

На правах рукописи



МАТЮНИНА ЯНА ЮРЬЕВНА

**ДИНАМИЧЕСКИЕ И СТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИХ ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫХ МАГНЕТИКОВ**

1.3.8 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Симферополь
2024

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:

Бычков Игорь Валерьевич доктор физико-математических наук, профессор, проректор по научной работе, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)

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»

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Защита состоится «4» октября 2024 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 <https://science.cfuv.ru/gosudarstvennaya-nauchnaya-attestaciya/dissertacionnye-sovety/dissertacionnye-raboty-sovety-d-900-006-12/matyunina-yana-yurevna>

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

Автореферат разослан «__» _____ 2024 г.

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



Б. П. Лапин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы Современная элементная база микроэлектроники, по всей видимости, достигла своего физического предела, когда соотношение «цена – качество» электронных устройств перестает быть экономически выгодным. Такое состояние микроэлектроники требует создания новых материалов со специфическими свойствами, а также построения новых теоретических моделей, позволяющих не только описать эти свойства, но и предсказать новые. Одним из таких направлений является развитие элементной базы не на основе переноса электрического заряда, а на основе так называемого «спинового тока». Это направление получило название спинтроники, и в последние десятилетия активно развивается.

До недавнего времени ферромагнетики рассматривались как основной материал для элементной базы спинтроники. Однако, частота ферромагнитного резонанса недостаточно высока для практического использования ферромагнетиков в спинтронных устройствах. При этом, в последние годы растет потребность в освоении диапазона терагерцовых волн, см. Эта проблема может быть решена, если в качестве магнитного носителя использовать не ферромагнитный материал, а антиферромагнитный, поскольку они обладают интересным свойством – обменным усилением динамических характеристик. Благодаря этому эффекту частоты антиферромагнитного резонанса лежат существенно выше мегагерцового диапазона, и в принципе могут достигать терагерцового диапазона (типичные значения - от сотен гигагерц до единиц терагерц, и даже до десятков терагерц).

Однако, при всей привлекательности идеи использования антиферромагнетики в спинтронных устройствах, эти материалы имеют один существенный недостаток – их магнитные свойства крайне чувствительны к качеству кристаллической структуры. Однако, ферримагнетики, в которых также наблюдается эффект обменного усиления динамических свойств, менее чувствительны к наличию дефектов решетки. Следовательно, ферримагнетики в окрестности точки компенсации подрешеток можно использовать как материал для устройств спинтроники.

Таким образом, исследования магнетиков со скомпенсированным магнитным моментом является актуальной задачей как с точки зрения их практического применения, так и с точки зрения фундаментальных задач физики твердого тела. При этом, необходимо отметить, что среди многообразия магнитоупорядоченных систем существует достаточно обширный класс систем, свойства которых не удастся описать в рамках стандартных моделей магнитного упорядочения (например, в рамках модели Гейзенберга). К таким магнетика можно отнести, например, EuO , EuSe , EuTe , UO_2 , CuBr_3 , VBr_3 , 2H-FeS_2 и целый ряд других. Ряд специфических особенностей спектров возбуждений и фазовых переходов в ферропниктидах LaFeAsO можно объяснить только с учетом вкладов высших спиновых инвариантов в обменный гамильтониан магнетика. Такого рода материалы получили название негейзенберговских магнетиков. Характерной особенностью такого рода магнетиков является возможность реализации (при определенных условиях) состояний, в которых среднее значение магнитного момента (на один узел) равно нулю ($\langle S^z \rangle = 0$). При этом, спонтанное нарушение вращательной симметрии не связано с обращением времени ($t \rightarrow -t$), а определяется мультипольными средними, такими, например, как компоненты тензора

$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \langle S^\alpha S^\beta + S^\beta S^\alpha \rangle$ ($\alpha, \beta = x, y, z$) для магнетика с $S=1$. Такого рода магнетики также

часто называют спиновыми нематиками, по аналогии с жидкими кристаллами, поскольку геометрическим образом таких состояний в спиновом пространстве является одноосный эллипсоид. Стандартная модель, используемая при описании сильного магнетизма – модель Гейзенберга. В рамках этой модели удается описать большинство свойств магнитоупорядоченных систем, однако, она является точной только для систем со спином магнитного иона $S=1/2$, поскольку учитывает лишь билинейный спиновый инвариант. Для точного описания обменного взаимодействия магнетиков со спином магнитного иона $S \geq 1$ необходимо учитывать в обменном гамильтониане все, допустимые симметрией системы, спиновые инварианты вида $(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^{2S}$, где S – величина спина магнитного иона. Так, для магнетика со спином магнитного иона $S=1$ таким высшим инвариантом является биквадратичное обменное взаимодействие вида $K_{n,n'}(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2$, где \mathbf{S}_n и $\mathbf{S}_{n'}$ – операторы спинов на соседних узлах n и n' , K – константа биквадратичного обмена, и именно величина и знак константы биквадратичного обмена определяет возможность реализации нематического состояния. Состояние спинового нематика с учетом биквадратичного обменного взаимодействия, т.е. с $S=1$, характеризуется нулевым значением среднего магнитного момента (на одном узле) $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, а спонтанное нарушение вращательной симметрии определяется спиновыми квадрупольными параметрами $S_{ik} = \langle S_i S_k + S_k S_i \rangle$, $i, k = x, y, z$. Геометрическим образом нематического состояния в спиновом пространстве является квадрупольный эллипсоид, то есть эллипсоид направления главных осей $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, таково, что $\langle S_i S_k + S_k S_i \rangle = 0$ при $i \neq k$, $i, k = 1, 2, 3$, а полуоси эллипсоида равны $\langle S_1^2 \rangle, \langle S_2^2 \rangle$ и $\langle S_3^2 \rangle$.

Интерес к спиновым нематикам и сильно анизотропным магнетикам связан с их специфическими свойствами, и не ослабевает на протяжении последних двадцати лет. Спиновые нематики активно изучались в кристаллических магнетиках, включая низкоразмерные системы. Кроме того, особый интерес к таким состояниям, связан с изучением ультрахолодных атомных газов с целым значением спина иона, а особенно, с конденсацией Бозе-Эйнштейна для таких газов в оптических ловушках или решетках.

Такого рода исследования позволяют построить теоретические модели не только коллинеарных (одноподрешеточных) спиновых нематиков и сильно анизотропных магнетиков, но и многоподрешеточных систем, в частности, негейзенберговских антиферро- и ферримагнетиков.

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. 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 РФФИ № 20-42-910003 р-а Республика Крым «Динамические и статические свойства сильно анизотропных антиферро- и ферримагнетиков» 2020-2021 гг.

- Проект РФФ 23-22-00054 «Продольная динамика негејзенберговских и сильно анизотропных магнетиков»

Цели и задачи исследования. Целью данной диссертационной работы являются теоретические исследования динамических свойств и спиновых конфигураций негејзенберговских антиферро- и ферримагнетиков, а также влияния одноионной анизотропии на свойства этих магнетиков. В соответствии с целью диссертации были поставлены и решены следующие задачи:

1. Определить влияние одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» на спектральные закономерности, фазовые состояния и типы фазовых переходов двухподрешеточного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ при наличии биквадратичного обменного взаимодействия.
2. Исследовать влияние одноионной анизотропии на тип фазовых переходов между дипольными и нематическими состояниями двухподрешеточного антиферромагнетика со спином магнитного иона $S=1$ и учетом биквадратичного обменного взаимодействия.
3. Исследовать влияние биквадратичного обменного взаимодействия на свойства ферримагнетика с изотропными подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ и межподрешеточным обменным взаимодействием изинговского типа. Определить точку компенсации (по материальным параметрам), и исследовать поведение системы в ее окрестности, а также определить тип фазового перехода.
4. Определить влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния и спектры возбуждений с анизотропной подрешеткой с $S=1$ и $\sigma = 1/2$ при наличии биквадратичного обменного взаимодействия.
5. Исследовать поведение спектров возбуждений системы в окрестности точки компенсации, а также определить тип фазового перехода.

Объектом исследования являются двухподрешеточные негејзенберговские антиферромагнетики с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», изотропные и анизотропные негејзенберговские ферримагнетики с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$.

Предметом исследования являются фазовые состояния и спектральные закономерности изотропных и анизотропных негејзенберговских двухподрешеточных магнетиков при низких температурах.

Методы исследования. Наиболее адекватным математическим аппаратом, позволяющим описать свойства спиновых нематиков, является диаграммная техника для операторов Хаббарда. Этот математический аппарат применим как для одно-, так и для двухподрешеточных магнетиков с произвольным видом обменных взаимодействий.

При определении спектров элементарных возбуждений анизотропных негејзенберговских ферримагнетика и антиферромагнетика была использована диаграммная техника операторов Хаббарда для функций Грина. При определении динамических свойств изотропного ферримагнетика с $S=1$ и $\sigma = 1/2$ был использован метод бозонизации, который основан на построении бозе-аналога гамильтониана в терминах операторов Хаббарда.

Приводимые в работе результаты были получены аналитически, и прошли проверку при сравнении с уже известными решениями, для некоторых предельных случаев, полученными при численных расчетах и в экспериментах. Для визуализации некоторых спектральных закономерностей и фазовых диаграмм так же использовались численные методы анализа.

Научная новизна полученных результатов. Все поставленные в диссертации задачи были сформулированы и решены впервые. Решением поставленных задач являются следующие новые результаты:

1. Было показано, наличие одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» в негејзенберговском антиферромагнетике со спином $S=1$ не меняет фазовые состояния системы, но существенно меняет динамические свойства системы, а также приводит к смене

типа фазовых переходов, по сравнению с изотропным негейзенберговским антиферромагнетиком. Фазовые переходы являются фазовым переходам первого рода, протекающим через область сосуществования фаз. Одним из наиболее интересных результатов является тот, что в рассматриваемом случае возможен прямой фазовый переход первого рода между нематической и ортогонально-нематической фазами, что, во первых невозможно в изотропном негейзенберговском антиферромагнетике, а во вторых, свидетельствует об отсутствии $SU(3)$ точки, существующей в изотропной системе.

2. Показано, что учет влияния биквадратичного обменного взаимодействия в подрешетке с $S=1$, приводит возникновению в ферримагнетике с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ фазы как с дипольными параметрами порядка (ферримагнитная), так и нематического состояния. Установлено, что фазовый переход между этими фазами является переходом второго рода. Определена точка компенсации (по материальным параметрам) спинов подрешеток. Исследованы спектры элементарных возбуждений в окрестности этой точки.

3. Определено влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$. Показано, что малая одноионная анизотропия (существенно меньшая констант обменных взаимодействий первой подрешетки) не меняет фазовые состояния по сравнению с изотропным случаем, но приводит к смене типа фазового перехода со второго, на первый, по сравнению с изотропной системой. Определена точка компенсации (по материальным параметрам) спинов подрешеток, и исследованы спектры возбуждений в окрестности этой точки.

4. Установлено, что в случае большой одноионной анизотропии (сравнимой, или даже превосходящей константы обменных взаимодействий подрешетки с $S=1$) в негейзенберговском ферримагнетике с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ ферримагнитная фаза становится энергетически не выгодна при любых соотношениях обменных интегралов подрешетки с $S=1$, и система находится в нематическом состоянии. Определена линия компенсации спинов подрешеток в этой фазе, а также исследовано поведение спектров возбуждений в окрестности этой линии.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Впервые показано, что учет одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» в антиферромагнетике со спинами магнитных ионов подрешеток $S=1$ и учетом биквадратичного обменного взаимодействия, сохраняет фазовые состояния, реализуемые в изотропном случае, однако тип фазовых переходов меняется с вырожденных переходов первого рода (в изотропном случае), на фазовые переходы первого рода, протекающие через область сосуществования фаз. Наличие одноионной анизотропии приводит к появлению прямого фазового перехода между нематическим и ортогонально-нематическим состояниями, не реализуемого в изотропном случае. Следовательно, в анизотропном негейзенберговском антиферромагнетике не реализуется $SU(3)$ точка, характерная для изотропной системы.

2. Установлено, что для негейзенберговского ферримагнетика с изинговским межподрешеточным обменным взаимодействием, и подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ возможна реализация фаз как с дипольными параметрами порядка (ферримагнитная), так и нематических состояний, которые характеризуются как дипольными, так и квадрупольными параметрами порядка. Фазовый переход между ферримагнитной и нематической фазами является фазовым переходом второго рода. В области реализации нематической фазы существует линия компенсации спинов подрешеток. Поведение спектров возбуждений в окрестности точки компенсации «антиферроманитоподобно».

3. Показано, что для анизотропного негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ в случае малой одноионной анизотропии (меньшей констант билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий подрешетки $S=1$) в системе также реализуются ферримагнитная и нематическая фазы. Однако, фазовый переход между этими фазами, в

отличие от случая изотропной подрешетки $S=1$, является переходом первого рода. В нематической фазе также реализуется точка компенсации спинов подрешеток при определенном соотношении материальных параметров. Поведение спектров возбуждений в окрестности точки компенсации также «антиферромагнитоподобно»

4. Впервые показано, что в случае большой одноионной анизотропии в негейзенберговском ферримагнетике с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ ферримагнитная фаза не реализуется, а системе выгодно находится в нематическом состоянии при любых соотношениях обменных интегралов подрешетки с $S=1$. В этом случае в системе также реализуется точка компенсации спинов подрешеток. Исследовано поведение спектров возбуждений в окрестности линии компенсации спинов подрешеток.

Достоверность полученных результатов обусловлена выбором наиболее адекватных математических методов анализа магнитоупорядоченных систем, как с точки зрения корректности математических вычислений, так и с точки зрения применимости физических законов в рамках описываемых задач. Выбранный подход к описанию свойств сложных систем позволяет провести проверку полученных результатов путем предельных переходов к системам более простым, поведение которых описано и общеизвестно. Кроме того, полученные результаты хорошо коррелируют с данными экспериментов.

Научная и практическая ценность полученных результатов. Представленные в диссертационной работе исследования негейзенберговских двухподрешеточных магнетиков позволили дать достаточно полное и наиболее универсальное описание свойств рассматриваемых систем при различных соотношениях материальных параметров. Определены и подробно описаны все фазовые состояния, реализуемые для каждой из систем, что является существенным для создания магнитных материалов со специфическими, заранее заданными свойствами. Результаты исследования хорошо коррелируют с результатами экспериментов, и предельными переходами к ранее исследованным системам, их можно рекомендовать для обоснования и интерпретации экспериментальных данных.

Апробация результатов диссертации.

Результаты, представляемые к защите, представлялись на научных международных и Всероссийских 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, 11-14 ноября, 2020; XII Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании»: спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа - 2021», посвященной 100-летию профессора БашГУ Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича, г. Уфа, 6-9 октября, 2021; International Conference "Functional Materials" ICFM'21. October 4-8, Crimea, Alushta, 2021; Международная конференция ФИЗИКА.СПБ/2021, Россия, Санкт-Петербург, 2021; VIII Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism". August 22-26, Kazan, Russia, 2022; International Conference «Functional Materials», ICFM-2023, October 2-6, Crimea, Foros, 2023. Также, результаты диссертации докладывались на научных семинарах Физико-технического института КФУ им. В.И. Вернадского (Симферополь).

Публикации. Вошедшие в диссертационную работу результаты были опубликованы в 10 статьях в журналах, входящих в список ВАК Российской Федерации и наукометрические базы данных SCOPUS и Web of Science, а также в докладах, опубликованных в материалах конференций.

Личный вклад автора.

Автор принимал активное участие в постановке задач, их решении, а также в интерпретации и анализе полученных результатов. В работах [1,8] автором были определены спектры элементарных возбуждений для антиферромагнитной и ортогонально-нематической фаз негейзенберговского анизотропного антиферромагнетика с $S=1$. В работе [6] автором была построена и исследована свободная энергия негейзенберговского легкоосного ферромагнетика. В [9] автором были получены спектры возбуждений как изотропного негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ в ферримагнитной фазе, а в работе [3] аналогичные результаты были получены автором в негейзенберговском ферримагнетике с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$, и изинговским межподрешеточным обменным взаимодействием. Кроме того, графическое представление спектров возбуждений как в ферримагнитной, так и в нематической фазах были получены автором диссертации в работах [2,3]. В работах [4,5] автором диссертации была построена и исследована свободная энергия негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$ и одноионной анизотропией типа «легкая плоскость». В работе [10] автором диссертации проведен симметричный анализ изотропного спинового нематика с $S=1$ в окрестности $SU(3)$ точки. В работе [7] автор проанализировал трансформацию анизотропного спинового нематика с анизотропией «легкая плоскость» во внешнем магнитном поле.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 разделов, заключения и списка используемой литературы из 132 наименований. Общий объем диссертации составляет 104 страницы текста с 8 рисунками.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** проведен анализ проблемы, раскрыта ее значимость и актуальность; поставлены цели и задачи исследований; определяется достоверность и область применения полученных результатов.

В **первом разделе** исследована модель негейзенберговского антиферромагнетика с одноосной анизотропией типа «легкая плоскость» и учетом биквадратичного обменного взаимодействия ($S = 1$) для случая низких температур, гамильтониан которой может быть представлен в виде:

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

Такого рода модель является вполне применимой для описания магнитных свойств редкоземельных магнетиков. В редкоземельных магнетиках DySb, TbTe, TmCu, CsMnBr экспериментально установлено, что влияние высших мультиполей играет существенную роль в формировании свойств основного состояния, а также спектральных и термодинамических свойств. Среди таких магнитоупорядоченных систем существуют как практически изотропные системы (EuSe, CdMg), так и соединения, обладающие существенной анизотропией (TbMg, TmZn, TmCd).

Анализ плотности свободной энергии показал, что в системе сохраняются стабильные фазовые состояния, характерные для легкоосного случая, а именно, две коллинеарные фазы – ферромагнитная (FM) и нематическая (SN), и две двухподрешеточные – антиферромагнитная (AFM) и ортогонально-нематическая (ON). 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 $\theta = 0$:

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

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 $\theta = \frac{\pi}{4}$:

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (3)$$

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:

$$\varepsilon_1(k) = \sqrt{(2J_0 - K_0)^2 - K^2(k)}; \varepsilon_2(k) = \sqrt{\left(J_0 - K_0 - \frac{\beta}{2}\right)^2 - (J(k) - K(k))^2}. \quad (4)$$

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

$$\varepsilon_{1,2}(k) = \sqrt{\left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right)\left(K_0 - K(k) + 2J(k) - \frac{\beta}{2}\right)}. \quad (5)$$

Анализ спектров элементарных возбуждений (2)-(5) позволяет построить фазовую диаграмму системы в приведенных переменных $\left(\frac{K_0}{\beta}, \frac{J_0}{\beta}\right)$.

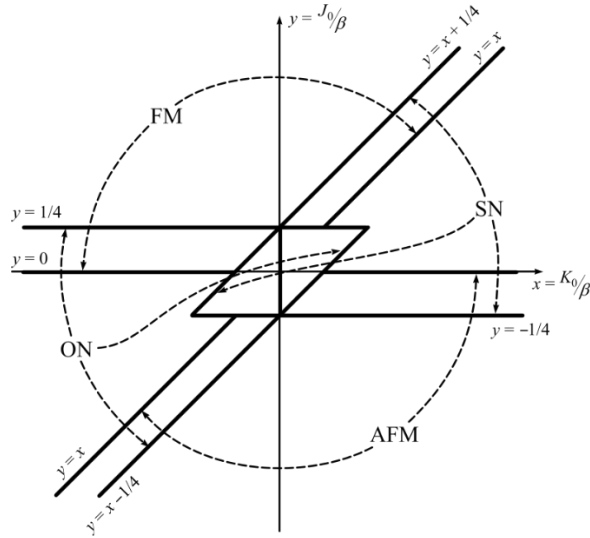


Рисунок 1. Фазовая диаграмма негейзенберговского магнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «легкая плоскость».

Во втором разделе рассмотрены фазовые состояния и динамические свойства обменно-анизотропного негейзенберговского ферримагнетика. При этом предполагается, что одна из подрешеток имеет спин магнитного иона, равный единице, а вторая — спин, равный $\frac{1}{2}$. В подрешетке со спином единиц учитывается и билинейное обменное взаимодействие, и биквадратичное. Кроме того, предполагается, что межподрешеточное обменное взаимодействие изингоподобным, т.е. имеет сильную одноосную анизотропию. Гамильтониан такой системы может иметь вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{m,m'} J_1(m-m') \sigma_m \sigma_{m'} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_2(n-n') \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{n,n'} K(n-n') (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 - \frac{1}{2} \sum_{m,n} A(m-n) \sigma_m^z S_n^z. \end{aligned} \quad (6)$$

J_2 , K , J_1 – константы обменного взаимодействия в подрешетках с $S=1$ и $\sigma = 1/2$; $A < 0$ – константа изинговского межподрешеточного обменного взаимодействия. Рассмотрение проводится при низких температурах, т.е. при $T \ll T_N$.

Используя диаграммную технику для операторов Хаббарда, определим энергию основного состояния, которая, в случае низких температур, фактически определяет плотность свободной энергии:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{2} J_1(0) \langle \sigma^z \rangle + \frac{1}{2} J_1(0) \langle (\sigma^z) \rangle^2 - \frac{K(0)}{12} - \frac{|A(0)|}{4} \cos 2\alpha - \frac{1}{2} (J_2(0) - K(0)) \cos^2 2\alpha. \quad (7)$$

а также параметры порядка системы:

$$\langle \sigma^z \rangle = -\frac{1}{2}, \langle S^z \rangle = \cos 2\alpha = 1, q_2^0 = 1, q_2^2 = 0. \quad (8)$$

Здесь α – параметр u - v преобразования.

Минимизируя плотность свободной энергии по параметру α , получим следующее уравнение

$$\frac{|A(0)|}{4} \sin 2\alpha + (J_2(0) - K(0)) \sin 2\alpha \cos 2\alpha = 0, \quad (9)$$

решения которого имеют вид:

$$\sin 2\alpha = 0, \quad \cos 2\alpha = \frac{|A(0)|}{4(K(0) - J(0))}. \quad (10)$$

Уравнение $\sin 2\alpha = 0$ удовлетворяется следующими значениями параметра $\alpha = 0, \pi$. Так константа межподрешеточного обменного взаимодействия $A < 0$, то единственным решением на параметр α является $\alpha = 0$. Это означает, что в системе реализуется ферримагнитное упорядочение (FiM) с векторами состояния подрешёток

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

и параметрами порядка $\langle \sigma^z \rangle = -\frac{1}{2}$, $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha = 1$, $q_2^0 = 1$, $q_2^2 = 0$. Как видно, в этом состоянии первая и вторая подрешетки достигают насыщения, но вектора намагниченности антиколлинеарны, и это состояние является ферримагнитным (FiM),

Более интересным является второе решение (10) уравнения (9). Как уже было ранее показано, средний магнитный момент (на узле) подрешетки с $S=1$ связан с параметром u - v преобразования ($\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$), то $\cos 2\alpha$ должен быть положительным и ограниченным,

следовательно, $\cos 2\alpha = \frac{|A(0)|}{4(K(0) - J(0))} < 1$. Следовательно, если в подрешетке с $S=1$

биквадратичный обмен является преобладающим ($K(0) > J(0)$), то в системе реализуется

состояние с намагниченностью первой подрешетки меньшей максимально возможного, а вторая подрешетка сохраняет насыщенное значение вектора намагниченности ($\langle \sigma^z \rangle = 1/2$).

При этом компоненты тензора квадрупольных моментов имеют вид:

$$q_2^2 = \langle O_2^2 \rangle = \sin 2\alpha < 1, \quad q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle = 1,$$

а одноузельные квадратичные корреляторы компонент спиновых операторов:

$$\langle (S^x)^2 \rangle = \frac{1}{2}(1 + \sin 2\alpha); \quad \langle (S^y)^2 \rangle = \frac{1}{2}(1 - \sin 2\alpha); \quad \langle (S^z)^2 \rangle = 1.$$

Как следует из этих соотношений, наличие эффективного поля, создаваемого подрешеткой $\sigma = 1/2$, приводит к трансформации плоского диска двухосный эллипсоид. Таким образом, в случае большого биквадратичного обмена в подрешетке с $S=1$ реализуется состояние спинового нематика (SN).

Поскольку средний спин подрешетки с $S=1$ может изменяться в зависимости от соотношения обменных интегралов, то в SN фазе возможно соотношение материальных параметров (J, K, A) , при котором суммарный средний магнитный момент подрешеток равен нулю: $\langle S^z + \sigma^z \rangle = 0$, т.е. $\langle S^z \rangle = -\langle \sigma^z \rangle$. Это условие определяет точку компенсации спинов подрешеток, и реализуется, если

$$|A(0)| = 2(J(0) - K(0)).$$

В переменных $y = |A|/K$, $x = J/K$ линия компенсации магнитных моментов примет вид: $y = 2x - 2$.

Из равенства плотности свободной энергии в FiM – и SN-фазах получим линию фазового перехода между этими фазами

$$|A(0)| = 4(K(0) - J(0)),$$

или в приведенных переменных (x, y) : $y = 4 - 4x$.

Эти результаты дают возможность построить фазовую диаграмму исследуемой системы, причем, ее удобнее изобразить в приведенных переменных (x, y) . Схематично эта диаграмма приведена на рис.2.

Исследуем тип фазового перехода SN – FiM фаза.

Для этого воспользуемся термодинамической теорией фазовых переходов Ландау. Для плотности свободной энергии в окрестности линии фазового перехода SN-FiM получим выражение

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \Lambda \alpha^2 + \Theta \alpha^4 + \dots, \quad (11)$$

где $\Lambda = 2J_2(0) - 2K(0) + \frac{1}{2}|A(0)|$,

$$\Theta = -\frac{1}{6}|A(0)| - \frac{8}{3}J_2(0) + \frac{8}{3}K(0).$$

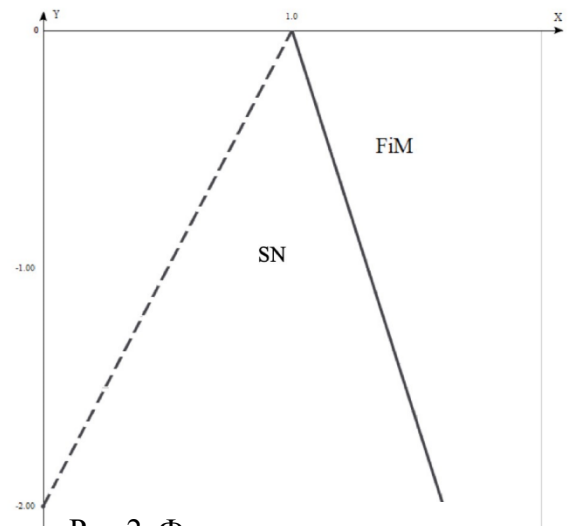


Рис.2. Фазовая диаграмма ферромагнетика с подрешетками $S = 1$ и $\sigma = 1/2$. Сплошная жирная линия – линия фазового перехода FiM-SN фаза; пунктирная линия – линия компенсации.

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

Используя метод бозонизации операторов Хаббарда, определим спектры возбуждений негейзенберговского ферримагнетика в FiM- и SN-фазах.

Ветви элементарных возбуждений первой и второй подрешеток в FiM-фазе имеют вид

$$\tilde{\Omega}_a = J_2(0) - J_2(k) + \frac{1}{4}|A(0)|, \quad (12)$$

$$\tilde{\Omega}_b(k) = 2J_2(0) - K_0 - K(k) + \frac{1}{2}|A(0)|, \quad (13)$$

$$\tilde{\Omega}_c = \frac{1}{2}(J_1(0) - J_1(k) + |A(0)|). \quad (14)$$

Ветви спектра возбуждения (12) и (14) являются «поперечными» возбуждениями первой и второй подрешеток, т.е. описывают прецессию магнитных моментов подрешеток, и в отсутствие межподрешеточного обменного взаимодействия ($A = 0$) принимают стандартный вид. Наибольший интерес представляет поведение ветви возбуждений (13), которая представляет собой «продольную» ветвь возбуждений первой подрешетки, т.е. эта ветвь возбуждений связана с колебанием длины вектора магнитного момента подрешетки с $S=1$.

Из обращения в ноль энергетической щели в спектре (13), получим линию потери устойчивости FiM-фазы:

$$2J_2(0) - K(0) - K(k) + \frac{1}{2}|A(0)| = 0,$$

которую в переменных (x, y) можно представить в виде:

$$y = 4 - 4x. \quad (15)$$

Как видно, линия потери устойчивости (15) FiM-фазы в точности совпадает с линией фазового перехода FiM-SN, из чего следует, что данный фазовый переход является переходом второго рода.

На рис.3 приведены спектры элементарных возбуждений анизотропного негейзенберговского ферримагнетика. Как видно из графиков и выражений (12)-(14) все три ветви возбуждений имеют энергетические щели при $k \rightarrow 0$. Такое поведение спектров возбуждений принципиально отличает рассматриваемый случай от динамики изотропного негейзенберговского ферримагнетика. «Поперечные» ветви возбуждений изотропного негейзенберговского ферримагнетика являются голдстоуновскими. Такое различие в поведении спектров возбуждений связано с влиянием изингоподобного

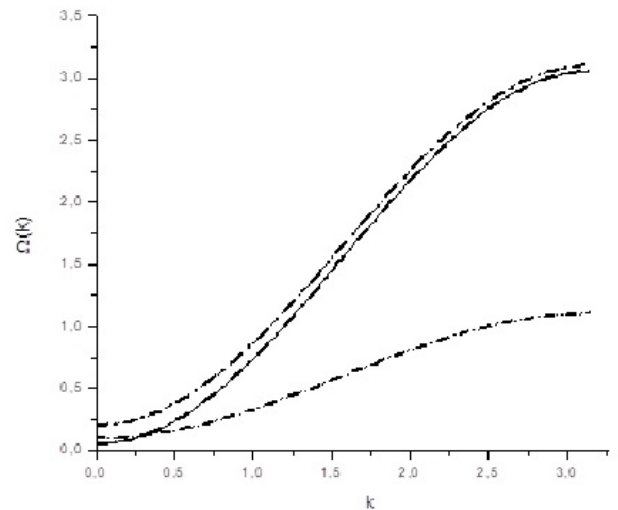


Рис.3. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского анизотропного (изинговского) ферримагнетика в FiM-фазе при $J_1 = 1$; $J_2 = 1,5$; $K = 1,45$; $|A| = 0,2$. Сплошная линия – ветвь $\Omega_a(k)$, пунктирная линия – ветвь $\Omega_b(k)$, штрих-пунктирная линия – ветвь $\Omega_c(k)$.

межподрешеточного обменного взаимодействия. Что касается энергетической щели в спектрах «продольных» возбуждений как изотропного, так и рассматриваемого здесь ферримагнетика с анизотропным межподрешеточным обменом, максимальны и совпадают для обеих систем. Именно эти ветви теряют устойчивость при фазовом переходе второго рода FiM-SN, как в изотропном, так и анизотропном ферримагнетиках. Как следует из соотношений (12) и (14), спектры $\tilde{\Omega}_a$ и $\tilde{\Omega}_c$ в длинноволновом пределе (при $k \rightarrow 0$) имеют энергетические щели, пропорциональные $A(0)$.

В SN фазе спектры возбуждений имеют следующий вид:

$$\Omega_a^2 = \left(K_0 - J_2(k) + \frac{1}{4} |A_0| \cos 2\alpha + (J_2(0) - K_0) \cos^2 2\alpha \right)^2 - \left(\frac{1}{2} \sin 2\alpha (J_2(k) - K(k)) \right)^2 \quad (16)$$

$$\Omega_b^2 = \left(K_0 - J_2(k) + \frac{1}{2} |A_0| \cos 2\alpha + (2J_2(0) - 2K_0 - K(k) + J_2(k)) \cos^2 2\alpha \right)^2 - \left(\frac{1}{2} \sin^2 2\alpha (J_2(k) - K(k)) \right)^2 \quad (17)$$

$$\Omega_c = -\frac{1}{2} (J_1(k) - J_1(0) - |A_0| \cos 2\alpha) \quad (18)$$

Отметим, что спектры (16)-(18) совпадают со спектрами (12)-(14) при $\alpha \rightarrow 0$.

Как и в FiM фазе, спектр (17) описывает «продольную» ветвь возбуждений, связанную с изменением длины вектора магнитного момента подрешетки с $S=1$, а формулы (16) и (18) описывают «поперечные» ветви возбуждений подрешеток, которые, как видно из этих выражений, являются «запутанными».

Как следует из (17), энергетическая щель в спектре «продольных» возбуждений имеет вид

$$|A(0)| = 4(J(0) - K(0)),$$

и совпадает с полученной ранее линией фазового перехода между FiM- и SN- фазами.

Исследуем «продольную» ветвь возбуждений в окрестности линии/точки компенсации. В

окрестности этой линии (при $\cos 2\alpha = \frac{1}{2}$)

«продольная» ветвь возбуждений (17) принимает вид:

$$\Omega_b(k) = \frac{1}{2} \sqrt{2(K(0) - J_2(0)) + A(0) - K(k) - 3J_2(k)}$$

и на линии компенсации энергетическая щели в спектре равна:

$$\Omega_b(0) = \frac{1}{2} \sqrt{K(0) - J_2(0)}$$

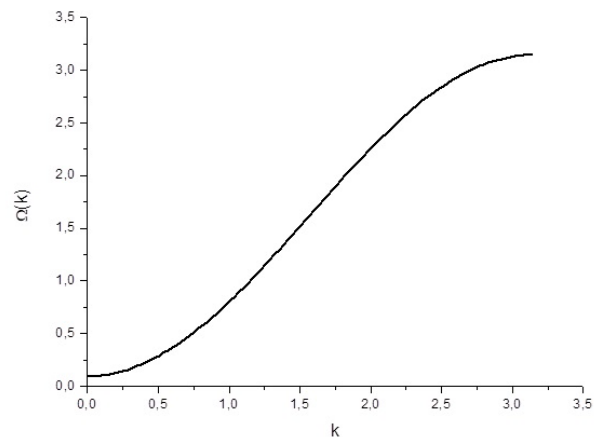


Рис.4. Спектр элементарных возбуждений $\Omega_b(k)$, негейзенберговского анизотропного (изинговского) ферримагнетика в SN-фазе при $J_1 = 1$; $J_2 = 1,5$; $K = 1,625$; $|A| = 0,2$.

В третьем разделе диссертации исследуются фазовые состояния и динамические свойства негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$. При этом

предполагается, что подрешетка с $S=1$ является анизотропной, с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость». Мы будем рассматривать две возможные ситуации: подрешетка $S=1$ обладает малой анизотропией, существенно меньшей обменных интегралов ($\beta \ll J^{(2)}, K$); подрешетка с $S=1$ является сильно анизотропной ($\beta > J^{(2)}, K$). Гамильтониан исследуемой модели, вне зависимости от величины константы одноионной анизотропии, имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} \left[J^{(2)}(n-n')(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'}) + K(n-n')(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 \right] - \frac{1}{2} \sum_{m,m'} J^{(1)}(m-m')(\boldsymbol{\sigma}_m \boldsymbol{\sigma}_{m'}) - \frac{1}{2} \sum_{n,m} A(n-m)(\boldsymbol{\sigma}_m \mathbf{S}_n) + \frac{\beta}{2} \sum_n (S_n^x)^2 \quad (19)$$

J_2, K, J_1 – константы обменного взаимодействия в подрешетках с $S=1$ и $\sigma = 1/2$; $A < 0$ – константа изинговского межподрешеточного обменного взаимодействия, $\beta > 0$ – константа одноионной анизотропии типа «легкая плоскость». Рассмотрение проводится при низких температурах, т.е. при $T \ll T_N$.

Используя диаграммную технику для операторов Хаббарда, определим энергию основного состояния, которая, в случае низких температур, фактически определяет плотность свободной энергии:

$$F = -\frac{1}{4} \left[\beta + \frac{4}{3} K_0 + \frac{1}{2} J_0^{(1)} \right] - \frac{1}{4} |A_0| \cos 2\alpha + \frac{\beta}{4} \sin 2\alpha - \frac{1}{2} \left[J_0^{(2)} - K_0 \right] \cos^2 2\alpha, \quad (20)$$

где учтено, что $\langle \sigma^z \rangle = 1/2$, $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha$.

Минимизируя (20) по параметру α получим

$$\frac{|A_0|}{2} \sin 2\alpha + \frac{\beta}{2} \cos 2\alpha + 2(J_0^{(2)} - K_0) \cos 2\alpha \sin 2\alpha = 0 \quad (21)$$

Рассмотрим решения уравнения (21) при различных соотношениях материальных параметров и низких температурах.

Прежде всего рассмотрим случай, когда константа одноионной анизотропии много меньше билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, а билинейный обмен, в свою очередь, превосходит биквадратичный ($J_0 > K_0 \gg \beta$). При таком соотношении материальных параметров решение уравнения (21) можно представить в виде:

$$\sin 2\alpha = -\frac{\beta}{4(J_0^{(2)} - K_0) + |A_0|}.$$

Поскольку мы рассматриваем случай малой одноионной анизотропии, т.е. предполагаем, что константа одноионной анизотропии является самым малым параметром системы, а $J_0 > K_0$, то в силу малости константы анизотропии, с хорошей степенью точности можно считать, что $\sin 2\alpha \sim 0$, а $\cos 2\alpha \sim 1$. Таким образом, намагниченность подрешетки с $S=1$ достигает своего максимально возможного значения $\langle S^z \rangle \approx 1$. Следовательно, при таком соотношении материальных параметров, система по своей спиновой конфигурации близка к ферромагнитному упорядочению. Это означает, что в системе реализуется ферромагнитное фазовое состояние (FiM) с векторами состояния подрешёток

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

и параметрами порядка

$$\left| \langle \sigma^z \rangle \right| = \frac{1}{2}, \quad \langle S^z \rangle = \cos 2\alpha \approx 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 \approx 0.$$

Как видно, в этом состоянии подрешетка с $S=1$ почти насыщена, а подрешетка с $\sigma = 1/2$ является насыщенной. При этом векторы намагниченности подрешеток антиколлинеарны, что связано со знаком константы межподрешеточного обменного взаимодействия ($A < 0$).

Рассмотрим теперь случай, когда преобладающим материальным параметром первой подрешетки является биквадратичное обменное взаимодействие. В этом случае решение уравнения (201) имеет вид:

$$\cos 2\alpha = \frac{|A_0|}{4(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta} \quad (22)$$

Поскольку $\cos 2\alpha$ определяет средний магнитный момент (на узле) подрешетки $S=1$, то эта величина должна быть положительной, и кроме того, функция $\cos 2\alpha$ ограничена, и не превосходит единицу. Таким образом, при $K(0) > J(0) \gg \beta$ в системе реализуется состояние с намагниченностью подрешетки с $S=1$ существенно меньше максимально возможного, а вторая подрешетка сохраняет насыщенное значение намагниченности. Квадрупольные параметры порядка первой подрешетки в этом случае имеют вид

$$q_2^2 = \sin 2\alpha < 1, \quad q_2^0 = 1.$$

Таким образом, при $K_0 > J_0 > \beta$ в подрешетке с $S=1$ реализуется нематическое состояние (SN), геометрическим образом которого является двухосный эллипсоид.

Из условия $\langle S^z \rangle = -\langle \sigma^z \rangle$, и учитывая, что $\left| \langle \sigma^z \rangle \right| = 1/2$, получим

$$\frac{|A_0|}{4(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta} = -1/2.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$|A_0| = -2(K_0 - J_0^{(2)}) - \beta/2. \quad (23)$$

Следовательно, уравнение (23) описывает поверхность в переменных (J, K, A, β) на которой суммарный средний спин подрешеток равен нулю ($\langle S^z + \sigma^z \rangle = 0$). Подчеркнем, как это уже отмечалось ранее, что речь идет именно о компенсации спинов подрешеток, а не о компенсации магнитных моментов подрешеток. Это связано с тем, что решетки не эквивалентные, и имеют разные g -факторы. Уравнение (23) удобнее переписать в приведенных переменных $y = |A|/K, x = J/K, z = \beta/K$. Тогда

$$y = 2(x - 1) - z/2. \quad (24)$$

Из равенства плотности свободной энергии в FiM – и SN-фазах получим поверхность фазового перехода между этими фазами

$$\left[|A_0| - 4(K_0 - J_0^{(2)}) - \beta \right]^2 + \beta \left[4(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta \right] = 0,$$

или в приведенных переменных (x, y, z)

$$\left[y - 4(1-x) - z \right]^2 + z \left[4(1-x) + z \right] = 0 \quad (25)$$

Эти результаты позволяют построить фазовую диаграмму исследуемой системы. Анализ фазовых состояний, а следовательно, и фазовую диаграмму удобнее рассматривать в приведенных переменных на плоскости (x, y) при различных значениях z, т.е. при различных значениях константы одноионной анизотропии β . Схематично эта диаграмма приведена на рис.5.

Эти результаты свидетельствуют о том, что одноионная анизотропия существенно увеличивает область существования SN – фазы, и сдвигает как линии фазового перехода, так и линии компенсации в область больших значений билинейного обменного взаимодействия подрешетки S=1.

Раскладывая плотность свободной энергии (20) в ряд по этому параметру в SN-фазе в окрестности линии фазового перехода ($\alpha \rightarrow 0$) получим

$$F = F_0 + A\alpha + \Lambda\alpha^2 + B\alpha^3 + \Theta\alpha^4 + \dots, \quad (26)$$

где $A = \frac{\beta}{6}$, $\Lambda = 2J_0^{(2)} - 2K_0 + \frac{1}{2}|A_0|$, $B = -\frac{\beta}{9}$, $\Theta = -\frac{1}{6}|A(0)| - \frac{8}{3}J_2(0) + \frac{8}{3}K(0)$,

Наличие линейного по α слагаемого в выражении (26) свидетельствует о том, что подрешетка с S=1 является почти насыщенной в FiM-фазе. Анализ плотности свободной энергии позволяет трактовать фазовый переход SN-FiM-фаза как фазовый переход первого рода. Поскольку коэффициент $\Theta > 0$ в SN-фазе, то кубическая парабола, определяемая уравнением $A + 2\Lambda\alpha + 3B\alpha^2 + 4\Theta\alpha^3 = 0$, имеет два минимума, ни один из которых не совпадает с точкой $\alpha = 0$.

Исследование поведения спектров элементарных возбуждений системы как в FiM-фазе, так и в SN является важной задачей. Особый интерес представляет поведение спектров в окрестности линии компенсации спинов подрешеток.

Очевидно, что в рассматриваемом негеизенберговском ферримагнетике реализуются три ветви элементарных возбуждений: две «поперечные» ветви возбуждений, связанные с прецессией магнитных моментов подрешеток, и одна «продольная», связанная с изменением модуля магнитного момента подрешетки с S=1.

Рассмотрим «продольную» ветвь возбуждений в FiM фазе, т.е. при $J_0 > K_0 \gg \beta$. С учетом $\langle S^z \rangle \approx 1$, $\sin 2\alpha \approx 0$, спектр «продольных» возбуждений имеет вид:

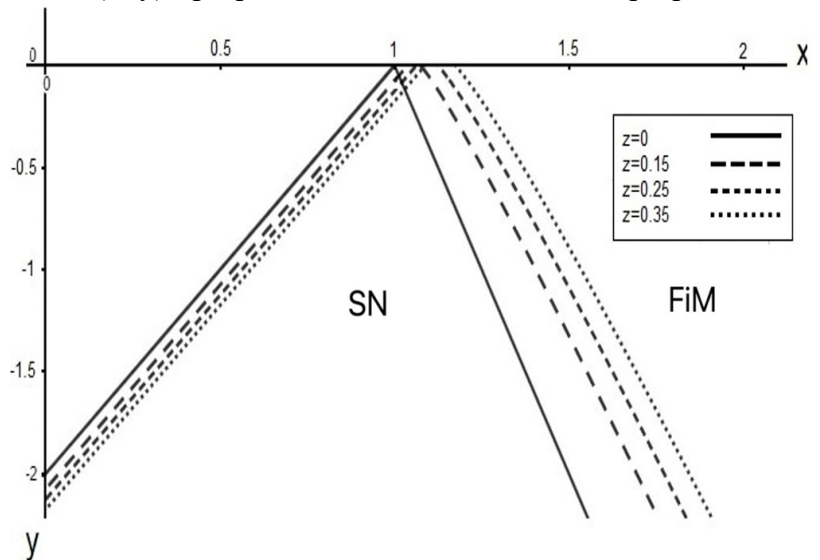


Рис.5. Сечение фазовой диаграммы легкоплоскостного негеизенберговского ферримагнетика при различных значениях константы одноионной анизотропии.

$$\varepsilon_1^2(k) \approx \left((K_0 - K_k) + 2(J_0^{(2)} - K_0) + \frac{|A_0|}{2} \right)^2 \quad (27)$$

Дисперсия «продольных» магнонов определяется биквадратичным обменным взаимодействием, а энергетическая щель в спектре (27) равна: $\varepsilon_1(0) = 2(J_0^{(2)} - K_0) + \frac{|A_0|}{2}$. Это выражение определяет линию потери устойчивости «продольной» ветви элементарных возбуждений $2(J_0^{(2)} - K_0) + \frac{|A_0|}{2} = 0$ при фазовом переходе из FiM фазы в SN, и в переменных (x, y, z) эта линия имеет вид $y = 4(1-x)$. Очевидно, что эта линия лежит ниже линии фазового перехода, и совпадает с линией фазового перехода в изотропном негејзенберговском ферримагнетике. Такое поведение линии потери устойчивости подтверждает полученный нами результат, а именно, то, что фазовый переход FiM – SN является переходом первого рода.

Рассмотрим теперь поведение спектра ε_1 в противоположном случае, когда $K_0 > J_0 \gg \beta$, и система находится в SN фазе. Учитывая это, спектр «продольных» магнонов можно представить в виде:

$$\varepsilon_1^2(k) \approx \left((K_0 - K_k) - \frac{\beta}{2} \right) \cdot \left((K_0 - K_k) - \frac{\left(\left(2(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta/2 \right)^2 - |A_0/2|^2 \right) \left(\beta/2 - 2(K_0 - J_0^{(2)}) \right)}{\left(2(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta/2 \right)^2} \right) \quad (28)$$

Из равенства нулю энергетической щели спектра (28) можно определить линию потери устойчивости SN фазы:

$$\varepsilon_1^2(0) \approx \frac{\beta}{2} \cdot \left[\left(\left(2(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta/2 \right)^2 - |A_0/2|^2 \right) \left(\beta/2 - 2(K_0 - J_0^{(2)}) \right) \right] = 0$$

Из последнего уравнение следует, что спектр (28) теряет устойчивость на линии $2(K_0 - J_0^{(2)}) + \beta/2 - |A_0/2| = 0$, или в переменных (x, y, z) $y = 4(1-x) + z$.

Особый интерес представляет поведение спектра «продольных» возбуждений в окрестности линии компенсации спиновых моментов подрешёток. Учитывая, что на линии компенсации спинов подрешёток $\left| \langle S^z \rangle \right| = \left| \langle \sigma_z \rangle \right| = 1/2$, спектр (28) существенно упрощается и принимает «антиферромагнитный» вид для спинового нематика:

$$\varepsilon_1(k) \approx \sqrt{\frac{3}{2}} (K_0 - K_k)(K_0 - J_0).$$

Кроме «продольной» ветви возбуждений в системе существуют две «поперечные» ветви элементарных возбуждений, которые связаны с прецессионным движением спинов подрешёток с $S=1$ и $\sigma=1/2$, соответственно. «Поперечные» ветви возбуждений являются «гибридизированными», т.е. их нельзя разделить на независимые возбуждения каждой из подрешёток. Такого рода «гибридизация» обусловлена наличием межподрешеточного обменного взаимодействия. Одна из ветвей «поперечных» возбуждений является безщелевой (голдстоуновской модой) и пропорциональна k ($\varepsilon_2(k) \sim k$), а во второй ветви появляется энергетическая щель пропорциональна $|A_0|\beta$.

Перейдем к исследованию модели, описываемой гамильтонианом (19) в случае, когда константа одноионной анизотропии подрешетки с $S=1$ становится сравнимой с константами билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий (или даже превосходит эти взаимодействия): $\beta > J > K$, либо $\beta > K > J$. Как и ранее, предполагается, что температура близка к 0^0K .

Выражение для плотности свободной энергии и уравнение на минимум плотности свободной энергии (20) были получены без каких-либо ограничений на материальные параметры системы, следовательно, эти уравнения могут быть использованы для случая большой одноионной анизотропии.

В первую очередь рассмотрим ситуацию, когда константа гейзенберговского обменного взаимодействия превосходит биквадратичное обменное взаимодействие ($J_0^{(2)} > K_0$), учитывая, при этом, что $\beta \geq J > K$. Решение уравнения (21) в этом случае можно представить в виде:

$$\cos 2\alpha = \frac{|A_0|}{\beta - 4(J_0^{(2)} - K_0)}. \quad \text{Таким образом, в рассматриваемом случае (при } \beta > J > K),$$

намагниченность первой подрешетки становится существенно меньше максимально возможного значения. Это связано с эффектом квантового сокращения спина первой подрешетки, обусловленного влиянием как большой одноионной анизотропии, так и биквадратичного обменного взаимодействия.

Если же биквадратичное обменное взаимодействие больше билинейного ($K_0 > J_0^{(2)}$), и преобладающей одноионной анизотропией, среднее значение намагниченности (на один узел) равно:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha = \frac{|A_0|}{\beta + 4(K_0 - J_0^{(2)})},$$

т.е. среднее значение намагниченности также остается меньше максимально возможного.

Следовательно, как при $\beta \gg K_0 > J_0^{(2)}$, так и при $\beta \gg J_0^{(2)} > K_0$ в системе реализуется состояние с намагниченностью первой подрешетки существенно меньше максимально возможного, а вторая подрешетка сохраняет насыщенное значение намагниченности ($\langle \sigma^z \rangle = 1/2$). Векторный и квадрупольные параметры порядка первой подрешетки в этом случае имеют вид

$$\langle S^z \rangle < 1, \quad q_2^2 = \sin 2\alpha < 1, \quad q_2^0 = 1.$$

Как следует из выражений для $\langle S^z \rangle$, среднее значение магнитного момента (на один узел) уменьшается с ростом константы биквадратичного обменного взаимодействия и константы одноионной анизотропии.

Таким образом, в системе реализуется фаза, в которой как векторный параметр порядка первой подрешетки ($\langle S^z \rangle$), так и компоненты тензора квадрупольных моментов (q_2^2) первой подрешетки принимают промежуточные значения, лежащие в интервале между нулем и единицей, а вторая подрешетка играет роль постоянного «подмагничивающего поля». Как ранее было показано из симметричного анализа этих состояний следует, что учет большой одноионной анизотропии, в подрешетке с $S=1$ приводит к эффекту квантового сокращения

спина. В результате реализуется нематическое состояние (SN) при произвольных соотношениях между обменными интегралами.

Из условия $\langle S^z \rangle = -\langle \sigma^z \rangle$, и учитывая, что $|\langle \sigma^z \rangle| = 1/2$, получим следующее уравнение,

описывающее поверхность компенсации спинов подрешеток в пространстве $(A, J^{(2)}, K, \beta)$:

$$|A_0| = 2(J_0^{(2)} - K_0) - \beta/2. \quad (29)$$

Уравнение (29) удобнее переписать в относительных переменных $y = |A|/K$, $x = J/K$, $z = \beta/K$. В этих переменных уравнение поверхности компенсации имеет вид:

$$y = 2(x - 1) - z/2.$$

Таким образом, уравнение (29) описывает поверхность в переменных (J, K, A, β) на которой суммарный средний спин подрешеток равен нулю ($\langle S^z + \sigma^z \rangle = 0$).

Полученные результаты позволяют построить поверхность компенсации исследуемой системы (см. уравнение (29), причем, ее удобнее изобразить в приведенных переменных на плоскости (x, y) , при фиксированном значении z , т.е. при фиксированных значениях константы одноионной анизотропии β . Схематично эта диаграмма приведена на рис.6.

Исследуем поведение спектров элементарных возбуждений системы в окрестности поверхности компенсации спинов подрешеток сильно анизотропного негейзенберговского ферримагнетика. В рассматриваемой нами системе существуют три ветви элементарных

возбуждений: две «поперечные» ветви возбуждений, связанные с прецессией магнитных моментов подрешеток, и одна «продольная», связанная с изменением модуля магнитного момента подрешетки с $S=1$. Наибольший интерес представляет продольная ветвь возбуждений, динамика которой определяется квадрупольными параметрами порядка.

Учитывая, что в окрестности линии компенсации среднее значение магнитного момента подрешетки с $S=1$ $\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha = 1/2$, спектр «продольных» магнонов примет вид:

$$\varepsilon_1^2(k) \approx \left((K_0 - K_k) + \frac{\beta}{4}(\sqrt{3} - 1) \right) \left(\frac{|A_0|}{2} + \frac{\beta}{4} \left(\sqrt{3} + \frac{1}{2} \right) \right) \quad (30)$$

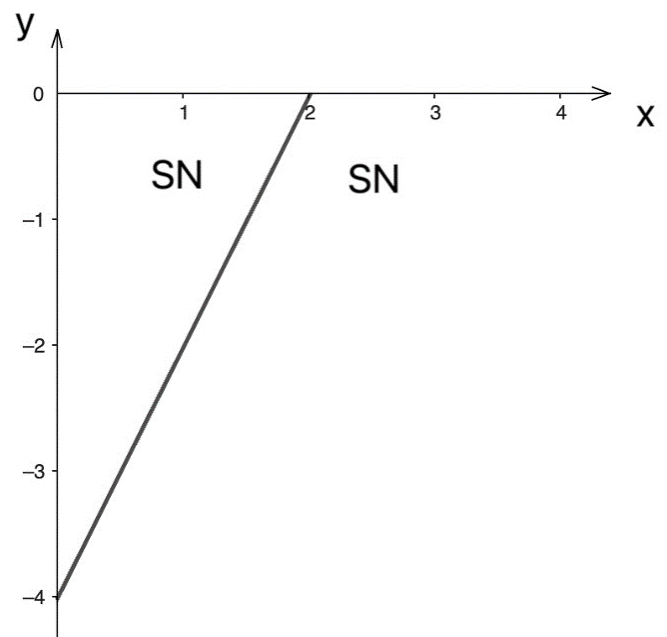


Рис.6.Фазовая диаграмма сильно анизотропного негейзенберговского ферримагнетика (при $z=4$)

Из (30) следует, что энергетическая щель в спектре «продольных» возбуждений (в длинноволновом пределе) пропорциональна константе одноионной анизотропии, но усиленной межподрешеточным обменным взаимодействием:

$$\varepsilon_1^2(0) \approx \frac{\beta}{8}(\sqrt{3}-1) \left(|A_0| + \frac{\beta}{2} \left(\sqrt{3} + \frac{1}{2} \right) \right).$$

Такое обменное усиление энергетической щели характерно для антиферромагнетиков, следовательно, в окрестности линии (поверхности) компенсации негейзенберговский сильно анизотропный ферромагнетик ведет себя как антиферромагнетик.

Кроме рассмотренной продольной ветви возбуждений, в системе существуют и две «поперечные» ветви элементарных возбуждений. Эти возбуждения связаны с прецессионным движением спинов подрешеток с $S=1$ и $\sigma=1/2$, соответственно. Одна из ветвей «поперечных» возбуждений является безщелевой и пропорциональна k ($\varepsilon_2(k) \sim k$), а во второй ветви появляется энергетическая щель, которая пропорциональна константе одноионной анизотропии, усиленной межподрешеточным обменным взаимодействием.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных теоретических исследований двухподрешеточных негейзенберговских магнетиков можно сформулировать основные результаты, полученные в работе:

1. Определено влияние одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» на фазовые состояния и спектры возбуждений негейзенберговского антиферромагнетика со спином магнитных ионов подрешеток $S=1$. Показано, что в исследуемой системе, как и в изотропном и легкоосном негейзенберговском антиферромагнетике, реализуются четыре фазовых состояния, два из которых характеризуются векторными параметрами порядка (ферро- и антиферромагнитное), и два – тензорными параметрами порядка (нематическое и ортогонально-нематическое). Однако, в отличие от изотропного и легкоосного негейзенберговского антиферромагнетика, в рассматриваемом в диссертации случае, фазовые переходы между указанными фазами являются переходами первого рода, протекающими через области сосуществования фаз. Еще одной особенностью рассматриваемой системы является возможность прямого фазового перехода первого рода между нематической и ортогонально нематической фазами, тогда как в легкоосном и изотропном магнетиках данный фазовый переход невозможен, а ему соответствует $SU(3)$ точка.
2. Впервые исследованы динамические и статические свойства негейзенберговского ферромагнетика с изингоподобным межподрешеточным обменным взаимодействием, и со спинами магнитных ионов подрешеток $S=1$ и $\sigma=1/2$. Было показано, что учет биквадратичного обменного взаимодействия в подрешетке с $S=1$ приводит к тому, что кроме реализации ферромагнитного состояния, возможно также существование нематической фазы. Необходимо отметить, что в рассматриваемом случае, в нематическом состоянии среднее значение намагниченности (на одном узле) не равно нулю, тем не менее это состояние является нематическим, о чем свидетельствуют его симметричные свойства. Определены линия фазового перехода «ферромагнитная-нематическая» фаза, а в нематической фазе существует линия компенсации спинов подрешеток по материальным параметрам. Показано, что фазовый переход ферромагнитная–нематическая фаза является фазовым переходом второго рода, и протекает по продольной ветви элементарных возбуждений. Показано, что в окрестности линии компенсации спинов подрешеток спектр продольной ветви возбуждений «антиферроподобен».

3. Исследовано влияние одноионной анизотропии типа «легкая плоскость» на динамические и статические свойства негейзенберговского ферримагнетика с подрешетками $S=1$ и $\sigma = 1/2$. Показано, что свойства системы существенно зависят от соотношения материальных параметров подрешетки со спином магнитного иона $S=1$. Установлено, что в зависимости от величины константы одноионной анизотропии в системе реализуются либо ферримагнитная и нематическая фазы, либо только нематическая.
4. Установлено, что в случае малой легкоплоскостной анизотропии (существенно меньшей обменных интегралов подрешетки с $S=1$) реализуются два фазовых состояния: ферримагнитное и нематическое. Фазовый переход между этими фазами, в отличие от изотропного случая, является фазовым переходом первого рода. В области существования нематического состояния реализуется линия компенсации спинов подрешеток. Поведение спектров возбуждений в окрестности этой линии – «антиферроподобно».
5. Показано, что, если константа одноионной анизотропии превосходит константы обменных взаимодействий в системе реализуется только нематическое состояние, а ферримагнитная фаза становится энергетически не выгодной. В этом случае в системе также существует линия компенсации спинов подрешеток. Исследованы спектры возбуждений в окрестности линии компенсации.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах из списка ВАК:

1. Е. А. Ярыгина., Динамические и статические свойства двухподрешеточного анизотропного негейзенберговского магнетика / Е. А. Ярыгина, Я. Ю. Матюнина, Ф. Н. Клевещ, Ю. А. Фридман // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2019. – Т.156. - вып.6 (12). – С.1175–1184
2. А. В. Кривцова. Негейзенберговский анизотропный ферримагнетик / А. В. Кривцова, Я. Ю. Матюнина, Ю. А. Фридман // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. - Т.158. - вып. 2 (8). - стр. 334–344
3. О.А. Космачев. Динамические и статические свойства негейзенберговского ферримагнетика с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость» / О.А. Космачев, Е.А. Ярыгина, Я.Ю. Матюнина, Ю.А. Фридман // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 2022, Т.162. - №3. – С.406-416
4. О.А. Космачев. Негейзенберговский ферримагнетик с одноионной анизотропией / О.А. Космачев, Е.А. Ярыгина, Я.Ю. Матюнина, Ю.А. Фридман // Физика твердого тела. – 2022. – Т.64. - №3. – С.337-344
5. О.А. Космачев. Влияние большой одноионной анизотропии на динамические и статические свойства негейзенберговского ферримагнетика / О.А. Космачев, Я.Ю. Матюнина, Ю.А. Фридман // Физика твердого тела. – 2023. – Т. 65. - №5. - С.810-816
6. Е. А. Ярыгина. Динамические и статические свойства негейзенберговского анизотропного антиферромагнетика при ненулевой температуре / Е. А. Ярыгина, В. В. Козачек, Я. Ю. Матюнина, О. А. Космачев, Ю. А. Фридман / Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2024. – Т.165. -вып.1. – С.98–113
7. Я. Ю. Матюнина Спиновый нематик в сильном магнитном поле/ Я. Ю. Матюнина, О. А. Космачев, Ю. А. Фридман//Физика Металлов и Металловедение – 2024. – Т.125. - №5. – С. 463-469

Статьи в зарубежных журналах:

8. E.A. Yarygina. Dynamic and static properties of two-sublattice anisotropic non-Heisenberg magnet / E.A. Yarygina, Y.Y. Matyunina, P.N. Klevets, Y.A. Fridman // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2020. -Vol.512. – P.167043
9. A.V. Krivtsova. Isotropic non-Heisenberg magnet with two sublattices (1, 1/2): Statics and dynamics / A.V. Krivtsova, Y.Y. Matyunina, E.A. Polyanskaya, O.A. Kosmachev, Y.A. Fridman // Journal of magnetism and magnetic materials. - 2020. - Vol.513. - P.167178
10. Y.Y. Matyunina. Singular points of the isotropic non-heisenberg magnet / Y.Y. Matyunina, O.A. Kosmachev, Y.A. Fridman // Journal of magnetism and magnetic materials. – 2023. - Vol.588. - P.171451

Тезисы докладов:

1. Е.А. Ярыгина. Влияние биквадратичного обменного взаимодействия на фазовые состояния сильно анизотропного антиферромагнетика / Ярыгина Е.А., Клевец Ф.Н., Матюнина Я.Ю., Фридман Ю.А. // В сборнике: Сборник тезисов, материалы Двадцать пятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-25). Крым, 2019. С. 231
2. Е.А. Ярыгина. Влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния двухподрешеточного негейзенберговского магнетика / Ярыгина Е.А., Клевец Ф.Н., Матюнина Я.Ю. // В книге: Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании. Тезисы докладов XI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Уфа, 2020. С. 56-58
3. O.A. Kosmachev. Spin states of an anisotropic non-Heisenberg ferrimagnet / O.A. Kosmachev, A.V. Krivtsova, Ya.Yu. Matyunina, Yu.A. Fridman // International Conference «Functional Materials», ICFM-2021, Crimea, Alushta, 2021. С.43
4. Ya.Yu. Matyunina. Phase states of spin-1 ising-like magnetic with strong single-ion anisotropy of the easy-plane type / Matyunina Ya.Yu., Yarygina E.A., Klevets Ph.N // В сборнике: XII Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 100-летию профессора БашГУ Фарзтдинова Миркашира Минигалиевича. Уфа, 2021. С. 41
5. Ya.Yu. Matyunina. Phase states of a non-Heisenberg ferrimagnet / Matyunina Ya.Yu., Kosmachev O.A., Yarygina E.A., Fridman Yu. A // Международная конференция Физика.СПб, Санкт-Петербург, 2021. С. 563
6. O.A. Kosmachev. Dynamic and static properties of a non-heisenberg ferrimagnet with a single-ion anisotropy / O.A. Kosmachev, Ya.Yu. Matyunina*, Yu.A. Fridman //VIII Euro-Asian Symposium “Trends in magnetism”. Kazan, 2022. С. 85
7. Ya.Yu. Matyunina Phase states and excitation spectra of a non-heisenberg ferrimagnet / Matyunina Ya.Yu., Yarygina E.A., Kosmachev O.A., Fridman Yu.A. // В сборнике: International Conference Functional Materials ICFM-2023. Crimea, Foros, 2023. С. 22
8. Ya.Yu. Matyunina. Singular points of an isotropic non-heisenberg magnet /Matyunina Ya.Yu., Kosmachev O.A., Fridman Yu.A.// В сборнике: International Conference Functional Materials ICFM-2023. Crimea, Foros, 2023. С. 41.