

На правах рукописи



КРИВЦОВА АНАСТАСИЯ ВЛАДИМИРОВНА

**ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ
ВОЗБУЖДЕНИЙ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ИЗОТРОПНЫХ И
ОБМЕННО-АНИЗОТРОПНЫХ МАГНЕТИКОВ**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Симферополь
2021

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Физико-технического института Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского»

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

Официальные оппоненты: Метлов Константин Леонидович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела теории электронных и кинетических свойств нелинейных систем ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»
Звездин Константин Анатольевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Теоретического отдела Института общей физики имени А.М. Прохоров РАН

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования и науки «Челябинский государственный университет»

Защита состоится «__» _____ 2021 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета 24.2.318.06 на базе Федерального автономного образовательного учреждения высшего образования «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского» по адресу: 295007, Республика Крым, г. Симферополь, ул. Ялтинская, 20, зал для защиты диссертаций (аудитория 301).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского»

по адресу: 295007, Республика Крым, г. Симферополь, проспект Академика Вернадского, 4, корпус А,

или на сайте <http://science.cfuv.ru/gosudarstvennaya-nauchnaya-attestaciya/dissertacionnye-sovety/dissertacionnye-raboty-sovety-d-900-006-12>

Телефон ученого секретаря +7 (978) 772-19-86

Автореферат разослан «__» _____ 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.2.318.06
к.ф.-м.н.



Б.П. Лапин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы.

Упорядочение в спиновых системах обычно ассоциируется со стандартным магнитным порядком, для которого средние значения спинов на узлах отличны от нуля и образуют различные магнитные структуры.

Одна из наиболее распространённых теоретических моделей, используемых для описания магнитоупорядоченных систем, является модель Гейзенберга. При этом, в зависимости от знака обменного интеграла материал может проявлять ферромагнитное или антиферромагнитное упорядочение.

Однако, модель Гейзенберга является точной только для систем с $S=1/2$. Для магнетиков с $S>1/2$ кроме билинейного спинового инварианта существуют высшие по спинам обменные слагаемые $(\vec{S}_m \vec{S}_{m'})^{2S}$, где S – величина спина магнитного иона. Учет такого типа слагаемых в обменном гамильтониане системы может приводить, при определенных условиях, к реализации не только фаз с магнитным параметром порядка, но также и фаз с $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, в которых спонтанное нарушение вращательной симметрии обусловлено квадрупольными средними. Такие магнитоупорядоченные системы принято называть негейзенберговскими. Пример такого состояния – это состояния спинового нематика, для которого средние значения спинов на узлах $\langle \mathbf{S}_n \rangle$ равны нулю, но спонтанное нарушение симметрии связано с анизотропией некоторых высших корреляторов проекций спина.

Большинство авторов рассматривают нематические состояния изотропных негейзенберговских магнетиков, хотя влияние сильной спин-орбитальной связи приводит как к анизотропии обменного взаимодействия, так и возникновению одноионной анизотропии. Одной из целей данной работы является изучение влияния анизотропного межионного взаимодействия, на фазовые состояния негейзенберговского ферро- и антиферро- магнетика со спином магнитного иона $S=1$.

Кроме того, современная микроэлектроника активно исследует антиферримагнетики, как перспективные материалы для хранения данных с бóльшей плотностью информации. Однако антиферромагнетики обладают высокой чувствительностью антиферромагнитного порядка к наличию дефектов. В связи с этим представляет интерес поиск альтернативных материалов, которые также могли бы быть использованы в спинтронике. Известно, что эффекты обменного усиления динамических параметров имеют место для ферримагнетиков, находящихся в непосредственной близости точки компенсации спинов подрешеток, но вопрос о фазовых состояниях и

динамических свойствах негејзенберговских ферримагнетиков является практически не изученным.

Таким образом, из всего выше сказанного можно сделать вывод, что тема данной диссертационной работы представляет интерес как для решения некоторых фундаментальных вопросов физики конденсированного состояния, так и для решения прикладных задач, что и определяет актуальность данной работы.

Связь работы с научными программами, планами, темами. Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики Физико-технического института Крымского федерального университета имени В. И. Вернадского. Исследования, содержащиеся в работе, выполнены в рамках проектов РФФИ:

- Проект 16-02-00069 «Линейная и нелинейная динамика негејзенберговских магнетиков» (код проекта А), 2016-2018 гг.

- Проект 16-32-00098 «Влияние структуры кристаллической решетки на магнитные свойства изотропных и обменно анизотропных спиновых нематиков» (код проекта мол_а), 2016 г.

- Проект 17-42-92007 «Фазовые состояния негејзенберговских многоподрешеточных магнетиков» (код проекта р_а), 2017-2019 гг.

Цель и задачи исследования. Цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании фазовых состояний, спектров элементарных возбуждений и описании фазовой картины негејзенберговских магнетиков с учетом влияния анизотропии обменного взаимодействия, а так же изотропного и анизотропного (изинговского) ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = \frac{1}{2}$.

Согласно основной цели работы поставлены и решены следующие задачи:

1. Определить фазовые состояния, реализуемые в одно- и двухподрешеточном негејзенберговском магнетике со сложной межионной анизотропией и спином магнитного иона $S=1$.

2. Исследовать влияние анизотропии обменного взаимодействия на динамические свойства одно- и двухподрешеточного негејзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S=1$.

3. Определить фазовые состояния, статические и динамические свойства изотропного ферримагнетика с учетом влияния биквадратичного обменного взаимодействия в одной из подрешеток.

4. Определить фазовые состояния, статические и динамические свойства ферримагнетика с анизотропным межподрешеточным взаимодействием и учетом биквадратичного обменного взаимодействия в одной из подрешеток.

Объект исследования — обменно-анизотропные негејзенберговские магнетики, изотропные и анизотропные негејзенберговские ферримагнетики.

Предмет исследования — фазовые состояния, статические и динамические свойства негејзенберговских магнетиков и ферримагнетиков.

Методы исследования. Описывать системы с дипольными и тензорными параметрами порядка удобно с помощью диаграммной техники для операторов Хаббарда. Применение этой техники позволяет развить регулярную процедуру вычисления статических и спектральных свойств одно- и двухподрешеточных негејзенберговских магнетиков. 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. Также в работе использован метод бозонизации операторов Хаббарда, основанном на построении бозе-аналога гамильтониана в терминах операторов Хаббарда.

Результаты получены аналитически и проверены при сравнении с известными решениями для предельных случаев.

Научная новизна полученных результатов. Поставленные задачи сформулированы и решены впервые. В результате получены новые результаты:

1. Впервые показано, что в негејзенберговском ферромагнетике со сложной межионной анизотропией возможна реализация нематического состояния особого типа — угловой нематической фазы. Также возможна реализация и угловой ферромагнитной фазы.

2. Впервые показано, что в этой модели негејзенберговского антиферромагнетика со сложной межионной анизотропией возможна реализация углового ортогонально-нематического состояния (ON_{\angle}) со специфическим геометрическим образом. Реализация его невозможна в изотропном негејзенберговском магнетике с $S=1$. Возможно существование еще двух ортогонально-нематических фаз (ON_1 и ON_2), вырожденных в случае изотропного спинового нематика.

3. Впервые показано, что понятие ориентационного фазового перехода справедливо для двухподрешеточных систем с тензорными компонентами параметра порядка. Из анализа динамически и статических свойств системы в случае реализации лишь ортогонально-нематических фаз видно, что фазовые переходы между ортогонально-нематическими фазами по материальным параметрам магнетика по характеру близки к ориентационным фазовым переходам.

4. Впервые исследованы статические и динамические свойства ферримагнетика с учетом влияния высших спиновых инвариантов в одной из подрешеток. Из-за учета влияния биквадратичного обменного взаимодействия в ферримагнетике возможна реализация фаз с дипольными параметрами порядка и тензорных фаз, характеризующихся дипольными и квадрупольными параметрами порядка. Состояние спинового немагнетика в рассматриваемой системе не реализуется, т. к. подрешетка с билинейным обменным взаимодействием выступает «подмагничивающим» полем, не дающим «сократить» средний магнитный момент первой подрешетки до нуля.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. В негејзенберговском ферромагнетике со сложной межионной анизотропией возможна реализация угловой нематической фазы и угловой ферромагнитной фазы. Анизотропия обменного взаимодействия снимает вырождение нематического состояния.

2. В негејзенберговском антиферромагнетике со сложной межионной анизотропией возможна реализация углового ортогонально-нематического состояния и двух разных ортогонально-нематических фаз. Вырождение снимается влиянием межионной анизотропии биквадратичного обменного взаимодействия.

3. Для изотропного и анизотропного ферримагнетика возможна реализация фаз с дипольными параметрами порядка и тензорных фаз, характеризующихся дипольными и квадрупольными параметрами порядка. Фазовый переход между дипольной фазой и тензорной фазой — это фазовый переход второго рода. В сфере реализации квадрупольно-ферримагнитной фазы возможна линия компенсации магнитных моментов подрешеток.

Достоверность полученных результатов обусловлена адекватностью выбора методов анализа магнитоупорядоченных систем и с позиции корректности математических вычислений, и с позиции применимости физических законов. Эти результаты коррелируют с данными экспериментов.

Научная и практическая ценность полученных результатов. Полно описаны свойства исследованных магнитоупорядоченных систем при разных параметрах обменных интегралов и анизотропии обменного взаимодействия и все фазовые состояния, реализуемые для каждой системы. Результаты применимы при создании магнитных материалов с заданными свойствами и для обоснования и интерпретации экспериментальных данных. Исследование актуально в связи с обнаружением в сплавах редкоземельных и переходных металлов явления сверхбыстрого переворота намагниченностей подрешеток под действием лазерного импульса с длительностью меньше 100 фемтосекунд.

Апробация результатов диссертации. Результаты, представленные на защите, докладывались на научных международных конференциях, таких как International Conference “Functional Materials” ICFM’13. Ukraine, Crimea, Partenit, 2013; Proceedings of the international conference nanomaterials: applications and properties 2013, Alushta, Ukraine. Также результаты докладывались на конференции “International Symposium Spin Waves» 2015, Saint-Petersburg. Результаты исследования влияния анизотропии обменного взаимодействия на фазовые состояния негейзенберговского антиферромагнетика представлены на конференциях “Moscow International Symposium on Magnetism 2017” и «Новое в магнетизме и магнитных материалах 2018». Москва. Кроме того, результаты диссертации докладывались на научных семинарах Физико-технического института КФУ им. В. И. Вернадского (Симферополь).

Публикации. Результаты опубликованы в 6 статьях, опубликованных в журналах, входящих в список ВАК Российской Федерации и наукометрические базы данных SCOPUS и Web of Science, и в докладах, опубликованных в материалах конференций.

Личный вклад автора. Автор принимал активное участие в постановке задач, их решении, а также в интерпретации и анализе полученных результатов. В работе [1] автором выполнен анализ свободной энергии, а также определены спектры элементарных возбуждений в нематических осевой и плоскостной фазах, определены фазовые состояния и линии потери устойчивости этих фаз. В работах [2,3] автор исследовал спектры элементарных возбуждений в изингоподобном негейзенберговском ферромагнетике. В работе [4] автором было получено и аналитически решено дисперсионное уравнение ферромагнетика с большой анизотропией в квадрупольной фазе. В работах [5,6] участвовала в анализе плотности свободной энергии как изотропного так и анизотропного негейзенберговского ферромагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma=1/2$, строила бозевский аналог гамильтониана системы, определяла спектры возбуждений в квадрупольно-ферромагнитном состоянии.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 разделов, заключения и списка используемых источников из 117 наименований. Общий объем диссертации составляет 121 страница текста с 15 рисунками.

Содержание работы

Во **введении** проанализирована проблема, раскрыта ее важность; сформулированы и поставлены цели и задачи исследований; уточнены достоверность и область применения полученных результатов.

В первом разделе исследована модель негейзенберговского ферромагнетика со сложной межионной анизотропией со спином магнитного иона $S=1$.

В первом подразделе рассматриваются возможные фазовые состояния обменно-анизотропного негейзенберговского магнетика, гамильтониан которого можно представить в виде:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J(n-n') \left[S_n^z S_{n'}^z + \Delta (S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y) \right] + \right. \\ & \left. + K(n-n') \left[O_{2n}^0 O_{2n'}^0 / 3 + \Delta_1 (O_{2n}^{zx} O_{2n'}^{zx} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz}) + \Delta_2 (O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

где операторы O_2^i ($i=0, 2, zx, ux, zy$) - операторы Стивенса. Для данной задачи в качестве динамических переменных удобно выбрать три спиновых переменных S^x, S^y, S^z и пять квадрупольных $O_2^0, O_2^2, O_2^{zx}, O_2^{xy}, O_2^{yz}$. Очевидно, что средние значения этих динамических переменных являются параметрами порядка системы. Система рассматривается при низких температурах ($T \ll T_c$, T_c - температура Кюри).

Рассмотрим случай, когда $\Delta, \Delta_1, \Delta_2 > 0$.

В случае низких температур ($T \rightarrow 0$) энергия основного состояния совпадает с плотностью свободной энергии, которая имеет вид:

$$\begin{aligned} F = & \frac{K_0}{8} (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2) (1 - \sin 2\alpha)^2 \sin^4 \theta - \frac{1}{2} (J_0 - K_0 \Delta_2) \cos^2 2\alpha + \\ & + \frac{1}{2} \left[J_0 (1 - \Delta) \cos^2 2\alpha + K_0 (1 - \Delta_1 + (\Delta_1 - \Delta_2) \sin 2\alpha) (1 - \sin 2\alpha) \right] \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (2)$$

Анализ плотности свободной энергии (2) позволяет определить фазовые состояния, реализуемые в системе при различных соотношениях материальных параметров.

В случае $J_0 > K_0$ величина среднего спина достигает своего насыщенного значения $\langle S \rangle = 1$. Однако, в зависимости от значения анизотропного параметра Δ изменяется ориентация вектора намагниченности и реализуются ферромагнитно упорядоченные фазы:

1. Легкоосная ферромагнитная фаза ΦM_{\parallel} с направлением вектора магнитного момента вдоль оси OZ (угол $\theta = 0$).

2. Легкоплоскостная ферромагнитная фаза ΦM_{\perp} фаза с направлением вектора магнитного момента, ортогональным оси OZ ($\theta = \pi/2$).

3. Угловая квадрупольно ферромагнитная фаза $K\Phi M_{\angle}$ с $\langle S \rangle < 1$, в которой направление вектора магнитного момента (угол θ) определяется соотношением между материальными константами.

Во втором подразделе проведен анализ спектров элементарных возбуждений в дипольных фазах, для которого был использован метод функций Грина для операторов Хаббарда.

В третьем подразделе исследовано тензорное упорядочение и ориентационные фазовые переходы.

Известно, что в изотропных негейзенберговских магнетиков с $S=1$ при $K_0 > J_0$ ферромагнитное упорядочение становится энергетически невыгодным, и реализуется состояние, характеризуемое тензорными параметрами порядка.

Анализ плотности свободной энергии (2), при $K_0 > J_0$ 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 $\alpha = -\pi/4$.

Причем, в квадрупольной фазе QU_2 функция основного состояния имеет вид: $\psi = |0\rangle$. 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: $q_2^0 = 1$.

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.

Функция основного состояния угловой нематической фазы 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 $|0\rangle$.

Фазовые переходы между нематическими фазами являются ориентационными и происходят по параметрам межионной анизотропии биквадратичного обменного взаимодействия Δ_1 и Δ_2 (рис. 1).

В четвертом подразделе исследованы фазовые переходы, определяемые продольной динамикой магнонов. Рассмотрен случай $\Delta_2 < 1$, $\Delta_1 < 1$ (рис. 2.). При таком выборе параметров анизотропии, в зависимости от соотношения между Δ и J_0/K_0 в системе реализуются ΦM_{\parallel} , $K\Phi M_{\perp}$ и QU_2 фаз.

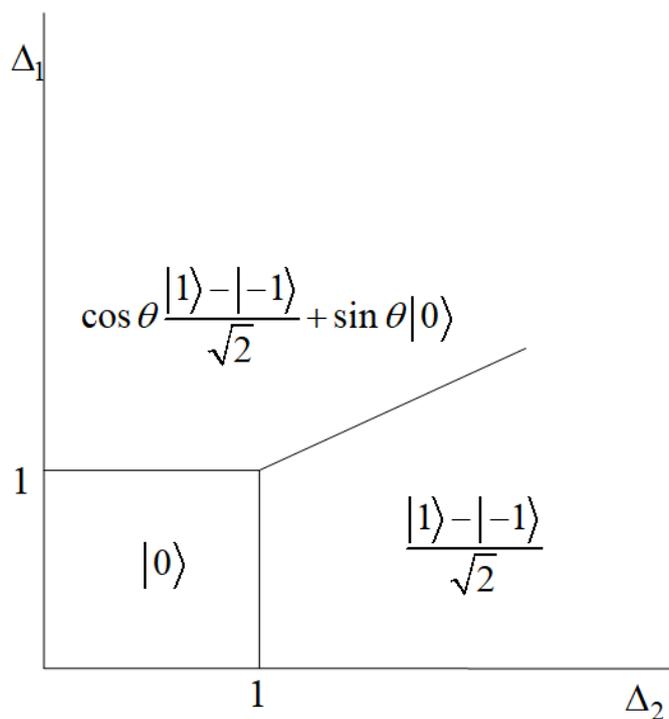


Рис. 1. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости (Δ_1, Δ_2) при $J_0/K_0 < 1$.

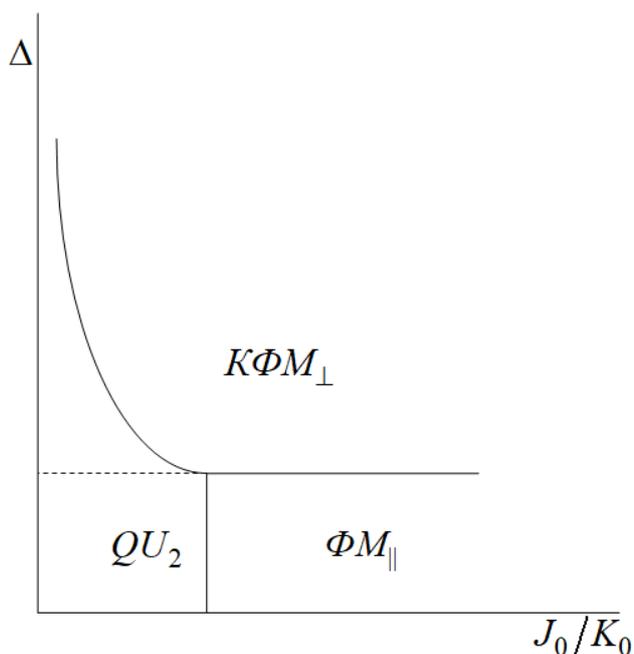


Рис. 2. Фазовая диаграмма обменно анизотропного негейзенберговского магнетика на плоскости $(\Delta, J_0/K_0)$ в случае реализации ферромагнитных и нематических фаз при $\Delta_1 < 1, \Delta_2 < 1$.

В пятом подразделе рассмотрен «изинговский» негейзенберговский магнетик со спином магнитного иона $S=1$ и отрицательными значениями параметров межйонной анизотропии. Гамильтониан такой системы имеет вид, аналогичный (1) с заменой параметров межйонной анизотропии $\Delta \rightarrow -\Delta, \Delta_1 \rightarrow -\Delta_1, \Delta_2 \rightarrow -\Delta_2$.

В результате проведенного исследования построена фазовая диаграмма, которая схематично приведена на рис. 3.

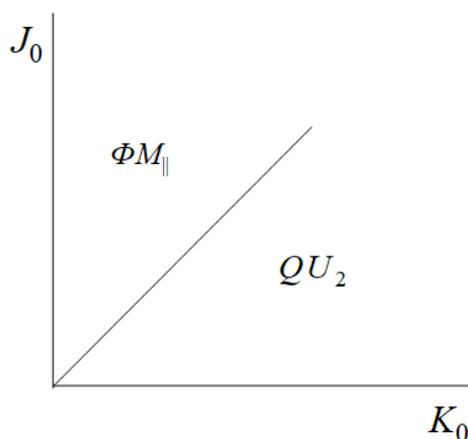


Рис. 3. Фазовая диаграмма обменно анизотропного изингоподобного негейзенберговского магнетика.

Во **втором разделе** рассмотрены динамические и статические свойства негейзенберговского антиферромагнетика со сложной межионной анизотропией.

В первом подразделе исследованы статические и динамические свойства негейзенберговского антиферромагнетика со спином магнитного иона, равным единице, с учетом возможностью разбиения на две подрешетки. Гамильтониан этой системы аналогичен гамильтониану (1), с учетом того, что $J_{m'}$, $K_{m'} < 0$ — константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий; $\Delta, \Delta_1, \Delta_2 > 0$ — параметры межионной анизотропии. Как и в предыдущем разделе исследование проводится при $T \rightarrow 0$.

Анализ плотности свободной энергии

$$F = \frac{1}{2} \left[-J_0(1-\Delta)\cos^2 2\alpha + K_0(1-\Delta_1 + (\Delta_1 - \Delta_2)\sin 2\alpha)(1 - \sin 2\alpha) \right] \sin^2 \theta + \frac{K_0}{8} (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2)(1 - \sin 2\alpha)^2 \sin^4 \theta + \frac{1}{2} (J_0 + K_0\Delta_2)\cos^2 2\alpha, \quad (3)$$

позволяет определить устойчивые фазовые состояния, реализуемые в системе. Угол θ определяет ориентацию вектора намагниченности относительно оси OZ первой подрешетки; во второй подрешетке этот угол составляет $(\pi - \theta)$; α — параметр унитарного преобразования.

В зависимости от значения анизотропного параметра Δ 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 $\Delta > 1$.

Плоскостную антиферромагнитную фазу в данном случае определим, как квадрупольно-ферромагнитную $AKFM_x$. Анализ плотности свободной энергии (3) показывает, что при условии $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ реализуется промежуточная антиферромагнитная угловая фаза $AKFM_z$ с $\langle S \rangle < 1$.

Рассмотрим поведение системы при $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$. В этом случае фазовые переходы $AFM_z - AKFM_{\perp}$ и $AKFM_x - AKFM_{\perp}$ являются чисто ориентационными фазовыми переходами второго рода (рис. 4.(а)).

Теперь рассмотрим случай $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$ (рис. 4.(б)). Угловая фаза становится неустойчивой. Фазовый переход из AFM_z фазы происходит непосредственно в $AKFM_x$ фазу и не является ориентационным. Фазовый переход между $AFM_z - AKFM_x$ - переход первого рода.

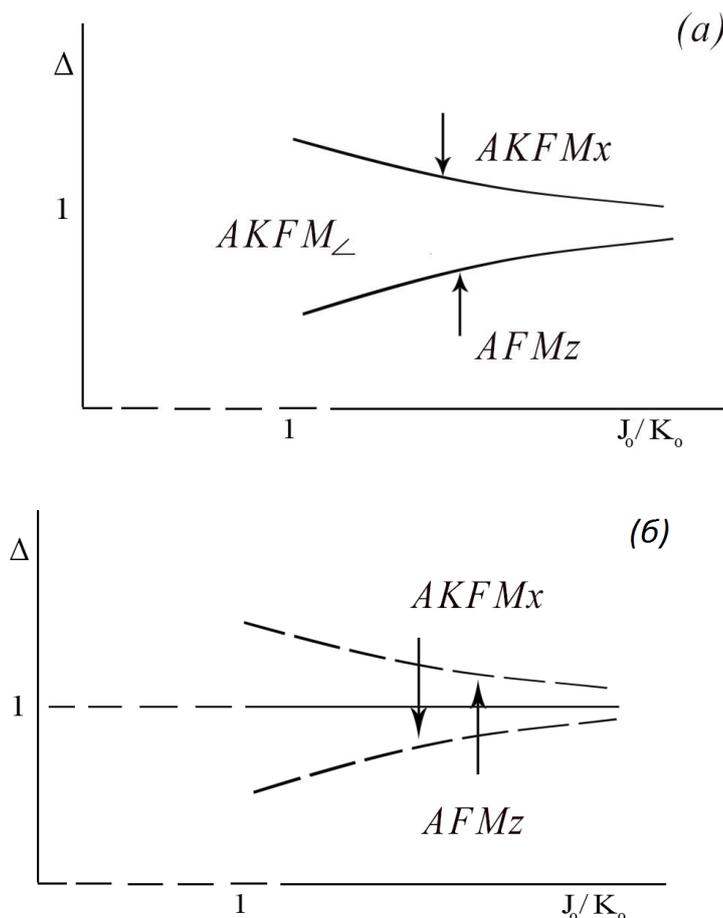


Рис. 4. а) Фазовая диаграмма AFM фаз в случае $J > K$ и $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$;

б) Фазовая диаграмма AFM фаз в случае $J > K$ и $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$.

Во втором подразделе рассмотрены ортогонально-нематические фазы. При $|K| > |J|$ и определенном соотношении между $\Delta, \Delta_1, \Delta_2$ 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 $\langle S^z \rangle = 0$.

Компоненты тензора квадрупольных моментов 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

$$F = \frac{K_0}{3} + \frac{K_0}{8}(4\Delta_1 - 3 - \Delta_2)\sin^2 2\beta \quad (4)$$

Из анализа плотности свободной энергии (4) следует, что в зависимости от соотношения параметров межионной анизотропии возможны реализации ортогональных нематических состояний (ON). 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:

$$q_{2(1)}^0 = 1, \quad q_{2(1)}^2 = -1, \quad q_{2(1)}^{zx} = 0 \quad \text{и} \quad q_{2(2)}^0 = -2, \quad q_{2(2)}^2 = 0, \quad q_{2(2)}^{zx} = 0,$$

Здесь индекс (i) – номер магнитной подрешетки.

Волновые функции основного состояния подрешеток имеют вид $|\psi_1\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle$, и ортогональны, т.е. $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$. Обозначим такое фазовое состояние ON_1 . В этом состоянии квадрупольные средние в каждой подрешетке определяются выражениями

$$\langle (S_1^x)^2 \rangle = 0, \quad \langle (S_1^y)^2 \rangle = \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S_2^x)^2 \rangle = \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S_2^z)^2 \rangle = 0.$$

Если же параметры системы таковы, что $\beta = \pi/4$, а $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$, получим волновые функции основного состояния подрешеток:

$$|\psi_1\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/2 + |0\rangle/\sqrt{2}, \quad |\psi_2\rangle = -(|1\rangle - |-1\rangle)/2 + |0\rangle/\sqrt{2}, \quad \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0,$$

а тензорные параметры порядка подрешеток равны, соответственно:

$$q_{2(1)}^0 = -1/2, \quad q_{2(1)}^2 = -1/2, \quad q_{2(1)}^{zx} = 1 \quad \text{и} \quad q_{2(2)}^0 = -1/2, \quad q_{2(2)}^2 = -1/2, \quad q_{2(2)}^{zx} = -1.$$

Это означает, что средние значения квадратов спиновых операторов имеют, соответственно, вид:

$$\begin{aligned} \langle (S_1^x)^2 \rangle &= 1/2, \quad \langle (S_1^y)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1/2, \quad \langle S_1^x S_1^z + S_1^z S_1^x \rangle = 1; \\ \langle (S_2^x)^2 \rangle &= 1/2, \quad \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \quad \langle (S_2^z)^2 \rangle = 1/2, \quad \langle S_2^x S_2^z + S_2^z S_2^x \rangle = -1. \end{aligned}$$

Такое состояние обозначим ON_{\angle} и назовем угловой ортогонально нематической фазой, поскольку, главные оси квадрупольных эллипсоидов подрешеток образуют угол с осью квантования OZ .

Если параметры унитарных преобразований равны $\alpha = \pi/4, \beta = 0$, то плотность свободной энергии системы имеет вид:

$$F = -\frac{K_0}{6}(1 - 3\Delta_2). \quad (5)$$

При этом волновые функции основного состояния подрешеток принимают

вид: $|\psi_1\rangle = (|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\psi_2\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ ($\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$). Следовательно, параметры порядка и квадрупольные средние имеют вид:

$$q_{2(1)}^0 = 1, q_{2(1)}^2 = 1, q_{2(1)}^{zx} = 0, \langle (S_1^x)^2 \rangle = 1, \langle (S_1^y)^2 \rangle = 0, \langle (S_1^z)^2 \rangle = 1;$$

$$q_{2(2)}^0 = 1, q_{2(2)}^2 = -1, q_{2(2)}^{zx} = 0, \langle (S_2^x)^2 \rangle = 0, \langle (S_2^y)^2 \rangle = 1, \langle (S_2^z)^2 \rangle = 1.$$

Такое состояние обозначим как ON_2 .

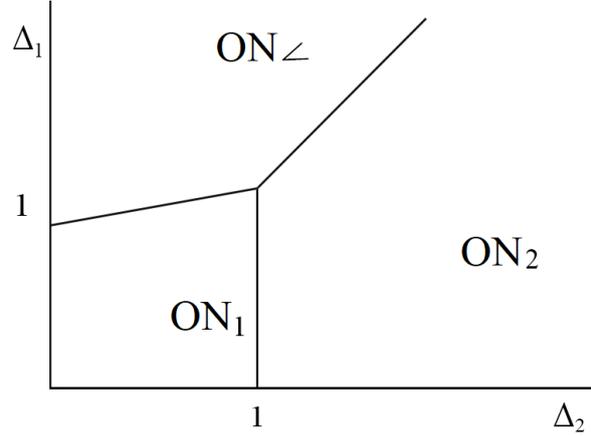


Рис. 5. Фазовая диаграмма в случае реализации ON фаз при $|K| > |J|$.

Из равенства свободных энергий в различных состояниях можно определить линии фазового перехода (рис. 5.) между ON фазами:

$$ON_1 - ON_2: \Delta_2 = 1;$$

$$ON_1 - ON_<: 4\Delta_1 = \Delta_2 + 3;$$

$$ON_2 - ON_<: \Delta_1 = (5\Delta_2 - 1)/4,$$

Фазовые переходы между ON фазами обусловлены изменением параметров межионной анизотропии Δ_1 и Δ_2 .

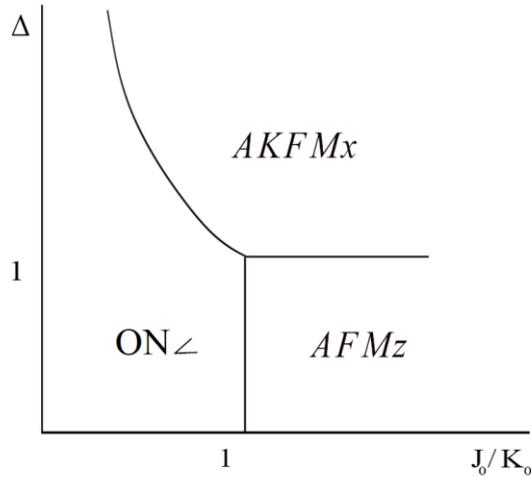


Рис. 6. Фазовая диаграмма рассматриваемой системы при $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ и $J_0/K_0 \leq 1$.

В третьем подразделе исследованы фазовые переходы, связанные с

продольной динамикой. Так в случае $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ (рис.6) в системе реализуются AFM_z , $AKFM_x$, ON_z фазы. Фазовый переход $AFM_z - ON_z$ фазы является фазовым переходом первого рода, в результате которого скачком меняется модуль намагниченности с единицы до нуля.

В третьем разделе рассмотрены фазовые состояния и динамические свойства как изотропного негеизенберговского ферримагнетика, так и обменно-анизотропного. При этом предполагается, что одна из подрешеток имеет спин магнитного иона, равный единице, а вторая — спин, равный $\frac{1}{2}$. В подрешетке со спином единиц учитывается и билинейное обменное взаимодействие, и биквадратичное.

В первом подразделе рассмотрены статические свойства и возможные фазовые состояния изотропной модели. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_1(m-m') \sigma_m \sigma_{m'} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_2(n-n') \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 - \frac{1}{2} \sum_{m,n} A(m-n) \sigma_m \mathbf{S}_n, \quad (6)$$

где $J_1 > 0$ – константа обменного взаимодействия для подрешетки со спином $\sigma = 1/2$; $J_2 > 0$, $K > 0$ – константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий для $S=1$; $A < 0$ – константа межподрешеточного обменного взаимодействия.

В качестве оси квантования выберем ось OZ. Тогда среднее значение спина для первой подрешетки будет параллельно этой оси, а второй подрешетки – антипараллельно этой оси, так как константа межподрешеточного обменного взаимодействия $A < 0$. Для удобства вычислений подвернем вторую подрешетку так, чтобы направления осей квантования обеих подрешеток совпадали.

Волновые функции подрешеток имеют вид: $\Psi(1) = \cos\alpha|1\rangle + \sin\alpha|-1\rangle$; $\Psi(0) = |0\rangle$ и $\Psi(-1) = -\sin\alpha|1\rangle + \cos\alpha|-1\rangle$; $\Phi\left(\frac{1}{2}\right) = \left|\frac{1}{2}\right\rangle$ и $\Phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle$.

Из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда можно определить параметры порядка, как функцию α : $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$, $q_2^2 = \langle O_2^2 \rangle = \sin 2\alpha$, $q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle = 1$.

Свободную энергию, как функцию параметра α представим в виде:

$$F = -\frac{K(0)}{12} - \frac{|A(0)|}{4} \cos 2\alpha - \frac{1}{2} (J_2(0) - K(0)) \cos^2 2\alpha, \quad (7)$$

В системе реализуется ферримагнитное упорядочение (FiM) с векторами состояния подрешёток

$$|\Psi(1)\rangle = |1\rangle \text{ и } \left| \Phi\left(\frac{1}{2}\right) \right\rangle = -\left| \frac{1}{2} \right\rangle,$$

и параметрами порядка

$$\langle \sigma^z \rangle = -\frac{1}{2}, \langle S^z \rangle = \cos 2\alpha = 1, q_2^0 = 1, q_2^2 = 0.$$

Как видно, в этом состоянии первая и вторая подрешетки достигают насыщения, но вектора намагниченности антиколлинеарны.

Суммарное значение магнитного момента системы в FiM- фазе равно $\langle \sigma^z + S^z \rangle = \frac{1}{2}$. Векторы основного состояния подрешеток в QFiM-фазе имеют

$$\text{вид, соответственно: } |\Psi(1)\rangle = \cos\alpha|1\rangle + \sin\alpha|-1\rangle, \left| \Phi\left(\frac{1}{2}\right) \right\rangle = -\left| \frac{1}{2} \right\rangle.$$

В этой фазе возможно такое соотношение материальных параметров (J, K, A) , при котором суммарный средний магнитный момент подрешеток равен нулю ($\langle S^z + \sigma^z \rangle = 0$). В переменных $y = |A|/K, x = J/K$ линия компенсации магнитных моментов примет вид: $y = 2x - 2$.

Из равенства плотности свободной энергии в FiM – и QFiM-фазах получим линию фазового перехода между этими фазами в приведенных переменных (x, y)

$$y = 4 - 4x. \quad (8)$$

Полученные результаты позволяют построить фазовую диаграмму исследуемой системы. Схематично эта диаграмма приведена на рис.3.1.

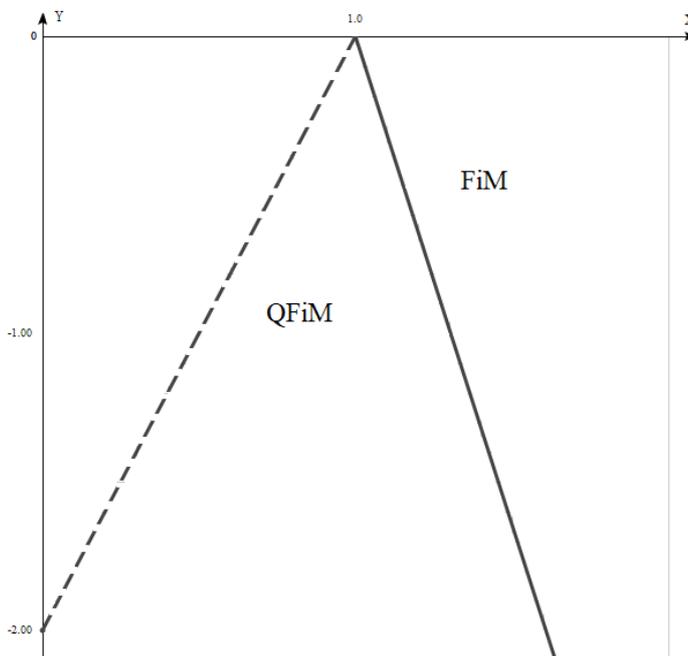


Рис. 7. Фазовая диаграмма негейзенберговского ферромагнетика с подрешетками $S = 1$ и $\sigma = \frac{1}{2}$. Сплошная жирная линия – линия фазового перехода FiM-QFiM фаза; пунктирная линия – линия компенсации.

Для определения типа фазового перехода QFiM- FiM применим термодинамическую теорию фазовых переходов Ландау. Для этого рассмотрим плотность свободной энергии (8) в окрестности фазового перехода QFiM- FiM,

т.е в окрестности линии $y = 4 - 4x$. Вблизи линии фазового перехода из QFiM фазы параметр $\alpha \ll 1$, и на линии перехода обращается в ноль. Раскладывая плотность свободной энергии (3.9) в ряд по этому параметру в QFiM-фазе в окрестности линии фазового перехода ($\alpha \rightarrow 0$) получим

$$F = F_0 + \Lambda \alpha^2 + \Theta \alpha^4 + \dots, \quad (9)$$

$$\text{где } \Lambda = 2J_2(0) - 2K(0) + \frac{1}{2}|A(0)|, \quad \Theta = -\frac{1}{6}|A(0)| - \frac{8}{3}J_2(0) + \frac{8}{3}K(0).$$

Представим коэффициенты Λ и Θ как функции относительных переменных x, y : $\Lambda = \frac{K(0)}{2}(4x - 4 + y)$, $\Theta = \frac{K(0)}{6}(-y - 16x + 16)$.

Анализ коэффициентов Λ и Θ вблизи линии $y = 4 - 4x$ показывает, что коэффициент Λ с точностью до множителя $K/2$ совпадает с линией фазового перехода, и в QFiM-фазе $\Lambda < 0$, а коэффициент $\Theta > 0$. Такое поведение коэффициентов разложения термодинамического потенциала (9) свидетельствует о том, что фазовый переход QFiM- FiM является переходом второго рода.

Для определения спектров элементарных возбуждений воспользуемся методом бозонизации операторов Хаббарда.

Линия потери устойчивости FiM-фазы в точности совпадает с линией фазового перехода FiM-QFiM, из чего следует, что данный фазовый переход является переходом второго рода.

На рисунке 8 изображены спектры возбуждений изотропного ферримагнетика в ферримагнитной фазе. Из рисунка следует, что ветвь $\Omega_a(k)$ является безщелевой, а ветви $\Omega_b(k)$ и $\Omega_c(k)$ имеют энергетические щели при $k = 0$. Щель в спектре $\Omega_b(k)$ дает линию фазового перехода.

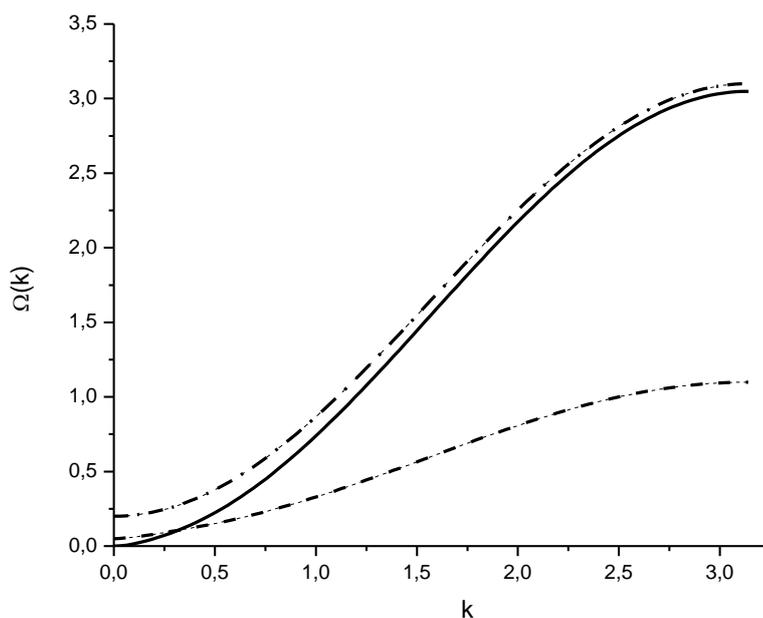


Рис. 8. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского анизотропного ферримагнетика в FiM-фазе при $J_1 = 1$; $J_2 = 1,5$; $K = 1,45$; $|A| = 0,2$.

Сплошная линия – ветвь $\Omega_a(k)$, пунктирная линия – ветвь $\Omega_c(k)$, штрих-пунктирная линия – ветвь $\Omega_b(k)$.

Во втором подразделе третьего раздела исследуется влияние анизотропии межподрешеточного обменного взаимодействия на фазовые состояния и динамику системы. Гамильтониан системы может иметь вид:

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_1(m-m') \sigma_m \sigma_{m'} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_2(n-n') \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'} - \\ & -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 - \frac{1}{2} \sum_{m,n} \tilde{A}(m-n) \sigma_m^z S_n^z. \end{aligned} \quad (10)$$

J_2, K, J_1 – константы обменного взаимодействия в подрешетках с $S=1$ и $\sigma^z = 1/2$; $\tilde{A} < 0$ – константа изинговского межподрешеточного обменного взаимодействия.

При выборе в качестве оси квантования легкой оси (оси OZ) межподрешеточной анизотропии одноузельный гамильтониан совпадает с изотропным одноузельным гамильтонианом (с учетом замены $A \rightarrow \tilde{A}$). Статические свойства изотропного и анизотропного негейзенберговских ферромагнетиков совершенно идентичны. Анизотропия межподрешеточного обменного взаимодействия не меняет статические свойства исследуемой системы, но малое изменение гамильтониана межподрешеточного обменного взаимодействия серьезно изменяет динамику системы.

Фазовый переход FiM-QFiM протекает по «продольной» ветви возбуждений и является переходом второго рода. На линии фазового перехода, в длинноволновом пределе ($k \rightarrow 0$), энергетическая щель в спектре возбуждений обращается в ноль.

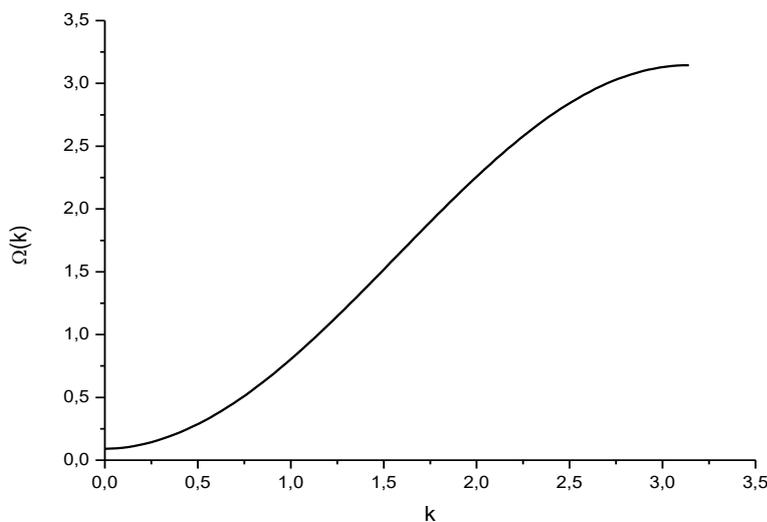


Рис. 9. Спектр «продольной» ветви возбуждений $\Omega_b(k)$, негейзенберговского анизотропного (изинговского) ферромагнетика в QFiM-фазе при $J_1 = 1$; $J_2 = 1,5$; $K = 1,625$; $|A| = 0,2$.

Основные результаты и выводы:

1. Впервые показано, что в негейзенберговском ферромагнетике со сложной межионной анизотропией можно реализовать нематическое состояние угловой нематической фазы. При определенных соотношениях материальных параметров возможна реализация и угловой ферромагнитной фазы.

2. Впервые показано, что в исследуемой модели негейзенберговского антиферромагнетика со сложной межионной анизотропией возможна реализация углового ортогонально-нематического состояния (ON_{\perp}) со специфическим геометрическим образом. Реализация этого состояния невозможна в изотропном негейзенберговском магнетике с $S=1$. Также возможно существование еще двух ортогонально-нематических фаз (ON_1 и ON_2), в случае изотропного спинового нематика они являются вырожденными.

3. Впервые показано, что понятие ориентационного фазового перехода справедливо для систем и с дипольными, и с тензорными компонентами параметра порядка. Анализ динамически и статических свойств системы при реализации только ортогонально-нематических фаз показал, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам.

4. Впервые исследованы динамические и статические свойства негейзенберговского ферромагнетика и с изотропным, и с анизотропным межподрешеточным обменным взаимодействием. Благодаря учету влияния биквадратичного обменного взаимодействия в одной из подрешеток в ферромагнетике возможна реализация и фаз с дипольными параметрами порядка (ферромагнитная), и фаз, характеризуемых дипольными и квадрупольными параметрами порядка (квадрупольно- ферромагнитная). Определены линии фазового перехода и потери устойчивости. Показано, что фазовый переход ферромагнитная – квадрупольно-ферромагнитная фаза является фазовым переходом второго рода и протекает по продольной ветви элементарных возбуждений.

5. Показано, что в изотропном негейзенберговском ферромагнетике и в системе с анизотропным межподрешеточным взаимодействием состояние спинового нематика в рассматриваемой системе не реализуется, т. к. подрешетка с билинейным обменным взаимодействием играет роль «подмагничивающего» поля, не позволяющего «сократить» средний магнитный момент первой подрешетки до нуля.

Результаты, изложенные в диссертации, представлены в следующих публикациях:

1. Fridman Yu.A. Influence of the mechanic boundary conditions on the dynamic and static properties of the ferromagnet with competing anisotropies / Yu.A. Fridman, G.A. Gorelikov, A.G. Meleshko, A.V. Krivtsova // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2014. – Vol. 361. – P. 50-56.
2. Космачев О.А. Влияние анизотропного обменного взаимодействия на фазовые состояния и спектры негейзенберговского магнетика $s=1$ / О.А.Космачев, А.В.Кривцова, Ю.А.Фридман // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2016. - Т.149. - № 2. - С. 367–377
3. 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 твердых тел*. – 2017. - Т 59. - № 3. - С.491-499
4. 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.- №2. - С. 382-391
5. Кривцова А.В. Негейзенберговский анизотропный ферримагнетик / А. В. Кривцова, Я. Ю. Матюнина, Ю. А. Фридман // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 2020. – Т. 158. – С. 334–344;
6. A.V.Krivtsova Isotropic non-heisenberg magnet with two sublattices (1, 1/2): statics and dynamics / A.V.Krivtsova, Ia.Yu.Matiunina, E.A.Polyanskaya, O.A.Kosmachev, Yu.A.Fridman // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2020. – Vol. 513. - P. 167-178.

Тезисы докладов опубликованы в следующих сборниках материалов конференций:

1. Kosmachev O.A. Influence of anisotropic exchange interaction on the phase states of non-heisenberg spin-1 magnetic/ О.А. Kosmachev, A.V. Krivtsova, Yu.A. Fridman // *International Symposium Spin Waves*. - 2015. - Sankt-Petersburg.
2. A.V. Krivtsova Influence of the Mechanical Boundary Conditions on Dynamic and Static Properties of the Ferromagnetic with Competing Anisotropies/ A.V. Krivtsova, A.G. Meleshko, G.A. Gorelikov, Yu.A. Fridman, Ph.N Klevets// *Proceedings of the international conference nanomaterials: applications and properties*. – 2013. - Vol. 2. - No 1, 01 NFPMM07(2pp).
3. Kosmachev O.A. Two-lattice exchange-anisotropic nematics with $S = 1$ / Kosmachev O.A., Krivtsova A.V., Fridman Yu.A. // *Moscow International Symposium on Magnetism*.- 2017.
4. Космачев О.А. Влияние сложной обменной анизотропии на фазовые состояния двухподрешеточного негейзенберговского магнетика/ Космачев О.А., Кривцова А.В., Фридман Ю.А. // *Новое в магнетизме и магнитных материалах*. - 2018.