S_2^z S_2^x \rangle = -1. \end{aligned}$$

Чтобы определить геометрический образ данного состояния в спиновом пространстве, исследуем поверхность, определяемую уравнением $\vec{S}(\hat{q}\vec{S}) = 1$,

где вектор $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$, а тензор $\hat{q} = q^{ij} = \langle Q^{ij} \rangle = \langle S^i S^j + S^j S^i \rangle / 2$. Уравнение поверхности эллипсоида одной из подрешеток

$$\langle (S_1^z S_1^x + S_1^x S_1^z) \rangle + \frac{1}{2} \langle (S_1^z)^2 \rangle + \langle (S_1^y)^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle (S_1^x)^2 \rangle = 1;$$

а для второй

$$\frac{1}{2} \langle (S_2^z)^2 \rangle + \langle (S_2^y)^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle (S_2^x)^2 \rangle - \langle (S_2^z S_2^x + S_2^x S_2^z) \rangle = 1.$$

Повороты на угол $\pi/4$ и $-\pi/4$ соответственно для первой и второй подрешеток вокруг оси OY приводят уравнения к главным осям. Уравнения поверхностей для первой и второй подрешеток, соответственно

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \langle (S_1^x)^2 \rangle + \langle (S_1^y)^2 \rangle - \frac{1}{2} \langle (S_1^z)^2 \rangle &= 1; \\ -\frac{1}{2} \langle (S_2^x)^2 \rangle + \langle (S_2^y)^2 \rangle + \frac{3}{2} \langle (S_2^z)^2 \rangle &= 1. \end{aligned} \quad (4.142)$$

Как видно из (4.142) геометрическим образом данного состояния являются эллипсоиды, главные оси которых лежат в плоскости XOZ, причем в первой подрешетке главная ось эллипсоида образует угол $\pi/4$ с осью OX, а во второй подрешетке главная образует угол $\pi/4$ с осью OZ. Такое состояние мы обозначим OQU_{\angle} и назовем угловой ортогонально квадрупольной фазой, поскольку, главные оси квадрупольных эллипсоидов подрешеток образуют угол с осью квантования.

Если параметры унитарных преобразований равны $\alpha = \pi/4, \beta = 0$, то свободная энергия системы имеет вид:

$$F = -\frac{K_0}{6}(1 - 3\Delta_2). \quad (4.143)$$

Совершая во второй подрешетке унитарный поворот, обратный преобразованию (4.129),

$$q_{2n_2}^i = \langle U(-\varphi) O_2^i U^+(-\varphi) \rangle, \quad U(\varphi) = e^{-i\varphi S^z}, \quad \varphi = \pi/2,$$

получим волновые функции основного состояния подрешеток $|\psi_1\rangle = (|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\psi_2\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ ($\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$). Следовательно, параметры порядка и квадрупольные средние для каждой из подрешеток имеют вид:

$$q_2^0 = 1, q_2^2 = 1, q_2^{zx} = 0, \langle (S_1^x)^2 \rangle = 1, \langle (S_1^y)^2 \rangle = 0, \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1;$$

$$q_2^0 = 1, q_2^2 = -1, q_2^{zx} = 0, \langle (S_2^x)^2 \rangle = 0, \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_2^z)^2 \rangle = 1.$$

Как следует из последних выражений, геометрическими образами состояний являются эллипсоиды, лежащие в плоскостях ZOX и ZOY для первой и второй подрешеток, соответственно. Такое состояние обозначим как OQU_2 .

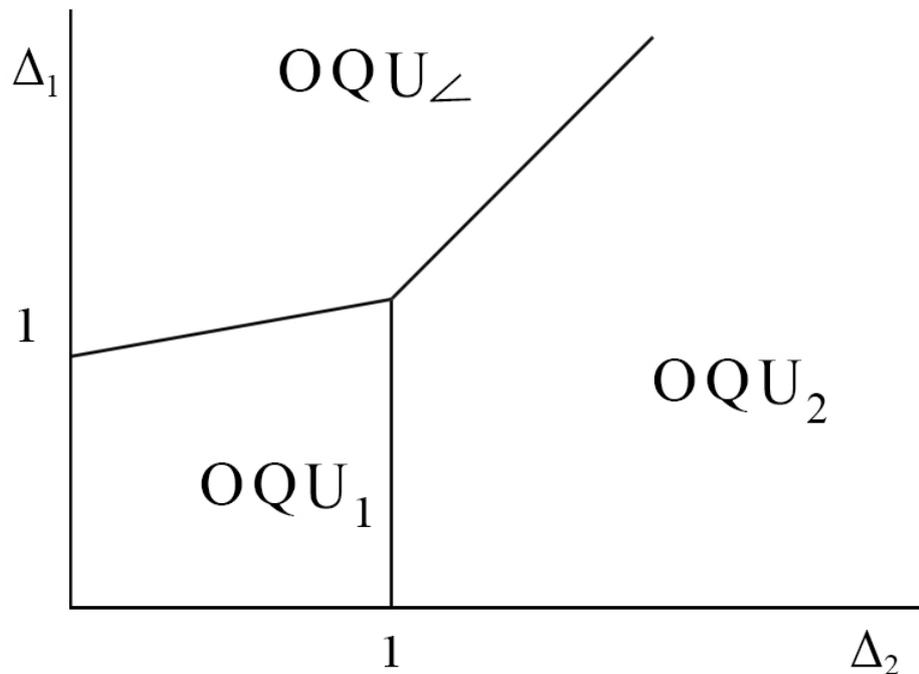


Рис.4.21. Фазовая диаграмма системы в случае реализации OQU фаз при $|K| > |J|$.

Из равенства свободных энергий в рассмотренных состояниях можно определить линии фазового перехода (рис.4.21) между OQU фазами:

$$OQU_1 - OQU_2: \Delta_2 = 1;$$

$$OQU_1 - OQU_{\angle}: 4\Delta_1 = \Delta_2 + 3;$$

$$OQU_2 - OQU_{\angle}: \Delta_1 = (5\Delta_2 - 1)/4,$$

Для уточнения фазовой диаграммы и определения типов фазовых переходов исследуем спектры элементарных возбуждений в OQU фазах.

Спектры возбуждения в OQU_1 – фазе имеют вид:

$$\varepsilon_1^2(k) = [K_0(3 + \Delta_2)/2 + 2J_k\Delta][K_0(3 + \Delta_2)/2 - 2K_k\Delta_1]. \quad (4.144)$$

а спектры в OQU_2 – фазе:

$$\varepsilon_2^2(k) = 4(K_0\Delta_2 + J_k)(K_0 - K_k)\Delta_2. \quad (4.145)$$

Высокочастотные ветви возбуждений OQU_1 и OQU_2 фаз не приводятся т.к. являются бездисперсионными.

Спектры возбуждения в OQU_{\angle} – фазе можно представить в виде:

$$\varepsilon_3^2(k) = [K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4 + J_k(1 - \Delta)] \cdot [K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4 + J_k(\Delta_2 - \Delta_1)]; \quad (4.146)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = (K_0\Delta_1 + J_k\Delta)[4K_0\Delta_1 - K_k(3 + \Delta_2)]. \quad (4.147)$$

Фазовые переходы между OQU фазами обусловлены изменением параметров межионной анизотропии Δ_1 и Δ_2 . Эти переходы можно интерпретировать как переориентационные, причем понятие «переориентации» связано с поворотом главных осей квадрупольных эллипсоидов.

Фазовый переход $OQU_1 - OQU_{\angle}$ фазы являются ориентационными фазовыми переходами второго рода. На линии фазового перехода $4\Delta_1 = \Delta_2 + 3$ в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ щели в ветвях (4.144) и (4.147) обращаются в ноль; спектры становятся линейными по волновому вектору \vec{k} .

Линия $\Delta_2 = 1$ является линией фазового перехода между OQU_1 и OQU_2 фазами. Этот переход является ориентационным фазовым переходом первого рода, поскольку параметры порядка меняются скачком, а спектры не размягчаются на линии фазового перехода. Как следует из (4.144) спектр возбуждений OQU_1 фазы теряет устойчивость на линии $\Delta_2 = 4(J_0/K_0)\Delta - 3$

при $k \rightarrow \pi$, а щель в спектре (4.145) OQU_2 фазы обращается в ноль на линии потери устойчивости $\Delta_2 = J_0/K_0$ также при $k \rightarrow \pi$.

Фазовый переход между $OQU_2 - OQU_{\angle}$ фазами является ориентационным фазовым переходом первого рода. На линии фазового перехода $4\Delta_1 = 5\Delta_2 - 1$ щели в спектрах магнонов не обращаются в ноль. Как следует из (4.145) спектр магнонов OQU_2 фазы теряет устойчивость на линии $\Delta_2 = J_0/K_0$ при $k \rightarrow \pi$, а линия потери устойчивости в OQU_{\angle} фазе определяется обращением в ноль энергетической щели спектра (4.147), и имеет вид $\Delta_1 = (J_0/K_0)\Delta$ при $k \rightarrow \pi$.

4.5.3. Фазовые переходы по модулю.

Выше мы рассмотрели фазовые переходы между дипольными и квадрупольно дипольными фазами в случае преобладающего билинейного обменного взаимодействия ($J_0/K_0 \gg 1$). Представляет интерес рассмотреть противоположную ситуацию, когда преобладающим является биквадратичное обменное взаимодействие ($J_0/K_0 \leq 1$). Очевидно, что реализация того или иного состояния определяется соотношением параметров системы, но поскольку мы рассматриваем случай $J_0/K_0 \leq 1$, то основное внимание уделим соотношениям между параметрами анизотропии.

Рассмотрим вначале случай $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ (рис.4.22). При таком соотношении параметров анизотропии и в зависимости от соотношений Δ и J_0/K_0 в системе реализуются AFM_z , $AKFM_x$, OQU_{\angle} фазы. Поведение в окрестности дипольных фаз, т.е. AFM фаз было нами рассмотрено выше. Теперь рассмотрим фазовые переходы между ортогональными квадрупольными фазами и дипольными.

Линия фазового перехода $AFM_z - OQU_{\angle}$ фазы находится из равенства энергий основного состояния в этих фазах: $J_0 = K_0(4\Delta_1 + 1 - \Delta_2)/4$. Щели в

спектрах (4.136-4.137) и (4.146-4.147) соответствующих фаз обращаются в ноль на линиях потери устойчивости спектра при $k \rightarrow \pi$ (4.146) $2J_0(1-\Delta) = K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4$ в области $J_0/K_0 < 1$ и потери устойчивости спектра (4.136) $J_0 = K_0\Delta_2$ в области $J_0/K_0 > 1$. Линии потери устойчивости определяют область совместного сосуществования AFM_z и OQU_\perp фаз. Таким образом, фазовый переход $AFM_z - OQU_\perp$ фазы является фазовым переходом первого рода, в результате которого скачком меняется модуль намагниченности с единицы до нуля.

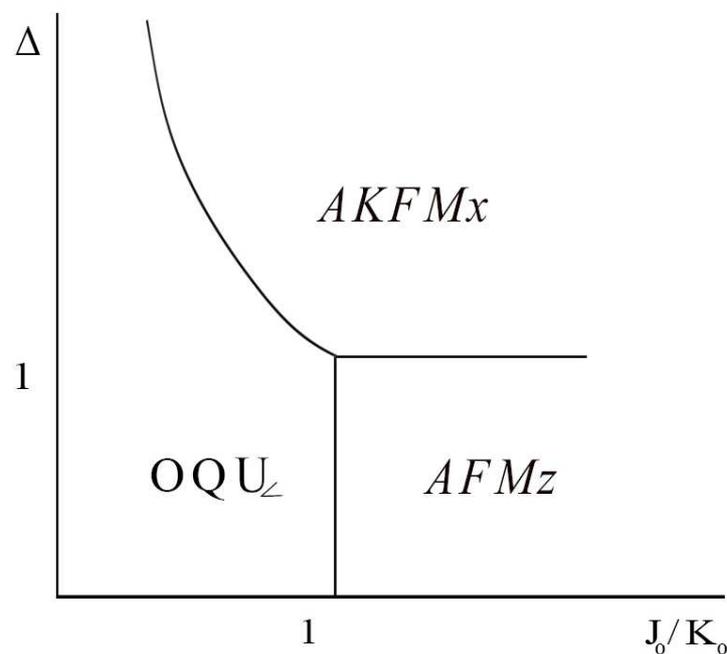


Рис. 4.22. Фазовая диаграмма рассматриваемой системы при $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ и $J_0/K_0 \leq 1$.

Линия фазового перехода $AKFM_x - OQU_\perp$ фазы определяется выражением $J_0\Delta = K_0\Delta_1$. На этой же линии обращаются в ноль щели спектров (4.139) и (4.147) при $k \rightarrow \pi$. Это фазовый переход II рода: при приближении к линии фазового перехода из квадрупольно-ферромагнитной фазы $AKFM_x$ намагниченность подрешеток непрерывно уменьшается и на линии $J_0\Delta = K_0\Delta_1$ обращается в ноль $\langle S \rangle = 0$.

Теперь рассмотрим следующую ситуацию: $\Delta_2 < 1$ и $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ (рис.4.23). В этом случае в системе в зависимости от соотношений Δ и J_0/K_0 реализуются AFM_z , $AKFM_{\angle}$, $AKFM_x$ и OQU_1 фазы.

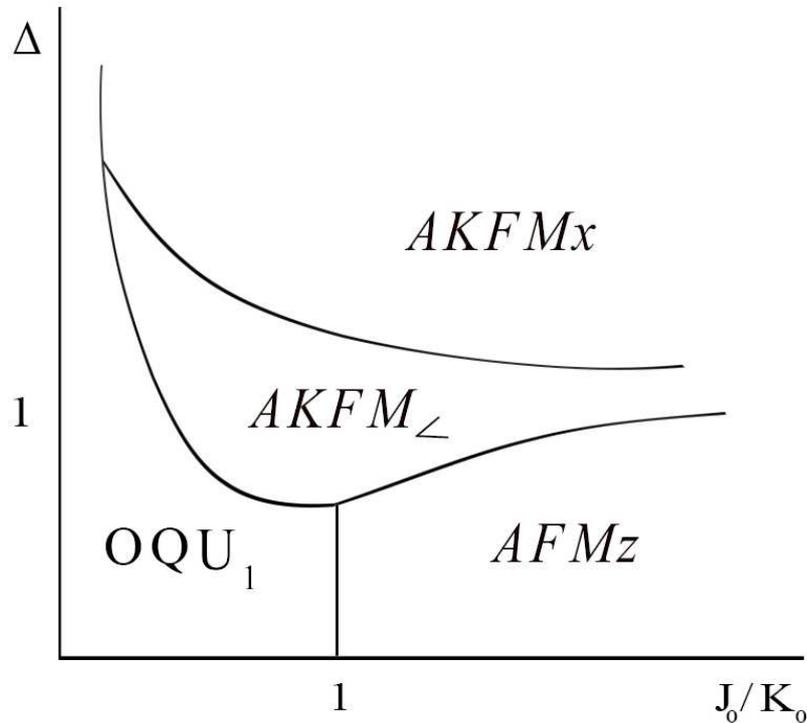


Рис.4.23. Фазовая диаграмма двухподрешеточного негейзенберговского магнетика при $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$, $\Delta_2 < 1$.

Линия фазового перехода $AFM_z - OQU_1$ фазы $J_0 = K_0$ определяется равенством свободных энергий. Щели в спектрах (4.136-4.137) и (4.144) соответствующих фаз обращаются в ноль на линиях потери устойчивости спектра (4.144) при $k \rightarrow \pi$ $J_0\Delta = K_0(3 + \Delta_2)/4$ в области $J_0/K_0 < 1$ и потери устойчивости спектра (4.136) $J_0 = K_0\Delta_2$ в области $J_0/K_0 > 1$. Эти линии определяют область сосуществования AFM_z и OQU_1 фаз. Переход между фазами сопровождается скачком намагниченности, и является фазовым переходом первого рода.

На линии $J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)}/2$ фазового перехода $AKFM_x - OQU_1$ фазы обращается в ноль спектр (4.138) при $k \rightarrow \pi$. Однако спектр OQU_1 фазы (4.144)

становится неустойчивым на линии $J_0\Delta = K_0(3 + \Delta_2)/4$ при $k \rightarrow \pi$, совпадающая с линией фазового перехода $J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)/2}$ при $\Delta_2 \rightarrow 1$.

Линия фазового перехода $AKFM_{\angle} - OQU_1$ фаз определяется из равенства свободной энергии (4.133) со значением α и θ определяемых выражениями (4.135) и (4.143) при $\beta = 0$. Выражение это громоздко и приводиться не будет. Кроме того, на линиях $\Delta = 1$ и $J_0/K_0 = 1$ симметрия системы повышается и в окрестности этих линий возникают разрывы на линии фазового перехода $AKFM_{\angle} - OQU_1$ фаз. Окрестность точки пересечения линий $\Delta = 1$ и $J_0/K_0 = 1$ требует более подробного анализа, выходящего за рамки нашей задачи. При этом, вполне достоверно можем говорить, что на линии $AKFM_{\angle} - OQU_1$ фаз скачком меняется все параметры порядка.

Наконец, рассмотрим еще один случай $\Delta_2 > 1$ и $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ (рис.4.24). При таком соотношении параметров межюнной анизотропии в системе, в зависимости от Δ и J_0/K_0 реализуются AFM_z , $AKFM_{\angle}$, $AKFM_x$ и OQU_2 фазы.

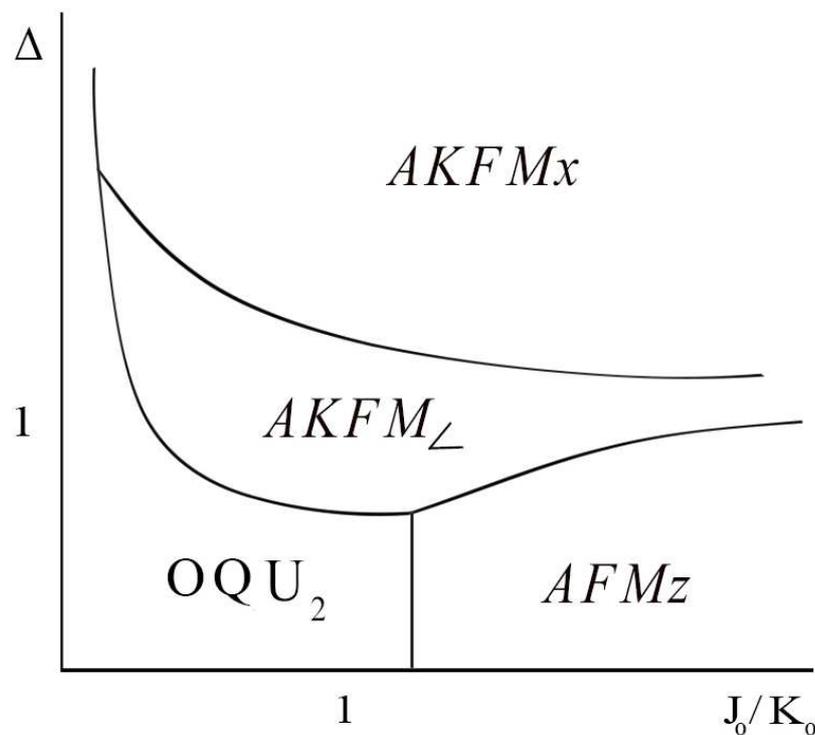


Рис.4.24. Фазовая диаграмма двухподрешеточного негейзенберговского

магнетика при $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$, $\Delta_2 > 1$.

Линия фазового перехода $AFM_z - OQU_2$ фазы определяется равенством свободных энергий и имеет вид $J_0 = K_0\Delta_2$. Щели в спектрах (4.136) и (4.147) соответствующих фаз обращаются в ноль на линии фазового перехода при $k \rightarrow \pi$, параметры порядка изменяются скачком. Следовательно переход между фазами $AFM_z - OQU_2$ вырожденный фазовый переход I рода.

В точке $J_0\Delta = K_0 \left[\Delta_2 - 1 + \sqrt{2\Delta_2(1 + \Delta_2)} \right] / 2$ фазового перехода $AKFM_x - OQU_2$ фазы щели в спектрах (4.138-4.139) и (4.145) не обращаются в ноль. Спектр OQU_2 фазы (4.145) становится неустойчивым на линии $J_0 = K_0\Delta_2$ при $k \rightarrow \pi$, а спектр (4.138) $AKFM_x$ фазы неустойчив на линии $J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)}/2$.

Рассуждения касательно перехода $AKFM_z - OQU_2$ аналогичны рассуждениям переходу $AKFM_z - OQU_1$ фазы.

Основные результаты четвертого раздела

1. Исследован негејзенберговский магнетик со спином магнитного иона равным двум с одноосной одноионной анизотропии. Изучение спектров возбуждения в реализующихся фазах позволило построить фазовые диаграммы системы при различных соотношениях материальных констант.

2. Впервые исследован негејзенберговский магнетик с анизотропией обменных взаимодействий. Изучено влияние внешнего поля на фазовые переходы при различных соотношениях материальных параметров системы. Проведено сравнение результатов исследования при крайних значениях параметра анизотропии с известными результатами.

3. Впервые исследована модель негејзенберговского ферромагнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий. Учет анизотропных обменных взаимодействий приводит к снятию вырождения по направлению вектора магнитного момента в ферромагнитной фазе и вектора-директора в нематическом состоянии. Показано, что учет анизотропного биквадратичного обменного взаимодействия более сложного вида приводит к реализации угловых ферромагнитной и нематической фаз.

4. Исследованы статические и динамические свойства двухподрешеточного негејзенберговского магнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий. Анализ динамических и статических свойств системы в случае реализации только тензорных фаз показал, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам. Также показано, что фазовые переходы сопровождающиеся изменением модуля намагниченности могут быть как первого так и второго рода.

Раздел 5. Динамические и статические свойства изотропного негейзенберговского магнетика с $S=2$.

В течение последних двух десятилетий наблюдается растущий интерес к изучению новых фазовых состояний магнетиков, возникающий благодаря учету высших спиновых инвариантов в гамильтониане взаимодействия [19,22,54,65,160-163]. В магнетиках с $S=1$ ферромагнитная фаза, характеризуется как дипольным параметром $\langle S^i \rangle$ порядка, так квадрупольными $\langle (S^i)^2 \rangle$, более того реализуются упорядоченные состояния с $\langle S^i \rangle = 0$ – т.н. нематическое состояние, характеризующееся квадрупольными параметрами порядка. В общем случае, магнетики с произвольным значением спина магнитного иона S , характеризуются мультипольными параметрами порядка степени $2S$ по спиновым операторам. Соответственно, в таких системах возможна реализация новых необычных фазовых состояний [59-66], существование которых невозможно объяснить учетом только лишь билинейного по спинам гейзенберговского обмена.

Целесообразность рассмотрения высших обменов неоднократно обсуждалась многими авторами [14-22]. Хорошо известно, что в модели прямого обмена вклад от высших спиновых инвариантов пренебрежимо мал по сравнению с билинейным. Однако, как отмечено в [15,16], для соединений EuO , $EuSe$, $EuTe$, представляющие собой почти идеальный гейзенберговский магнетик, негейзенберговский обмен может конкурировать с гейзенберговским. В твердом гелии и в UO_2 существуют механизмы возникновения негейзенберговского обмена порядка гейзенберговского [13,15].

Магнитные состояния для спинов $S > 1$ изучены гораздо меньше, но для них получены совершенно новые эффекты, которых нет в модели с $S=1$. Исследование магнетика со спином $S=3/2$ позволило сделать вывод об отсутствии инвариантности относительно отражения времени в нематическом

состоянии за счет свойств средних кубических спиновых операторов [67]. Вследствие этого для спина $S=3/2$ возможно существование антинематической фазы [62,64]. Для системы со спином $S=2$ по сравнению с $S=1$ или $S=3/2$ опять возникает новая физика: получены несколько различных типов нематических состояний [63,65], в том числе и состояние с нарушенной инвариантностью относительно отражения времени.

Интерес к изучению спиновых систем с $S \geq 1$ также связан с описанием бозе-эйнштейновского конденсата в оптических ловушках [59-61]. Теоретически и экспериментально исследуются конденсаты, полученные на ультрахолодных атомах щелочных металлов со спином $S=1$ и $S=2$; также был получен конденсат на атомах Cr со спином $S=3$. Конденсат со спином $S=2$ по сравнению с $S=1$ имеет дополнительный параметр порядка и как следствие – возможность реализации трех типов фазового упорядочения (вместо двух как для случая $S=1$) [59,60,65]. В теоретических работах по исследованию состояний бозе-эйнштейновского конденсата эффективный гамильтониан взаимодействия записывается через операторы проекторов на состояния с общим спином S . Там же указывается возможность написания эффективного гамильтониана в виде ряда по степеням $(\vec{S}_i \vec{S}_j)^{2S}$, где S -величина спина магнитного иона.

Как показывают исследования эффективного гамильтониана с $S=2$, состояния, полученные в [63,65], соответствуют одноподрешеточному изотропному магнетику со спином $S=2$ и учетом всех нетривиальных слагаемых спиновых инвариантов [59,60]. Известно, что при отрицательных значениях констант обменного взаимодействия реализуются двухподрешеточные структуры: антиферромагнитная и ортогонально нематическая фазы для $S=1$ [22] и антиферромагнитная и антинематическая фазы для $S=3/2$ [62,64,66]. Естественно, в магнетике с $S=2$ кроме антиферромагнитной фазы возможно существование большое разнообразие двухподрешеточных нематических фаз различной симметрии.

Таким образом, исследование модели изотропно магнетика с учётом всех высших спиновых инвариантов позволяет решить задачу нахождения фазовых состояний одноподрешеточных и двухподрешеточных структур, а также построить фазовые диаграммы при различных соотношениях между константами обменного взаимодействия. Кроме того, представляет интерес изучить динамические свойства системы вблизи линий фазовых переходов во всех возможных фазах, реализующихся в данной модели.

Данный раздел посвящен изучению фазовых состояний и их устойчивости относительно произвольных возмущений для модели изотропно магнетика со спином $S=2$ в приближении среднего поля с взаимодействием ближайших соседей, допускающей разбиение на две подрешетки.

В **первом** подразделе решается одноузельная задача диагонализации гамильтониана пятиуровневой системы; определяются собственные функции и уровни энергии одноионного гамильтониана. В результате анализа свободной энергии определяются фазовые состояния магнетика, реализующиеся при различных соотношениях констант обменного взаимодействия.

Во **втором** подразделе определяются спектры элементарных возмущений в магнетике с $S=2$. Исследуется поведение спектров в окрестностях линий устойчивостей фаз и линий фазовых переходов в центре и на границе зоны Бриллюэна.

Третий подраздел посвящен исследованию фазовой диаграммы магнетика при различных соотношениях констант обменных интегралов. Введение новых переменных (построенных на комбинациях констант обменных интегралов) позволяет изобразить на сечениях фазовой диаграммы все состояния, реализующиеся в системе.

5.1. Фазовые состояния, реализующихся в изотропном негејзенберговском магнетике с $S=2$.

5.1.1. Гамильтониан негејзенберговского магнетика с $S=2$.

Гамильтониан изотропного негејзенберговского магнетика со спином $S=2$ с учётом допустимого набора спиновых инвариантов имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J_{nn'} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'}) + K_{nn'} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^2 + D_{nn'} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^3 + F_{nn'} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^4 \right\}, \quad (5.1)$$

где суммирование производится по всем ближайшим узлам квадратной решетки, допускающей разбиение на две эквивалентные подрешетки с векторами трансляций \vec{n} и \vec{n}' . Все узлы в сумме учитываются однократно; J , K , D , F – константы обменных взаимодействий, отвечающие различным степеням спиновых инвариантов.

Для записи обменного гамильтониана с тензорными взаимодействиями удобно использовать неприводимые тензорные операторы O_j^i ($j \leq 2S$, $i \leq j$) [70]. Полный набор операторов O_j^i образует унитарную группу $SU(2S+1)$ и действуют в пространстве собственных векторов $|m\rangle$ оператора S^z ($m = \pm 2, \pm 1, 0$). В основе способа построения данных операторов лежит метод эквивалентных операторов [70]. В качестве базиса используется набор ортогональных полиномов Лежандра $P_j^i(\theta, \phi)$ ($j \leq 2S$, $i \leq j$). Используя тот факт, что между матричными элементами функций $P_j^i(\theta, \phi)$ и неприводимыми тензорными операторами $P_j^i(S^i)$ ($P_j^i(S^i)$ – функции оператора спинового момента) существуют однозначные соответствия, строится полный набор тензорных операторов O_j^i ($j \leq 2S$, $i \leq j$) в представлении которых записывается гамильтониан исследуемой системы.

Таким образом, обменный гамильтониан со спином $S=2$ можно представить в виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ a_{nn'}^{(0)} + a_{nn'}^{(1)} (\vec{S}_n \vec{S}_{n'}) + a_{nn'}^{(2)} O_{2n} O_{2n'} + a_{nn'}^{(3)} O_{3n} O_{3n'} + a_{nn'}^{(4)} O_{4n} O_{4n'} \right\}, \quad (5.2)$$

где $a_{nn'}^{(i)}$ функции констант обменных взаимодействий

$$\begin{aligned} a_{nn'}^{(1)} &= J_{nn'} - \frac{1}{2} K_{nn'} + \frac{98}{5} D_{nn'} - \frac{61}{2} F_{nn'}, \quad a_{nn'}^{(0)} = 12K_{nn'} - 6D_{nn'} + \frac{24 \cdot 37}{5} F_{nn'}, \\ a_{nn'}^{(3)} &= D_{nn'} - 5F_{nn'}, \quad a_{nn'}^{(2)} = \frac{1}{2} K_{nn'} - D_{nn'} + \frac{187}{14} F_{nn'}, \quad a_{nn'}^{(4)} = F_{nn'}. \end{aligned} \quad (5.2')$$

$$O_{2n} O_{2n'} = \frac{1}{3} O_{2n}^0 O_{2n'}^0 + O_{2n}^1 O_{2n'}^1 + \tilde{O}_{2n}^1 \tilde{O}_{2n'}^1 + O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + \tilde{O}_{2n}^2 \tilde{O}_{2n'}^2,$$

$$\begin{aligned} O_{3n} O_{3n'} &= \frac{1}{10} O_{3n}^0 O_{3n'}^0 + \frac{3}{20} (O_{3n}^1 O_{3n'}^1 + \tilde{O}_{3n}^1 \tilde{O}_{3n'}^1) + \frac{3}{2} (O_{3n}^2 O_{3n'}^2 + \tilde{O}_{3n}^2 \tilde{O}_{3n'}^2) + \\ &+ \frac{1}{4} (O_{3n}^3 O_{3n'}^3 + \tilde{O}_{3n}^3 \tilde{O}_{3n'}^3), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} O_{4n} O_{4n'} &= \frac{1}{280} O_{4n}^0 O_{4n'}^0 + \frac{1}{7} (O_{4n}^1 O_{4n'}^1 + \tilde{O}_{4n}^1 \tilde{O}_{4n'}^1) + \frac{1}{14} (O_{4n}^2 O_{4n'}^2 + \tilde{O}_{4n}^2 \tilde{O}_{4n'}^2) + \\ &+ O_{4n}^3 O_{4n'}^3 + \tilde{O}_{4n}^3 \tilde{O}_{4n'}^3 + \frac{1}{8} (O_{4n}^4 O_{4n'}^4 + \tilde{O}_{4n}^4 \tilde{O}_{4n'}^4). \end{aligned}$$

Операторы $O_2^i, \tilde{O}_2^i, O_3^i, \tilde{O}_3^i$ определяются (1.27). Тензорные операторы четвертой степени по операторам спина имеют вид:

$$O_4^0 = 35(S^z)^4 - 30S(S+1)(S^z)^2 + 25(S^z)^2 - 6S(S+1) + 3S^2(S+1)^2,$$

$$O_4^1 = \frac{1}{4} \left[(7(S^z)^3 - 3S(S+1)S^z - S^z), (S^+ + S^-) \right]_+,$$

$$\tilde{O}_4^1 = \frac{1}{4i} \left[(7(S^z)^3 - 3S(S+1)S^z - S^z), (S^+ - S^-) \right]_+,$$

$$O_4^2 = \frac{1}{4} \left[(7(S^z)^2 - S(S+1) - 5), \left((S^+)^2 + (S^-)^2 \right) \right]_+,$$

$$\tilde{O}_4^2 = \frac{1}{4i} \left[(7(S^z)^2 - S(S+1) - 5), \left((S^+)^2 - (S^-)^2 \right) \right]_+,$$

$$O_4^3 = \frac{1}{4} \left[S^z, \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right) \right]_+, \quad \tilde{O}_4^3 = \frac{1}{4i} \left[S^z, \left((S^+)^3 - (S^-)^3 \right) \right]_+,$$

$$O_4^4 = \frac{1}{2} \left((S^+)^4 + (S^-)^4 \right), \quad \tilde{O}_4^4 = \frac{1}{2i} \left((S^+)^4 - (S^-)^4 \right).$$

Поскольку изотропное обменное взаимодействие зависит только от относительной ориентации спинов, энергия системы не меняется при повороте спинов на один и тот же угол. По этой причине существует некоторая свобода в выборе направления средних моментов и в качестве оси квантования выберем ось OZ . Для определения энергии основного состояния и реализующихся спиновых конфигураций необходимо найти вид одноузельного гамильтониана H_0 . Выделим в (5.2) средние, возникающие благодаря упорядочению спиновых моментов и мультипольных моментов высшего порядка:

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (5.3)$$

где

$$H_0 = -2 \sum_{i \leq j} a_0^{(j)} \varepsilon_j^i \langle O_j^i \rangle_0 \sum_n O_{jn}^i + N \sum_{i \leq j} a_0^{(j)} \varepsilon_j^i \langle O_j^i \rangle_0^2,$$

$$H_{\text{int}} = - \sum_{n \neq n'} \sum_{i \leq j} a_{nn'}^{(j)} \varepsilon_j^i \left(O_{jn}^i - \langle O_j^i \rangle_0 \right) \left(O_{jn'}^i - \langle O_j^i \rangle_0 \right),$$

здесь $\langle O_1^i \rangle_0 \equiv \langle S^i \rangle$ ($i=x,y,z$) – средние, связанные с упорядочением дипольного (магнитного) момента, $\langle O_2^i \rangle_0 \equiv q_2^i$ ($i=0,2,xy, yz,zx$) – средние, связанные с упорядочением квадрупольного момента, и т.д.; ε_j^i – числовые коэффициенты

$$\varepsilon_3^1 = 3/20, \varepsilon_3^2 = 3/2, \varepsilon_3^3 = 1/4, \varepsilon_4^1 = 1/7, \varepsilon_4^2 = 1/14, \varepsilon_4^3 = 1, \varepsilon_4^4 = 1/8.$$

Для приведения одноузельного гамильтониана (5.3) требуется совершить $N(N-1)$ унитарных преобразований (в данной системы $N=5$ количество уровней энергии магнитного иона). Это можно сделать используя формализм операторов Хаббарда [221-223].

Операторы Хаббарда $X^{km} \equiv |k\rangle\langle m|$ строятся на базисе собственных векторов оператора S^z . Связь различных представлений имеет следующий вид:

$$S^+ = \sqrt{6} (X^{0-1} + X^{10}) + 2 (X^{-1-2} X^{21}).$$

В представлении операторов Хаббарда одноузельный гамильтониан можно представить в следующем виде:

$$H_0 = \sum_m \varepsilon_m H^m + \sum_{k \neq m} D_{km} X^{km}, \quad D_{mk} = (D_{km})^*, \quad (5.4)$$

где ε_m – диагональные слагаемые; D_{km} – недиагональные слагаемые гамильтониана. После проведения унитарных поворотов гамильтониан (5.4) становится диагональным:

$$\tilde{H}_0 = U H_0 U^+ = \sum_m E_m H^m, \quad U = \prod U_{km}(\varphi_{km})$$

$$U_{km}(\varphi_{km}) = \hat{1} + (H^k + H^m)(\cos \varphi_{km} - 1) + (X^{km} - X^{mk}) \sin \varphi_{km}.$$

Система уравнений

$$\tilde{D}_{km}(\varphi_{21}, \dots) = 0$$

определяет параметры преобразований φ_{km} .

Вектор состояния на каждом узле \mathbf{n} узле можно записать в виде суперпозиции пяти векторов $|m\rangle$ $|\psi\rangle = \sum C_m |m\rangle$, где C_m принадлежат комплексному проективному пространству CP^4 . Ограничимся случаем низких температур (фактически, $T \rightarrow 0$); тогда в приближении молекулярного поля энергия системы совпадает со средним значением гамильтониана (5.2) по вектору состояния, $W[C_{m,n}] = \langle H \rangle$. В случае низких температур свободная энергия системы равна энергии системы в приближении молекулярного поля.

5.1.2. Определение одноподрешеточных фазовых состояний магнетика.

Для простейших одноподрешеточных фаз состояния спинов на каждом узле одинаковые, и энергия $W[C_m]$ зависит от восьми вещественных параметров. Используя изотропность системы, число независимых параметров можно уменьшить. Как отмечалось ранее, выберем ось OZ параллельно направлению среднего значения спина, тогда $\langle S^x \rangle_0 = \langle S^y \rangle_0 = 0$ и можно

ограничиться только суперпозицией состояний $|m\rangle$ со значениями m , отличающимися не менее, чем на 2, а тензор квадрупольного эллипсоида $S_{ij} = \langle S_i S_j + S_j S_i \rangle / 2$ можно выбрать диагональным. Следовательно, с учетом этих условий можно ограничиться двумя формами пробного вектора состояний состояния на узле:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos\theta|2\rangle + \sin\theta|-1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \cos\beta(\cos\varphi|2\rangle + \sin\varphi|-2\rangle) + \sin\beta|0\rangle, \end{aligned} \quad (5.5)$$

которые зависят только от одного или двух вещественных параметров, соответственно. Далее легко получить свободную энергию системы при нулевой температуре для каждой из функций $|\psi_{1,2}\rangle$ через параметры θ или φ, β , соответственно.

Начнем со случая вектора $|\psi_1\rangle$, для которого свободная энергия (на один спин) определяется выражением

$$W_1 = -\frac{1}{4}(\tilde{J} + 3\tilde{K})(1 - 3\cos^2\theta)^2, \quad (5.6)$$

где введены обозначения:

$$\tilde{J} = 2J - K + 41D - 79F, \quad \tilde{K} = K - 5D + 43F. \quad (5.6')$$

Легко видеть, что при $\tilde{J} + 3\tilde{K} > 0$ минимуму отвечает ферромагнитное (ФМ) состояние, в котором $\theta = 0$ и $|\psi\rangle = |\psi_{FM}\rangle = |2\rangle$, то есть среднее значение спина на узле максимально, $\langle S^z \rangle = 2$. Второе состояние в рамках вектора основного состояния возникает при $\tilde{J} + 3\tilde{K} < 0$, ему отвечает $\cos\theta = 1/\sqrt{3}$ и вектор состояния вида

$$|\psi\rangle = |\psi_{TN}\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle) / \sqrt{3} \quad (5.7)$$

Это состояние было найдено в модели конденсата Бозе-газа атомов со спином $S=2$ и контактным взаимодействием [59,60], используя описание системы с помощью $2S$ точек на единичной сфере [59,60]. Состояние магнетика с $S=2$ (5.7) характеризуется четырьмя точками, совпадающими с вершинами правильного тетраэдра вписанного в сферу, и его уместно назвать

тетраэдрическим нематиком (ТН) [59,60,64]. Для него $\langle S^z \rangle = 0$, а квадрупольный эллипсоид вырожден в сферу, $\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 2$.

Спонтанное нарушение симметрии определяется средними, кубическими по компонентам оператора спина, которые не инвариантны относительно инверсии времени $t \rightarrow -t$. Для конкретной формы (5.7) отличны от нуля мультипольные средние равны

$$q_3^0 = 10, q_3^3 = 4\sqrt{2}, q_4^0 = -28, q_4^3 = 2\sqrt{2}.$$

Для наглядного представления их геометрических свойств заметим, что коррелятор

$$\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle = \sqrt{2} \cos 3\chi$$

инвариантен относительно поворотов вокруг оси OZ на угол $2\pi/3$. Это указывает на существование оси третьего порядка C_3 , совпадающей с осью OZ . Такие же свойства имеют место для трех направлений в пространстве, составляющих с осью OZ угол $2 \arctan \sqrt{2} \approx 109.5^\circ$ и полярными углами $\pi/3, \pi, 5\pi/3$. Ось OZ и эти три оси ориентированы как оси C_3 тетраэдра с одной из вершин при положительном значении OZ .

Кроме того, ТН-фаза имеет еще одну интересную особенность. В магнитоупрядоченных системах со значением спина превосходящим единицу может возникнуть еще один параметр порядка, который будет пропорционален среднему значению от кубических операторов спина [64]. Представляя волновую функцию основного состояния для этой фазы в следующем виде

$$|\psi_{TN}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle e^{i\gamma}),$$

то можно получить

$$\sigma^{(\pm)} = \langle (S^\pm)^3 \rangle = \langle (S^x \pm iS^y)^3 \rangle = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}.$$

Построим вектор $\vec{\sigma}$:

$$\vec{\sigma} = \sigma^x \vec{e}^x + \sigma^y \vec{e}^y = 4\sqrt{2} (\cos \gamma \vec{e}^x + \sin \gamma \vec{e}^y). \quad (5.8)$$

При преобразовании времени $t \rightarrow -t$ поведение этого вектора аналогично вектору спинового момента. Таким образом его можно назвать псевдоспином [62]. Следовательно данное фазовое состояние характеризуется добавочным параметром порядка, который пропорционален среднему значению от кубических операторов спина. Значение переменной γ задает ориентацию вектора $\vec{\sigma}$ в базисной плоскости XOY . Также следует отметить, что вектор $\vec{\sigma}$ при преобразовании времени $t \rightarrow -t$ меняет знак поэтому ведет себя аналогично вектору «псевдоспина».

Энергия основного состояния, порождаемого пробной функцией $|\psi_2\rangle$ (5.5), определяются формулой

$$W_2 = \frac{3}{2} \tilde{K} (1 - \sin 2\varphi) \sin^2 2\beta - \tilde{J} \cos^2 2\varphi \cos^4 \beta - 3\tilde{K}. \quad (5.9)$$

Минимизация (5.9) дает, помимо ФМ состояния (при $\varphi=0, \beta=0$), новое спиновое нематическое (СН) состояние с нулевым спином, для которого $\varphi=\pi/4$, то есть

$$|\psi_{SN}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \beta (|2\rangle + |-2\rangle) + \sin \beta |0\rangle, \quad (5.10)$$

при этом энергия (5.9) в СН фазе не зависит от параметра β . Геометрическим образом этого состояния при отличных от нуля значениях параметров двухосный эллипсоид

$$\langle (S^x)^2 \rangle = (\sqrt{3} \sin \beta + \cos \beta)^2, \langle (S^y)^2 \rangle = (\sqrt{3} \sin \beta - \cos \beta)^2, \langle (S^z)^2 \rangle = 4 \cos^2 \beta, ,$$

сплюснутый в базисной плоскости XOY

$$\begin{aligned} \langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^4 \rangle &= 12 \sin^2 \beta + \frac{5}{2} \cos^2 \beta + \frac{3}{2} \cos^2 \beta \cos 4\chi + \\ &+ 4\sqrt{3} \sin 2\beta \cos 2\chi \end{aligned} \quad (5.11)$$

На рис.5.1 представлена зависимость «гофрировки» эллипсоида в СН - фазе от параметра унитарного преобразования β .

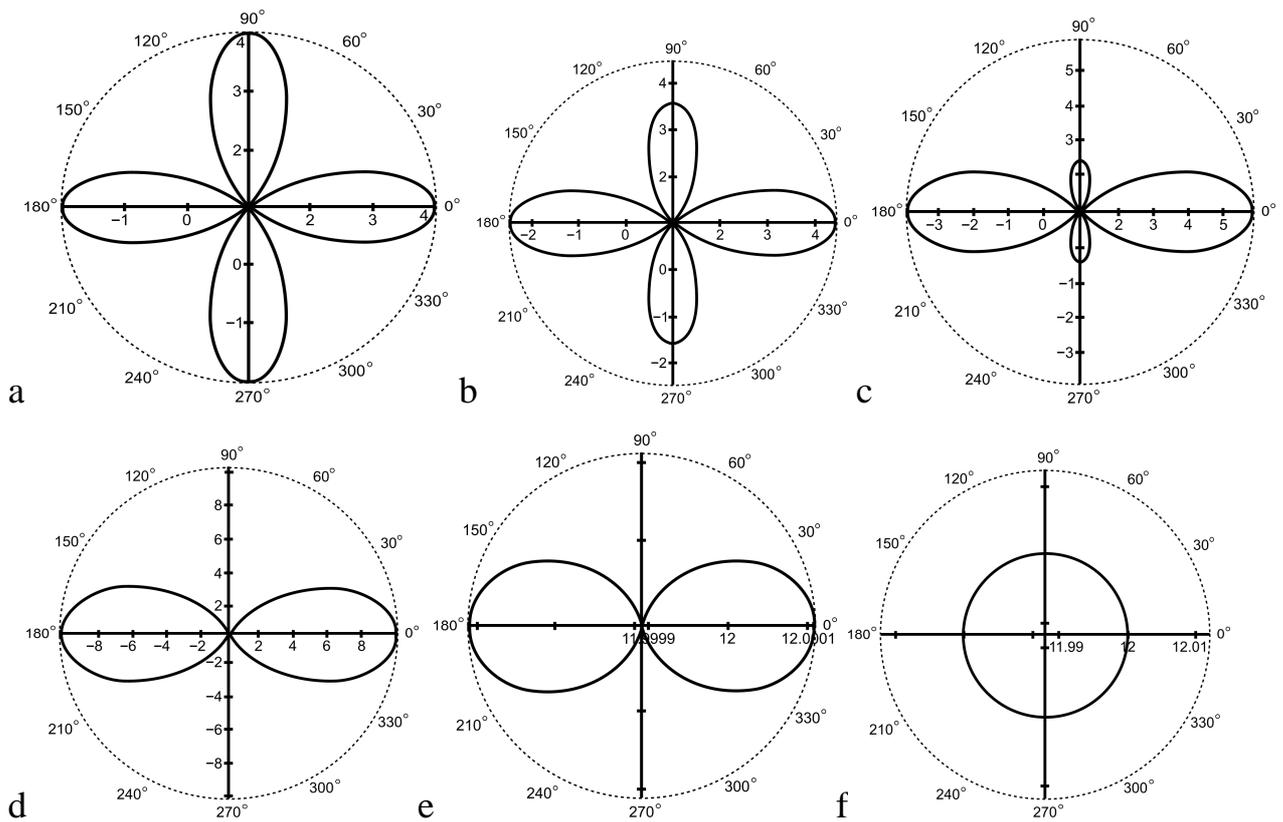


Рис. 5.1. Зависимость «гофрировки» эллипсоида от параметра β :

a. $\beta=0$, b. $\beta=\pi/100$, c. $\beta=\pi/25$, d. $\beta=\pi/10$, e. $\beta=\pi/(2,00001)$, f. $\beta=\pi/2$.

Напомним, что квадрупольные эллипсоиды для нематических состояний магнетиков с $S=1$ и $S=3/2$ [22,62] чисто одноосные (с симметрией C_∞) что в нашем случае имеет место только при $\beta=0, \pi/2$. Кроме того, симметрия C_∞ присутствует только при $\beta=\pi/2$, когда

$$\langle (S^z)^2 \rangle = 0, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 3,$$

а коррелятор (5.11) – константа, и эллипсоид вырождается в плоский диск.

При $\beta=0$ квадрупольный эллипсоид также одноосный,

$$\langle (S^z)^2 \rangle = 4, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

но при этом полная симметрия состояния понижена за счет средних четвертого порядка,

$$\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^4 \rangle = \frac{5 + 3 \cos 4\chi}{2}$$

то есть одноузельное состояние при $\beta=0$ характеризуется осью симметрии четвертого порядка [65]. В работе [60] показано, что учет тепловых флуктуаций приводит к выбору только одного из двух значений, $\beta=0$ или $\beta=\pi/2$. Этот вопрос будет рассмотрен ниже.

5.1.3. Определение двухподрешеточных фазовых состояний магнетика.

Вполне естественно ожидать, что полный набор состояний магнетика с $S=2$ в модели (5.2) включает также фазы с различными состояниями спинов в двух подрешетках. Наличие одного такого состояния очевидно – это антиферромагнитное (АФМ) состояние. Унитарное преобразование, то есть поворот спинов второй подрешетки на угол $\varphi=\pi$ вокруг оси, перпендикулярной оси OZ сводит задачу к исследованию одноподрешеточного состояния для гамильтониана типа (5.2). В итоге АФМ состояние, как и для рассмотренных ранее случаев магнетиков с $S=1$ и $S=3/2$, характеризуется насыщенным значением спина и антипараллельной ориентацией спинов в каждой подрешетке, $\mathbf{S}_n = 2\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{S}_{n'} = -2\mathbf{e}_z$. Волновые функции основного состояния подрешеток в этом состоянии имеют, соответственно, вид:

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle \text{ и } |\psi_2\rangle = |-2\rangle. \quad (5.12)$$

Анализ энергии основного состояния двухподрешеточного магнетика $W[C_{m,n}]$

$$W_3 = \frac{1}{2}(J - 2K + 19D - 50F)(1 - 3\cos^2 \theta)^2,$$

показал, что кроме АФМ фазы реализуется двухподрешеточная фаза с тетраэдрической симметрией. Функции основного состояния в подрешетках имеют вид

$$|\psi_1\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)/\sqrt{3}, \quad |\psi_2\rangle = (|-2\rangle - \sqrt{2}|1\rangle)/\sqrt{3}. \quad (5.13)$$

Как и в ТН фазе квадрупольный эллипсоид каждой из подрешеток вырожден в сферу, $\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 2$. Нечетные по степеням спина мультипольные средние для первой и второй подрешеток отличаются знаками: $q_{3(1,2)}^3 = \pm 4\sqrt{2}$, $q_{3(1,2)}^0 = \pm 10$. Геометрическим образом параметров порядка антитетраэдрической фазы каждой из подрешеток является тетраэдр (в пространстве спиновых операторов). Причем, вершины обоих тетраэдров имеют противоположную ориентацию относительно оси OZ , а основания тетраэдров – развернуты относительно друг друга вокруг оси OZ на угол $\pi/3$. Это следует из вида кубических средних

$$\left\langle \left(S_{1,2}^y \sin \chi + S_{1,2}^x \cos \chi \right)^3 \right\rangle = \pm \sqrt{2} \cos 3\chi.$$

Поэтому это состояние естественно назвать тетраэдрической антинематической фазой (ТАН).

Мультипольные параметры порядка в ТАН фазе также как и в ТН фазе, в отличие от нематических состояний для магнетика со спином $S=3/2$, определяются не только трехспиновыми корреляторами, не инвариантными относительно обращения времени, но и четырехспиновыми, не меняющими знак при замене $t \rightarrow -t$. В этом состоит принципиальное отличие ТН и ТАН состояний для магнетика с $S=2$ от нематической и антинематической фаз, соответственно, для $S=3/2$.

В состоянии ТАН также можно построить вектор псевдоспина $\vec{\sigma}$ подрешеток. Представим функции основного обеих подрешеток в следующем виде

$$\psi^{(1)} = (|2\rangle + \sqrt{2}e^{i\gamma}|-1\rangle)/\sqrt{3}, \quad \psi^{(2)} = -(\sqrt{2}e^{-i\gamma}|1\rangle - |-2\rangle)/\sqrt{3}.$$

Отсюда следует, что

$$\sigma_2^{(\pm)} = -4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}, \quad \sigma_1^{(\pm)} = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}.$$

Соответственно, вектор $\vec{\sigma}_1$ первой подрешетки имеет вид (5.8), а второй:

$$\vec{\sigma}_2 = -4\sqrt{2}(\vec{e}^x \cos \gamma + \vec{e}^y \sin \gamma).$$

Векторы $\vec{\sigma}_1$ и $\vec{\sigma}_2$ лежат на одной оси и противоположно направлены. Вместе со свойством смены знака $\vec{\sigma}$ при отражении времени в этом также проявляется аналогия антитетраэдрической и антиферромагнитной фаз.

Полученные двухподрешеточные устойчивые состояния в данной модели являются не единственными. Как будет показано ниже, существуют более сложные двухподрешеточные спиновые конфигурации. Для того, чтобы выявить все возможные фазовые состояния магнетика с $S=2$ возникает необходимость исследовать свободную энергию с учетом всех возможных спиновых конфигураций. В наиболее общей форме пробные векторы состояний подрешеток можно представить в виде:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos \mu \cos \theta \cos \alpha |2\rangle + \cos \mu \sin \theta \cos \beta |1\rangle + \sin \mu |0\rangle + \\ &+ \cos \mu \cos \theta \sin \alpha |-1\rangle + \cos \mu \sin \theta \sin \beta |-2\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \cos \eta \sin \varphi \sin \delta |2\rangle - \cos \eta \cos \varphi \sin \gamma |1\rangle - \sin \eta |0\rangle - \\ &- \cos \eta \sin \varphi \cos \delta |-1\rangle + \cos \eta \cos \varphi \cos \gamma |-2\rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

Усредняя гамильтониан системы по состояниям (5.14) получим выражение для свободной энергии системы при нулевой температуре, и представим ее как функцию восьми параметров.

$$\begin{aligned} W &= -\frac{1}{2} \left[\frac{a^{(1)}}{4} \cos^2 \mu \cos^2 \eta [\cos^2 \theta (1 + 3 \cos 2\alpha) - \sin^2 \theta (1 - 3 \cos 2\beta)] \times [-\cos^2 \varphi (1 + 3 \cos 2\gamma) + \sin^2 \varphi (1 - 3 \cos 2\delta)] \right] + \\ &+ 3a^{(2)} \left[\frac{1}{2} \cos^2 \mu (\cos^2 \theta (1 + 3 \cos 2\alpha) + \sin^2 \theta (1 - 3 \cos 2\beta)) - 2 \sin^2 \mu \right] \times \left[\frac{1}{2} \cos^2 \eta (\cos^2 \varphi (1 + 3 \cos 2\gamma) + \sin^2 \varphi (1 - 3 \cos 2\delta)) - 2 \sin^2 \eta \right] + \\ &+ \frac{9}{10} a^{(3)} \cos^2 \mu \cos^2 \eta [\cos^2 \theta (3 - \cos 2\alpha) - \sin^2 \theta (3 + \cos 2\beta)] \times [\cos^2 \varphi (-3 + \cos 2\gamma) + \sin^2 \varphi (3 + \cos 2\delta)] + \\ &+ \frac{9a^{(4)}}{70} [\cos^2 \mu (\cos^2 \theta (5 \cos 2\alpha - 3) - \sin^2 \theta (5 \cos 2\beta + 3)) + 12 \sin^2 \mu] \times [\cos^2 \eta (\cos^2 \varphi (5 \cos 2\gamma - 3) - \sin^2 \varphi (5 \cos 2\delta + 3)) + 12 \sin^2 \eta] + \\ &+ a^{(1)} \left[\begin{array}{l} \sin 2\theta \cos^2 \mu (\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta) + \\ + \frac{\sqrt{6}}{2} \sin 2\mu (\sin \alpha \cos \theta + \cos \beta \sin \theta) \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} -\cos^2 \eta \sin 2\varphi (\cos \gamma \cos \delta + \sin \gamma \sin \delta) + \\ + \frac{\sqrt{6}}{2} \sin 2\eta (\sin \gamma \cos \varphi + \cos \delta \sin \varphi) \end{array} \right] + \\ &+ a^{(2)} \left[\begin{array}{l} 3 \sin 2\theta \cos^2 \mu (-\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta) + \\ + \frac{\sqrt{6}}{2} \sin 2\mu (-\sin \alpha \cos \theta + \cos \beta \sin \theta) \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} 3 \cos^2 \eta \sin 2\varphi (\cos \gamma \cos \delta - \sin \gamma \sin \delta) + \\ + \frac{\sqrt{6}}{2} \sin 2\eta (\sin \gamma \cos \varphi - \cos \delta \sin \varphi) \end{array} \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3a^{(3)}}{5} \left[-3 \sin 2\theta \cos^2 \mu (\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta) + \left[\begin{array}{l} 3 \cos^2 \eta \sin 2\varphi (\cos \gamma \cos \delta + \sin \gamma \sin \delta) + \\ + \sqrt{6} \sin 2\mu (\sin \alpha \cos \theta + \cos \beta \sin \theta) \end{array} \right] \right] + \\
& + \frac{9a^{(4)}}{7} \left[\sin 2\theta \cos^2 \mu (-\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha \cos \beta) + \left[\begin{array}{l} \cos^2 \eta \sin 2\varphi (\cos \gamma \cos \delta - \sin \gamma \sin \delta) - \\ - \sqrt{6} \sin 2\mu (\sin \alpha \cos \theta - \cos \beta \sin \theta) \end{array} \right] \right] + \\
& + a^{(2)} \left[\sqrt{6} \sin 2\mu (\cos \alpha \cos \theta + \sin \beta \sin \theta) + 3 \cos^2 \mu \sin 2\theta \sin \alpha \cos \beta \right] \times \\
& \times \left[-\sqrt{6} \sin 2\eta (\cos \gamma \cos \varphi + \sin \delta \sin \varphi) + 3 \cos^2 \eta \sin 2\varphi \sin \gamma \cos \delta \right] + \\
& + 9a^{(3)} \sin 2\mu \sin 2\eta (\cos \alpha \cos \theta - \sin \beta \sin \theta) (\cos \gamma \cos \varphi - \sin \delta \sin \varphi) + \\
& + \frac{9a^{(4)}}{14} \left[-\sqrt{6} \sin 2\mu (\cos \alpha \cos \theta + \sin \beta \sin \theta) + 4 \cos^2 \mu \sin 2\theta \sin \alpha \cos \beta \right] \times \\
& \times \left[\sqrt{6} \sin 2\eta (\cos \gamma \cos \varphi + \sin \delta \sin \varphi) + 4 \cos^2 \eta \sin 2\varphi \sin \gamma \cos \delta \right] - \\
& - 9a^{(3)} \cos^2 \mu \cos^2 \eta (\sin 2\alpha \cos^2 \theta + \sin 2\beta \sin^2 \theta) (\sin 2\gamma \cos^2 \varphi + \sin 2\delta \sin^2 \varphi) + \\
& + 9a^{(4)} \cos^2 \mu \cos^2 \eta (\sin 2\alpha \cos^2 \theta - \sin 2\beta \sin^2 \theta) (\sin 2\gamma \cos^2 \varphi - \sin 2\delta \sin^2 \varphi) + \\
& + 18a^{(4)} \cos^2 \mu \cos^2 \eta \cos \alpha \sin \beta \sin 2\theta \cos \gamma \sin \delta \sin 2\varphi \Big],
\end{aligned}$$

(5.15) где $a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, a^{(4)}$ определяются выражением (5.2').

Минимизируя численно полученное выражение для свободной энергии по параметрам задачи при различных соотношениях обменных интегралов (и их знаков) можно определить устойчивые спиновые состояния системы.

Прежде чем переходить к определению новых двухподрешеточных спиновых состояний, убедимся в справедливости выбора пробных функций (5.14). Для этого рассмотрим минимум энергии (5.15) уже определенных нами фазовых состояний, например АФМ и ТН, и найдем векторы основного состояния для этих фаз. Так, для области параметров $a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, a^{(4)}$ в которой реализуется АФМ фаза минимум энергии (5.15) достигается при

$$\alpha = \beta = \theta = \mu = \gamma = \varphi = \eta = \delta = 0,$$

а векторы состояния подрешеток, как видно из (5.14) имеют вид:

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle, |\psi_2\rangle = |-2\rangle,$$

что соответствует АФМ упорядочению (5.12).

Аналогично, для области значений обменных интегралов, в которой стабильна ТН фаза минимум энергии достигается при

$$\alpha = 0.9553, \beta = 0.3421, \gamma = 0.2374, \varphi = 1.5498, \delta = 0.6155, \theta = \mu = \eta = 0.$$

Векторы основного состояния подрешеток в этом случае совпадают,

$$|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle = \frac{|2\rangle}{\sqrt{3}} + \sqrt{\frac{2}{3}}|-1\rangle,$$

что свидетельствует об одноподрешеточности фазы.

Как видно, полученное выражение вектора основного состояния совпадает с (5.7), что свидетельствует о том, что данная фаза является ТН. Таким образом, сделанный нами выбор пробных функций основного состояния вполне оправдан. Аналогично можно показать, что выбранный нами вид пробных функций дает правильные результаты для ФМ, СН и ТАН фаз.

Необходимо отметить, что изменение знака обменных интегралов может приводить к новой физике. Так, например, в изотропной модели Гейзенберга изменение знака константы билинейного взаимодействия приводит к возникновению энергетически выгодного антиферромагнитного состояния. В изотропном негейзенберговском магнетике со спином $S=1$ при учете биквадратичного обмена при отрицательном значении констант гейзенберговского и биквадратичного взаимодействий и при условии $|K| > |J|$ реализуется двухподрешеточная ортогонально нематическая фаза [65]. В этом состоянии ортогональными являются главные оси тензора квадрупольных моментов подрешеток. Для изотропного негейзенберговского магнетика с $S=3/2$ возможна реализация антинематического двухподрешеточного состояния в случае отрицательных значений обменных интегралов при высших спиновых инвариантах [64]. Поэтому, можно ожидать появления такого упорядочения для магнетика с $S=2$ при определенных соотношениях материальных параметров и их знаков. Действительно, если константы обменного взаимодействия удовлетворяют неравенству $K-2D+28F < 0$, а параметры пробных функций (5.14), соответствующие минимуму свободной энергии равны

$$\mu = \theta = \pi/4, \alpha = 0, \beta = \pi/2; \eta = \varphi = \pi/4, \gamma = 0, \delta = \pi/2,$$

то функции основного состояния в каждой из подрешеток определяется ортогональными векторами

$$\begin{aligned}
|\Psi_1\rangle &= \frac{1}{2}(|2\rangle + |-2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle, \\
|\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2}(|2\rangle + |-2\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle.
\end{aligned}
\tag{5.16}$$

Средняя намагниченность в подрешетках (на один узел) равна нулю $\langle S \rangle = 0$, а средние значения квадратов спиновых операторов отличны от нуля. Для каждой из подрешеток они имеют вид, соответственно:

$$\begin{aligned}
\langle (S_1^z)^2 \rangle &= 2, \quad \langle (S_1^{x(y)})^2 \rangle = 2 \pm \sqrt{3}, \\
\langle (S_2^z)^2 \rangle &= 2, \quad \langle (S_2^{x(y)})^2 \rangle = 2 \mp \sqrt{3}.
\end{aligned}$$

Легко видеть, что состояние, определяемое векторами (5.16) представляет ортогонально нематическую фазу (ОН), геометрическим образом которой являются два двухосных эллипсоида, главные оси которых ортогональны друг другу. Кроме того, как следует из следующего коррелятора

$$\left\langle \left(S_{1(2)}^x \cos \chi + S_{1(2)}^y \sin \chi \right)^4 \right\rangle = 7 \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \cos 4\chi \pm 4\sqrt{3} \cos 2\chi,$$

эти эллипсоиды являются «гофрированными» в плоскостях, перпендикулярных их главным осям, и развернуты друг относительно друга на угол $\pi/2$.

Еще одно двухподрешеточное нематическое состояние возникает в случае большого отрицательного значения интеграла обменного взаимодействия $F < 0$. В этом случае состояние будет устойчивым, если параметры пробных функций (5.14) равны

$$\mu = \alpha = 0, \quad \theta = \pi/4, \quad \beta = \pi/2; \quad \eta = \gamma = 0, \quad \varphi = -\pi/4, \quad \delta = \pi/2,$$

а функции основного состояния подрешеток имеют вид

$$|\psi_1\rangle = \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\psi_2\rangle = \frac{|2\rangle - |-2\rangle}{\sqrt{2}}.
\tag{5.17}$$

Мультипольные параметры порядка подрешеток отличаются знаком среднего четвертой степени по операторам спина т.е. q_4^4 :

$$q_{4(1,2)}^4 = \frac{\langle (S_{(1,2)}^+)^4 \rangle + \langle (S_{(1,2)}^-)^4 \rangle}{2} = \pm 12.$$

Геометрическими образами данной фазы в спиновом пространстве будут являться одноосные эллипсоиды

$$\langle (S_{1,2}^x)^2 \rangle = \langle (S_{1,2}^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_{1,2}^z)^2 \rangle = 4.$$

оси которых параллельны. Однако, как и в ОН-фазе эллипсоиды являются «гофрированными» в плоскости перпендикулярной главной оси. Это следует из выражений для корреляторов четвертого порядка подрешеток

$$\langle (S_{1(2)}^x \cos \chi + S_{1(2)}^y \sin \chi)^4 \rangle = \frac{5 \pm 3 \cos 4\chi}{2}.$$

Из этих выражений также понятно, что «гофрировка» в плоскости XOY – 4-го порядка; кроме того, гофрированные эллипсоиды развернуты относительно друг друга на угол $\pi/4$ в плоскости XOY .

С другой стороны, если провести анализ подобный [60], то можно показать, что каждой из волновых функций (5.17) будут соответствовать четыре точки на единичной сфере, являющиеся вершинами квадратов, ориентированных в плоскости XOY и повернутых друг относительно друга на угол $\pi/4$. Таким образом, данное состояние можно назвать тетрагональным двухподрешеточным нематиком (ТДН).

Кроме того, анализ свободной энергии (5.15) показал, что в магнетике с $S=2$ могут реализовываться двухподрешеточные структуры с неэквивалентными подрешетками. Эти фазы характеризуются ненасыщенностью среднего спина одной из подрешеток, а магнитные моменты подрешеток либо коллинеарны, либо антиколлинеарны. В коллинеарной ЛС₁ (low spin) фазе модуль намагниченности первой подрешетки равен $\langle S_1 \rangle = 2$, а второй подрешетки равен $\langle S_2 \rangle = 1$. В антиколлинеарной ЛС₁ фазе – $\langle S_1 \rangle = 2$, $\langle S_2 \rangle = -1$.

Состояние ЛС₁ является устойчивым, если параметры пробных функций (5.15) равны

$$\mu=\theta=\alpha=0; \eta=\varphi=0, \gamma=\pi/2,$$

а функции основного состояния подрешеток имеют вид:

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle, |\psi_2\rangle = |1\rangle$$

Состояние ЛС₁ также устойчиво, если параметры пробных функций (5.15) равны

$$\mu=\theta=\alpha=0; \eta=\delta=0, \varphi=\pi/2,$$

а функции основного состояния подрешеток имеют вид:

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle, |\psi_2\rangle = |-1\rangle.$$

О возможности реализации такого упорядочения отмечено в [16] для модели изинговского типа с учетом квадрупольного взаимодействия: в одной подрешетке момент насыщен, во второй – ненасыщен.

5.2. Дисперсионное уравнение и спектры возбуждения в исследуемых фазах.

Для анализа устойчивости описанных выше фаз относительно произвольных малых возмущений найдем спектр всех ветвей магнонов $\varepsilon_i(\mathbf{k})$ (для магнетика со спином $S=2$ этих ветвей четыре, i – определяет номер моды, \mathbf{k} – волновой вектор, принадлежащий зоне Бриллюэна). Наличие неустойчивостей при немалых \mathbf{k} не только указывает на переходы в многоподрешеточные фазы, но и позволяет понять их подрешеточную структуру.

Для получения спектров элементарных возбуждений в магнетике с $S=2$ можно использовать метод функций Грина для операторов Хаббарда [221-223], который в данном случае является наиболее адекватным исследованием сильно коррелированных систем. В данном случае такой метод требует громоздких вычислений, однако допускает аналитический расчет спектров во всей области параметров и волновых векторов. Хорошо известно, что полюса функции Грина сильно коррелированных систем определяют энергетический спектр возбуждений системы [54]. Параметром малости как и в работе [249], позволяющим применять теорию возмущений, является обратный радиус взаимодействия.

Функцию Грина запишем в виде [221-223]:

$$G^{\alpha\alpha'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_n^\alpha(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau') \rangle,$$

где $\tilde{X}_n^\alpha(\tau) = \exp(\mathbf{H}\tau) X_n^\alpha \exp(-\mathbf{H}\tau)$ – оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, \hat{T} – оператор Вика, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\text{int}}$. Дальнейшие вычисления проводятся в приближении среднего поля. Следовательно, можно ограничиться учетом «поперечной» части гамильтониана обменного взаимодействия, которая в представлении операторов Хаббарда записывается в виде:

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{m \neq m'} \sum_{\alpha, \alpha'} \{ \bar{c}(\alpha) \hat{A}_{mm'} \bar{c}(\alpha') \} \Delta X_m^\alpha \cdot \Delta X_{m'}^{\alpha'},$$

где $\Delta X^\alpha = X^\alpha - \langle X^\alpha \rangle_0$, а компоненты 24-х мерного вектора $\vec{c}(\alpha)$ определяются из связи спиновых и тензорных операторов с операторами Хаббарда; матрица $\hat{A}_{nn'}$ представляется как прямая матричная сумма матриц \hat{I} и $\hat{I} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$:

$$\hat{A}_{nn'} = \frac{a_{nn'}^{(1)}}{2} (2 \cdot \hat{1} \oplus \hat{I}) \oplus \frac{a_{nn'}^{(2)}}{2} (6 \cdot \hat{1} \oplus \hat{I} \oplus \hat{I}) \oplus \frac{a_{nn'}^{(3)}}{160} (16 \cdot \hat{1} \oplus 3\hat{I} \oplus 30\hat{I} \oplus 20\hat{I}) \\ \oplus \frac{a_{nn'}^{(4)}}{560} (2 \cdot \hat{1} \oplus 10\hat{I} \oplus 5\hat{I} \oplus 70\hat{I} \oplus 35\hat{I}).$$

Вывод дисперсионного уравнения, определяющего спектры элементарных возбуждений, приведён в предыдущем разделе. Уравнение справедливо для произвольного значения спина и произвольной температуры (исключая флуктуационную область). Формально, дисперсионное уравнение исследуемой модели магнетика с $S=2$ имеет вид:

$$\det \|1 + X_{ij}\| = 0, \quad i, j = 1, \dots, 24, \quad (5.18)$$

$X_{ij} = G_0^\alpha(\omega_n) b(\alpha) c_{ij}(\alpha)$, $G_0^\alpha(\omega_n) = [i\omega_n + \vec{\alpha}\vec{E}]^{-1}$ – нулевая функция Грина, $b(\alpha) = \langle \vec{\alpha}\vec{X} \rangle_0$ – концевой множитель; $c_{ij}(\alpha) = a_{ik}(\alpha) A_{kj}$, $a_{ik}(\alpha) = c_i(\alpha) c_k(-\alpha)$, $\vec{\alpha}$ – корневые векторы, определяемые алгеброй операторов Хаббарда [221]. Решения уравнения (5.18) определяют спектры магнонов в различных фазах.

Вид спектров наиболее простой для ТН-фазы, так как для нее три ветви вырождены и при $k \rightarrow 0$ имеют линейный закон дисперсии:

$$\varepsilon_{1,2,3}^2(k) = 36(9D_0 - 36F_0 - 2J_k - 2K_k - 35D_k - 14F_k) \times \\ \times (D_0 - 4F_0 - D_k + 4F_k) \quad (5.19)$$

$$\varepsilon_4(k) = 12(3D_0 - 15F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k), \quad (5.20)$$

J_k, K_k, D_k, F_k – Фурье-компоненты соответствующих обменных интегралов $J_k = J_0 \gamma_k$, $\gamma_k = (1/z) \sum \exp(ik\delta)$, $\delta = 1$ – межатомное расстояние, z – число ближайших соседей. Необходимо отметить, что совпадение трех ветвей

возбуждений связано с вырождением возбужденных энергетических уровней магнитного иона $E_I = E_0 = E_{-I}$.

Этот результат находится в соответствии с общим результатом о числе безактивационных ветвей магнонов [241] при наличии высокой (тетраэдрической) симметрией состояния на узле. Трех ветвям (5.19) соответствуют повороты осей тетраэдров и связанные с ними колебания среднего спина. Нестабильность, связанная с этими ветвями, определяет переходы в состояния с ненулевым значением спина. Такая неустойчивость имеет место при $J+K+13D+25F=0$ относительно возмущений с малыми $k \rightarrow 0$

$$\varepsilon_{1,2,3}(k) = 9(D - 4F)zk^2.$$

Четвертая ветвь (активационная) (5.20) определяется колебаниями мультипольных моментов q_3^i, q_4^i и описывает неустойчивость относительно перехода в другое немагнитическое состояние. Такая неустойчивость относительно возмущений с $k \rightarrow 0$ или с $k \rightarrow k_B$ (где k_B отвечает краю зоны Бриллюэна), имеет место при выполнении условий $K-5D+43F=0$ или $K+D+13F=0$, соответственно

$$\varepsilon_4(k) = 18(D - 5F)zk^2,$$

и отвечает переходу в другие немагнитические состояния.

В ФМ-фазе спектры магнонов имеют вид:

$$\varepsilon_1(k) = 2(J_0 + 4K_0 + 16D_0 + 64F_0 - J_k - 4K_k - 16D_k - 64F_k); \quad (5.21)$$

$$\varepsilon_2(k) = 2(2J_0 + 5K_0 + 29D_0 + 89F_0 - 3K_k - 3D_k - 39F_k); \quad (5.22)$$

$$\varepsilon_3(k) = 6(J_0 + K_0 + 16D_0 + 13F_0 - 3D_k + 12F_k); \quad (5.23)$$

$$\varepsilon_4(k) = 4(2J_0 - K_0 + 41D_0 - 70F_0 - 9F_k). \quad (5.24)$$

Первая из четырех ветвей возбуждения является бесщелевой, она соответствует прецессии спина. Устойчивость этой фазы определяют активационные ветви (5.22)-(5.24). ФМ фаза теряет устойчивость относительно длинноволновых возмущений ($k \rightarrow 0$) при $J+K+13D+25F=0$

$$\varepsilon_3(k) = 9(D - 4F)zk^2,$$

и при $2J-K+41D-79F=0$

$$\varepsilon_4(k) = 18Fzk^2.$$

Таким образом, области устойчивости ГН и ФМ фаз могут соприкоснуться при $J+K+13D+25F=0$. При $J+4K+16D+64F=0$ имеет место неустойчивость относительно возмущений с $k \rightarrow k_B$ ветви спектра (5.21), что указывает на переход в некоторую двухподрешеточную фазу.

Решение дисперсионного уравнения в СН фазе позволяет определить спектр элементарных возбуждений:

$$\varepsilon_i^2(k) = \left(12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k) \sin^2 \beta_i + 36(F_0 - F_k) \cos^2 \beta_i \right) \times \\ \times \left(12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \sin^2 \beta_i + \right. \\ \left. + 4(9F_0 - 2I_k + K_k - 41D_k + 70F_k) \cos^2 \beta_i \right) \quad (5.25)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \times \\ \times (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k), \quad (5.26)$$

где $\beta_i = \beta + \frac{2\pi}{3}i$, $i=1,2,3$.

Следует обратить внимание, что при значениях $\beta \neq 0, \pi/2$ в СН фазе имеется четыре ветви спектра возбуждений. Как было отмечено в предыдущем подразделе, анализ свободной энергии при $T=0$ не позволяет определить параметр β в нематической фазе. Это удастся сделать, проводя анализ свободной энергии с учетом температурных поправок – так называемый механизм образования порядка из беспорядка [296,297]. Вблизи линий фазового перехода в ферромагнитную и тетраэдрическую фазы эти поправки, как функция β , можно представить в виде:

$$\Delta F(\beta) \sim -T^4 \sum_{i=1}^3 \left[\frac{1}{v(\beta_i)} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (5.27)$$

где $v(\beta_i)$ – «жесткость» магнонов (5.25):

$$v(\beta_i) = \left(3\tilde{K} \sin^2 \beta_i - \tilde{J} \cos^2 \beta_i \right) \left((K - 2D + 28F) \sin^2 \beta_i + 3F \cos^2 \beta_i \right),$$

где \tilde{J} , \tilde{K} определяются выражениям (5.6').

Из (5.27) следует, что вклад в тепловые поправки дают «жесткости» трех магнонных ветвей и это создает некоторые сложности для аналитического вычисления условий равновесия нематической фазы. Однако, можно показать, что в окрестности линий $\tilde{J} = 0$ при $\beta=0$ и $\tilde{K} = 0$ при $\beta=\pi/2$ «жесткости» ветвей ε_1 и ε_2 вклада в (5.27) практически не дают и достаточно учесть «жесткость» только ветви ε_3 . Условие экстремума температурных поправок к плотности свободной энергии $\frac{\partial \Delta F}{\partial \beta} = 0$ дает следующие решения:

$$\beta=0, \beta=\pi/2, \quad \sin^2 \beta = \frac{(K - 2D + 25F)\tilde{J} - 3F(3\tilde{K} + \tilde{J})}{2(K - 2D + 25F)(3\tilde{K} + \tilde{J})}.$$

Легко видеть, что первые два решения $\beta=0$ и $\beta=\pi/2$ соответствуют линиям $\tilde{J} = 0$ и $\tilde{K} = 0$ и на этих линиях размягчается магнонная ветвь ε_3 . Причем, эти решения соответствуют минимуму свободной энергии. Что касается третьего решения на параметр β , из выражения для второй производной выражения (5.27)

$$\frac{\partial^2 \Delta F}{\partial \beta^2} = -T^4 \frac{3 \sin^2 2\beta \left(\frac{2(K - 2D + 28F)}{(K - 2D + 28F)\sin^2 \beta + 3F \cos^2 \beta} \right)^2}{2(3\tilde{K} \sin^2 \beta - \tilde{J} \cos^2 \beta)^{\frac{3}{2}} \left((K - 2D + 28F)\sin^2 \beta + 3F \cos^2 \beta \right)^{\frac{3}{2}}} < 0,$$

видно, что функция $\Delta F(\beta)$ имеет максимум при

$$\sin \beta = \sqrt{\frac{(K - 2D + 25F)\tilde{J} - 3F(3\tilde{K} + \tilde{J})}{2(K - 2D + 25F)(3\tilde{K} + \tilde{J})}}.$$

Состояние с $\beta \neq 0, \pi/2$ является неустойчивым. Это обстоятельство позволяет утверждать, что при $T \neq 0$ снимается вырождение по параметру β , и если при $T=0$ мы имели вектор основного состояния $|\psi\rangle = \cos \beta(|2\rangle + |-2\rangle)/\sqrt{2} + \sin \beta|0\rangle$, то при ненулевых температурах (даже достаточно близких к нулю) это состояние «расщепляется» на осевой нематик ($\beta=0$) в окрестности линии $\tilde{J} = 0$ и плоскостной нематик ($\beta=\pi/2$) вблизи линии

$\tilde{K} = 0$. Линия, разделяющая эти два состояния определяется из условия равенства свободных энергий $\Delta F(\beta=0) = \Delta F(\beta = \pi/2)$, имеет вид:

$$F\tilde{J} + \tilde{K}(K - 2D + 28F) = 0,$$

и, следовательно, это линия фазового перехода между осевым ($\beta=0$) и плоскостным нематиками ($\beta=\pi/2$).

Для АФМ-фазы состояния спинов в различных подрешетках энергетически эквивалентны, и магноны естественно рассматривать в схеме расширенных зон.

$$\varepsilon_1^2(k) = 4(J_0 - 5K_0 + 34D_0 - 179F_0)^2 - 4(J_k - 5K_k + 34D_k - 179F_k)^2 \quad (5.28)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = 4(2J_0 - 7K_0 + 53D_0 - 229F_0)^2 - 36(K_k - 5D_k + 43F_k)^2 \quad (5.29)$$

$$\varepsilon_3^2(k) = 36(J_0 - 2K_0 + 22D_0 - 68F_0)^2 - (18(D_k - 6F_k))^2 \quad (5.30)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = 16(2J_0 - K_0 + 41D_0 - 70F_0)^2 - (36F_k)^2 \quad (5.31)$$

Ветвь (5.28) в области малых значений волнового вектора k становится линейной по волновому вектору и соответствует прецессии спинов вокруг оси квантования в подрешетках

$$\varepsilon_1(k) = 2|J - 5K + 34D - 179F|zk.$$

Наличие голдстоуновской ветви возбуждений в фазах с дипольным параметром порядка $\langle S \rangle \neq 0$ является следствием симметрии ферромагнитной и антиферромагнитной фаз относительно преобразований группы вращений $SU(2)$.

В окрестности линии $2J - K + 41D - 61F = 0$ спектр (5.31) размягчается. Эту ветвь можно связать с колебаниями среднего значения спина на одном узле по модулю. На линии фазового перехода в нематическую фазу спектр (5.31) размягчается и принимает вид:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow 0) = 36Fzk.$$

Как видно из последнего соотношения, эта ветвь становится бесщелевой, что связано с появлением дополнительной симметрии при равенстве нулю $\langle S \rangle$.

Энергетические щели в спектрах (5.28-5.30) уменьшаются по мере приближения к линии $J-2K+19D-50F=0$. На линии $J-2K+19D-50F=0$ обе ветви неустойчивы

$$\varepsilon_3(k \rightarrow 0) = 18(D - 6F)zk.$$

В антитетраэдрической ТАН- фазе, как и в ТН- фазе также возникают три совпадающие безактивационные ветви магнонов, что является следствием вырождения возбужденных уровней энергии магнитного иона ($E_I = E_0 = E_{-I}$), а четвертая ветвь имеет конечную энергию активации:

$$\varepsilon_{1,2,3}^2(k) = 36(9(D_0 - 6F_0) - (2J_k - 4K_k + 47D_k - 154F_k)) \times (D_0 - 6F_0 + D_k - 6F_k), \quad (5.32)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = 144(9(D_0 - 5F_0)^2 - (K_k - 2D_k + 28F_k)^2). \quad (5.33)$$

Поведение ветви $\varepsilon_4(k)$ на границе зоны Бриллюэна аналогично поведению спектра в центре зоны Бриллюэна – антиферромагнитно подобный спектр.

На линии $J-2K+19D-50F=0$ щель в спектре (5.33) обращается в ноль, и спектр становится линейным по k

$$\varepsilon_{1,2,3}(k \rightarrow 0) = 36(D - 6F)zk.$$

Таким образом, области устойчивости ТАН и АФМ фаз могут соприкасаться при $J-2K+19D-50F=0$, как это имеет место быть для ТН и ФМ фаз.

Щель в спектре (5.33) обращается в ноль как при значении $K-5D+43F=0$ так и при $K+D+13F=0$ – спектр становится линейным по волновому вектору

$$\varepsilon_4(k \rightarrow 0) = 36(D - 5F)zk.$$

Фазовые состояния ТН и ТАН характеризуются ненулевыми октупольными средними – третьего и четвертого порядка по операторам спина. Следствием этого является наличие только двух ветвей возбуждения. Энергия ветвей (5.19) и (5.32) непосредственно зависит от обменных интегралов D и F . И в случае равенства нулю констант D и F – обе фазы ТН и ТАН– отсутствуют.

Рассмотрим спектр элементарных возбуждений в ОН фазе. Структура фазы определяется состояниями вида (5.16). Спектр магнонов в этой фазе имеет четыре ветви, две из которых совпадают, что связано с вырождением энергетических уровней магнитного иона $E_I = E_{-I}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) = & 12(3(K_0 - 2D_0 + 25F_0) - 2J_k + K_k - 32D_k + 25F_k) \times \\ & \times (K_0 - 2D_0 + 25F_0 + K_k - 2D_k + 25F_k), \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2,3}^2(k) = & 3(6(K_0 - 2D_0 + 25F_0) + 2J_k - K_k + 32D_k - 25F_k) \times \\ & \times (2(K_0 - 2D_0 + 25F_0) - K_k + 2D_k - 25F_k), \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_4^2(k) = & 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 + 3D_k - 15F_k) \times \\ & \times (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Ветвь (5.34) неустойчива на линии $\tilde{J}' - 3\tilde{K}' = 0$ фазовый переход в ЛС₋₁ фазу, и в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ принимает вид:

$$\varepsilon_1(k \rightarrow 0) = 6(K - 2D + 25F)zk^2,$$

где $\tilde{J}' = 2J - K + 41D - 61F = 0$, $\tilde{K}' = K + D + 13F$.

На краю зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$) спектр (5.34) размягчается на линии фазовый переход в ЛС₁ фазу $\tilde{J} + 3\tilde{K} = 0$:

$$\varepsilon_1(k \rightarrow \pi) = 6\sqrt{2}(K - 2D + 25F)zk.$$

На линии фазовый переход в ТН фазу $\tilde{K}' = 0$ щель в спектре (5.36) при $k \rightarrow 0$ обращается в ноль и спектр принимает вид:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow 0) = 36(D - 5F)zk^2.$$

На краю зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$) спектр (5.34) размягчается на линии фазовый переход в ТАН фазу $\tilde{K} = 0$:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow \pi) = 6(D - 5F)zk.$$

В заключении рассмотрим спектры элементарных возбуждений в ТДН фазе. Спектр возбуждения представлен четырьмя ветвями

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^2(k) = & 27(K_0 - 2D_0 + 25F_0 + K_k - 2D_k + 25F_k) \times \\ & \times (3(K_0 - 2D_0 + 25F_0) + 2J_k - K_k + 38D_k - 55F_k), \end{aligned} \quad (5.37)$$

$$\varepsilon_3^2(k) = 144(F_0 + F_k)(9F_0 - 2J_k + K_k - 41D_k + 70F_k), \quad (5.38)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = (K_0 - 2D_0 + 25F_0)^2. \quad (5.37)$$

Спектр двух ветвей (5.37) совпадает, что связано с вырождением двух возбужденных уровней энергии магнитного иона $E_l = E_{-l}$. Ветвь (5.39) является бездисперсионной.

Ветвь (5.37) неустойчива на линии $J-2K+28D-104F=0$ при $k \rightarrow 0$ и принимает вид:

$$\varepsilon_{1,2}(k \rightarrow 0) = 9\sqrt{2}(K - 2D + 25F)zk.$$

На краю зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$) спектр (5.37) размягчается на линии $J-2K+19D-50F=0$:

$$\varepsilon_{1,2}(k \rightarrow \pi) = 9(K - 2D + 25F)zk^2.$$

Ветвь (5.39) неустойчива на линии $\tilde{J} = 0$ в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ и принимает вид:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow 0) = 36\sqrt{2}|F|zk.$$

На краю зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$) спектр (5.39) размягчается на линии $\tilde{J}' = 0$:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow \pi) = 36|F|zk^2$$

Из определения ОН и ТДН фаз следует, обе фазы являются двухподрешеточными нематическими. Однако, как видно из закона дисперсии (5.38) в ТДН фазе определяющим является обменный интеграл F в отличие от ОН фазы, в которой все ветви спектра существуют при $D=F=0$.

Таким образом, картина фазовых переходов сложнее, чем для магнетика со спином $S=3/2$, где области стабильности фаз определялись знаками только двух комбинаций параметров [64] (см. также Раздел 3). В рассматриваемом магнетике удастся провести анализ фазовых состояний, если строить сечения фазовой диаграммы при некоторых фиксированных значениях констант обменного взаимодействия.

5.3. Анализ устойчивости фаз относительно произвольных малых возмущений при различных соотношениях обменных интегралов.

5.3.1. Сечения фазовой диаграммы магнетика с $S=2$ при различных соотношениях констант обменных интегралов и $F>0$.

Представление полученных результатов становится более наглядным если ввести следующие комбинации переменных $x_1=2J-K+41D-70F$, $x_2=3D-15F$, $x_3=K-2D+28F$, $x_4=9F$ и построить на них вещественное проективное пространство

$$x = x_1/x_4, \quad y = x_2/x_4, \quad z = x_3/x_4,$$

и далее рассмотреть его сечения при фиксированных значениях координаты z и знака константы обменного взаимодействия F , т.е. x_4 .

Следует отметить, что выбор сечений, в которых можно отобразить фазовую диаграмму исследуемой системы не единственный. Именно в переменных « x,y,z » приведенных выше, при отображении сечений удастся наиболее наглядно проследить динамику изменения фазовой картины от величин обменных интегралов: на всех сечениях устойчивыми остаются ФМ, АФМ, ТН и ТАН фазы; кроме того, как показал анализ спектров исследуемой системы, реализация той или иной нематической фазы существенно от знака обменного интеграла при старшей степени скалярного произведения, в данном случае – F . Такая же особенность имела и в магнетиках, рассмотренных в третьем разделе: $S=1$ – K_{nn} –биквадратичное и $S=3/2$ – L_{nn} – бикубическое обменные взаимодействия.

Сразу же отметим, что картина фазовых состояний выглядит наиболее просто для $z=0$ и $F>0$. В этом случае нематические фазы СН, ОН и ТДН– не

реализуются. Переписав выражения для линий фазовых переходов или линий потери устойчивости фаз, полученных из анализа свободных энергий и анализа спектров возбуждения в ФМ, АФМ, ТН и ТАН фазах, в переменных (x, y, z) , следует, что ФМ фаза теряет устойчивость на линиях $x \pm 3y = 1$, АФМ – становится неустойчивой при $x \pm 3y = -1$ (рис. 5.2). Граница области устойчивости ТН фазы определяется лучами: $3y + x = -1$, $3y - x = -1$ и отрезком $x \in [-1, 1]$ при $y = 0$.

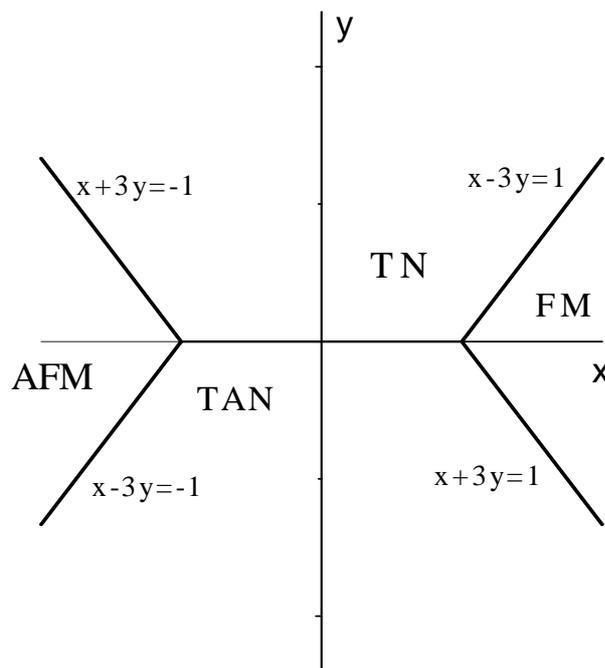


Рис. 5.2. Области существования различных фаз на плоскости XOY при $z=0$, $F>0$. Здесь и ниже на других рисунках обозначено: ФМ – ферромагнитная фаза, АФМ – антиферромагнитная фаза, ТН – тетраэдрический нематик, ТАН – тетраэдрический антинематик.

Область устойчивости ТАН- фазы определяется выражениями $x+3y=1$ и $x-3y=-1$ и $y=0$. Таким образом, четыре описанные выше фазы полностью определяют все фазовые состояния магнетика при значении $z=0$. Фазовые переходы как и в магнетиках с значениями спинов $S=1, 3/2$, в рассматриваемом случае являются вырожденными переходами I рода.

Если $z \neq 0$, $F > 0$ поведение системы существенно различается для случаев $z > 0$ и $z < 0$. В случае $z > 0$ к описанным выше четырем фазам добавляется одноподрешеточная нематическая фаза СН. Непосредственного перехода между ТН и ТАН фазами не будет, переход будет происходить через СН фазу (рис. 5.3).

Для значений $\beta \neq 0, \pi/2$ имеются четыре ветви спектра с линейным законом дисперсии и различными скоростями. Однако анализ свободной энергии с учетом температурных поправок (5.27) показал, что состояние с $\beta \neq 0, \pi/2$ – неустойчиво и «расщепляется» на осевой нематик ($\beta = 0$) в окрестности ФМ и АФМ фаз и плоскостной нематик ($\beta = \pi/2$) в окрестности ТН и ТАН фаз.

В случае осевого нематика спектр двух ветвей совпадает:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= 144(F_0 - F_k)(9F_0 - 2J_k + K_k - 41D_k + 70F_k); \\ \varepsilon_3^2(k) &= 9(K_0 - 2D_0 + 29F_0 - K_k + 2D_k - 29F_k) \cdot \\ &\cdot (9(K_0 - 2D_0 + 29F_0) - 2J_k + K_k - 68D_k + 205F_k) \\ \varepsilon_{2,4}^2(k) &= 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k) \cdot \\ &\cdot (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \end{aligned}$$

Анализ спектра для осевого нематика показывает, что ветвь $\varepsilon_1(k)$ становится неустойчивой на линиях $x=1$ или $x=-1$ СН-фаза переходит в ФМ или АФМ фазы, соответственно.

В случае реализации плоскостного нематика спектр (5.25-5.26) принимает вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^2(k) &= 9(K_0 - 2D_0 + 37F_0 - K_k + 2D_k - 37F_k) \cdot \\ &\cdot (K_0 - 2D_0 + 37F_0 - 2J_k + K_k - 44D_k + 85F_k); \\ \varepsilon_{3,4}^2(k) &= 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k) \cdot \\ &\cdot (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \end{aligned}$$

Спектр плоскостной нематической фазы представлен двумя ветвями, что, как и в случае осевого нематика, связано с вырождением возбужденных уровней магнитного иона.

При $y=z$ или $y=-z$ щель в спектре $\varepsilon_{3,4}(k)$ обращается в ноль. Анализ свободной энергии показывает, что линии $y=z$ или $y=-z$ соответствуют переходам из СН-фазы в ТН или ТАН фазы, соответственно.

Таким образом, СН-фаза существует только при $z>0$ внутри прямоугольника $-z<y<z$ и $|x|<1$. На всех этих линиях, а также на линиях переходов ФМ–ТН и АФМ–ТАН имеют место вырожденные переходы первого рода. Линии фазовых переходов осевой нематик – плоский нематик обозначены пунктирными линиями внутри прямоугольной области СН фазы на рис. 5.3.

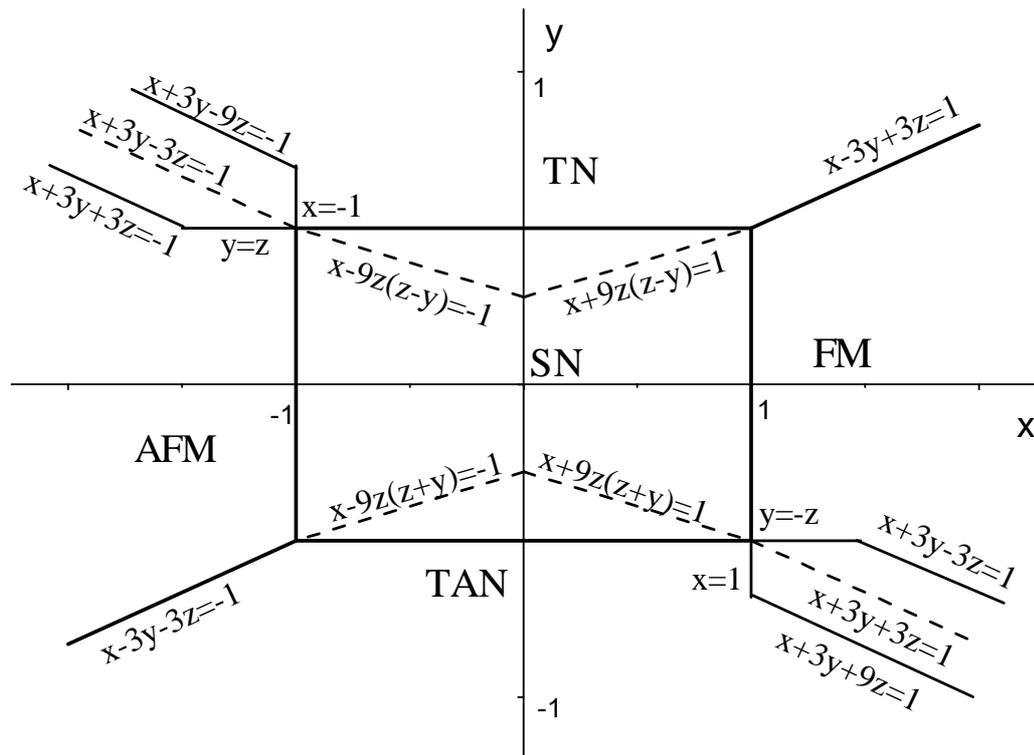


Рис. 5.3. Области существования различных фаз в пространстве переменных x , y , z при $z=0,5$ и $F>0$. Стандартные фазовые переходы первого рода отмечены штриховыми линиями, а тонкие сплошные линии представляют линии потери устойчивости фаз. Линии из точек показывают границы осевой нематической фазы с $\beta=0$ и плоскостной нематической фазы с $\beta=\pi/2$.

Необходимо отметить, что при $z>0$ имеется конечная область сосуществования фаз с различной подрешеточной структурой, определяемая неравенствами $x<-1$, $\max\{z, -(1+x+3z)\}<3y<9z-1-x$ для перехода ТН–

АФМ и $x > 1$, $1 - 9z - x < 3y < \min\{-z, (1 - x + 3z)\}$ для перехода ТАН–ФМ, (рис. 5.3). Энергии этих фаз сравниваются на линиях переходов, $x + 3y - 3z = -1$ и $x + 3y + 3z = 1$, соответственно. Для этих переходов линии устойчивости сосуществующих фаз и линии перехода первого рода сходятся в точках $x = -1, y = z$ или $x = 1, y = -z$, в этих точках соприкасаются области существования трех фаз.

При $z < 0$ нематическая фаза вида (5.10) становится неустойчивой и реализуется двухподрешеточная ортогональная нематическая ОН фаза. Структура ОН-фазы определяется состояниями вида (5.16). Область существования ОН-фазы определяется неравенствами $z < y < -z$ и $3y + 3z - 1 < x < 3y - 3z + 1$ (рис. 5.4).

Спектр магнонов определяется выражениями (5.34-5.36). Ветвь возбуждения ε_4 неустойчива относительно возмущений с $k \rightarrow 0$ или с $k \rightarrow k_B$ при выполнении условий $y = -z$ или $y = z$, соответственно происходит переход в ТН или ТАН фазы. С другой стороны, ветвь ε_1 становится неустойчивой в пределе длинных волн $k \rightarrow 0$ или на краю зоны Бриллюэна $k \rightarrow k_B$ на линиях $x - 3y + 3z = 1$ или $x - 3y - 3z = -1$.

Как показал анализ свободной энергии (5.15), а также как видно из рис. 5.4 при $z < 0, F > 0$ вместо областей сосуществования ФМ-ТАН и АФМ-ТН имеются две области, в которых реализуются двухподрешеточные ферримагнитно подобные фазы. Эти фазы характеризуются ненасыщенностью среднего спина одной из подрешеток: коллинеарная ЛС₁ фаза с основными функциями $|\psi_1\rangle = |2\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |1\rangle$; и антиколлинеарная ЛС₋₁ фаза с основными функциями $|\psi_1\rangle = |2\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |-1\rangle$.

Следовательно выражения, определяющие линии фазовых переходов переход в ЛС₁ и ЛС₋₁ фазы следующие: $x - 3y + 3z = 1$ и $x - 3y - 3z = -1$.

На линии $x + 3y + 9z = 1$ размягчается ветвь (5.20) ФМ фазы. На этой же линии совпадают значения свободных энергий $W[C_m]$ ФМ и ЛС₁. На линии $x + 3y + 3z = -1$ размягчается ветвь (5.21) ТН фазы. Также на этой линии равны

значения свободных энергий $W[C_m]$ ТН и ЛС₋₁. Нижняя часть рис. 5.4 симметрична верхней и ее анализ можно опустить.

Отметим, что все фазовые переходы в изотропном негейзенберговском магнетике с $S=2$, при $z<0$, $F>0$ являются вырожденными переходами первого рода.

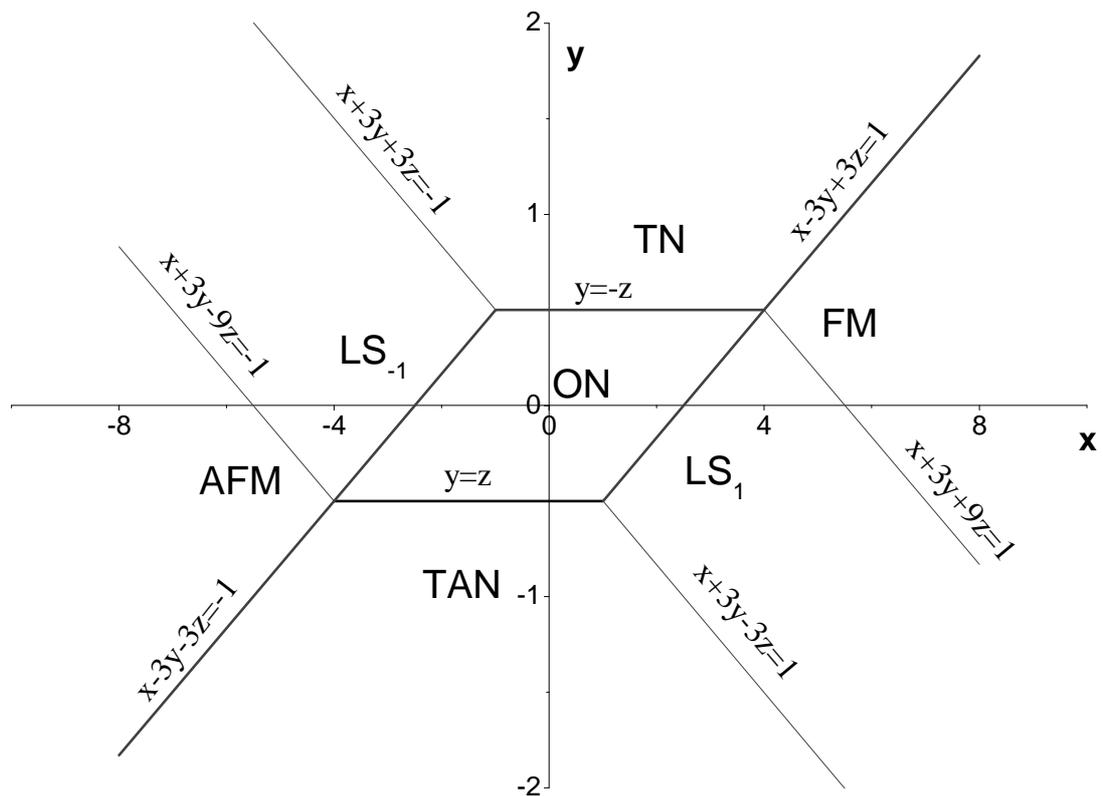


Рис. 5.4. Области существования различных фаз в пространстве переменных x , y , z при $z=-0,5$, $F>0$.

5.3.2. Исследование сечений фазовой диаграммы магнетика с $S=2$ при различных соотношениях констант обменных интегралов и $F<0$

Как уже отмечалось ранее, и как видно из анализа фазовых состояний изотропных магнетиков $S=1$ и $S=3/2$, изменение знака констант обменных интегралов при высших спиновых инвариантах приводит к реализации новых фазовых состояний с нестандартными свойствами. Поэтому, представляет

интерес исследовать фазовую диаграмму рассматриваемой системы при $F < 0$. В первую очередь рассмотрим случай $z > 0$. На рис.5.5 представлено сечение диаграммы при $z=0,5$ – это тоже сечение, что и на рис. 5.4, на котором $z=-0,5$, но только развернуто относительно начала координат на 180 градусов. Это происходит потому, изменение знака переменной z в определенном диапазоне изменения z не приводит к появлению новых фаз на сечении фазовой диаграммы. Выражения для линий остаются прежними, однако из-за того, что меняется знак z сами линии неустойчивости фаз на рис.5.5 сдвигаются относительно линий на рис. 5.4.

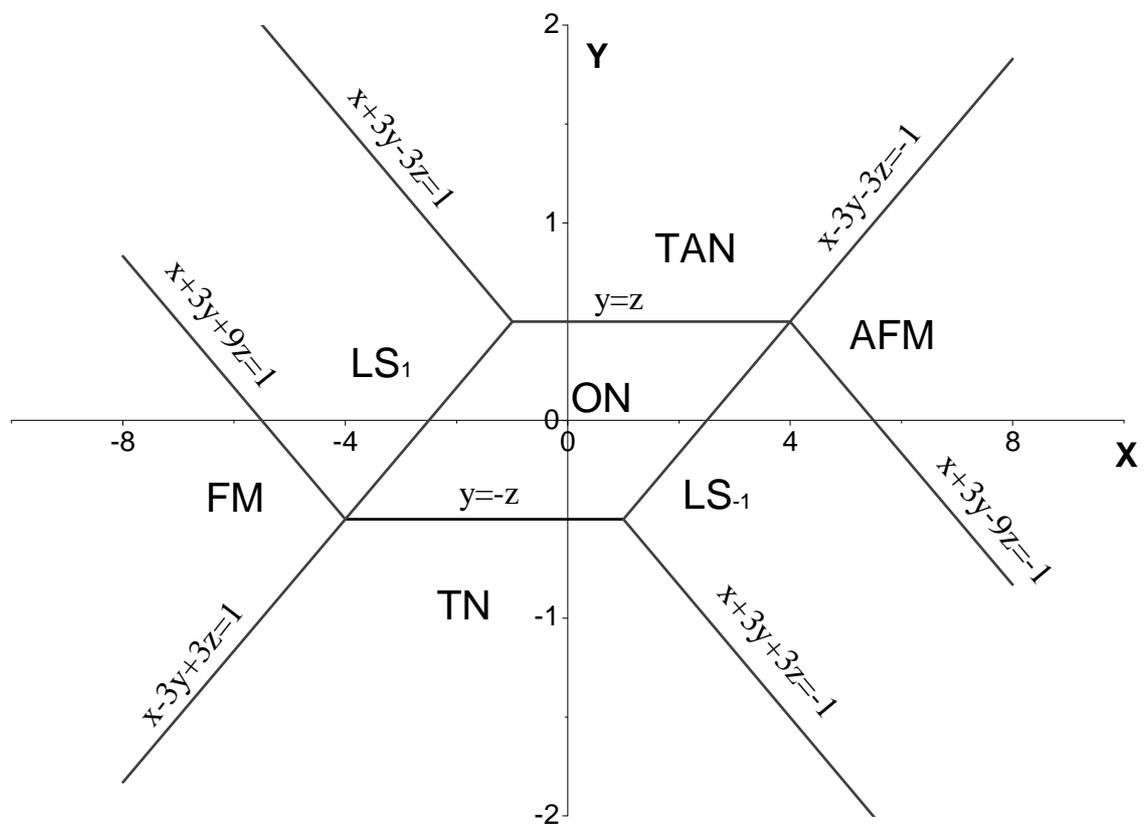


Рис. 5.5. Области существования различных фаз в пространстве переменных x , y , z при $z=0,5$ $F < 0$.

Как показал анализ энергии основного состояния – диаграмма с $F < 0$ и $z > 0$ справедлива до значения $z=1/3$. По мере уменьшения значений переменной z по модулю, (но $z > 1/3$) область ОН фазы сужается со стороны ЛС фаз и в точке $z=1/3$ ОН фаза становится неустойчивой (рис. 5.6).

Как и ранее, все линии границ фаз получены из анализа энергий основного состояния, а также из анализа спектров возбуждения в соответствующих фазах либо при $k \rightarrow 0$, либо при $k \rightarrow k_B$. Линия границ фаз LS_1 и LS_{-1} найдена из равенства энергий, так как получение спектров в фазах с неэквивалентными подрешетками для магнетика $S=2$ представляет довольно громоздкую математическую задачу.

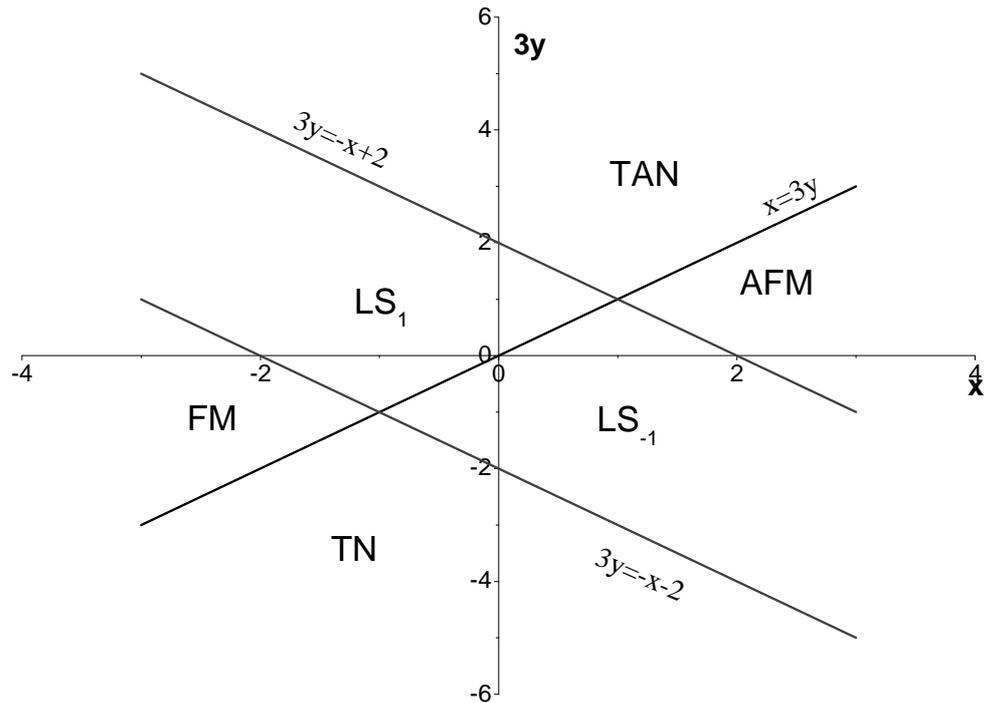


Рис. 5.6. Сечение фазовой диаграммы магнетика $S=2$ при $z=1/3$, $F<0$.

Представляет интерес рассмотреть ещё одно сечение фазовой диаграммы при $0 < z < 1/3$.

Исследование динамических и статических свойств системы показывает, что в случае $z < 1/3$ реализуется ещё одна двухподрешеточная нематическая ТДН фаза, структура, которой определяется состояниями вида (5.17)

Рассмотрим подробно поведение спектра возбуждений в ТДН фазе близи границ потери устойчивости фазы. Толстые линии, ограничивающие данную фазу – линии вырожденного фазового перехода первого рода. На линиях фазового перехода в АФМ или ФМ фазы $x = \pm 1$ теряет устойчивость ветвь (5.38) либо при $k \rightarrow 0$, либо при $k \rightarrow k_B$; на линиях фазового перехода в LS_1 ($x - 3y - 9z = -3$)

или ЛС₁ ($x-3y+9z=3$) теряет устойчивость ветвь (5.37). Следует отметить, что поведение ветвей (5.37-5.39) вблизи линиях фазовых переходов существенно отличается: в центре зоны Бриллюэна $k \rightarrow 0$ спектры линейны по волновому вектору, а на краю зоны Бриллюэна $k \rightarrow k_B$ квадратичные по k .

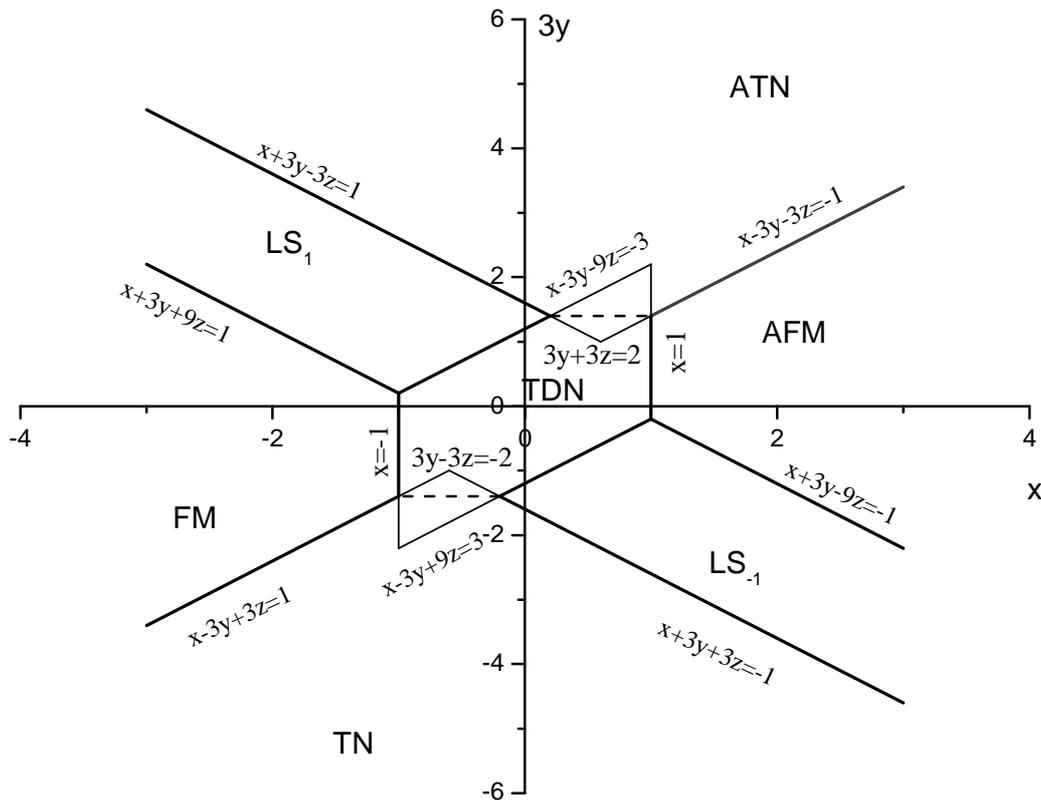


Рис. 5.7. Сечение фазовой диаграммы магнетика $S=2$ при $z=0,2$ и $F<0$.

Штриховой линией на рис. 5.6 обозначены линии фазового перехода первого рода в ТН фазу $3y-3z=-2$ и в ТАН фазу $3y+3z=2$. Области сосуществования фаз ТДН и ТАН ограничены тонкими сплошными линиями:

$x-3y-9z=-3$, $x=1$ – линии неустойчивости спектра ТДН фазы (5.38), (5.39);

$x+3y-3z=1$, $x-3y-3z=-1$ – линии неустойчивости спектра ТАН фазы (5.32).

Области сосуществования фаз ТДН и ТН ограничены линиями:

$x-3y+9z=3$, $x=-1$ – линии неустойчивости спектра ТДН фазы (5.38), (5.39);

$x-3y+3z=1$, $x+3y+3z=-1$ – линии неустойчивости спектра ТН фазы (5.19).

Из анализа свободной энергии (5.14) следует, что по мере уменьшения переменной z области существования ЛС фаз сужаются, а при $z=0$ ЛС фазы становятся неустойчивыми. При дальнейшем увеличении по модулю переменной z (рис. 5.8) имеется конечная область сосуществования фаз с различной подрешеточной структурой: АФМ-ТН и ФМ-ТАН фаз аналогичная случаю $z>0$ и $F>0$, рассмотренному выше в подразделе 5.3.1. (рис. 5.2). На отрезках линий $x=\pm 1$ области сосуществования АФМ-ТН и ФМ-ТАН граничат с областями сосуществования ТДН-ТН и ТДН-ТАН. При этом ситуация, при которой сосуществуют сразу три фазы– ФМ-ТАН-ТДН или АФМ-ТН-ТДН– не реализуется, так как на границе $x=1$ областей сосуществования неустойчивыми становятся ветви спектров ФМ фазы (5.24) и ТДН фазы (5.38), а линии $x=-1$ неустойчивыми– ветви спектров АФМ фазы (5.31) и ТДН фазы (5.38).

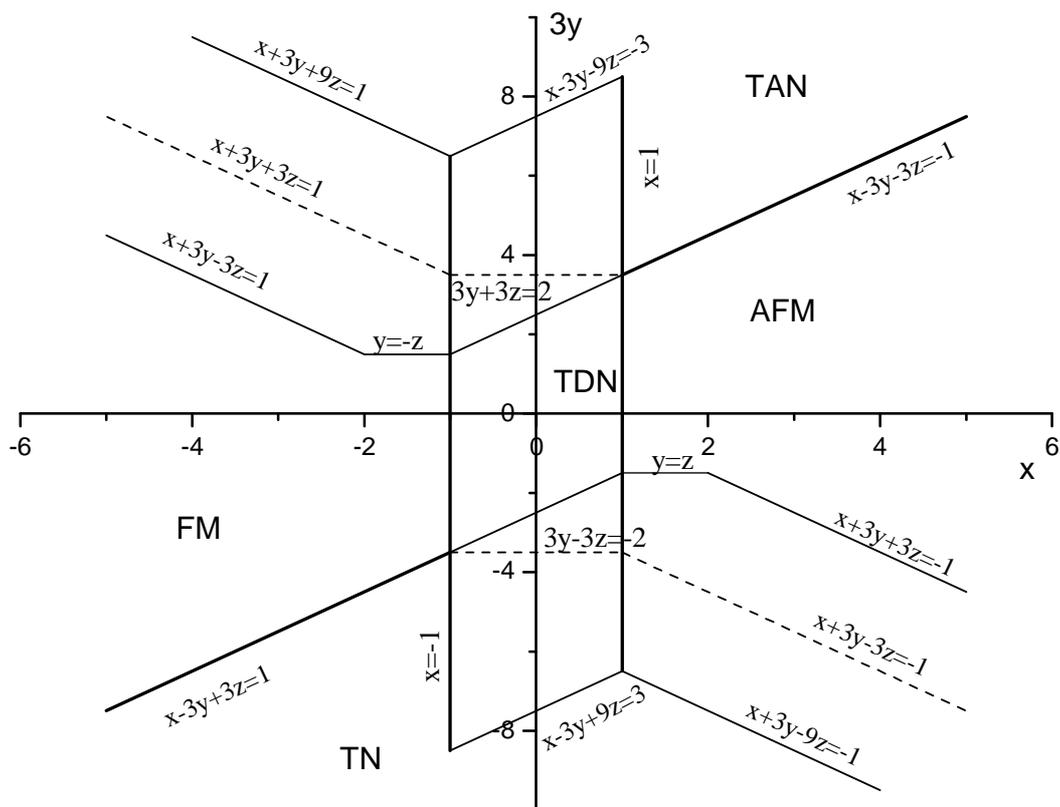


Рис. 5.8. Сечение фазовой диаграммы магнетика $S=2$ при $z=-0,5$, $F<0$.

Поведение спектров возбуждения на остальных линиях неустойчивостей фаз уже обсуждалось выше. Области сосуществования ТДН-ТН и ТДН-ТАН фаз в рассматриваемом сечении $z < 0$ ограничены следующими линиями: $\{x-3y-9z=-3, x-3y-3z=-1, x=\pm 1\}$ – ТДН-ТН фазы и $\{x-3y+9z=3, x-3y+3z=1, x=\pm 1\}$ – ТДН-ТАН фазы

Основные результаты пятого раздела

1. Впервые проведен полный анализ фазовых состояний и спектров элементарных возбуждений негейзенберговского изотропного магнетика с значением спина $S=2$. Этот анализ позволяет утверждать, что учет высших спиновых инвариантов является существенным, и приводит к возникновению магнитоупорядоченных состояний с более сложной структурой, нежели ферро- или антиферромагнитная.

2. Определены конфигурации всех нематических состояний, как в случае одноподрешеточного магнетика, так и в случае разбиения магнетика на две подрешетки. В случае реализации одноподрешеточной нематической фазы анализ свободной энергии с учетом тепловых поправок показал, что при определенных соотношения обменных интегралов, спиновый нематик становится либо плоскостным, либо осевым.

3. Впервые показано, что нематические состояния в двухподрешеточном магнетике имеют более сложную структуру по сравнению с двухподрешеточными нематическими состояниями для магнетиков с $S=1$ или $S=3/2$. Реализуется ортогонально нематическая фаза, в которой ортогональны являются главные оси эллипсоида квадрупольных моментов. Вторая двухподрешеточная нематическая фаза реализуется только при отрицательном значении обменного взаимодействия F , и характеризуется гофрированными эллипсоидами развернутыми вокруг главной оси тензора квадрупольного момента друг относительно друга на угол $\pi/4$.

4. Исследованы фазы, характеризующиеся высшими мультипольными моментами, так как средняя намагниченность на один узел равна нулю, а эллипсоид тензора квадрупольного момента вырождается в шар: тетраэдрическая и антитетраэдрическая состояния. Показано, что данным состояниям соответствует дополнительный параметр – «псевдоспин», который при преобразованиях $t \rightarrow -t$ ведет себя как вектор спиного момента. Установлено, что вектора псевдоспина каждой из подрешеток в

антитетраэдрической фазе имеют противоположную ориентацию подобно векторам среднего спина для антиферромагнитной фазы

5. Впервые для изотропного магнетика обнаружен случай появления невырожденных фазовых переходов между фазами: в зависимости от соотношения констант обменного взаимодействия имеет место фазовый переход первого рода с конечной областью сосуществования фаз.

6. Впервые в результате анализ свободной энергии было установлено, что в магнетике с $S=2$ могут реализовываться двухподрешеточные структуры с неэквивалентными подрешетками. Эти фазы характеризуются насыщенным значением среднего спина одной из подрешеток и ненасыщенностью среднего спина второй подрешетки. Причем, направления магнитных моментов подрешеток либо коллинеарны, либо антиколлинеарны.

Заключение

В диссертационной работе теоретически исследованы статические и динамические свойства негейзенберговских магнетиков: изотропных и анизотропных с различным видом магнитной анизотропии. В результате поставленных и решенных задач было выяснено влияние эффекта квантового сокращения спина во всех исследованных моделях. Было показано, что возможность такого эффекта связана с учетом немалых высших обменных инвариантов как для магнетиков с целым ($S=1$, $S=2$) и полуцелым ($S=3/2$) значением спина. Другая возможность проявления эффекта квантового сокращения спина – это влияние магнитной анизотропии: одноионной или обменной. Как показали исследования наиболее существенные проявления эффекта квантового сокращения спина являются: появление дополнительной ветви спиновых колебаний, для которой характерны осцилляции длины вектора намагниченности и возникновение устойчивого упорядоченного состояния с нулевым средним значением спина на узле – состояние спинового нематика, характеризуемого тензорными параметрами порядка для магнетиков со спином магнитного иона $S=1$ и $S=3/2$). В магнетике с $S=2$ кроме одноподрешеточных фаз (с средним значением намагниченности равным нулю) возможно существование большого разнообразия двухподрешеточных фаз различной симметрии в зависимости от соотношений материальных констант.

Кроме выше приведенных результатов, основные положения впервые сформулированные и решенные в диссертационной работе следующие:

- Выяснена роль квантовых эффектов в простейшей модели анизотропного ферримагнетика при температуре отличной от нуля. Показано, что даже малая одноионной анизотропией (значительно меньшая значений констант обменного взаимодействия) при отличной от нуля температуре приводит к осязательному уменьшению среднего значения спина на узле анизотропной подрешетки. Также показано, что эффект квантового сокращения спина оказывает существенное влияние не только на статические, но и динамические свойства ферримагнетика.

- Впервые исследовано поведение сильноанизотропного фрустрированного антиферромагнетика со спином единица, в котором возможно существование сверхтвердой магнитной фазы. Предсказана возможность существования сверхтвердого магнитного состояния в продольном внешнем поле. Показано, что в случае поперечного внешнего поля в рассматриваемой системе сверхтвердая магнитная фаза не реализуется.

- Показано, что для магнетиков со спином $S=1$ и $S=3/2$, в которых реализуется состояние спинового нематика, существуют двумерные топологические солитоны– вихри. Обнаружены несколько типов таких вихрей, с сингулярностью в центре и с несингулярным ядром, в котором разрушен нематический порядок. Ядро характеризуется восстановлением магнитного порядка, который может быть ферромагнитным или антиферромагнитным.

- Исследована модель негейзенберговского ферромагнетика со сложной анизотропией обменных взаимодействий. Учет анизотропных обменных взаимодействий приводит к снятию вырождения по направлению вектора магнитного момента в ферромагнитной фазе и вектора-директора в нематическом состоянии. Показано, что учет анизотропного биквадратичного обменного взаимодействия более сложного вида приводит к реализации угловых ферромагнитной и нематической фаз. Анализ динамических и статических свойств системы в случае реализации только тензорных фаз показал, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам. Также показано, что фазовые переходы сопровождающиеся изменением модуля намагниченности могут быть как первого так и второго рода.

- Проведен полный анализ фазовых состояний и спектров элементарных возбуждений негейзенберговских изотропных магнетиков со значением спина $S=1, 3/2, 2$. Этот анализ позволяет утверждать, что учет высших спиновых инвариантов является существенным, и приводит к возникновению магнитоупорядоченных состояний с более сложной структурой, нежели ферро- или антиферромагнитная.

- Исследованы фазы магнетика со спином магнитного иона $S=2$ характеризуется высшими мультипольными моментами, так как средняя намагниченность на один узел равна нулю, а эллипсоид тензора квадрупольного момента вырождается в шар: тетраэдрическое и антитетраэдрическое состояния. Показано, что в этих состояниях возникает дополнительный параметр – псевдоспин, который при преобразованиях времени $t \rightarrow -t$ ведет как вектор спинового момента. Показано, что вектора псевдоспина каждой из подрешеток в антитетраэдрической фазе имеют противоположную ориентацию подобно векторам среднего спина для антиферромагнитной фазы.

- В результате анализа свободной энергии было установлено, что в магнетике с $S=2$ могут реализовываться двухподрешеточные структуры с неэквивалентными подрешетками. Эти фазы характеризуются насыщенным значением среднего спина одной из подрешеток и ненасыщенностью среднего спина второй подрешетки. Причем, направления магнитных моментов подрешеток либо коллинеарны, либо антиколлинеарны.

Благодарности

Автор выражает самую искреннюю и сердечную благодарность научному консультанту, руководителю и учителю Юрию Анатольевичу Фридману за постоянную помощь на всех этапах работы, за моральную поддержку и уверенность в успехе этой деятельности.

Также хочу поблагодарить своих соавторов Виктора Бутрима, Елену Галкину, Филиппа Клевца, Александра Мелешко, Анастасию Кривцову за плодотворное сотрудничество и полезные обсуждения материалов диссертации.

Отдельную благодарность хочу выразить Борису Алексеевичу Иванову за предоставленную возможность сотрудничества и плодотворное обсуждение результатов.

Литература

1. Вонсовский С.В. Магнетизм/ Сергей Васильевич Вонсовский. – М.: Изд-во «Наука», 1971. – 1032 с.
2. Маттис Д. Теория магнетизма/ Daniel C. Mattis. – М.: Изд-во «Мир», 1968. – 408 с.
3. Гейзенберг В. Избранные труды/ Вернер Гейзенберг. – М.: Изд-во «Эдиториал УРСС», 2001. – 616 с.
4. Дирак П.А.М. Собрание научных трудов/ Поль Адриен Морис. – М.: Изд-во «Физматлит», 2002. – 698 с.
5. Avilov V.V. Calculation of the exchange integrals in solid ^3He / V.V. Avilov and S.V. Iordansky// J. Low. Temp. Phys. – 1983. – Vol. 55. – P. 1-90.
6. Roger M. Magnetism in solid ^3He / M. Roger, J.H. Hetherington and J.M. Delrieu // Review Modern Physics. – 1982. – Vol. 48. – P. 241-256.
7. Dacre P. The Interaction of Two Electronic Systems at Short and Medium Range/ Dacre P., McWeeney R. //Proc. Roy. Soc. Ser. A. –1970. –Vol. 317.– P. 435-454.
8. Anderson P. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions/ P. Anderson //Phys. Rev. –1959. –Vol. 115. –P. 2–13.
9. Celinski Z. The temperature dependence of the bilinear and biquadratic exchange coupling in Fe/Cu, Ag/Fe(001) structures/ Z. Celinski, B. Heinrich, J.F. Cochran// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. –1995. –Vol. 145. –P. L1-L5.
10. Êittel C. Model of Exchange-Inversion Magnetization /Êittel C.//Phys. Rev. –1960, –Vol. 120. – P. 335.
11. Harris E. Biquadratic Exchange Between Mn^{2+} Ions in MgO / Harris E. Owen J.//Phys. Rev. Lett. –1963. –Vol. 11. – P. 9–10.
12. Sirvadiere J. Molecular-Field Theory of Phase Transitions in TbPO_4 and in TmAsO_4 /Sirvadiere J.//Phys. Rev. B –1973. –Vol. 8. – P. 2004–2015.
13. Allen S.J. Spin-Lattice Interaction in UO_2 . Theory of the First-Order Phase Transition/Allen S.J.//J. Phys. Rev. –1968. Vol. – 167. – P. 492–496.

14. Локтев В. М. Особенности статики и динамики магнитных диэлектриков с одноионной анизотропией / В. М. Локтев, В. С. Островский // Физика низких температур. – 1994. – Т. 20. – С. 983-1016.
15. Нагаев Э.Л. Аномальные магнитные структуры и фазовые переходы в негейзенберговских магнетиках / Э.Л. Нагаев // Успехи Физических Наук. – 1982. – Т. 136. – С. 61-103.
16. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложным обменным взаимодействием / Э.Л. Нагаев. – М.: Изд-во «Наука», 1988. – 232 с.
17. Матвеев В.М. Квантовый квадрупольный магнетизм и фазовые переходы при биквадратном обмене / В.М. Матвеев // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1973. – Т. 65. – С. 1626-1636.
18. Андреев А.Ф. Спиновые нематики/ А. Ф. Андреев, И. А. Грищук// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1984. – Т. 87. – С. 467-475.
19. Papanikolaou N. Unusual phases in quantum spin-1 systems/ N. Papanikolaou// Nuclear Physics. – 1988. – В. 305. – Р. 367-395.
20. Chubucov A.V. Fluctuations in spin nematics/ A.V. Chubucov //Journal of Physics: Condens Matter. – 1990. – Vol. 2. – P. 1593.
21. Калита В. М. Описание ферромагнитных свойств системы с $S = 1$ с учётом негейзенберговского изотропного обмена/ В. М. Калита// Физика Твёрдого Тела. – 1991. – Т. 33. – С. 1940.
22. Fridman Yu.A. Spin nematic and orthogonal nematic states in $S=1$ non-Heisenberg magnet/ Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, Ph.N. Klevets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2013. –Vol. 325. – P. 125.
23. Svistov L. E. New high magnetic field phase of the frustrated $S=1/2$ chain compound LiCuVO_4 / L. E. Svistov, T. Fujita, H. Yamaguchi, S. Kimura, K. Omura, A. Prokofiev, A. I. Smirnov, Z. Honda, M. Hagiwara// Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2011. – Т. 93. – С. 24.
24. Zhitomirsky M. E. Magnon pairing in quantum spin nematic/ M. E. Zhitomirsky, H. Tsunetsugu// Europhys. Lett. – 2010. – Vol. 92. – P. 37001.

25. Гинзбург С. Л. Спиновые волны в анизотропном ферромагнетике/ С. Л. Гинзбург// Физика Твёрдого Тела. – 1970. – Т. 12. – С. 1805.
26. Hsieh Y. Y. Excitation in magnetic systems with a singlet ground state/ Y. Y. Hsieh and M. Blume// Phys. Rev. B. – 1972. – Vol. 8. – P. 2684.
27. Онуфриева Ф.П. Exact solution of the one-ion problem for a magnet with one-ion anisotropy in a field of arbitrary direction / Ф.П. Онуфриева // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1981. – Т. 80. – С. 2372-2379.
28. Онуфриева Ф.П. Низкотемпературные свойства спиновых систем с тензорным параметром порядка/ Ф.П. Онуфриева // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1985. – Т. 89. – С. 2270-2287.
29. Переломов А. М. Обобщенные когерентные состояния и некоторые их применения/ А. М. Переломов// Успехи Физических Наук. – 1977. – Т. 123. – С. 23-55.
30. Perelomov A. Generalized Coherent States and Their Applications/ Askold Perelomov. – Berlin: Springer-Verlag, 1986. P. 80.
31. Ivanov B.A. Effective field theory for the S=1 quantum nematic/ B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk// Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – P. 052401.
32. Fridman Yu.A. Spin waves in two-dimensional ferromagnet with large easy-plane anisotropy / Yu.A. Fridman, D.V. Spirin // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2002. – Vol. 253. – P. 111.
33. Fridman Yu.A. Phase Transition in Temperature “Quadrupolar Phase–Disordered Phase” in a Two-Dimensional Non-Heisenberg Ferromagnet / Yu.A. Fridman, D.V. Spirin// Physica Status Solidi (b). – 2002. – Vol. 231. – P. 165.
34. Buchta K. Probable absence of a quadrupolar spin-nematic phase in the bilinear-bicquadratic spin-1 chain/ K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza, and J. Sólyom// Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72. – P. 054433.
35. Läuchli A. Spin nematics correlations in bilinear-bicquadratic S=1 spin chain/ A. Läuchli, G. Schmid, and S. Trebst// Phys. Rev. B – 2006. – Vol. 74. – P. 144426.
36. Де Жен П. Физика жидких кристаллов/ П. де Жен.– М.: Мир, 1977. – 396 с.

37. Läuchli A. Quadrupolar phases of the $S=1$ bilinear-bicquadratic Heisenberg model on the triangular lattice/ A. Läuchli, F. Mila, and K. Penc// *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 229901.
38. Smerald A. Theory of spin excitations in a quantum spin-nematic state/ A. Smerald and N. Shannon// *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 88. – P. 184430.
39. Fáth G. Period tripling in the bilinear-bicquadratic antiferromagnetic $S=1$ chain/ G. Fáth and J. Sólyom// *Phys. Rev. B.* – 1991. – Vol. 44. – P. 11836.
40. Xian Y. Spontaneous trimerization of the spin-1 chains/ Y. Xian// *Journal of Physics: Condens Matter.* – 1993. – Vol. 5. – P. 7489.
41. Stamper-Kurn D.M. Optical confinement of a Bose-Einstein condensate/ D.M. Stamper-Kurn, M.R. Andrews, A.P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Meisner, J. Stenger, and W. Ketterle// *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – Vol. 80. – P. 2027.
42. Imambekov A. Spin-exchange interactions of spin-one bosons in optical lattices: singlet, nematic, and dimerized phases/ A. Imambekov, M. Lukin, and E. Demler// *Phys. Rev. A.* – 2003. – Vol. 68. – P. 063602.
43. Snoek M. Microscopic wave functions of spin-singlet and nematic Mott states of spin-one bosons in high-dimensional bipartite lattices/ M. Snoek and F. Zhou// *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 094410.
44. Бутрим В. И. Релаксация магнонов в спиновом нематике/ В. И. Бутрим, Б. А. Иванов, А. С. Кузнецов, Р. С. Химин// *Физика низких температур.* – 2008. – Т. 34. – С. 1266.
45. Kolezhuk A. Magnon decay in gapped quantum spin systems/ A. Kolezhuk and S. Sachdev// *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 96. – P. 087203.
46. Bar'yakhtar V. G. Dynamics and relaxation in spin nematics/ V. G. Bar'yakhtar, V. I. Butrim, A. K. Kolezhuk, and B. A. Ivanov// *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 87. – P. 224407.
47. Иванов Б. А. Динамика солитонов в спиновом нематике/ Б. А. Иванов, Р. С. Химин// *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 2007. – Т. 131. – С. 343.

48. Komineas S. Vortex rings and lieb modes in a cylindrical Bose-Einstein condensate/ S. Komineas and N. Papanicolaou// Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P. 070402.

49. Иванов Б. А. Дисклинации в нематической фазе магнетика со спином единица/ Б. А. Иванов// Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2006. – Т. 84. – С. 90.

50. Ivanov B. A. Pairing of solitons in two-dimensional S=1 magnets/ B. A. Ivanov, R. S. Khymyn, and A. K. Kolezhuk// Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 100. – P. 047203.

51. Lieb E. H. Long range atomic potentials in Thomas-Fermi theory/ E. H. Lieb// Commun. Math. Phys. – 1979. – Vol. 67. – P. 69.

52. Ivanov B. A. Dynamics of vortices and their contribution to the response functions of classical quasi-two-dimensional easy-plane antiferromagnet/ B. A. Ivanov and D. D. Sheka// Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 72. – P. 404.

53. Galkina E.G. Magnetic vortex as a ground state for micron-scale antiferromagnetic samples/ E.G. Galkina, A. Yu. Galkin, B. A. Ivanov, and Franco Nori// Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81. – P. 184413.

54. Chubukov A. V. Quantum ferrimagnetism /A. V. Chubukov, K. I. Ivanova, P. Ch. Ivanov and E. R. Korutcheva// J. Phys.: Condens. Matter – 1991. – Vol. 3. – P. 2665.

55. Wu C. Exact SO(5) symmetry in the spin-3/2 fermionic system/ Congjun Wu, Jiang-ping Hu and Shou-cheng Zhang// Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91. – P. 186402.

56. Wu C. Hidden symmetry and quantum phases in spin-3/2 cold atomic systems/ Congjun Wu// Modern Physics Letters B. – 2006. – Vol. 20. – P. 1707.

57. Tu H.-H. Spin-quadrupole ordering of spin-3/2 ultracold fermionic atoms in optical lattices in the one-band Hubbard model/ Hong-Hao Tu, Guang-Ming Zhang and Lu Yu// Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 74. – P. 174404.

58. Tu H.-H. Mott insulating phases and quantum phase transitions of interacting spin-3/2 fermionic cold atoms in optical lattices at half filling/ Hong-Hao Tu, Guang-Ming Zhang and Lu Yu// *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76. – P. 014438.
59. Barnett R. Classifying novel phases of spinor atoms/ Ryan Barnett, Ari Turner and Eugene Demler// *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97. – P. 180412.
60. Turner A. M. Nematic order by disorder in spin-2 Bose-Einstein condensates/ Ari M. Turner, Ryan Barnett, Eugene Demler and Ashvin Vishwanath// *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98. – P. 190404.
61. Barnett R. Classifying vortices in $S=3$ Bose-Einstein condensates/ Ryan Barnett, Ari Turner and Eugene Demler// *Phys. Rev. A.* – 2007. – Vol. 76. – P. 013605.
62. Fridman Yu. A. Spin nematic and antinematic state in a spin $S=3/2$ isotropic non-Heisenberg magnet/ Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, A. K. Kolezhuk and B. A. Ivanov // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – V. 106. – P. 097202.
63. Космачев О.А. Особенности формирования фазовых состояний в негейзенберговском магнетике с $S=2$ / О.А.Космачев, Ю.А.Фридман// *Физика Твёрдого Тела.* – 2013.– Т. 55. – С. 678.
64. Космачев О.А. Динамические свойства магнетиков со спином $S=3/2$ и негейзенберговским изотропным взаимодействием/ О.А. Космачев, Ю.А. Фридман, Е.Г. Галкина, Б.А. Иванов// *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 2015. – Т. 147. – С. 320.
65. Космачев О.А. Фазовые состояния магнетика со спином $S=2$ и изотропным обменным взаимодействием/ О.А. Космачев, Ю.А. Фридман, Б.А. Иванов// *Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* – 2017. – Т. 105. – С. 444.
66. Орленко Е.В. Магнитные состояния изотропного магнетика с «высоким» $S=3/2$ спином ионов/ Е.В. Орленко, Ф.Е. Орленко// *Физика Твёрдого Тела.* – 2016.– Т. 58. – С. 1338.

67. Марченко В.И. К теории обменной симметрии/В.И. Марченко// Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1988. – Т. 48. – С. 387.
68. Белов К. П. Редкоземельные магнетики и их применение/ К. П. Белов. – М.: Наука, 1980. – 240 с.
69. Тейлор К.. Физика редкоземельных соединений/ К. Тейлор, М. Дарби. – М.: Мир, 1974. – 376 с.
70. Звездин А.К. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах/ А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов.–М.: Изд-во «Наука», 1985.– 296с.
71. Tsuneto T. Spin ordering in a system with large anisotropy energy in a magnetic field/ T. Tsuneto, T. Muraо// Physica.– 1971. – Vol. 51. – P.186.
72. Ishikawa C. Collective modes of spin excitations in a uniaxial ferromagnet/ C. Ishikawa, Y. Endo// J. Progr. Theor. Phys.– 1976. – Vol. 55. – P. 650.
73. Борисенко В.Г., Переверзев Ю.В. Квантовые особенности фазовых диаграмм легкоплоскостных антиферромагнетиков в магнитном поле/ В.Г. Борисенко, Ю.В. Переверзев// Физика низких температур. – 1985. – Т. 11. – С. 730.
74. Diederix K.M. The first experimental evidence of a field induced magnetic phase transition in a $S = 1$ singlet ground state system/ К.М. Diederix, H.A. Algra, J.P. Groen, T.O. Klassen, N.I. Poulis and R.L. Carlin// Phys. Lett. A.– 1977. – Vol.60. – P. 247.
75. Дьяконов В. П. Индуцированные магнитным полем фазовые переходы в синглетных магнетиках с ферромагнитным обменом/ В.П. Дьяконов, Э.Е. Зубов, Ф.П. Онуфриева, А.В. Сайко, И.М. Фита// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1987.– Т. 93. – С. 1775.
76. Varret F. Pulsed magnetic field study of Fe^{2+} in some fluosilicates/ F. Varret// J. Phys. Chem. Solids. – 1976.– Vol. 37. – P. 257.
77. Bos W. G. Field-induced magnetic long range order in the singlet-ground-state system $Ni(C_5H_5NO)_6(NO_3)_2$ / W.G. Bos, T.O. Klassen, N.J. Poulis, R.L. Carlin// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1980. –Vol. 15. – P. 464.

78. Carlin R.L. Field-dependent magnetic phenomena / R.L. Carlin, V. Van Duynveldt // J. Acc. Chem. Res. – 1980. – Vol. 13. – P. 231.
79. Morija T. Theory of magnetism of NiF_2 / T. Morija // Phys. Rev. – 1960. – Vol. 117. – P.635.
80. Потапков Н.А. Функции Грина и термодинамические величины гейзенберговской модели с одноионной анизотропией/ Н.А. Потапков// Теоретическая и математическая физика. –1971. – Т. 8. – С. 381.
81. Носкова Л.М. О влиянии одноионной анизотропии на энергетический спектр и намагниченность гейзенберговского ферромагнетика/ Л.М. Носкова// Физика металлов и металловедение. – 1972. – Т. 33. – С. 698.
82. Носкова Л.М. О влиянии одноионной анизотропии на энергетический спектр и намагниченность гейзенберговского ферромагнетика/ Л.М. Носкова// Физика твердого тела. – 1976. – Т. 18. – С. 1669.
83. Кащенко М.П. Спиновые волны в гейзенберговском ферромагнетике с одноионной анизотропией/ М.П. Кащенко, И.Ф. Балахонов, Л.В. Курбатов// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1973.– Т. 64. – С. 391.
84. Китаев В.Н. Magnetic-field-induced interaction of collective excitations in a weak ferromagnet with single-ion anisotropy/ В.Н. Китаев, М.П. Кащенко, Л.В. Курбатов// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1974. – Т.65. – С. 2334.
85. Гайдидей Ю.Б. К теории анизотропных ферромагнетиков/ Ю.Б. Гайдидей, В.М. Локтев // Физика низких температур. – 1977. – Т. 13. – С. 507.
86. Локтев В.М. Квантовая теория одноосных антиферромагнетиков в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Физика твердого тела. – 1978. – Т. 20. – С. 3086.
87. Локтев В.М. К теории коллективных возбуждений в слабом ферромагнетике в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Физика твердого тела. – 1979. – Т. 21. – С. 3559.

88. Локтев В.М. Квантовая теория одноосного ферромагнетика в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Украинский физический журнал. – 1978. – Т. 23. – С. 1708.

89. Переверзев Ю.В. О фазовых диаграммах легкоплоскостного ферромагнетика в продольном магнитном поле/ Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко// Физика твердого тела. – 1984. – Т. 26. – С. 1249.

90. Переверзев Ю.В. Спектр магнонов и фазовые переходы в легкоплоскостных ферромагнетиках/ Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко// Физика низких температур. – 1986. – Т. 9. – С. 1185.

91. Онуфриева Ф.П. Квантовая теория ферромагнетиков с одноионной анизотропией в магнитном поле произвольного направления/ Ф.П. Онуфриева// Физика твердого тела. – 1981. – Т. 23. – С. 2664.

92. Онуфриева Ф. П. Спектр коллективных возбуждений ферромагнетика с одноионной анизотропией в магнитном поле/ Ф.П. Онуфриева// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1984. – Т. 86. – С. 1691.

93. Онуфриева Ф.П. Динамическая теория немагнитной фазы синглетных магнетиков/ Ф.П. Онуфриева// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1988. – Т. 94. – С. 232.

94. Вальков В.В. Влияние сильного кристаллического поля на спектральные свойства магнетиков с биквадратичным обменом/ В.В. Вальков, Г.Н. Мацулева, С.Г. Овчинников // Физика твердого тела. – 1989. – Т. 31. – С. 60.

95. Вальков В.В. Фазовые переходы в анизотропных негейзенберговских магнетиках с тензорными параметрами порядка/ В.В. Вальков, Б.В. Федосеев// Физика твердого тела. – 1990. – Т. 32. – С. 3522.

96. Мицай Ю.Н. Спектры связанных магнитоупругих волн двуосного сильно анизотропного ферромагнетика с учетом биквадратичного взаимодействия/ Ю.Н. Мицай, Ю.А. Фридман, О.В. Кожемяко, О.А. Космачёв// Физика низких температур. – 1999. – Т. 25. – С. 690.

97. Blume M. Ising model for the λ transition and phase separation in $\text{He}^3\text{-He}^4$ mixtures/ M. Blume, V.J. Emery, and R.B. Griffiths// *Phys. Rev. A.* – 1971. – Vol. 10. – P. 1071.

98. Fridman Yu.A. Phase states of $S=1$ magnetic with anisotropic exchange interactions/ Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, Ph.N. Klevets// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2008.– Vol. 320. - P. 435.

99. Фридман Ю.А. Фазовые переходы в ферромагнетике с анизотропным биквадратичным обменным взаимодействием/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Ф.Н. Клевец // *Физика низких температур.*– 2006.– Т. 32. – С. 289.

100. Шаповалов И.П. Квадрупольные фазы и фазовые переходы в одноосных магнетиках с тензорными взаимодействиями/ И.П. Шаповалов// *Физика низких температур.*– 2013.– Т. 39. – С. 663.

101. Sayko P.A. Axial quadrupole phase of a uniaxial spin-1 magnet/ P.A. Sayko and I.P. Shapovalov// // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2015.– Vol. 392. - P. 134.

102. Космачев О.А. Влияние межионной анизотропии на фазовое состояние и спектры негейзенберговского магнетика $S=1$ / О.А. Космачев, А.В. Кривцова, Ю.А. Фридман// *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.*– 2016.– Т. 149. – С. 367.

103. Гореликов Г.А. Динамические и статические свойства негейзенберговского магнетика со сложной межионной анизотропией/ Г.А. Гореликов, О.А. Космачев, А.В. Кривцова, Ю.А. Фридман// *Физика твердого тела.*– 2017.– Т. 59.– С. 491.

104. Космачев О.А. Двухподрешеточный негейзенберговский магнетик $S=1$ со сложной межионной анизотропией/ О.А. Космачев, А.В. Кривцова, Ю.А. Фридман// *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.*– 2018.– Т. 154. – С. 382.

105. Kim E. Probable observation of a supersolid helium phase/ E. Kim, M.H.W. Chan// *Nature.* 2004.– Vol. 427. – P. 225.

106. Kim D.Y. Absence of supersolidity in solid helium in porous vycor glass/ D.Y. Kim, M.H.W. Chan// *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109. – P. 155301.
107. Matsuda T. Off-diagonal long-range order in solids/ T. Matsuda, T. Tsuneto// *Suppl. Prog. Theor. Phys.*– 1970. – Vol. 46. – P. 411.
108. Vengalattore M. Periodic spin textures in a degenerate $F=1$ ^{87}Rb spinor Bose gas/ M. Vengalattore, J. Guzman, S.R. Leslie, F. Serwane, and D.M. Stamper-Kurn// *Phys. Rev. A.*– 2010.– Vol. 81. – P. 053612.
109. Murakami Y. Supersolid states in a spin system: phase diagram and collective excitations/ Y. Murakami, R. Oka, H. Aoki// // *Phys. Rev. B.*– 2013.– Vol. 88. – P. 224404.
110. Ye J. Quantum phases, supersolids and quantum phase transitions of interacting bosons in frustrated lattices/ J. Ye, Y. Chen// *Nuclear Physics B.*– 2013.– Vol. 869. – P. 242.
111. Rossini D. Spin-supersolid phase in Heisenberg chains: a characterization via matrix product states with periodic boundary conditions/ D. Rossini, V. Giovannetti, R. Fazio// *Phys. Rev. B.*– 2011.– Vol. 83. – P. 140411.
112. Giamarchi T. Bose-Einstein condensation in magnetic insulators/ T. Giamarchi, C Rugg, O. Tchernyshyov// *Nature Physics.*– 2008.– Vol. 4. – P. 198.
113. Kwai-Kong Ng. Supersolid phase in spin dimmer XYZ systems under a magnetic field/ Kwai-Kong Ng, T.K. Lee// *Physical Review Letters.*– 2006.– Vol. 97. – P. 127204.
114. Fridman Yu.A. «Supersolid» phase in spin-1 easy-plane antiferromagnetic/ Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, P.N. Klevets// *Eur. Phys. Journal.*– 2011.– Vol. 81– P. 185.
115. Sengupta P. Field-induced supersolid phase in spin-one Heisenberg models/ P. Sengupta, C.D. Batista// *Physical Review Letters.*– 2007.– Vol. 98.– P. 227201.
116. Laflorencie N. Quantum and thermal transitions out of the supersolid phase of a 2D quantum antiferromagnet/ N. Laflorencie, F. Mila// *Physical Review Letters.*– 2007.– Vol. 99.– P. 027202.

117. Picon J.-D. Mechanisms for spin supersolidity in $S=1/2$ spin-dimer antiferromagnets/ J.-D. Picon, A.F. Albuquerque, K.P. Schmidt, N. Laflorencie, M. Troyer and F. Mila// *Physical Review B.*– 2008.– Vol. 78.– P. 184418.

118. Chen P. Field-induced spin supersolidity in frustrated $S=1/2$ spin-dimer models/ P. Chen, C.-Y. Lai, M.-F. Yang// *Physical Review B.*– 2010.– Vol. 81.– P. 020409.

119. Albuquerque A.F. Phase separation versus supersolid behavior in frustrated antiferromagnets/ A.F. Albuquerque, N. Laflorencie, J.-D. Picon and F. Mila// *Physical Review B.*– 2011.– Vol. 83.– P. 174421.

120. Renard J.P. Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional $S=1$ Heisenberg antiferromagnets/ J.P. Renard, M. Verdaguer, L.P. Regnault et al.// *Journal of Applied Physics.*– 1988.– Vol. 63.– P. 3538.

121. Orendac M. Thermodynamic and magnetic properties of the $S=1$ Heisenberg chain $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{Ni}(\text{CN})_4$: experiments and theory/ M. Orendac, A. Orendacova, J. Cernak et al.// *Physical Review B.*– 1995.– Vol. 52.– P. 3435.

122. Tanaka Y. Field-induced two-step phase transitions in the singlet ground state triangular antiferromagnet CsFeBr_3 / Y. Tanaka, H. Tanaka, T. Ono, A. Oosawa, K. Morishita, K. Iio, T. Kato, H.A. Katori, M.I. Bartashevich, T. Goto// *J. Phys. Soc. Jpn.*– 2001.– Vol. 70.– P. 3068.

123. Harrison A. A dynamical correlated effective-field treatment of the magnetic excitations in the singlet ground state antiferromagnet RbFeBr_3 / A. Harrison, D. Visser// *Journal of Physics: Condensed Matter.*– 1992.– Vol. 4.– P. 6977.

124. Dorner B. / B. Dorner, D. Visser, U. Steigenberger et al.// *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter.*– 1988.– Vol. 72.– P. 487.

125. Balents L. Spin liquids in frustrated magnets/ L. Balents// *Nature.*– 2010.– Vol. 464.– P. 199.

126. Romhanyi J. Supersolid phase and magnetization plateaus observed in the anisotropic spin- $3/2$ Heisenberg model on bipartite lattices/ J. Romhanyi, F. Pollmann, K. Penc// *Physical Review B.*– 2011.– Vol. 84.– P. 184427.

127. Peters D. Spin-one Heisenberg antiferromagnetic chain with exchange and single-ion anisotropies/ D. Peters, I.P. McCulloch, W. Selke// *Physical Review B.*– 2009.– Vol. 79.– P. 132406.

128. Seabra L. Competition between supersolid phases and magnetization plateaus in the frustrated easy-axis antiferromagnet on a triangular lattice/ L. Seabra, N. Shannon// *Physical Review B.*– 2011.– Vol. 83.– P. 134412.

129. Eto Y. Observation of dipole-induced spin texture in an ^{87}Rb Bose-Einstein condensate/ Y. Eto, H. Saito and T. Hirano// *Physical Review Letters.*– 2014.– Vol. 112.– P. 185301.

130. Klevets Ph.N. Supersolid magnetic phase realization in strongly anisotropic easy-plane antiferromagnet with Ising-like exchange interaction in the transverse magnetic field/ Ph.N. Klevets, O.A. Kosmachev, Yu.A. Fridman// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2013.– Vol. 348. - P. 68.

131. Klevets Ph.N. Phase transitions in $S=1$ antiferromagnet with Ising-like exchange interaction and strong easy-plane single-ion anisotropy/ Ph.N. Klevets, O.A. Kosmachev, Yu.A. Fridman// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* – 2013.– Vol. 330. - P. 91.

132. Барьяхтар В.Г. Phase diagram of a ferromagnetic plate in an external magnetic field/ В.Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов// *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.*– 1977.– Т. 72. – С. 1504.

133. Барьяхтар В.Г. Динамика доменных границ в слабых ферромагнетиках/ В.Г. Барьяхтар, Б.А. Иванов, М.В. Четкин// *Успехи физических наук.*– 1985.– Т. 146. – С. 417.

134. Erickson R.P. Magnetic instabilities in ultrathin ferromagnets/ R.P. Erickson, D.L. Mills// *Physical Review B.*– 1992.– Vol. 46.– P. 861.

135. Fridman Yu.A. Influence of the dipole-dipole and the magnetoelastic interactions on the phase states of 2D non-Heisenberg ferromagnetic with complex exchange interactions/ Yu.A. Fridman, D.A. Matunin, Ph.N. Klevets, O.A. Kosmachev// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*– 2009.– Vol. 321. - P. 3782.

136. Antos R. Magnetic vortex dynamics/ R. Antos, Y. Otani, J. Shibata// J. Phys. Soc. Jpn.– 2008.– Vol. 77. - P. 031004.

137. Ivanov B.A. Normal modes and solution resonance for vortices in 2D classical antiferromagnets / B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk, and G.M. Wysin// Physical Review Letters.– 1996.– Vol. 76.– P.511.

138. Galkina E.G. Magnetic vortex as a ground state for micron-scale antiferromagnetic samples/ E.G. Galkina, A.Yu. Galkin, B.A. Ivanov, F. Nori// Physical Review B.– 2010.– Vol. 81.– P.184413.

139. Bigot J.-Y. Coherent ultrafast magnetism induced by femtosecond laser pulses/ J.-Y. Bigot, M. Vomir, E. Beaurepaire// Nature Physics.– 2009.– Vol. 5.– P. 515.

140. Kirilyuk A. Ultrafast optical manipulation of magnetic order/A. Kirilyuk, A.V. Kimel, Th. Rasing// Rev. Mod. Phys.– 2010.– Vol. 82.– P. 2731.

141. Huang P.-C. Polarization control of isolated high-harmonic pulses/ P.-C. Huang, C. Hernandez-Garcia, M.-C. Chen// Nature Photonics.– 2018.– Vol. 12.– P. 349.

142. Radu I. Transient ferromagnetic-like state mediating ultrafast reversal of antiferromagnetically coupled spins/ I. Radu, K. Vahaplar, C. Stamm et al.// Nature.– 2011.– Vol. 472.– P. 205.

143. Ostler T.A. Ultrafast heating as a sufficient stimulus for magnetization reversal in a ferrimagnet/ T.A. Ostler, J. Barker, R.F.L. Evans et al.// Nat. Commun.– 2012.– Vol. 3.– P. 666.

144. Mentink J.H. Ultrafast spin dynamics in multisublattice magnets/ J.H. Mentink, J. Hellsvik, D.V. Afanasiev et al.// Physical Review Letters.– 2012.– Vol. 108.– P. 057202.

145. Барьяхтар В.Г. Обменная релаксация как источник сверхбыстрой переориентации спинов в ферримагнетике с двумя подрешетками/ В.Г. Барьяхтар, В.И. Бутрим, Б.А. Иванов// Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.– 2013.– Т. 98. – С. 327.

146. López-Flores V. Role of critical spin fluctuations in ultrafast demagnetization of transition-metal rare-earth alloys/ V. López-Flores, N. Bergard, V. Halté et al.// *Physical Review B*.– 2013.– Vol. 87.– P. 214412.

147. Schellekens A.J. Microscopic model for ultrafast magnetization dynamics of multisublattice magnets/ A.J. Schellekens and B. Koopmans// *Physical Review B*.– 2013.– Vol. 87.– P. 020407(R).

148. Wienholdt S. Orbital-resolved spin model for thermal magnetization switching in rare-earth-based ferrimagnets/ S. Wienholdt, D. Hinzke, K. Carva et al.// *Physical Review B*.– 2013.– Vol. 88.– P. 020406(R).

149. Satoh T. Spin oscillations in antiferromagnetic NiO triggered by circularly polarized light/ T. Satoh, S.-J. Cho, R. Iida et al.// *Physical Review Letters*.– 2010.– Vol. 105.– P. 077402.

150. Galkina E.G. Longitudinal magnetization reversal in ferromagnets with Heisenberg exchange and strong single-ion anisotropy/ E.G. Galkina, V.I. Butrim, Yu.A. Fridman et al.// *Physical Review B*.– 2013.– Vol. 88.– P. 144420.

151. Li T. Femtosecond switching of magnetism via strongly correlated spin-charge quantum excitations/ T. Li, A. Patz, L. Mouchliadis, J. Yan et al.// *Nature*.– 2013.– Vol. 496.– P. 69.

152. Yamani Z. Magnetic excitations of spin and orbital moments in cobalt oxide/ Z.Yamani, W. J. L. Buyers, R.A. Cowley and D. Prabhakaran// *Canadian Journal of Physics*.– 2010.– Vol. 88.– P. 729.

153. Kant Ch. Optical spectroscopy in CoO: phononic, electric and magnetic excitation spectrum within the charge-transfer gap/ Ch. Kant, T. Rudolf, F. Schrettle et al.// *Physical Review B*.– 2008.– Vol. 78.– P. 245103.

154. Вальков В.В. Операторы Хаббарда и спин-волновая теория гейзенберговских магнетиков с произвольным спином/ В.В. Вальков, С.Г. Овчинников// *Теоретическая и математическая физика*.– 1982.– Vol. 50.– P. 466.

155. Mitsay Yu.N. Influence of a one-ion anisotropy on stabilization of the long-range magnetic order in two-dimensional ferromagnet/ Yu.N. Mitsay, Yu.A. Fridman, D.V. Spirin, M.S. Kochanski// *Acta Phys. Pol.*– 2000.– Vol. 97.– P. 355.

156. Fridman Yu.A. The influence of external magnetic field on phase states and spectra of coupled magnetoelastic waves in a biaxial non-Heisenberg ferromagnet/ Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev// Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 2001.– Vol. 236.– P. 272.

157. Фридман Ю.А. Квантовые эффекты в анизотропном ферромагнетике/ Ю.А.Фридман, О.А.Космачев// Физика Твёрдого Тела.– 2009.– Т. 51. – С. 1104.

158. Бутрим В.И. Температурная зависимость статистических и динамических свойств анизотропного ферромагнетика/ В.И. Бутрим, Б.А. Иванов, О.А. Космачев, Ю.А. Фридман// Физика Твёрдого Тела.– 2012.– Т. 54. – С. 1286.

159. Бутрим В.И. Температурная зависимость спектров элементарных возбуждений анизотропного $S=1$ ферромагнетика/ В.И. Бутрим, О. А. Космачев, Ю.А. Фридман// Физика низких температур.– 2014.– Т. 40.– С. 1243.

160. Arikawa M. Spin nematic order in $S=1$ triangular antiferromagnets/ M. Arikawa, H. Tsunetsugu// Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 2007.– Vol. 310.– P. 1308.

161. Grover T. Quantum spin nematics, dimerization and deconfined criticality in quasi-1D spin-one magnets/ T. Grover and T. Senthil// Physical Review Letters.– 2007.– Vol. 98.– P. 247202.

162. Oitmaa J. $S=1$ bilinear biquadratic spin model on the square lattice: A series expansion study/ J. Oitmaa and C.J. Hamer// Physical Review B.– 2013.– Vol. 87.– P. 224431.

163. Wu C. Competing orders in one-dimensional spin-3/2 fermionic systems/ Congjun Wu// Physical Review Letters.– 2005.– Vol. 95.– P. 266404.

164. Koashi M. Exact eigenstates and magnetic response of spin-1 and spin-2 Bose-Einstein condensates/ M. Koashi, M. Ueda// Physical Review Letters.– 2000.– Vol. 84.– P. 1066.

165. Santos L. Spin-3 chromium Bose-Einstein condensates/ L. Santos, T Pfau// Physical Review Letters.– 2006.– Vol. 96.– P. 190404.

166. Schmaljohann H. Dynamics of $F=2$ spinor Bose-Einstein condensates/ H. Schmaljohann, M. Erhard et al.// *Physical Review Letters*.– 2004.– Vol. 92.– P. 040402.
167. Eto Y. Observation of dipole-induced spin texture in an ^{87}Rb Bose-Einstein condensates/ Y. Eto, H. Saito, T. Hirano// *Physical Review Letters*.– 2014.– Vol. 112.– P. 185301.
168. Tuirev K. Three-dimensional skyrmions in spin-2 Bose-Einstein condensates/ K.Tuirev, T. Ollikainen et al.// *New J. Phys.*– 2018.– Vol. 20.– P. 055011.
169. Borgh M.O. Core structure and non-Abelian reconnection of defects in a biaxial nematic spin-2 Bose-Einstein condensate/ Magnus O. Borgh and Janne Ruostekoski// // *Physical Review Letters*.– 2017.– Vol. 118.– P. 129901.
170. Zhao Q. Ground State of spin-2 dipolar rotating Bose-Einstein condensate/ Qiang Zhao// *International Journal of Modern Physics*.– 2019.– Vol. 33.– P. 1950087.
171. Stenger J. Spin domains in ground state spinor Bose-Einstein condensates/ J. Stenger, S. Inouye, D.M.Stamper-Kurn et al// *Nature*.– 1998.– Vol. 396.– P. 345.
172. Branco N.S. Blume-Emery-Griffiths model in a random crystal field/ N.S. Branco// *Physical Review B*.– 1999.– Vol. 60.– P. 1033.
173. Ellis R.S. Analysis of phase transitions in the mean-field Blume-Emery-Griffiths model/ R.S. Ellis, P.T. Otto and H. Touchette// *The annals of applied probability*.– 2005.– Vol. 15.– P. 2203.
174. Ertas M. Dynamic phase transitions of the Blume-Emery-Griffiths model under an oscillating external magnetic field by the path probability method/ M. Ertas, M. Keskin// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*.– 2015.– Vol. 377.– P. 386.
175. Thomaz M.T. Comparison of the ferromagnetic Blume-Emery-Griffiths model and AF spin-1 longitudinal Ising model at low temperature/ M.T. Thomaz, E.V. Correa Silva// *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*.– 2016.– Vol. 401.– P. 633.

176. Berkowitz A.E. Exchange anisotropy– a review/ A.E. Berkowitz, Kentaro Takano// Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 1999.– Vol. 200.– P. 552.

177. Rodriguez R.L. Exchange anisotropy determined by magnetic field dependence of ac susceptibility/ R.L. Rodriguez, L.H. Vilela Leao et al.// Journal of Applied Physics.– 2003.– Vol. 94.– P. 4544.

178. Воротынов А.М. Магнитная анизотропия антиферромагнетика $(\text{CH}_3)_4\text{NMnCl}_3$ / А.М. Воротынов, С.Г. Овчинников, В.В. Руденко, А.Н. Судаков// Физика Твёрдого Тела. – 2000. – Т. 42. – С. 1275.

179. Kiwi M. Exchange bias theory/ Miguel Kiwi//Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 2001.– Vol. 234.– P. 584.

180. Nogués, J. Exchange Bias. / J. Nogués, I. K. Schuller// Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 1999.– Vol. 192.– P. 203.

181. Zhou S.M. Perpendicular Exchange Bias and Magnetic Anisotropy in CoO/Permalloy Multilayers/ S.M. Zhou, L. Sun, P.C. Searson, C.L. Chien// Physical Review B.– 2004.– Vol. 69.– P. 024408.

182. Stamps R.L. Mechanisms for Exchange Bias/ R.L. Stamps // Journal Physics D Applied Physics.– 2000.– Vol. 33.– P. R247.

183. Miyahara S. Theory of magnetoelectric resonance in two-dimensional $S=3/2$ antiferromagnet $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ via spin-depend metal-ligand hybridization mechanism/ S. Miyahara, N. Furukawa// Journal of the physical society of Japan.– 2011.– Vol. 80.– P. 073708.

184. Иванов Б.А. Мезоскопические антиферромагнетики: статика, динамика, квантовое туннелирование/ Б.А. Иванов// Физика низких температур.– 2005.– Т. 31.– С. 841.

185. Jaksch D. Fast quantum gates for neutral atoms/ D. Jaksch, J.I. Cirac, P. Zoller, S.L. Rolston, R. Cote, M.D. Lukin// Physical Review Letters.– 2000.– Vol. 85.– P. 2208.

186. DeMille D. Quantum computation with trapped polar molecules/ D. DeMille// Physical Review Letters.– 2002.– Vol. 88.– P. 067901.

187. Micheli A. A toolbox for lattice spin models with polar molecules/ A. Micheli, G.K. Brennen, P. Zoller// *Nature Physics*.– 2006.– Vol. 2.– P. 341.
188. Фридман Ю.А. Фазовые переходы в ферромагнетике с биквадратичным обменным взаимодействием и гексагональной одноионной анизотропией/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Б.Л. Эйнгорн// *Физика низких температур*.– 2005.– Т. 31. – С. 687.
189. Fridman Yu.A. Formation of quadrupolar phase in non-heisenberg ferromagnets with half-integer spin/ Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, D.V. Spirin// *Physica B*. – 2005.– Vol. 357.– P. 478.
190. Галкина Е.Г. Двумерные солитоны в нематической фазе магнетиков с изотропным обменным взаимодействием/ Е.Г. Галкина, Б.А. Иванов, О.А. Космачев, Ю.А. Фридман// *Физика низких температур*.– 2015.– Т. 41. – С. 490.
191. Мелешко А.Г. Сверхтвердая магнитная фаза в двумерном изингоподобном антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией/ А.Г. Мелешко, Ф.Н. Клевец, Г.А. Гореликов, О.А. Космачев, Ю.А. Фридман// *Физика Твёрдого Тела*. – 2017.– Т. 59. – С. 1716.
192. Phase transitions in 2d XY-model with biquadratic exchange interaction/ Yu.A.Fridman, O.A. Kosmachev, Ph.N. Klevets, O.V. Kozhemyako// *Statistical Physics 2005: Modern Problem and New Applications. Annual Conference in Ukraine, Lviv, Ukraine, 2005*, P.93
193. Consideration of a heisenberg ferromagnetic above the curie temperature as a spin liquid/ E.V.Kuz'min, Yu.A.Fridman, O.A.Kosmachev, Ph.N. Klevets// *International Conference on the Functional Materials. Partenit, Crimea, Ukraine, 2005*, P.26
194. Фазовые диаграммы изингоподобного негейзенберговского ферромагнетика со спином 1/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Ф.Н. Клевец// XX международная школа-семинар «Новые магнитные материалы микроэлектроники» (НМММ-20), Москва, Россия, 2006.
195. Модель Изинга с биквадратичным обменным взаимодействием ($S=1$)/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачев, Ф.Н. Клевец// "Statistical Physics 2006.

Condensed Matter Physics: Theory and Applications" (CMPT 2006), Kharkov, Ukraine, 2006

196. Phase diagram of the non-Heisenberg magnet with spin $3/2$ / Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, B. A. Ivanov // International Conference on the Functional Materials. Partenit, Crimea, Ukraine, 2007.

197. The quantum effects in anisotropic ferrimagnets/ Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev // International Conference on the Functional Materials. Partenit, Crimea, Ukraine, 2007.

198. 2D non-Heisenberg ferromagnetic with complex exchange interactions/ Yu. A. Fridman, D. A. Matunin, Ph. N. Klevets and O. A. Kosmachev // Statistical Physics: Modern Trends and Applications 2009, Lviv, Ukraine, 2009.

199. Phase diagram of spin nematic with $S=2$ / Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, B. A. Ivanov // International Conference «Functional Materials» (ICFM 2009), Partenit, Crimea, Ukraine, 2009.

200. Modulated magnetic structure realization in non-heisenberg magnets/ Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, Ph. N. Klevets, D. A. Matunin, G. A. Gorelikov // International Conference «Functional Materials» (ICFM 2009), Partenit, Crimea, Ukraine, 2009.

201. Спиральная магнитная структура в сильно анизотропных гейзенберговских и негейзенберговских магнетиках/ Ю. А. Фридман, Д. А. Матюнин, Ф. Н. Клевец, О. А. Космачев, Г. А. Гореликов // Сборник трудов XXI Международной конференции НМММ, Москва, Россия, 2009.

202. Spin-2 nematic/ Fridman Yu. A., Kosmachev O. A., Ivanov B. A. // International Conference «Functional Materials» (ICFM 2011), Partenit, Crimea, Ukraine, 2011.

203. Phase diagram of spin-1 easy-plane antiferromagnetic/ Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, Ph. N. Klevets // International Conference «Functional Materials» (ICFM 2011), Partenit, Crimea, Ukraine, 2011.

204. Influence of the external magnetic field on the phase of spin-1 antiferromagnet with Ising-like exchange interaction/ Ph. N. Klevets, O. A.

Kosmachev, Yu.A. Fridman, C.N. Alexeyev // International Conference «Functional Materials» (ICFM 2013), Gaspra, Crimea, Ukraine, 2013.

205. Spin nematic states for isotropic magnet with spin $S=2$ / O.A. Kosmachev, Yu.A. Fridman, B.A. Ivanov// «Spin Waves 2015» International Symposium, Ioffe Physical- Technical Institute Saint Petersburg, Russia, June 7-13, 2015.

206. Influence of anisotropic exchange interaction on the phase states of non-Heisenberg spin-1magnetic/ O.A. Kosmachev, A.V. Krivtsova, Yu.A. Fridman// «Spin Waves 2015» International Symposium, Ioffe Physical- Technical Institute Saint Petersburg, Russia, June 7-13, 2015.

207. Two-lattice exchange-anisotropic nematics with $S=1$ / O.A. Kosmachev, A.V. Krivtsova, Yu.A. Fridman// Moscow International Symposium on Magnetism, Moscow, Russia, 2018.

208. Spin nematic with $S=2$ / O.A. Kosmachev, Yu.A. Fridman, B.A. Ivanov// Moscow International Symposium on Magnetism, Moscow, Russia, 2018.

209. Спиновые нематика с $S = 1, 3/2$ и 2 / Ю.А.Фридман, О.А Космачев, Б.А. Иванов// Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВА-XXXVII», 2018.

210. Nikuni T. Bose-Einstein Condensation of Dilute Magnons in TiCuCl_3 / T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa *et al.*// Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 84. – P. 5868.

211. Misguich G. Bose-Einstein Condensation of Magnons in TiCuCl_3 : Phase Diagram and Specific Heat from a Self-consistent Hartree-Fock Calculation with a Realistic Dispersion Relation/ Grégoire Misguich and Masaki Oshikawaand// Journal of the Physical Society of Japan. – 2004. – Vol. 73. – P. 3429.

212. Schmidt K.P. Supersolid Phase Induced by Correlated Hopping in Spin-1/2 Frustrated Quantum Magnets// K.P. Schmidt, J. Dorier, A.M. Läuchli *et al.*// Physical Review Letters. – 2008. – Vol. 100. – P. 090401.

213. Yamamoto D. Magnon supersolid and anomalous hysteresis in spin dimers on a triangular lattice / Daisuke Yamamoto and Ippei Danshita // Physical Review B. – 2013. – Vol. 88. – 014419.

214. Steiner M. Inelastic neutron scattering studies on 1D near-Heisenberg antiferromagnets: A test of the Haldane conjecture / M. Steiner, K. Kakurai, J.K. Kjems *et al.* // *Journal of Applied Physics*. – 1987. – Vol. 61. – P. 3953-3955.

215. Renard J.P. Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional $S=1$ Heisenberg antiferromagnets (invited)/ J.P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault *et al.*// *Journal of Applied Physics*. – 1988. – Vol. 63. – P. 3538-3542.

216. Orendáč M. Thermodynamic and magnetic properties of the $S=1$ Heisenberg chain $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{Ni}(\text{CN})_4$: Experiments and theory/ M. Orendáč, A. Orendáčová, J. Černák *et al.* // *Physical Review B*. – 1995. – Vol. 52. – P. 3435.

217. Ueltschi D. Random loop representations for quantum spin systems/ D. Ueltschi// *Jornal mathematition physics*.– 2013.– Vol. 54.– P. 083301.

218. Ueltschi D. Ferromagnetism, antiferromagnetism, and the curious nematic phase of $S=1$ quantum spin systems/ D. Ueltschi// *Physical Review E*.– 2015.– Vol. 91.– P. 042132.

219. Ivanova I.M. Quantum phase transition: Van Vleck antiferromagnet in a magnetic field / I.M. Ivanova, V.M. Kalita, V.O. Pashkov *et al.*// *Condensed Matter Physics*. – 2008. – Vol. 11. – P. 509.

220. Kalita V.M. Magnetization and magnetostriction of Van Vleck antiferromagnets with magnetic anisotropy of «easy-plane» type / V.M. Kalita, I. Ivanova, V.M. Loktev // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 78. – P. 104415.

221. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Р.О. Зайцев // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 1975. – Т. 68 – С. 207.

222. Мицай Ю.Н. Применение операторов Хаббарда в теории магнитоупругих волн / Ю.Н. Мицай, Ю.А. Фридман // *Теоретическая и Математическая Физика*. – 1989. – Т. 81. – С. 263.

223. Вальков В.В. Квантовая спин-волновая теория ферромагнетиков с произвольным видом одноионной анизотропии / В.В. Вальков, Т.А. Валькова, С.Г. Овчинников // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 1985. – Т. 88. – С. 550.

224. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. В 10 томах [Т. VIII. Электродинамика сплошных сред.] / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Изд-во «Наука», 1982. – 620 с.

225. Белов К.П. Переходы спиновой переориентации в редкоземельных магнетиках / К.П. Белов, А.К. Звездин, А.М. Кадомцева и др.// Успехи Физических Наук. – 1976. – Т. 119. – С. 447-486.

226. Ахиезер А.И. Спиновые волны / Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. – М.: Наука, 1967. – 368 с.

227. Барьяхтар В.Г. Функции Грина в теории магнетизма / Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. – К.: Наукова думка, 1984. – 336 с.

228. Вакс В.Г. Термодинамика идеального ферромагнетика / В.Г. Вакс, А.И. Ларкин, С.А. Пикин // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1967. – Т. 53. – С. 281.

229. Holtschneider M. Biconical structures in two-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnets/ M. Holtschneider and W. Selke // Physical Review B. – 2007. – Vol. 76. – P. 220405(R).

230. Wang H.-T. Long-range order in gapped magnetic systems induced by Bose-Einstein condensation / Han-Ting Wang and Yupeng Wang // Physical Review B. – 2005. – Vol. 71. – P. 104429.

231. Калита В.М. Особенности намагничивания антиферромагнетика с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» и со спинами ионов $S=1/2$ / В.И. Калита, И.М. Иванова, В.М. Локтев// Физика Низких Температур. – 2002. – Т. 28. – С. 667.

232. Вальков В.В. Унитарные преобразования группы $U(N)$ и диагонализация многоуровневых гамильтонианов/ В.В. Вальков// Теоретическая и Математическая Физика. – 1988. – Т. 76. – С. 143.

233. Вальков В.В. Применение индефинитной метрики для бозонизации $SU(3)$ – гамильтонианов и квантовая теория спиновых нематиков / В.В. Вальков, Т.А. Валькова – Красноярск, 1990. – 40 с. – (Препринт / ИФ СО АН СССР, № 667Ф).

234. Малеев С.В. Дипольный силы в двумерных и слоистых ферромагнетиках/ С.В. Малеев// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1976. – Т. 70. – С. 2344.

235. Fridman Yu.A. Phase Transition in Temperature “Quadrupolar Phase–Disordered Phase” in a Two-Dimensional Non-Heisenberg Ferromagnet/ Yu.A. Fridman and D.V. Spirin// Phys. Stat. Sol. (b) – 2002. – Vol. 231.– P. 165.

236. Fridman Yu.A. Stabilization of the long-range magnetic ordering by dipolar and magnetoelastic interactions I two-dimensional ferromagnets/ Yu.A. Fridman, D.V. Spirin, C.N. Alexeyev, and D.A. Matiunin// Eur. Phys. Journal. B. – 2002. – Vol. 26. – P. 185.

237. Fridman Yu.A. Reorientation of magnetization with temperature in 2D ferromagnets/ Yu.A.Fridman, D.V. Spirin, Ph.N. Klevets// Journal of Magnetism and Magnetic Materials.– 2002. – Vol. 253. – P. 105.

238. Фридман Ю.А. Влияние магнитоупругого взаимодействия на формирование пространственно неоднородной фазы в двумерных ферромагнетиках / Ю.А. Фридман, Д.В. Спири́н, Ф.Н. Клевец // Физика Низких Температур. – 2003. – Т. 29. – С. 418.

239. Гуревич А.Г. Магнитный резонанс в ферритах и антиферромагнетиках/ А.Г. Гуревич. – М.: Изд-во «Наука», 1973. – 591 с.

240. Иванов Б.А. О нелинейной динамике и релаксации сильноанизотропных ферромагнетиков/ Б.А. Иванов, А.Н. Кичижиев, Ю.Н. Мицай// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.– 1992.– Т. 102. – С. 618.

241. Андреев А.Ф. Симметрия и макроскопическая динамика магнетиков/ А.Ф. Андреев, В.И. Марченко// Успехи Физических Наук.– 1980.– Т. 130. – С. 39.

242. Ковалевский М.Ю. Симметрия и релаксационная динамика магнетиков со спином $S=1$ / М.Ю. Ковалевский, А.В. Глущенко// Физика низких температур. – 2014. – Т. 40. – С. 560.

243. Глущенко А.В. Спинорный параметр порядка и состояния равновесия бозе-систем со спином $S=1$ / А.В. Глущенко, М.Ю. Ковалевский// Физика низких температур. – 2017. – Т. 43. – С. 1324.

244. Zhou F. Spin correlation and discrete symmetry in spinor Bose-Einstein condensates/ F. Zhou// Physical Review Letters.– 2001.– Vol. 87.– P. 080401.

245. Demler E. Spinor bosonic atoms in optical lattices: symmetry breaking and fractionalization/ E. Demler and F. Zhou// Physical Review Letters.– 2002.– Vol. 88. – P. 080401.

246. Komineas S. Vortex rings/ E. Demler and F. Zhou// Physical Review Letters.– 2002.– Vol. 88. – P. 080401.

247. Mikushina N.A. Dipole and quadrupole skyrmions in $S=1$ (pseudo)spin systems/ N.A.Mikushina, A.S. Moskvin// Physics Letters A.– 2002.– Vol. 302. – P. 8.

248. Haldane F.D.M. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model/ F.D.M.Haldane // Physics Letters A.– 1983.– Vol. 93. – P. 464.

249. Вакс В.Г. Термодинамика идеального ферромагнетика/ В.Г. Вакс, А.И. Ларкин, С.А. Пикин// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.– 1967. – Т. 53. – С. 281.

250. Kolezhuk A.K. Magnetic phases of spin-3/2 fermions on a spatially anisotropic square lattice/ A.K. Kolezhuk and T. Vekua// Physical Review B.– 2011.– Vol. 83.– P. 014418.

251. Галкин А.Ю. Нелинейные колебания намагниченности для ферромагнитных частиц в вихревом состоянии и их упорядоченных массивов/ А.Ю. Галкин, Б.А. Иванов// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2009. – Т. 136. – С. 87.

252. Santini P. Multipolar interactions in f -electron systems: the paradigm of actinide dioxides/ P. Santini, S. Garretta, G. Amoretti et al// Reviews of Modern Physics.– 2009.– Vol. 81.– P. 807.

253. Mydosh J.A. Colloquim: Hidden order, superconductivity, and magnetism: the unsolved case of URu₂Si₂/ J.A. Mydosh and P.M. Oppeneer // *Reviews of Modern Physics*.– 2011.– Vol. 83.– P. 1301.

254. Gouva M.E. Vortices in the classical two-dimensional anisotropic Heisenberg model/ M.E. Gouva, G.M. Wysin, A.R. Bishop and F.G. Mertens// *Physical Review B*.– 1989.– Vol. 39.– P. 11840.

255. Wysin G.M. Instability of in-plane vortices in two-dimensional easy-plane ferromagnets/ G.M. Wysin// *Physical Review B*.– 1994.– Vol. 49.– P. 8780.

256. Volkel A.R. Dynamic correlation in the classical two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model easy-plane symmetry/ A.R. Volkel, G.M. Wysin, A.R. Bishop and F.G. Mertens// *Physical Review B*.– 1991.– Vol. 44.– P. 10066.

257. Karadamoglou J. Bulk and surface spin-flop transitions in an antiferromagnetic XYZ chain/ J. Karadamoglou and N. Papanicolaou// *Physical Review B*.– 1999.– Vol. 60.– P. 9477.

258. Белавин А.А. Метастабильные состояния двумерного изотропного ферромагнетика/ А.А. Белавин, А.М. Поляков// *Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 1975. – Т. 22. – С. 503.

259. Филин Д.В. Динамические топологические солитоны большого радиуса в одноосных ферромагнетиках/ Д.В. Филин, Е.Г. Галкина, Б.А. Иванов// *Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 2013. – Т. 97. – С. 291.

260. Косевич А.М. Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны/ А.М. Косевич, Б.А. Иванов, А.С. Ковалев.– Киев: Изд-во «Наукова думка», 1983.– 194 с.

261. Ivanov B.A. Two-dimensional solution dynamics in ferromagnets/ B.A. Ivanov and V.A. Stephanovich//*Physics Letters A*.– 1989.– Vol. 141. – P. 89.

262. Туров Е.А. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков/ Е.А. Туров, А.В. Колчанов, В.В. Меньшенин, И.Ф. Мирсаев, В.В. Николаев.– М.: Изд-во «Физматлит», 2001.– 232 с.

263. Иванов Б.А. Солитоны в низкоразмерных антиферромагнетиках/ Б.А. Иванов, Б.А. Колежук// Физика низких температур. – 1995. – Т. 21. – С. 355.

264. Ivanov B.A. Nonlinear dynamics and two-dimensional solitons for spin-1 ferromagnets with biquadratic exchange/ B.A. Ivanov, A.Yu. Galkin, R.S. Khymyn, and A.Yu. Merkulov// Physical Review B.– 2008.– Vol. 77.– P. 064402.

265. Kawaguchi Y. Spinor Bose-Einstein condensates/ Y.Kawaguchi, M. Ueda// Physics Report.– 2012.– Vol. 520.– P. 253.

266. Ho T.-L. Spinor Bose condensates in optical traps/ Tin-Lun Ho// Physics Review Letters.– 1998.– Vol. 81.– P. 742.

267. Ciobanu C.V. Phase diagrams of $F=2$ spinor Bose-Einstein condensates/ C.V. Ciobanu, S.-K. Yip, and Tin-Lun Ho// Physical Review A.– 2000.– Vol. 61.– P. 033607.

268. Ueda M. Theory of spin-2 Bose-Einstein condensates: spin correlations, magnetic response, and excitation spectra/ M. Ueda, M. Koashi// Physical Review A.– 2002.– Vol. 65.– P. 063602.

269. Абрагам В. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов/ В.Абрагам, Б. Блини.–М.: Изд-во «Мир», 1967.– 652 с.

270. Альтшулер С.А. Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп/ С.А. Альтшулер, Козырев Б.М.–М.: Изд-во «Наука», 1972.– 674 с.

271. Tsuneto T. Spin ordering in a system with large anisotropy energy in a magnetic field/ T. Tsuneto, T. Muraо// Physica.– 1971.– Vol. 51.– P.186.

272. Ishikawa C. Collective modes of spin excitations in a uniaxial ferromagnet/ C. Ishikawa, Y. Endo// Journal of Progress Theoretical Physics.– 1976.–Vol. 55.– P. 650.

273. Борисенко В.Г. Квантовые особенности фазовых диаграмм легкоплоскостных антиферромагнетиков в магнитном поле/ В.Г. Борисенко, Ю.В. Переверзев// Физика низких температур. – 1985. – Т. 11. – С. 730.

274. Потапков Н.А. Функции Грина и термодинамические величины гейзенберговской модели с одноионной анизотропией/ Н.А. Потапков// Теоретическая и математическая физика.– 1971.– Т. 8.– С.381.

275. Носкова Л.М. О влиянии одноионной анизотропии на энергетический спектр и намагниченность гейзенберговского ферромагнетика/ Носкова Л.М.// Физика Металлов и Металловедение.– 1972.– Т. 33. С. 698.

276. Носкова Л.М. О влиянии одноионной анизотропии на энергетический спектр и намагниченность гейзенберговского ферромагнетика/ Носкова Л.М.// Физика Твердого Тела.– 1976.– Т.18.– С. 1669.

277. Кащенко М. П., Балахонов И. Ф., Курбатов Л. В. Спиновые волны в гейзенберговском ферромагнетике с одноионной анизотропией// Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1973. – Т. 64. – С. 391.

278. Гайдидей Ю.Б. К теории анизотропных ферромагнетиков/ Ю.Б. Гайдидей, В.М. Локтев// Физика низких температур. – 1977. – Т. 3. – С. 507.

279. Локтев В.М. Квантовая теория одноосных антиферромагнетиков в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Физика Твердого Тела.– 1978.– Т.20.– С. 3086.

280. Локтев В.М. К теории коллективных возбуждений в слабом ферромагнетике в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Физика Твердого Тела.– 1979.– Т.21.– С. 3559.

281. Локтев В.М. Квантовая теория одноосного ферромагнетика в поперечном магнитном поле/ В.М. Локтев, В.С. Островский// Украинский Физический Журнал.– 1978.– Т.23.– С. 1708.

282. Переверзев Ю.В. О фазовых диаграммах легкоплоскостного ферромагнетика в продольном магнитном поле/ Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко// Физика Твердого Тела.– 1984.– Т.26.– С. 1249.

283. Переверзев Ю.В. Спектр магнонов и фазовые переходы в легкоплоскостных ферромагнетиках/ Ю.В. Переверзев, В.Г. Борисенко// Физика низких температур. – 1986. – Т. 9. – С. 1185.

284. Вальков В.В. Влияние кубической анизотропии на основное состояние и термодинамические свойства гейзенберговских магнетиков/ В.В. Вальков, Т.А. Валькова// Теоретическая и математическая физика.– 1984.– Т. 59.– С.453.

285. Фридман Ю.А. Фазовая диаграмма и спектры связанных магнитоупругих волн двуосного ферромагнетика с биквадратичным взаимодействием во внешнем магнитном поле/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачёв, Г.Э. Байрамалиева// Физика низких температур. – 2000. – Т. 26. – С. 1108.

286. Фридман Ю.А. Влияние большого биквадратичного взаимодействия на фазовые состояния негейзенберговского двуосного ферромагнетика/ Ю.А. Фридман, О.А. Космачёв// Физика низких температур. – 2001. – Т. 27. – С. 642.

287. Изюмов Ю.А. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем / Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрыбин.– М.: Изд-во «Наука», 1987.– 264 с.

288. Erickson R.P. Magnetic instabilities in ultrathin ferromagnets/ R.P. Erickson and D.L. Mills // Physical Review B. – 1992. – Vol. 46. – P. 861.

289. Туров Е.А. Мягкие магнитно-звуковые волны в кубическом ферромагнетике в окрестности ориентационного перехода/ Е.А. Туров, А.А. Луговой, В.Д. Бучельников и др.// Физика Металлов и Метелловедение. – 1988. – Т. 66. – С. 12.

290. Nagata H. Monte Carlo simulation of the three-dimensional XY model with bilinear-biquadratic exchange interaction/ H. Nagata, M. Žukovič, T. Idogaki // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2001. – Vol. 234. – P. 320.

291. Manojlovic M. Thermodynamic properties of the Ising and Heisenberg $S=1$ ferromagnet with biquadratic exchange and uniaxial anisotropy/ M. Manojlovic, M. Pantic, M. Skrinjar, D. Kapor, S. Stojanovic, M. Pavkov Mills // Physica Status Solidi (b). – 2006. – Vol. 243. – P. 530.

292. Мицай Ю.Н. Связанные магнитоупругие волны в магнетиках с биквадратичным обменом/ Ю.Н. Мицай, А.Н. Майорова, Ю.А. Фридман// Физика Твёрдого Тела. – 1992. – Т. 34. – С. 66.

293. Chen H.H. Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models/ H.H. Chen and Peter M. Levy// Physical Review B. – 1973. – Vol. 7. – P. 4267.

294. Mermin N.D. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models/ N.D. Mermin and H. Wagner // Physical Review Letters. – 1966. – Vol. 17. – P. 1133.

295. Калита В.М. В.М. Калита, И.М. Иванова, В.М. Локтев // Теоретическая и математическая физика. –2012. – Т. 173. –С. 333.

296. Barnett R. Order by disorder in spin-orbit coupled Bose-Einstein condensates/ R. Barnett, S. Powell, T. Grass, M. Lewenstein, S. Das Sarma// Physical Review A. – 2012. – Vol.85. – P. 023615.

297. Yildirim T. Ordering Due to Disorder in Frustrated Quantum Magnetic Systems/ T.Yildirim// Journal of Physics. – 1999. – Vol.23. – P. 47.

298. Иванов Б.А. Магнитоупругая стабилизация дальнего магнитного порядка в двумерных легкоплоскостных магнетиках/ Б.А. Иванов, Е.В. Тартаковская// Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1996. – Т. 63. – С. 792.

299. Fridman Yu.A. Reorientation phase transition in temperature in a two- and three-dimensional ferromagnet with the account of magnetoelastic coupling/ Yu.A. Fridman, D.V. Spirin, C.N. Alexeyev// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2001. – Vol. 234. – P. 174.