

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НЕМАТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ В МАГНЕТИКЕ С $S = 2$

О. А. Космачев, Ю. А. Фридман*

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

Поступила в редакцию 13 сентября 2024 г.,
после переработки 14 ноября 2024 г.
Принята к публикации 20 ноября 2024 г.

В приближении среднего поля при низких температурах исследованы фазовые состояния и спектры элементарных возбуждений изотропного магнетика с $S = 2$ с учетом всех допустимых спиновых инвариантов. Рассматриваемая система предполагает возможность разбиения на две подрешетки. Определены новые фазовые состояния нематического типа. Построена полная фазовая диаграмма исследуемой системы с учетом всех возможных соотношений обменных интегралов, определены типы фазовых переходов.

DOI: 10.31857/S0044451025030113

1. ВВЕДЕНИЕ

Жидкие кристаллы сочетают в себе, казалось бы, взаимоисключающие свойства, т.е. как свойства жидкости, так и твердого тела. Почти столетие такие состояния считались экзотическими, прежде чем они стали повсеместными в технике [1–3]. Однако в физике твердого тела существуют квантовые аналоги таких состояний, например, такие как нематические состояния в сильно коррелированных магнитных материалах [4–7], спиновые нематики во фрустрированных магнетиках [8–18] и в ультрахолодных атомарных газах [19].

Упорядочение в спиновых системах обычно ассоциируется со стандартным магнитным порядком, для которого средние значения спинов $\langle S_n \rangle$ на узлах отличны от нуля и образуют различные магнитные структуры (ферромагнетики, антиферромагнетики и др.), см. [20, 21]. Основным свойством магнитоупорядоченных систем является нарушение симметрии относительно отражения времени, $\langle S_n \rangle \rightarrow -\langle S_n \rangle$ при $t \rightarrow -t$. Такие симметричные свойства основываются на модели Гейзенберга магнитоупорядоченных систем. Для магнетиков со спином магнитного иона $S \geq 1$ уже достаточно давно была указана возможность существования спинового нематика, для которого средние значения спинов на узлах

$\langle S_n \rangle$ равны нулю, но спонтанное нарушение симметрии спиновой системы связано с анизотропией некоторых высших однопетлевых одноузельных средних проекций спина [4], а параметры порядка спинового нематика — средние значения ненулевых компонент бесследового квадрупольного тензора второго ранга

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}S(S+1),$$

где S_α ($\alpha = x, y, z$) — оператор проекции спина S [4, 6–9, 21–33].

Наиболее изучены системы со спином магнитного иона $S = 1$ [4, 15, 31–38]. Магнитные состояния для спинов $S > 1$ изучены гораздо слабее, но для них получены эффекты, которые не наблюдаются в модели со спином $S = 1$ [38–42]. Интерес к изучению спиновых систем с $S > 1$ в значительной мере связан с описанием бозе-эйнштейновского конденсата холодных атомов в оптических ловушках [43–49]. Дополнительный интерес к таким состояниям связан с изучением свойств ультрахолодных ферми-газов, примером которых являются газы ^{132}Cs , ^9Be , ^{135}Ba со спином $S = 3/2$ в оптических решетках, в которых на одну ячейку приходится один атом [46–49]. Для таких систем характерно сильное негейзенберговское взаимодействие магнитных ионов, необходимое для существования нематических состояний. Для магнетика со спином $S = 3/2$ существуют нематические состояния с нарушением инвариантности относительно отражения времени, которые определяются нетривиальным тройным средним по ком-

* E-mail: yurifridman@gmail.com

понентам спина [38–42]. Вследствие этого для спина $S = 3/2$ возможно существование антинематической фазы [38–42].

Теоретически и экспериментально исследуются конденсаты, полученные на ультрахолодных атомах щелочных металлов со спином $S = 1$ и $S = 2$; также был получен конденсат на атомах Sr со спином $S = 3$. Структура параметра порядка для конденсата со спином $S = 2$ более сложная, чем для $S = 1$, для него возможна реализация большего числа типов фазового упорядочения (вместо двух как для случаев $S = 1$ и $S = 3/2$) [43, 44, 50].

В работах [43–45] исследован эффективный гамильтониан бозе-конденсата нейтральных атомов с $S = 2$, соответствующий одноподрешеточному изотропному магнетик со спином $S = 2$ и учетом всех допустимых спиновых инвариантов. Однако при отрицательных значениях констант обменного взаимодействия возможна реализация двухподрешеточных структур: антиферромагнитная и ортогонально-нематическая фазы для $S = 1$ [33] и антиферромагнитная и антинематическая фазы для $S = 3/2$ [39–42, 51, 52]. Естественно, в магнетике с $S = 2$ кроме антиферромагнитной фазы возможно существование большого разнообразия двухподрешеточных нематических фаз различной симметрии. Такие двухподрешеточные состояния спинового нематика с $S = 2$ частично были исследованы в работе [50]. Но в этой работе были исследованы лишь состояния и динамические свойства системы с положительной константой обменного взаимодействия при спиновом инварианте четвертой степени,

$$\sum_{n,n'} F_{nn'} (S_n S_{n'})^4, \quad F > 0.$$

Изменение знака этой константы обменного взаимодействия может привести к возникновению новых спиновых конфигураций и специфике динамических свойств, как это происходит в спиновых нематиках с $S = 1$ и $S = 3/2$ (см. [33, 39, 41]).

Целью данной работы является исследование фазовых состояний и динамических свойств изотропного магнетика со спином магнитного иона $S = 2$ и учет всех высших спиновых инвариантов, а также построение фазовых диаграмм исследуемой системы при различных соотношениях (и различных знаках) констант обменных взаимодействий.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим изотропный негейзенберговский магнетик со спином магнитного иона $S = 2$ с

учетом только парного изотропного обменного взаимодействия спинов. Наиболее общий спиновый гамильтониан, описывающий такой магнетик, имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{(n \neq n')} \left\{ J_{nn'} (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'}) + K_{nn'} (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^2 + D_{nn'} (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^3 + F_{nn'} (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^4 \right\}. \quad (1)$$

Здесь суммирование проводится по всем парам ближайших соседей на квадратной решетке, при этом допускается возможность разбиения системы на две эквивалентные подрешетки с векторами трансляций \mathbf{n} и \mathbf{n}' ; J, K, D, F — обменные интегралы, соответствующие различным спиновым инвариантам. В дальнейшем мы рассмотрим все возможные соотношения обменных интегралов и комбинации их знаков. Рассмотрим свойства системы, описываемой гамильтонианом (1), в случае низких температур ($T \rightarrow 0$). В этом случае наиболее ярко проявляются квантовые свойства системы.

Модель, описываемая гамильтонианом (1), аналогична модели конденсата бозе-газа атомов со спином $S = 2$ и контактным взаимодействием [43, 44] и использовала описание системы с помощью $2S$ точек на единичной сфере. В рамках этой модели были подробно исследованы коллинеарные фазовые состояния, хорошо согласующиеся с экспериментальными результатами [46–49]. Но поскольку мы допускаем возможность разбиения системы на эквивалентные подрешетки, нас в большей степени интересуют эти состояния, хотя мы кратко остановимся и на рассмотрении коллинеарных фаз.

Вектор состояния на каждом узле \mathbf{n} можно записать в виде суперпозиции пяти векторов

$$|m\rangle - |\psi\rangle = \sum C_m |m\rangle;$$

величины C_m нормированы на единицу, т. е.

$$\sum_m |C_m|^2 = 1.$$

В случае низких температур и приближении молекулярного поля энергия системы совпадает со средним значением гамильтониана (1) по вектору состояния, $W[C_{m,n}] = \langle H \rangle$, и фактически определяется энергией магнитного иона в основном состоянии с учетом обменного поля со стороны соседних спинов.

В самом общем случае энергия рассматриваемой системы $W[C_m]$ зависит от восьми параметров, и, предполагая, что векторы состояния подрешеток

вещественны, можем представить пробные формы векторов состояний подрешеток в следующем виде:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos \mu [\cos \theta (\cos \alpha |2\rangle + \sin \alpha | - 1\rangle) + \\ &+ \sin \theta (\cos \beta |1\rangle + \sin \beta | - 2\rangle)] + \sin \mu |0\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \cos \eta [\sin \varphi (\sin \delta (|2\rangle - \cos \delta | - 1\rangle) + \\ &+ \cos \varphi (\cos \gamma | - 2\rangle - \sin \gamma |1\rangle)] + \sin \eta |0\rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Используя представление (2) для векторов состояний подрешеток при $T = 0$, можно получить выражение плотности свободной энергии как функцию восьми параметров: $\alpha, \beta, \delta, \varphi, \gamma, \mu, \eta, \theta$. В связи с громоздкостью это выражение мы приводить не будем, однако численная минимизация выражения для свободной энергии по соответствующим параметрам, т.е. при различных соотношениях обменных интегралов (и их знаков), позволит определить все — как коллинеарные, так и двухподрешеточные устойчивые фазовые состояния системы.

Однако задачу об определении фазовых состояний спинового нематика с $S = 2$ можно упростить для некоторых частных случаев, если учесть следующее обстоятельство. Выбирая в качестве оси квантования ось z , параллельную направлению среднего значения магнитного момента $|\langle \mathbf{S} \rangle| \mathbf{e}_z = \langle S_z \rangle \mathbf{e}_z$, и, учитывая условие $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$, можно уменьшить число независимых параметров и ограничиться только суперпозицией состояний $|\mathbf{m}\rangle$ со значениями m , различающимися не менее, чем на 2. В этом случае $\langle S_z S_{x,y} \rangle = 0$ и выбором осей $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ тензор $S_{ij} = \langle S_i S_j + S_j S_i \rangle / 2$ можно сделать диагональным. Следовательно, с учетом этих условий можно ограничиться следующими формами пробного вектора состояний на узле:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \cos \alpha |2\rangle + \sin \alpha | - 1\rangle, \\ |\phi\rangle &= \cos \mu (\cos \theta |2\rangle + \sin \theta | - 2\rangle) + \sin \mu |0\rangle, \\ |\chi\rangle &= \cos \alpha | - 2\rangle - \sin \alpha |1\rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

Заметим, что для состояний с одной подрешеткой первый и третий векторы состояния полностью эквивалентны. Однако они могут реализоваться для состояний с двумя подрешетками, которые могут возникнуть при отрицательных значениях констант обменного взаимодействия.

Как уже отмечалось во Введении, в работах [43–45] были подробно изучены коллинеарные (одноподрешеточные) состояния в рамках модели конденсата бозе-газа нейтральных атомов щелочных металлов со спином $S = 2$ с контактным взаимодействием. При этом использовалось представление пробных функций, полностью аналогичное (3).

В данной работе мы рассмотрим как коллинеарные спиновые состояния спинового нематика, используя пробные функции (3), так и двухподрешеточные, используя более общее представление пробных функций (2). При этом в случае низких температур энергия $W[C_m]$ как функция параметров $\alpha, \beta, \delta, \varphi, \gamma, \eta, \mu, \theta$ совпадает с плотностью свободной энергии системы, анализом которой мы и займемся.

3. КОЛЛИНЕАРНЫЕ ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРЫ ВОЗБУЖДЕНИЙ СПИНОВОГО НЕМАТИКА С $S = 2$

Исследуем сначала коллинеарные фазы. Так, если вектором основного состояния является $|\psi\rangle$, то свободная энергия (на один спин) определяется выражением

$$W_1 = -\frac{1}{4} \left(\tilde{J} + 3\tilde{K} \right) (1 - 3 \cos^2 \alpha)^2, \quad (1)$$

где

$$\tilde{J} = 2J - K + 41D - 79F, \quad \tilde{K} = K - 5D + 43F.$$

Легко видеть, что при $\tilde{J} + 3\tilde{K} > 0$ минимуму плотности свободной энергии отвечает состояние, в котором $\alpha = 0$. Это состояние характеризуется отличными от нуля средними:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= 2, \\ q_2^0 &= 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 6 = 6, \\ q_3^0 &= 5 \langle (S^z)^3 \rangle - 17 \langle S^z \rangle = 6, \\ q_4^0 &= 35 \langle (S^z)^4 \rangle - 155 \langle (S^z)^2 \rangle + 72 = 12, \end{aligned}$$

а функция основного состояния имеет вид $|\psi\rangle = |2\rangle$.

Таким образом, в системе реализуется ферромагнитная (ФМ) фаза с максимально возможным значением магнитного момента на узле. Эта фаза устойчива при преобладающем гейзенберговском обменном взаимодействии, т.е. когда $J \gg K, D, F$. Ферромагнитная фаза характеризуется четырьмя отличными от нуля средними: $\langle S^z \rangle, q_2^0, q_3^0, q_4^0$, и симметрия системы полностью определяется симметрией «среднего спина» $\langle S^z \rangle$ [32, 33, 39, 41].

Если же $\tilde{J} + 3\tilde{K} < 0$, то минимум свободной энергии достигается при $\cos \alpha = 1/\sqrt{3}$. В этом случае вектор основного состояния имеет вид

$$|\psi\rangle = |\psi_{TN}\rangle = \frac{|2\rangle + \sqrt{2}| - 1\rangle}{\sqrt{3}}.$$

Как уже отмечалось, такое состояние было найдено в работах [43, 44] с использованием описания систе-

мы с помощью $2S$ точек на единичной сфере. Это состояние характеризуется четырьмя точками, совпадающими с вершинами правильного тетраэдра, вписанного в сферу, и его уместно назвать тетраэдрическим нематиком (TN). В этом состоянии $\langle S^z \rangle = 0$, а квадрупольный эллипсоид вырожден в сферу,

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 2.$$

Спонтанное нарушение симметрии определяется средними, кубическими по компонентам оператора спина, которые не инвариантны относительно обращения времени ($t \rightarrow -t$); отличные от нуля мультипольные средние равны

$$\begin{aligned} q_3^0 &= 10, \\ q_3^3 &= \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle \right) = 4\sqrt{2}, \\ q_4^0 &= -28, \\ q_4^3 &= \frac{1}{4} \left\langle \left[S^z, \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right) \right]_+ \right\rangle = 2\sqrt{2}. \end{aligned}$$

Геометрическим образом этого состояния является тетраэдр в спиновом пространстве. Чтобы это показать, рассмотрим одноузельный коррелятор

$$\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle = \sqrt{2} \cos 3\chi.$$

Как видно, он инвариантен относительно поворотов спиновой системы вокруг оси z на угол $2\pi/3$. Это указывает на существование оси третьего порядка C_3 , совпадающей с осью z . Такие же свойства имеют место для трех направлений в пространстве, составляющих с осью z угол $2 \arctan \sqrt{2} \approx 109.5^\circ$ и полярными углами $\pi/3, \pi, 5\pi/3$. Ось z и эти три оси ориентированы как оси C_3 тетраэдра с одной из вершин при положительном значении z .

Если в качестве пробной функции использовать $|\phi\rangle$ (см. формулу (3)), то плотность свободной энергии имеет вид

$$W_2 = \frac{3}{2} \tilde{K} \{ (1 - \sin 2\theta) \sin^2 2\mu - 6 \} - \tilde{J} \cos^2 2\theta \cos^4 \mu.$$

Минимизируя выражение W_2 по двум параметрам θ и μ , легко показать, что кроме полученного выше FM-состояния (при $\theta = 0, \mu = 0$) в системе реализуется состояние спинового нематика (SN), для которого $\theta = \pi/4$, а вектор этого состояния имеет вид

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \mu (|2\rangle + |-2\rangle) + \sin \mu |0\rangle.$$

Среднее значение магнитного момента на узле $\langle S^z \rangle = 0$, а мультипольные параметры порядка являются четными по степеням компонент спиновых

операторов, т. е. они инвариантны относительно обращения времени:

$$\begin{aligned} q_2^0 &= 6 \cos 2\mu, \\ q_2^2 &= \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^2 \rangle + \langle (S^-)^2 \rangle \right) = 2\sqrt{3} \sin 2\mu, \\ q_4^0 &= 12(6 - 5 \cos^2 \mu), \\ q_4^4 &= \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^4 \rangle + \langle (S^-)^4 \rangle \right) = 12 \cos^2 \mu. \end{aligned}$$

Состояние спинового нематика является истинно нематическим в том смысле, как это определено для нематика со спином $S = 1$ [33], так как оно инвариантно относительно обращения времени в отличие, например, от нематика со спином $S = 3/2$ [39]. Анализ выражения W_2 при $T = 0$ не позволяет определить параметр μ в нематической фазе. Это удастся сделать, проводя анализ свободной энергии с учетом температурных поправок — так называемый механизм образования порядка из беспорядка [45]. Состояние спинового нематика с неопределенным значением параметра μ представляет собой «суперпозицию» осевого и плоскостного нематиков. Учет температурных поправок в свободной энергии в этой фазе позволяет снять это «вырождение» по параметру μ , и если при $T = 0$ основное состояние

$$|\phi\rangle = \cos \mu (|2\rangle + |-2\rangle) / \sqrt{2} + \sin \mu |0\rangle,$$

то при ненулевых температурах (даже достаточно малых и близких к нулю) это состояние «расщепляется» на осевой нематик ($\mu = 0$) в окрестности линии $\tilde{J} = 0$ и плоскостной нематик ($\mu = \pi/2$) вблизи линии $\tilde{K} = 0$. Вопрос о переходах «осевой нематик–плоскостной нематик» будет также подробно обсуждаться при анализе фазовых диаграмм.

Представляет интерес исследовать геометрический образ нематического состояния в спиновом пространстве. Квадрупольные средние определяют «эффективную» анизотропию системы:

$$\begin{aligned} \langle (S^z)^2 \rangle &= 4 \cos^2 \mu, \\ \langle (S^{x(y)})^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{6} \sin \mu \pm \sqrt{2} \cos \mu \right)^2, \end{aligned}$$

т. е. геометрическим образом в спиновом пространстве является двuosный эллипсоид. Параметр μ «перемешивает» нематически упорядоченные состояния: «осевой» нематик ($\mu = 0, \langle (S^z)^2 \rangle = 4, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1$), геометрическим образом которого является одноосный эллипсоид, и «плоскостной» нематик, геометрическим образом которого является бесконечно тонкий диск ($\mu = \pi/2, \langle (S^z)^2 \rangle = 0, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 3$).

Необходимо отметить, что квадрупольный эллипсоид представляет сложную поверхность (в спиновом пространстве) четвертого порядка, такую что

$$\begin{aligned} \langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^4 \rangle &= \frac{3}{2} \cos^2 \chi \cos 4\chi + \\ &+ \frac{5}{2} \cos^2 \chi + 12 \sin^2 \chi + 4\sqrt{3} \sin 2\mu \cos 2\chi. \end{aligned}$$

Из последнего соотношения следует, что эллипсоид является «гофрированным» в плоскости XY , а параметр χ определяет степень его «гофрировки».

Отметим также, что квадрупольный эллипсоид нематического состояния для изотропных магнетиков со спинами $S = 1$ и $S = 3/2$ более симметричен, так как содержит ось C_∞ [33, 39, 41, 42].

Следует отметить, что условия устойчивости нематической фазы ($\tilde{J} < 0$ и $\tilde{K} > 0$) соответствуют случаю больших и положительных обменных констант биквадратичного и четырехквартичного взаимодействия $K, F > J, D$.

Таким образом, в случае реализации коллинеарной спиновой конфигурации (одноподрешеточный магнетик) в зависимости от соотношения материальных параметров возможно существование трех фазовых состояний, различающихся значениями параметров порядка, а на линиях $\tilde{J} = 0$, $\tilde{K} = 0$ и $\tilde{J} = -3\tilde{K}$ энергии граничащих фаз совпадают. В работе [39] указывалось, что такое поведение характерно для вырожденных переходов первого рода. Однако, как будет показано ниже, в отличие от изотропных магнетиков со спинами $S = 1$ [33] и $S = 3/2$ [39], для модели со спином $S = 2$ возможны фазовые переходы первого рода (невыврожденные) между одноподрешеточными и двухподрешеточными фазами.

Для анализа устойчивости описанных выше фаз относительно произвольных малых возмущений найдем спектр всех ветвей элементарных возбуждений (магнонов) $\varepsilon_\alpha(k)$. Для магнетика со спином $S = 2$ таких ветвей четыре, $\alpha=1-4$ определяет номер моды, k — волновой вектор, принадлежащий зоне Бриллюэна. Наличие неустойчивостей в спектрах возбуждений при малых и немалых волновых векторах k указывает на фазовые переходы в системе. Совместный анализ плотности свободной энергии и спектров возбуждений позволяет определить тип фазового перехода. Так, равенство свободных энергий позволяет получить линию фазового перехода, а анализ энергетических щелей в спектрах возбуждений позволяет определить тип фазового перехода. Спектры магнонов были

получены методом функций Грина для операторов Хаббарда [53–56].

В ферромагнитной фазе спектры магнонов имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(k) &= 2(J_0 + 4K_0 + 16D_0 + 64F_0 - J_k - \\ &- 4K_k - 16D_k - 64F_k), \\ \varepsilon_2(k) &= 2(2J_0 + 5K_0 + 29D_0 + 89F_0 - \\ &- 3K_k - 3D_k - 39F_k), \\ \varepsilon_3(k) &= 6(J_0 + K_0 + 16D_0 + 13F_0 - \\ &- 3D_k + 12F_k), \\ \varepsilon_4(k) &= 4(2J_0 - K_0 + 41D_0 - 70F_0 - 9F_k). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь J_k, K_k, D_k, F_k — фурье-компоненты соответствующих обменных интегралов,

$$\begin{aligned} J_k &= J_0 \gamma_k, \\ \gamma_k &= \frac{1}{z} \sum_{\delta} \exp(i\mathbf{k}\delta), \end{aligned}$$

$|\delta| = 1$ — межатомное расстояние, z — число ближайших соседей.

Первая из четырех ветвей возбуждения является безщелевой голдстоуновской модой с параболическим законом дисперсии при малых значениях волнового вектора и соответствует прецессии спина. Ветвь ε_2 описывает «продольную» динамику спина, т. е. колебание среднего спинового момента по модулю. Моды ε_3 и ε_4 определяются спецификой динамики рассматриваемого магнетика и связаны с соответствующими мультипольными средними.

Вопрос об области устойчивости ферромагнитной фазы будет обсуждаться ниже при построении фазовой диаграммы рассматриваемой системы.

Решение дисперсионного уравнения в нематической фазе позволяет определить спектр элементарных возбуждений:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^2(k) &= [12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k) \times \\ &\times \sin^2 \mu_i + 36(F_0 - F_k) \cos^2 \mu_i] \times \\ &\times [12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \sin^2 \mu_i + \\ &+ 4(9F_0 - 2J_k + K_k - 41D_k + 70F_k) \cos^2 \mu_i], \\ \varepsilon_4^2(k) &= 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \times \\ &\times (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k). \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\mu_i = \mu + \left(\frac{2\pi}{3}\right) i, \quad i = 1, 2, 3.$$

При значениях $\mu \neq 0, \pi/2$ в нематической фазе имеются четыре ветви спектра возбуждений. Как

уже отмечалось выше, анализ энергии основного состояния при $T = 0$ не позволяет определить параметр μ в нематической фазе.

Тетраэдрическое состояние характеризуется трехкратным вырождением возбужденных уровней, т. е. $E_1 = E_{-1} = E_0$. Это приводит к тому, что три ветви возбуждений совпадают, и спектр элементарных возбуждений в тетрагонально нематической фазе представлен двумя ветвями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2,3}(k) &= \\ &= 36(9D_0 - 36F_0 - 2J_k - 2K_k - 35D_k - 14F_k) \times \\ &\times (D_0 - 4F_0 - D_k + 4F_k), \\ \varepsilon_4(k) &= 12(3D_0 - 15F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k). \end{aligned} \quad (6)$$

Этот результат находится в соответствии с общим результатом о числе безактивационных ветвей магнонов [55,57] при наличии высокой (тетраэдрической) симметрии состояния на узле. Первая ветвь (ε_1) соответствует повороту осей тетраэдра и связанного с ним колебания среднего спина. Неустойчивость, связанная с этой ветвью, определяет переход в состояние с ненулевым значением спина. Вторая ветвь (активационная) связана с колебаниями мультипольных моментов q_3^i, q_4^i и описывает неустойчивость относительно перехода в другое нематическое состояние.

4. ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРЫ ВОЗБУЖДЕНИЙ СПИНОВОГО НЕМАТИКА С $S = 2$

Рассмотрим теперь состояния, реализуемые в двухподрешеточном изотропном спиновом нематике. Если в качестве пробной функции основного состояния выбрать $|\chi\rangle$ (см. выражения (3)), то плотность свободной энергии определяется выражением

$$W_3 = \frac{1}{4} (\tilde{J}' - 3\tilde{K}') (1 - 3\cos^2 \alpha)^2,$$

где

$$\tilde{J}' = 2J - K + 41D - 61F, \quad \tilde{K}' = K + D + 13F.$$

Для упрощения математических вычислений при расчете спектра для одной из подрешеток (для определенности второй) совершим поворот вокруг оси y ,

$$U(\phi) = \prod_n \exp(i\phi S_n^y),$$

на угол $\phi = \pi$ в спиновом пространстве. Это отвечает преобразованию операторов вида

$$S_{n_2}^x \rightarrow \tilde{S}_{n_2}^x = -S_{n_2}^x,$$

$$\begin{aligned} S_{n_2}^y &\rightarrow \tilde{S}_{n_2}^y = S_{n_2}^y, \\ S_{n_2}^z &\rightarrow \tilde{S}_{n_2}^z = -S_{n_2}^z, \end{aligned}$$

что соответствует спиновой структуре подрешеток антиферромагнетика.

Анализ показал, что для расчетов спектров элементарных возбуждений можно рассматривать гамильтониан в терминах как старых $S_{n_1}^i$, так и новых операторов $\tilde{S}_{n_2}^i$, используя один и тот же квазиимпульс для обоих операторов. Фактически, это означает использование схемы расширенных зон. В данном случае оказывается, что это представление достаточно удобно и наглядно, поскольку подрешетки эквивалентны.

Одно из решений уравнения для минимума плотности свободной энергии W_3 имеет вид $\alpha = 0$. Это решение соответствует условию максимального насыщения $\langle S^z \rangle = 2$ при $\tilde{J}'_0 < 0$ и $\tilde{J}'_0 - 3\tilde{K}'_0 < 0$. Кроме того, в этом состоянии отличными от нуля являются только «осевые» тензорные моменты: $q_2^0 = 6$, $q_3^0 = 6$, $q_4^0 = 12$. Во второй подрешетке параметры порядка: $\langle S^z \rangle = -2$, $q_2^0 = 6$, $q_3^0 = -6$, $q_4^0 = 12$. Волновые функции основного состояния подрешеток в этом состоянии имеют вид $|\psi\rangle = |2\rangle$ и $|\chi\rangle = |-2\rangle$ (см. формулу (3)), что соответствует антиферромагнитному упорядочению (AFM), характеризующему насыщенным значением спина и антипараллельной ориентацией спинов в каждой подрешетке, $\mathbf{S}_n = 2\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{S}_{n'} = -2\mathbf{e}_z$.

Для антиферромагнитной фазы состояния спинов в различных подрешетках энергетически эквивалентны и спектры магнонов естественно рассматривать в схеме расширенных зон:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= 4(J_0 - 5K_0 + 34D_0 - 179F_0)^2 - \\ &- 4(J_k - 5K_k + 34D_k - 179F_k)^2, \\ \varepsilon_2^2(k) &= 4(2J_0 - 7K_0 + 53D_0 - 229F_0)^2 - \\ &- 36(K_k - 5D_k + 43F_k)^2, \\ \varepsilon_3^2(k) &= 36(J_0 - 2K_0 + 22D_0 - 68F_0)^2 - \\ &- (18(D_k - 6F_k))^2, \\ \varepsilon_4^2(k) &= 16(2J_0 - K_0 + 41D_0 - 70F_0)^2 - (36F_k)^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Наличие голдстоуновской ветви возбуждений ε_1 в фазах с дипольным параметром порядка $\langle S \rangle \neq 0$ является следствием симметрии ферромагнитной и антиферромагнитной фаз относительно преобразований группы $SU(2)$.

Анализ выражения W_3 показал, что кроме AFM-фазы реализуется двухподрешеточная фаза с тетра-

эдрической симметрией. Функции основного состояния в каждой из подрешеток имеют вид ортогональных векторов:

$$|\psi\rangle = \frac{(|2\rangle + \sqrt{2}|1\rangle)}{\sqrt{3}},$$

$$|\chi\rangle = \frac{(|-2\rangle - \sqrt{2}|1\rangle)}{\sqrt{3}}.$$

Это состояние устойчиво при $\tilde{K}'_0 < 0$ и $\tilde{J}'_0 - 3\tilde{K}'_0 > 0$, а $\cos \alpha = 1/\sqrt{3}$. Как и в тетраэдрической нематической фазе, $\langle S^z \rangle = 0$, а квадрупольный эллипсоид каждой из подрешеток вырожден в сферу,

$$\langle (S^z)^2 \rangle = \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 2.$$

Нечетные по степеням компонент спинового оператора мультипольные средние для первой и второй подрешеток различаются знаками:

$$q_{3(1,2)}^0 = \pm 10, \quad q_{3(1,2)}^3 = \pm 4\sqrt{2}.$$

Геометрическим образом этого состояния в спиновом пространстве каждой из подрешеток является тетраэдр. Причем вершины тетраэдров обеих подрешеток противоположно направлены относительно оси z , а основания развернуты друг относительно друга на угол $\pi/3$ вокруг оси z , что следует из соответствующего коррелятора:

$$\langle (S_{1,2}^x \cos \chi + S_{1,2}^y \sin \chi)^3 \rangle = \pm \sqrt{2} \cos 3\chi.$$

Это состояние естественно назвать тетраэдрической антинематической фазой (TAN).

Мультипольные параметры порядка в тетраэдрической антинематической фазе, так же как и в тетраэдрической нематической, определяются трехспиновыми (не инвариантными относительно обращения времени) и четырехспиновыми (не меняющими знак при замене $t \rightarrow -t$) корреляторами. В этом состоит принципиальное отличие тетраэдрических нематической и антинематической фаз для магнетика с $S = 2$ от нематической и антинематической фаз для $S = 3/2$.

В тетраэдрической антинематической фазе, как и в тетраэдрической нематической также присутствуют три совпадающие безактивационные ветви магнонов, что связано с вырождением возбужденных энергетических уровней магнитного иона ($E_1 = E_0 = E_{-1}$), а четвертая ветвь имеет конечную энергию активации:

$$\varepsilon_{1,2,3}^2(k) = 36 [9(D_0 - 6F_0) - (2J_k - 4K_k + 47D_k - 154F_k)] (D_0 - 6F_0 + D_k - 6F_k), \quad (8)$$

$$\varepsilon_4^2(k) = 144 [9(D_0 - 5F_0)^2 - (K_k - 2D_k + 28F_k)^2].$$

Поведение ветви $\varepsilon_4(k)$ аналогично как при $k \rightarrow 0$, так и при $k \rightarrow k_B$, т. е. реализуется антиферромагнитоподобный спектр (здесь k_B — волновой вектор на границе зоны Бриллюэна). Энергия ветвей $\varepsilon_{1,2,3}(k)$ в тетраэдрических нематических и антинематических фазах непосредственно зависит от обменных интегралов D и F .

Достаточно простое представление пробных функций (3) основного состояния позволило получить некоторые как одно-, так и двухподрешеточные состояния изотропного спинового нематика с $S = 2$. Для определения всех возможных фазовых состояний исследуем свободную энергию системы с учетом всех возможных спиновых конфигураций, предполагая, что система может разбиваться на две подрешетки, а пробные функции подрешеток соответствуют состояниям (2). Полученное таким образом выражение для плотности свободной энергии как функции восьми параметров порядка, $\alpha, \beta, \delta, \varphi, \gamma, \eta, \mu, \theta$, при $T = 0$ является очень громоздким, и мы приводить его в данной работе не будем. Однако численная минимизация выражения для свободной энергии по параметрам задачи при различных соотношениях обменных интегралов (и их знаков) позволяет определить все устойчивые спиновые состояния системы.

Прежде чем переходить к этой процедуре, отметим, что изменение знака обменных интегралов может приводить к новой физике. Так, например, в изотропной модели Гейзенберга изменение знака константы билинейного взаимодействия приводит к возникновению энергетически выгодного антиферромагнитного упорядочения. В модели изотропного магнетика с учетом биквадратичного обменного взаимодействия и спином магнитного иона $S = 1$ при отрицательных значениях биквадратичного и билинейного обменных взаимодействий (при $|K| > |J|$) реализуется двухподрешеточная ортогонально-нематическая фаза [33]. В этом состоянии ортогональными являются главные оси тензора квадрупольных моментов подрешеток. Для изотропного негейзенберговского магнетика с $S = 3/2$ возможна реализация антинематического двухподрешеточного состояния в случае отрицательных значений обменных интегралов при высших спиновых инвариантах [39, 41]. Поэтому можно ожидать появления новых фазовых состояний в магнетике с $S = 2$ при определенных соотношениях материальных параметров и их знаков.

Действительно, если константы обменного взаимодействия удовлетворяют неравенству $K - 2D + 28F < 0$, а параметры пробных функ-

ций (2), соответствующие минимуму свободной энергии, равны

$$\begin{aligned} \mu = \theta = \pi/4, \quad \alpha = 0, \quad \beta = \pi/2; \\ \eta = \varphi = \pi/4, \quad \gamma = 0, \quad \delta = \pi/2, \end{aligned}$$

то функции основного состояния в каждой из подрешеток определяются ортогональными векторами

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{2} (|2\rangle + |-2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{2} (|2\rangle + |-2\rangle) - \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Средняя намагниченность в подрешетках (на один узел) равна нулю $\langle S \rangle = 0$, а средние значения квадратов спиновых операторов отличны от нуля. Для каждой из подрешеток они имеют вид

$$\begin{aligned} \langle (S_1^z)^2 \rangle &= 2, \quad \langle (S_1^{x(y)})^2 \rangle = 2 \pm \sqrt{3}, \\ \langle (S_2^z)^2 \rangle &= 2, \quad \langle (S_2^{x(y)})^2 \rangle = 2 \mp \sqrt{3}. \end{aligned}$$

Такое состояние является не чем иным, как ортогонально-нематической фазой (ОН), геометрическим образом которой являются два двухосных эллипсоида, у которых оси с наибольшим и наименьшим собственными значениями ортогональны друг другу. Кроме того, как следует из коррелятора

$$\begin{aligned} \left\langle \left(S_{1(2)}^x \cos \chi + S_{1(2)}^y \sin \chi \right)^4 \right\rangle = \\ = \frac{7}{4} + \frac{3}{4} \cos 4\chi \pm 4\sqrt{3} \cos 2\chi, \end{aligned}$$

эти эллипсоиды являются «гофрированными» в плоскости, перпендикулярной их главным осям, и развернуты друг относительно друга на угол $\pi/2$.

Спектр магнонов в этой фазе имеет три ветви, что связано с вырождением возбужденных энергетических уровней магнитного иона $E_1 = E_{-1}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2(k) &= 12[3(K_0 - 2D_0 + 25F_0) - \\ &- 2J_k + K_k - 32D_k + 25F_k] \times \\ &\times (K_0 - 2D_0 + 25F_0 + K_k - 2D_k + 25F_k), \\ \varepsilon_{2,3}^2(k) &= 3[6(K_0 - 2D_0 + 25F_0) + \\ &+ 2J_k - K_k + 32D_k - 25F_k] \times \\ &\times [2(K_0 - 2D_0 + 25F_0) - K_k + 2D_k - 25F_k], \\ \varepsilon_4^2(k) &= 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 + 3D_k - 15F_k) \times \\ &\times (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k). \end{aligned} \quad (10)$$

Еще одно двухподрешеточное нематическое состояние реализуется в случае большого отрицательного значения интеграла обменного взаимодействия $F < 0$. В этом случае состояние будет устойчивым, если параметры пробных функций (2) равны

$$\begin{aligned} \mu = \alpha = 0, \quad \theta = \pi/4, \quad \beta = \pi/2; \\ \eta = \gamma = 0, \quad \varphi = -\pi/4, \quad \delta = \pi/2, \end{aligned}$$

а функции основного состояния подрешеток имеют вид

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{|2\rangle - |-2\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Мультипольные параметры порядка подрешеток различаются знаком средних четвертой степени по операторам спина $q_{4(1,2)}^4 = \pm 12$. Геометрическим образом этого состояния в спиновом пространстве являются одноосные эллипсоиды

$$\begin{aligned} \langle (S_{1,2}^z)^2 \rangle &= 4, \\ \langle (S_{1,2}^x)^2 \rangle &= \langle (S_{1,2}^y)^2 \rangle = 1, \end{aligned}$$

оси которых параллельны. Однако, как и в ортогонально-нематической фазе, поверхность этих эллипсоидов представляет собой поверхность четвертого порядка. Это следует из явного вида корреляторов четвертого порядка подрешеток:

$$\left\langle \left(S_{1(2)}^x \cos \chi + S_{1(2)}^y \sin \chi \right)^4 \right\rangle = \frac{5 \pm 3 \cos 4\chi}{2}.$$

Из этих выражений также понятно, что «гофрировка» в плоскости XY — четвертого порядка; кроме того, гофрированные эллипсоиды развернуты относительно друг друга на угол $\pi/4$ в плоскости XY .

Легко видеть, что каждой из волновых функций (11) будут соответствовать четыре точки на единичной сфере, являющиеся вершинами квадратов, ориентированных в плоскости XY и повернутых друг относительно друга на угол $\pi/4$. Таким образом, данное состояние можно назвать тетрагональным двухподрешеточным нематиком (TDN).

Спектр элементарных возбуждений в тетрагональном двухподрешеточном нематическом состоянии представлен тремя ветвями:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}^2(k) &= 27(K_0 - 2D_0 + 25F_0 + K_k - 2D_k + 25F_k) \times \\ &\times [3(K_0 - 2D_0 + 25F_0) + 2J_k - K_k + 38D_k - 55F_k], \\ \varepsilon_3^2(k) &= 144(F_0 + F_k)(9F_0 - 2J_k + K_k - 41D_k + 70F_k), \\ \varepsilon_4^2(k) &= |K_0 - 2D_0 + 25F_0|, \end{aligned} \quad (12)$$

что связано с вырождением двух возбужденных уровней энергии магнитного иона $E_1 = E_{-1}$. Ветвь $\varepsilon_4(k)$ является бездисперсионной.

Как следует из законов дисперсии (8) и (12), в тетраэдрической и тетрагональной двухподрешеточных нематических фазах определяющим является обменный интеграл F , в отличие от ортогонально-нематической фазы, в которой все ветви спектра (10) существуют при $D = F = 0$ и определяющим является обменный интеграл K .

Кроме того, анализ свободной энергии показал, что в магнетике с $S = 2$ могут реализовываться двухподрешеточные структуры с неэквивалентными подрешетками. Эти фазы характеризуются ненасыщенностью среднего спина одной из подрешеток, а магнитные моменты подрешеток либо коллинеарны, либо антиколлинеарны в зависимости от соотношения обменных интегралов. В коллинеарной фазе FiM(+) модуль намагниченности первой подрешетки равен $\langle S_1 \rangle = 2$, а второй подрешетки равен $\langle S_2 \rangle = 1$. В антиколлинеарной фазе FiM(-) получаем $\langle S_1 \rangle = 2$, $\langle S_2 \rangle = -1$.

Состояние FiM(+) является устойчивым, если параметры пробных функций (2) равны

$$\mu = \theta = \alpha = 0, \quad \eta = \varphi = 0, \quad \gamma = \pi/2,$$

а векторы состояния подрешеток имеют вид

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle, \quad |\psi_2\rangle = |1\rangle.$$

Состояние FiM(-) также устойчиво, если параметры пробных функций (2) равны

$$\mu = \theta = \alpha = 0, \quad \eta = \delta = 0, \quad \varphi = \pi/2,$$

а векторы состояния подрешеток имеют вид

$$|\psi_1\rangle = |2\rangle, \quad |\psi_2\rangle = |-1\rangle.$$

О возможности реализации такого упорядочения отмечено в [50], а для модели изинговского типа с учетом биквадратичного взаимодействия — в работе [56].

Таким образом, наблюдаемая картина фазовых переходов сложнее, чем для магнетика со спином $S = 1$ или $S = 3/2$, где область стабильности фаз определяется знаками только двух комбинаций параметров [39, 41].

5. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СПИНОВОГО НЕМАТИКА С $S = 2$

Представление полученных результатов становится более наглядным, если ввести следующие комбинации переменных:

$$x_1 = 2J - K + 41D - 70F, \quad x_2 = 3D - 15F, \\ x_3 = K - 2D + 28F, \quad x_4 = 9F$$

и построить на них вещественное проективное пространство

$$x = \frac{x_1}{x_4}, \quad y = \frac{x_2}{x_4}, \quad z = \frac{x_3}{x_4},$$

и далее рассмотреть его сечения при фиксированных значениях «координаты» z и знака константы обменного взаимодействия F , т.е. x_4 .

Следует отметить, что выбор сечений, в которых можно отображать фазовую диаграмму исследуемой системы, не единственный. Однако именно в «переменных» x, y, z , приведенных выше, при отображении сечений удастся наиболее наглядно проследить изменения фазовой картины при изменении величин и знаков обменных интегралов. Как показал анализ свободной энергии и спектров исследуемой системы, реализация той или иной нематической фазы существенно зависит от знака обменного интеграла при старшей степени спинового инварианта, в данном случае F . Такая же особенность наблюдалась и в магнетиках, рассмотренных в работах [39, 41]: в системах с $S = 1$ наличие большого и отрицательного биквадратичного взаимодействия приводит к реализации ортогонально-нематического состояния, а для $S = 3/2$ изменение знака бикубического обменного взаимодействия приводит к реализации антинематического состояния.

Сразу же отметим, что картина фазовых состояний выглядит наиболее просто для $z = 0$ и $F > 0$. В этом случае нематические фазы SN, ON и TDN становятся энергетически невыгодными. Переписав выражения для линий фазового перехода или линий потери устойчивости фаз, полученных из анализа свободных энергий и анализа спектров возбуждений в фазах FM, AFM, TN и TAN в переменных x, y, z , видно, что FM-фаза теряет устойчивость на линиях $x \pm 3y = 1$, AFM — становится неустойчивой при $x \pm 3y = -1$ (рис. 1). Граница области устойчивости TN-фазы определяется отрезком $x \in [-1, 1]$ при $y = 0$ и лучами: $3y + x = -1$, $3y - x = -1$, выходящими из точек на оси x .

Область устойчивости TN-фазы определяется, соответственно, тем же отрезком на оси x и лучами $x + 3y = 1$, $x - 3y = -1$. Таким образом, четыре

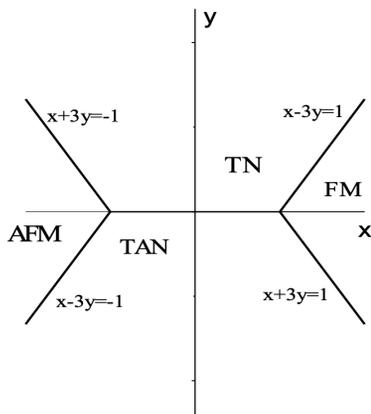


Рис. 1. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = 0, F > 0$. Здесь и ниже на других рисунках обозначено: FM — ферромагнитная фаза, AFM — антиферромагнитная фаза, TN — тетраэдрический немагнетик, TAN — тетраэдрический антинемагнетик

описанные выше фазы полностью определяют все фазовые состояния системы при $z = 0$. Переходы между фазами, как и для магнетиков со спинами $S = 1, 3/2$, проходят как вырожденные фазовые переходы первого рода.

Если $z \neq 0$, а $F > 0$, поведение системы существенно различается для случаев $z > 0$ и $z < 0$, т. е. в зависимости от знака комбинации обменных интегралов $K - 2D + 28F$. В случае $z > 0$ к описанным выше четырем фазам добавляется одноподрешеточная немагнитическая фаза SN. Непосредственного перехода между фазами TN и TAN не будет, переход будет происходить через SN-фазу (рис. 2).

Анализ спектров немагнетика (5) показывает, что при $\mu = 0$ ветвь возбуждений осевого немагнетика становится неустойчивой на линиях $x = 1$ или $x = -1$. SN-фаза переходит в фазы FM или AFM соответственно.

В случае, если $\mu = \pi/2$, реализуется плоскостной немагнетик, спектр которого представлен двумя ветвями, что, как и в случае осевого немагнетика, связано с вырождением возбужденных уровней магнитного иона, и при $y = z$ или $y = -z$ щель в спектре (5) обращается в нуль. Анализ свободной энергии показывает, что линии $y = z$ или $y = -z$ соответствуют переходам из фазы SN в фазу TN или TAN соответственно.

Таким образом, SN-фаза существует только при $z > 0$ и $F > 0$ внутри прямоугольника $-z < y < z$ и $|x| < 1$. На всех этих линиях, а также на линиях пе-

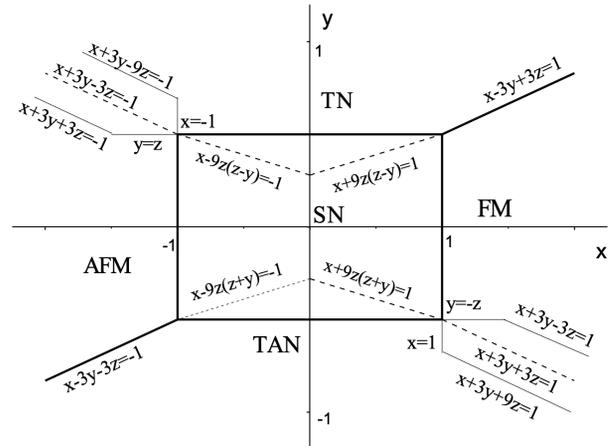


Рис. 2. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = 0.5$ и $F > 0$. Стандартные фазовые переходы первого рода отмечены штриховыми линиями, а тонкие сплошные линии представляют линии потери устойчивости фаз. Штриховые линии в области SN-фазы соответствуют границам осевой немагнитической фазы с $\mu = 0$ и плоскостной немагнитической фазы с $\mu = \pi/2$

реходов FM–TN и AFM–TAN имеют место вырожденные переходы первого рода. Однако, как отмечалось ранее, в SN-фазе при $T = 0$ параметр μ является неопределенным. Учет температурных поправок к свободной энергии позволяет определить параметр μ и получить линии перехода между осевым и плоскостным немагнитическими состояниями. Линии фазовых переходов осевой–плоский немагнетика обозначены штриховыми линиями внутри прямоугольной области SN-фазы на рис. 2. Поскольку параметр μ при $T = 0$ не определен, то тип фазового перехода между осевым и плоскостным немагнетиками не удается определить.

Необходимо отметить, что при $z > 0$ и $F > 0$ имеется конечная область сосуществования фаз с различной подрешеточной структурой, определяемая неравенствами $x < -1, \max\{z, -(1 + x + 3z)\} < 3y < 9z - 1 - x$ для перехода TN–AFM и $x > 1, 1 - 9z - x < 3y < \min\{-z, (1 - x + 3z)\}$ для перехода TAN–FM (рис. 2). Энергии этих фаз сравниваются на линиях переходов, $x + 3y - 3z = -1$ и $x + 3y + 3z = 1$ соответственно. Для этих переходов линии устойчивости сосуществующих фаз и линии перехода первого рода сходятся в точках $x = -1, y = z$ или $x = 1, y = -z$, в этих точках соприкасаются области существования трех фаз.

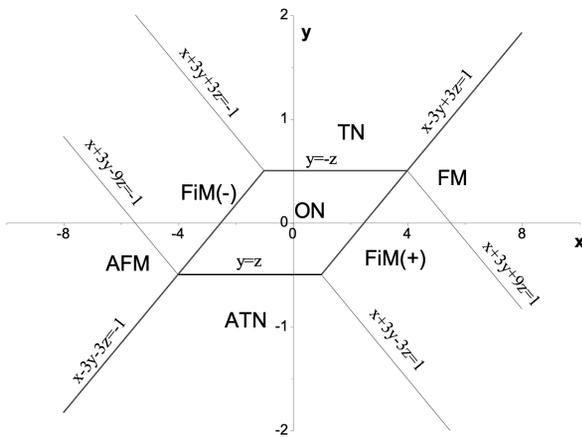


Рис. 3. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = -0.5$, $F > 0$. Здесь ON — ортогональный нематик; FiM(+) и FiM(-) — фазы с неэквивалентными подрешетками

При $z < 0$ и $F > 0$ вместо нематической фазы SN реализуется двухподрешеточная ортогонально-нематическая ON-фаза. Структура ON-фазы определяется состояниями вида (9), и ее область существования определяется неравенствами $z < x < -z$ и $3y + 3z - 1 < x < 3y - 3z + 1$ (рис. 3).

Спектр магнонов определяется выражениями (10). Ветвь возбуждения ϵ_4 неустойчива относительно возмущений $k \rightarrow 0$ или $k \rightarrow k_B$ при выполнении условий $y = -z$ или $y = z$ соответственно, что приводит к переходу в фазы TN или TAN. С другой стороны, ветвь ϵ_1 становится неустойчивой в пределе длинных волн $k \rightarrow 0$ или на краю зоны Бриллюэна $k \rightarrow k_B$ на линиях $x - 3y + 3z = 1$ или $x - 3y - 3z = -1$.

Как показал анализ свободной энергии, построенной на функциях (2), и как видно на рис. 3, при $z > 0$ вместо областей существования фаз FM–TAN и AFM–TN имеются две области, в которых реализуются фазы двухподрешеточного нематика типа FiM(+) и FiM(-). Эти фазы характеризуются ненулевыми значениями среднего спина одной из подрешеток: коллинеарная FiM(+) и антиколлинеарная FiM(-) фазы.

Таким образом, линии $x - 3y + 3z = 1$ или $x - 3y - 3z = -1$ это линии вырожденного фазового перехода первого рода в фазы FiM(+) или FiM(-) соответственно.

На линии $x + 3y + 9z = 1$ ветвь $\epsilon_4(k)$ спектра FM-фазы (4) теряет устойчивость. На этой же линии совпадают значения свободных энергий $W[C_m]$ фаз FM и FiM(+). На линии $x + 3y + 3z = -1$ неустой-

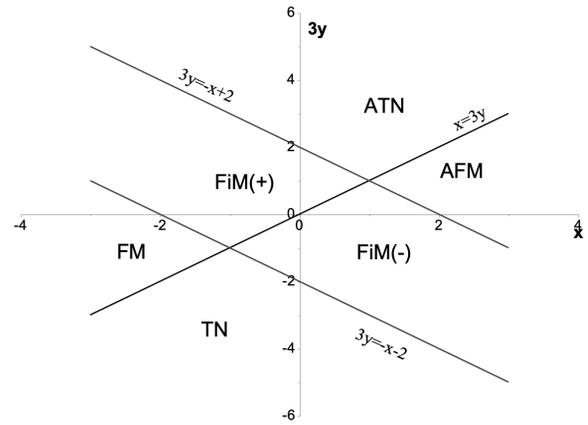


Рис. 4. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = 1/3$ и $F < 0$

чивой является ветвь $\epsilon_1^2(k)$ (6) TN-фазы. Также на этой линии равны значения свободных энергий $W[C_m]$ TN и FiM(-). Нижняя часть рис. 3 симметрична верхней, и ее анализ можно опустить. Отметим, что все фазовые переходы в изотропном негеизенберговском магнетике с $S = 2$ при $z < 0$, $F > 0$ являются вырожденными переходами первого рода.

Как уже отмечалось ранее и как следует из анализа фазовых состояний изотропных магнетиков $S = 1$ и $S = 3/2$, изменение знака констант обменных интегралов при высших спиновых инвариантах приводит к реализации новых фазовых состояний с нестандартными свойствами. Поэтому представляет интерес исследовать фазовую диаграмму рассматриваемой системы при $F < 0$.

В этом случае, как и для $F > 0$, фазовая диаграмма сильно упрощается для одного избранного значения $z = 1/3$. В этом случае фазы FiM(+) и FiM(-) соприкасаются (рис. 4).

Как и ранее, все линии границ фаз получены из анализа энергий основного состояния, а также из анализа спектров возбуждений в соответствующих фазах либо при $k \rightarrow 0$, либо при $k \rightarrow k_B$. Линия границ фаз FiM(+) и FiM(-) найдена из равенства свободных энергий, так как получение спектров в фазах с неэквивалентными подрешетками для магнетика $S = 2$ представляет довольно сложную математическую задачу.

На рис. 5 представлено сечение диаграммы при $z = 0.5$ и $F < 0$ — это то же сечение, что и на рис. 3, на котором $z = 0.5$ и $F > 0$, но только развернутое относительно начала координат на 180° в плоскости XY. Такое поведение системы при изме-

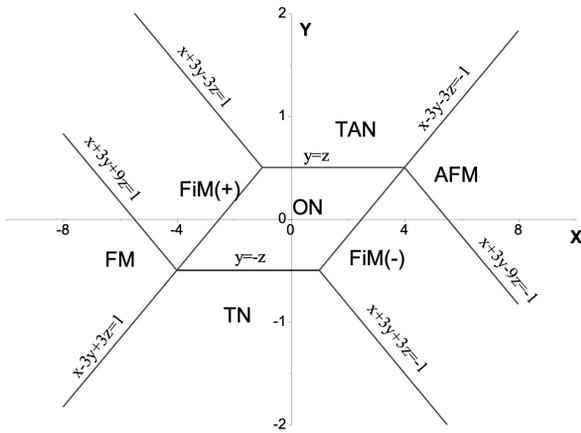


Рис. 5. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = 0.5$ и $F < 0$

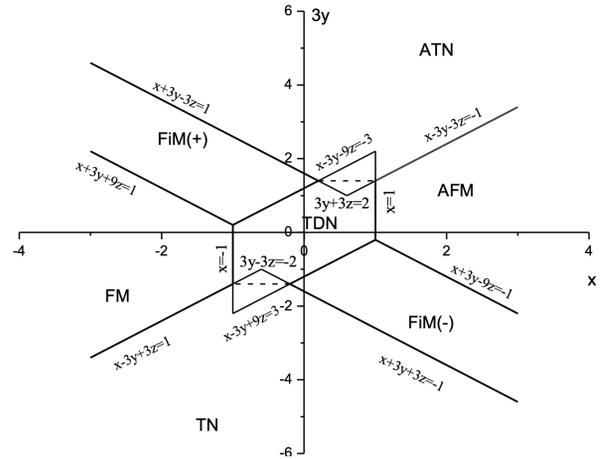


Рис. 6. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = 0.2$, $F < 0$

нении знака F как $x_1 = 2J - K + 41D - 70F$, так и $x_4 = 9F(z = x_3/x_4 > 0)$, справедливо только в определенной диапозоне «координаты» z , при $z > 1/3$.

Представляет интерес рассмотреть еще одно сечение фазовой диаграммы при $0 < z < 1/3$ и $F < 0$. Исследование динамических и статических свойств системы показывает, что в случае $z < 1/3$ реализуется еще одна двухподрешеточная фаза — нематическая TDN-фаза.

Рассмотрим подробно поведение спектра возбуждений в TDN-фазе вблизи границ потери устойчивости фаз. Жирные линии, ограничивающие данную фазу — линии вырожденного фазового перехода первого рода. На линиях фазового перехода $x = \pm 1$ из фазы TDN в AFM или FM теряет устойчивость ветвь ϵ_3^2 (см. выражение (12)) либо при $k \rightarrow 0$, либо при $k \rightarrow k_B$, на линиях фазового перехода в FiM(+) ($x - 3y - 9z = -3$) или FiM(-) ($x - 3y + 9z = 3$) теряет устойчивость ветвь $\epsilon_{1,2}^2$ (12).

Штриховой линией на рис. 6 обозначены линии фазового перехода первого рода $3y \mp 3z = \mp 2$ из фазы TDN в TN (верхний знак) и в TAN (нижний знак). Области существования фаз TDN и TAN ограничены тонкими сплошными линиями: $x - 3y - 9z = -3$, $x = 1$ — линии неустойчивости спектра TDN-фазы, $x + 3y - 3z = 1$, $x - 3y - 3z = -1$ — линии неустойчивости спектра TAN-фазы.

Области сосуществования фаз TDN и TN ограничены линиями: $x - 3y + 9z = 3$, $x = -1$ — линии неустойчивости спектра TDN-фазы, $x - 3y + 3z = 1$, $x + 3y + 3z = -1$ — линии неустойчивости спектра TN-фазы. Таким образом, фазовые переходы TDN-TN и TDN-TAN являются фазовыми переходами

первого рода с областями сосуществования соответствующих фаз.

Также можно показать, что с уменьшением значения z области существования FiM фаз сужаются, а при $z = 0$ они становятся неустойчивыми.

При дальнейшем увеличении по модулю переменной z (рис. 7) имеется конечная область сосуществования фаз с различной подрешеточной структурой: AFM-TN и FM-TAN, аналогично случаю $z > 0$ и $F > 0$, рассмотренному выше (рис. 2). На отрезках линий $x = \pm 1$ области сосуществования AFM-TN и FM-TAN граничат с областями сосуществования TDN-TN и TDN-TAN. При этом ситуация, при которой сосуществуют сразу три фазы — FM-TAN-TDN или AFM-TN-TDN — не реализуется, так как на границе $x = 1$ области сосуществования неустойчивыми становятся ветви спектров фаз FM и TDN, а на линии $x = -1$ — ветви спектров фаз AFM и TDN.

Поведение спектров возбуждений на остальных линиях неустойчивостей фаз уже обсуждалось выше. Области сосуществования фаз TDN-TN и TDN-TAN в рассматриваемом сечении $z < 0$ ограничены следующими линиями: $\{x - 3y - 9z = -3, x - 3y - 3z = -1, x = \pm 1\}$ — TDN-TN и $\{x - 3y + 9z = 3, x - 3y + 3z = 1, x = \pm 1\}$ — TDN-TAN. Штриховые линии на рис. 7 являются линиями фазовых переходов первого рода, полученных из равенства свободных энергий, а тонкие сплошные линии соответствуют линиям потери устойчивости спектров возбуждений. Таким образом, фазовые переходы между одно- и двухподрешеточными фазами FM-TAN и AFM-

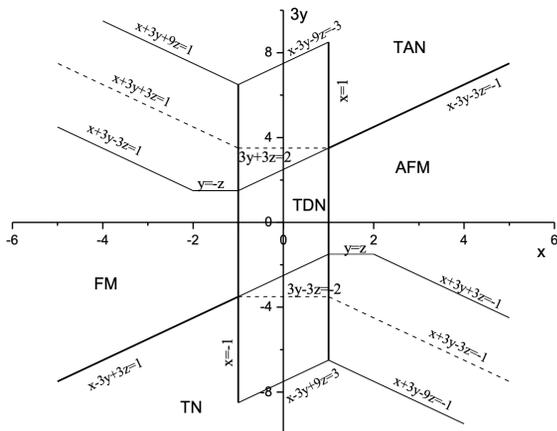


Рис. 7. Области существования различных фаз на плоскости XY при $z = -0.5, F < 0$

TN, а также переходы TDN–TN и TDN–TAN являются переходами первого рода с областями сосуществования соответствующих фаз.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проведенный анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений двухподрешеточного спинового нематика с $S = 2$ позволил определить все допустимые фазовые состояния системы, а также определить типы фазовых переходов между стабильными состояниями.

Эти исследования дали возможность построить полную фазовую диаграмму изотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 2$ при различных соотношениях и знаках обменных интегралов. Необходимо отметить, что полученные нами результаты хорошо согласуются с результатами работ [43, 44]. Однако отметим, что результаты, полученные в данной работе, имеют более общий характер, нежели результаты работ [43, 44], поскольку в них исследованы только коллинеарные (одноподрешеточные) спиновые состояния. Нами же изучены особенности формирования как одно-, так и двухподрешеточных состояний как с векторными, так и тензорными (нематическими) параметрами порядка.

Отметим некоторые особенности формирования нематических состояний. Прежде всего отметим, что основное состояние одноподрешеточного спинового нематика для магнетика с $S = 2$ принципиально отличается от нематических состояний для систем с $S = 1$ и $S = 3/2$. Геометрические образы

нематических фаз для магнетиков с $S = 1$ и $S = 3/2$ представляют собой одноосные эллипсоиды, тогда как в рассматриваемой здесь системе геометрическим образом спинового нематика является двуосный эллипсоид. Это свидетельствует о различных симметричных свойствах нематиков в магнетиках с различными значениями спина. Если для магнетиков с $S = 1$ и $S = 3/2$ симметрия нематической фазы есть C_∞ , то для магнетиков с $S = 2$ симметрия нематической фазы более сложная: в окрестностях линий фазового перехода в фазы TN и TAN, т. е. при $\mu = 0$, квадрупольный эллипсоид остается двухосным, нематик является осевым с осью четвертого порядка; в окрестности линий фазовых переходов в фазы FM и AFM, т. е. при $\mu = \pi/2$, симметрия нематического состояния C_∞ . Учет даже малых тепловых флуктуаций приводит к возникновению конечных областей стабильного существования осевого и плоскостного нематиков.

Наибольший интерес представляют двухподрешеточные нематические состояния. Необходимо отметить, что существенную роль при формировании двухподрешеточных нематических фаз играет знак констант обменного взаимодействия, особенно константы F при спиновом инварианте четвертой степени. Так, при $F > 0$ и $z < 0$ в системе реализуется ортогонально-нематическая фаза, геометрическим образом которой являются двухосные эллипсоиды в каждой из подрешеток, главные оси которых ортогональны друг другу. При указанных соотношениях материальных параметров ($F > 0$ и $z < 0$) в системе возникают еще две устойчивых фазы, но не с тензорным упорядочением, а дипольным. Это так называемые FiM-фазы, т. е. двухподрешеточные состояния, в которых магнитный момент одной из подрешеток не насыщен, а во второй — максимально насыщен $\langle S_x \rangle = 2, \langle S_y \rangle = \pm 1$. При этом ориентация магнитных моментов подрешеток антипараллельна $\langle S_1 \rangle = 2, \langle S_2 \rangle = -1$, если $x < 0$ (ферримагнитная), и параллельна $\langle S_1 \rangle = 2, \langle S_2 \rangle = +1$, если $x > 0$. Эти фазы граничат с TN, AFM и ON при $x < 0$ и FM, TAN и ON при $x > 0$, причем фазовые переходы между этими фазами и FiM являются вырожденными переходами первого рода.

Как уже отмечалось ранее, изменение знака обменного интеграла при высшем спиновом инварианте может приводить к возникновению новых фазовых состояний. Все описанные выше фазы сохраняются и при $F < 0$, но $z > 0$ (см. рис. 3). Однако изменение знака обменного интеграла F приводит к зеркальному отражению фазовой диаграммы относительно ON-фазы (см. рис. 3 и 5). При этом

при уменьшении переменной z область, занимаемая ON-фазой, уменьшается, и при $z = 1/3$ и $F < 0$ эта фаза полностью исчезает (см. рис. 4), аналогично тому, как исчезает SN-состояние при $z = 0$, $F > 0$ (см. рис. 1). Дальнейшее уменьшение параметра z при $F < 0$ приводит к тому, что в секторе $0 < z < 1/3$ вместо двухподрешеточной ON-фазы реализуется также двухподрешеточное нематическое состояние TDN, но не ортогонального типа, а тетрагонального с симметрией C_4 . При этом области, занимаемые FiM-фазами, сужаются (см. рис. 6). Наконец, при $z < 0$ и $F < 0$ FiM-фазы становятся энергетически невыгодными, а области фаз TN, FM и AFM за счет этого существенно расширяются. При этом фазовые переходы между FM и TAN, а также AFM и TN являются переходами первого рода, т. е. снимается вырождение этих фазовых переходов.

Проведенные исследования позволили определить все возможные фазовые состояния изотропно негеизенберговского магнетика с $S = 2$ при различных соотношениях обменных интегралов и их знаков. Определены новые двухподрешеточные фазовые состояния как дипольного (FiM-фазы), так и нематического типа (фазы TAN, TDN). Исследования динамических и статических свойств системы позволили определить типы фазовых переходов.

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность Б. А. Иванову за постоянный интерес к работе и полезные дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-22-00054).

ЛИТЕРАТУРА

1. P.-G. De Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford University Press (1993).
2. П. Де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
3. D. Andrienko, *J. Mol. Liq.* **267**, 520 (2018)
4. А. Ф. Андреев, И. А. Грищук, *ЖЭТФ* **87**, 467 (1984) [*Sov. Phys. JETP* **60**, 267 (1984)].
5. M. Blume and Y. Y. Hsieh, *J. Appl. Phys.* **40**, 1249 (1969).
6. M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, *Europhys. Lett.* **92**, 37001 (2010).
7. P. Chandra and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 100 (1991).
8. A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **44**, 4693 (1991).
9. F. Michaud, F. Vernay, and F. Mila, *Phys. Rev. B* **84**, 184424 (2011).
10. E. Fradkin, S. A. Kivelson, M. J. Lawler, J. P. Eisenstein, and A. P. Mackenzie, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 153 (2010).
11. J.-H. Chu, H.-H. Kuo, J. G. Analytis, and I. R. Fisher, *Science* **337**, 710 (2012).
12. R. M. Fernandes, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *Nat. Phys.* **10**, 97 (2014).
13. F. Mila, *Physics* **10**, 64 (2017).
14. R. Nath, A. A. Tsirlin, H. Rosner, and C. Geibel, *Phys. Rev. B* **78**, 064422 (2008).
15. L. E. Svistov, T. Fujita, H. Yamaguchi, S. Kimura, K. Omura, A. Prokofiev, A. I. Smirnov, Z. Honda, and M. Hagiwara, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 24 (2011) [*JETP Lett.* **93**, 21 (2011)].
16. M. Yoshida, K. Nawa, H. Ishikawa, M. Takigawa, M. Jeong, S. Krämer, M. Horvatić, C. Berthier, K. Matsui, T. Goto, S. Kimura, T. Sasaki, J. Yamaura, H. Yoshida, Y. Okamoto, and Z. Hiroi, *Phys. Rev. B* **96**, 180413(R) (2017).
17. A. Orlova, E. L. Green, J. M. Law, D. I. Gorbunov, G. Chanda, S. Krämer, M. Horvatić, R. K. Kremer, J. Wosnitza, and G. L. J. A. Rikken, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 247201 (2017).
18. K. Y. Povarov, V. K. Bhartiya, Z. Yan, and A. Zheludev, *Phys. Rev. B* **99**, 024413 (2019).
19. V. K. Bhartiya, K. Y. Povarov, D. Blosser, S. Bettler, Z. Yan, S. Gvasaliya, S. Raymond, E. Ressouche, K. Beauvois, J. Xu, F. Yokaichiya, and A. Zheludev, *Phys. Rev. Research* **1**, 033078 (2019).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
21. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, *УФН* **130**, 39 (1980).
22. С. Л. Гинзбург, *ФТТ* **12**, 1805 (1970).
23. Y. Y. Hsieh and M. Blume, *Phys. Rev. B* **8**, 2684 (1972).
24. В. М. Матвеев, *ЖЭТФ* **65**, 1626 (1973).
25. Э. Л. Нагаев, *УФН* **136**, 61 (1982) [*E. L. Nagaev, Sov. Phys. Usp.* **25**, 31 (1982)].
26. V. M. Loktev and V. S. Ostrovskii, *Low Temp. Phys.* **20**, 775 (1994).

27. Ф. П. Онуфриева, ЖЭТФ **80**, 2372 (1981).
28. Ф. П. Онуфриева, ЖЭТФ **89**, 2270 (1988).
29. А. М. Переломов, УФН **123**, 23 (1977).
30. A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, Berlin (1986).
31. B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003).
32. N. Papanikolaou, Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).
33. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, J. Magn. Magn. Mater. **325**, 125 (2013).
34. A. Läuchli, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).
35. A. Smerald and N. Shannon, Phys. Rev. B **88**, 184430 (2013).
36. G. Fáth and J. Sólyom, Phys. Rev. B **44**, 11836 (1991).
37. Y. Xian, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 7489 (1993).
38. В. И. Марченко, Письма в ЖЭТФ **48**, 387 (1988).
39. О. А. Космачев, Ю. А. Фридман, Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, ЖЭТФ **147**, 320 (2015).
40. Ф. Н. Клевец, Е. А. Неклюдов, Ю. А. Фридман, ФТТ **60**, 1945 (2018).
41. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, A. K. Kolezhuk, and B. A. Ivanov, Phys. Rev. Lett. **106**, 097202 (2011).
42. A. V. Chubukov, K. I. Ivanova, P. Ch. Ivanov, and E. R. Korutcheva, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 2665 (1991).
43. R. Barnett, A. Turner, and E. Demler, Phys. Rev. Lett. **97**, 180412 (2006).
44. A. M. Turner, R. Barnett, E. Demler, and A. Vishwanath, Phys. Rev. Lett. **98**, 190404 (2007).
45. R. Barnett, A. Turner, and E. Demler, Phys. Rev. A **76**, 013605 (2007).
46. C. Wu, J.P. Hu, and S.C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **91**, 186402 (2003).
47. C. Wu, Mod. Phys. Rev. Lett. B **20**, 1707 (2006).
48. C. Wu, Phys. Rev. Lett. **95**, 266404 (2005).
49. H.-H. Tu, G.-M. Zhang, and L.Yu., Phys. Rev. B **74**, 174404 (2006).
50. О. А. Космачев, Ю. А. Фридман, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **105**, 444 (2017).
51. Е. В. Орленко, Ф. Е. Орленко, ФТТ **58**, 1338 (2016).
52. О. А. Космачев, Ю. А. Фридман, ФТТ **55**, 678 (2013).
53. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
54. В. В. Вальков, ТМФ **76**, 143 (1988).
55. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Издательство СО РАН, Новосибирск (2001).
56. E. A. Yarygina, Ph. N. Klevets, O. A. Kosmachev, Yu. A. Fridman, and V. Khovaylo, J. Magn. Magn. Mater. **565**, 170238 (2020).
57. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложным обменным взаимодействием*, Наука, Москва (1988).