

ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫЙ НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ МАГНЕТИК $S = 1$ СО СЛОЖНОЙ МЕЖИОННОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

О. А. Космачев, А. В. Кривцова, Ю. А. Фридман*

Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского
295007, Симферополь, Республика Крым, Россия

Поступила в редакцию 29 марта 2018 г.

Исследованы статические и динамические свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со сложной межионной анизотропией как билинейного, так и биквадратичного обменных взаимодействий. Определены условия существования как фаз с дипольным параметром порядка (AFM-фазы), так и фаз с тензорными параметрами (OQU-фазы), и промежуточных состояний, характеризующихся как векторным, так и тензорным параметрами. Определены условия фазовых переходов и их типы.

DOI: 10.1134/S0044451018080163

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к изучению новых фазовых состояний магнетиков постоянно растет в связи с технологическим развитием [1–8]. В изотропных магнетиках с учетом высших спиновых инвариантов в обменном гамильтониане возможна реализация не только фаз с магнитным порядком, т. е. с отличным от нуля средним значением спина (дипольного параметра порядка $\langle \mathbf{S} \rangle$), но также и фаз с $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, в которых спонтанное нарушение вращательной симметрии обусловлено средними значениями спиновых мультиполей, например, квадрупольными средними $S^{ij} = \langle S^i S^j + S^j S^i \rangle / 2$ [9]. Такое состояние, названное спиновым нематиком (SN), было найдено для магнетиков со спином $S = 1$. Геометрическим образом SN-фазы является квадрупольный эллипсоид, представляющий симметричный тензор второго ранга S^{ij} (средние с более высокими степенями спинов тривиальны); в основном состоянии этот эллипсоид является эллипсоидом вращения и симметрия состояния на узле есть C_∞ . Для этой системы найдена также ортогональная нематическая (ON) фаза, для которой ориентации главной оси квадрупольного эллипсоида перпендикулярны для разных подрешеток [1, 2, 5].

Наряду с исследованием изотропных спиновых систем, представляет интерес исследование обмен-

но-анизотропных моделей. Одна из самых простых моделей, содержащая в гамильтониане тензорные взаимодействия, — это модель Блюма–Эмери–Гриффитса [10]. Эта модель была предложена для описания термодинамических свойств смеси HeIII и HeIV в окрестности критической точки. В работах [11–13] обобщена модель Блюма–Эмери–Гриффитса на негейзенберговские магнетики с $S = 1$. Было показано, что учет анизотропного обменного взаимодействия (типа модели Изинга или XY-модели) оказывает существенное влияние на формирование специфических фазовых состояний. В работах [14, 15] исследовалось влияние как межионной, так и одноионной анизотропий на свойства негейзенберговских магнетиков. Наиболее полно фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений магнетиков с межионной анизотропией были рассмотрены в работах [16, 17]. В этих работах было показано, что межионная анизотропия биквадратичного обменного взаимодействия снимает вырождение квадрупольных (нематических) фаз, реализуемых на состояниях $|0\rangle$ и $(|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$. В изотропном негейзенберговском магнетике фазовые состояния, реализуемые на этих состояниях, вырождены. Кроме того, межионная анизотропия приводит к реализации так называемой угловой нематической фазы, в которой главные оси квадрупольного эллипсоида ориентированы под некоторым углом к оси квантования [16, 17]. Необходимо отметить, что анизотропные негейзенберговские магнетики в строгом смысле не являются спиновыми нематиками. Так, большая константа анизотропии (сравнимая с обменным

* E-mail: yuriiifridman@gmail.com

взаимодействием) также приводит к квантовому сокращению спина. Однако для таких фаз симметрия квадрупольных средних иная, чем в изотропных негейзенберговских магнетиках. Именно поэтому анизотропные негейзенберговские магнетики в строгом смысле нельзя считать спиновыми немагнетиками, а фазы с $\langle S \rangle = 0$ в таких системах носят название квадрупольных (QU) фаз [9].

Однако все указанные выше модели относятся к одноподрешеточным магнетикам. Представляет интерес исследовать фазовые состояния и динамические свойства двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со сложной межюноной анизотропией. Очевидно, что такое разбиение на эквивалентные подрешетки возможно в случае отрицательного билинейного обменного интеграла.

2. МОДЕЛЬ

В качестве модели рассмотрим магнетик со спином магнитного иона единица, в котором учтена возможность разбиения на две подрешетки. Такой выбор величины спина позволяет учесть кроме билинейного (гейзенберговского) обменного взаимодействия также и биквадратичное обменное взаимодействие. Кроме того, предполагается, что эти взаимодействия существенно анизотропны. Таким образом, гамильтониан такой системы можно представить в виде

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \{ J_{nn'} (S_n^z S_{n'}^z + \Delta (S_n^x S_{n'}^x + S_n^y S_{n'}^y)) + K_{nn'} (O_{2n}^0 O_{2n'}^0 / 3 + \Delta_1 (O_{2n}^{zx} O_{2n'}^{zx} + O_{2n}^{yz} O_{2n'}^{yz}) + \Delta_2 (O_{2n}^2 O_{2n'}^2 + O_{2n}^{xy} O_{2n'}^{xy})) \}, \quad (1)$$

где $J_{nn'}$, $K_{nn'}$ — константы соответственно билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий; Δ , Δ_1 , Δ_2 — безразмерные параметры межюноной анизотропии; n , n' — индексы узлов подрешеток; O_j^i ($j \leq 2S$, $i \leq j$) — операторы Стивенса [18], связанные со спиновыми операторами следующим образом:

$$\begin{aligned} O_2^0 &= 3(S^z)^2 - S(S+1), \\ O_2^2 &= \frac{1}{2} [(S^+)^2 + (S^-)^2], \\ O_2^{xy} &= \frac{1}{2i} [(S^+)^2 - (S^-)^2], \\ O_2^{zx} &= \frac{1}{2} [S^z, (S^+ + S^-)]_+, \\ O_2^{yz} &= \frac{1}{2i} [S^z, (S^+ - S^-)]_+. \end{aligned} \quad (2)$$

Такой выбор представления гамильтониана (1) связан с тем, что полный набор операторов (2), совместно с операторами S^x , S^y , S^z , являются генераторами группы $SU(3)$. Кроме того, предполагается, что $J, K < 0$; $\Delta, \Delta_1, \Delta_2 > 0$.

Исследование будем проводить при низких температурах ($T = 0$) и, как отмечалось ранее, предполагается, что в системе возможно разбиение на две эквивалентные подрешетки (n , n' — индексы узлов подрешеток). Нас интересует реализация различных спиновых состояний системы в зависимости от соотношения материальных параметров системы. Так, в случае преобладающего билинейного обменного взаимодействия ($|J| > |K|$) очевидно, что состояние магнетика будет, в основном, определяться дипольными параметрами порядка подрешеток. В противоположном случае ($|K| > |J|$) определяющую роль в формировании фазовых состояний будут играть тензорные параметры порядка (квадратичные по операторам спина), поскольку при таком соотношении обменных интегралов намагниченности подрешеток равны нулю в силу реализации квантового сокращения спина [5, 9]. В изотропных многоподрешеточных негейзенберговских магнетиках при таких условиях реализуются ортогональные немагнитические состояния [1, 2, 5]. Представляет интерес возможность реализации аналогичных состояний в обменно-анизотропном негейзенберговском магнетике.

Исследование систем с точным учетом анизотропии необходимо начать с определения основной спиновой конфигурации на каждом узле [19]. Для перехода в собственную систему координат на каждом узле совершим унитарное преобразование вида

$$\begin{aligned} \tilde{H} &\rightarrow U H U^{-1}, \\ U &= \prod_k \exp(-i\theta_k S_k^y) \exp(-i\varphi_k S_k^z). \end{aligned} \quad (3)$$

Унитарное преобразование вида (3) соответствует линейному преобразованию спиновых операторов

$$S_k^\alpha = \sum_\beta u_k^{\alpha\beta} S_k^\beta, \quad O_{2k}^{\alpha\beta} = \sum_{\alpha', \beta'} u_k^{\alpha\alpha'} u_k^{\beta\beta'} O_{2k}^{\alpha'\beta'},$$

где $u_k^{\alpha\beta} = u_k^{\alpha\beta}(\theta_k, \varphi_k)$ — матрица поворотов, k — номера узлов подрешеток. Необходимо отметить, что преобразование (3) позволяет рассматривать двухподрешеточную систему как одноподрешеточную, так называемое сокращенное описание. Для перехода к двухподрешеточному описанию необходимо сделать обратные преобразования.

Дальнейшее рассмотрение будем проводить в приближении среднего поля. Выделяя в гамильтониане (1) средние, связанные с упорядочением магнитного момента, а также квадрупольные моменты $q_2^t = \langle O_2^t \rangle$, запишем одноузельный гамильтониан в виде

$$H_0(n) = -H_z S_n^z - H_x S_n^x - B_2^0 O_{2n}^0 - B_2^2 O_{2n}^2 - B_2^{zx} O_{2n}^{zx}, \quad (4)$$

где H_z, H_x — функции $J_0, \langle S \rangle, \Delta, \theta_n, \varphi_n$; коэффициенты B_2^0, B_2^2, B_2^{zx} пропорциональны K_0 и являются функциями параметров и углов $q_2^t, \Delta_1, \Delta_2, \theta_n, \varphi_n$; $J_0 = \sum_{n'} J_{nn'}$, $K_0 = \sum_{n'} K_{nn'}$ — нулевые фурье-компоненты обменных интегралов.

Для решения одноузельной задачи воспользуемся методом унитарного преобразования N -уровневой системы для операторов Хаббарда [20]. Операторы Хаббарда построим на базисе $|i\rangle$ собственных векторов оператора S^z : $X^{ij} \equiv |i\rangle\langle j|$. Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда имеет вид

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

Одноузельный гамильтониан (4) в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_i X^{ii} + \sum_{i \neq j} V_{ij} X^{ij}, \quad V_{ji} = (V_{ij})^*, \quad (5)$$

где ε_i — «затравочный» спектр исходных состояний $|i\rangle$; V_{ij} — недиагональные амплитуды. Диагонализуя гамильтониан (5) с помощью обобщенного u - v -преобразования [20, 21], определим базис собственных векторов гамильтониана (5):

$$|\psi_1\rangle = \cos \beta (\cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle) + \sin \beta |0\rangle, \\ |\psi_0\rangle = -\sin \beta (\cos \alpha |1\rangle + \sin \alpha |-1\rangle) + \cos \beta |0\rangle, \quad (6) \\ |\psi_{-1}\rangle = -\sin \alpha |1\rangle + \cos \alpha |-1\rangle.$$

Вид параметров порядка, входящих в одноузельный гамильтониан (4), определяется из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\alpha \cos^2 \beta, \\ \langle S^x \rangle = (\cos \alpha + \sin \alpha) \sin 2\beta / \sqrt{2}, \\ q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1) = \\ = \cos^2 \beta - 2\sin^2 \beta, \\ q_2^2 = \langle O_2^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle = \\ = \sin 2\alpha \cos^2 \beta, \\ q_2^{zx} = \langle O_2^{zx} \rangle = \langle S^z S^x + S^x S^z \rangle = \\ = (\cos \alpha - \sin \alpha) \sin 2\beta / \sqrt{2}. \quad (7)$$

3. АНАЛИЗ ПЛОТНОСТИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ И СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Для получения условий устойчивости фазовых состояний, реализующихся в системе, исследуем плотность свободной энергии. В случае низких температур ($T = 0$) энергия основного состояния совпадает с плотностью свободной энергии. Однако общий вид выражения является довольно громоздким, поэтому отдельно исследуем энергию в случае $\langle S \rangle \neq 0$, в котором реализуется дипольное (или, как будет показано ниже, квадрупольно-дипольное) упорядочение. и в случае $\langle S \rangle = 0$, отвечающем квадрупольному упорядочению.

В случае реализации антиферромагнитного упорядочения параметр унитарного преобразования $\beta = 0$, поскольку в собственной системе координат с осью квантования z среднее $\langle S^x \rangle = 0$. Анализ плотности свободной энергии

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

показывает, какие устойчивые фазовые состояния реализуются в системе. Угол θ — угол между вектором намагниченности и осью z первой подрешетки; во второй подрешетке этот угол составляет $(\pi - \theta)$; α — параметр унитарного преобразования. В случае изотропного обменного взаимодействия было показано [5], что антиферромагнитная фаза устойчива при $|J| > |K|$. В случае анизотропного обменного взаимодействия это условие будет скорректировано параметрами обменной анизотропии Δ, Δ_1 и Δ_2 .

Очевидно, что в случае $K = 0$ величина среднего спина не меняется — $\langle S \rangle = 1$ (параметр $\alpha = 0$). В зависимости от значения анизотропного параметра Δ изменяется направление вектора намагниченности и реализуются антиферромагнитно упорядоченные фазы: AFM_z с направлением вектора магнитного момента вдоль оси z , устойчивая при $\Delta < 1$, и плоскостная фаза с направлением вектора магнитного момента ортогональным оси z при $\Delta > 1$. При $K \neq 0$ в плоскостной фазе модуль магнитного момента $\langle S \rangle$ становится меньше единицы, что видно из выражения

$$\begin{aligned} \langle S \rangle &= \sqrt{1 - \sin^2 2\alpha_{\perp}}, \quad \sin^2 2\alpha_{\perp} = \\ &= K_0(1 - \Delta_2) / (4J_0\Delta + K_0(3 + \Delta_2)). \end{aligned} \quad (9)$$

Плоскостную антиферромагнитную фазу в данном случае определим как квадрупольно-ферромагнитную АКФМ_x: фаза характеризуется не только средним значением спина на узле, но и квадрупольными параметрами порядка. Анализ плотности сво-

бодной энергии (8) показывает, что при условии $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ реализуется промежуточная антиферромагнитная угловая фаза АКФМ_z с $\langle S \rangle < 1$, в которой векторы магнитных моментов в подрешетках антипараллельны друг другу и образуют угол θ с осью квантования z . Этот угол изменяется в зависимости от соотношения между константами обменного взаимодействия значение от 0 до $\pi/2$:

$$\begin{aligned} \sin 2\alpha_{\angle} &= \frac{K_0 \sin^2 \theta (1 - \Delta_2 + (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2) \cos^2 \theta)}{K_0(4\Delta_2 + 3(1 - \Delta_2) \sin^2 \theta + (4\Delta_1 - 3 - \Delta_2) \sin^2 \theta \cos^2 \theta) + 4J_0(\cos^2 \theta + \Delta \sin^2 \theta)}, \\ \cos 2\theta &= \frac{K_0(1 - \Delta_2)(1 + 3 \sin 2\alpha_{\angle}) - 4J_0(1 - \Delta)(1 + \sin 2\alpha_{\angle})}{K_0(4\Delta_1 - 3 - \Delta_2)(1 - \sin 2\alpha_{\angle})}. \end{aligned} \quad (10)$$

Для дальнейшего исследования фазовых состояний нам потребуются данные о динамических свойствах системы, т. е. спектры элементарных возбуждений. Спектры элементарных возбуждений определяются полюсами функции Грина [22]

$$G^{\lambda\lambda'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \hat{T} \tilde{X}_n^{\lambda}(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\lambda'}(\tau') \rangle, \quad (11)$$

где $\tilde{X}_n^{\lambda}(\tau) = \exp(\hat{H}\tau) X_n^{\lambda} \exp(-\hat{H}\tau)$ — оператор Хаббарда в представлении Гейзенберга, \hat{T} — оператор Вика, λ — корневые векторы, определяющиеся алгеброй операторов Хаббарда [20]. Вывод дисперсионного уравнения подробно изложен в работах [13, 23]. Дисперсионное уравнение, определяющее спектры магнонов, справедливо при произвольном соотношении материальных констант, т. е. в различных фазовых состояниях, и температурном интервале существования магнитного упорядочения. Его решения определяют спектры возбуждений в различных фазах.

Спектры магнонов в AFM_z-фазе имеют вид

$$\varepsilon_1^2(k) = 4(J_0 - K_k\Delta_2)(J_0 + K_k\Delta_2); \quad (12.1)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = (J_0 - K_0)^2 - (J_k\Delta - K_k\Delta_1)^2. \quad (12.2)$$

Спектры в АКФМ_x-фазе имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= 4(J_0\Delta - K_k\Delta_1) \{ (J_0 - J_k)\Delta + \\ &+ [J_k\Delta + K_k(3 + \Delta_2)/4] (1 - \sin^2 2\alpha_{\perp}) \}; \end{aligned} \quad (13.1)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = \Omega_1(\Omega_1 + \Omega_2), \quad (13.2)$$

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= (J_0 + J_k)\Delta(1 - \sin 2\alpha_{\perp}) + \\ &+ (K_0 + K_k)\Delta_2(1 + \sin 2\alpha_{\perp}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Omega_2 &= K_k(\Delta_1 + \Delta_2) - J_k(1 + \Delta) - \\ &- \sin 2\alpha_{\perp} [K_k(\Delta_1 - \Delta_2) + J_k(1 - \Delta)]. \end{aligned}$$

Вначале рассмотрим случай $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ (рис. 1а). Как следует из выражений (9) и (10), в АКФМ_x-фазе и угловой АКФМ_z-фазе $\langle S \rangle \neq 1$, однако фазовые переходы AFM_z-АКФМ_x и АКФМ_x-АКФМ_z являются чисто ориентационными фазовыми переходами второго рода. При приближении к линии фазового перехода АКФМ_z-AFM_z модуль магнитного момента стремится к значению насыщения $\langle S \rangle = 1$. На линии фазового перехода $J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_1)$ щель в спектре (12.2) обращается в нуль. На линии фазового перехода АКФМ_z-АКФМ_x

$$\begin{aligned} K_0(\Delta_1 + \Delta_2) - J_0(1 - \Delta) - \\ - \sin 2\alpha_{\perp} [K_0(\Delta_1 - \Delta_2) + J_0(1 + \Delta)] = 0 \end{aligned}$$

значения намагниченностей сравниваются, т. е.

$$\sin 2\alpha_{\perp} = \sin 2\alpha_{\angle} \quad \text{при} \quad \theta = \pi/2.$$

На этой же линии обращается в нуль щель в спектре (13.2). В длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ оба спектра (12.2) и (13.2) на линиях фазовых переходов в угловую фазу имеют линейный по \mathbf{k} закон дисперсии.

Теперь рассмотрим случай $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$ (рис. 1б). Угловая фаза становится неустойчивой. Фазовый переход из AFM_z-фазы происходит непосредственно в АКФМ_x-фазу и не является ориентационным, так как на линии фазового перехода AFM_z-АКФМ_x вместе с резким поворотом вектора намагниченности на угол $\pi/2$ скачком изменяется значение модуля вектора намагниченности с $\langle S \rangle = 1$ в AFM_z-фазе до $\langle S \rangle < 1$ в АКФМ_x-фазе, определяемого выражением (9). Линия фазового перехода определяется из равенства свободных энергий в фазах AFM_z и АКФМ_x:

$$4J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_2)(1 + \sin 2\alpha_{\perp}).$$

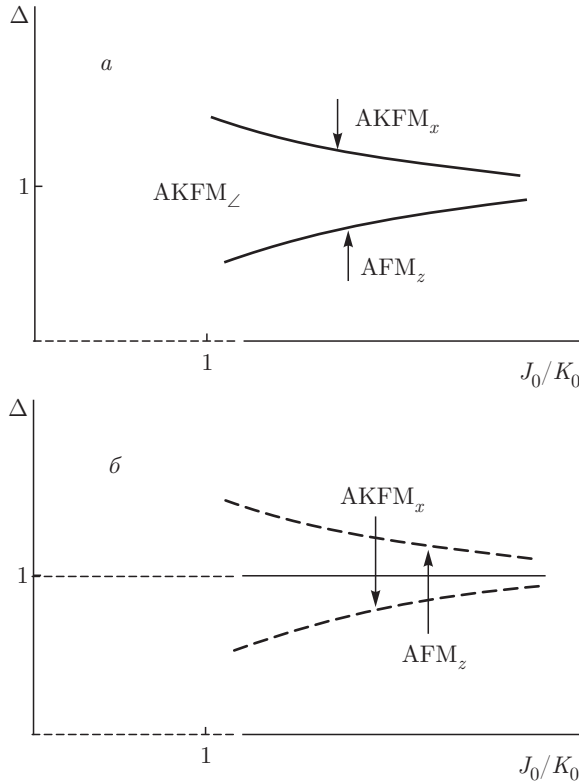


Рис. 1. а) Фазовая диаграмма AFM-фаз в случае $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$; б) фазовая диаграмма AFM-фаз в случае $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$

В окрестности линии фазового перехода AFM_z-AKFM_x размягчаются ветви возбуждений (12.2) и (13.2). Обращение щелей в спектрах в нуль определяет линии неустойчивости спектров:

$$J_0(1 - \Delta) = K_0(1 - \Delta_1), \quad K_0(\Delta_1 + \Delta_2) - J_0(1 - \Delta) - \sin 2\alpha_1 [K_0(\Delta_1 - \Delta_2) + J_0(1 + \Delta)] = 0.$$

Линии неустойчивости определяют границы области сосуществования рассматриваемых здесь фаз. Такое поведение спектров характерно для фазовых переходов первого рода.

4. КВАДРУПОЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ

Исследуем статические и динамические свойства квадрупольного упорядочения в двухподрешеточном магнетике. Пусть $|K| > |J|$ и соотношение параметров анизотропии $\Delta, \Delta_1, \Delta_2$ такое, что антиферромагнитное упорядочение становится энергетически невыгодным. Одноподрешеточное квадрупольное (нематическое) состояние неустойчиво, так как при $K < 0$ основное состояние вырождено, что позволяет сделать вывод о том, что система разбита на

две подрешетки с взаимно ортогональными осями квантования и $\langle S^z \rangle = 0$ в обеих подрешетках. Анизотропия обменного взаимодействия приводит к появлению выделенных направлений ориентации тензора квадрупольного момента подрешеток. Вместо изотропного ортогонального нематического состояния [5] реализуются ортогональные квадрупольные фазы.

Состояния каждой из подрешеток характеризуются параметрами порядка, являющимися компонентами симметричного тензора второго ранга. Из симметрии биквадратичной части гамильтониана (1) следует, что главные оси тензора квадрупольных эллипсоидов подрешеток могут быть ориентированы строго в плоскостях xy, yz или xz , причем плоскости yz и xz энергетически эквивалентны. В произвольном фазовом состоянии параметры порядка системы определяются выражениями (7). Поскольку нас интересуют квадрупольные состояния, в которых средние значения магнитного момента на узле равны нулю, параметр α может принимать значения $\pm\pi/4$. Квадрупольные параметры порядка тогда имеют вид

$$q_2^0 = \cos^2 \beta - 2 \sin^2 \beta, \quad q_2^2 = -\cos^2 \beta, \quad q_2^{zx} = \sin 2\beta.$$

Если параметр $\alpha = -\pi/4$, то плотность свободной энергии имеет вид

$$F = \frac{K_0}{3} + \frac{K_0}{8}(4\Delta_1 - 3 - \Delta_2) \sin^2 2\beta. \quad (14)$$

Учитывая, что намагниченности подрешеток равны нулю ($\langle S_{n_1}^z \rangle = \langle S_{n_2}^z \rangle = 0$), и выполняя преобразование во второй подрешетке

$$q_{2n_2}^i = \langle U(-\theta) O_2^i U^+(-\theta) \rangle, \quad U(\theta) = e^{-i\theta S^y} (\theta = \pi/2), \quad (15)$$

обратное преобразованию (3), можно получить параметры порядка подрешеток при различных соотношениях констант межюнной анизотропии и параметра β . Из соотношения (14) следует, что в зависимости от соотношения параметров межюнной анизотропии возможны реализации ортогональных квадрупольных состояний (ОКУ).

Так, при $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 < 0$ и $\beta = 0$, $\langle S_i^z \rangle = \langle S_i^x \rangle = 0$, $i = 1, 2$, а квадрупольные параметры порядка первой и второй подрешеток соответственно равны

$$q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = -1, \quad q_2^{zx} = 0; \\ q_2^0 = -2, \quad q_2^2 = 0, \quad q_2^{zx} = 0.$$

Волновые функции основного состояния подрешеток ортогональны, т.е. $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$, и имеют вид

$|\psi_1\rangle = (|1\rangle - |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle$. Обозначим такое фазовое состояние OQU_1 . В этом состоянии квадрупольные средние в каждой подрешетке определяются выражениями

$$\begin{aligned} \langle(S_1^x)^2\rangle &= 0, & \langle(S_1^y)^2\rangle &= \langle(S_1^z)^2\rangle = 1, \\ \langle(S_2^x)^2\rangle &= \langle(S_2^y)^2\rangle = 1, & \langle(S_2^z)^2\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Следовательно, геометрически эта фаза представляет собой одноосные эллипсоиды, главные оси которых лежат в плоскостях zy и xy .

При $\beta = \pi/4$, $4\Delta_1 - 3 - \Delta_2 > 0$ с учетом обратного преобразования (15) получим волновые функции основного состояния подрешеток:

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

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

а параметры порядка подрешеток равны соответственно

$$\begin{aligned} q_{2(1)}^0 &= -1/2, & q_{2(1)}^2 &= -1/2, & q_{2(1)}^{zx} &= 1; \\ q_{2(2)}^0 &= -1/2, & q_{2(2)}^2 &= -1/2, & q_{2(2)}^{zx} &= -1. \end{aligned}$$

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

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

Чтобы определить геометрический образ данного состояния в спиновом пространстве, исследуем поверхность, определяемую уравнением $\mathbf{S}(\hat{q}\mathbf{S}) = 1$, где вектор $\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$, а тензор

$$\hat{q} = q^{ij} = \langle Q^{ij} \rangle = \frac{1}{2} \langle S^i S^j + S^j S^i \rangle \quad (i, j = x, y, z).$$

Для первой подрешетки уравнение поверхности имеет вид

$$\frac{1}{2} \langle (S_1^x)^2 \rangle + \langle (S_1^y)^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle (S_1^z)^2 \rangle + \langle (S_1^x S_1^z + S_1^z S_1^x) \rangle = 1,$$

а для второй —

$$\frac{1}{2} \langle (S_2^x)^2 \rangle + \langle (S_2^y)^2 \rangle + \frac{1}{2} \langle (S_2^z)^2 \rangle - \langle (S_2^x S_2^z + S_2^z S_2^x) \rangle = 1.$$

Диагонализуя эти уравнения поворотом вокруг оси y на угол $\pi/4$ для первой подрешетки и на угол $-\pi/4$

для второй подрешетки, получим уравнения поверхностей соответственно для первой и второй подрешеток:

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \langle (S_1^x)^2 \rangle + \langle (S_1^y)^2 \rangle - \frac{1}{2} \langle (S_1^z)^2 \rangle &= 1, \\ -\frac{1}{2} \langle (S_2^x)^2 \rangle + \langle (S_2^y)^2 \rangle + \frac{3}{2} \langle (S_2^z)^2 \rangle &= 1. \end{aligned} \quad (16)$$

Как видно из формулы (16), геометрическим образом данного состояния являются эллипсоиды, главные оси которых лежат в плоскости xz , причем в первой подрешетке главная ось эллипсоида образует угол $\pi/4$ с осью x , а во второй подрешетке главная ось образует угол $\pi/4$ с осью z . Такое состояние мы обозначим OQU_\angle и назовем угловой ортогонально квадрупольной фазой, поскольку главные оси квадрупольных эллипсоидов подрешеток образуют угол с осью квантования.

Если параметры унитарных преобразований равны $\alpha = \pi/4$, $\beta = 0$, то свободная энергия системы имеет вид

$$F = -\frac{K_0}{6}(1 - 3\Delta_2). \quad (17)$$

Совершая во второй подрешетке унитарный поворот, обратный преобразованию (3),

$$\begin{aligned} q_{2n_2}^i &= \langle U(-\varphi) O_2^i U^+(\varphi) \rangle, \\ U(\varphi) &= e^{-i\varphi S^z}, \quad \varphi = \pi/2, \end{aligned}$$

получим волновые функции основного состояния подрешеток

$$|\psi_1\rangle = (|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$$

и

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

Следовательно, параметры порядка и квадрупольные средние для каждой из подрешеток имеют вид

$$\begin{aligned} q_2^0 &= 1, & q_2^2 &= 1, & q_2^{zx} &= 0, \\ \langle (S_1^x)^2 \rangle &= 1, & \langle (S_1^y)^2 \rangle &= 0, & \langle (S_1^z)^2 \rangle &= 1; \\ q_2^0 &= 1, & q_2^2 &= -1, & q_2^{zx} &= 0, \\ \langle (S_2^x)^2 \rangle &= 0, & \langle (S_2^y)^2 \rangle &= 1, & \langle (S_2^z)^2 \rangle &= 1. \end{aligned}$$

Как следует из последних выражений, геометрическими образами состояний являются эллипсоиды, лежащие в плоскостях zx и zy соответственно для первой и второй подрешеток. Такое состояние обозначим как OQU_2 .

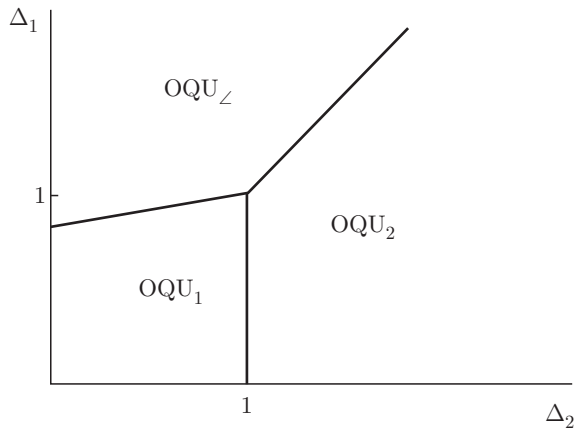


Рис. 2. Фазовая диаграмма системы в случае реализации OQU-фаз при $|K| > |J|$

Из равенства свободных энергий в рассмотренных состояниях можно определить линии фазового перехода между OQU-фазами —

$$\text{OQU}_1 - \text{OQU}_2 : \Delta_2 = 1;$$

$$\text{OQU}_1 - \text{OQU}_\zeta : 4\Delta_1 = \Delta_2 + 3;$$

$$\text{OQU}_2 - \text{OQU}_\zeta : \Delta_1 = (5\Delta_2 - 1)/4$$

— и построить фазовую диаграмму, которая схематично изображена на рис. 2. Для уточнения фазовой диаграммы и определения типов фазовых переходов исследуем спектры элементарных возбуждений в OQU-фазах.

Спектры возбуждения в OQU₁-фазе имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) = [K_0(3 + \Delta_2)/2 + 2J_k\Delta] \times \\ \times [K_0(3 + \Delta_2)/2 - 2K_k\Delta_1], \end{aligned} \quad (18)$$

а спектры в OQU₂-фазе —

$$\varepsilon_1^2(k) = 4(K_0\Delta_2 + J_k)(K_0 - K_k)\Delta_2. \quad (19)$$

Высокочастотные ветви возбуждений OQU₁- и OQU₂-фаз не приводятся, так как являются бездисперсионными.

Спектры возбуждения в OQU_ζ-фазе можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) = [K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4 + J_k(1 - \Delta)] \times \\ \times [K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4 + J_k(\Delta_2 - \Delta_1)], \end{aligned} \quad (20.1)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = (K_0\Delta_1 + J_k\Delta) [4K_0\Delta_1 - K_k(3 + \Delta_2)]. \quad (20.2)$$

Фазовые переходы между OQU-фазами обусловлены изменением параметров межионной анизотропии Δ_1 и Δ_2 . Эти переходы можно интерпретировать как переориентационные, причем понятие «переориентации» связано с поворотом главных осей квадрупольных эллипсоидов.

Фазовые переходы между фазами OQU₁–OQU_ζ являются ориентационными фазовыми переходами второго рода. На линии фазового перехода $4\Delta_1 = \Delta_2 + 3$ в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$ щели в ветвях (18) и (20.2) обращаются в нуль; спектры становятся линейными по волновому вектору \mathbf{k} .

Линия $\Delta_2 = 1$ является линией фазового перехода между фазами OQU₁ и OQU₂. Этот переход является ориентационным фазовым переходом первого рода, поскольку параметры порядка меняются скачком, а спектры не размягчаются на линии фазового перехода. Как следует из выражения (18), спектр возбуждений OQU₁-фазы теряет устойчивость на линии $\Delta_2 = 4(J_0/K_0)\Delta - 3$ при $k \rightarrow \pi$, а щель в спектре (19) OQU₂-фазы обращается в нуль на линии потери устойчивости $\Delta_2 = J_0/K_0$ также при $k \rightarrow \pi$.

Фазовый переход между фазами OQU₂ и OQU_ζ является ориентационным фазовым переходом первого рода. На линии фазового перехода $4\Delta_1 = 5\Delta_2 - 1$ щели в спектрах магнонов не обращаются в нуль. Как следует из (19), спектр магнонов OQU₂-фазы теряет устойчивость на линии $\Delta_2 = J_0/K_0$ при $k \rightarrow \pi$, а линия потери устойчивости в OQU_ζ-фазе определяется обращением в нуль энергетической щели спектра (20.2) и имеет вид $\Delta_1 = (J_0/K_0)\Delta$ при $k \rightarrow \pi$.

5. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПО МОДУЛЮ

Выше мы рассмотрели фазовые переходы между дипольными и квадрупольно-дипольными фазами в случае преобладающего билинейного обменного взаимодействия ($J_0/K_0 \gg 1$). Представляет интерес рассмотреть противоположную ситуацию, когда преобладающим является биквадратичное обменное взаимодействие ($J_0/K_0 \leq 1$). Очевидно, что реализация того или иного состояния определяется соотношением параметров системы, но поскольку мы рассматриваем случай $J_0/K_0 \leq 1$, основное внимание уделим соотношениям между параметрами анизотропии.

Рассмотрим вначале случай $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ (рис. 3). При таком соотношении параметров анизотропии и в зависимости от соотношений Δ и J_0/K_0 в системе реализуются фазы AFM_z, AKFM_x

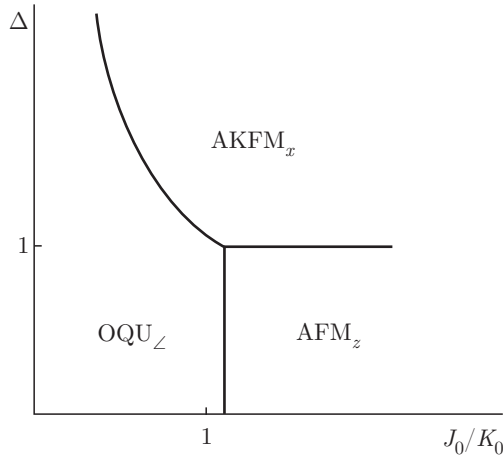


Рис. 3. Фазовая диаграмма рассматриваемой системы при $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$ и $J_0/K_0 \leq 1$

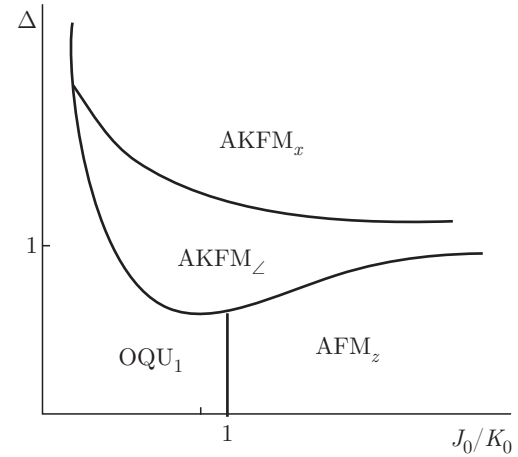


Рис. 4. Фазовая диаграмма двухподрешеточного негейзенберговского магнетика при $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$, $\Delta_2 < 1$

и OQU_{\perp} . Поведение в окрестности дипольных фаз, т. е. AFM-фаз, мы рассмотрели выше. Теперь рассмотрим фазовые переходы между ортогональными квадрупольными фазами и дипольными.

Линия фазового перехода между фазами AFM_z и OQU_{\perp} определяется из равенства свободных энергий и имеет вид

$$J_0 = K_0(4\Delta_1 + 1 - \Delta_2)/4.$$

Щели в спектрах (12.1), (12.2) и (20.1), (20.2) соответствующих фаз обращаются в нуль на линиях потери устойчивости спектра при $k \rightarrow \pi$ (20.1)

$$2J_0(1 - \Delta) = K_0(4\Delta_1 - 1 - 3\Delta_2)/4$$

в области $J_0/K_0 < 1$ и потери устойчивости спектра (12.1)

$$J_0 = K_0\Delta_2$$

в области $J_0/K_0 > 1$. Линии потери устойчивости определяют область совместного сосуществования фаз AFM_z и OQU_{\perp} . Таким образом, фазовый переход AFM_z - OQU_{\perp} является фазовым переходом первого рода, в результате которого скачком меняется модуль намагниченности с единицы до нуля.

Линия фазового перехода $AKFM_x$ - OQU_{\perp} определяется выражением $J_0\Delta = K_0\Delta_1$. На этой же линии обращаются в нуль щели спектров (13.2) и (20.2) при $k \rightarrow \pi$. Данный фазовый переход является фазовым переходом второго рода: при приближении к линии фазового перехода из квадрупольно-ферромагнитной фазы $AKFM_x$ намагниченность подрешеток непрерывно уменьшается и на линии $J_0\Delta = K_0\Delta_1$ обращается в нуль, $\langle S \rangle = 0$.

Теперь рассмотрим следующую ситуацию: $\Delta_2 < 1$ и $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ (рис. 4). В этом случае в системе в зависимости от соотношений Δ и J_0/K_0 реализуются фазы AFM_z , $AKFM_{\perp}$, $AKFM_x$ и OQU_1 .

Линия фазового перехода $J_0 = K_0$ между фазами AFM_z и OQU_1 определяется равенством свободных энергий. Щели в спектрах (12.1), (12.2) и (18) соответствующих фаз обращаются в нуль на линиях потери устойчивости спектра (18)

$$J_0\Delta = K_0(3 + \Delta_2)/4$$

при $k \rightarrow \pi$ в области $J_0/K_0 < 1$ и потери устойчивости спектра (12.1)

$$J_0 = K_0\Delta_2$$

в области $J_0/K_0 > 1$. Эти линии определяют область сосуществования AFM_z - и OQU_1 -фаз. Переход между фазами сопровождается скачком намагниченности и является фазовым переходом первого рода.

На линии $J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)}/2$ фазового перехода $AKFM_x$ - OQU_1 обращается в нуль спектр (13.1) при $k \rightarrow \pi$. Однако спектр OQU_1 -фазы (18) становится неустойчивым на линии

$$J_0\Delta = K_0(3 + \Delta_2)/4$$

при $k \rightarrow \pi$, совпадая с линией фазового перехода

$$J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)}/2$$

при $\Delta_2 \rightarrow 1$.

Линия фазового перехода $AKFM_{\perp}$ - OQU_1 определяется из равенства для свободной энергии (8) со значениями α и θ , определяемыми выражениями (10), (17) при $\beta = 0$. Выражение это громоздко и

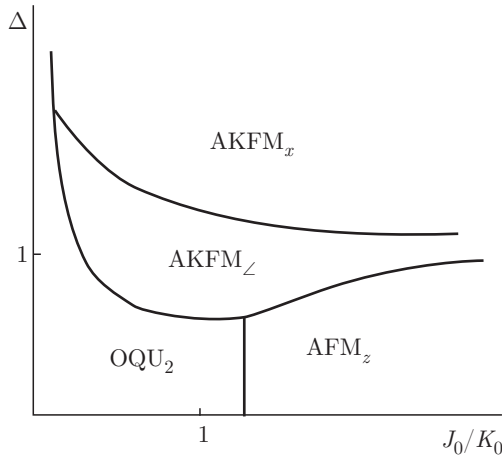


Рис. 5. Фазовая диаграмма двухподрешеточного негейзенберговского магнетика при $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$, $\Delta_2 > 1$

приводиться не будет. Кроме того, на линиях $\Delta = 1$ и $J_0/K_0 = 1$ симметрия системы повышается и в окрестности этих линий возникают разрывы на линии фазового перехода $AKFM_{\angle}-OQU_1$. Окрестность точки пересечения линий $\Delta = 1$ и $J_0/K_0 = 1$ требует более подробного анализа, выходящего за рамки нашей задачи. При этом, вполне достоверно можем говорить, что на линии $AKFM_{\angle}-OQU_1$ скачком меняются все параметры порядка.

Наконец, рассмотрим еще один случай $\Delta_2 > 1$ и $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ (рис. 5). При таком соотношении параметров межионной анизотропии в системе в зависимости от Δ и J_0/K_0 реализуются фазы AFM_z , $AKFM_{\angle}$, $AKFM_x$ и OQU_2 .

Линия фазового перехода AFM_z-OQU_2 определяется равенством свободных энергий и имеет вид $J_0 = K_0\Delta_2$. Щели в спектрах (12.1) и (19) соответствующих фаз обращаются в нуль на линии фазового перехода при $k \rightarrow \pi$, параметры порядка изменяются скачком. Таким образом, фазовый переход AFM_z-OQU_2 является вырожденным фазовым переходом первого рода.

На линии

$$J_0\Delta = K_0 \left[\Delta_2 - 1 + \sqrt{2\Delta_2(1 + \Delta_2)} \right] / 2$$

фазового перехода $AKFM_x-OQU_2$ щели в спектрах (13.1), (13.2) и (19) не обращаются в нуль. Спектр OQU_2 -фазы (19) становится неустойчивым на линии

$$J_0 = K_0\Delta_2$$

при $k \rightarrow \pi$, а спектр (13.1) $AKFM_x$ -фазы неустойчив на линии

$$J_0\Delta = K_0\sqrt{(1 + \Delta_2)/2}.$$

Рассуждения касательно перехода $AKFM_{\angle}-OQU_2$ аналогичны рассуждениям относительно перехода $AKFM_{\angle}-OQU_1$.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В результате исследования модели обменно-анизотропного двухподрешеточного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 1$ определены все фазовые состояния, реализующиеся при различных соотношениях констант обменного взаимодействия и параметров анизотропии. Показано, что учет межионной анизотропии биквадратичного обменного взаимодействия приводит к реализации нескольких ортогонально-квадрупольных фаз, для которых намагниченность в каждой из подрешеток (на один узел) равна нулю, а основные состояния подрешеток ортогональны. Геометрическими образами этих состояний в спиновом пространстве являются квадрупольные эллипсоиды, а главные оси эллипсоидов, принадлежащие различным подрешеткам, ортогональны. Одной из основных особенностей рассматриваемой нами модели является реализация так называемого углового ортогонально-квадрупольного состояния (OQU_{\angle}), имеющего специфический геометрический образ, реализация которого невозможна в изотропном негейзенберговском магнетике [5]. Еще две ортогонально квадрупольные фазы (OQU_1 и OQU_2) в случае изотропной системы являются вырожденными [5, 9]. В рассматриваемом в данной работе случае вырождение снимается влиянием межионной анизотропии Δ_1 и Δ_2 .

Проведенный в работе анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений в различных фазовых состояниях позволил не только построить фазовую диаграмму системы (вернее, ее сечения в различных переменных), но и определить типы фазовых переходов. Так, показано, что понятие ориентационного фазового перехода справедливо для двухподрешеточных систем с дипольными и тензорными компонентами параметра порядка. В области реализации антиферромагнитных фаз $AKFM_x$ и угловой $AKFM_{\angle}$ исследуемой модели абсолютное значение магнитного момента подрешеток зависит от параметров анизотропии. Анализ ориентационных переходов с $\langle S \rangle \neq 0$ позволил определить особенности поведения системы с учетом квантового сокращения спина. Наиболее ярко этот эффект проявился в случае неустойчивости угловой антиферромагнитной фазы $AKFM_{\angle}$: на линии

фазового перехода скачком меняется модуль намагниченности, а щели элементарных возбуждений антиферромагнитных фаз AFM_z и $AKFM_x$ обращаются в нуль на линиях потери устойчивости, образуя область сосуществования.

Анализ динамических и статических свойств системы в случае реализации только тензорных фаз показал, что фазовые переходы по тензорному параметру порядка по характеру близки к ориентационным фазовым переходам. На линиях фазового перехода и на линиях неустойчивости фаз спектры имеют линейный закон дисперсии по волновому вектору.

Отдельно рассмотрены переходы $AFM-OQU$ с изменением модуля намагниченности. Переходы могут быть второго рода с непрерывным изменением параметров порядка в окрестности фазового перехода, которые сопровождаются размягчением спектров на линии фазового перехода, например, переход $AKFM_x-OQU_{\perp}$ при $4\Delta_1 > 3 + \Delta_2$. Также возможен фазовый переход первого рода — параметры порядка скачком меняются на линии фазового перехода, а щели в спектрах обращаются в нуль на линиях неустойчивости фаз, например, переход AFM_z-OQU_1 в случае $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ и $\Delta_2 < 1$. Также имеет место вырожденный фазовый переход первого рода AFM_z-OQU_2 при $4\Delta_1 < 3 + \Delta_2$ и $\Delta_2 > 1$, когда на линии фазового перехода параметры порядка меняются скачком, при этом щели в спектрах обращаются в нуль.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект №16-02-00069а), а также РФФИ и Совета Министров Республики Крым (проект №17-42-92007) и при поддержке федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Papanikolaou, Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).
2. A. V. Chubukov, J. Phys. Condens. Matter **2**, 1593 (1990).
3. M. Arikawa and H. Tsunetsugu, J. Magn. Magn. Mat. **310**, 1308 (2007).
4. Tarun Grover and T. Senthil, Phys. Rev. Lett. **98**, 247202 (2007).
5. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, J. Magn. Magn. Mat. **325**, 125 (2013).
6. J. Oitmaa and C. J. Hamer, Phys. Rev. B **87**, 224431 (2013).
7. В. М. Матвеев, ЖЭТФ **65**, 1626 (1973).
8. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Наука, Москва (1988).
9. Б. А. Иванов, Р. С. Химин, ЖЭТФ **131**, 343 (2007).
10. M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **10**, 1071 (1971).
11. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, J. Magn. Magn. Mat. **320**, 435 (2008).
12. Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, Ф. Н. Клевец, ФНТ **32**, 289 (2006).
13. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, Europhys. J. B **81**, 185 (2011).
14. P. A. Sayko and I. P. Shapovalov, J. Magn. Magn. Mat. **392**, 134 (2015).
15. Yu. A. Fridman, D. V. Spirin, and Ph. N. Klevets, Phys. Stat. Sol. (b) **232**, 264 (2002).
16. О. А. Космачев, А. В. Кривцова, Ю. А. Фридман, ЖЭТФ **149**, 367 (2016).
17. Г. А. Гореликов, О. А. Космачев, А. В. Кривцова, Ю. А. Фридман, ФТТ **59**, 491 (2017).
18. K. Stevens, Proc. Phys. Soc. A **65**, 209 (1952).
19. В. М. Локтев, В. С. Островский, ФНТ **20**, 983 (1994).
20. В. В. Вальков, ТМФ **76**, 143 (1988).
21. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **88**, 550 (1985).
22. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
23. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).