

На правах рукописи

ЯРЫГИНА ЕКАТЕРИНА АЛЕКСАНДРОВНА

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

1.3.8 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Симферополь
2023

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

Научный руководитель:	Космачев Олег Александрович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Физико-технического института Крымского федерального университета им. В.И.Вернадского, доцент
Официальные оппоненты:	Метлов Константин Леонидович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела теории электронных и кинетических свойств нелинейных систем ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина» Звездин Константин Анатольевич, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет»
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет»

Защита состоится «10» ноября 2023 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета 24.2.318.06 на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского» по адресу: 295007, Республика Крым, г. Симферополь, ул. Ялтинская 20, зал защиты диссертаций (аудитория 301).

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

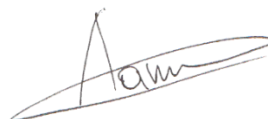
по адресу: 295007, Республика Крым, г. Симферополь, проспект Академика Вернадского, 4, корпус А

или на сайте <http://science.cfuv.ru/gosudarstvennaya-nauchnaya-attestaciya/dissertacionnye-sovety/yarygina-ekaterina-aleksandrovna>

Телефон ученого секретаря: +7 978 772-19-86

Автореферат разослан «__» _____ 2023 г.

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



Б. П. Лапин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы.

Современный уровень развития спинтронных устройств требует новых материалов с рядом специфических свойств и новых теоретических моделей, как описывающие эти свойства, так и предсказывающие новые.

Обычно, при теоретическом описании магнитоупорядоченных систем используется модель Гейзенберга, 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 $1/2$, спиновый инвариант модели Гейзенберга является не единственным и в общем случае имеет вид $(\vec{S}_1\vec{S}_2)^{2S}$, где S – величина спина магнитоактивного иона. Учет высших спиновых инвариантов приводит к возникновению фазовых состояний, спонтанное нарушение симметрии в которых обусловлено квадрупольными средними вида $S_{\alpha\beta} = \langle S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \rangle$, где $\alpha, \beta = x, y, z$. Такие фазовые состояния получили название – нематические фазы.

В большинстве работ рассматриваются только изотропные состояния негейзенберговских магнетиков при температурах близких к абсолютному нулю, хотя влияние спин-орбитальной связи приводит к возникновению одноионной анизотропии, а учет температурных флуктуаций существенно изменяет динамику и статику системы. Одной из целей данной работы является изучение влияния температуры и одноионной анизотропии на динамические и статические свойства негейзенберговских магнетиков со спином магнитного иона $S = 1$.

Помимо исследований анизотропных негейзенберговских магнетиков существенный интерес представляет собой изучение антиферромагнетиков, как перспективных материалов для хранения данных с большей плотностью информации. Интерес представляет изучение влияния одноионной анизотропии и внешнего магнитного поля на поведение антиферромагнитных систем, в которых, в частности, возможно возникновение «квазиферритовых» состояний, реализация неколлинеарных фаз типа «сверхтвёрдой» фазы, спин-флоп фазы и т.д. Однако, вопрос о влиянии внешнего магнитного поля и одноионной анизотропии сравнимой или превосходящей константу обменного взаимодействия в антиферромагнетиках остается недостаточно изученным.

Таким образом, можно сделать вывод, что тема данной диссертационной работы представляет интерес для решения некоторых фундаментальных вопросов физики конденсированного состояния и для решения ряда прикладных задач, что определяет актуальность диссертационной работы.

Связь работы с научными программами, планами, темами. 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).

Цель 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 $S = 1$.

Объект исследования – спиновые нематики с одноосной одноионной анизотропией при произвольной температуре, изинговские сильно анизотропные легкоплоскостные антиферромагнетики во внешнем магнитном поле.

Предмет исследования – 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. Для построения графиков температурных зависимостей были использованы численные методы анализа.

Результаты данной диссертационной работы были получены численно и аналитически и согласуются с уже известными решениями и экспериментальными результатами. Помимо этого, одним из критериев проверки достоверности полученных результатов был переход к предельным случаям.

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 фазами является вырожденным фазовым переходом первого рода.
6. Впервые было показано, что в изинговском сильно анизотропном антиферромагнетике со спином магнитного 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 позволяет 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 [1] автором выполнен анализ свободной энергии, определены устойчивые фазовые состояния негеизенберговского легкоплоскостного магнетика со спином магнитного иона $S = 1$. В работе [2] автором были обобщены результаты исследования на легкоосный негеизенберговский магнетик со спином магнитного иона $S = 1$. Были определены спектры элементарных возбуждений для ферромагнитной и нематической фаз и построена фазовая диаграмма для негеизенберговского магнетика с учетом влияния одноосной анизотропии. В работе [3] результаты исследования для негеизенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 1$ с учетом влияния легкоосной анизотропии были расширены и определены спектры элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе. В работе [4] автором были исследованы стабильные фазовые состояния, определены спектры элементарных возбуждений для ферромагнитной и квадрупольной фаз. 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.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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

В **первом разделе** исследована модель негеизенберговского магнетика с одноосной анизотропией и спином магнитного иона $S = 1$ для случая низких температур, гамильтониан которой может быть представлен в виде:

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

В первом подразделе рассмотрен случай одноионной анизотропии типа «легкая ось». Анализ плотности свободной энергии (2) позволяет определить, что в системе возможна

реализация четырех стабильных фазовых состояний: ферромагнитное, нематическое, антиферромагнитное и ортогонально нематическое.

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

С использованием метода функций Грина для операторов Хаббарда были определены спектры элементарных возбуждений в каждой из устойчивых фаз.

Для FM фазы при $\langle S^z \rangle = 1; q_2^0 = 1; q_2^2 = 0; J_0 > K_0 > 0$ и $\theta = 0$:

$$\varepsilon_1(k) = 2J_0 - K_0 - K(k); \varepsilon_2(k) = J_0 - J(k) + \frac{\beta}{2}. \quad (3)$$

Для SN фазы при $\langle S^z \rangle = 0; q_2^0 = 1; q_2^2 = 1; J_0 < K_0$, но $J_0, K_0 > 0$ и $\theta = \frac{\pi}{4}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= \sqrt{(K_0 - K(k))(K_0 + K(k) - 2J(k))}; \\ \varepsilon_2(k) &= \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для AFM фазы при $J_0 < 0$ и $\langle S_{(1,2)}^z \rangle = \pm 1; q_{2(1,2)}^0 = 1; q_{2(1,2)}^2 = 0$ для каждой из подрешеток:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(2J_0 - K_0)^2 - K^2(k)}; \varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(K_0 - J_0 + \frac{\beta}{2}\right)^2 - (J(k) - K(k))^2}. \quad (5)$$

Для ON фазы при $J_0 < 0; |J_0| < |K_0|$ и параметрах порядка для каждой подрешетки $\langle S_{(1,2)}^z \rangle = 0; q_{2(1,2)}^0 = 1; q_{2(1,2)}^2 = \pm 1$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= \sqrt{(K_0 + K(k))(K_0 - K(k) + 2J(k))}; \\ \varepsilon_2(k) &= \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \end{aligned} \quad (6)$$

Анализ спектров элементарных возбуждений (3)-(6) позволяет построить фазовую диаграмму системы в приведенных переменных $\left(\frac{K_0}{\beta}, \frac{J_0}{\beta}\right)$.

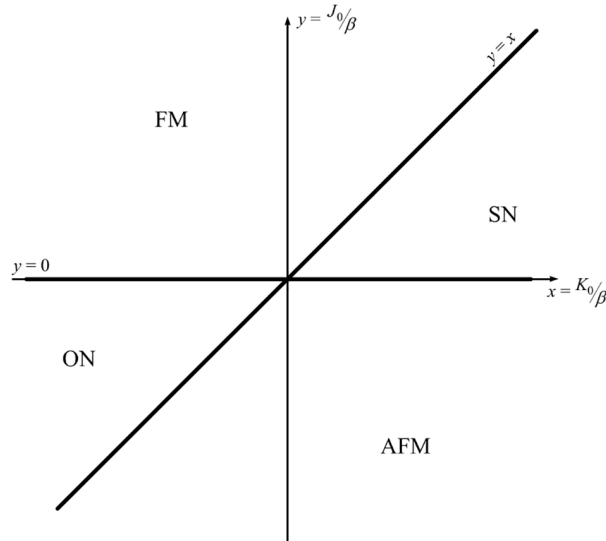


Рисунок 1. Фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «легкая ось»

Во втором подразделе рассмотрен случай одноионной анизотропии типа «легкая плоскость». Анализ показал, что в системе сохраняются стабильные фазовые состояния, характерные для легкоосного случая.

С использованием метода функций Грина для операторов Хаббарда были определены спектры элементарных возбуждений в каждой из устойчивых фаз.

Для FM фазы при $\langle S^z \rangle = 1; q_2^0 = 1; q_2^2 = 0; J_0 > K_0 > 0$ и $\theta = 0$:

$$\varepsilon_1(k) = 2J_0 - K_0 - K(k); \varepsilon_2(k) = J(k) - J_0 + \frac{\beta}{2}. \quad (7)$$

Для SN фазы при $\langle S^z \rangle = 0; q_2^0 = 1; q_2^2 = 1; J_0 < K_0$, но $J_0, K_0 > 0$ и $\theta = \frac{\pi}{4}$:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (8)$$

Для AFM фазы при $J_0 < 0$ и $\langle S_{(1,2)}^z \rangle = \pm 1; q_{2(1,2)}^0 = 1; q_{2(1,2)}^2 = 0$ для каждой из подрешеток:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(2J_0 - K_0)^2 - K^2(k)}; \varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(J_0 - K_0 - \frac{\beta}{2}\right)^2 - (J(k) - K(k))^2}. \quad (9)$$

Для ON фазы при $J_0 < 0; |J_0| < |K_0|$ и параметрах порядка для каждой подрешетки $\langle S_{(1,2)}^z \rangle = 0; q_{2(1,2)}^0 = 1; q_{2(1,2)}^2 = \pm 1$:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 - K(k) + 2J(k) - \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (10)$$

Анализ спектров элементарных возбуждений (7)-(10) позволяет построить фазовую диаграмму системы в приведенных переменных $\left(\frac{K_0}{\beta}; \frac{J_0}{\beta}\right)$.

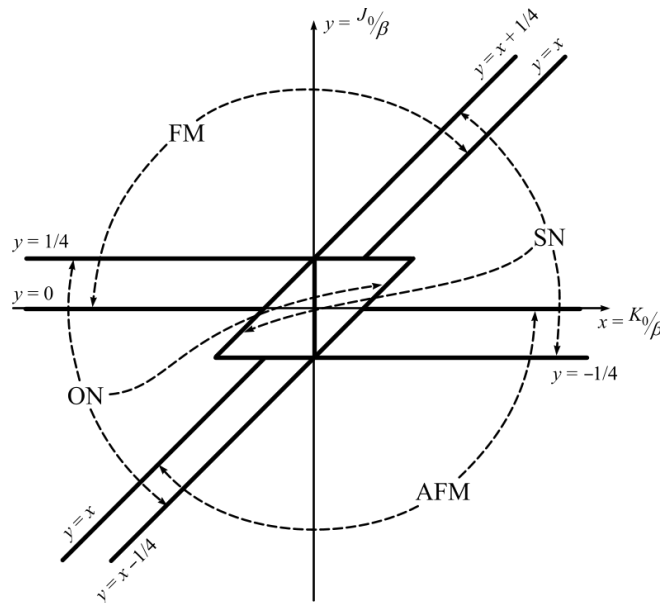


Рисунок 2. Фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «легкая плоскость».

Во **втором разделе** рассмотрен негейзенберговский магнетик с легкоосной анизотропией и спином магнитного иона $S = 1$ и учетом влияния температуры ($T \neq 0$). Гамильтониан системы аналогичен рассмотренному в предыдущем разделе (1).

Влияние температуры может быть учтено через общее выражение для параметров порядка системы: $\langle X^{ij} \rangle = 0, i \neq j$ и $\langle X^{ij} \rangle = \frac{e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}$. Тогда связь между параметрами порядка

системы, как векторными, так и тензорными и температурой и материальными параметрами системы выглядит следующим образом:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}; \quad (11)$$

$$q_2^0 = 3 \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)} - 2; \quad (12)$$

$$q_2^2 = \sin 2\theta \frac{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) - \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}{\exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right)}. \quad (13)$$

Выражения (11)-(13) позволяют построить графики температурной зависимости в ферромагнитной и нематической фазах.

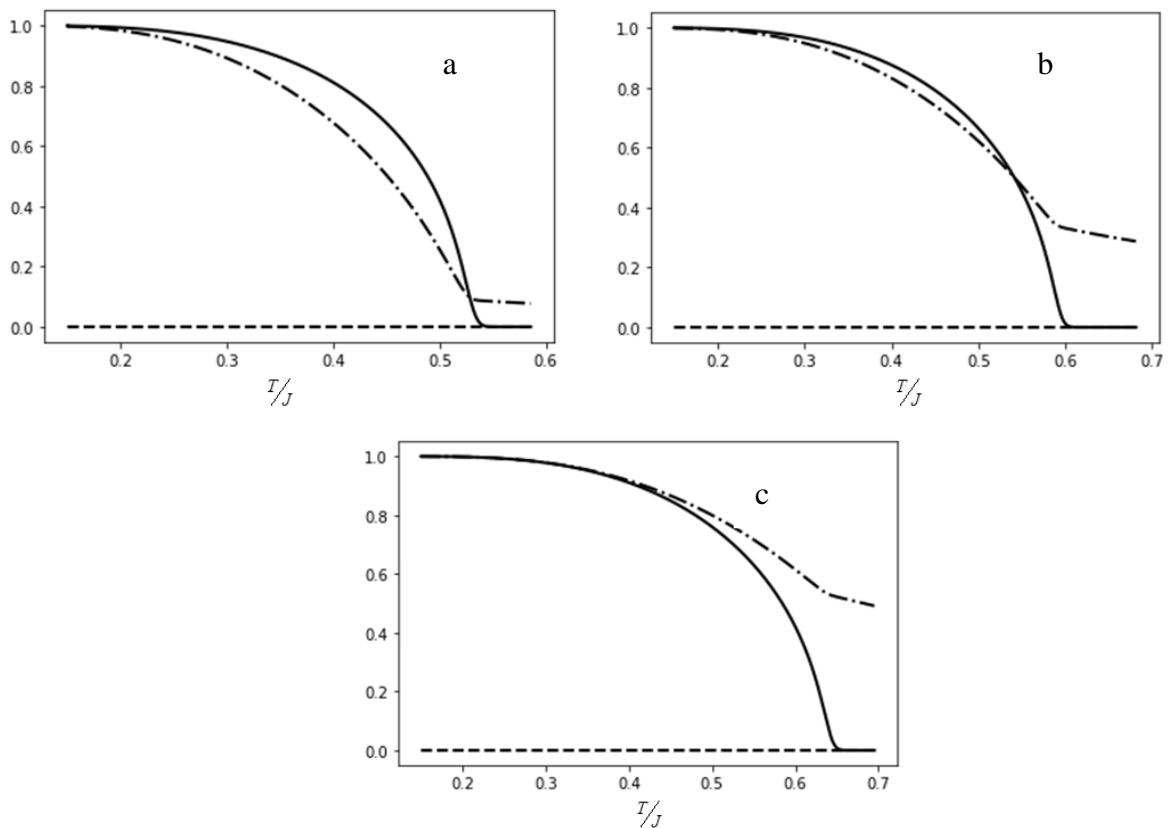


Рисунок 3. Графики зависимости параметров порядка негейзенберговского анизотропного ферромагнетика с $S = 1$ от температуры в FM фазе при $\beta/J = 0,1$ (а), $\beta/J = 0,5$ (б), $\beta/J = 1,0$ (в). Сплошной линии соответствует векторный параметр порядка $\langle S^z \rangle$, штрих-пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^0 , а пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^2 . Обменные интегралы при вычислениях $J = 1, K = 0,5$.

Все переменные на рис.3 приведены в относительных переменных $(\beta/J, T/J)$. Как можно увидеть из рис. 3 с ростом тепловых флуктуаций уменьшается среднее значение магнитного момента в пересчете на один узел. Данные приведенные на рис.3 позволяют определить критическое значение температуры $T_c = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \frac{2 + q_2^0}{3}$.

Температура Кюри растет с ростом константы одноионной анизотропии, что легко объяснимо, учитывая, что в ферромагнитной фазе магнитный момент ориентируется вдоль оси легкого 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.

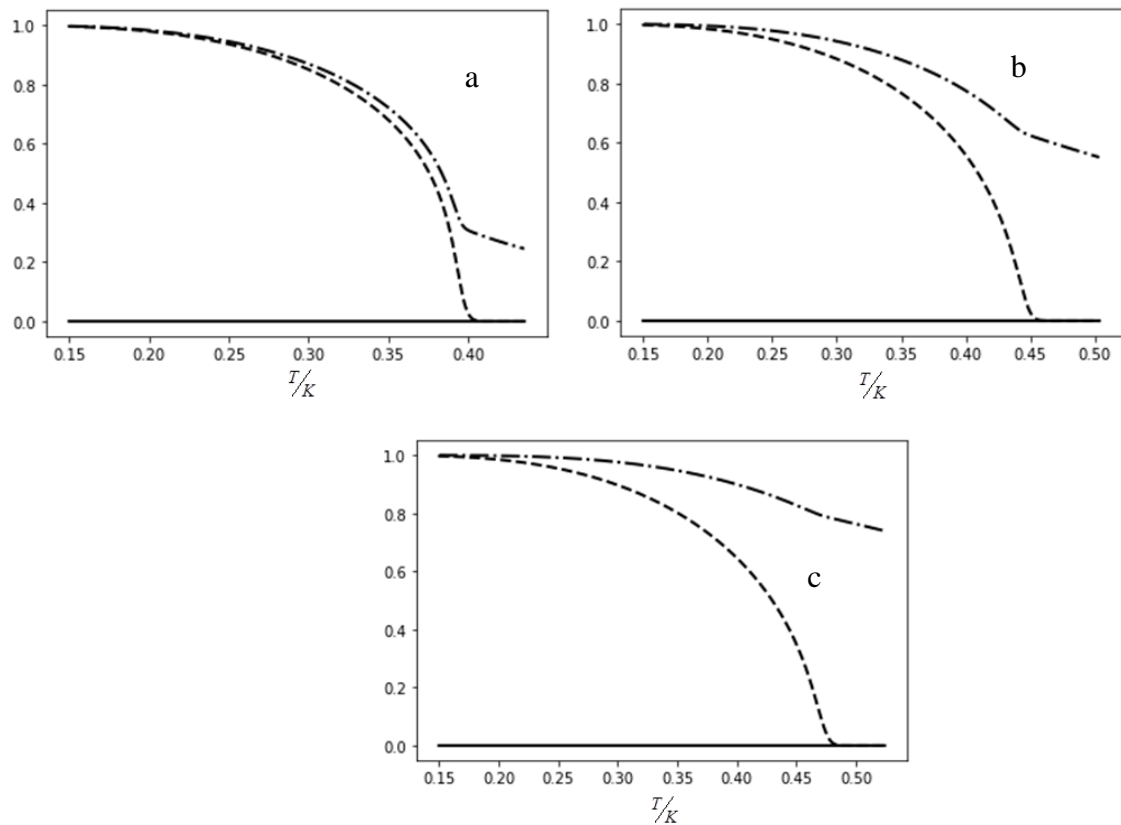


Рисунок 4. Графики зависимости параметров порядка негейзенберговского анизотропного ферромагнетика с $S = 1$ от температуры в SN фазе при $\beta/J = 0,1$ (а), $\beta/J = 0,5$ (б), $\beta/J = 1,0$ (в). Сплошной линии соответствует векторный параметр порядка

$\langle S^z \rangle$, штрих-пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^0 , а пунктирной линии – тензорный параметр порядка q_2^2 . Обменные интегралы при вычислениях $J = 0,2$, $K = 1,0$.

Численно анализируя выражения (11)-(13) в нематической фазе, можно показать, что среднее значение магнитного момента на один узел равно нулю при произвольном значении температуры и константы одноионной анизотропии. Выражение $T_Q = \frac{K_0}{2} \frac{2 + q_2^0}{3}$ определяет температуру фазового перехода «спиновый нематик – парамагнетик».

Были исследованы динамические свойства системы и получены спектры элементарных возбуждений в ферромагнитной и нематической фазах.

Поведение спектров элементарных возбуждений в ферромагнитной фазе с учетом температурной зависимости, но при температурах много меньших температуры Кюри, и при различных значениях константы одноионной анизотропии представлено на рис. 5 и рис.6.

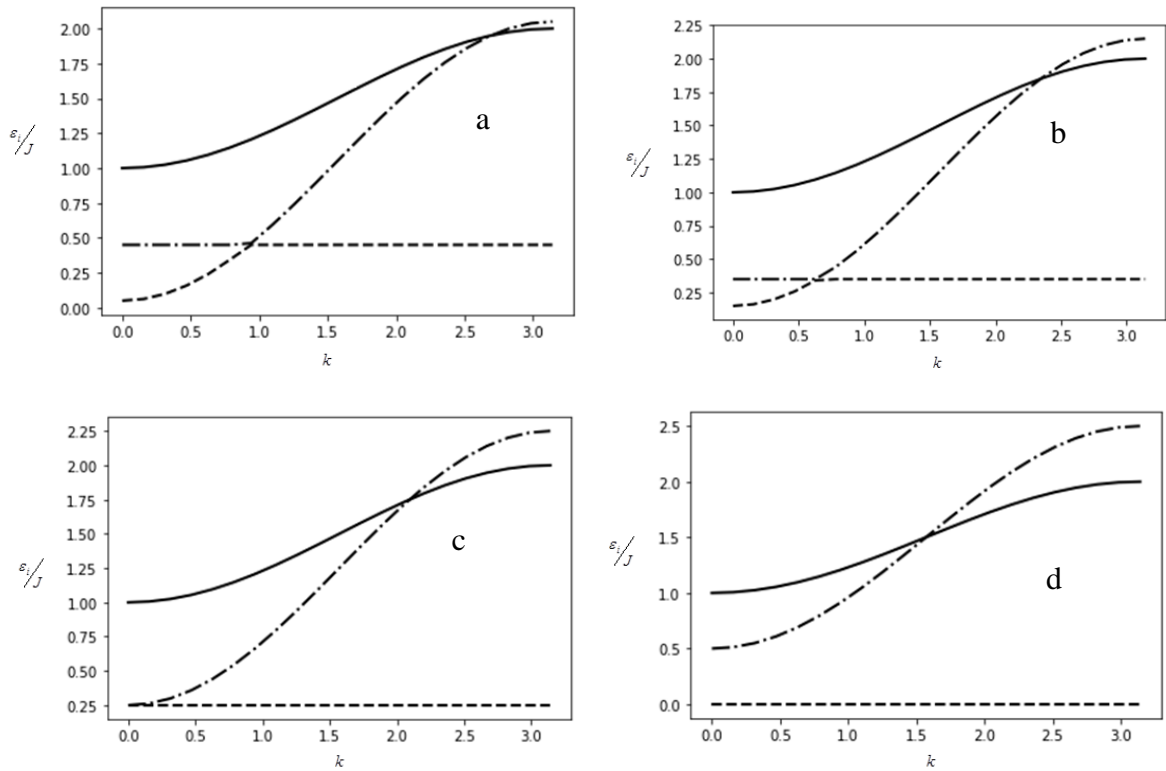


Рисунок 5. Спектры элементарных возбуждений в FM фазе при $T/J = 0,003$ и значениях анизотропии $\beta/J = 0,1$ (a), $\beta/J = 0,3$ (b), $\beta/J = 0,5$ (c), $\beta/J = 1,0$ (d). Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon^{\parallel}/J$, пунктирной линии – «поперечная» ветвь ε_1^{\perp}/J , а штрих-пунктирной – «поперечная» ветвь ε_2^{\perp}/J . Здесь выбраны следующие материальные параметры: $J = 1$, $K = 0,5$.

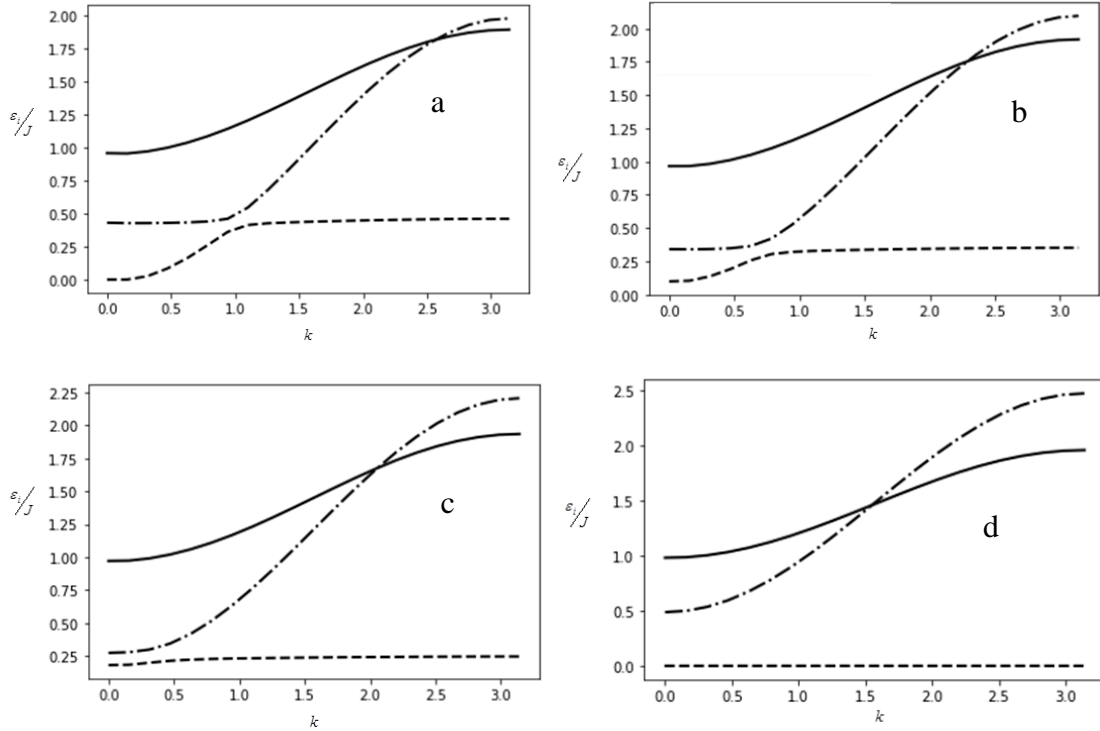
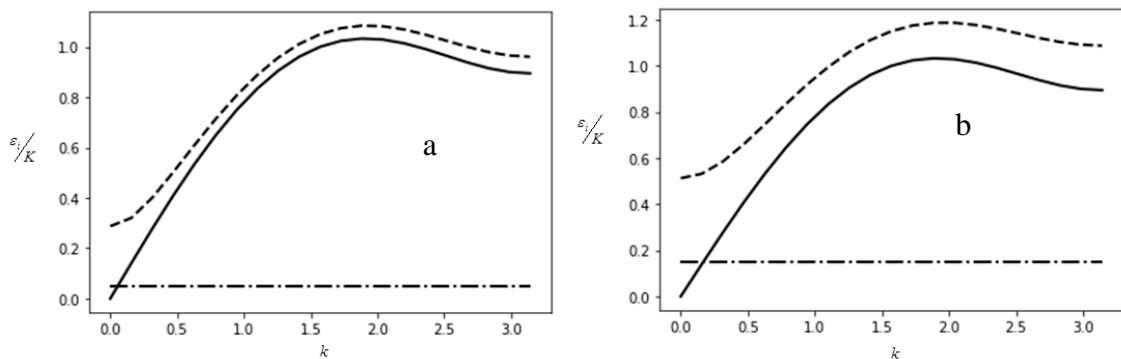


Рисунок 6. Спектры элементарных возбуждений в FM фазе при $T/J = 0,3$ и значениях анизотропии $\beta/J = 0,1(a), \beta/J = 0,3(b), \beta/J = 0,5(c), \beta/J = 1,0(d)$. Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon^{\parallel}/J$, пунктирной линии – «поперечная» ветвь ε_1^{\perp}/J , а штрих-пунктирной – «поперечная» ветвь ε_2^{\perp}/J . Здесь выбраны следующие материальные параметры: $J = 1, K = 0,5$.

Как видно на рис. 5 и рис.6 «поперечные» моды колебаний являются более сложными и «запутанными» между собой, однако с ростом температуры эта «запутанность» уменьшается. При достаточно низких температурах и малых значениях одноионной анизотропии обе ветви «поперечных» мод практически переходят одна в другую. Увеличение температуры приводит к «расталкиванию» поперечных ветвей элементарных возбуждений и тем сильнее, чем большие значения приобретает константа одноионной анизотропии.

Поведение спектров элементарных возбуждений в нематической фазе с учетом температурной зависимости, но при температурах меньших критической, и при различных значениях константы одноионной анизотропии представлено на рис. 7 и рис.8.



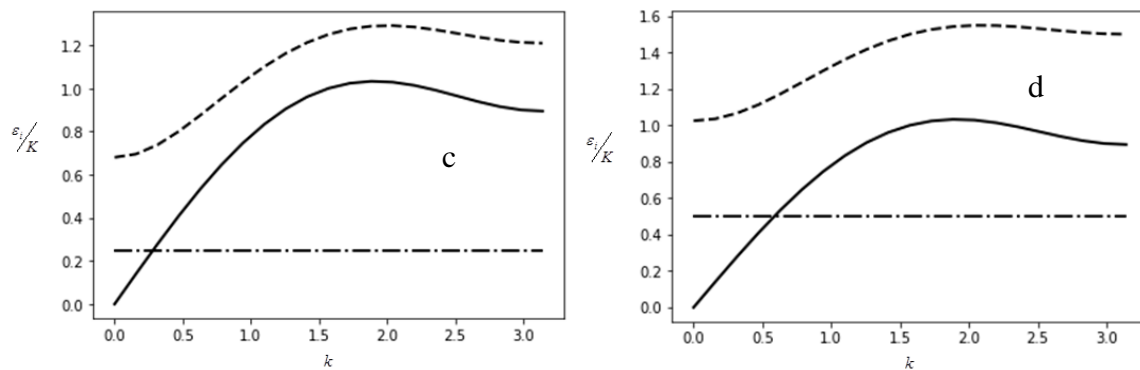


Рисунок 7. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика в SN фазе при $T/K = 0,003$; $\beta/K = 0,1$ (a); $\beta/K = 0,3$ (b); $\beta/K = 0,5$ (c); $\beta/K = 1,0$ (d).

Сплошной линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_{\parallel}/K$, пунктирной линии – «поперечная» ветвь ε_1^{\perp}/K , а штрих-пунктирной – «поперечная» ветвь ε_2^{\perp}/K . Здесь выбраны следующие материальные параметры: $J = 0,2$, $K = 1,0$.

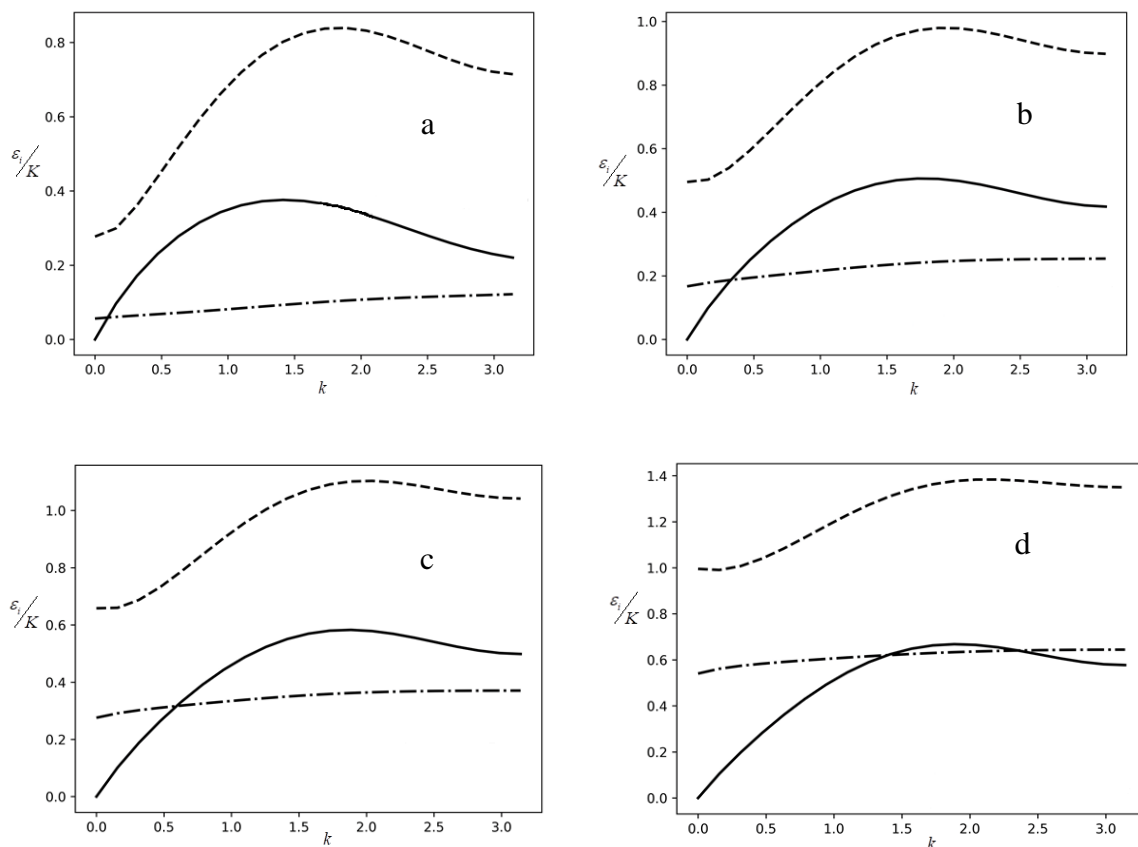


Рисунок 8. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика в SN фазе при $T/K = 0,4$; $\beta/K = 0,1$ (a); $\beta/K = 0,3$ (b); $\beta/K = 0,5$ (c); $\beta/K = 1,0$ (d). Сплошной

линии соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_{\parallel}/K$, пунктирной линии –

«поперечная» ветвь ε_1^\perp/K , а штрих-пунктирной – «поперечная» ветвь ε_2^\perp/K . Здесь выбраны следующие материальные параметры: $J = 0,2$, $K = 1,0$.

Одна из «поперечных» ветвей возбуждений является бездисперсионной во всем температурном диапазоне и при различных значениях константы одноионной анизотропии. 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 . «Продольная» мода колебаний является безщелевой и не имеет явной зависимости от константы одноионной анизотропии.

Фазовая диаграмма рассматриваемой системы:

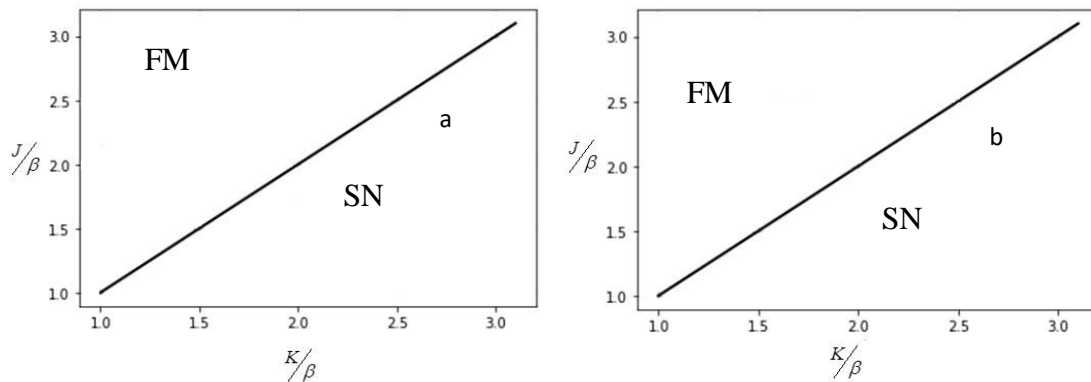


Рисунок 9. Фазовая диаграмма негейзенберговского ферромагнетика с $S=1$ при различных значениях температуры и константы одноионной анизотропии:

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

Фазовая диаграмма системы не зависит от температуры и величины константы одноионной анизотропии и в точности соответствует фазовой диаграмме для исследуемой системы при $T=0$ и фазовый переход между FM-SN фазами является вырожденным фазовым переходом первого рода.

В третьем разделе исследована модель изинговского сильно анизотропного легкоплоскостного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ во внешнем магнитном поле. Гамильтониан системы можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_{nn'} (\hat{S}_n^z \hat{S}_{n'}^z) + \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_{mm'} (\hat{S}_m^z \hat{S}_{m'}^z) + \frac{1}{2} \sum_{nm} \tilde{J}_{nm} (\hat{S}_n^z \hat{S}_m^z) + \\ & + D \sum_{i=n,m} (\hat{S}_i^z)^2 - H \sum_{i=n,m} \hat{S}_i^z, \end{aligned} \quad (14)$$

где n и m – номера узлов первой и второй подрешёток, соответственно; $\tilde{J} > 0$ – 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).

Выделяя среднее поле в гамильтониане (14) получим одноузельный гамильтониан, который представляет собой сумму одноузельных гамильтонианов подрешеток:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_0^{(2)} + \varepsilon, \quad (15)$$

где $\hat{H}_0^{(i)} = \bar{H}_i \hat{S}_i^z + D (\hat{S}_i^z)^2$ – одноузельный гамильтониан i -ой подрешетки ($i = 1, 2$); $\bar{H}_i = -H + J \langle \hat{S}_i^z \rangle + \tilde{J} \langle \hat{S}_{i\pm 1}^z \rangle$ – среднее поле i -ой подрешетки, причем верхний знак в индексах соответствует первой подрешетке, а нижний – второй; $\varepsilon = -\frac{J}{2} (\langle \hat{S}_1^z \rangle^2 + \langle \hat{S}_2^z \rangle^2) - \tilde{J} \langle \hat{S}_1^z \rangle \langle \hat{S}_2^z \rangle$ – энергия нулевых колебаний.

На базисе собственных функций оператора \hat{S}^z каждой из подрешеток построим операторы Хаббарда, связанные 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 (15) является диагональным:

$$\hat{H}_0 = \sum_M (E_M^{(1)} + \varepsilon) \hat{X}_1^{MM} + \sum_M (E_M^{(2)} + \varepsilon) \hat{X}_2^{MM}, \quad (16)$$

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

Энергетические уровни каждой из подрешеток имеют вид:

$$E_1^{(i)} = \bar{H}_i + D + \varepsilon; E_0^{(i)} = \varepsilon; E_{-1}^{(i)} = -\bar{H}_i + D + \varepsilon. \quad (17)$$

Волновая функция основного состояния для каждой из подрешеток:

$$|\psi_i\rangle = \cos \alpha_i \cos \beta_i |1\rangle + \sin \beta_i |0\rangle + \sin \alpha_i \cos \beta_i |-1\rangle, \quad (18)$$

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 (18), получим выражение для плотности свободной энергии антиферромагнетика:

$$F = \sum_{i=1,2} \left[(D + \bar{H}_i \cos 2\alpha_i) \cos^2 \beta_i - \frac{J}{2} \cos^2 2\alpha_i \cos^4 \beta_i \right] - \tilde{J} \cos 2\alpha_1 \cos 2\alpha_2 \cos^2 \beta_1 \cos^2 \beta_2. \quad (19)$$

Среднее значение магнитного момента подрешеток (на один узел) можно представить в виде $\langle \hat{S}_i^z \rangle = \cos 2\alpha_i \cos^2 \beta_i$.

Анализ плотности свободной энергии (19) позволяет определить устойчивые фазовые состояния рассматриваемой системы.

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:

$$E_1^{(i)} = -H + D; E_0^{(i)} = 0; E_{-1}^{(i)} = H + D.$$

Такое фазовое состояние носит название квадрупольной фазы (QU) и характеризуется компонентами тензорных квадрупольных моментов.

При $\alpha_1 = \beta_1 = 0$ и $\beta_2 = \frac{\pi}{2}$, при этом предполагается, что магнитное поле $H > H_1$, т.е. вне области QU фазы. В этом случае $\langle \hat{S}_1^z \rangle = 1$ и $\langle \hat{S}_2^z \rangle = 0$. Энергия основного состояния первой подрешётки имеет вид: $E_1^{(1)} = -H - \frac{J}{2} + D$, а второй: $E_0^{(2)} = 0$. Векторы основного состояния подрешеток принимают следующий вид: $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle$.

Система переходит в состояние, при котором для характеристики первой подрешетки используются векторные параметры порядка, а для характеристики второй – тензорные, то есть состояние с пониженным спином (LS).

При $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = 0$, 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: $E_1^{(1)} = E_1^{(2)} = -H + D - |J| + \check{J}$, и в системе реализуется ферромагнитное состояние.

Анализ свободной энергии системы показывает, что в системе энергетически выгодным является только реализация так называемых «коллинеарных» фазовых состояний.

Для анализа спектров элементарных возбуждений воспользуемся методом функций Грина для операторов Хаббарда.

Для FM фазы

$$\varepsilon_{FM} = H - D + |J| - \check{J}. \quad (20)$$

Для QU фазы:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= D - H; \\ \varepsilon_2 &= D + H. \end{aligned} \quad (21)$$

Для LS фазы:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= D - H - |J|; \\ \varepsilon_2 &= H - D - \check{J}; \\ \varepsilon_3 &= H + D - \check{J}. \end{aligned} \quad (23)$$

Полученные результаты позволяют построить фазовую диаграмму сильно анизотропного изинговского антиферромагнетика во внешнем магнитном поле:

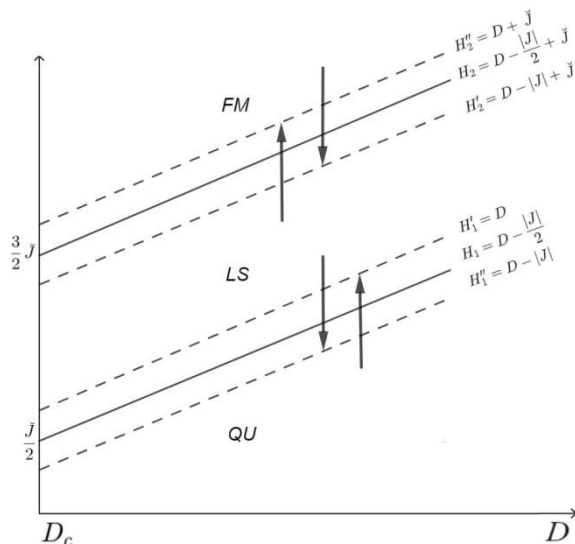


Рисунок 10. Фазовая диаграмма изинговского сильно анизотропного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S = 1$. Сплошные линии – линии фазовых переходов, пунктирные линии – линии потери устойчивости спектров элементарных возбуждений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Впервые было показано, что в анизотропном негеизенберговском 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 негеизенберговском 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 негеизенберговском 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 негеизенберговского 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 и в 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 начинают «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.

Результаты, изложенные в диссертации, представлены в следующих публикациях:

1. 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
2. E.A. 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. – 167043
3. О.А. Космачев Негейзенберговский ферромагнетик с одноионной анизотропией / О.А. Космачев, Е.А. Ярыгина, Я.Ю. Матюнина, Ю.А. Фридман // ФТТ. – 2022. – Т.64(3). – С.337-344

4. E.A. 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, V.Khovaylo // JMMM. – 2023. – V.565. – 170238

Тезисы докладов опубликованы в следующих сборниках материалов конференций:

1. Ярыгина Е.А. Влияние биквадратичного обменного взаимодействия на фазовые состояния сильно анизотропного антиферромагнетика / Ярыгина Е.А., Клевец Ф.Н., Матюнина Я.Ю., Фридман Ю.А. // Двадцать пятая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных «ВНКСФ – 25». – 2019. – Севастополь.
2. Yarygina E.A. Influence of Single-ion Anisotropy on the Phase States of two-subtleties non-Heisenberg magnet / E.A. Yarygina, Pn.N. Klevets, Yu.A. Fridman // 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Palm Beach, FL, United States. – 2020.
3. Ярыгина Е.А. Динамические и статические свойства двухподрешеточного анизотропного негейзенберговского магнетика / Ярыгина Е.А. // XXVII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов», Россия, Москва. – 2020.
4. Ярыгина Е.А. Влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния двухподрешеточного негейзенберговского магнетика / Ярыгина Е.А., Клевец Ф.Н., Матюнина Я.Ю. // Международная научная конференция «Уфимская осенняя математическая школа-2020». – 2020.
5. Ярыгина Е.А. Фазовые состояния двухподрешеточного анизотропного негейзенберговского магнетика / Ярыгина Е.А., Клевец Ф.Н., Космачев О.А., Кривцова А.В. // Международная конференция ФИЗИКА.СПБ/2021. – 2021.
6. Yarygina E.A. Phase state of spin-1 Ising-like magnetic with strong single-ion anisotropy / E.A. Yarygina, Pn.N.Klevets, Yu.A. Fridman // International Conference «Functional Materials» ICFM'21. – 2021.
7. Yarygina E A. Phase state of spin-1 Ising-like magnetic with strong single-ion anisotropy of the easy-plane type / E.A. Yarygina, Pn.N.Klevets, Ya.Yu. Matyunina // Уфимская осенняя математическая школа 2021. – 2021.