

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

На правах рукописи

Ярыгина Екатерина Александровна

**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ОДНОИОННОЙ АНИЗОТРОПИИ НА
ДИНАМИКУ И СТАТИКУ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ МАГНЕТИКОВ**

Специальность 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
Космачев Олег Александрович,
доктор физико-математических наук,
профессор

СИМФЕРОПОЛЬ – 2023

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
РАЗДЕЛ 1. НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ МАГНЕТИК С ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ.....	19
1.1 НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ОСЬ»	20
1.1.1 МОДЕЛЬ. АНАЛИЗ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ	20
1.1.2 АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ	27
1.1.3 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА.....	34
1.2 НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ПЛОСКОСТЬ»	36
1.2.1 МОДЕЛЬ. АНАЛИЗ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ	36
1.2.2 АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ	40
1.2.3 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА.....	44
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПЕРВОГО РАЗДЕЛА	46
РАЗДЕЛ 2. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ОСЬ»	47
2.1 МОДЕЛЬ	47
2.2 ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА	51
2.2.1 ФЕРРОМАГНИТНАЯ ФАЗА.....	51
2.2.2 НЕМАТИЧЕСКАЯ ФАЗА	55
2.3 ДИНАМИКА СПИНОВОГО НЕМАТИКА ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ .	58
2.4 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ.....	60
2.4.1 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В FM ФАЗЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТЛИЧНЫХ ОТ НУЛЯ.....	60
2.4.2 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В SN ФАЗЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТЛИЧНЫХ ОТ НУЛЯ.....	67
2.5 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА.....	73
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ВТОРОГО РАЗДЕЛА	77
РАЗДЕЛ 3. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИЛЬНО АНИЗОТРОПНОГО АНИТФЕРРОМАГНЕТИКА	79
3.1 МОДЕЛЬ. КОЛЛИНЕАРНЫЕ ФАЗЫ.....	80
3.2 МОДЕЛЬ. НЕКОЛЛИНЕАРНЫЕ ФАЗЫ.....	87
3.3 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ.....	93
3.4 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА	95
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ТРЕТЬЕГО РАЗДЕЛА	97
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	98
ЛИТЕРАТУРА.....	101

ВВЕДЕНИЕ

Возможности современной традиционной полупроводниковой электроники близки к своим физическим пределам. Основа современной цивилизации – информационные технологии, а значит, решение этой проблемы имеет первостепенную важность. Спинтроника является одним из самых многообещающих и быстро развивающихся направлений физики магнетизма. На данный момент, спинтроника рассматривается как наиболее перспективная технология элементной базы информационных технологий в XXI веке. Принцип работы практически всей существующей электроники сейчас основан на переносе электрического заряда – электрическом токе. Еще одной фундаментальной характеристикой электрона является его спин, использование которого в качестве основополагающей характеристики развивающихся информационных технологий позволяет создавать принципиально новые устройства. В качестве примера можно привести высокочувствительные датчики магнитных полей [1]; элементы хранения с более высокой плотностью записи и переключения информации; управляемые наногенераторы сверхвысокочастотного и терагерцового диапазонов [2]; новые методы вычислений и кодировки информации, в основе которых лежат квантовые когерентные эффекты и т.д..

Как отдельное научное направление спинтроника возникла около ста лет назад, вместе с открытием магнитных явлений, связанных с наличием собственных спиновых и орбитальных магнитных моментов электронов. Например, спиновые волны, возникновение доменов в магнитных пленках, магнитные резонансы, и т.д., которые активно применяются в устройствах обработки информации микро- и наноразмеров [3-5]. В более узком смысле спинтроника сформировалась в 1980-х годах, когда были открыты эффекты возбуждение ферромагнитного резонанса спин-поляризованным током [6-8], туннельного магнетосопротивления и т.д.. Некоторые из этих явлений уже

применяются на практике и оказывают влияние на развитие информационных технологий.

Начиная с 1970-х годов, большое внимание уделялось спиновым волнам в монокристаллических пленках железо-иттриевого $Y_3Fe_5O_{12}$ граната, выращенного на подложках из монокристаллов галлий-гадолиниевого граната ($Gd_3Ga_5O_{12}$). Экспериментально было установлено, что данный материал обладает низкими потерями в СВЧ диапазоне $\sim 0,5-30$ ГГц. На основе данных исследований было создано достаточно много спин-волновых устройств обработки СВЧ сигналов, таких как перестраиваемые по частоте фильтры и резонаторы; управляемые фазовращатели; шумоподавители и т.д., но по ряду причин технология не получила дальнейшего развития. Спин-волновая техника снова вызывает интерес в последние годы, в связи с успехами в генерации и детектировании спиновых волн в металлических пленках субмикронной и наномикронной толщины, что позволяет вернуться к теоретическим разработкам прошлых лет, но с учетом уменьшения затрат на подобную генерацию [9]. Спиновыми волнами в магнитных пленках можно управлять, изменяя внешнее управляющее магнитное поле. Важно отметить, что спин-волновые устройства реализуют основной принцип спинтроники – перенос спина частицы без переноса ее заряда.

Из современных значимых достижений спинтроники стоит отметить обнаружение в 2013 году новых объектов – «скирмион» [10], теоретически предсказанных еще в 1962 году [11,12]. Скирмионы представляют собой устойчивую двумерную топологическую структуру с распределением намагниченности в форме кольца диаметром порядка 10–30 нм, формирующуюся в ферромагнитной или антиферромагнитной пленке толщиной 1–100 нм. Фактически, эти объекты представляют собой чрезвычайно малые магнитные вихри. Формируются скирмионы из-за конкуренции обменного взаимодействия между спинами отдельных атомов и

взаимодействия Дзялошинского-Мория. Теоретические расчеты показывают, что применение скирмионов на несколько порядков повысит скорость и плотность записи информации на магнитных носителях.

Спинтронные технологии требуют новых материалов, со специфическими свойствами, а также новых теоретических моделей, позволяющих эти свойства не только описать, но и предсказать новые.

Обычно, при теоретическом описании магнитоупорядоченных систем используется модель Гейзенберга [13,14], согласно которой обменное взаимодействие можно описать спиновым гамильтонианом, с учетом билинейного по спину инварианта вида: $J_{12}(\vec{S}_1\vec{S}_2)$. Однако, для магнетиков, величина спина магнитного иона в которых превышает $\frac{1}{2}$, спиновый инвариант модели Гейзенберга [13,14] является не единственным. Можно показать, что в общем случае спиновые инварианты при $S > \frac{1}{2}$ имеют вид $(\vec{S}_1\vec{S}_2)^{2S}$, где S – величина спина магнитоактивного иона. Наличие негейзенберговского обменного взаимодействия приводит к возникновению серии квантовомеханических эффектов [15]. К примеру, в магнитных системах со спином магнитного иона $S=1$, в которых биквадратичное обменное взаимодействие превосходит билинейное (т.е. $K > J$), могут возникать фазовые состояния, для характеристики которых используются тензорные параметры порядка. Такие фазовые состояния получили название – спиновые нематики [16-19]. Характерной особенностью нематических фаз является возникновение спонтанного нарушения симметрии даже при нулевом значении среднего магнитного момента на узлах кристаллической решетки, что обусловлено квадрупольными средними вида $S_{\alpha\beta} = \langle S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \rangle$, где $\alpha, \beta = x, y, z$ [20,21]. Причем вращательная симметрия спонтанно нарушается в нематических фазах, даже несмотря на инвариантность данных состояний, относительно обращения времени. Данный факт обусловлен специфическим упорядочением квадрупольных моментов. В работах [22,23] показано, что реальным материалом, в котором возможна реализация

нематического состояния, является низкоразмерный магнетик $LiCuVO_4$. Нулевое значение среднего магнитного момента ($\langle \vec{S} \rangle = 0$) является важным фактором, приводящим к реализации нематических фаз в магнетике. Отметим, что нематические состояния носят характер чисто квантовых явлений, поскольку характеризуются только тензорными параметрами порядка.

Исследование нематических фазовых состояний активно проводится для кристаллических магнетиков, что было показано в работе [24]. Стоит отметить, что исследования проводятся не только для трехмерных, но и для низкоразмерных систем [25,26]. Помимо этого, возрастающий интерес к исследованию таких магнетиков связан с исследованием Бозе-конденсата нейтральных атомов щелочных металлов [27,28] находящихся в оптических ловушках, где изменение параметров ловушек может привести к появлению негейзенберговского обменного взаимодействия [13,14]. Причем, экспериментально установлено, что нематические фазы устойчивы только при наличии биквадратичного обменного взаимодействия [15,25,29-39]. Так, в работе [40], было показано, что в ферропниктидах $LaFeAsO$ ряд особенностей спектров магнонов и фазовых переходов можно объяснить, только учитывая вклад биквадратичного обменного взаимодействия. Особый интерес представляет исследования возможности реализации нематических состояний в многоподрешеточных магнетиках, например, в антиферромагнетиках, поскольку такого рода магнитоупорядоченные системы активно используются в спинтронике.

К аналогичным квантовым состояниям магнитоупорядоченных систем может приводить наличие в магнетике сильного спин-орбитального взаимодействия, иными словами наличие большой, сравнимой с обменным взаимодействием одноионной анизотропии. Впервые это было показано Т. Мория [41], где было показано, что наличие большой одноионной легкоплоскостной анизотропии может быть фактором, приводящим к возникновению эффекта квантового сокращения спина. Так, если величина анизотропии равна или превосходит величину обменного взаимодействия $\beta \geq J$ (β – константа

одноионной анизотропии, J – гейзенберговское обменное взаимодействие), то среднее значение спина на узле магнитной решетки становится равным нулю $\langle \vec{S} \rangle = 0$.

В данный момент известен ряд магнитных соединений, в которых величина энергии одноионной анизотропии и энергии обменного взаимодействия сопоставимы между собой по величине. Так, к примеру, соединения таллия [42-44], алюминаты редкоземельных металлов [45-47], а так же магнитные соединения на основе никеля и железа. Стоит отметить, что в некоторых из них, таких, как $CeFeBr_3$ и $CeFeCl_3$, величина константы одноионной анизотропии превышает значение обменного взаимодействия [48,49].

Интерес представляет случай, при котором значение константы обменного взаимодействия отрицательно ($J < 0$). Для такого рода магнитных систем энергетически выгодным оказывается разбиение на две магнитные подрешетки. Если величина константы билинейного обменного взаимодействия по модулю превосходит величину константы биквадратичного обменного взаимодействия по модулю, то в системе реализуется антиферромагнитное состояние. Если же обменный интеграл остается отрицательным, но константа биквадратичного обмена по модулю превышает константу билинейного обменного взаимодействия (т.е. $|K| > |J|$), то существование антиферромагнитной фазы становится энергетически не выгодным. И в системе возникает ортогонально нематическая фаза, основной характеристикой которой, является ортогональность между собой векторов-директоров различных подрешеток и обращение в ноль среднего значения магнитного момента на каждом узле кристаллической решетки [33-36,50-53]. В работах [37,38], удалось доказать устойчивость ортогонально нематического состояния для магнетиков с квадратной и треугольной решеткой. В случае если изотропная магнитоупорядоченная система является двухподрешеточной, то возможны фазовые переходы между ортогонально нематическим и антиферромагнитным состояниями, что было показано в работе

[26]. Кроме того, было установлено, что такие фазовые переходы представляют собой вырожденные фазовые переходы I-го рода.

При рассмотрении негейзенберговских магнетиков большинство исследований ограничивалось простейшей изотропной моделью при $T = 0$, например, в работе [26,51,52]. Но большой интерес представляет учет одновременного влияния как одноионной анизотропии, так и температуры на статические и динамические свойства спинового нематика. Это связано, прежде всего, с возможностью практического использования негейзенберговских магнетиков, поскольку трудно надеяться, что устройства, построенные на этих принципах, будут находиться при температурах, близких к абсолютному нулю.

Помимо исследований анизотропных негейзенберговских магнетиков в последние годы большой интерес представляет собой изучение скомпенсированных магнетиков или антиферромагнетиков [54-57].

При наличии внешнего магнитного поля поведение антиферромагнетиков вызывает особый интерес, в частности исследование антиферромагнетиков типа ABX_3 , где A – ион щелочного металла, B – ион переходного металла, X – галогенид. В таких системах ионы B^{2+} с одной стороны формируют антиферромагнитные цепочки вдоль оси C_3 , а другой – спиновые конфигурации в базисной плоскости [48,58,59].

В подобных магнитоупорядоченных системах прослеживается ряд интересных особенностей, как в статике, так и динамике системы. Например, даже в условиях нулевых температур ($T = 0$), возможно существование состояний, намагниченность которых намного меньше намагниченности насыщения или даже принимает нулевые значения. Также, в таких магнитоупорядоченных системах могут возникать особые типы динамических возбуждений, характерной особенностью которых является изменение величины намагниченности по модулю, получившие название продольные магноны [24,53,59].

Большая одноионная анизотропия в магнетиках может приводить к ситуации, когда состояние с нулевой намагниченностью ($\langle \vec{S} \rangle = 0$) является основным. Такие устойчивые фазовые состояния получили название квадрупольных фаз [24,53,59]. Однако важно заметить, в квадрупольных фазах симметрия средних значений тензора квадрупольных моментов чисто одноосная, иными словами, одна из главных осей квадрупольного эллипсоида становится параллельной оси анизотропии. Сам квадрупольный эллипсоид так же становится одноосным и вырождается в эллипс с эксцентриситетом равным единице. Этот факт показывает, что такого рода состояния не являются «чистыми» нематическими фазами, которые были описаны выше [60].

Примером магнетиков, описываемым подобным соотношением материальных параметров, может являться $CsFeBr_3$ или $CsFeCl_3$, в которых спин ионов железа Fe^{2+} равен единице. Константа одноионной анизотропии составляет порядка 20-30 К, а константы обменного взаимодействия внутри подрешеток и между ними равны порядка 3-5 К и 0,3-0,4 К, соответственно. Синглетное спиновое состояние является основным в антиферромагнетике. На практике это означает, что двухподрешеточная антиферромагнитная структура не реализуется и вместо нее возникает ситуация, когда из трех возможных спиновых состояний с проекциями $S^z = \pm 1; 0$ энергетически выгодным оказывается последнее ($S^z = 0$). Кроме того, подобное состояние является квадрупольно упорядоченным [47,48,54-59,61-68].

Учет влияния внешнего магнитного поля существенным образом усложняет ситуацию в подобных магнитоупорядоченных системах. В частности, с увеличением магнитного поля происходит перестройка энергетических уровней системы и состояние со средним значением нулевой намагниченности ($\langle \vec{S} \rangle = 0$) становится энергетически не выгодным. При этом в магнетике возможно возникновение спиновых конфигураций, не характерных для двухподрешеточного антиферромагнетика. К примеру, реализация «квазиферритового» состояния с неэквивалентными намагниченностями

подрешеток в случае чистого антиферромагнетика [69]. И целый ряд других особенностей в статических и динамических свойствах систем, не только с целым спином, но и, например, со значениями спина $S = \frac{3}{2}$ [24,29,53,70,71]. Наблюдаемые при этом фазовые переходы по магнитному полю не всегда ясны по типу перехода и с точки зрения рода.

В перспективе, новые устойчивые фазовые состояния могут быть обнаружены во фрустрированных магнитных системах [72,74]. В качестве примера можно рассмотреть двухподрешеточный магнетик, в котором константы обменного взаимодействия внутри подрешеток и между подрешетками существенно различаются. Как было показано в [72-75] такой магнетике возникает целый ряд новых фазовых состояний: «сверхтвердая фаза», спиновая жидкость, магнитное плато и т.п. В работе [70] исследован пример изинговского двухподрешеточного антиферромагнетика. В результате было показано, что такие фазовые состояния реализовываются, но при этом тип фазовых переходов и области сосуществования фаз различаются. Кроме того, на реализацию рассмотренных в [70-77] фаз оказывает влияние тип и величина одноионной анизотропии.

Исходя из всего выше сказанного, можно утверждать, что тема данной диссертационной работы является актуальной, и может представлять интерес не только как фундаментальные исследования магнитоупорядоченных систем, но с точки зрения прикладных исследований

Связь работы с научными программами, планами, темами. Работа была выполнена на кафедре теоретической физики Физико-технического института Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского. Исследования, входящие в содержание диссертации, были выполнены в рамках следующих проектов:

- Проект 20-32-90027 «Влияние внешнего магнитного поля на динамику и статику сильно анизотропного негейзенберговского двухподрешеточного магнетика», 2020-2022 гг. (РФФИ и Республика Крым);

- Проект 20-42-910003 «Динамические и статические свойства сильно анизотропных антиферро- и ферримагнетиков» 2020г. (РФФИ);
- Проект 23-22-00054 «Продольная динамика негейзенберговских и сильно анизотропных магнетиков» (РНФ).

Цели и задачи исследования. Цель данной диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании фазовых состояний, спектров элементарных возбуждений и описании фазовой картины негейзенберговских магнетиков со спином магнитного иона $S=1$ с учетом влияния одноионной анизотропии, внешнего магнитного поля, а так же влияния температуры на динамические и статические свойства негейзенберговских магнетиков. В соответствии с основной целью работы были поставлены и решены следующие задачи:

1. Определить устойчивые фазовые состояния, реализуемые в двухподрешеточном негейзенберговском магнетике с одноосной анизотропией и спином магнитного иона $S=1$.
2. Выяснить влияние одноосной анизотропии на динамические свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S=1$.
3. Исследовать влияние температуры на статические и динамические свойства одноподрешеточного негейзенберговского магнетика с легкоосной одноионной анизотропией и спином магнитного иона $S=1$.
4. Определить влияние внешнего магнитного поля на фазовые состояния и спектральные закономерности изинговского сильно анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$.

Объектом исследования являются спиновые немагики с одноосной одноионной анизотропией при произвольной температуре, изинговские сильно анизотропные легкоплоскостные антиферромагнетики во внешнем магнитном поле.

Предметом исследования являются фазовые состояния, статические и динамические свойства анизотропных негейзенберговских и изинговских магнетиков.

Методы исследования. Для описания магнитных систем, характеризующихся как дипольными (векторными), так и квадрупольными (тензорными) параметрами порядка наиболее удобна диаграммная техника для операторов Хаббарда. Данный метод применим как для одноподрешеточных, так и для двухподрешеточных магнетиков с произвольным видом обменных взаимодействий.

Для описания спектров элементарных возбуждений в магнитных системах была использована диаграммная техника для функций Грина.

Результаты, представленные в данной работе, были получены как аналитически, так и с применением численных методов и согласуются с уже известными решениями и экспериментальными результатами. Помимо этого, одним из критериев проверки достоверности полученных результатов был переход к предельным случаям. Для визуализации ряда фазовых диаграмм и графиков зависимостей между параметрами были использованы численные методы анализа.

Научная новизна полученных результатов. Все поставленные в рамках данной диссертационной работы задачи были сформулированы и решены впервые. Как результат решения этих задач были получены следующие новые результаты:

1. Впервые было показано, что в анизотропном спиновом нематике со спином магнитного иона $S=1$ учет одноионной анизотропии типа «легкая ось», или «легкая плоскость» не изменяют стабильные фазовые состояния, аналогичные изотропной системе. В обоих случаях в системе реализуются две фазы, характеризующиеся векторными параметрами порядка (ферро- и антиферромагнитная) и две фазы, характеризующиеся тензорными параметрами порядка (нематическая и ортогонально нематическая).

2. Впервые было показано, что учет одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» в негейзенберговском магнетике со спином $S = 1$ приводит к тому, что фазовые переходы перестают быть вырожденными. Наблюдаемые фазовые переходы являются фазовым переходом первого рода, протекающим через область сосуществования фаз. Кроме того, было показано, что в рассматриваемом случае возможен прямой фазовый переход между нематической и ортогонально нематической фазами, в то время как в легкоосном и изотропном случаях данный фазовый переход не существовал, а ему соответствовала $SU(3)$ - точка.

3. Впервые был проведен численный анализ векторных и тензорных параметров порядка в ферромагнитной и нематической фазах негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ и одноионной анизотропией типа «легкая ось» с учетом влияния тепловых флуктуаций. Были определены температуры фазовых переходов «ферромагнетик – парамагнитная фаза» и «спиновый нематик – парамагнитная фаза». Было показано, что с возрастанием величины легкоосной одноионной анизотропии критические температуры так же возрастают, поскольку наличие легкоосной анизотропии препятствует разрушению магнитного упорядочения тепловыми флуктуациями. Кроме того, было показано, что критическая температура существенно зависит от тензорных параметров порядка и величины биквадратичного обменного взаимодействия.

4. Впервые были исследованы динамические свойства негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ и одноионной анизотропией типа «легкая ось» при $T \neq 0$. Было показано, что в данной системе реализуется дополнительная ветвь элементарных возбуждений, связанная с переходом магнитного иона из основного состояния в наиболее возбужденное. Кроме того, было показано, что в ферромагнитной фазе при низких значениях температуры и малых значениях константы одноионной анизотропии «поперечные» ветви являются «запутанными» между собой, а с ростом температуры и анизотропии начинают «расталкиваться». В нематической фазе «поперечные» ветви возбуждений не являются запутанными.

5. Впервые была построена фазовая диаграмма для легкоосного анизотропного негейзенберговского ферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ при произвольных значениях температуры и константы одноионной анизотропии. Было показано, что линия фазового перехода не зависит от температуры и величины константы одноионной анизотропии и в точности совпадает с линией фазового перехода при $T=0$. Кроме того, было показано, что фазовый переход между ферромагнитной и нематической фазой является вырожденным фазовым переходом первого рода.

6. Впервые было показано, что в изинговском сильно анизотропном антиферромагнетике со спином магнитно иона $S=1$ находящемся во внешнем магнитном поле возможна реализация только «коллинеарных» фазовых состояний (ферромагнитного, квадрупольного и фазы с «пониженным» спином), а реализация неколлинеарных фаз энергетически не выгодна. Реализация фазы с «пониженным» спином примечательна тем, что в этой фазе одна из подрешеток характеризуется векторными параметрами порядка, а вторая подрешетка – тензорными. Кроме того, было показано, что все фазовые переходы между устойчивыми фазами являются фазовыми переходами первого рода.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. В спиновом нематике с одноосной одноионной анизотропией возможна реализация четырех стабильных фазовых состояний: ферромагнитного, нематического, антиферромагнитного и ортогонально нематического.
2. Анизотропия типа «легкая ось» сохраняет тип фазовых переходов в спиновом нематике с одноосной одноионной анизотропией, аналогичный изотропному случаю, но существенно влияет на динамические свойства магнетика.
3. Анизотропия типа «легкая плоскость» снимает вырождение с фазовых переходов, изменяет их на фазовые переходы первого рода, и приводит к появлению прямого фазового перехода между нематическими фазами. Это означает, что, в отличие от изотропной системы, в данном случае $SU(3)$ точка исчезает.

4. В легкоосном негејзенберговском спиновом нематике со спином магнитного иона $S=1$ учет влияния температуры приводит к появлению третьей ветви элементарных возбуждений. Кроме того, учет температурных флуктуаций приводит к особенностям в поведении «поперечных» ветвей элементарных возбуждений в ферромагнитной и нематической фазах.
5. Фазовый переход в легкоосном негејзенберговском спиновом нематике со спином магнитного иона $S=1$ при произвольных значениях температуры и константы одноионной анизотропии является вырожденным фазовым переходом первого рода и не зависит от значений температуры и легкоосной анизотропии.
6. В изинговском легкоплоскостном сильно анизотропном антиферромагнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S=1$ возможна реализация только коллинеарных фазовых состояний: ферромагнитного, квадрупольного и фазы с «пониженным спином», в которой одна подрешетка характеризуется векторными параметрами порядка, а вторая – тензорными.
7. Фазовые переходы в изинговском легкоплоскостном сильно анизотропном магнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S=1$ являются фазовыми переходами первого рода.

Достоверность полученных результатов обусловлена адекватным выбором использованных методов анализа магнитоупорядоченных систем, как с точки зрения применимости физических законов в рамках рассматриваемых задач, так и с точки зрения корректности математических вычислений. Выбранный способ позволит провести проверку полученных результатов путем перехода к более простым магнитным системам, поведение которых описано и общеизвестно.

Научная и практическая ценность полученных результатов.

Магнитные системы, исследованные в данной диссертационной работе, получили наиболее полное и универсальное описание свойств при различных параметрах обменных интегралов и одноосной анизотропии. Описаны все возможные устойчивые состояния, реализуемые для каждой из систем. Это позволяет утверждать, что полученные результаты можно использовать при

создании магнитных материалов при заданных заранее свойствах. Кроме того, результаты исследования можно использовать для обоснования и интерпретации экспериментальных данных.

Апробация результатов диссертации.

Результаты, представляемые к защите, представлялись на научных международных конференциях, таких как Двадцать пятая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных «ВНКСФ – 25», Россия, Республика Крым, Севастополь, 2019; Международная научная конференция «Уфимская осенняя математическая школа-2020», Россия, Республика Башкортостан, Уфа, 2020; XXVII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов», Россия, Москва, 2020; 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Palm Beach, FL, United States, 2020; International Conference “Functional Materials” ICFM’21. Russia, Crimea, Alushta, 2021; Международная конференция ФИЗИКА.СПБ/2021, Россия, Санкт-Петербург, 2021; XII Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании»: спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа - 2020», посвященной 100-летию профессора БашГУ Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича, Россия, Республика Башкортостан, Уфа, 2021.

Публикации.

Предоставляемые к защите результаты были опубликованы в 4 статьях в журналах, входящих в список ВАК Российской Федерации и наукометрические базы данных SCOPUS и Web of Science, а так же в докладах, опубликованных в материалах конференций.

Личный вклад автора.

Автор принимала активное участие в постановке задач, их решении, а также в интерпретации и анализе полученных результатов. В работе [74] автором выполнен анализ свободной энергии, определены устойчивые фазовые состояния негейзенберговского легкоплоскостного магнетика со спином магнитного иона

$S=1$. В работе [77] автором были обобщены результаты исследования на легкоосный негейзенберговский магнетик со спином магнитного иона $S=1$. Были определены спектры элементарных возбуждений для ферромагнитной и нематической фаз и построена фазовая диаграмма для негейзенберговского магнетика с учетом влияния одноосной анизотропии. В работе [78] результаты исследования для негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S=1$ с учетом влияния легкоосной анизотропии были расширены и определены спектры элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе. В работе [79] автором были исследованы стабильные фазовые состояния, определены спектры элементарных возбуждений для ферромагнитной и квадрупольной фазы. Построена картина фазовых переходов для изинговского легкоплоскостного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 разделов, заключения и списка используемой литературы из 100 наименований. Общий объем диссертации составляет 110 страниц текста с 33 рисунками.

Во **введении** проведен анализ проблемы, раскрыта ее значимость на сегодняшний день; сформулированы и поставлены цели и задачи исследований; уточняется достоверность и область применения полученных результатов.

В **первом разделе** исследуется модель негейзенберговского магнетика с одноосной анизотропией и спином магнитного иона $S=1$. Рассматриваются возможные фазовые состояния и условия реализации в зависимость от соотношений между материальными параметрами системы. Показывается возможность реализации нематических состояний для данной магнитной системы. Определены соотношения материальных параметров, при которых реализуются нематические фазы. Определены спектры элементарных возбуждений для каждого из фазовых состояний. Определен тип фазовых переходов в случае анизотропии типа «легкая ось» и анизотропии типа «легкая плоскость». Показано, что учет влияния легкоосной анизотропии сохраняет картину фазовых переходов в сравнении с изотропным случаем, а учет влияния легкоплоскостной анизотропии приводит к снятию вырождения фазовых

переходов первого рода между стабильными фазами и реализации прямого фазового перехода между нематическими фазами.

Во **втором разделе** рассматривается модель негейзенберговского магнетика с легкоосной анизотропией и спином магнитного иона $S=1$ и учетом влияния температуры ($T \neq 0$). Определены зависимости параметров порядка от температуры и показано, что с ростом константы одноионной анизотропии увеличивается температура перехода в парамагнитную фазу из ферромагнитной и нематической фаз. Определены спектры элементарных возбуждений для ферромагнитной и нематической фаз с учетом влияния температуры. Показано, что учет влияния температуры приводит к появлению третьей ветви элементарных возбуждений.

В **третьем разделе** исследована модель изинговского сильно анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ во внешнем магнитном поле. Были определены фазовые состояния, реализуемые в системе и условия протекания фазовых переходов между ними. Было показано, что в данной магнитной системе возможна реализация только коллинеарных фазовых состояний. Кроме того, было показано, что одно из них, фаза с «низким спином» реализуется, когда одна подрешетка характеризуется дипольными параметрами порядка, а другая – квадрупольными параметрами порядка. Определено, что все фазовые переходы, реализуемые в системе, являются фазовыми переходами первого рода.

В **заключении** представлены основные результаты, полученные в диссертационной работе.

РАЗДЕЛ 1. НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ МАГНЕТИК С ОДНООСНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Известно, что для магнитоупорядоченных систем, модель предложенная Гейзенбергом [13,14], построенная на спиновом инварианте вида $(\vec{S}_{n_1} \vec{S}_{n_2})$ не является единственной и становится неприменимой [15-21], если значение спина системы превышает $\frac{1}{2}$. И в общем случае спиновые инварианты можно представить следующим образом: $(\vec{S}_{n_1} \vec{S}_{n_2})^{2S}$, где S – величина спина магнитного иона. Учет высших спиновых инвариантов приводит к появлению ряда интересных квантовых эффектов [15]. К примеру, в магнитных системах, в которых биквадратичное обменное взаимодействие сравнимо или превосходит билинейное обменное взаимодействие возможно возникновение фазовых состояний, характеризующихся тензорными параметрами порядка и получивших название спиновые нематики [16,17,19]. Так магнитное упорядочение при $\langle \vec{S} \rangle = 0$ зависит от квадрупольных средних вида $S_{\alpha\beta} = \langle S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \rangle$, где $\alpha, \beta = x, y, z$. Геометрически представить данный тензор можно используя эллипсоид с главными осями вдоль выделенных направлений e_x, e_y, e_z , и полуосями равными $\langle (S^x)^2 \rangle$, $\langle (S^y)^2 \rangle$ и $\langle (S^z)^2 \rangle$, связанных между собой соотношением $\langle (S^x)^2 \rangle + \langle (S^y)^2 \rangle + \langle (S^z)^2 \rangle = S(S+1)$ [15,21].

Аналогично к подобным состояниям может приводить учет одноионной анизотропии, сравнимой с обменным взаимодействием [41]. Помимо ряда особенностей статических свойств, в динамике сильно анизотропной системы так же наблюдается новый тип возбуждений – продольные магноны, что приводит к появлению так называемых «продольных» колебаний, в которых модуль магнитного момента изменяется по длине.

Исследование спиновых нематиков представляет интерес, поскольку для таких магнетиков характерно возникновение необычных свойств. В кристаллических магнитных системах такие состояния активно изучались на протяжении последних десятилетий [29], затрагивая случай низкоразмерных магнетиков [25,29]. Ультрахолодные атомные газы с целыми значениями спина [27,28] так же вызывают интерес исследователей, поскольку в таких системах, находящихся в оптических ловушках или решетках [27] возможно возникновение бозе-конденсата. Отметим, что для таких конденсатов негейзенберговское обменное взаимодействие спинов является необходимым условием, приводящим к реализации нематических фаз.

Реальным материалом, в котором возможна реализация нематического состояния, является низкоразмерный магнетик $LiCuVO_4$, кроме того, вероятными кандидатами на обнаружение подобных устойчивых состояний являются соединения таллия, алюминаты редкоземельных металлов и соединения на основе никеля и железа. Примечательно, что в некоторых из них, например $CeFeBr_3$ и $CeFeCl_3$ величина константы одноионной анизотропии превосходит величину константы обменного взаимодействия [48,49].

Цель первого раздела диссертации состоит в исследовании влияний одноосной анизотропии на устойчивые фазовые состояния негейзенберговского магнетика со спином магнитно иона $S = 1$.

1.1 НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ АНТИФЕРРОМАГНЕТИК С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ОСЬ»

1.1.1 МОДЕЛЬ. АНАЛИЗ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Рассмотрим негейзенберговский антиферромагнетик с одноионной анизотропией типа «легкая ось». Значение спина магнитного иона будем принимать равным единице ($S = 1$), поскольку это минимальное значение спина,

при котором реализуются как биквадратичное обменное взаимодействие, так и одноионная анизотропия. В рамках данного исследования, ограничимся рассмотрением только решеток, допускающих разбиение на две эквивалентные подрешетки, например, кубической или квадратной. Гамильтониан такой модели можно представить в виде:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left[J_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2}) + K_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2})^2 \right] - \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^z)^2, \quad (1.1)$$

где $S_{n_i}^j$ – компоненты спинового оператора в n -ом узле i -й подрешетки; J, K – константы билинейного и биквадратичного обменного взаимодействия, соответственно; $\beta > 0$ – константа одноионной анизотропии типа «легкая ось».

Для начала ограничимся более простым случаем и будем рассматривать систему при низких температурах ($T \ll T_c$ – температура Кюри). Внешнее магнитное поле положим равным нулю. При этом магнитные фазовые переходы могут происходить по материальным константам системы (β, J_0, K_0 , где J_0, K_0 – нулевые фурье-компоненты билинейного и биквадратичного обмена соответственно). В контексте данной задачи не принципиально, как именно происходит изменение материальных параметров системы.

Перепишем гамильтониан (1.1) в терминах спиновых операторов и операторов Стивенса [80], которые являются генераторами группы $SU(3)$ симметрии исследуемой системы:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left(J_{n_1, n_2} - \frac{1}{2} K_{n_1, n_2} \right) (S_{n_1}^x S_{n_2}^x + S_{n_1}^y S_{n_2}^y + S_{n_1}^z S_{n_2}^z) - \\ & - \frac{1}{4} \sum_{n_1, n_2} K_{n_1, n_2} \left(\frac{1}{3} O_{2n_1}^0 O_{2n_2}^0 + \sum_{t=2, xy, yz, zx} O_{2n_1}^t O_{2n_2}^t \right) - \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^z)^2. \end{aligned} \quad (1.2)$$

В гамильтониане (1.2) легкоосная магнитная анизотропия приводит к ориентации магнитных моментов подрешеток вдоль оси квантования OZ, поскольку обменные взаимодействия инвариантны относительно поворотов магнитных моментов.

Связь операторов Стивенса [80] и спиновыми операторами выглядит следующим образом:

$$O_2^0 = 3(S^z)^2 - S(S+1); O_2^2 = (S^x)^2 - (S^y)^2; O_2^{ij} = S^i S^j + S^j S^i; \\ i, j = x, y, z; i \neq j$$

Выделяя в гамильтониане (1.2) средние поля, связанные как с векторными $\langle S^z \rangle$, так и с тензорными $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$ параметрами порядка, получим одноузельный гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\beta}{2}(S^z)^2 - \bar{H}S^z - B_2^0 O_2^0 - B_2^2 O_2^2 + \varepsilon, \quad (1.3)$$

$$\text{где } \bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^2 \rangle; B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0; B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2$$

$$\text{и } \varepsilon = \frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{12} (q_2^0)^2 + \frac{K_0}{4} (q_2^2)^2.$$

При этом было учтено, что недиагональные тензорные параметры порядка q_2^t (xy, yz, xz) равны нулю, а отличны от нуля только q_2^0 и q_2^2 .

Для нахождения энергетических уровней рассматриваемой системы воспользуемся уравнением Шредингера. Решениями этого уравнения для одноузельного гамильтониана (1.3) являются следующие выражения:

$$E_1 = -\frac{\beta}{2} - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta; \\ E_0 = 2B_2^0; \\ E_{-1} = -\frac{\beta}{2} + \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 + B_2^2 \sin 2\theta; \quad (1.4)$$

и собственные волновые функции магнитного иона:

$$|\psi(1)\rangle = \cos\theta |1\rangle + \sin\theta |-1\rangle, |\psi(0)\rangle = |0\rangle, |\psi(-1)\rangle = -\sin\theta |1\rangle + \cos\theta |-1\rangle. \quad (1.5)$$

Здесь θ параметр $u-v$ преобразования Боголюбова, явный вид которого определяется выражением $\bar{H} \sin 2\theta = B_2^2 \cos 2\theta$. Важно отметить, что параметр θ не зависит от величины константы одноионной анизотропии β и, как и в

изотропном случае [26], определяется только константами обменного взаимодействия.

Для построения операторов Хаббарда $X^{MM'} = |M\rangle\langle M'|$ [81-83,97-99] необходим полный набор собственных волновых функций системы (1.5) одноузельного гамильтониана (1.3). Представление гамильтониана (1.3) с использованием операторов Хаббарда [81-83,97-99], позволит наиболее рациональным способом вычислить статические и динамические характеристики рассматриваемой системы, учитывая реализацию нематических фаз. Переписанный гамильтониан является диагональным $\hat{H}_0 = \sum_M E_M X^{MM}$.

Как следует из выражения для уровней энергии (1.4) нижайшим уровнем энергии является E_1 , следовательно, параметры порядка системы можно переписать в виде:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta; q_2^0 = 1; q_2^2 = \sin 2\theta. \quad (1.6)$$

Поскольку в данном разделе рассматривается случай низких температур ($T \rightarrow 0$), то свободная энергия системы в приближении среднего поля совпадает с нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона E_1 . Плотность свободной энергии можно записать в следующем виде:

$$F = -\frac{\beta}{2} - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta. \quad (1.7)$$

Минимизируя выражение (1.7) параметру θ становится возможным определить устойчивые фазовые состояния при различных соотношениях материальных параметров системы.

При $J_0 > K_0 > 0$ и $\theta = 0$ в системе реализуется одноподрешеточное ферромагнитное упорядочение (FM). В этом случае нижайшим уровнем энергии является, E_1 и параметры порядка принимают значения:

$$\langle S^z \rangle = 1; q_2^0 = 1; q_2^2 = 0, \quad (1.8)$$

а волновая функция основного состояния $|\psi(1)\rangle = |1\rangle$.

В ферромагнитной фазе квадрупольные средние определяются выражениями $\langle (S^z)^2 \rangle = 1; \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1/2$. Отсюда следует, что геометрическим образом квадрупольных моментов является эллипсоид вращения в спиновом пространстве. При этом симметрию этого эллипсоида определяет направление вектора магнитного момента, направленного вдоль главной оси эллипсоида, совпадающей с осью легкоосной анизотропии. Отметим так же, что выражения (1.8) справедливы и для изотропного случая. В данной задаче эти выражения выполняются, поскольку магнитное упорядочение в ферромагнитной фазе определяется обменным взаимодействием и поэтому в этом состоянии $\beta < J_0$.

В случае если $J_0 < K_0$, но при этом $J_0 > 0$ и $K_0 > 0$, параметр унитарного преобразования приобретает значение $\theta = \pi/4$, что соответствует нематическому упорядочению (SN). Аналогично ферромагнитной фазе, волновая функция основного состояния имеет вид: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle)$, а нижайшим уровнем энергии является E_1 . Параметры порядка приобретают следующие значения:

$$\langle S^z \rangle = 0; q_2^0 = 1; q_2^2 = 1. \quad (1.9)$$

В нематической фазе квадрупольные средние принимают следующие значения: $\langle (S^z)^2 \rangle = 1; \langle (S^x)^2 \rangle = 1; \langle (S^y)^2 \rangle = 0$. Это позволяет утверждать, что геометрическим представлением тензора квадрупольных моментов в спиновом пространстве является вырожденный квадрупольный эллипсоид – диск, лежащий в плоскости ZOX . Вектор-директор становится перпендикулярным плоскости этого диска. Так же, достаточно очевидно, что форма эллипсоида в нематической фазе отличается от формы эллипсоида в ферромагнитной фазе. Феноменологический подход позволяет ожидать существование безактивационных мод для коллективной системы таких эллипсоидов. Энергия одноионной анизотропии в нематической фазе меньше энергии обменного

взаимодействия $\beta < J_0, K_0$, что причиной чего является отличное от нуля значение квадрупольного параметра порядка $q_2^2 = 1$, аналогично ферромагнитной фазе.

Теперь перейдем к рассмотрению двухподрешеточного магнетика. В этом случае константа билинейного обменного взаимодействия становится отрицательной ($J_0 < 0$). Если, в такого рода негейзенберговском магнетике, константа билинейного обменного взаимодействия превышает константу биквадратичного обменного взаимодействия по модулю ($|J_0| > |K_0|$), то можно говорить о реализации антиферромагнитного состояния (AFM). Волновые функции основного состояния для каждой подрешетки $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_{-1}\rangle = |-1\rangle$, а параметры порядка для подрешеток выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 1; q_{2(1)}^0 = 1; q_{2(1)}^2 = 0; \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= -1; q_{2(2)}^0 = 1; q_{2(2)}^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Очевидно, что в этом случае, константа одноионной анизотропии не превышает значения констант обменного взаимодействия.

Рассмотрим случай, когда обе константы обменного взаимодействия имеют отрицательные значения и при этом $|J_0| < |K_0|$. Такое фазовое состояние соответствует ортогонально нематическому упорядочению (ON) [15,16,20,21,23,26,30,52]. Для данной фазы параметр θ приобретает значения

$\theta_{1,2} = \pm \pi/4$ соответственно, для каждой из магнитных подрешеток. Волновые

функции основного состояния выглядят следующим образом: $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle)$

и $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle)$. Параметры порядка каждой магнитной подрешетки:

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 0; q_{2(1)}^0 = 1; q_{2(1)}^2 = 1; \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= 0; q_{2(2)}^0 = 1; q_{2(2)}^2 = -1. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Имеет смысл отдельно рассмотреть значения квадрупольных средних, чтобы лучше понять физическую природу этой фазы (рис.1.1).

Так, для каждой из подрешеток $\langle (S_{(1)}^x)^2 \rangle = 1; \langle (S_{(1)}^y)^2 \rangle = 0; \langle (S_{(1)}^z)^2 \rangle = 1$ и $\langle (S_{(2)}^x)^2 \rangle = 0; \langle (S_{(2)}^y)^2 \rangle = 1; \langle (S_{(2)}^z)^2 \rangle = 1$. Вектор-директор каждой из подрешеток ортогонален другому, на что указывает такой вид средних значений тензора квадрупольных моментов. Это позволяет назвать такое состояние ортогонально нематическим. Квадрупольный эллипсоид, представляющий первую подрешетку, имеет форму диска в плоскости ZOX , а квадрупольный эллипсоид второй подрешетки – диск в плоскости ZOY (рис.1.2). Учитывая, что плоскости ZOX и ZOY являются ортогональными между собой, то и фазовое состояние получило название ортогонально нематическая фаза.

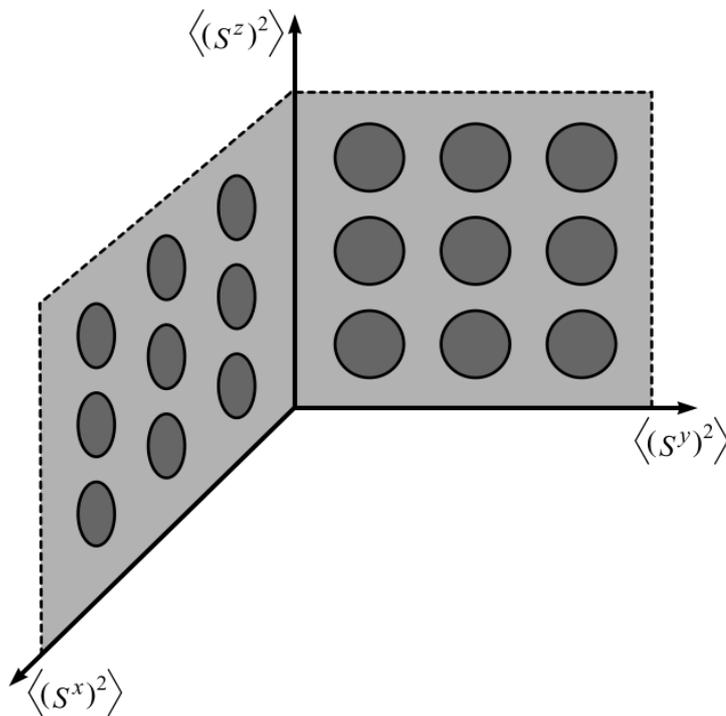


Рисунок 1.1. Ориентация геометрических образов тензорных параметров порядка в спиновом пространстве для двух подрешеток в ортогонально нематической фазе

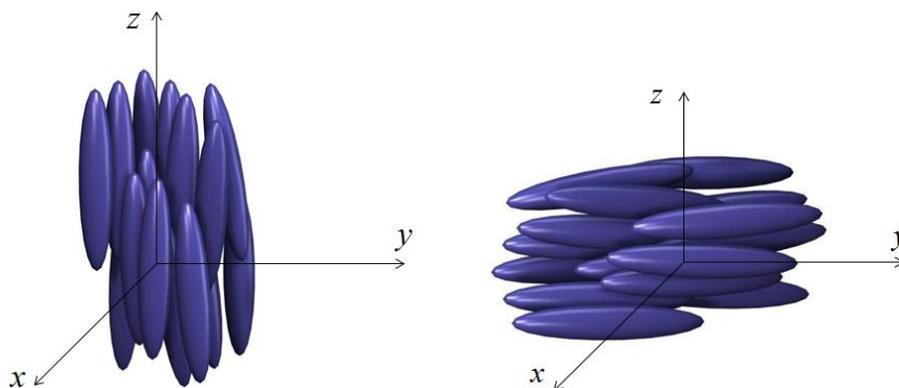


Рисунок 1.2. Геометрическое представление ортогонально нематической фазы

1.1.2 АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

В рассматриваемой магнитной системе с $S=1$ анализ динамических свойств удобнее всего проводить, с использованием метода функций Грина [84-87,97-99] для операторов Хаббарда. Для исследования сильно коррелированных систем и в рамках рассматриваемой задачи этот метод является наиболее адекватным. Несмотря на достаточно громоздкие выкладки, метод функций Грина для операторов Хаббарда позволяет аналитически вычислить спектры элементарных возбуждений, включая всю область параметров гамильтониана и волновых векторов с использованием некоторых приближений.

Хорошо известно, что энергетический спектр сильно коррелированных систем определяется полюсами функций Грина [84-87], а малым параметром, позволяющим применить теорию возмущений целесообразно выбрать обратный радиус взаимодействия.

Мацубаровские функции Грина определим следующим образом:

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

где \hat{T} – оператор Вика, $\tilde{X}_n^\lambda(\tau) = \exp(\mathcal{H}\tau)X_n^\lambda \exp(-\mathcal{H}\tau)$ – оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, $\lambda = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{2S+1}, M_1, M_2, \dots, M_{2S+1}$;

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}.$$

Дальнейшие вычисления мы будем проводить, учитывая приближение среднего поля, поэтому нам понадобится только «поперечная» часть обменного гамильтониана, представленная в виде:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{n, n', \lambda, \lambda'} \left\{ \mathbf{c}(\lambda), \hat{A}_{nn'} \mathbf{c}(\lambda') \right\} X_n^\lambda X_{n'}^{\lambda'},$$

где компоненты вектора $\mathbf{c}(\lambda)$ определяются из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда, а матрицу $\hat{A}_{nn'}$ можно представить в виде:

$$\hat{A}_{n_1 n_2} = \hat{A}_{n_1 n_2}^{(3)} \oplus \hat{A}_{n_1 n_2}^{(5)}.$$

Следовательно, фурье-образ системы уравнений для функций Грина записывается в следующем виде:

$$G^{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega_n) = \Sigma^{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega_n) - \frac{1}{2} \Sigma^{\lambda\lambda_1}(\mathbf{k}, \omega_n) \left\{ \mathbf{c}(-\lambda_1), \hat{A}(\mathbf{k}) \mathbf{c}(\lambda_2) \right\} G^{\lambda_2\lambda'}(\mathbf{k}, \omega_n),$$

и фурье-компоненты $G^{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega_n)$ отличны от нуля только для четных частот $\omega_n = 2\pi nT$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Система уравнений для полных функций Грина в (\mathbf{k}, ω) – графически может быть представлена так:



Рисунок 1.3. Графическое уравнение на функции Грина

Неприводимые по Ларкину графики могут быть следующих типов:

$$\Sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n), \Sigma^{\alpha M}(\mathbf{k}, \omega_n), \Sigma^{M\alpha}(\mathbf{k}, \omega_n), \Sigma^{MM'}(\mathbf{k}, \omega_n).$$

В нулевом приближении по обратному радиусу взаимодействия система уравнений для функции Грина существенно упрощается, поскольку в рассматриваемом приближении:

$$\begin{aligned}\Sigma^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n) &= \delta_{\alpha\alpha} b(\alpha) G_0^\alpha(\omega_n), \quad \Sigma^{\alpha M}(\mathbf{k}, \omega_n) = \Sigma^{M\alpha}(\mathbf{k}, \omega_n) = 0, \\ \Sigma^{MM'}(\mathbf{k}, \omega_n) &= -\frac{n_{MM'}}{T} \delta_{\omega_n, 0},\end{aligned}$$

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 алгеброй операторов Хаббарда. Таким образом, в нулевом приближении по обратному радиусу взаимодействия дисперсионное уравнение имеет вид:

$$\det \|\delta_{ij} + x_{ij}\| = 0; \quad i, j = 1, 2, \dots, 8, \quad (1.12)$$

где $x_{ij} = G_0^\alpha(\omega_n) b(\alpha) c_{ij}(\alpha)$, $c_{ij}(\alpha, \beta) = a_{ik}(\alpha, \beta) A_{kj}$; $a_{ik}(\alpha, \beta) = c_i(\alpha) c_k(-\beta)$.

Дисперсионное уравнение (1.12) справедливо при различных соотношениях между обменными интегралами, т.е. для различных фазовых состояний, поскольку техника операторов Хаббарда позволяет точно учесть все одноузельные корреляторы.

Теперь перейдем к анализу фазовых состояний и спектров элементарных возбуждений, которые реализуются в магнетике, описываемым обменным гамильтонианом (1.1).

Для начала рассмотрим ферромагнитную фазу. Как было указано выше, параметры порядка, описывающие данную фазу, определяются выражением (1.8). Легко заметить, что один из квадрупольных параметров порядка равен нулю ($q_2^2 = 0$), а второй имеет постоянное значение и не влияет на динамику рассматриваемой системы ($q_2^0 = 1$). Это позволяет сделать вывод, что в ферромагнитной фазе рассматриваемой магнитной системы симметрия магнитного момента полностью определяет симметрию квадрупольных средних.

Дисперсионное уравнение (1.12) позволяет определить спектры элементарных возбуждений в FM фазе. Поскольку в данной задаче

рассматривается случай низких температур, то в системе имеются две ветки возбуждения магнов, так называемые «продольная» и «поперечная», выражения для которых имеют вид:

$$\varepsilon_1(k) = 2J_0 - K_0 - K(k); \quad (1.13)$$

$$\varepsilon_2(k) = J_0 - J(k) + \frac{\beta}{2}. \quad (1.14)$$

Как можно видеть из (1.13) и (1.14) при значении параметра одноионной анизотропии стремящегося к нулю ($\beta \rightarrow 0$), спектры магнов приобретают хорошо известный вид, описанный в работе [26], для изотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона равным единице.

«Продольная» мода колебаний $\varepsilon_1(k)$ описывает продольные колебания модуля вектора намагниченности, направление которых остается параллельным главной оси квадрупольного эллипсоида.

Мода $\varepsilon_2(k)$ – это мода «поперечных» колебаний, характерная для ферромагнетика. Как показывает анализ, колебания в этом случае связаны с поворотом главной оси квадрупольного эллипсоида, а в данном случае, с направлением магнитного момента.

Теперь рассмотрим устойчивость ферромагнитной фазы. При малых значениях волнового вектора ($k \rightarrow 0$) мода (1.13) теряет устойчивость на линии $J_0 = K_0$. А вблизи границы зоны Бриллюэна при $k \rightarrow \pi$ ветвь элементарных возбуждений (1.13) теряет устойчивость на $J_0 = 0$. В условиях рассматриваемой модели, учет влияния легкоосной одноионной анизотропии сводится к заданию направлению намагниченности в ферромагнитной фазе, которое в изотропном случае может быть выбрано произвольно. Следовательно, выражения для устойчивости «продольной» моды колебаний должны быть близки к случаю изотропного негейзенберговского магнетика, для которого линия $J_0 = K_0$ является линией потери устойчивости ферромагнитной фазы при переходе в другое одноподрешеточное состояние, а линия $J_0 = 0$ – линией потери

устойчивости при переходе в двухподрешеточной состояние. Как будет показано далее, это нематическая (SN) и ортогонально нематическая (ON) фазы.

Рассмотрим следующее одноподрешеточное состояние, а именно нематическую фазу. Ее параметры порядка определены в выражении (1.9). Нижайшим энергетическим уровнем, как и в случае FM фазы, остается E_1 , но вместе с тем происходит инверсия возбужденных энергетических уровней, то есть $E_0 > E_{-1}$, откуда следует, что учет легкоосной одноионной анизотропии снимает, наблюдаемое в изотропном случае, вырождение энергетических уровней [26]. Из выражений для параметров порядка (1.9) следует что, среднее значение магнитного момента, приходящегося на узел кристаллической решетки равно нулю, а вот квадрупольные параметры порядка отличны от нуля. И как было указано выше, геометрическим образом данной фазы в спиновом пространстве является эллипсоид вращения, кардинально отличающийся от геометрического образа ферромагнитной фазы.

Дисперсионное уравнение (1.12) позволяет определить спектры элементарных возбуждений в исследуемой фазе:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(K_0 - K(k))(K_0 + K(k) - 2J(k))}; \quad (1.15)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (1.16)$$

Заметим, что при предельном переходе к изотропному случаю ($\beta \rightarrow 0$) спектры полностью переходят в известное выражение для спектров элементарных возбуждений в SN фазе [26]. Главным отличием является вырождение энергетических уровней $E_0 = E_{-1}$ в изотропном случае, а значит, моды $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_2(k)$ совпадают между собой, в то время как данной задаче такого не происходит из-за наличия одноионной легкоосной анизотропии. Поскольку симметрия нематической фазы определяется квадрупольным эллипсоидом, «продольная» ветвь колебаний $\varepsilon_1(k)$ описывает колебания главной оси квадрупольного эллипсоида, определяемые тензорным параметром порядка ($q_2^0 = 1$), а

«поперечная» ветвь колебаний $\varepsilon_2(k)$ описывает прецессию главной оси квадрупольного эллипсоида вокруг направления легкоосной анизотропии.

Анализ спектров (1.15) и (1.16), показывает, что в длинноволновом пределе, то есть при волновом векторе стремящимся к нулю ($k \rightarrow 0$), щель в спектрах исчезает при $J_0 = K_0$, откуда следует, что эта линия является фазового перехода в ферримагнитную фазу. В то же время, на границе зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$), спектр (1.15) становится неустойчивым на линии $J_0 = 0$, что соответствует переходу в двухподрешеточное состояние и как дальше будет показано, реализуется переход SN фаза – AFM фаза. Здесь важно отметить, что линии фазовых переходов в рассматриваемом случае, совпадают с известными линиями для фазовых переходов для изотропного негейзенберговского магнетика со значением спина равным единице ($S = 1$) [26].

Как было сказано выше, в рассматриваемой системе возможна реализация двухподрешеточного состояния. Что означает, что константы обменного взаимодействия меняют знаки на противоположные. Первым рассмотрим более простой случай, когда константа билинейного обменного взаимодействия отрицательна ($J_0 < 0$), но по модулю превосходит константу билинейного обменного взаимодействия ($|J_0| > |K_0|$). В этом случае в системе реализуется антиферромагнитная фаза, параметры порядка для каждой из подрешеток которой определяются выражением (1.10). Как видно, среднее значение вектора магнитного момента имеет противоположное значение для первой и второй подрешетки ($\langle (S^z)^2 \rangle = \pm 1$), а квадрупольные параметры порядка имеют совпадающие значения. Откуда можно сделать вывод, что в антиферромагнитном состоянии подрешетки тождественный друг другу, но противоположно ориентированы в спиновом пространстве.

Дисперсионное уравнение (1.12) позволяет определить спектры элементарных возбуждений в явном виде и для рассматриваемой фазы:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(2J_0 - K_0)^2 - K^2(k)}; \quad (1.17)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(K_0 - J_0 + \frac{\beta}{2}\right)^2 - (J(k) - K(k))^2}. \quad (1.18)$$

Как и в случае с ферромагнитной и нематической фазами, при переходе к изотропному случаю ($\beta \rightarrow 0$), выражения (1.17) и (1.18) переходят в выражения для спектров полученных в работе [26]. «Продольный» спектр колебаний (1.17), определяет «продольную» динамику спина, связанную с колебаниями модуля вектора намагниченности, а «поперечный» спектр (1.18) описывает спиновые волны в подрешетках.

Фазовые переходы из AFM фазы в SN фазу или ON фазу происходят путем квантового сокращения спина по модулю, а потому линию соответствующего фазового перехода стоит определять из спектра (1.17). В длинноволновом пределе ($k \rightarrow 0$), энергетическая щель исчезает при $J_0 = 0$, что соответствует фазовому переходу антиферромагнетик – нематик, когда магнитная система снова становится одноподрешеточной. На краю зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$), энергетическая щель в спектре (1.17), исчезает при $J_0 = K_0$, что соответствует переходу AFM – ON.

Теперь перейдем к рассмотрению наиболее интересного случая, когда в системе реализуется ортогонально нематическая фаза. Как было показано выше, в данном случае обе константы обменного взаимодействия отрицательны и константа биквадратичного обменного взаимодействия по модулю превосходит константу билинейного обменного взаимодействия т.е. $|J_0| < |K_0|$.

Параметры порядка, характеризующие каждую из подрешеток, приведены в выражении (1.11). Как и в случае нематической фазы, нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а учет легкоосной анизотропии снимает вырождение с уровней E_0 и E_{-1} , что отличает данную систему от изотропной [26].

Из дисперсионного уравнения (1.12) можно получить следующие решения:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(K_0 + K(k))(K_0 - K(k) + 2J(k))}; \quad (1.19)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (1.20)$$

«Продольный» спектр возбуждений (1.19), описывает появление в рассматриваемой системе дипольного параметра порядка и переход в ферромагнитную или антиферромагнитную фазы. В длинноволновом пределе, энергетическая щель в спектре (1.19) исчезает на прямой $J_0 = 0$, что означает переход в ферромагнитную фазу, в то время как на границе зоны Бриллюэна энергетическая щель в выражении (1.19) исчезнет на линии $J_0 = K_0$, что будет означать переход системы в антиферромагнитную фазу.

1.1.3 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Итак, анализ свободной энергии и спектров элементарных возбуждений в каждой фазе позволяет построить фазовую диаграмму рассматриваемой системы (рис.1.4).

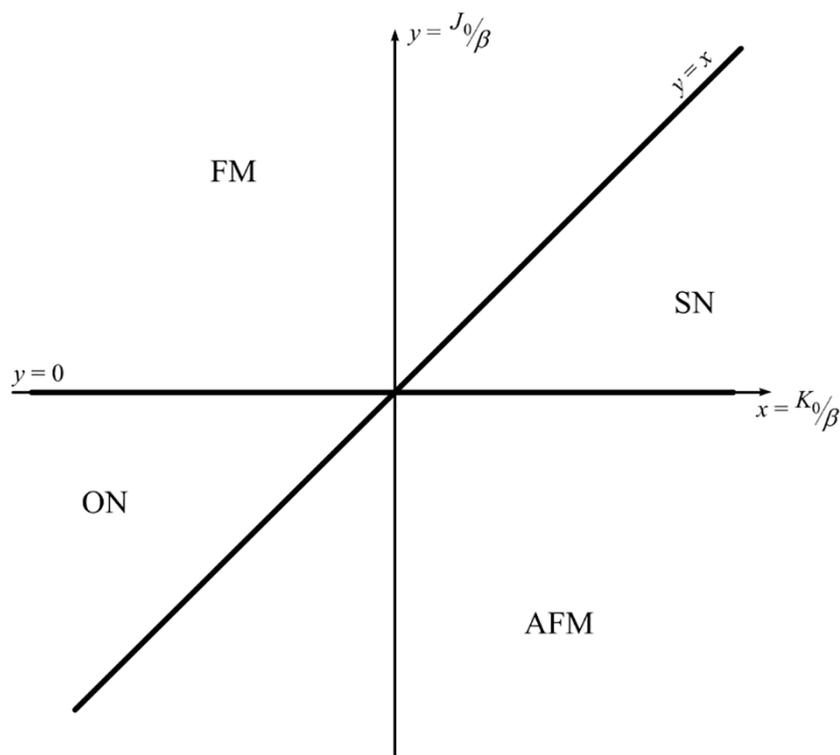


Рисунок 1.4. Фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «легкая ось»

Для удобства и возможности двумерного изображения, фазовая диаграмма построена в приведенных переменных $x = \frac{K_0}{\beta}$ и $y = \frac{J_0}{\beta}$.

Как уже было сказано выше, в системе реализуется четыре стабильных фазовых состояния. Два из них описываются дипольными параметрами порядка (FM и AFM), а еще два описываются квадрупольными параметрами порядка (SN и ON). Все фазовые переходы между устойчивыми фазами являются вырожденными фазовыми переходами первого рода (отсутствует область сосуществования фаз, т.е. линии потери устойчивости совпадают с линиями фазовых переходов), что полностью соответствует изотропному случаю [26]. Следовательно, статические свойства системы с одноионной анизотропией типа «легкая ось» не отличаются от изотропного случая, хотя динамические свойства системы существенно зависят от учета легкоостной анизотропии, убирая вырождение возбужденных энергетических уровней, что проявляется в появлении «поперечной» моды возбуждения в нематических фазах.

1.2 НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ АНТИФЕРРОМАГNETИК С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ПЛОСКОСТЬ»

1.2.1 МОДЕЛЬ. АНАЛИЗ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Теперь рассмотрим негейзенберговский антиферромагнетик с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» и выясним, какие различия будут по сравнению с легкоосным антиферромагнетиком.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left[J_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2}) + K_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2})^2 \right] + \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^z)^2. \quad (1.21)$$

Все дальнейшие исследования будем проводить при таких же условиях, как и в случае анизотропии типа «легкая ось».

Инвариантность обменного взаимодействия в гамильтониане (1.21) приводит к тому, что легкоплоскостная магнитная анизотропия ориентирует магнитные моменты подрешеток в плоскости XOY . Кроме того, для упрощения дальнейших вычислений при расчете спектров элементарных возбуждений повернем систему координат в спиновом пространстве вокруг OZ в одной из подрешеток (для определенности второй) на угол φ в спиновом пространстве:

$$\hat{U}(\varphi) = \prod_{n_2} \exp(i\varphi S_{n_2}^z),$$

а затем совершим еще один унитарный поворот всей системы вокруг OY на угол $\pi/2$, так, что бы OZ стала осью квантования. Тогда обменный гамильтониан, переписанный в терминах операторов Стивенса [80] примет вид:

$$\hat{H}(\varphi) = -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left(J_{n_1, n_2} - \frac{K_{n_1, n_2}}{2} \right) \left[S_{n_1}^x S_{n_2}^x + (S_{n_1}^y S_{n_2}^y + S_{n_1}^z S_{n_2}^z) \cos \varphi \right] -$$

$$-\frac{1}{4} \sum_{n_1, n_2} \left[\frac{1}{12} O_{2n_1}^0 O_{2n_2}^0 (1 + 2 \cos 2\varphi) + \frac{1}{4} O_{2n_1}^2 O_{2n_2}^2 (3 + \cos 2\varphi) + \right. \quad (1.22)$$

$$\left. + \frac{1}{4} (O_{2n_1}^0 O_{2n_2}^2 + O_{2n_1}^2 O_{2n_2}^0) (\cos 2\varphi - 1) + O_{2n_1}^{yz} O_{2n_2}^{yz} \cos 2\varphi + \right.$$

$$\left. + (O_{2n_1}^{xz} O_{2n_2}^{xz} + O_{2n_1}^{xy} O_{2n_2}^{xy}) \cos \varphi + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1,2} (S_{n_i}^x)^2 \right].$$

Выделяя в гамильтониане (1.22) средние поля, зависящие от дипольных и квадрупольных параметров порядка, получим одноузельный гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \beta (S^x)^2 - \bar{H} S^z - B_2^0 O_2^0 - B_2^2 O_2^2, \quad (1.23)$$

здесь: $\bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle$; $B_2^0 = \frac{K_0}{8} \left[\frac{q_2^0}{2} (1 + 3 \cos 2\varphi) + q_2^2 (\cos 2\varphi - 1) \right]$ и

$$B_2^2 = \frac{K_0}{8} \left[q_2^0 (\cos 2\varphi - 1) + q_2^2 (3 + \cos 2\varphi) \right].$$

При этом было учтено, что все квадрупольные средние, за исключением q_2^0 и q_2^2 , равны нулю.

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.23) позволяет определить энергетические уровни магнитной системы:

$$E_1 = \frac{\beta}{2} (1 - \sin 2\theta) - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta;$$

$$E_0 = \beta + 2B_2^0; \quad (1.24)$$

$$E_{-1} = \frac{\beta}{2} (1 + \sin 2\theta) + \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 + B_2^2 \sin 2\theta.$$

Параметр θ является параметром u - v преобразования Боголюбова и может быть получен в явном виде из трансцендентного уравнения

$$(\bar{H} + \eta) \cos \theta = \left(B_2^2 + \frac{\beta}{2} \right) \sin \theta, \quad \text{где } \eta = \sqrt{\bar{H}^2 + \left(B_2^2 - \frac{\beta}{2} \right)^2}.$$

Кроме того, решение уравнения Шредингера позволяет определить собственные функции магнитного иона, совпадающие с волновыми функциями для анизотропного легкоплоскостного магнетика (1.5).

Как и в случае легкоостного магнетика, в терминах операторов Хаббарда гамильтониан (1.23) является диагональным.

Поскольку при рассмотрении задачи мы ограничиваемся областью низких температур ($T \rightarrow 0$), то плотность свободной энергии системы (в расчете на один узел), в приближении среднего поля совпадает с нижайшим энергетическим уровнем E_1 . Таким образом, плотность свободной энергии выглядит следующим образом:

$$F = \frac{\beta}{2}(1 - \sin 2\theta) - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta, \quad (1.25)$$

параметры порядка системы в явном виде:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta; q_2^0 = 1; q_2^2 = \sin 2\theta.$$

Заметим, что выражение для параметров порядка зависит как от материальных параметров магнитной системы, так и от параметра u - v преобразования θ и от угла поворота второй подрешетки φ . Минимизируя плотность свободной энергии по параметрам θ и φ становится возможным определить стабильные фазовые состояния для различных соотношений материальных параметров.

При $J_0 > K_0 > 0$ и значениях $\theta = 0$; $\varphi = 0$ в системе реализуется ферромагнитное состояние. Нижайшим уровнем энергии является E_1 , а волновой функцией основного состояния $|\psi\rangle = |1\rangle$. Параметры порядка выглядят следующим образом:

$$\langle S^z \rangle = 1; q_2^0 = 1; q_2^2 = 0 \quad (1.26)$$

Подробное описание ферромагнитной фазы и ее геометрическое представление уже были приведены выше (см. раздел 1.1.1) и работе [77].

Если же $J_0 < K_0$, но при этом значения констант билинейного и биквадратичного обменного взаимодействия положительны, а параметры θ и φ равны соответственно $\pi/4$ и 0 , то в магнетике реализуется нематическое состояние. В этом случае, как и в ферромагнитной фазе, нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а волновая функция основного состояния имеет вид: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle)$. Параметры порядка в этом случае равны:

$$\langle S^z \rangle = 0; q_2^0 = 1; q_2^2 = 1 \quad (1.27)$$

Пусть теперь константа билинейного обменного взаимодействия принимает отрицательные значения ($J_0 < 0$), в этом случае магнитной системе выгодно разбиение на две подрешетки.

Если при этом константа билинейного обмена превосходит константу биквадратичного обмена по модулю ($|J_0| > |K_0|$), то, как показывает анализ свободной энергии, параметры θ и φ принимают следующие значения: $\theta = 0$, а $\varphi = 0; \pi$ (для каждой из подрешеток соответственно). Волновые функции подрешеток, находящихся в основном состоянии: $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |-1\rangle$. И параметры порядка в подрешетках имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 1; q_{2(1)}^0 = 1; q_{2(1)}^2 = 0; \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= -1; q_{2(2)}^0 = 1; q_{2(2)}^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Такие параметры порядка соответствуют антиферромагнитному порядку в системе.

Далее рассмотрим ситуацию, когда в системе возникает ортогонально нематическое упорядочение. Как было показано выше, в этом случае значения констант обменных взаимодействий отрицательны, но при этом по модулю биквадратичное взаимодействие превосходит билинейное ($|J_0| < |K_0|$). Значения параметров θ и φ имеют следующий вид: $\theta_{1,2} = \pm \pi/4$ и $\varphi_{1,2} = \pi/2$. Основное

состояние системы описывается следующими, ортогональными между собой, волновыми функциями:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle) \text{ и } |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |-1\rangle).$$

Параметры порядка для каждой из подрешеток равны:

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 0; q_{2(1)}^0 = 1; q_{2(1)}^2 = 1; \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= 0; q_{2(2)}^0 = 1; q_{2(2)}^2 = -1. \end{aligned} \quad (1.29)$$

1.2.2 АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Как и в случае с негейзенберговским магнетиком с анизотропией типа «легкая ось», для анализа элементарных возбуждений воспользуемся методом функций Грина для операторов Хаббарда, описание которого уже было приведено в разделе 1.1.2 и работах [84-87,97-99].

Начнем с анализа спектров в ферромагнитной фазе и, используя общее дисперсионное уравнение (1.12), определим явный вид спектров:

$$\varepsilon_1(k) = 2J_0 - K_0 - K(k); \quad (1.30)$$

$$\varepsilon_2(k) = J(k) - J_0 + \frac{\beta}{2}. \quad (1.31)$$

Из выражений (1.30) и (1.31) видно, что при переходе к изученному изотропному случаю, спектры принимают хорошо известный вид [26].

Ветвь элементарных возбуждений $\varepsilon_1(k)$ является «продольной» модой колебаний ферромагнетика, включая в себя продольные колебания модуля вектора намагниченности, направление которого остается параллельным главной оси эллипсоида квадрупольных моментов, деформацию эллипсоида и его поворот вокруг намагниченности. Мода $\varepsilon_2(k)$ – «поперечная» мода колебаний, связанная с поворотами направления главной оси квадрупольного эллипсоида.

Теперь перейдем к рассмотрению области устойчивости FM фазы относительно произвольных возмущений, которые соответствуют выражениям

(1.30) и (1.31). Из условия обращения в ноль энергетической щели при малых волновых векторах ($k \rightarrow 0$) и вблизи границы зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$), получим, что спектр (1.30) теряет устойчивость при $J_0 = K_0$ и $J_0 = 0$, соответственно.

Учитывая, что в рассматриваемой задаче одноионная анизотропия мала, то данные результаты должны быть близки к случаю изотропного негейзенберговского магнетика, для которого линия $J_0 = K_0$ является линией фазового перехода в нематическое состояние, а линия $J_0 = 0$ – соответствует линии фазового перехода в ортогонально нематическое состояние. Таким образом, как и в изотропном случае и в случае с анизотропией типа «легкая ось» FM фаза граничит с SN-фазой и ON-фазой.

Рассмотрим систему, находящуюся в нематической фазе. Параметры порядка для этой фазы были приведены в (1.27). Нижайшим энергетическим уровнем является E_1 , а при этом возбужденные энергетические уровни вырождены $E_0 = E_{-1}$. И, используя общее дисперсионное уравнение (1.12), найдем явный вид спектров в данной фазе:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (1.32)$$

Отметим, что при стремлении анизотропии к нулю ($\beta \rightarrow 0$), спектры в точности совпадают со спектрами для изотропного случая [26].

Кроме того, из-за вырождения возбужденных энергетических уровней две ветви элементарных возбуждений совпадают.

Анализ спектров (1.32) показывает, что малых волновых векторах, спектр «смягчается» при $J_0 = K_0 + \frac{\beta}{4}$ и определяет линию перехода в ферромагнитную фазу. А на краю зоны Бриллюэна спектр теряет устойчивость на линии $J_0 = -\frac{\beta}{4}$, то есть соответствует переходу в двухподрешеточное антиферромагнитное состояние.

Как уже отмечалось ранее, рассматриваемая система имеет возможность разбиения на две подрешетки. Вначале рассмотрим антиферромагнитное упорядочение, основные характеристики которого были приведены выше. Решая дисперсионное уравнение, получим две ветви элементарных возбуждений:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(2J_0 - K_0)^2 - K^2(k)}; \quad (1.33)$$

$$\varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(J_0 - K_0 - \frac{\beta}{2}\right)^2 - (J(k) - K(k))^2}. \quad (1.34)$$

В изотропном случае, выражения (1.33) и (1.34) совпадают с известными результатами [26].

Спектр (1.33) описывает «продольную» динамику спина, которая обусловлена его квантовыми сокращениями, а спектр (1.34) описывает «поперечную» динамику, давая представление о спиновых волнах в подрешетках.

В длинноволновом пределе и на границе зоны Бриллюэна оба спектра ведут себя одинаково и из обращения в нуль энергетической щели в спектре (1.33), получим, что линия $J_0 = 0$ соответствует линии фазового перехода из антиферромагнитной фазы в нематическую, а линия $J_0 = K_0$ соответствует переходу из антиферромагнитной в фазы в ортогонально нематическую фазу.

Легко видеть, что в спектре (1.34) энергетическая щель обращается в нуль при условии $J_0 = K_0 + \frac{\beta}{4}$, что соответствует линии, на которой ориентации намагниченностей в обеих подрешетках совпадают. Однако, данное решение не является физическим, поскольку при рассмотрении любого случая, при котором анизотропия отлична от нуля в изучаемой системе отсутствует прямой переход из антиферромагнитной в ферромагнитную фазу.

Теперь рассмотрим спектры в ортогонально нематической фазе. Решения дисперсионного уравнения имеют вид:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 - K(k) + 2J(k) - \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (1.35)$$

Как и в случае, с нематической фазой, где энергетические уровни были вырождены, а потому спектры совпадали между собой, так и в случае с ортогонально нематической фазой, вырождение энергетических уровней приводит к совпадению между собой двух ветвей возбуждения.

В длинноволновом пределе спектр (1.35) принимает следующий вид:

$$\varepsilon(0) = \sqrt{\left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right)\left(2J_0 - \frac{\beta}{2}\right)},$$

значит, что линия фазового перехода в ферромагнитную фазу определяется следующим образом $J_0 = \frac{\beta}{4}(k \rightarrow 0)$. Полученное выражение существенно отличается от выражения для негейзенберговского изотропного магнетика, рассмотренного в работе [26], и рассмотренного ранее случая легкоостной анизотропии, где линии фазовых переходов из FM-фазы в ON-фазу и наоборот совпадают, что говорит о том, что фазовые переходы являются вырожденными фазовыми переходами первого рода. В данном случае вырождение снимает учет влияния легкоплоскостной одноионной анизотропии.

Теперь рассмотрим спектр (1.35) вблизи границы зоны Бриллюэна:

$$\varepsilon(\pi) = \sqrt{\left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right)\left(2K_0 - 2J_0 - \frac{\beta}{2}\right)},$$

при этом энергетическая щель обращается в нуль при отрицательных значениях константы билинейного обмена: $J_0 = K_0 - \frac{\beta}{4}(k \rightarrow \pi)$, что соответствует переходу в AFM-фазу.

Таким образом, анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений дает возможность построить фазовую диаграмму исследуемой системы. Как уже было упомянуто, учет влияния одноионной анизотропии не изменяет четыре стабильных фазовых состояния, которые реализуются в магнитной системе, в сравнении с изотропным случаем. Две возникающие фазы описываются дипольными параметрами порядка (FM и AFM),

а еще две фазы – квадрупольными параметрами порядка (SN и ON). Фазовые переходы, протекающие в магнетике между этими состояниями являются фазовыми переходами первого рода, протекающими через смешанные состояние, в которые одновременно присутствуют и дипольные и квадрупольные параметры порядка.

1.2.3 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Для наглядного представления полученных результатов введем переменные $x = \frac{K_0}{\beta}$ и $y = \frac{J_0}{\beta}$. Фазовая диаграмма в этих переменных представлена на рис. 1.5.

Как видно и из фазовой диаграммы и из анализа спектров элементарных возбуждений, все устойчивые фазовые состояния реализуются только при условиях $\beta > 0$ и $\frac{\beta}{4} < |J_0|, |K_0|$, а все фазовые переходы между ними являются фазовыми переходами первого рода.

Область, определяемая неравенствами $-\frac{1}{4} < y < \frac{1}{4}$ и $y - \frac{1}{4} < x < y + \frac{1}{4}$ представляющая собой параллелограмм, можно рассматривать как область с большой анизотропией. Кроме того, для этой области можно указать ряд особенностей: на отрезке $x = 0; -\frac{1}{4} < y < \frac{1}{4}$, то есть при $K_0 = 0$, свободные энергии нематической и ортогонально нематической фаз совпадают, а значит, указанные отрезок является линией фазового перехода из ON в SN. А анализ спектров (1.33) и (1.35), показывает, что SN-фаза и ON-фаза теряют устойчивость на линиях $y = x + \frac{1}{4}$ и $y = x - \frac{1}{4}$, что делает область, ограниченную параллелограммом областью сосуществования SN и ON фаз, а переход между ними – фазовым переходом первого рода.

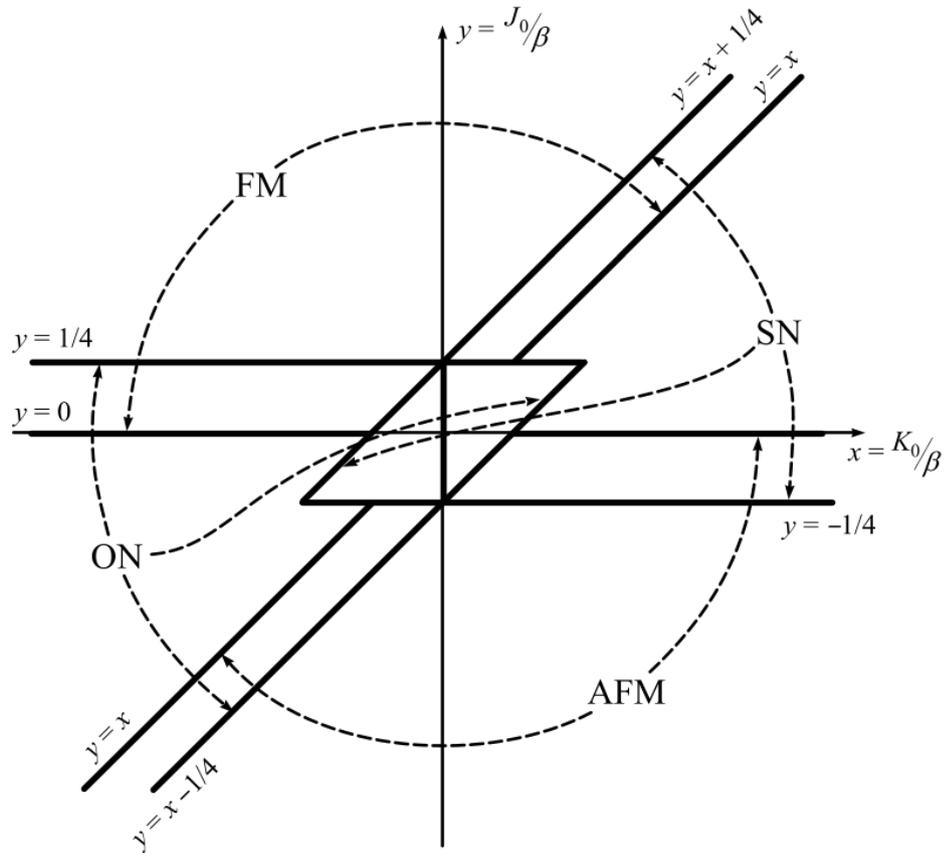


Рисунок 1.5. Фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «легкая плоскость». Штриховые стрелки указывают на линии потери устойчивости соответствующих фаз.

Итак, исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что учет влияния легкоплоскостной анизотропии сохраняет стабильные фазовые состояние, присущие изотропному случаю, но кардинально меняет картину фазовых переходов. Все возможные фазовые переходы являются фазовыми переходами первого рода, в то время как в изотропном случае все фазовые переходы являлись вырожденными фазовыми переходами первого рода, и область сосуществования фаз отсутствовала. Кроме того, отличием легкоплоскостного случая, от изотропного и легкоплоскостного является появление прямого фазового перехода между двумя нематическими фазами SN и ON, тогда как в других случаях такой фазовый переход не существует.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПЕРВОГО РАЗДЕЛА

1. Впервые было показано, в случае одноионной анизотропии типа «легкая ось» сохраняются стабильные фазовые состояния, характерные для изотропного случая; фазовая диаграмма системы полностью совпадает с изотропным случаем и все фазовые переходы в системе являются вырожденными фазовыми переходами первого рода. В этом случае в системе сохраняется $SU(3)$ -точка, в которой энергии всех четырех фаз совпадают.
2. Впервые было показано, что учет анизотропии типа «легкая ось» в негейзенберговском магнетике со спином магнитного иона $S = 1$ приводит к существенному изменению динамических свойств системы в сравнении с изотропным случаем. Легкоосная анизотропия снимает вырождение с энергетических уровней магнитного иона и приводит к появлению «поперечной» ветви элементарных возбуждений. При этом все фазовые переходы происходят по «продольной» ветви возбуждений.
3. Было показано, что в случае анизотропии типа «легкая плоскость» в негейзенберговском магнетике со спином магнитного иона $S = 1$ кардинально меняется тип фазовых переходов. Так, между дипольными (ферромагнитной и антиферромагнитной) и нематическими (нематической и ортогонально нематической) фазами происходят фазовые переходы первого рода. Кроме того, появляется прямой фазовый переход первого рода между нематическими фазами, который отсутствовал для изотропного и легкоосного случая.

РАЗДЕЛ 2. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА «ЛЕГКАЯ ОСЬ»

В настоящее время достаточно хорошо изучены магнитные системы, описание которых выходит за рамки модели Гейзенберга [13,14]. Так в ряде работ [15-17,19-21,23-26,30-39,50-53,76,77] были рассмотрены магнетики при температуре близкой к абсолютному нулю ($T = 0$). Часть исследованных систем описывалась простейшей изотропной моделью [26,30,36,37-39,52], часть исследованных систем включала в себя учет одноионной анизотропии [50,51,76,77]. Однако интерес представляет проследить, какое влияние оказывает учет как одноионной анизотропии, так и температуры на фазовые состояния и динамические свойства спинового нематика.

Цель второго раздела диссертации состоит в исследовании свойств анизотропного негейзенберговского магнетика с анизотропией типа «легкая ось» при температурах, отличных от нуля.

2.1 МОДЕЛЬ

В качестве модели рассмотрим негейзенберговский спиновый нематик с одноионной анизотропией типа «легкая ось», и учтем, что в системе предусмотрено влияние температурных флуктуаций, т.е. ($T \neq 0$). Все дальнейшие исследования будем проводить при условиях, описанных в разделе 1.1.1 и работе [77].

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left[J_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2}) + K_{n_1, n_2} (\vec{S}_{n_1} \cdot \vec{S}_{n_2})^2 \right] - \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^z)^2. \quad (2.1)$$

В работе [77] рассмотрен гамильтониан (2.1) при температуре равной нулю ($T = 0$). Как уже было показано, в системе описываемой обменным гамильтонианом (2.1) возможно реализация двух фазовых состояний:

ферромагнитного при соотношениях параметров $J > K$ и нематического при $K > J$. Фазовая диаграмма спинового нематика при значении спина $S = 1$ представлена на рисунке 2.1.

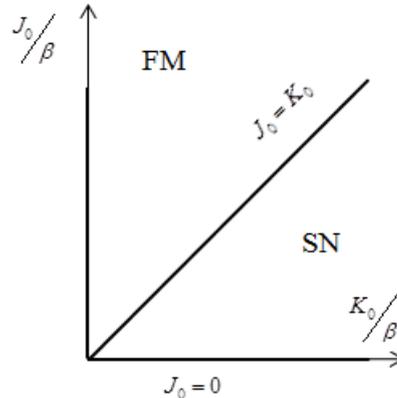


Рисунок 2.1. Фазовая диаграмма одноподрешеточного спинового нематика при значении спина $S = 1$

Отметим, что фазовый переход «ферромагнетик – нематик» являлся вырожденным фазовым переходом I-го рода.

Учет влияния одноионной анизотропии на зависимость намагниченности от температуры подразумевает точный учет эффектов связанных с анизотропией. Кроме того, может требовать выхода за рамки квазиклассического приближения. Одни из вариантов учета уже упомянутых эффектов является использование техники операторов Хаббарда [81-87,97-99], описание которой уже приводилось ранее. Данная техника является наиболее адекватным математическим аппаратом для данного класса задач и позволяет исследовать магнитоупорядоченную систему в широком диапазоне температур.

Система, которую описывает гамильтониан (2.1), является инвариантной относительно преобразований группы вращений $SO(3) \sim SU(2)$. Гамильтониан (2.1) имеет смысл переписать в терминах операторов Стивенса, которые являются генераторами группы $SU(3)$ симметрии рассматриваемой системы и представляют собой набор неприводимых комбинаций операторов спиновых компонент [80]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left(J_{n_1, n_2} - \frac{1}{2} K_{n_1, n_2} \right) \left(S_{n_1}^x S_{n_2}^x + S_{n_1}^y S_{n_2}^y + S_{n_1}^z S_{n_2}^z \right) - \\ & - \frac{1}{4} \sum_{n_1, n_2} K_{n_1, n_2} \left(\frac{1}{3} O_{2n_1}^0 O_{2n_2}^0 + \sum_{t=2, xy, yz, zx} O_{2n_1}^t O_{2n_2}^t \right) - \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^z)^2. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Поскольку в гамильтониане (2.2) обменные взаимодействия инвариантны относительно поворотов магнитных моментов, то магнитная анизотропия типа «легкая ось» приводит к ориентации магнитных моментов подрешеток вдоль оси квантования OZ .

Операторы Хаббарда строятся на базисе собственных функций одноузельного гамильтониана. Выделяя в гамильтониане (2.2) средние поля, связанные как с векторными $\langle S^z \rangle$, так и с тензорными $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$ параметрами порядка, получим одноузельный гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\beta}{2} (S^z)^2 - \bar{H} S^z - B_2^0 O_2^0 - B_2^2 O_2^2 + \varepsilon, \quad (2.3)$$

где $\bar{H} = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^2 \rangle$; $B_2^0 = \frac{K_0}{6} q_2^0$; $B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2$ и

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{12} (q_2^0)^2 + \frac{K_0}{4} (q_2^2)^2.$$

При этом было учтено, что недиагональные тензорные параметры порядка q_2^t (xy, yz, xz) равны нулю, а отличны от нуля только q_2^0 и q_2^2 .

Решая одноузельную задачу с гамильтонианом (2.3) можно определить энергетические уровни магнитных ионов:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{\beta}{2} - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta; \\ E_0 &= 2B_2^0; \\ E_{-1} &= -\frac{\beta}{2} + \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 + B_2^2 \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (2.4)$$

И собственные волновые функции:

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

Параметр θ является параметром $u-v$ преобразования Боголюбова, явный вид которого определяется выражением $\bar{H} \sin 2\theta = B_2^2 \cos 2\theta$. Параметр θ не зависит от величины константы одноионной анизотропии, а определяется как константами обменного взаимодействия, так и параметрами порядка.

Построим операторы Хаббарда $X^{M'M} = |\psi(M')\rangle\langle\psi(M)|$ на базе собственных волновых функций (2.5). Операторы Хаббарда представляют собой стандартный полный набор собственных состояний спиновых операторов [81-83] и связаны с операторами спина следующим образом:

$$\begin{aligned} S_n^z &= \cos 2\theta (X_n^{11} - X_n^{-1-1}) - \sin 2\theta (X_n^{1-1} + X_n^{-11}); \\ S_n^+ &= \sqrt{2} \left[\sin \theta (X_n^{01} - X_n^{-10}) + \cos \theta (X_n^{10} + X_n^{0-1}) \right]; \\ S_n^- &= (S_n^+)^+. \end{aligned} \quad (2.6)$$

В общем случае, выражения для параметров порядка определяются следующим образом: $\langle X^{ij} \rangle = 0, i \neq j$ и $\langle X^{ij} \rangle = \frac{e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}$.

Из выражения (2.6) можно легко определить связь между параметрами порядка системы, как векторными, так и тензорными и температурой и материальными параметрами системы. В частности, намагниченность на один узел магнитной решетки можно представить как функцию температуры T :

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}. \quad (2.7)$$

И

$$q_2^0 = 3 \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)} - 2, \quad (2.8)$$

$$q_2^2 = \sin 2\theta \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}. \quad (2.9)$$

Отметим, что в выражения (2.7)-(2.9) постоянная Больцмана равна единице, а температура измеряется в единицах энергии.

2.2 ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА

2.2.1 ФЕРРОМАГНИТНАЯ ФАЗА

Как было показано в первом разделе и работе [77] в случае низких температур и преобладающей константой билинейного обменного взаимодействия ($J > K$) параметр $u - v$ преобразования равен нулю ($\theta = 0$). При этом, нижайшим уровнем энергии магнитного иона при $T \rightarrow 0$ является E_1 , и из соотношений (2.7)-(2.9) следует:

$$\langle S^z \rangle = 1, q_0^2 = 1, q_2^2 = 0.$$

Что свидетельствует о том, что при данных соотношения параметров в системе реализуется ферромагнитная фаза (FM). Численно решая систему уравнений (2.7)-(2.9) удастся определить влияние тепловых флуктуация на поведение параметров порядка системы в FM фазе.

Полученные результаты приведены на рисунке 2.2(a,b,c) при различных значениях константы одноионной анизотропии.

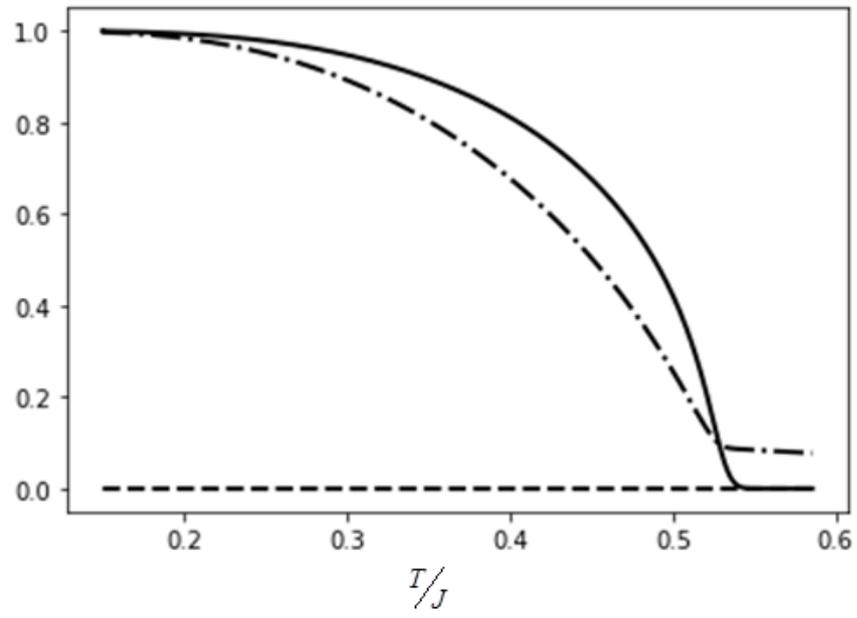


Рисунок 2.2(а)

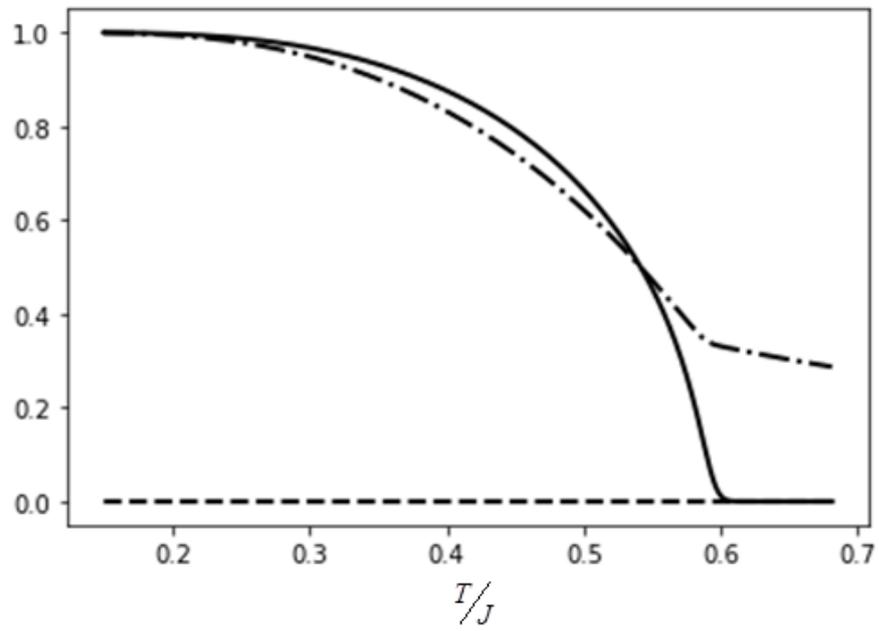


Рисунок 2.2(б)

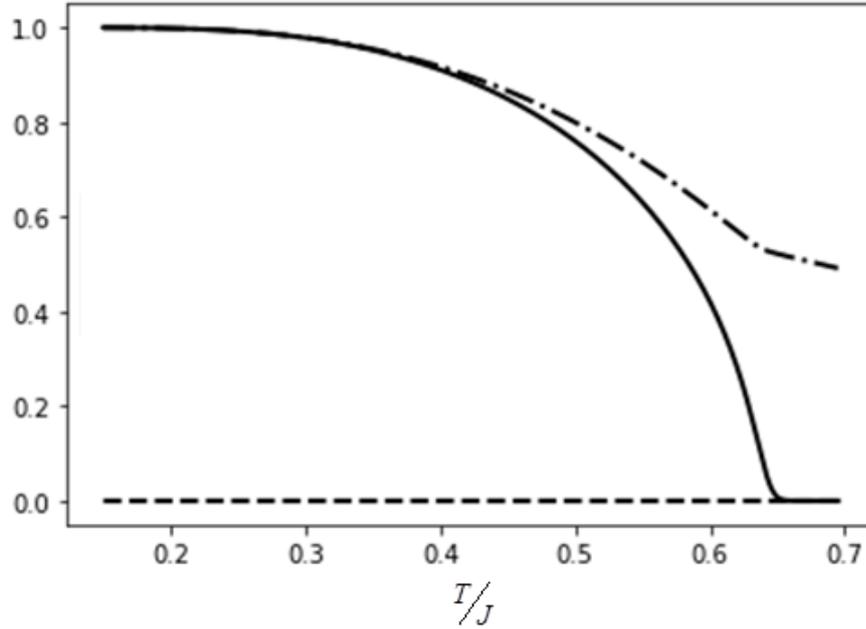


Рисунок 2.2(с)

Рисунок 2.2(a,b,c) Графики зависимости параметров порядка негейзенберговского анизотропного ферромагнетика с $S = 1$ от температуры в FM фазе при $\beta/J = 0,1$

(a), $\beta/J = 0,5$ (b), $\beta/J = 1,0$ (c). Сплошной линии соответствует векторный параметре порядка $\langle S^z \rangle$, штрих-пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^0 , а пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^2 . Обменные интегралы при вычислениях $J = 1$, $K = 0,5$.

Все переменные на рис.2.2(a,b,c) приведены в относительных переменных $(\beta/J, T/J)$. Как можно увидеть из рис. 2.2 с ростом тепловых флуктуаций уменьшается среднее значение магнитного момента в пересчете на один узел. Известно, что температура обращения в ноль среднего магнитного момента соответствует температуре Кюри. Данные приведенные на рис.2.2(a,b,c) позволяют определить критическое значение температуры T_c . Как можно увидеть из графика температурной зависимости, температура Кюри растет с ростом константы одноионной анизотропии. Данный факт легко можно объяснить,

учитывая, что в ферромагнитной фазе магнитный момент ориентируется вдоль оси легко намагничивания, а, следовательно, чем больше становится константа одноионной анизотропии, тем больше энергии требуется для разрушения векторного магнитного порядка, что и приводит к росту критической температуры.

Из уравнений (2.7)-(2.9) можно получить выражение для нахождения температуры Кюри в ферромагнитной фазе:

$$T_c = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Полагая биквадратичное обменное взаимодействие равным нулю в выражении для оценки критической температуры, можно получить хорошо известный результат, вычисленный для приближения среднего поля [88]. Из выражения выше следует, что температура Кюри неявно зависит от величины константы одноионной анизотропии, что следует из выражений (2.7)-(2.9). При значениях температур, близких к критическому, тензорный параметр порядка q_2^0 с ростом константы одноионной анизотропии начинает все сильнее становится отличным от нуля, поскольку существенная величина константы одноионной анизотропии способна стабилизировать ось квадрупольного эллипсоида.

Тензорные параметры порядка в ферромагнитной фазе ведут себя предсказуемо: параметр $q_2^2 = 0$ во всем температурном диапазоне, поскольку значения $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle$ совпадают между собой; а параметр q_2^0 принимает отличные от нуля значения при любых значениях температур, поскольку он не зависит от ориентации магнитного момента и пропорционален $\langle (S^z)^2 \rangle$.

Если температура превышает критическое значение ($T > T_c$), то в изотропном случае вращательная симметрия тензора $S_{ik} = \frac{1}{2} \langle S^i S^k + S^k S^i \rangle$ принимает следующие значения $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = \frac{2}{3}$. Однако учет

одноионной анизотропии нарушает эту вращательную симметрию, что можно увидеть на рис.2.2(a,b,c), поскольку, как уже упоминалось ранее, компоненты квадрупольного тензора q_2^0 зависят от величины константы одноионной анизотропии.

2.2.2 НЕМАТИЧЕСКАЯ ФАЗА

Теперь рассмотрим случай, преобладающего над билинейным биквадратичного обменного взаимодействия ($J < K$). Параметр $u - v$ преобразования $\theta = \pi/4$. И в случае низких температур в магнетике реализуется состояние спинового нематика (SN), которое описывается следующими параметрами порядка:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 1.$$

Геометрическим образом данной фазы, при низких температурах, является одноосный эллипсоид с полуосями $\langle (S^z)^2 \rangle = 1, \langle (S^x)^2 \rangle = 1, \langle (S^y)^2 \rangle = 0$, иными словами эллипсоид вырождается в круг, лежащий в плоскости ZOX .

Поведение параметров порядка в SN фазе как функций одноионной анизотропии и температуры приведено на рис.2.3(a,b,c). Аналогично ферромагнитной фазе, все переменные на рис.2.3(a,b,c) приведены в относительных единицах $(\beta/K, T/K)$.

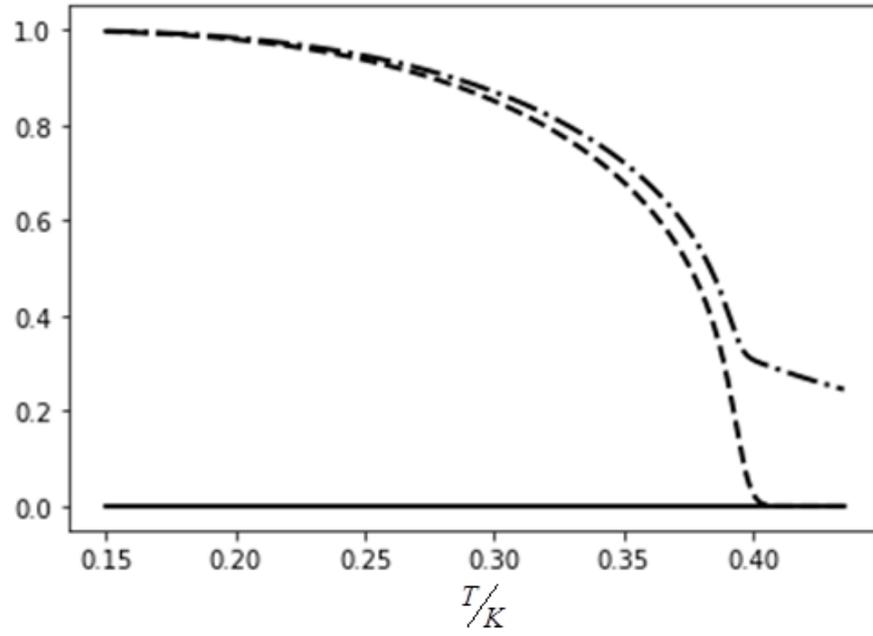


Рисунок 2.3(a)

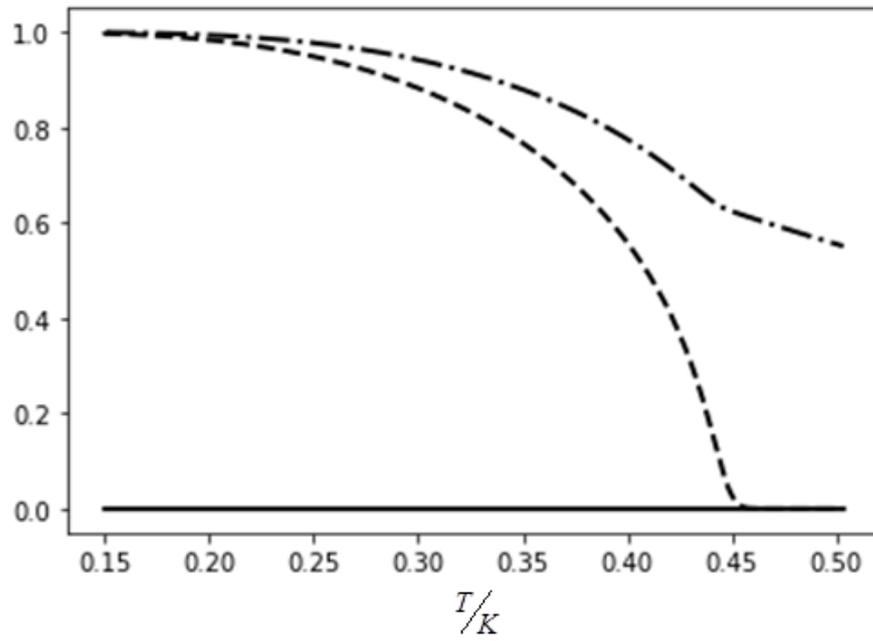


Рисунок 2.3(b)

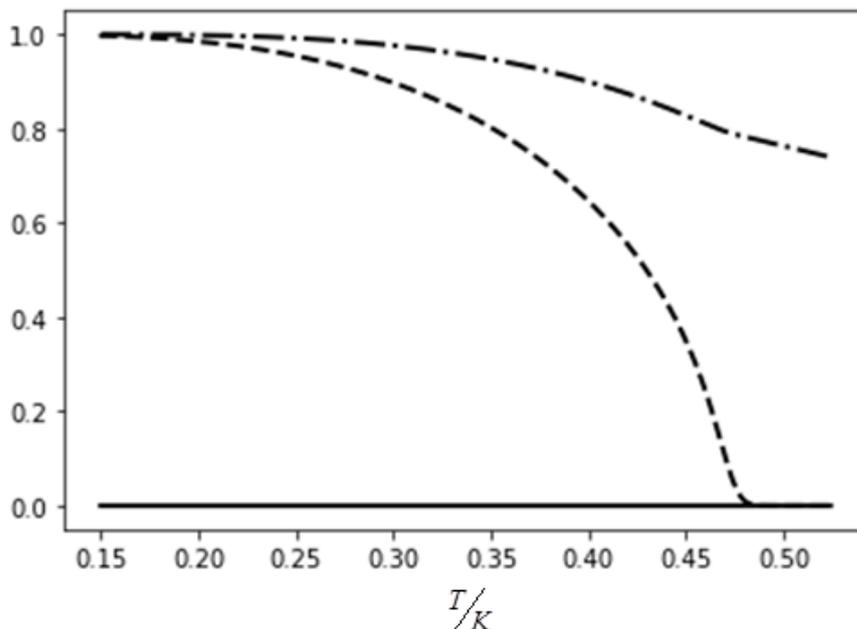


Рисунок 2.3(с)

Рисунок 2.3 (а,b,c) Графики зависимости параметров порядка негейзенберговского анизотропного ферромагнетика с $S=1$ от температуры в SN фазе при $\beta/J = 0,1$ (а), $\beta/J = 0,5$ (b), $\beta/J = 1,0$ (с). Сплошной линии соответствует векторный параметр порядка $\langle S^z \rangle$, штрих-пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^0 , а пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^2 .

Обменные интегралы при вычислениях $J = 0,2$, $K = 1,0$.

Из рис.2.3(а,b,c) следует, что с возрастанием температуры квадрупольный параметр порядка q_2^2 принимает значения меньше единицы, а значит, $\langle (S^y)^2 \rangle \neq 0$, следовательно, квадрупольный эллипсоид становится двухосным и его ориентация определяется осью анизотропии.

Численно анализируя выражения (2.7)-(2.9) в нематической фазе, можно показать, что среднее значение магнитного момента на один узел равно нулю при произвольном значении температуры и константы одноионной анизотропии.

Квадрупольный параметр порядка $q_2^2 = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle$ принимает значения равные нулю при температуре T_Q , которая определяет температуру фазового перехода «спиновый нематик – парамагнетик». С ростом одноионной анизотропии данная критическая температура T_Q растет, хоть и не так резко, как при фазовом переходе «ферромагнетик – парамагнетик». Аналогично ферромагнитному случаю, учет влияния легкоосной одноионной анизотропии нарушает вращательную симметрию тензора S_{ik} при температурах выше критической для нематической фазы ($T > T_Q$).

Значение критической температуры $T > T_Q$ точно так же можно оценить, используя выражения (2.7)-(2.9):

$$T_Q = \frac{K_0}{2} \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Достаточно очевидно, что значение T_Q зависит только от биквадратичного обмена и тензорных параметров порядка.

2.3 ДИНАМИКА СПИНОВОГО НЕМАТИКА ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Помимо статических свойств системы представляет интерес исследование спектров элементарных возбуждений при температурах значительно отличающихся от нуля. Особенно важным является исследование поведения спектров вблизи линии компенсаций спинов подрешеток. Помимо этого, учет влияния температурных флуктуаций позволят более адекватно описать фазовые переходы, реализующиеся в системе в сравнении со случаем исследования при температурах близких к абсолютному нулю.

Ранее упоминалось, что энергетический спектр возбуждений в сильно коррелированных системах определяется полюсами функции Грина. Для данной

задачи будем использовать метод функций Грина для операторов Хаббарда [82-85,97-99].

Дисперсионное уравнение (1.12) является справедливым при различных соотношениях материальных параметров, и в контексте данной задачи учет материальных параметров системы и температуры можно записать через концевые множители, представленные следующими выражениями:

$$b(\alpha_1) = -b(\alpha_2) = \frac{-\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}; \quad (2.10)$$

$$b(\alpha_3) = -b(\alpha_4) = \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}; \quad (2.11)$$

$$b(\alpha_5) = -b(\alpha_6) = \frac{\exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}. \quad (2.12)$$

Где α_i – корневые векторы ($i = 1, \dots, 6$), компоненты которых равны:

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha(0,1) = (-1,1,0), \alpha_2 = \alpha(1,0) = (1,-1,0), \alpha_3 = \alpha(1,-1) = (1,0,-1), \\ \alpha_4 = \alpha(-1,1) = (-1,0,1), \alpha_5 = \alpha(0,-1) = (0,1,-1), \alpha_6 = \alpha(-1,0) = (0,-1,1). \end{aligned} \quad (2.13)$$

В работах [76,77] были подробно исследованы решения дисперсионного уравнения (1.12) при $T = 0$, как для изотропного случая спинового нематика со значением спина магнитного иона $S = 1$, так и для негейзенберговского магнетика, обладающего одноосной анизотропией. В результате было показано, что в случае температур близких к абсолютному нулю, в магнетике реализуются две ветви элементарных возбуждений, одна из которых является прецессионной и связана с переходом магнитного иона из основного состояния (E_1) в первое невозбужденное (E_0), иными словами в этой моде «поперечные» колебания спиновой плотности связаны с поворотами направления главной оси квадрупольного эллипсоида. В то время как, вторая ветвь возбуждений связана с

переходом магнитного иона из основного состояния (E_1) в состояние E_{-1} . Данная мода включает продольные колебания модуля вектора намагниченности, направление которого остается параллельным главной оси эллипсоида квадрупольных моментов, то есть является «продольной» ветвью возбуждений.

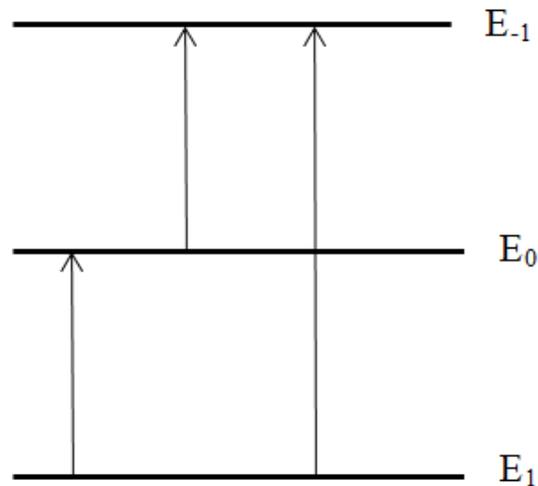


Рис.2.3 Энергетические уровни магнитного иона и переходы между ними

Важно отметить, что в изотропном случае, рассмотренном в работе [26] в нематической фазе обе ветви возбуждений совпадают.

Помимо выше описанных ветвей возбуждений в системе возможно возникновение еще одной ветви, связанной с возбужденными состояниями магнитного иона ($E_0 \rightarrow E_{-1}$) схематично изображенная на рис.3, т.е. температура «размораживает» степени свободы магнитного иона. При этом колебательная мода, связанная с переходом E_{1-1} не является релаксационной.

2.4 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

2.4.1 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В FM ФАЗЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТЛИЧНЫХ ОТ НУЛЯ

Как уже было сказано ранее, FM фаза в рассматриваемой системе реализуется только при $J > K$ и $T < T_c$. Рассмотрим решения дисперсионного

уравнения (1.14) в данной фазе. Учет влияния температуры приводит к появлению третьего решения уравнения (1.14) и соответствует трем ветвям спиновых возбуждений: две из которых условно являются «поперечными», поскольку они связаны с колебаниями квадрупольного эллипсоида, а одна – «продольной», поскольку она связана с колебаниями модуля магнитного момента. Явный вид спектров имеет следующий вид:

$$\varepsilon^{\parallel}(k) = -E_{1-1} - K_k b(\alpha_3), \quad (2.14)$$

и

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^{\perp} = & \frac{1}{2} \left[E_{10} + E_{0-1} + J_k (b(\alpha_2) + b(\alpha_5)) \right] \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \left\{ \left[E_{10} - E_{0-1} + J_k (b(\alpha_2) - b(\alpha_5)) \right]^2 + 4b(\alpha_2)b(\alpha_5)(J_k - K_k)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Явный вид уровней энергии и конечных множителей в FM фазе, а так же значение параметра $u - v$ преобразования, позволяет переписать спектры (2.14) и (2.15) в следующем виде:

$$\varepsilon^{\parallel}(k) = (2J_0 - K_0 - K_k) \langle S^z \rangle; \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^{\perp}(k) = & \frac{1}{2} (2J_0 - K_0 - J_k) \langle S^z \rangle \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \sqrt{(J_k - K_k)^2 \left[\langle S^z \rangle^2 - (q_2^0)^2 \right] + (\beta - (J_k - K_0)q_2^0)^2}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Кроме того, было учтено, что в FM фазе $b(\alpha_3) = \langle S^z \rangle$ и $q_2^0 = 3\langle S^z \rangle^2 - 2$.

Зависимость спектров элементарных возбуждений от температуры в ферромагнитной фазе определяется температурной зависимостью среднего значения магнитного момента на узле кристаллической решетки $\langle S^z \rangle$ и компоненты тензора квадрупольных моментов q_2^0 , определяемых выражениями (2.7) и (2.8) соответственно.

Подробнее рассмотрим поведение спектров элементарных возбуждений с учетом температурной зависимости, но при температурах много меньших

температуры Кюри, и при различных значениях константы одноионной анизотропии представленных на рисунках 2.5(a,b,c,d) и 2.6(a,b,c,d).

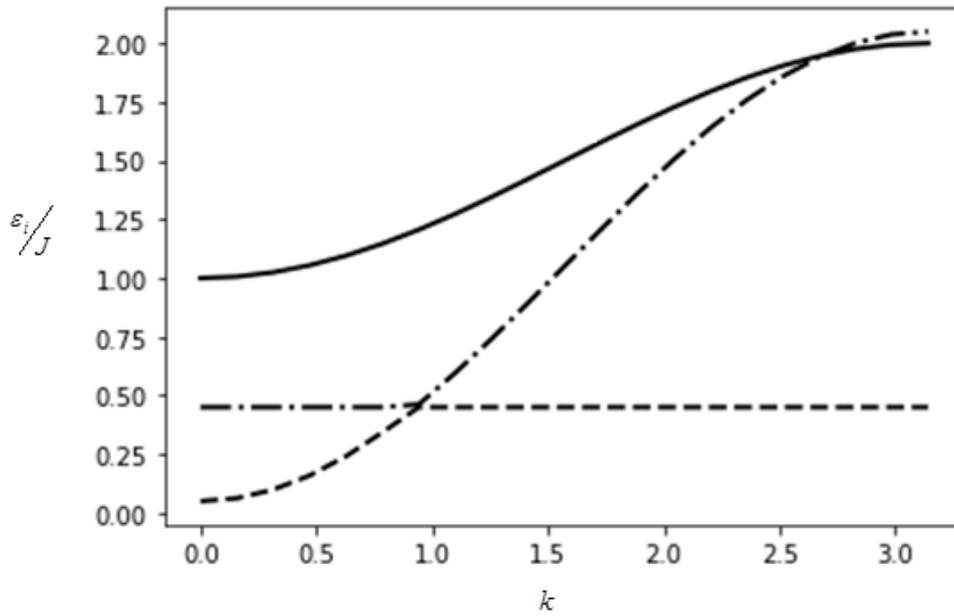


Рисунок 2.5(a)

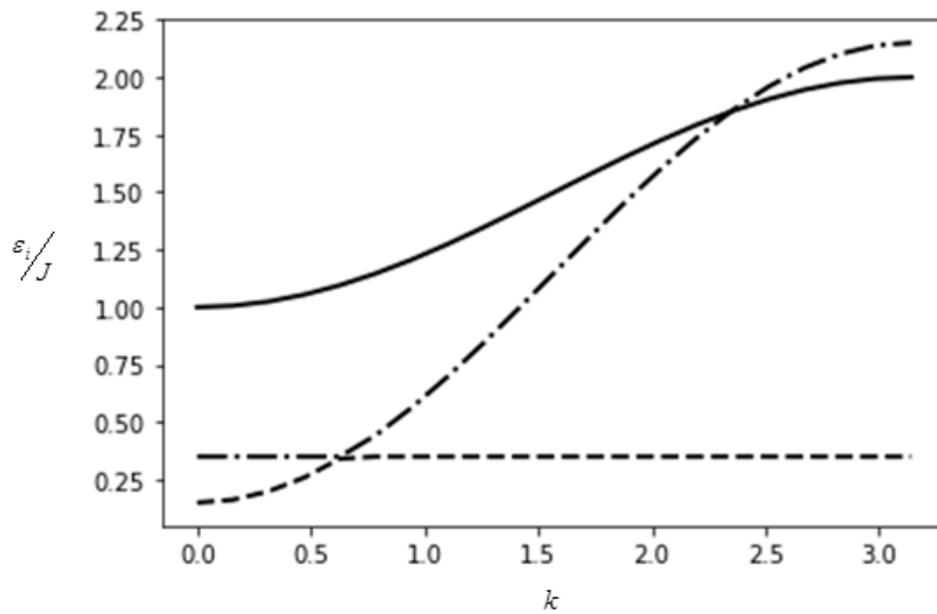


Рисунок 2.5(b)

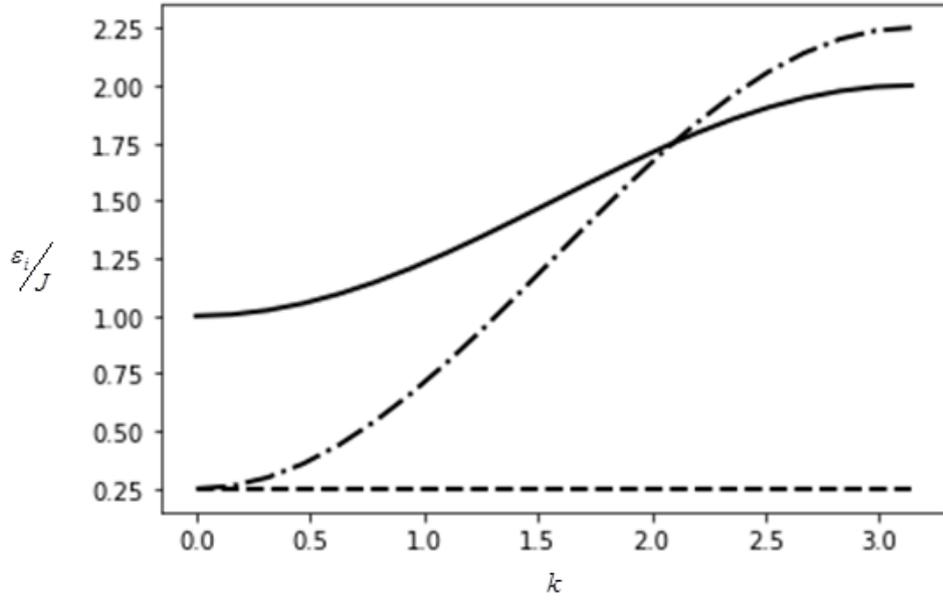


Рисунок 2.5(с)

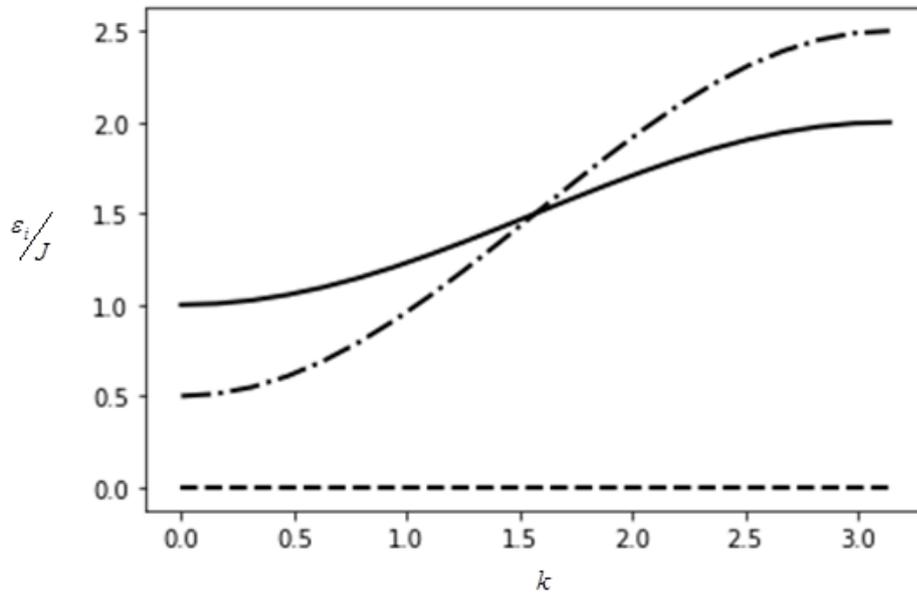


Рисунок 2.5(d)

Рисунок 2.5 (a,b,c,d) Спектры элементарных возбуждений в FM фазе при

$$T/J = 0,003 \text{ и значениях анизотропии}$$

$\beta/J = 0,1(a), \beta/J = 0,3(b), \beta/J = 0,5(c), \beta/J = 1,0(d)$. Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_{\parallel}/J$, пунктирной линии – «поперечная» ветвь

ε_1^\perp/J , а штрих-пунктирной – «поперечная» ветвь ε_2^\perp/J . Здесь выбраны следующие материальные параметры: $J = 1, K = 0,5$.

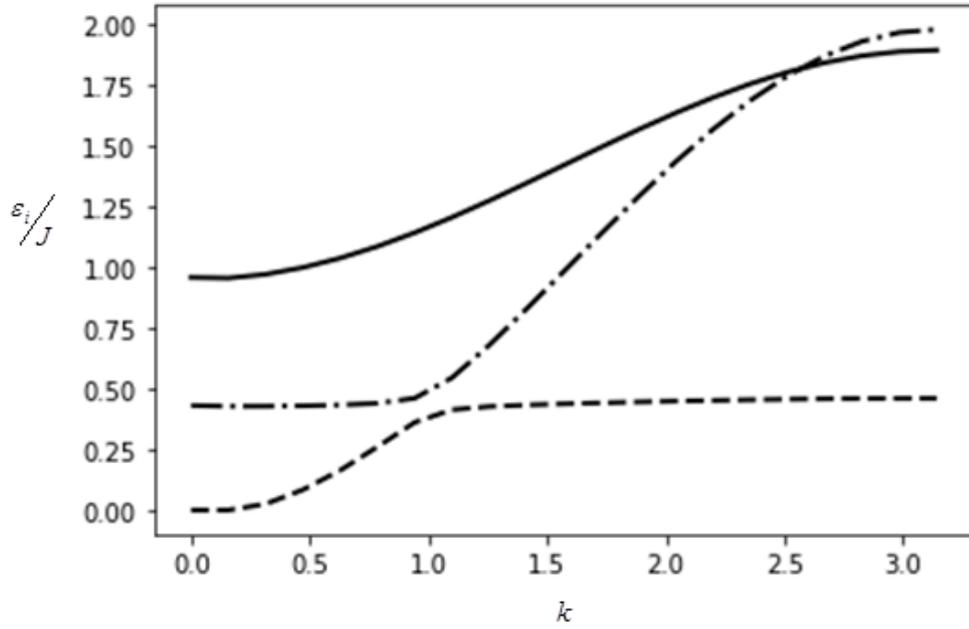


Рисунок 2.6(a)

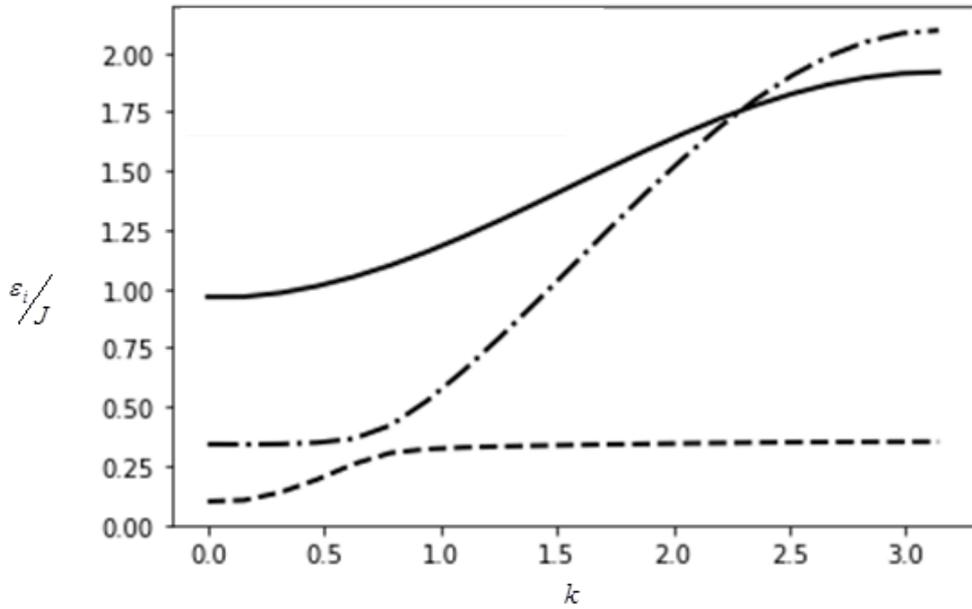


Рисунок 2.6(b)

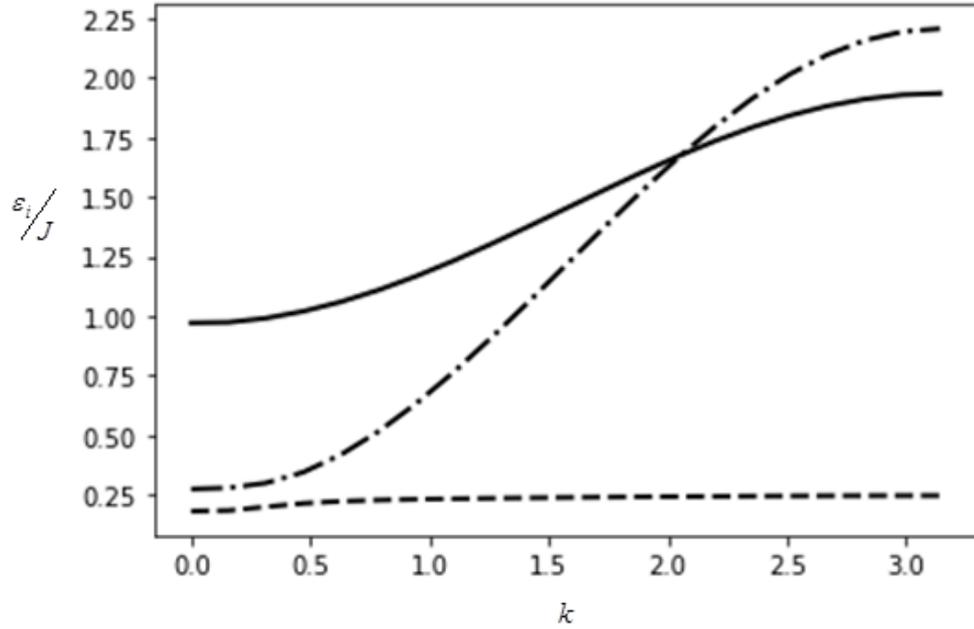


Рисунок 2.6(с)

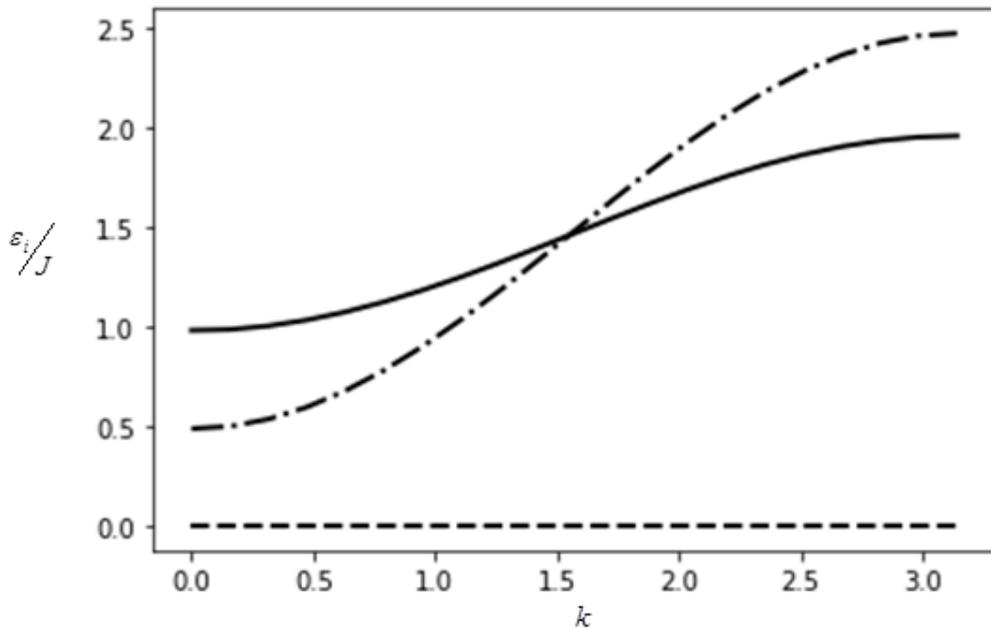


Рисунок 2.6(d)

Рисунок 2.6(a,b,c,d) Спектры элементарных возбуждений в FM фазе при $T/J = 0,3$

и значениях анизотропии $\beta/J = 0,1(a), \beta/J = 0,3(b), \beta/J = 0,5(c), \beta/J = 1,0(d)$.

Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon^{\parallel}/J$,

пунктирной линии – «поперечная» ветвь ε_1^{\perp}/J , а штрих-пунктирной –

«поперечная» ветвь ε_2^\perp/J . Здесь выбраны следующие материальные параметры:

$$J = 1, K = 0,5.$$

Рассмотрим сначала продольную ветвь возбуждений (2.16). Как можно увидеть из рисунков выше и выражения (2.16), зависимость данной моды колебаний от волнового вектора является квадратичной и слабо меняется с изменением значений одноионной анизотропии и температуры. Помимо этого, в спектре (2.16) есть энергетическая щель, которая не зависит от значения константы одноионной анизотропии и определяется выражением:

$$\varepsilon^{\parallel}(0) = 2(J_0 - K_0)\langle S^z \rangle. \quad (2.18)$$

Как видно из формулы (2.17) так называемые «поперечные» моды колебаний являются более сложными и «запутанными» между собой. Важно отметить, что с ростом температуры эта «запутанность» уменьшается. При достаточно низких температурах и малых значениях одноионной анизотропии обе ветви (2.17) практически переходят одна в другую, что явно показано на рис.2.5(a,b). Данный факт легко поддается объяснению, если вспомнить поведение векторного параметра порядка $\langle S^z \rangle$ и тензорного параметра q_2^0 , которые были представлены на рис. 2.2(a-с): при низких температурах $T/J \sim 0,03$ и малых значениях анизотропии $\beta/J \sim 0,1$, выражение $\langle S^z \rangle^2 \rightarrow (q_2^0)^2 \rightarrow 0$. А из выражения для спектров (2.17) следует, что «поперечная» ветвь ε_1 при малых волновых векторах ведет себя как: $\varepsilon_1^\perp(k) \approx \alpha k^2 + \beta/2$, а вторая ветвь ε_2 является бездисперсионной $\varepsilon_2^\perp = J_0 - K_0 - \beta/2$. При возрастании волнового вектора данные моды колебаний «переходят» одна в другую, иными словами при достаточно больших значениях волнового вектора ε_1 превращается в бездисперсионную, а ε_2 ведет себя подобно квадратичной параболе.

При возрастании температуры, например при $T/J \sim 0,3$ величина $\langle S^z \rangle^2 - (q_2^0)^2 \neq 0$, как видно из рис. 2.2(а-с), что приводит к тому, что «поперечные» ветви элементарных возбуждений начинают «расталкиваться» и тем сильнее, чем большие значения приобретает константа одноионной анизотропии. Так, при $\beta/J = 1$ «поперечная» мода ε_1 переходит в бездисперсионную, а мода ε_2 ведет себя пропорционально квадрату волнового вектора и, как видно из рис. 2.6 (а,b,c,d) энергетическая щель в этой моды существенно зависит от величины константы одноионной анизотропии.

2.4.2 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В SN ФАЗЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ОТЛИЧНЫХ ОТ НУЛЯ

Теперь рассмотрим поведение спектров элементарных возбуждений в SN фазе при различных значениях константы одноионной анизотропии и температуры (исключая область флуктуаций). Как говорилось ранее, в нематической фазе параметр $u-v$ преобразования $\theta = \pi/4$ и материальные константы системы соотносятся как $K > J$. В дальнейших вычислениях будем учитывать, что $\langle S^z \rangle = 0$, а $q_2^2 = b(\alpha_3)$.

Спектры всех трех ветвей элементарных возбуждений можно представить в следующем виде:

$$\varepsilon^{\parallel}(k) = b(\alpha_3) \sqrt{(K_0 - K(k))(K_0 + K(k) - 2J(k))}; \quad (2.19)$$

$$\varepsilon_1^{\perp}(k) = \sqrt{\left(\frac{\beta}{2} + b(\alpha_2)(K_0 - K(k))\right) \left(\frac{\beta}{2} + b(\alpha_2)(K_0 + K(k) - 2J(k))\right)}; \quad (2.20)$$

$$\varepsilon_2^{\perp}(k) = \sqrt{\left(\frac{\beta}{2} + b(\alpha_6)(K_0 - K(k))\right) \left(\frac{\beta}{2} + b(\alpha_6)(K_0 + K(k) - 2J(k))\right)}. \quad (2.21)$$

Зависимость спектров возбуждений от температуры определяется концевыми множителями $b(\alpha_i)$. Как и в FM фазе, в SN фазе имеется три ветви возбуждений,

одна из которых (2.19) является «продольной», и связана с колебанием длины вектора магнитного момента, а две другие (2.20) и (2.21) – «поперечные», и связаны с колебаниями квадрупольного эллипсоида.

Спектры элементарных возбуждений в SN фазе при различных температурах и различных значениях константы анизотропии представлены на рис.2.7(a,b,c,d) и 2.8(a,b,c,d). Как можно увидеть из данных графиков, одна из «поперечных» ветвей возбуждений (ε_2^\perp) является бездисперсионной во всем диапазоне температур, и при произвольных значениях константы анизотропии. Это становится очевидным, если учесть, что значение концевой множителя $b(\alpha_6)$ зависит только от возбужденных энергетических уровней, а значит, имеет мало отличий от нуля при произвольных значениях температуры и константы одноионной анизотропии. Величина энергетической щели в спектре (2.19) зависит от значения константы анизотропии и возрастает с ростом β , как видно на рис.2.7(a,b,c,d) и 2.8(a,b,c,d).

Энергетическая щель в «поперечной» ветви колебаний, значительно зависит от величины константы одноионной анизотропии, но помимо анизотропии вклад в щель дают также фурье-образы обменных интегралов J_0, K_0 . На рисунках 2.7(a,b,c,d) и 2.8(a,b,c,d) видно, что данная ветвь возбуждений ведет себя как $\sqrt{k^2 + a}$ по отношению к волновому вектору, а зависимость от температуры определяется концевым множителем $b(\alpha_2)$.

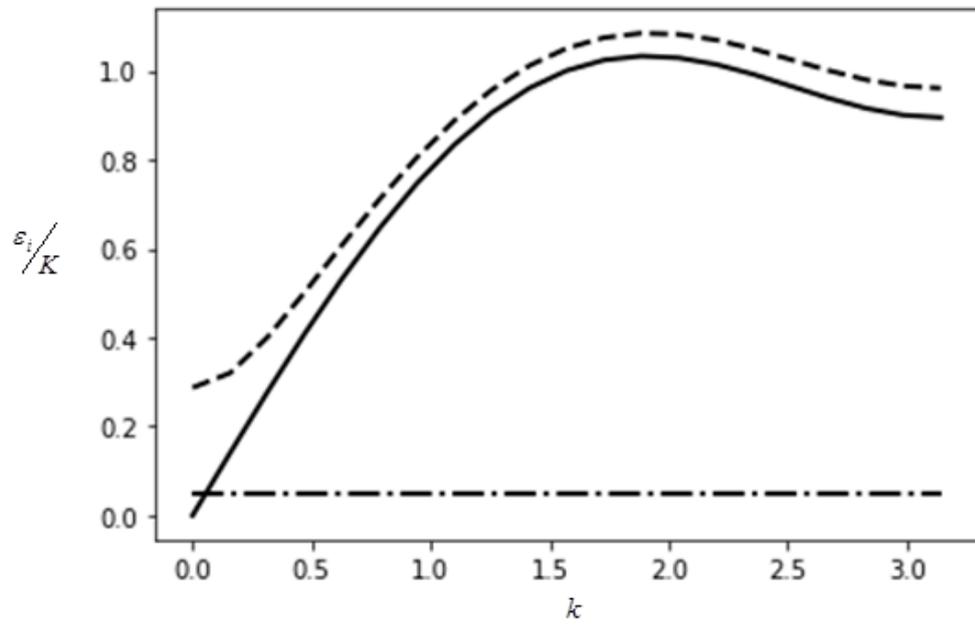


Рисунок 2.7(a)

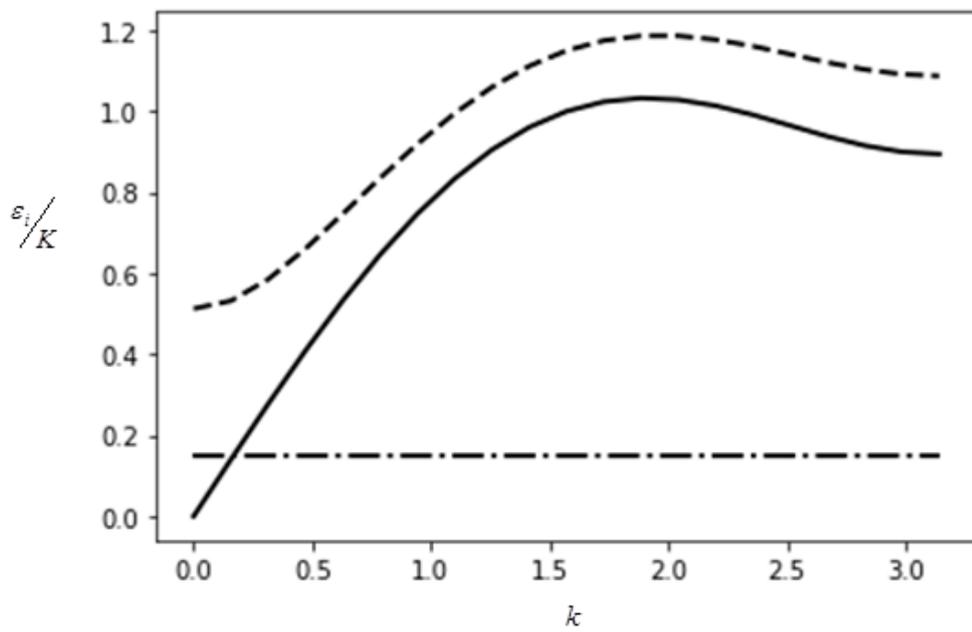


Рисунок 2.7(b)

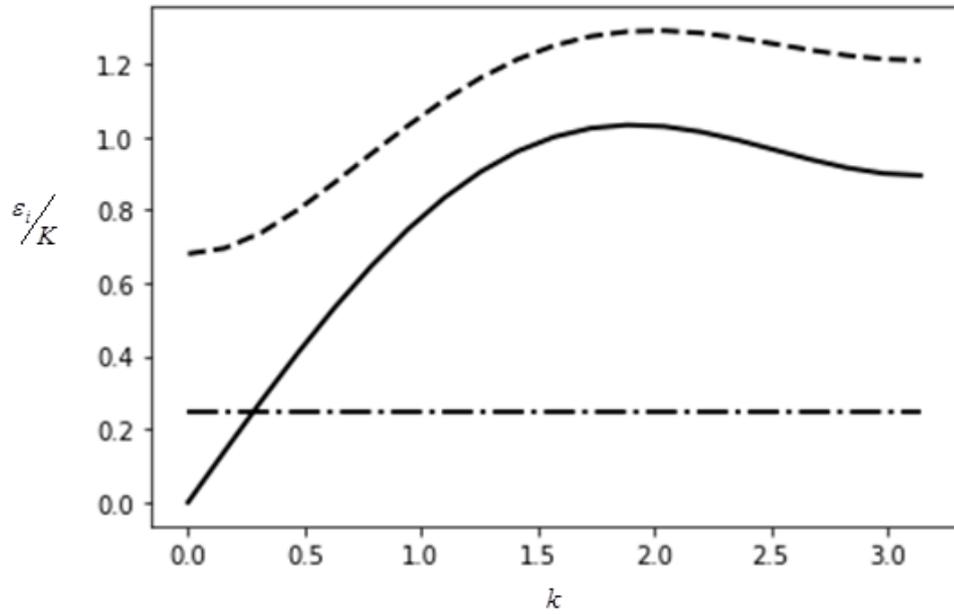


Рисунок 2.7(с)

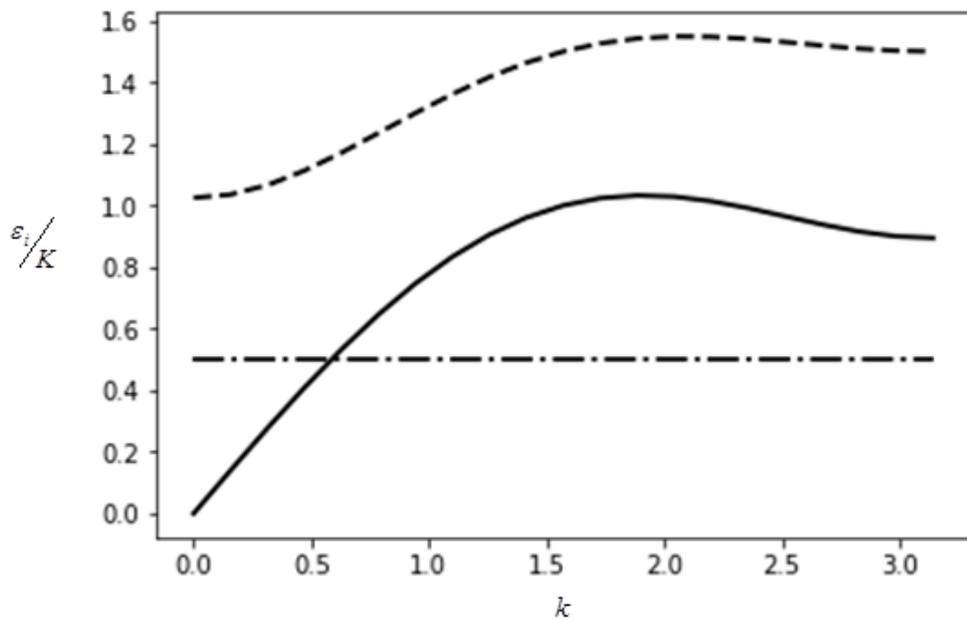


Рисунок 2.7(д)

Рисунок 2.7 (а,b,c,d) Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика SN фазе при $T/K = 0,003$; $\beta/K = 0,1$ (а); $\beta/K = 0,3$ (b); $\beta/K = 0,5$ (c); $\beta/K = 1,0$ (d). Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_{\parallel}/K$, пунктирной линии – «поперечная» ветвь ε_1^{\perp}/K , а штрих-пунктирной –

«поперечная» ветвь ε_2^\perp / K . Здесь выбраны следующие материальные параметры:

$$J = 0,2, K = 1,0.$$

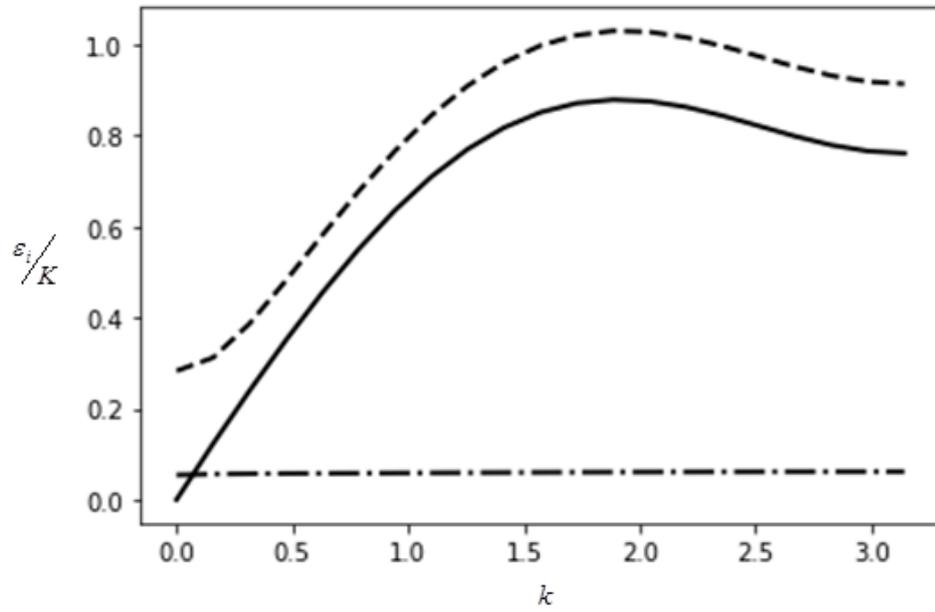


Рисунок 2.8(а)

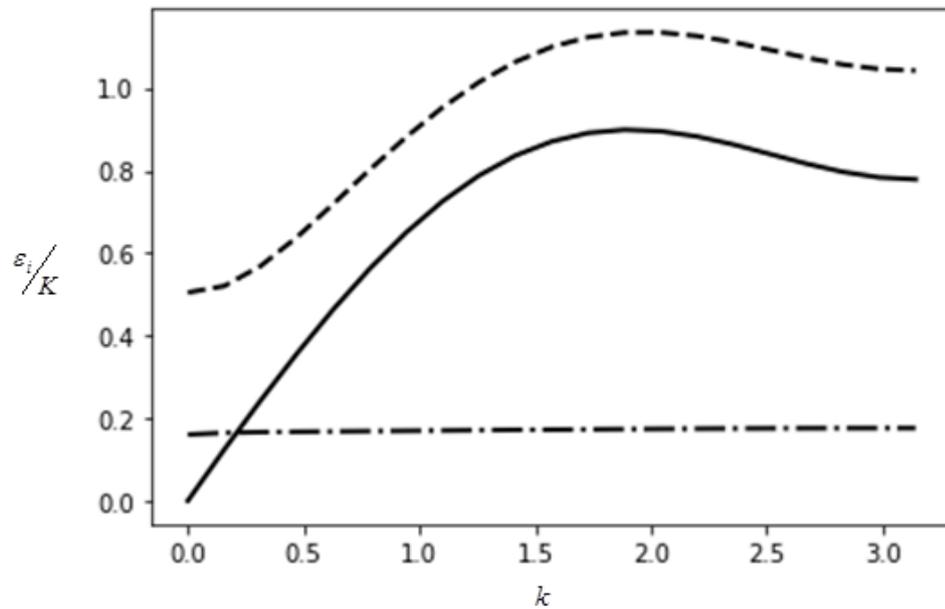


Рисунок 2.8(б)

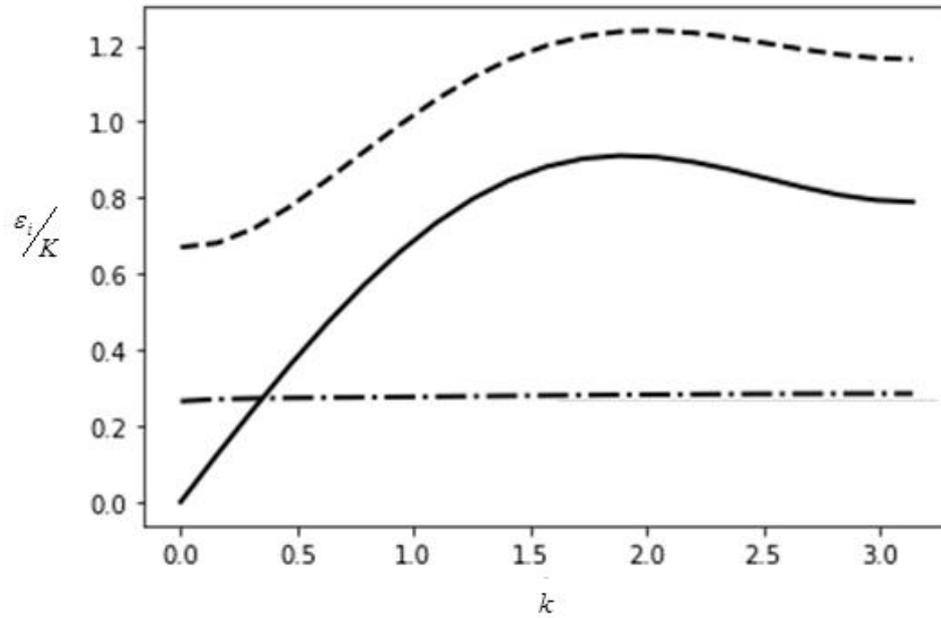


Рисунок 2.8 (с)

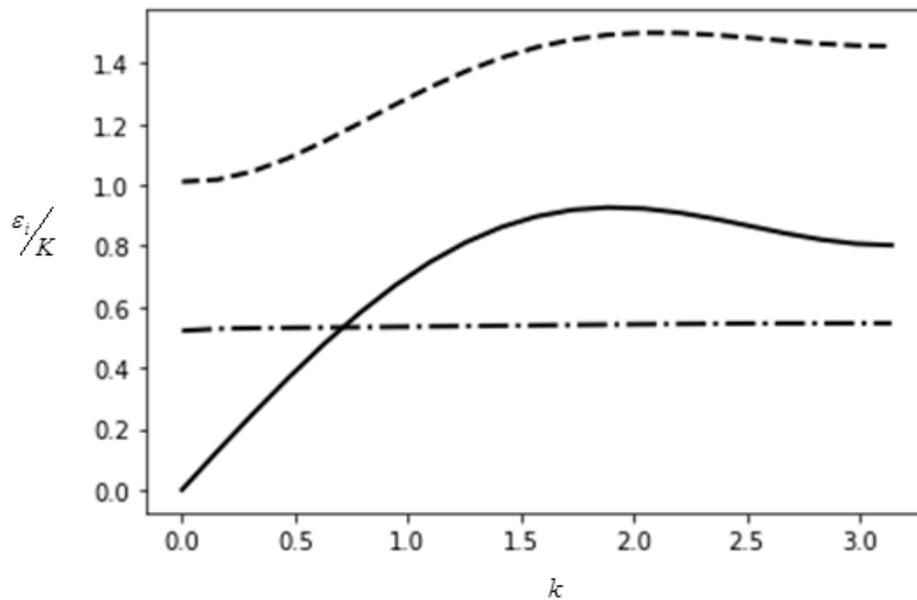


Рисунок 2.8(d)

Рисунок 2.8 (a,b,c,d) Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика SN фазе при $T/K = 0,3$; $\beta/K = 0,1$ (a); $\beta/K = 0,3$ (b); $\beta/K = 0,5$ (c) ; $\beta/K = 1,0$ (d). Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений ϵ_{\parallel}/K , пунктирной линии – «поперечная» ветвь ϵ_1^{\perp}/K , а штрих-пунктирной –

«поперечная» ветвь ε_2^\perp / K . Здесь выбраны следующие материальные параметры:

$$J = 0,2, K = 1,0.$$

Заметим, что «продольная» мода колебаний (2.19) является безщелевой и не имеет явной зависимости от константы одноионной анизотропии. Однако, учитывая выражения (2.7) и (2.8), эта зависимость присутствует и обусловлена влиянием q_2^2 тензора квадрупольных моментов, соответствующего концевому множителю $b(\alpha_3)$ в нематической фазе и зависит от энергетических уровней E_1 и E_{-1} , и связана с переходом магнитного иона из основного состояния в наиболее возбужденное.

2.5 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Проведенные исследования и полученные результаты позволяют построить фазовую диаграмму на плоскости (J, K) при произвольных значениях температуры, а так же сравнить с полученными результатами для исследуемой системы, но при температурах близких к абсолютному нулю [76,77].

Известно, что линию фазового перехода можно определить из условия равенства термодинамических потенциалов [89] в соответствующих фазах. Тогда очевидно, что линию фазового перехода «ферромагнетик – спиновый нематик» можно получить из выражения:

$$F_{FM} = F_{SN}, \quad (2.22)$$

где $F_{FM} = -T \ln Z_{FM}$, $F_{SN} = -T \ln Z_{SN}$ – соответствует свободным энергиям в ферромагнитной и нематической фазах соответственно; а $Z_{FM(SN)}$ – выражения для статсуммы в ферромагнитной и нематической фазах и определяется соотношением: $Z = \sum_{M=-1,0,1} \exp\left(-\frac{E_M}{T}\right)$.

Численный анализ выражения (2.22) позволяет построить фазовую диаграмму при произвольных температурах и различных значениях константы одноионной анизотропии.

Фазовая диаграмма приведена на рис.2.9(a,b,c).

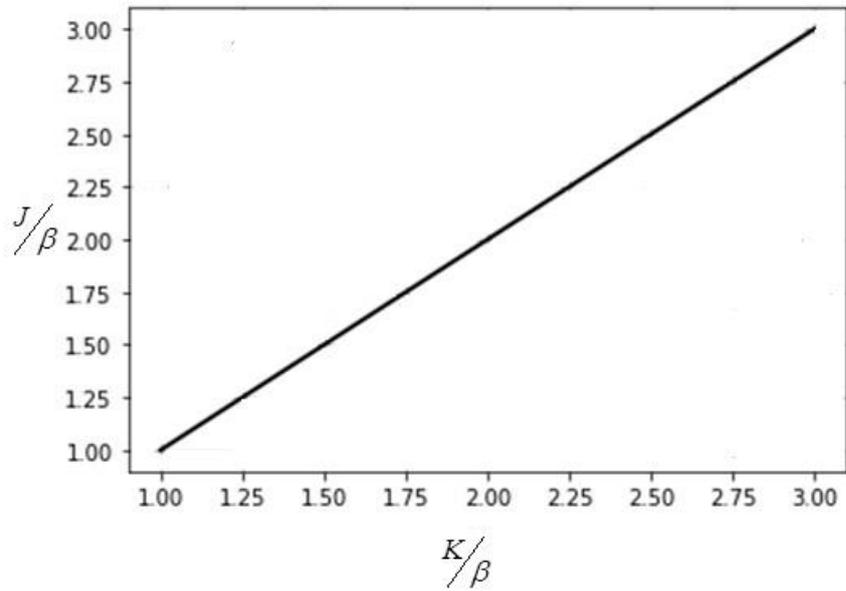


Рисунок. 9(a)

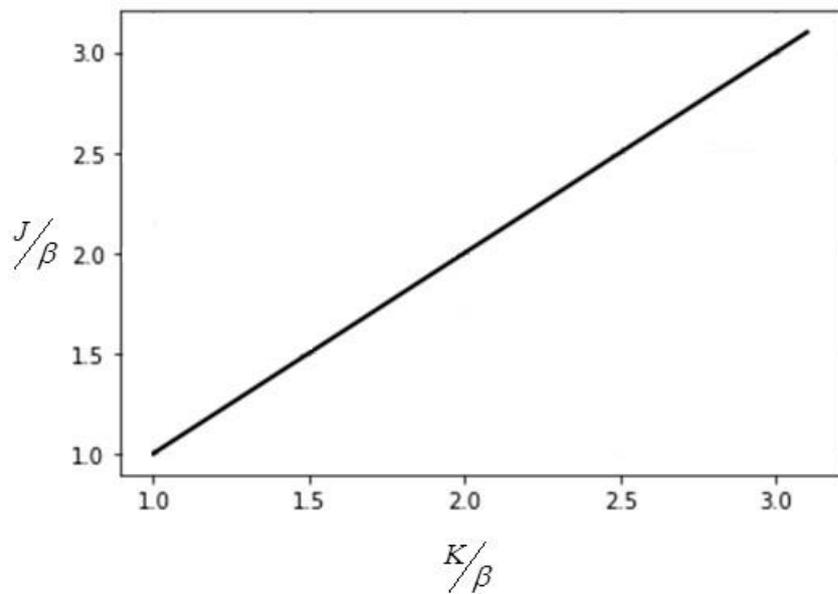


Рисунок. 9(b)

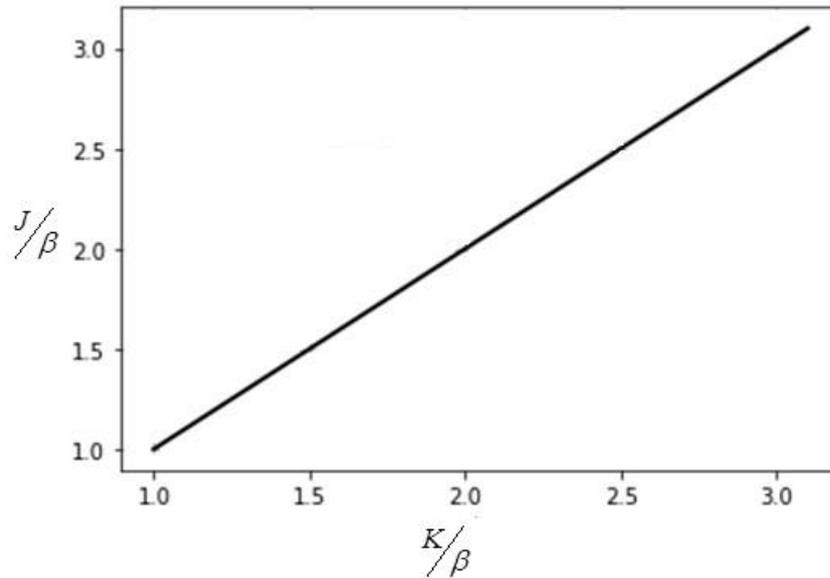


Рисунок. 9(с)

Рисунок 2.9 (a,b,c) Фазовая диаграмма негейзенберговского ферромагнетика с $S=1$ при различных значениях температуры и константы одноионной

анизотропии: (a) - $T/J = 0.003$, $\beta/J = 0.1$;

(b) - $T/J = 0.103$, $\beta/J = 0.5$; (c) - $T/J = 0.313$, $\beta/J = 1.0$.

Анализ фазовой диаграммы показывает, что фазовый переход между FM-SN фазами выглядит следующим образом:

$$J_0 = K_0 \quad (2.23)$$

Как следует из численного анализа выражения (2.22) и (2.23), см. рис.9(a,b,c) линия фазового перехода не зависит от температуры и величины константы одноионной анизотропии и в точности соответствует фазовой диаграмме для исследуемой системы при $T = 0$ [74,75].

Кроме того, линию фазового перехода (2.23) можно получить из анализа выражений для спектров элементарных возбуждений в ферромагнитной и нематической фазах. В FM фазе «продольные» возбуждения прекращают быть устойчивыми на линии $J_0 = K_0$ при $k = 0$, как следует из выражения (2.14) и (2.16). Аналогично на этой же линии теряет устойчивость спектр «продольных»

магнонов в SN фазе (2.19). Следовательно, линия определяемая выражением (2.23) соответствует линии фазового перехода «ферромагнетик – нематик».

Помимо этого, анализируя фазовую диаграмму и спектры элементарных возбуждений можно показать, что фазовый переход между FM-SN фазами является вырожденным фазовым переходом первого рода.

Потеря устойчивости спектра (2.19) на линии $J_0 = 0$ при $k = \pi$ может означать возможный фазовый переход между SN-AFM фазами, если рассмотреть двухподрешеточных случай.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ВТОРОГО РАЗДЕЛА

1. Впервые исследовано влияние температурных флуктуаций и одноионной анизотропии «легкая ось» на поведение параметров порядка, плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений для негейзенберговского ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$.
2. Проведен численный анализ векторных и тензорных параметров порядка в ферромагнитной и нематической фазах негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ и одноионной анизотропией типа «легкая ось». Были определены температуры перехода между ферромагнитной – парамагнитной фазой и нематической – парамагнитной фазой. Установлено, что с ростом константы одноионной анизотропии эти температуры так же возрастают, поскольку учет влияния легкоосной анизотропии препятствует разрушению магнитного упорядочения тепловыми флуктуациями. Кроме того, было показано, что критическая температура в ферромагнитной и нематической фазах существенно зависят от тензорных параметров порядка и биквадратичного обменного взаимодействия.
3. Впервые было показано, что в легкоосном анизотропном негейзенберговском ферромагнетике со спином магнитного иона $S = 1$ возникает дополнительная ветвь элементарных возбуждений, связанная с «виртуальным» переходом между возбужденными уровнями, т.е. в системе реализуются три ветви элементарных возбуждений, две из которых являются «поперечными», а одна «продольной». Также показано, что динамические свойства системы в ферромагнитной и нематической фазах принципиально различаются. В ферромагнитной фазе при низких значениях температуры и малых значениях константы одноионной анизотропии «поперечные» ветви являются «запутанными», но с ростом температуры и анизотропии «расталкиваются». В нематической фазе «поперечные» ветви возбуждений не являются «запутанными».

4. Впервые была построена фазовая диаграмма для легкоосного анизотропного негейзенберговского ферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ при произвольных значениях температуры и константы одноионной анизотропии. Было показано, что линия фазового перехода не зависит от температуры и константы одноионной анизотропии, и в точности совпадает с линией фазового перехода при температуре близкой к абсолютному нулю. Кроме того, фазовый переход между ферромагнитной и нематической фазами является вырожденным фазовым переходом первого рода.

РАЗДЕЛ 3. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИЛЬНО АНИЗОТРОПНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

Помимо исследований анизотропных негејзенберговских магнетиков в последние годы большой интерес представляет собой изучение скомпенсированных магнетиков или антиферромагнетиков [54-57], что позволяет активно развиваться спинтронике, где антиферромагнитные системы находят свое практическое применение [1-10, 54-57].

Повышенный интерес к антиферромагнетикам объясняется тем, что динамические параметры в них являются обменно-усиленными, что приводит к тому, что ими достаточно легко манипулировать [61-63]. Активное влияние спинового тока на магнетики с нулевым интегральным магнитным моментом было показано в работе [57]. Это позволяет активно использовать антиферромагнетики в спинтронике, повышая скорость работы систем считывания и записи информации и существенно увеличивая рабочую частоту генераторов с накачкой спиновым током [58,61-66].

Отдельно стоит отметить вопрос о поведении антиферромагнетиков при наличии внешнего магнитного поля и одноионной анизотропии. В такого рода магнитных системах одноионная анизотропия, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием, вносит весомый вклад при формировании термодинамических и динамических свойств. Особый интерес представляют магнетики, в которых значение константы одноионной анизотропии сравнимо или превосходит значение величины константы обменного взаимодействия. В этом случае в магнетике возможна реализация квадрупольных фазовых состояний [24,30,53]. В работе [41] было показано, что даже при абсолютном нуле температур в системе возникает квантовое сокращение спина на узле, т.е. возможна ситуация, когда состояние с нулевым средним значением спина ($\langle \vec{S} \rangle = 0$) становится основным. Такие фазы получили название квадрупольных [24,30,53]. Несмотря на то, что

среднее значение спина равно нулю, эти состояния не являются нематическими, в точном смысле этого термина, поскольку симметрия квадрупольных средних в них чисто одноосная, иными словами одна из главных осей квадрупольного эллипсоида параллельна оси анизотропии, а сам эллипсоид вырождается в эллипс с эксцентриситетом равным единице. Достаточно перспективным кандидатом для реализации подобных фазовых состояний является изингоподобный двухподрешеточный легкоплоскостной антиферромагнетик [75].

Целью третьего раздела диссертации является исследование статических и динамических свойств изинговского сильно анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ во внешнем магнитном поле при низких температурах.

3.1 МОДЕЛЬ. КОЛЛИНЕАРНЫЕ ФАЗЫ

Рассмотрим трехмерный антиферромагнетик, обладающей простой кубической кристаллической решеткой и двумя эквивалентными подрешетками. Значение спина магнитного иона в каждой из подрешеток $S = 1$. Будем предполагать, что в магнетике присутствует большая одноосная межюнная анизотропия, ориентированная вдоль оси C_3 , т.е. антиферромагнетик является изингоподобным. Помимо этого, в системе присутствует большая одноионная анизотропия типа «легкая плоскость», сравнимая с константами обменного взаимодействия, или даже превосходящая их. Дальнейшие рассмотрения будем проводить, предполагая, что система находится во внешнем магнитном поле, также ориентированном вдоль оси C_3 . Выбирая в качестве оси C_3 ось OZ , гамильтониан такой системы можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_{nn'} (\hat{S}_n^z \hat{S}_{n'}^z) + \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{mm'} (\hat{S}_m^z \hat{S}_{m'}^z) + \frac{1}{2} \sum_{nm} \check{J}_{nm} (\hat{S}_n^z \hat{S}_m^z) + \\ & + D \sum_{i=n,m} (\hat{S}_i^z)^2 - H \sum_{i=n,m} \hat{S}_i^z, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где n и m – номера узлов первой и второй подрешёток, соответственно; $\check{J} > 0$ – константа межподрешеточного обменного взаимодействия; $J < 0$ – константа обменного взаимодействия в подрешетках; H – внешнее магнитное поле в энергетических единицах, ориентированное перпендикулярно базисной плоскости вдоль оси OZ ; $D > 0$ – константа легкоплоскостной одноионной анизотропии (базисная плоскость – плоскость XOY). Кроме того, дальнейшее рассмотрение будем проводить для случая низких температур ($T \ll T_N$, T_N – температура Нееля).

Подобная модель уже исследовалась в работе [90], однако там рассматривались свойства слабо анизотропного ($D \ll J$) антиферромагнетика. В то время, как настоящее исследование рассматривает свойства сильно анизотропного антиферромагнетика ($D \gg J, \check{J}$), находящегося во внешнем магнитном поле.

Несмотря на то, что рассматриваемая система и является моделью, существуют реальные магнетики, которые по своим характеристикам соответствуют данной модели. К примеру, антиферромагнетик $NiCl_2 2SC(NH_2)_2$, в котором спин ионов Ni^{2+} равен единице, а большая легкоплоскостная одноионная анизотропия позволяет реализоваться синглетному основному состоянию со значением проекции спина $S^z = 0$.

Рассматриваемая модель не вполне соответствует реальным материалам, таким как $CsFeBr_3$, $CsFeCl_3$ или $CsNiBr_3$. Эти отличия прежде всего касаются типа кристаллической решетки (трех- и двухподрешеточные антиферромагнетики), а также наличию в рассматриваемой модели одноосной анизотропии межионной природы. Однако, как отмечено в [88] $CsFeBr_3$ обладает небольшой межионной анизотропией (см. таблицу 1 в [88]). Также, отметим, что подобного рода модель была исследована в работе [90]. Однако в этой работе были исследованы свойства слабо анизотропного $D \ll J$ антиферромагнетика. В данном разделе исследуется влияние большой одноионной анизотропии $D \gg J, \check{J}$

и внешнего магнитного поля на фазовые состояния и спектральные свойства антиферромагнетика со значением спина магнитного иона $S = 1$.

Точно учесть влияние одноионной анизотропии можно, используя технику операторов Хаббарда [81-87,97-99], построенных на собственных функциях одноузельного гамильтониана.

Выделяя из гамильтониана (3.1) средние поля в подрешетках $\langle \hat{S}_1^z \rangle$ и $\langle \hat{S}_2^z \rangle$, получим одноузельный гамильтониан, который представляет собой сумму одноузельных гамильтонианов подрешеток:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_0^{(2)} + \varepsilon, \quad (3.2)$$

где $\hat{H}_0^{(i)} = \bar{H}_i \hat{S}_i^z + D (\hat{S}_i^z)^2$ – одноузельный гамильтониан i -ой подрешетки ($i = 1, 2$);

$\bar{H}_i = -H + J \langle \hat{S}_i^z \rangle + \check{J} \langle \hat{S}_{i\pm 1}^z \rangle$ – среднее поле i -ой подрешетки, причем верхний знак в индексах соответствует первой подрешетке, а нижний – второй;

$\varepsilon = -\frac{J}{2} (\langle \hat{S}_1^z \rangle^2 + \langle \hat{S}_2^z \rangle^2) - \check{J} \langle \hat{S}_1^z \rangle \langle \hat{S}_2^z \rangle$ – энергия нулевых колебаний.

На базисе собственных функций оператора \hat{S}^z каждой из подрешеток построим операторы Хаббарда [81-87,97-99] $\hat{X}^{M'M} = |M'\rangle \langle M|$, описывающие переход магнитного иона из состояния $|M\rangle$ в состояние $|M'\rangle$, где $M = \pm 1; 0$. Операторы Хаббарда связаны со спиновыми операторами следующим образом:

$$\hat{S}^+ = \sqrt{2} (\hat{X}^{10} + \hat{X}^{0-1}); \hat{S}^- = \sqrt{2} (\hat{X}^{01} + \hat{X}^{-10}); \hat{S}^z = \hat{X}^{11} - \hat{X}^{-1-1}.$$

Переписанный в терминах операторов Хаббарда одноузельный гамильтониан (3.2) является диагональным:

$$\hat{H}_0 = \sum_M (E_M^{(1)} + \varepsilon) \hat{X}_1^{MM} + \sum_M (E_M^{(2)} + \varepsilon) \hat{X}_2^{MM}, \quad (3.3)$$

здесь $E_M^{(i)}$ – энергетические уровни магнитного иона i -ой подрешетки; \hat{X}_i^{MM} – диагональные операторы Хаббарда i -ой подрешетки.

Перепишем гамильтониан (2.3) в явном виде:

$\hat{H}_0 = (\bar{H}_1 + D + \varepsilon) \hat{X}_1^{11} + (-\bar{H}_1 + D + \varepsilon) \hat{X}_1^{-1-1} + (\bar{H}_2 + D + \varepsilon) \hat{X}_2^{11} + (-\bar{H}_2 + D + \varepsilon) \hat{X}_2^{-1-1}$ и используя полученное выражение, найдем энергетические уровни для каждой из подрешеток:

$$\begin{aligned} E_1^{(i)} &= \bar{H}_i + D + \varepsilon; \\ E_0^{(i)} &= \varepsilon; \\ E_{-1}^{(i)} &= -\bar{H}_i + D + \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Теперь обсудим более конкретно, что в данной работе понимается под большой анизотропией. Простейшим способом является определение критического значения одноионной анизотропии при отсутствии внешнего магнитного поля. Так в данном случае (при $H = 0$) и в соответствии с результатами работы [53], можно показать, что критическому значению константы одноионной анизотропии, при которой реализуются интересующие нас эффекты соответствует выражение:

$$D_c = \frac{1}{2}(|J| + \bar{J}), \quad (3.5)$$

где учтено, что внутривузельный обмен имеет отрицательное значение.

Очевидно, что в дальнейшем будет рассматриваться магнетик с $D > D_c$. Как следует из выражения (3.4), и, учитывая (3.5), при малых значениях внешних магнитных полей ($H < D$) нижайшим энергетическим уровнем магнитного иона в каждой подрешетке является $E_0^{(i)}$.

Волновую функцию основного состояния для каждой из подрешеток представим в наиболее общем виде:

$$|\psi_i\rangle = \cos \alpha_i \cos \beta_i |1\rangle + \sin \beta_i |0\rangle + \sin \alpha_i \cos \beta_i |-1\rangle. \quad (3.6)$$

Здесь α и β являются параметрами унитарного преобразования системы и зависят как от материальных параметров магнетика, так и от значений углов ориентации магнитных моментов подрешеток.

Усредняя одноузельный гамильтониан по основным состояниям подрешеток (3.6), получим выражение для плотности свободной энергии антиферромагнетика:

$$F = \sum_{i=1,2} \left[(D + \bar{H}_i \cos 2\alpha_i) \cos^2 \beta_i - \frac{J}{2} \cos^2 2\alpha_i \cos^4 \beta_i \right] - \bar{J} \cos 2\alpha_1 \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_1 \cos^2 \beta_2. \quad (3.7)$$

Необходимо отметить, что плотность свободной энергии определяется как $F = E - TS$, где E – энергия основного состояния, T – температура, S – энтропия системы. Поскольку мы рассматриваем антиферромагнетик при $T = 0$, то плотность свободной энергии (3.7) практически совпадает с энергией основного состояния.

Среднее значение магнитного момента подрешеток (на один узел) можно представить в виде:

$$\langle \hat{S}_i^z \rangle = \cos 2\alpha_i \cos^2 \beta_i. \quad (3.8)$$

Учитывая это, представим выражения для средних полей подрешеток в виде:

$$\begin{aligned} \bar{H}_1 &= -H + J \cos 2\alpha_1 \cos^2 \beta_1 + \bar{J} \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_2; \\ \bar{H}_2 &= -H + J \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_2 + \bar{J} \cos 2\alpha_1 \cos^2 \beta_1. \end{aligned} \quad (3.9)$$

И здесь параметры α_i и β_i характеризуют спиновых состояния подрешеток антиферромагнетика.

Анализ плотности свободной энергии (3.7), с учетом соотношений (3.8) и (3.9), позволяет определить устойчивые фазовые состояния рассматриваемой системы. Минимизируя (3.7) по параметрам α_i и β_i получим систему из четырех уравнений, решения которой оказываются достаточно простыми:

- 1) $\beta_1 = \beta_2 = \frac{\pi}{2}$;
- 2) $\alpha_1 = \beta_1 = 0; \beta_2 = \frac{\pi}{2}$;
- 3) $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = 0$.

Проанализируем полученные результаты. Как следует из (3.8) и (3.6), при $\beta_1 = \beta_2 = \frac{\pi}{2}$ среднее значение намагниченности подрешеток равно $\langle \hat{S}_i^z \rangle = 0$, а векторы основного состояния имеют вид: $|\psi_i\rangle = 0$, а уровни энергии магнитного иона соответственно равны:

$$E_1^{(i)} = -H + D;$$

$$E_0^{(i)} = 0;$$

$$E_{-1}^{(i)} = H + D.$$

Отсюда следует, что в случае малых магнитных полей ($H < D$) и $D > D_c$ нижайшим уровнем энергии в каждой подрешетке является $E_0^{(i)}$. Следовательно, при низких значениях температур ($T \ll T_N$) плотность свободной энергии данного фазового состояния совпадает с энергией основного состояния:

$$F_{QU} = E_0^{(i)} = 0. \quad (3.10)$$

Такое фазовое состояние носит название квадрупольной фазы (QU) и характеризуется компонентами тензорных квадрупольных моментов [31,37,38,53,93-96,100]. Важно отметить, что QU фаза реализуется в широком интервале магнитных полей, от $H = 0$ до критического значения $H_{c_1} \geq D$. При достижении критического значения магнитного поля происходит инверсия основного состояния и нижайшим энергетическим уровнем становится $E_1^{(i)}$, и магнетик переходит в другое фазовое состояние. Величину критического магнитного поля H_{c_1} можно определить, если известна линия фазового перехода из QU фазы.

Следующим теперь случай, когда параметры α_i и β_i принимают значения $\alpha_1 = \beta_1 = 0$ и $\beta_2 = \frac{\pi}{2}$, при этом предполагается, что магнитное поле $H > H_1$, т.е. мы находимся вне области QU фазы. В этом случае, как видно из (3.8), значение среднего магнитного момента первой подрешетки максимально и равно $\langle \hat{S}_1^z \rangle = 1$, а

средний магнитный момент во второй подрешетке $\langle \hat{S}_2^z \rangle = 0$. Как следует из (3.4) и (3.9), энергия основного состояния первой подрешётки имеет вид:

$$E_1^{(1)} = -H - \frac{J}{2} + D, \quad (3.11)$$

а второй:

$$E_0^{(2)} = 0. \quad (3.12)$$

Векторы основного состояния подрешеток принимают следующий вид: $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle$.

Таким образом, с ростом внешнего магнитного поля ($H > H_{c1}$) рассматриваемая система переходит в состояние, при котором для характеристики первой подрешетки используются векторные параметры порядка, а для характеристики второй – тензорные. Назовем это состояние с пониженным спином (LS). Такие же состояния для антиферромагнетика с малой одноионной анизотропией было определено в [95]. Кроме того, подобная фаза реализуется в изотропном негейзенберговском магнетике с $S = 2$ в отсутствие магнитного поля [69].

Анализируя выражения (3.11) и (3.12) можно показать, что плотность свободной энергии системы при низких температурах:

$$F_{LS} = -H + \frac{J}{2} + D. \quad (3.13)$$

Равенство свободных энергий (3.10) и (3.13) позволяет получить линию фазового перехода между QU и LS фазами:

$$H_1 = D - \frac{|J|}{2}. \quad (3.14)$$

При этом было учтено, что константа обменного взаимодействия внутри подрешетки $J < 0$. Магнитное поле, в выражении (3.14) представляет собой поле перехода из QU в LS состояние.

Теперь рассмотрим случай, когда $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = 0$. Из (3.8) видно, что средние значения магнитных моментов подрешеток равны $\langle \hat{S}_1^z \rangle = \langle \hat{S}_2^z \rangle = 1$, а

векторы основного состояния имеют вид: $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |1\rangle$. Энергетические уровни принимают следующие значения:

$$E_1^{(1)} = E_1^{(2)} = -H + D - |J| + \check{J}.$$

А значит, исследуемая система переходит в ферромагнитное состояние (FM фазу).

Плотность свободной энергии при низких температурах равна:

$$F_{FM} = 2D - 2H - |J| + \check{J}. \quad (3.15)$$

Сравнивая выражения (3.13) и (3.15) можно получить поле перехода между LS и FM фазами:

$$H_2 = D - \frac{|J|}{2} + \check{J}. \quad (3.16)$$

Таким образом, в изинговском сильно анизотропном антиферромагнетике со значением спина магнитного иона $S = 1$, в зависимости от величины внешнего магнитного поля могут возникать три устойчивые фазы, которые, с некоторой долей условности, можно назвать «коллинеарными» фазами.

Однако, возможно, данные фазовые состояния не являются единственными. Можно предположить, что в системе возможна реализация неколлинеарного спинового состояния типа спин-флоп фазы (SF) или «сверхтвердой» фазы (SS) [68,73,75,91,92], при определенных соотношениях материальных параметров системы.

3.2 МОДЕЛЬ. НЕКОЛЛИНЕАРНЫЕ ФАЗЫ

Поскольку мы предполагаем возможным реализацию фазы неколлинеарного типа, рассмотрим поведение магнитной системы, считая, что магнитные моменты подрешеток образуют углы φ_1 и φ_2 с осью квантования. Рассмотрим самый общий случай, когда углы φ_1 и φ_2 не равны между собой, т.е. в системе возможна реализация «сверхтвердой» фазы [68,73,75,91,92]. Если углы совпадают между собой, то это соответствует спин-флоп состоянию [68,73,75,91,92].

Для упрощения дальнейших вычислений повернем вокруг оси ОУ магнитный момент каждой из подрешеток на угол φ_1 и φ_2 , соответственно:

$$\begin{aligned} S_n^z &= \tilde{S}_n^x \sin \varphi_1 + \tilde{S}_n^z \cos \varphi_1; \\ S_m^z &= \tilde{S}_m^x \sin \varphi_2 - \tilde{S}_m^z \cos \varphi_2. \end{aligned}$$

После всех преобразований гамильтониан (3.1) примет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J \left[\tilde{S}_n^x \tilde{S}_{n'}^x \sin^2 \varphi_1 + (\tilde{S}_n^z \tilde{S}_{n'}^x + \tilde{S}_n^x \tilde{S}_{n'}^z) \cos \varphi_1 \sin \varphi_1 + \tilde{S}_n^z \tilde{S}_{n'}^z \cos^2 \varphi_1 \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J \left[\tilde{S}_m^x \tilde{S}_{m'}^x \sin^2 \varphi_2 + (\tilde{S}_m^z \tilde{S}_{m'}^x + \tilde{S}_m^x \tilde{S}_{m'}^z) \cos \varphi_2 \sin \varphi_2 + \tilde{S}_m^z \tilde{S}_{m'}^z \cos^2 \varphi_2 \right] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n,m} \tilde{J} \left[\tilde{S}_n^x \tilde{S}_m^x \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \tilde{S}_n^z \tilde{S}_m^x \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \tilde{S}_n^x \tilde{S}_m^z \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \right. \\ &\quad \left. - \tilde{S}_n^z \tilde{S}_m^z \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \right] + \\ &+ D \sum_n \left[(\tilde{S}_n^x)^2 \sin^2 \varphi_1 + (\tilde{S}_n^z \tilde{S}_n^x + \tilde{S}_n^x \tilde{S}_n^z) \cos \varphi_1 \sin \varphi_1 + (\tilde{S}_n^z)^2 \cos^2 \varphi_1 \right] + \\ &+ D \sum_m \left[(\tilde{S}_m^x)^2 \sin^2 \varphi_2 + (\tilde{S}_m^z \tilde{S}_m^x + \tilde{S}_m^x \tilde{S}_m^z) \cos \varphi_2 \sin \varphi_2 + (\tilde{S}_m^z)^2 \cos^2 \varphi_2 \right] - \\ &- H \sum_n \left[\tilde{S}_n^x \sin \varphi_1 + \tilde{S}_n^z \cos \varphi_1 \right] - \\ &- H \sum_m \left[\tilde{S}_m^x \sin \varphi_2 - \tilde{S}_m^z \cos \varphi_2 \right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Выделим из гамильтониана (3.17) средние поля в подрешетках $\langle \hat{S}_1^z \rangle$ и $\langle \hat{S}_2^z \rangle$, и получим одноузельный гамильтониан, который представляет собой сумму одноузельных гамильтонианов подрешеток:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_0^{(2)} + \varepsilon, \quad (3.18)$$

где:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{(1)} &= D \cos^2 \varphi_1 (\hat{S}_n^z)^2 + D \sin^2 \varphi_1 (\hat{S}_n^x)^2 - H \cos \varphi_1 \hat{S}_n^z + H \sin \varphi_1 \hat{S}_n^x + \\ &+ 2J \cos^2 \varphi_1 \hat{S}_n^z \langle \hat{S}^z \rangle + J \sin 2\varphi_1 \hat{S}_n^x \langle \hat{S}^z \rangle - \tilde{J} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \hat{S}_n^z \langle \hat{S}^z \rangle - \\ &- J \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \hat{S}_n^x \langle \hat{S}^z \rangle; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0^{(2)} &= D \cos^2 \varphi_2 \left(\hat{S}_m^z \right)^2 + D \sin^2 \varphi_2 \left(\hat{S}_m^x \right)^2 + H \cos \varphi_2 \hat{S}_m^z - H \sin \varphi_2 \hat{S}_m^x + \\
&+ 2J \cos^2 \varphi_2 \hat{S}_m^z \left\langle \hat{S}^z \right\rangle - J \sin 2\varphi_2 \hat{S}_m^x \left\langle \hat{S}^z \right\rangle - J_3 \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \hat{S}_m^z \left\langle \hat{S}^z \right\rangle + \\
&+ J_3 \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \hat{S}_m^x \left\langle \hat{S}^z \right\rangle; \\
\varepsilon &= -J \cos^2 \varphi_1 \left\langle \hat{S}^z \right\rangle^2 - J \cos^2 \varphi_2 \left\langle \hat{S}^z \right\rangle^2 - \check{J} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \left\langle \hat{S}^z \right\rangle^2.
\end{aligned}$$

Построим операторы Хаббарда на базисе собственных волновых функций каждой из подрешеток спинового оператора \hat{S}^z .

В терминах операторов Хаббарда гамильтониан (3.18) не является диагональным, а потом приведем его к диагональному виду при помощи u -преобразований Боголюбова $H = U(\gamma)U(\beta)U(\alpha)H_{0n}U^+(\gamma)U^+(\beta)U^+(\alpha)$.

$$\begin{aligned}
U(\alpha) &= 1 + (\cos \alpha - 1)(X^{11} + X^{00}) + \sin \alpha (X^{10} - X^{01}); \\
U(\beta) &= 1 + (\cos \beta - 1)(X^{11} + X^{-1-1}) + \sin \beta (X^{1-1} - X^{-11}); \\
U(\gamma) &= 1 + (\cos \gamma - 1)(X^{00} + X^{-1-1}) + \sin \gamma (X^{0-1} - X^{-10}).
\end{aligned}$$

После унитарного преобразования гамильтониан приобретает диагональный вид. Кроме того, отметим, что параметр γ является произвольными, поэтому, не теряя общности, можно положить его равными нулю.

Теперь решая одноузельную задачу с гамильтонианом (3.18) получим уровни энергии магнитного иона:

$$\begin{aligned}
E_1^{(i)} &= \left(A_i \cos^2 \alpha_i + C_i \sin^2 \alpha_i + D_i \sin 2\alpha_i \right) \cos^2 \beta_i + \\
&+ \left(\frac{C_i}{2} \cos \alpha_i + D_i \sin \alpha_i \right) \sin 2\beta_i + B_i \sin^2 \beta_i; \\
E_0^{(i)} &= C_i \cos^2 \alpha_i + A_i \sin^2 \alpha_i - D_i \sin 2\alpha_i; \\
E_{-1}^{(i)} &= B_i \cos^2 \beta_i - \left(\frac{C_i}{2} \cos \alpha_i + D_i \sin \alpha_i \right) \sin 2\beta_i - \\
&- \left(A_i \cos^2 \alpha_i + C_i \sin^2 \alpha_i + D_i \sin 2\alpha_i \right) \sin^2 \beta_i.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Где для сокращения записи введены обозначения:

$$\begin{aligned}
A_i &= D \cos^2 \varphi_i + \frac{1}{2} D \sin^2 \varphi_i \mp H \cos \varphi_i + J \cos^2 \varphi_i \cos 2\alpha_i \cos^2 \beta_i - \\
&\quad - \frac{1}{2} \tilde{J} \cos \varphi_i \cos \varphi_{i\pm 1} \cos 2\alpha_{i\pm 1} \cos^2 \beta_{i\pm 1}; \\
B_i &= D \cos^2 \varphi_i + \frac{1}{2} D \sin^2 \varphi_i \mp H \cos \varphi_i - J \cos^2 \varphi_i \cos 2\alpha_i \cos^2 \beta_i + \\
&\quad + \frac{1}{2} \tilde{J} \cos \varphi_i \cos \varphi_{i\pm 1} \cos 2\alpha_{i\pm 1} \cos^2 \beta_{i\pm 1}; \\
C_i &= \frac{1}{2} D \sin^2 \varphi_i; \\
D_i &= -\frac{H}{\sqrt{2}} \sin \varphi_i \pm \frac{J}{2\sqrt{2}} \sin 2\varphi_i \cos 2\alpha_i \cos^2 \beta_i \mp \\
&\quad \mp \frac{\tilde{J}}{2\sqrt{2}} \sin \varphi_i \cos \varphi_{i\pm 1} \cos 2\alpha_{i\pm 1} \cos^2 \beta_{i\pm 1}.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Верхний знак в индексах обозначений (3.20) соответствует первой подрешетке ($i=1$), а нижний – второй подрешетке ($i=2$). При этом волновые функции основного состояния определяются выражением (3.6), а среднее значение магнитного момента в подрешетке выражением (3.8).

Выше было показано, что в системе могут возникать ферромагнитная, векторно-тензорная и квадрупольная фазы. Предположим, что неколлинеарное состояние изинговского антиферромагнетика реализуется при магнитных полях больших, чем критическое поле для LS фазы. Такое предположение справедливо, т.к. в LS фазе магнитный момент первой подрешетки ориентирован по полю и максимально намагничен, а вторая подрешетка находится в квадрупольном состоянии. Поэтому, при росте магнитного поля магнитный момент первой подрешетки изменяться не будет, а во второй подрешетке модуль магнитного момента начнет возрастать и изменять свою ориентацию с ростом поля и, при некотором критическом значении поля, скачком сориентируется в направлении поля.

Таким образом, при достаточно больших полях система перейдет в неколлинеарную фазу, которую можно ассоциировать с SS фазой или спин-флоп

фазой. Интерес представляет поведение системы вблизи фазового перехода в FM и LS фазы.

Выше отмечалось, что в предполагаемой неколлинеарной фазе намагниченность одной из подрешеток ориентирована вдоль поля и достигает максимального значения, а намагниченность второй подрешетки составляет определенный угол с направлением внешнего магнитного поля (т.е. осью OZ). Что фактически означает, что параметры унитарного преобразования для первой подрешетки равны нулю ($\alpha_1 = \beta_1 = 0$), что согласно (3.8) обеспечивает среднее значение магнитного момента равное единице. Используя этот факт можно переписать систему уравнений для определения параметров унитарного преобразования для второй подрешетки следующим образом:

$$\begin{aligned}
 & -H \sin \varphi_2 - \frac{1}{2} J \sin 2\varphi_2 \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_2 + \frac{1}{2} \check{J} \sin \varphi_2 = 0, \\
 & D \sin^2 \varphi_2 \cos 2\alpha_2 + \\
 & + \left(\check{J} \cos \varphi_2 - 2H \cos \varphi_2 - 2J \cos^2 \varphi_2 \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_2 \right) \sin 2\alpha_2 = 0, \\
 & \left[\begin{aligned} & \frac{D}{2} \sin^2 \varphi_2 (1 + \cos^2 \varphi_2 - \sin 2\alpha_2) - D \cos^2 \varphi_2 + \\ & + \left(\frac{1}{2} \check{J} \cos \varphi_2 - H \cos \varphi_2 - J \cos^2 \varphi_2 \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_2 \right) \cos 2\alpha_2 \end{aligned} \right] \sin 2\beta_2 = 0
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Первое уравнение системы дает тривиально решение φ_2 равно 0 или π . При этом решение $\varphi_2 = 0$ является нефизичным, поскольку фактически означает, что реализуется FM фаза вместо неколлинеарной фазы, а второе решение $\varphi_2 = \pi$ соответствует окрестности фазового перехода из неколлинеарной фазы в LS фазу. Нетривиальное решение этой системы относительно угла φ_2 в общем виде выглядит следующим образом:

$$\operatorname{tg}^2 \varphi_2 = \frac{2}{1 - \sin 2\alpha_2} \tag{3.22}$$

Легко заметить, что угол ориентации намагниченности во второй подрешетке является функцией материальных параметров системы (констант обменных взаимодействий и внешнего магнитного поля). Найдем приближенного

решение уравнения (3.20) вблизи линии фазового перехода в FM фазу, когда значение параметра α_2 стремится к нулю, а значит $\langle \hat{S}_2^z \rangle \rightarrow 1$. В этом случае:

$$\operatorname{tg} \varphi_2 = -\sqrt{2} \quad (3.22)$$

Отметим, что значение угла $\varphi_2 = \operatorname{arctg}(-\sqrt{2})$ является критическим. После того, как ориентация намагниченности второй подрешетки достигает этого значения, происходит срыв намагниченности, что может свидетельствовать о фазовом переходе первого рода по полю.

Предельные значения угла φ_2 в неколлинеарной фазе вблизи линий фазовых переходов, позволяют найти эти линии, сравнивая свободные энергии в соответствующих фазах.

Сначала определим линию фазового перехода из неколлинеарной фазы в LS фазу, если $\varphi_2 = \pi$. В этом случае параметры u - v преобразования для второй подрешетки из системы (3.21) равны:

$$\cos 2\alpha_2 = 1 - \frac{2D}{\check{J} - 2H} \quad \text{и} \quad \cos^2 \beta_2 = \frac{(\check{J} - 2H)^2}{2J(2D + 2H - \check{J})}.$$

При этом намагниченность второй подрешетки равна:

$$\langle \hat{S}_2^z \rangle = \frac{\check{J} - 2H}{2|J|}.$$

Учитывая данные соотношения и выражение (3.19) получим нижайший энергетический уровень второй подрешетки:

$$E_1^{(2)} = (D - H)(\cos^2 \alpha_2 \cos^2 \beta_2 + \sin^2 \beta_2) - \left(|J| \langle \hat{S}_2^z \rangle - \frac{\check{J}}{2} \right) (\cos^2 \alpha_2 \cos^2 \beta_2 - \sin^2 \beta_2), \quad \text{а}$$

энергия основного состояния первой подрешетки, в которой $\alpha_1 = \beta_1 = 0$; $\varphi_1 = 0$ и $\langle \hat{S}_1^z \rangle = 1$ равна:

$$E_1^{(1)} = D - H - |J| + \frac{\check{J}}{2} \langle \hat{S}_2^z \rangle.$$

Таким образом, свободная энергия неколлинеарной фазы вблизи фазового перехода LS фаза – неколлинеарная фаза, при $T \rightarrow 0$ равна:

$$\begin{aligned}
F_{non-col} = E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = D - H - |J| + \frac{\tilde{J}}{2} \langle \hat{S}_2^z \rangle + \\
+ (D - H) (\cos^2 \alpha_2 \cos^2 \beta_2 + \sin^2 \beta_2) - \\
- \left(|J| \langle \hat{S}_2^z \rangle - \frac{\tilde{J}}{2} \right) (\cos^2 \alpha_2 \cos^2 \beta_2 - \sin^2 \beta_2).
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Сравнивая выражения (2.13) и (2.23) и учитывая явный вид параметров u - v преобразования для второй подрешетки и выражения для среднего значения намагниченности, можно определить поле фазового перехода между неколлинеарной и LS фазой. Уравнение для определения этого поля является кубическим и имеет громоздкий вид, поэтому приведем лишь его решение:

$$H_{non-col-LS} \approx \frac{D}{2} - \frac{|J|}{2} - \tilde{J} \tag{3.24}$$

Анализ выражений (3.14) и (3.23) показывает, что поле перехода из LS фазы в неколлинеарную фазу существенно меньше, чем поле перехода из QU фазы в LS, т.е. мы получили, что неколлинеарное состояние, по магнитному полю, реализуется в области существования QU фазы. Данный результат не является физическим, и противоречит исходному предположению, что неколлинеарная по магнитному полю фаза «лежит» выше LS фазы. Таким образом, в рассматриваемой магнитной системе неколлинеарная фаза (спин-флоп или «сверхтвердая» фаза) не реализуется.

3.3 СПЕКТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Для анализа спектров элементарных возбуждений воспользуемся методом функций Грина для операторов Хаббарда [81-83,97-99], который уже был описан в первой главе.

Рассмотрим систему в FM фазе. Основной энергетический уровень в этом состоянии E_1 , а волновая функция – это состояние с максимальной проекцией

спина $|\psi\rangle = |1\rangle$. Используя общее дисперсионное уравнение (1.12) определим спектры возбуждений в FM фазе. В случае рассмотрения низких температур:

$$\varepsilon_{FM} = H - D + |J| - \tilde{J}. \quad (3.25)$$

Отметим, что данный спектр является бездисперсионными, что характерно для изинговского антиферромагнетика. Кроме того, спектр (3.25) является «поперечной» или прецессионной ветвью возбуждений и связан с переходом магнитного иона с нижайшего энергетического уровня E_1 на первый возбужденный уровень E_0 .

Теперь рассмотрим устойчивость FM фазы относительно элементарных возбуждений. Из условия обращения энергетической щели в ноль в спектре (3.25) получим, что мода теряет устойчивость при:

$$H'_2 = D - |J| + \tilde{J}. \quad (3.26)$$

Если среднее значение намагниченности на узле кристаллической решетки равно нулю, то в системе возникает QU фаза. Основное состояние, которой описывается волновой функцией $|\psi\rangle = |0\rangle$. В QU фазе происходит инверсия энергетических уровней и нижайшим становится E_0 , а свободная энергия в этом случае имеет вид: $F_{QU} = 0$.

Решение дисперсионного уравнения в общем случае дают выражения для спектров в QU фазе:

$$\varepsilon_1 = D - H; \quad (3.27)$$

$$\varepsilon_2 = D + H. \quad (3.28)$$

Как и в случае с FM фазой, спектры в QU фазе являются бездисперсионными. И как видно из (3.27) QU фаза теряет устойчивость на линии:

$$H'_1 = D. \quad (3.29)$$

Аналогичным образом найдем спектры в LS фазе:

$$\varepsilon_1 = D - H - |J|; \quad (3.30)$$

$$\varepsilon_2 = H - D - \check{J}; \quad (3.31)$$

$$\varepsilon_3 = H + D - \check{J}. \quad (3.32)$$

И из условия обращения энергетической щели в ноль в спектрах (3.30) и (3.31) найдем линии потери устойчивости LS фазы при фазовом переходе в QU фазу:

$$H_1'' = D - |J|. \quad (3.33)$$

И в FM фазу:

$$H_2' = D + \check{J}. \quad (3.34)$$

3.4 ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Полученные результаты позволяют построить фазовую диаграмму сильно анизотропного изинговского антиферромагнетика во внешнем магнитном поле (рис.3.1).

Как видно из (рис.3.1) линия потери устойчивости (3.29) спектра возбуждений в QU фазе лежит выше линии фазового перехода QU-LS, а линия потери устойчивости (3.33) спектра возбуждений в LS фазе лежит ниже фазового перехода между QU и LS фазами. Линии потери устойчивости в LS и FM фазах ведут себя аналогичным образом: линия потери устойчивости FM фазы лежит ниже линии фазового перехода между LS и FM фазами, в то время как линия потери устойчивости LS фазы лежит выше линии фазового перехода. Такое поведение свидетельствует о том, что фазовые переходы QU-LS и LS-FM являются фазовыми переходами первого рода.

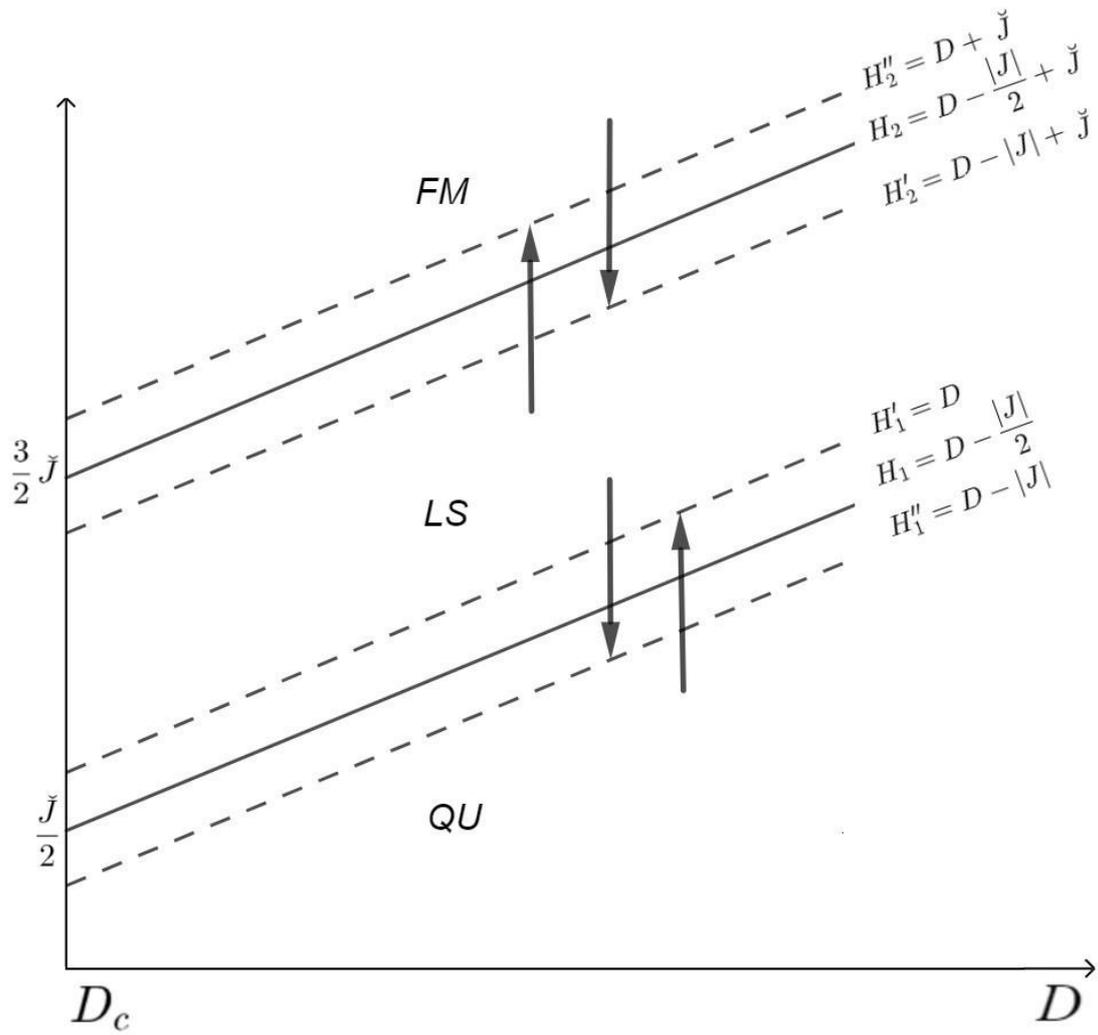


Рисунок 3.1. Фазовая диаграмма изинговского сильно анизотропного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$. Сплошные линии – линии фазовых переходов, пунктирные линии – линии потери устойчивости спектров элементарных возбуждений

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ТРЕТЬЕГО РАЗДЕЛА

1. Впервые были исследованы статические и динамические свойства изинговского сильно анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S = 1$. Было показано, что в системе возможна реализация следующих стабильных фазовых состояний: ферромагнитного, квадрупольного и фазового состояния с пониженным спином (LS-фазы).
2. Было показано, что в изинговском сильно анизотропном легкоплоскостном антиферромагнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S = 1$ энергетически не выгодна реализация неколлинеарных фазовых состояний типа спин-флоп фазы или «сверхтвёрдой фазы».
3. Впервые была показано, что в изинговском сильно анизотропном легкоплоскостном антиферромагнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S = 1$ возможна реализация фазового состояния с пониженным спином (LS-фазы), при котором одна подрешетка характеризуется векторными параметрами порядка, а вторая – тензорными.
4. Впервые было показано, что в изинговском сильно анизотропном антиферромагнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S = 1$ фазовые переходы между устойчивыми фазами, по магнитному полю, являются фазовыми переходами первого рода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных теоретических исследований были получены следующие результаты:

1. Впервые было показано, что в анизотропном негейзенберговском магнетике со спином магнитного иона $S=1$ учет анизотропии обоих типов, как «легкой оси», так и «легкой плоскости» не изменяет стабильные фазовые состояния в сравнении с изотропным случаем. В системе так же реализуются две фазы, характеризующиеся векторными параметрами порядка (ферромагнитная и антиферромагнитная) и две фазы, характеризующиеся тензорными параметрами порядка (нематическая и ортогонально нематическая).
2. Впервые было показано, что типы фазовых переходов в легкоосном негейзенберговском магнетике со спином $S=1$ являются вырожденными фазовыми переходами первого рода, как и в случае изотропной модели. Все фазовые переходы между фазами протекают по продольной ветви элементарных возбуждений, и являются вырожденными переходами первого рода.
3. Впервые было показано, что учет одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» в негейзенберговском магнетике со спином $S=1$ приводит к тому, что фазовые переходы перестают быть вырожденными. Наблюдаемые фазовые переходы соответствуют фазовым переходам первого рода, протекающим через область сосуществования фаз. Кроме того, было показано, что в легкоплоскостном магнетике возможен прямой фазовый переход между нематической и ортогонально нематической, в то время как в легкоосном и изотропном случае данный фазовый переход невозможен, и ему соответствовала $SU(3)$ точка.
4. Впервые было исследовано влияние температурных флуктуаций и величины константы одноионной анизотропии на поведение параметров порядка, плотности свободной энергии и спектров элементарных

возбуждений для негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$.

5. Впервые был проведен численный анализ векторных и тензорных параметров порядка в ферромагнитной и нематической фазах негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ и одноионной анизотропией типа «легкая ось». Были определены температуры перехода между ферромагнитной – парамагнитной фазой и нематической – парамагнитной фазой, кроме того, было показано, что с ростом константы одноионной анизотропии эти температуры так же возрастают, поскольку учет влияния легкоосной анизотропии препятствует разрушению магнитного упорядочения тепловыми флуктуациями. Кроме того, было показано, что критическая температура как в ферромагнитной, так в и нематической фазах существенно зависят от тензорных параметров порядка и биквадратичного обменного взаимодействия.
6. Впервые было показано, что в легкоосном анизотропном негейзенберговском ферромагнетике со спином магнитного иона $S = 1$ возникает дополнительная ветвь элементарных возбуждений, связанная с переходом между возбужденными уровнями магнитного иона, т.е в магнетике реализуется три ветви элементарных возбуждений, две из которых являются «поперечными», а одна «продольной». Динамические свойства системы в ферромагнитной и нематической фазах принципиально различаются. В ферромагнитной фазе при низких температурах и малых значениях константы одноионной анизотропии «поперечные» ветви являются «запутанными» между собой, а с ростом температуры и анизотропии начинаются «расталкиваться». В нематической фазе «поперечные» ветви возбуждений не являются запутанными.
7. Впервые была построена фазовая диаграмма для легкоосного анизотропного негейзенберговского ферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$ при произвольных значениях температуры и константы одноионной анизотропии. Было показано, что линия фазового перехода не

зависит от температуры и константы одноионной анизотропии и в точности совпадает с линией фазового перехода при $T = 0$. Фазовый переход между ферромагнитной и нематической фазами является вырожденным фазовым переходом первого рода.

8. Впервые было показано, что в изинговском сильно анизотропном антиферромагнетике во внешнем магнитном поле со спином магнитного иона $S = 1$ возможна реализация только коллинеарных фазовых состояний (FM, QU и LS), а реализация неколлинеарных фаз типа спин-флоп фазы или «сверхтвёрдой» фазы энергетически не выгодна. Впервые было показано, что фазовые переходы, по магнитному полю, между устойчивыми фазами являются фазовыми переходами первого рода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Parkin S. Magnetically engineered spintronics sensors and memory / Parkin S., Jiang X., Kaiser C. // *Proceedings of IEEE*. – 2003. – V.91(5). – P.661-680
2. Demidov V. Magnetic nano-oscillator driven by pure spin current / Demidov V., Urazhdin S., Ulrichs H. // *Nature Mater.* – 2012. – V.11(12). – P.1028-1031
3. Wolf S. A. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future / Wolf S. A., Awschalom D.D., Buhrman R.A. // *Science*. – 2001. – V.294(5546). – P.1488-1495
4. Zutic I. Spintronics: Fundamental and application / Zutic I., Fabian. J., Das Sarma S. // *Reviews of modern physics*. – 2004. – V.76(2). – P.323-410
5. Bader S. D. Spintronics / Bader S. D., Parkin S.S.P. // *Annual Review of condensed matter physics*. – 2010. – V.1. – P.71-88
6. Wolf S. A. Spintronics – A retrospective and perspective / Wolf S. A., Chtchelkanova A.Y., Treger D.M. // *IBM Journal of Research and Development*. – 2006. – V.50(1). – P.101-110
7. Fert A. Nobel Lecture: Origin, development and future of spintronics / Fert A. // *Reviews of modern physics*. – 2008. – V.80(4). – P.1517-1530
8. Ohno H. A window on the future of spintronics / Ohno H. // *Nature Materials*. – 2010. – V.9(12). – P.952-954
9. Никитов С.А. Магноника – новое направление спинтроники и спин-волновой электроники / Никитов С. А., Калябин Д.В., Лисенков И. В., Славин А. Н. // *УФН*. – 2015. – Т.185(10). – С.1099-1128
10. Fert A. Skyrmions on the track / Fert A., Cros V., Sampaio J. // *Nature Nanotechnology*. – 2013. – V.8. – P.152-156
11. Skyrme T. A non-linear field theory / Skyrme T. // *Mathematical and Physical Sciences*. – 1961. – V.260. – P.127-138
12. Skyrme T. A unified field theory of mesons and baryons / Skyrme T. // *Nuclear Physics*. – 1962. – V.31. – P.556-569

13. Heisenberg W. Anwendung der Quantenmechanik auf das Problem der anomalen Zeemaneffekte (нем.) / W. Heisenberg, P. Jordan // Zeitschrift für Physik. — 1926. — V.16. — S. 263—277
14. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus / W. Heisenberg // Zeitschrift für Physik. - 1928. - Vol. 49. - № 9-10. - P. 619-636
15. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложным обменным взаимодействием. — М.: Наука, 1988. — 231с.
16. Andreev A.F. Spin nematics / A.F. Andreev, I.A. Grishchuk // Soviet Physics JETP. — 1984. - Vol.60. - №87.- P. 467-475
17. Valkov V. V. Spectrum of excitations of an easy-plane ferromagnet (S a magnetic field / V. V. Valkov, T. A. Valkova, S. G. Ovchinnikov // Phys. Stat. Sol. (b) — 1987. — V. 142. — P. 255—263.
18. Вальков В. В. Вклад магнон-магнонного взаимодействия в термодинамику анизотропных ферромагнетиков / В. В. Вальков, С. Г. Овчинников // ЖЭТФ. — 1983. — Т. 85, № 5. — С. 1666 — 1674.
19. Nauciel-Bloch M. Spin-one heisenberg ferromagnet in the presence of biquadratic exchange / M. Nauciel-Bloch, G. Sarma, A. Castets // Phys. Rev. B. — 1972. — V. 5. — P. 4603—4609.
20. Läuchli A. Spin nematics correlations in bilinear-bicquadratic S=1 spin chain / A. Läuchli, G. Schmid, S. Trebst // Physical Review B. — 2006. — Vol. 74. — P. 144426.
21. Ivanov B.A. Effective field theory for the S=1 quantum nematic / B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk // Physical Review B. — 2003. — Vol. 68. — P. 052401.
22. Svistov L.E. New high magnetic field phase of the frustrated S=1/2 chain compound LiCuVO₄ / Svistov L.E., Fujita T., Yamaguchi H., Kimura S., Omura K., Prokofiev A., Smirnov., Honda Z., Hagiwara M. // Письма в ЖЭТФ. — 2011. — Т.93. — С.24.
23. Zhitomirsky M. E. Possibility of the field-induced spin-nematic phase in LiCuVO₄ / Zhitomirsky M. E., Tsunetsugu H. // Europhys. Lett. — 2010. — V.93

24. V.M. Loktev The peculiarities of statics and dynamics of magnetic insulators with single-ion anisotropy / V.M. Loktev and V.S. Ostrovskij // *Fizika Nizkih Temperatur.* – 1994. – V.20. – P. 983
25. B.A. Ivanov Mesoscopic antiferromagnets: statics, dynamics, and quantum tunneling (Review) / B.A. Ivanov // *Low Temp. Phys.* – 2005. – V.31. – P.635
26. Yu.A. Fridman Spin nematic and orthogonal nematic states in $S=1$ non-Heisenberg magnet / Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, and Ph.N. Klevets // *JMMM.* – 2013. – V.325. – P.125
27. Мазец И.Е. Неустойчивость Бозе-конденсата нейтральных атомов во внешнем световом поле с неоднородной интенсивностью / И. Е. Мазец // *Письма в ЖТФ.* – 1999. – Т.25. – с.77-81
28. Мазец И.Е. Субдородная спектроскопия Бозе-конденсата нейтральных атомов / И. Е. Мазец, Б.Г. Матисов // *Письма в ЖТФ.* – 1997. – Т.23. – с.33-38
29. Локтев В.М., Островский В.С. Особенности статики и динамики магнитных диэлектриков с одноионной анизотропией // *ФНТ.* – 1994. – Т.20, №10. – С.983-1016.
30. B. A. Ivanov Soliton dynamics in a spin nematic / B. A. Ivanov and R. S. Khymyn // *JETP.* – 2007. – V.104. – P. 307-318
31. Kosaka Masashi Quadrupolar ordering and magnetic properties of tetragonal / Nakamura Shintaro and Goto Terutaka, Kobayashi Hisao, Ikeda Suzumu. $TmAu_2$ // *Phys. Rev. B.* – 1998. – Vol. 58, № 10. – P. 6339-6345.
32. Chen H.H., Levy Peter M. High-Temperature Series Expansions for a Spin-1 Model of Ferromagnetism // *Phys. Rev. B.* – 1973. – Vol. 7, № 9. – P. 4284-4289.
33. Фридман Ю.А., Спириин Д.В. Влияние биквадратичного взаимодействия на магнитное упорядочение в двумерных ферромагнетиках // *ФНТ.* – 2000. – Т. 26, № 4. – С. 374-379.

- 34.Фридман Ю.А., Спирин Д.В Аномальное поведение продольно поляризованных звуковых волн в негейзенберговских ферромагнетиках // ФНТ. – 2000. – Т. 26, № 7. – С. 664-670.
- 35.Фридман Ю.А., Космачев О.А., Байрамалиева Г.Э. Фазовая диаграмма и спектры связанных магнитоупругих волн двухосного ферромагнетика с биквадратичным взаимодействием во внешнем магнитном поле // ФНТ. – 2000. – Т. 26, № 11. – С. 1108-1114.
- 36.Фридман Ю.А., Кожемяко О.В., Эйнгорн Б.Л. Влияние отрицательного биквадратичного взаимодействия на фазовые состояния и спектры связанных магнитоупругих волн легкоплоскостного ферромагнетика // ФНТ. – 2001. – Т. 27, № 5. – С. 495-499.
- 37.Fridman Yu.A. Phase Transition in Temperature “Quadrupolar Phase–Disordered Phase” in a Two-Dimensional Non-Heisenberg Ferromagnet / Fridman Yu.A. and Spirin D.V. // Phys. Stat. Sol. (b) – 2002. – Vol. 231, № 1. – P. 165-170.
- 38.Harada Kenji Quadrupolar order in isotropic Heisenberg models with biquadratic interaction / Harada Kenji, Kawashima Naoki // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65, № 5. – P. 2403-2407.
- 39.Fridman Yu.A. Influence of magnetoelastic coupling on the phase transitions in two-dimensional non-Heisenberg magnetics with biquadratic interaction / Fridman Yu.A., Klevets Ph.N., Kozhemyako O.V. // JMMM. – 2003. – Vol. 264. – P. 111-120.
- 40.Michael A. McGuire Phase transition in LaFeAsO: structural, magnetic,elastic and transport properties, heat capacity and Mossbauer spectra / Michael A. McGuire, Andrew D. Christianson, Athena S. Sefat, Brian C. Sales, Mark D. Lumsden, Rongying Jin, E. Andrew Payzant, David Mandrus, Yanbing Luan, Veerle Keppens, Vijayalaksmi Varadarajan, Joseph W. Brill, Raphael P. Hermann, Moulay T. Sougrati, Fernande Grandjean, Gary J. Long // PHYSICAL REVIEW. – 2008.
- 41.Moriya T. Theory of magnetism of NiF₂ / T. Moriya // Phys. Rev. – 1960. – V. 117, No 3. – P. 635–647.

42. Bucher E. Induced-moment systems: paramagnetic region of $\text{La}_3\text{Tl} - \text{Pr}_3\text{Tl}$ / E. Bucher, J. P. Maita, A. S. Cooper // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V. 6, No 7. – P. 2709–2716
43. K. Anders. Induced- moment ferromagnetism in Pr_3Tl / K. Anders, E. Bucher, S. Darack, J. P. Maita // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V. 6, No 7. – P. 2716–2724.
44. Birgeneau R. J. Neutron scattering from Pr_3Tl / R. J. Birgeneau, J. Als-Nielsen, E. Bucher // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V. 6, No 7. – P. 2724– 2729.
45. Furrer A. Magnetic excitations of NdAl_2 / A. Furrer, H. -G. Purwins // *Phys. Rev. B.* – 1977. – V. 16, No 5. – P. 2131–2140.
46. W. Shelp Magnetization and magnetic excitations in HoAl_2 / W. Shelp, A. Leson, W. Drewes [et al.] // *Z. Phys. B.* – 1983. – V. 51, No 1. – P. 41–47.
47. Holden T. M. Magnetic excitations of DyAl_2 in a magnetic field / T. M. Holden, W. J. L. Buyers, H. G. Purwins // *J. Phys. F.* – 1984. – V. 14. – P. 2701–2718.
48. B. Dorner. Magnetic excitations in the quasi one-dimensional antiferromagnetic singlet groundstate system CsFeBr_3 / B. Doner, D. Visser, U. Steigenberger [et al.] // *Z. Phys. B* – 1988. – V. 72, No 4. – P. 487–496.
49. Гехт Р. С. Магнитные состояния и фазовые переходы во фрустрированных антиферромагнетиках с треугольной решеткой / Р. С. Гехт // *УФН.* – 1989. – Т. 159, № 2. – С. 261–296.
50. Фридман Ю. А. Фазовые переходы в ферромагнетике с биквадратичным обменным взаимодействием и гексагональной одноионной анизотропией / Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, Б. Л. Эйнгорн // *ФНТ.* – 2005. – Т. 31, № 6. – С. 687–694.
51. Фридман Ю. А. Фазовые переходы в ферромагнетике с анизотропным биквадратичным обменным взаимодействием / Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, Ф. Н. Клевец // *ФНТ.* – 2006. – Т. 32, № 3. – С. 289–300.
52. Фридман Ю. А. Фазовая диаграмма негейзенберговского антиферромагнетика со спином единица / Ю. А. Фридман, Ф. Н. Клевец, В. Д. Спириин // *ФНТ.* – 2003. – Т. 29, № 12. – С. 1335–1340.

53. Yu.A. Fridman Quantum effects in an anisotropic ferrimagnet / Yu.A. Fridman and O.A. Kosmachev // *Phys. Solid State*. – 2009. – V.51(6). – P.1167-1171
54. Slavin A. Nonlinear Auto-Oscillator Theory of Microwave Generation by Spin-Polarized Current / A. Slavin and V. Tiberkevich // *IEEE Trans. Magn.* – 2009. – V.45. – P. 1875-1918
55. S.D. Bader Spintronics / S.D. Bader and S.S.P. Parkin, J.S. Langer (ed.) // *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* – 2010 – V.1. – P.71-88
56. V. V. Kruglyak First-Principles Calculation of Complex Metal-Oxide Materials / V. V. Kruglyak, S. Demokritov, D. Grundler // *J. Phys. D*. – 2010. – V.1. – P. 211-235
57. A.V. Chumak Spin pinning and spin-wave dispersion in nanoscopic ferromagnetic waveguides / A.V. Chumak, V. I. Vasyuchka, A. A. Serga, B. Hillebrands // *Nat. Phys.* – 2015. – V.11. – P.453-461
58. M.F. Collins Magnetics phase diagram / M.F. Collins and O.F. Petrenko // *Can. J. Phys.* – 1997. – V.75. – P. 605
59. Б.С. Думеш Влияние квантовых флуктуаций на магнитные свойства квазиодномерных треугольных антиферромагнетиков / Б.С. Думеш // *УФН*. – 2000. – Т.170. – С.403
60. Иванов Б. А. Динамика солитонов в спиновом нематике / Б. А. Иванов, Р. С. Химин // *ЖЭТФ*. – 2007. – Т.131. – С.343
61. H.V. Gomonay Spintronics of antiferromagnetic systems / H.V. Gomonay and V.M. Loktev // *Low Temp Phys.* – 2014. – V.40. – P. 22-47
62. V. Baltz Antiferromagnetic spintronics / V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak // *Rev. Mod Phys.* – 2018. – V.90.
63. M.B. Jungfleisch Perspectives of antiferromagnetic spintronics / M.B. Jungfleisch, W. Zhang, and A. Hoffmann // *Phys. Lett.* – 2018. – V.382. – P. 865-871
64. V. G. Bar'yakhtar Dynamics of domain walls in weak ferromagnets / V. G. Bar'yakhtar, B. A. Ivanov and M. V. Chetkin // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. – 1985. – V.146. – P. 417-468

65. A. Ivanov Dynamics of vortices and their contribution to the response functions of classical quasi-two-dimensional easy-plane antiferromagnet / A. Ivanov and D. D. Sheka // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V.72. – P. 404
66. E. G. Galkina Dynamic solitons in antiferromagnets / E. G. Galkina, B. A. Ivanov // *Low Temp Phys.* – 2018. – V.44. – P. 794-813
67. Y. Tanaka Magnetic-field- and pressure-induced quantum phase transition in CsFeCl₃ proved via magnetization measurements / Y. Tanaka, H. Tanaka and T. Oko // *Phys. Solid State.* – 2016.
68. Harrison A dynamical correlated effective-field treatment of the magnetic excitations in the singlet ground state antiferromagnet RbFeBr₃ / Harrison and D. Visser // *Cond. Matter.* – 1992. – V.4. – P. 6977
69. O. A. Kosmachev Phase states of a magnetic material with the spin $S=2$ and the isotropic exchange interaction / O. A. Kosmachev, Yu. A. Fridman, and B. A. Ivanov // *JETP Letters.* – 2017. – V.105. – P.453
70. L. Balents Spin liquids in frustrated magnets / L. Balents // *Nature.* – 2010. – V.464. – P.199
71. Judit Romhányi Supersolid phase and magnetization plateaus observed in the anisotropic spin-3/2 Heisenberg model on bipartite lattices / Judit Romhányi, Frank Pollmann, and Karlo Penc // *PhysRev B.* – 2011. – V.84.
72. D. Peters Spin-one Heisenberg antiferromagnetic chain with exchange and single-ion anisotropies / D. Peters, I.P. McCulloch, W. Selke // *PhysRevB.* – 2009. – V.79.
73. P. Sengupta Field-Induced Supersolid Phase in Spin-One Heisenberg Models / P. Sengupta and C.D. Batista // *PhysRevLet.* – 2007. – V.98.
74. Luis Seabra Novel phases in a square-lattice frustrated ferromagnet: 1/3-magnetisation plateau, helicoidal spin-liquid and vortex crystal / Luis Seabra and Nic Shannon // *PhysRevB.* – 2011. – V.83.
75. Y.A. Fridman “Supersolid” phase in spin-1 easy-plane antiferromagnetic / Y.A. Fridman, O.A. Kosmachev and P.N. Klevets // *Eur. Phys. J. B.* – 2011. – V.81. – P. 185-196

76. Е. А. Ярыгина Динамические и статические свойства двухподрешеточного негейзенберговского антиферромагнетика / Е. А. Ярыгина, Я. Ю. Матюнина, Ф. Н. Клевец, Ю. А. Фридман // ЖЭТФ. – 2019. – Т.156. – С.1175-1184
77. Е. А. Yarygina Dynamic and static properties of two-sublattices anisotropic non-Heisenberg magnet / E. A. Yarygina, Ya. Yu. Matyunina, Pn. N. Klevets, Yu. A. Fridman // JMMM. – 2020. – V.512. – P.167043
78. Е. А. Yarygina Effect of temperature on the dynamic and static properties of a non-Heisenberg anisotropic ferromagnet / E. A. Yarygina, Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, V. Kazachek // JMMM. – 2023.
79. Е. А. Yarygina Effect of an external magnetic field on the phase states and dynamic properties of the strongly anisotropic antiferromagnet/ E. A. Yarygina, Pn. N. Klevets, O.A.Kosmachev, Yu. A. Fridman, Vladimir Khovaylo// JMMM. – 2022
80. K. Stevens Matrix Elements and Operator Equivalents Connected with the Magnetic Properties of Rare earth Ions / K. Stevens // Proc. Phys. Soc. – 1952. – V. 65. – P.209
81. В. В. Вальков Унитарные преобразования группы $U(N)$ и диагонализация многоуровневых гамильтонианов / В. В. Вальков // ТМФ. – 1988. – Т. 76, № 1. – С. 143–152
82. Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А., Кожемяко О.В. Спектры связанных магнитоупругих волн двухосного сильно анизотропного ферромагнетика с учетом биквадратичного взаимодействия//Ученые записки Симферопольского государственного университета.- 1998.- №7(46).- С.137-139.
83. Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А., Кожемяко О.В., Космачев О.А. Спектры связанных магнитоупругих волн двухосного сильно анизотропного ферромагнетика с учетом биквадратичного взаимодействия//ФНТ.- 1999.- Т.25,№7.- С.690-698.

84. Гинзбург С. Л. Спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / С. Л. Гинзбург // ФТТ. – 1970. – Т. 12, № 6. – С. 1805–1809.
85. Вальков В. В. Квазичастицы в сильно коррелированных системах / В. В. Вальков, С. Г. Овчинников // СО-РАН. Новосибирск. – 2001.
86. Потапков Н. А. Функции Грина и термодинамические величины гейзенберговской модели с одноионной анизотропией / Н. А. Потапков // ТМФ. – 1971. – Т. 8, № 3. – С. 381–391.
87. Казаков А. А. Функции Грина и намагниченность одноосных ферромагнетиков с одноионной анизотропией в поперечном поле / А. А. Казаков // ТМФ. – 1976. – Т. 26, № 1. – С. 117–125.
88. Изюмов Ю. А. Полевые методы в теории ферромагнетизма / Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-Оглы, Ю. Н. Скрябин // М.: Наука. – 1974. – С. 224
89. Ландау Л. Д. Статистическая физика. Часть 1. — Издание 4-е. / Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. // М.: Наука, 1995. — («Теоретическая физика», том V).
90. M. Snoek Hyperfine Spin-Two Atoms in Three-Dimensional optical Lattices: Phase diagrams and Phase transition / M. Snoek, J.L.Song, F.Zhou // Ann. Phys. - 2003. – V.308. – P.692
91. R.O. Zaitsev Generalized diagram technique and spin waves in an anisotropic ferromagnet / R.O. Zaitsev // Sov. Phys. JETP. – 1975. – V.41(1). – P.100
92. Luis Seabra Competition between supersolid phases and magnetization plateaus in the frustrated easy-axis antiferromagnet on a triangular lattice / Luis Seabra and Nic Shannon // PhysRevB. – 2011. – V.83.
93. В. М. Калита К теории намагничивания димеризованных магнетиков / В. М. Калита, В. М. Локтев // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 125. – С. 1149
94. O. A. Kosmachev Dynamic properties of magnet with spin $S=3/2$ and non-Heisenberg isotropic interaction / O. A. Kosmachev, Yu. A. Fridman, E. G. Galkina, and B. A. Ivanov // JETP. – 2015. – V.120. – P.281-295
95. Y. Tanaka Field-Induced Two-Step Phase Transitions in the Singlet Ground State Triangular Antiferromagnet CsFeBr_3 / Y. Tanaka, Hidekazu Tanaka, T. Ono, A.

- Oosawa, K. Morishita, K. Iio, T. Kato, H. Katori, Mikhail I. Bartashevich and T. Goto // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 2001. – V.70. – P.3068-3075
96. B. Lorenz Hexagonal Manganites – (RMNO₃): Class (I) Multiferroics with Strong Coupling of Magnetism and Ferroelectricity / *Condens. Matter Phys.* – 2013.
97. Yu.A. Fridman Phase states of an s=1 magnet with anisotropic exchange interactions / Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, and Ph.N. Klevets // *JMMM*. – 2008. – V.320. – P.435-449
98. Yu.N. Mitsai Application of Hubbard operators in the theory of magnetoelastic waves / Mitsai Yu.N., Yu.A. Fridman // *Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika*. – 1989. – V.81. – P.263-270
99. V.V. Val'kov Quasiparticles in strongly correlated systems / V.V. Val'kov, S.G. Ovchinnikov // *SB RAS Publishing*. – 2001.
100. V.M. Kalita Magnetization and Magnetocaloric Effect in Antiferromagnets with Competing Ising Exchange and Single-Ion Anisotropies / V.M. Kalita, G.Yu. Lavanov, V.M. Loktev // *Ukr.J.Phys.* – 2020. – V.65. – P.858-864