

ДИНАМИЧЕСКИЕ И СТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХПОДРЕШЕТОЧНОГО АНИЗОТРОПНОГО НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО МАГНЕТИКА

*Е. А. Ярыгина, Я. Ю. Матюнина, Ф. Н. Клевец, Ю. А. Фридман**

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

Поступила в редакцию 26 июня 2019 г.,
после переработки 4 июля 2019 г.
Принята к публикации 5 июля 2019 г.

В приближении среднего поля исследовано влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния и динамические свойства негейзенберговского магнетика с $S = 1$. Показано, что в отличие от изотропной модели, учет одноионной анизотропии приводит к изменению типа фазовых переходов между дипольными и нематическими фазами, а также к исчезновению $SU(3)$ -точки. Построена фазовая диаграмма.

DOI: 10.1134/S0044451019120149

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что в общем случае изотропное обменное взаимодействие для магнетика со спином $S > 1/2$ не ограничивается билинейным взаимодействием и может включать высшие инварианты типа $(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2)^n$ со значениями n от 1 до $2S$, где S — величина спина магнитного иона [1–13]. В частности, общий гамильтониан для изотропного обменного взаимодействия двух единичных спинов содержит слагаемые $(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2)$ и $(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2)^2$. Магнетики, которые описываются таким гамильтонианом, принято называть негейзенберговскими магнетиками [1, 6, 11–15].

Такая модель обладает весьма интересными физическими свойствами, отсутствующими для гейзенберговских магнетиков, обменное взаимодействие которых содержит только билинейное по спиновым операторам слагаемое. В модели изотропного негейзенберговского магнетика возможно динамическое сокращение спина при произвольных соотношениях параметров билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, что приводит к принципиальной невозможности использования уравнения Ландау–Лифшица для макроскопического описания динамики магнитоупорядоченной системы. На протяжении последних двадцати лет такие состоя-

ния активно изучались в кристаллических магнетиках [5, 6], включая низкоразмерные системы [12–15]. Судя по всему, такие состояния обнаружены для низкоразмерного магнетика LiCuVO_4 [16, 17]. Исследовались взаимодействия элементарных возбуждений и их релаксации [18–20], нелинейная динамика под действием лазерного импульса [21, 22] и солитонные состояния [12, 23, 24]. Такие системы активно исследуются как в магнетиках с простейшей кристаллической решеткой (квадратной), так и в более сложных случаях, например, в магнетиках с треугольной решеткой [25–33] и в более сложных системах типа зиг-заг [34].

Учет немалого биквадратичного взаимодействия приводит к реализации спиновых структур тензорного типа, так называемых нематических фаз. В работе [35] отмечалось, что учет биквадратичного обменного взаимодействия, например в ферропниктидах LaFeAsO , позволяет объяснить некоторые особенности спектров магнонов и фазовых переходов. Кроме того, в данной системе константа биквадратичного обменного взаимодействия может превосходить константу билинейного обмена.

В нематической фазе в основном состоянии магнитного кристалла все средние значения проекций спиновых операторов равны нулю, а параметром порядка является не магнитный момент, а компоненты тензора квадрупольного момента [1–10]. Спонтанное нарушение симметрии в нематической фазе определяется квадрупольными средними типа $\langle S^i S^j +$

* E-mail: yuriiifridman@gmail.com

$+S^j S^i)/2$, геометрическим образом которых является эллипсоид с главными осями, ориентированными вдоль некоторых направлений $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$, и полуосями, равными $\langle(S^x)^2\rangle, \langle(S^y)^2\rangle, \langle(S^z)^2\rangle$, связанными соотношением [5, 12]

$$\langle(S^x)^2\rangle + \langle(S^y)^2\rangle + \langle(S^z)^2\rangle = S(S + 1).$$

Необходимо отметить, что изотропная модель, в которой учитываются все спиновые инварианты, существенно отличается от часто обсуждаемой модели негейзенберговских магнетиков с сильной одноионной анизотропией типа $\beta(S^z)^2$ [6, 36–42]. Как было показано в работе [42], при $\beta/2J > 1$ (β и J — соответственно константы одноионной анизотропии и билинейного взаимодействия), даже при абсолютном нуле температур, в системе возникает квантовое сокращение спина на узле. В подобных магнетиках присутствуют интересные особенности как статических, так и динамических свойств. В частности, как уже отмечалось, даже при $T = 0$ существуют состояния с намагниченностью, существенно меньшей номинальной или даже равной нулю, а также особые типы динамических возбуждений, так называемые продольные магноны, в которых намагниченность меняется по модулю [43]. Следовательно, в магнетиках с большой одноионной анизотропией возможен случай, когда состояние с $\langle\mathbf{S}\rangle = 0$ является основным состоянием. Такие фазы получили название квадрупольных [44], однако симметрия квадрупольных средних в них чисто одноосная, т. е. одна из главных осей квадрупольного эллипсоида параллельна оси анизотропии, а сам эллипсоид является одноосным и вырождается в эллипс с эксцентриситетом, равным единице. Поэтому эти состояния не являются нематическими (в строгом смысле этого термина).

Таким образом, в анизотропных негейзенберговских магнетиках эти два фактора (одноионная анизотропия и биквадратичный обмен) могут действовать одновременно, формируя особенности как основного состояния, так и спектральных свойств.

Если система предполагает возможность разбиения на несколько подрешеток, то ситуация становится существенно сложнее. Как было показано в ряде работ [14, 45, 46], для двухподрешеточного изотропного негейзенберговского магнетика кроме дипольной антиферромагнитной фазы при определенном соотношении обменных интегралов может реализовываться ортогонально-нематическое состояние, в котором средний магнитный момент на узле в каждой подрешетке равен нулю, а главные оси квад-

рупольных эллипсоидов подрешеток ортогональны [14, 45, 46].

Целью данной работы является исследование фазовых состояний и динамических свойств легкоплоскостного анизотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 1$, предполагающего возможность разбиения на две подрешетки.

2. ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ МОДЕЛИ

Рассмотрим легкоплоскостной магнетик со спином $S = 1$. Это минимальное значение спина, при котором в системе возможно существование как биквадратичного обменного взаимодействия, так и одноионной анизотропии. Поскольку мы рассматриваем произвольные соотношения для констант билинейного и биквадратичного обменного взаимодействия, в том числе и такие, когда они принимают отрицательные значения, рассматриваемая модель допускает разбиение на две подрешетки, например, при рассмотрении антиферромагнитного (АФМ) упорядочения. Гамильтониан такой системы имеет вид

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

где $S_{n_i}^j$ — j -я компонента спинового оператора в n -м узле i -й подрешетки, J и K — константы соответственно билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий, $\beta > 0$ — константа одноионной анизотропии типа легкая плоскость.

Дальнейшее рассмотрение будем проводить для случая низких температур ($T \ll T_C$, T_C — температура Кюри). Кроме того, мы предполагаем, что константа одноионной анизотропии фиксирована, но возможно изменение как величины, так и знака обменных интегралов J и K , т. е. возможны ситуации $\beta < J, K$ и $\beta > J, K$.

Внешнее магнитное поле в рассматриваемой модели равно нулю, а изменение фазовых состояний связано с изменением как величины, так и знака обменных интегралов (и их соотношения) [5, 11, 14, 45, 46]. Вариация материальных параметров системы может происходить, например, путем изменения концентрации магнитных ионов или приложения внешних механических напряжений, приводящих к деформации кристаллической решетки.

В контексте данной работы не принципиально, каким образом происходит изменение материальных констант в рассматриваемой модели.

Поскольку обменные взаимодействия в гамильтониане (1) инвариантны относительно поворотов магнитных моментов, магнитная анизотропия типа легкая плоскость приводит к ориентации магнитных моментов подрешеток в плоскости xy . Для упрощения дальнейших математических вычислений при расчете спектров элементарных возбуждений в одной из подрешеток (для определенности – второй) совершим поворот вокруг оси z ,

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

на угол φ в спиновом пространстве, а затем совершим еще один унитарный поворот вокруг оси y на угол $\pi/2$ так, чтобы ось z стала осью квантования. Дальнейшие вычисления будем проводить, используя операторы Стивенса [47], поскольку они являются генераторами группы $SO(3)$ симметрии исследуемой системы. Тогда гамильтониан исследуемой системы принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{H}(\varphi) = & -\frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2} \left(J_{n_1, n_2} - \frac{K_{n_1, n_2}}{2} \right) \times \\ & \times [S_{n_1}^x S_{n_2}^y + (S_{n_1}^y S_{n_2}^y + S_{n_1}^z S_{n_2}^z) \cos \varphi] - \\ & - \frac{1}{4} \sum_{n_1, n_2} K_{n_1, n_2} \left[\frac{1}{12} \tilde{O}_{2n_1}^0 \tilde{O}_{2n_2}^0 (1 + 3 \cos 2\varphi) + \right. \\ & + \frac{1}{4} \tilde{O}_{2n_1}^2 \tilde{O}_{2n_2}^2 (3 + \cos 2\varphi) + \\ & + \frac{1}{4} (\tilde{O}_{2n_1}^0 \tilde{O}_{2n_2}^2 + \tilde{O}_{2n_1}^2 \tilde{O}_{2n_2}^0) (\cos 2\varphi - 1) + \\ & \left. + \tilde{O}_{2n_1}^{yz} \tilde{O}_{2n_2}^{yz} \cos 2\varphi + (\tilde{O}_{2n_1}^{xz} \tilde{O}_{2n_2}^{xz} + \tilde{O}_{2n_1}^{xy} \tilde{O}_{2n_2}^{xy}) \cos \varphi \right] + \\ & + \frac{\beta}{2} \sum_{n_i, i=1,2} (S_{n_i}^x)^2, \quad (2) \end{aligned}$$

где O_2^t – операторы Стивенса ($t = 0, 2, ij; i, j = x, y, z$), связанные со спиновыми операторами следующим образом:

$$\begin{aligned} O_{2n}^0 = & 3(S_n^z)^2 - S(S+1), \quad O_{2n}^2 = \frac{1}{2} [(S_n^+)^2 + (S_n^-)^2], \\ O_{2n}^{ij} = & S_n^i S_n^j + S_n^j S_n^i \quad (i \neq j). \end{aligned}$$

Операторы \tilde{O}_2^t связаны с поворотами спиновой системы и имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{O}_2^0 = & \frac{1}{2} (3O_2^0 - O_2^2), \quad \tilde{O}_2^2 = \frac{1}{2} (O_2^0 + O_2^2), \\ \tilde{O}_2^{xz} = & -O_2^{xz}, \quad \tilde{O}_2^{yz} = O_2^{xy}, \quad \tilde{O}_2^{xy} = -O_2^{yz}. \end{aligned}$$

Выделяя в гамильтониане (2) средние поля, связанные как с дипольными параметрами порядка $\langle S^z \rangle$, так и с квадрупольными ($q_2^t = \langle O_2^t \rangle$), получим одноузельный гамильтониан

$$\hat{H}_0 = \beta(S^x)^2 - \bar{H}S^z - B_2^0 O_2^0 - B_2^2 O_2^2, \quad (3)$$

где $\bar{H} = (J_0 - K_0/2)\langle S^z \rangle$,

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

J_0 и K_0 – нулевые фурье-компоненты констант соответственно билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий. При этом мы учли, что недиагональные компоненты тензора квадрупольных моментов q_2^t ($t = xy, yz, xz$) равны нулю, а отличны от нуля только q_2^0 и q_2^2 .

Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом (3), получим энергии уровней,

$$\begin{aligned} E_1 = & \frac{\beta}{2} (1 - \sin 2\theta) - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta, \\ E_0 = & \beta + 2B_2^0, \\ E_{-1} = & \frac{\beta}{2} (1 + \sin 2\theta) + \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 + B_2^2 \sin 2\theta, \end{aligned} \quad (4)$$

и собственные функции магнитного иона,

$$\begin{aligned} |\psi(1)\rangle = & \cos \theta |1\rangle + \sin \theta |-1\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |0\rangle, \\ |\psi(-1)\rangle = & -\sin \theta |1\rangle + \cos \theta |-1\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Параметр θ является параметром обобщенного u - v -преобразования и определяется следующим трансцендентным уравнением:

$$(\bar{H} + \eta) \cos \theta = \left(B_2^2 + \frac{\beta}{2} \right) \sin \theta,$$

где $\eta = \sqrt{\bar{H}^2 + (B_2^2 - \beta/2)^2}$.

На базисе собственных функций одноузельного гамильтониана (5) построим операторы Хаббарда $X^{M'M} = |\psi(M')\rangle\langle\psi(M)|$ [48–51], описывающие переход магнитного иона из состояния M в состояние M' . В терминах операторов Хаббарда гамильтониан (3) является диагональным, $\hat{H}_0 = \sum_M E_M X^{MM}$, а операторы Хаббарда связаны со спиновыми операторами следующим образом:

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

$$S_n^- = (S_n^+)^\dagger.$$

Из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда определим как векторные (дипольные), так и тензорные (квадрупольные) параметры порядка:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \cos 2\theta \langle X^{11} - X^{-1-1} \rangle, \\ q_2^0 &= 3 \langle X^{11} + X^{-1-1} \rangle - 2, \\ q_2^2 &= \sin 2\theta \langle X^{11} - X^{-1-1} \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\langle X^{ij} \rangle = 0, \quad i \neq j, \quad \langle X^{ii} \rangle = \exp(-E_i/T)/Z,$$

$$Z = \sum_i \exp(-E_i/T)$$

— статистическая сумма, E_i — энергии уровней магнитного иона, T — температура в энергетических единицах.

Из соотношений (4) следует, что энергия основного уровня магнитного иона равна E_1 . Тогда $\langle X^{11} \rangle = 1$, $\langle X^{-1-1} \rangle = 0$ и параметры порядка системы имеют вид

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

Поскольку мы рассматриваем случай низких температур, свободная энергия системы (в расчете на один узел) в приближении среднего поля совпадает с энергией E_1 основного уровня магнитного иона (см. формулу (4)). Таким образом, для плотности свободной энергии получаем

$$F = \frac{\beta}{2} (1 - \sin 2\theta) - \bar{H} \cos 2\theta - B_2^0 - B_2^2 \sin 2\theta. \quad (7)$$

Выражение (7) зависит как от материальных параметров магнетика, так и от параметра θ и угла поворота φ второй подрешетки. Минимизируя плотность свободной энергии по параметрам θ и φ , можно определить стабильные фазовые состояния при различных соотношениях материальных параметров.

Так, при $J_0 > K_0 > 0$ и $\theta = \varphi = 0$ энергия основного уровня магнитного иона есть E_1 , параметры порядка равны

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 0, \quad (8)$$

а волновая функция основного состояния есть $|\psi\rangle = |1\rangle$. Очевидно, что такое соотношение параметров соответствует одноподрешеточному ферромагнитному (ФМ) упорядочению. Кроме того, в этом состоянии квадрупольные средние определяются выражениями

$$\langle\langle S^z \rangle\rangle = 1, \quad \langle\langle S^x \rangle\rangle = \langle\langle S^y \rangle\rangle = \frac{1}{2}.$$

Следовательно, геометрическим образом квадрупольных моментов в спиновом пространстве является эллипсоид вращения. Симметрия этого эллипсоида определяется направлением магнитного момента, которое совпадает с направлением главной оси эллипсоида. Необходимо отметить, что соотношения (8) являются точными в изотропном случае. В рассматриваемой модели эти соотношения справедливы, поскольку, как хорошо известно, ФМ-упорядочение определяется обменным взаимодействием, и, следовательно, в этом состоянии $\beta < J_0$.

Если же $J_0 < K_0$, но $J_0 > 0$, $K_0 > 0$, то минимуму плотности свободной энергии (7) соответствуют $\theta = \pi/4$, $\varphi = 0$. В этом случае, как и в ФМ-фазе, основным энергетическим уровнем будет E_1 , а волновой функцией основного состояния является

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |-1\rangle).$$

Параметры порядка в этом случае равны

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = 1, \quad q_2^2 = 1. \quad (9)$$

Очевидно, что основное состояние и параметры порядка соответствуют нематическому состоянию [11–14]. Квадрупольные средние в нематической фазе имеют следующий вид:

$$\langle\langle (S^z)^2 \rangle\rangle = 1, \quad \langle\langle (S^x)^2 \rangle\rangle = 1, \quad \langle\langle (S^y)^2 \rangle\rangle = 0,$$

откуда следует, что геометрическим образом тензора квадрупольных моментов является вырожденный квадрупольный эллипсоид — плоский диск, лежащий в плоскости zx . При этом вектор-директор перпендикулярен плоскости этого диска.

Из неравенства нулю квадрупольного параметра порядка ($q_2^2 \neq 0$) следует, что в нематической фазе энергия одноионной анизотропии, так же как и в ФМ-фазе, существенно меньше энергий обменных взаимодействий: $\beta < J_0, K_0$.

Предположим теперь, что константа билинейного обменного взаимодействия отрицательна ($J_0 < 0$). В этом случае системе выгодно разбиться на две подрешетки.

Если же в таком двухподрешеточном магнетике гейзенберговский обмен (по модулю) превосходит биквадратичное обменное взаимодействие ($|J_0| > |K_0|$), то, как показывает анализ свободной энергии, параметры θ и φ принимают следующие значения: $\theta = 0$, а $\varphi = 0$ или $\varphi = \pi$. Два различных значения угла φ соответствуют первой и второй подрешеткам. Следовательно, $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |-1\rangle$ —

волновые функции подрешеток в основном состоянии. Параметры порядка в подрешетках имеют вид

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 1, & q_{2(1)}^0 &= 1, & q_{2(1)}^2 &= 0, \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= -1, & q_{2(2)}^0 &= 1, & q_{2(2)}^2 &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Такие параметры порядка соответствуют АФМ-упорядочению в магнетике.

Очевидно, что и в этой фазе константа одноионной анизотропии не превосходит обменных интегралов.

Рассмотрим теперь случай $|J_0| < |K_0|$, причем K_0 и J_0 меньше нуля. Эта ситуация также соответствует двухподрешеточному магнетизму; при этом параметры θ и φ принимают следующие значения в подрешетках:

$$\theta_1 = \frac{\pi}{4}, \quad \theta_2 = -\frac{\pi}{4}, \quad \varphi_1 = \varphi_2 = \frac{\pi}{2}.$$

Таким образом, векторы основного состояния, $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$, в каждой из подрешеток имеют вид

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

и ортогональны друг другу ($\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$).

Параметры порядка для первой и второй подрешеток равны

$$\begin{aligned} \langle S_{(1)}^z \rangle &= 0, & q_{2(1)}^0 &= 1, & q_{2(1)}^2 &= 1, \\ \langle S_{(2)}^z \rangle &= 0, & q_{2(2)}^0 &= 1, & q_{2(2)}^2 &= -1. \end{aligned} \quad (11)$$

Квадрупольные средние в каждой из подрешеток имеют вид

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

Такой вид квадрупольных средних говорит о том, что их вектор-директоры ортогональны, т.е. данное состояние является ортогонально-нематическим [14, 45, 46]. При этом в первой подрешетке квадрупольный эллипсоид имеет форму диска в плоскости zx , а во второй подрешетке диск лежит в плоскости zy . Поскольку плоскости zx и zy ортогональны, данное фазовое состояние и получило название ортогональный нематик (рис. 1).

3. АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Для анализа элементарных возбуждений в магнетике с $S = 1$ воспользуемся методом функций

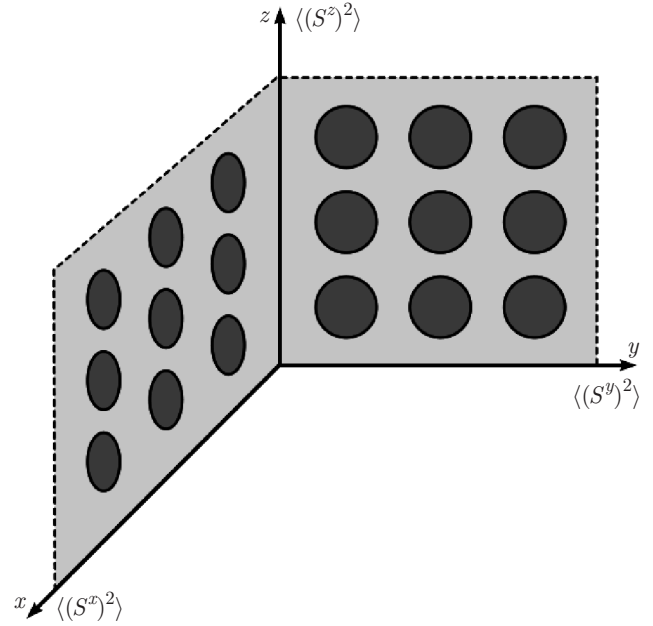


Рис. 1. Ориентация геометрических образов тензорных параметров порядка в спиновом пространстве для первой (zx) и второй (zy) подрешеток в ортогонально нематической фазе

Грина для операторов Хаббарда [49, 51]. В нашем случае этот подход требует громоздких вычислений, но в некотором приближении допускает аналитическое вычисление спектров во всей области параметров модели. Энергетический спектр возбуждений сильнокоррелированных систем определяются полюсами функции Грина [2, 52–55]. В качестве малого параметра, позволяющего применить теорию возмущений, используется, как и в работе [47], обратный радиус взаимодействия.

Определим мацубаровские функции Грина следующим образом [53]:

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

где \hat{T} — оператор Вика, $\tilde{X}_n^\lambda(\tau) = e^{\hat{H}\tau} X_n^\lambda e^{-\hat{H}\tau}$ — оператор Хаббарда в гейзенберговском представлении, а усреднение проводится с полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}$, $\lambda = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{2S+1}, M_1, M_2, \dots, M_{2S+1}$, где α — корневые векторы, определяемые алгеброй операторов Хаббарда [49, 51].

Дальнейшие вычисления будем проводить в приближении среднего поля, поэтому нам понадобится только «поперечная» часть обменного гамильтониана, \hat{H}_{int}^\perp , которую можно представить в виде

$$\hat{H}_{int}^\perp = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{n, n' \\ \lambda, \lambda'}} [c(\lambda), \hat{A}_{nn'} c(\lambda')] X_n^\lambda X_{n'}^{\lambda'},$$

где компоненты вектора $\mathbf{c}(\lambda)$ определяются из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда, а матрицу $\hat{A}_{nn'}$ можно представить в виде $\hat{A}_{nn'} = \hat{A}_{nn'}^{(3)} \oplus \hat{A}_{nn'}^{(5)}$. Тогда фурье-образ системы уравнений для функций Грина можно записать как

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

и фурье-компоненты $G^{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}, \omega_n)$ отличны от нуля только для четных частот $\omega_n = 2\pi nT$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а неприводимые по Ларкину графики могут быть следующих типов [49]:

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

Однако в нулевом приближении по обратному радиусу взаимодействия система уравнений для функций Грина существенно упрощается, поскольку в этом приближении

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

где $G_0^\alpha(\omega_n) = (i\omega_n + \alpha\mathbf{E})^{-1}$ — нулевая функция Грина, $b(\alpha) = \langle \alpha\mathbf{X} \rangle_0$ — концевой множитель. Таким образом, в нулевом приближении по обратному радиусу взаимодействия дисперсионное уравнение имеет вид

$$\det \| \delta_{ij} + x_{ij} \| = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, 8, \quad (12)$$

где $x_{ij} = G_0^\alpha(\omega_n) b(\alpha) c_i^\dagger(\alpha) A_{jk} c_k(-\alpha)$.

Поскольку техника операторов Хаббарда позволяет точно учесть одноузельные корреляторы, дисперсионное уравнение справедливо при произвольных соотношениях обменных интегралов, т. е. в различных фазовых состояниях [48–51].

После обсуждения общих подходов и формулировки проблемы перейдем к конкретному анализу спиновых состояний и спектров элементарных возбуждений в различных фазах магнетика, описываемого гамильтонианом (1).

Рассмотрим систему в ФМ-фазе. Как отмечалось ранее, этому фазовому состоянию отвечают параметры $\theta = \varphi = 0$. Параметры порядка, характеризующие ФМ-фазу, имеют вид (8). Основным энергетическим уровнем в ФМ-состоянии является уровень с энергией E_1 , а волновая функция основного состояния есть вектор-состояние с максимальной проекцией спина, $|\psi\rangle = |1\rangle$. Как видно из выражений (8),

квадрупольное среднее q_2^2 равно нулю, а величина q_2^0 является константой и не влияет на динамику системы. Следовательно, в ФМ-фазе для системы со спином $S = 1$ и малой одноионной анизотропией, симметрия квадрупольных средних полностью определяется симметрией магнитного момента.

Используя общее дисперсионное уравнение (12), определим спектры возбуждений в ФМ-фазе. В низкотемпературном приближении в системе будут существовать две магнонные ветви возбуждений [2], спектры которых имеют вид

$$\varepsilon_1(k) = 2J_0 - K_0 - K(k), \quad (13)$$

$$\varepsilon_2(k) = J(k) - J_0 + \frac{\beta}{2}. \quad (14)$$

Из выражений (13) и (14) видно, что при $\beta \rightarrow 0$ спектры магнонов переходят в известные результаты для негейзенберговского изотропного магнетика с $S = 1$ [14].

Ветвь $\varepsilon_2(k)$ — «поперечная» мода, характерная для ферромагнетика. Анализ показывает, что в этой моде «поперечные» колебания спиновой плотности связаны с поворотами направления главной оси квадрупольного эллипсоида (т. е. в данном случае направлением магнитного момента). Мода $\varepsilon_1(k)$ описывает «продольную» динамику спина [14, 21, 44]. Эта мода включает продольные колебания модуля вектора намагниченности, направление которого остается параллельным главной оси эллипсоида квадрупольных моментов, деформацию эллипсоида и его поворот вокруг намагниченности.

Рассмотрим теперь устойчивость ФМ-фазы относительно произвольных возмущений, которые соответствуют спектрам (13) и (14). Из условия обращения в нуль энергетической щели в спектре (13) при малых волновых векторах ($k \rightarrow 0$) и вблизи края зоны Бриллюэна ($k \rightarrow \pi$) получим, что мода (13) теряет устойчивость при

$$J_0 = K_0(k \rightarrow 0), \quad J_0 = 0(k \rightarrow \pi). \quad (15)$$

Поскольку мы рассматриваем систему с малой одноионной анизотропией, можно предположить, что данные результаты должны быть близки к случаю изотропного негейзенберговского магнетика, для которого линия $J_0 = K_0$ является линией потери устойчивости ФМ-фазы при переходе в иное, одноподрешеточное состояние (как увидим ниже — в нематическое), а линия $J_0 = 0$ — линия потери устойчивости при переходе в двухподрешеточное состояние (ортогонально-нематическое состояние (ОН) [14, 45, 46]). Таким образом, в случае малой

одноионной анизотропии ФМ-фаза граничит с нематической и ОН-фазами.

Рассмотрим теперь систему в нематической фазе. В этой фазе параметр $\theta = \pi/4$, а $\varphi = 0$. Параметры порядка, характеризующие нематическую фазу, имеют вид (9). Основным энергетическим уровнем является E_1 , при этом возбужденные энергетические уровни вырождены, $E_0 = E_{-1}$, а волновая функция основного состояния

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |-1\rangle).$$

Как видно из соотношений (9), параметры порядка таковы, что среднее значение магнитного момента на узле равно нулю, но не равны нулю компоненты тензора квадрупольных моментов. Как уже отмечалось ранее, геометрическим образом этого фазового состояния в спиновом пространстве является эллипсоид вращения, форма которого принципиально отличается от геометрического образа ФМ-фазы.

Используя общее дисперсионное уравнение (12), определим спектры возбуждений в нематической фазе. Из-за вырождения энергетических уровней, в нематической фазе две ветви элементарных возбуждений совпадают. В приближении ближайших соседей эти спектры имеют вид

$$\varepsilon_{1,2}^2(k) = \left[K_0 - K(k) + \frac{\beta}{2} \right] \times \left[K_0 + K(k) - 2J(k) + \frac{\beta}{2} \right]. \quad (16)$$

Прежде всего отметим, что при $\beta = 0$ спектры (16) в точности совпадают со спектрами элементарных возбуждений изотропного негеизенберговского магнетика с $S = 1$ в нематической фазе [14]. Симметрия нематического состояния определяется квадрупольным эллипсоидом. Следовательно, ветви $\varepsilon_{1,2}(k)$ описывают колебания квадрупольного эллипсоида, что и определяет двукратное вырождение этих мод.

Анализ спектров (16) показывает, что в длинноволновом пределе, т. е. при $k \rightarrow 0$, спектры (16) «смягчаются» при

$$J_0 = K_0 + \frac{\beta}{4}, \quad (17)$$

следовательно, это условие определяет линию фазового перехода из нематической в ФМ-фазу.

На краю зоны Бриллюэна спектр (16) также становится неустойчивым на линии

$$J_0 = -\frac{\beta}{4}, \quad (18)$$

т. е. энергетическая щель в спектре (16) при $k \rightarrow \pi$ обращается в нуль при отрицательных значениях константы билинейного обмена, что соответствует реализации двухподрешеточной структуры, т. е. переходу в состояние с АФМ-упорядочением.

Необходимо отметить, что выражение (18) при $\beta = 0$ также переходит в известное выражение для линии фазового перехода из нематической в АФМ-фазу изотропного негеизенберговского магнетика с $S = 1$ [14].

Как уже отмечалось ранее, рассматриваемая система предполагает возможность разбиения на две подрешетки. Это означает, что константы обменных взаимодействий могут менять знак. Рассмотрим вначале случай, когда константа билинейного обменного взаимодействия отрицательна, но по модулю превосходит константу биквадратичного обмена ($J_0 < 0$, $|J_0| > K_0$). В этом случае параметр $\theta = 0$, а $\varphi = 0$ или $\varphi = \pi$. Два различных значения угла φ соответствуют разным подрешеткам. Основным энергетическим уровнем в АФМ-фазе является E_1 , а волновые функции подрешеток в основном состоянии равны соответственно $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = |-1\rangle$. Параметры порядка в подрешетках имеют вид (10). В этом случае решения дисперсионного уравнения (12) имеют следующий вид:

$$\varepsilon_1^2(k) = (2J_0 - K_0)^2 - K^2(k), \quad (19)$$

$$\varepsilon_2^2(k) = \left(J_0 - K_0 - \frac{\beta}{2} \right)^2 - [J(k) - K(k)]^2. \quad (20)$$

В изотропном случае эти выражения совпадают с известными результатами работы [14]. Спектр (19) описывает «продольную» динамику спина, обусловленную его квантовыми сокращениями. Спектр (20) — «поперечную», описывающую спиновые волны в подрешетках.

В длинноволновом пределе и на границе зоны Бриллюэна оба спектра ведут себя одинаково. Из обращения в нуль энергетической щели в спектре (19) получим, что линии фазового перехода из АФМ-фазы в нематическую фазу соответствует $J_0 = 0$, а линии фазового перехода из АФМ-фазы в ОН-фазу — $J_0 = K_0$. Энергетическая щель в спектре (20) обращается в нуль при $J_0 = K_0 + \beta/4$, что соответствует линии, на которой ориентации намагниченностей в обеих подрешетках совпадают, но это решение нефизично, так как при любой отличной от нуля анизотропии в рассматриваемой системе нет прямого фазового перехода из АФМ-фазы в ФМ-фазу.

Наконец, рассмотрим спектры элементарных возбуждений в ОН-фазе, т.е. при $K_0 < 0$, $|J_0| < |K_0|$. В этой фазе параметры θ и φ равны

$$\theta_1 = \frac{\pi}{4}, \quad \theta_2 = -\frac{\pi}{4}, \quad \varphi_1 = \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$$

соответственно для первой и второй подрешеток. Параметры порядка, характеризующие ОН-фазу, имеют вид (11). Основным энергетическим уровнем является E_1 , при этом возбужденные энергетические уровни вырождены, $E_0 = E_{-1}$, а волновые функции основного состояния для первой и второй подрешеток имеют соответственно вид

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

В случае ОН-фазы спектры элементарных возбуждений совпадают из-за вырождения возбужденных состояний магнитного иона и принимают следующий вид:

$$\varepsilon^2(k) = \left(K_0 - \frac{\beta}{2}\right) \left[K_0 - K(k) + 2J(k) - \frac{\beta}{2}\right]. \quad (21)$$

В длинноволновом пределе спектр (21) имеет вид

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

следовательно, линия фазового перехода из ОН-фазы в ФМ-фазу определяется следующим образом:

$$J_0 = \frac{\beta}{4} \quad (k \rightarrow 0). \quad (22)$$

Выражение (22) отличается от выражения для аналогичного фазового перехода, полученного в работе [14] для изотропного магнетика, где линии фазовых переходов из ФМ-фазы в ОН-фазу и наоборот совпадают, и эти фазовые переходы являются вырожденными фазовыми переходами первого рода. В нашем случае учет легкоплоскостной одноионной анизотропии приводит к снятию вырождения.

На краю зоны Бриллюэна спектр (21) имеет вид

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

при этом энергетическая щель в спектре обращается в нуль при отрицательных значениях константы билинейного обмена:

$$J_0 = K_0 - \frac{\beta}{4} \quad (k \rightarrow \pi), \quad (23)$$

что соответствует переходу в АФМ-фазу.

Анализ плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений позволяет построить фазовую диаграмму исследуемой системы. Как было показано, в слабоанизотропном негеизенберговском магнетике с $S = 1$ возможна реализация четырех устойчивых спиновых состояний, два из которых (ФМ и АФМ) характеризуются дипольными параметрами порядка, а два (нематическое и ОН) — квадрупольными средними. Фазовые переходы между этими состояниями являются переходами первого рода, протекающими через смешанные состояния, в которых одновременно присутствуют как дипольные, так и квадрупольные параметры порядка. В изотропном негеизенберговском магнетике реализуются те же четыре фазовых состояния, что и в рассматриваемом случае, но фазовые переходы между ними являются вырожденными переходами первого рода [14]. Таким образом, даже малая, по сравнению с константами обменных взаимодействий, анизотропия снимает вырождение фазовых переходов.

4. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Используя полученные результаты можно построить фазовую диаграмму анизотропного негеизенберговского магнетика с $S = 1$ для различных соотношений между обменными интегралами. Поскольку общий энергетический масштаб в рассмотренном случае нулевой температуры не существует, фактически важны лишь соотношения обменных интегралов. Для наглядного представления результатов можно ввести два независимых параметра, в качестве которых удобно выбрать $x = K_0/\beta$ и $y = J_0/\beta$. Фазовая диаграмма в этих переменных представлена на рис. 2. Как видно из фазовой диаграммы, а также из анализа свободной энергии и спектров возбуждений, все устойчивые фазовые состояния реализуются при условиях $\beta > 0$ и $\beta/4 < |J_0|, |K_0|$, а фазовые переходы между этими фазами являются фазовыми переходами первого рода.

Что касается области, определяемой неравенствами $-1/4 < y < 1/4$ и $y - 1/4 < x < y + 1/4$, представляющей собой параллелограмм, то, как легко видеть, $\beta/4 > |J_0|, |K_0|$ в этой области параметров, т.е. этот параллелограмм можно рассматривать как область с большой анизотропией. Причем эта область параметров обладает следующей особенностью: на отрезке $x = 0$, $-1/4 < y < 1/4$, т.е. $K_0 = 0$, свободные энергии нематической и ОН-фаз совпадают. Следовательно, указанный отрезок ли-

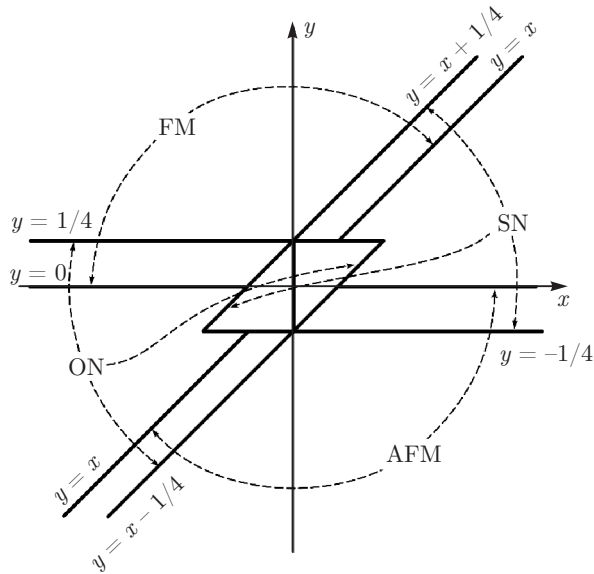


Рис. 2. Фазовая диаграмма, построенная в приведенных переменных $x = K_0/\beta$ и $y = J_0/\beta$. Штриховые стрелки указывают на линии потери устойчивости соответствующих фаз: FM — ферромагнитная фаза; AFM — антиферромагнитная фаза; SN — нематическая фаза; ON — ортогонально-нематическая фаза

нии $K_0 = 0$ является линией фазового перехода из нематической фазы в ОН-фазу. Кроме того, анализ спектров (16) и (21) показывает, что нематическая и ОН-фазы теряют устойчивость на линиях соответственно $y = x + 1/4$ и $y = x - 1/4$. Таким образом, область параметров, ограниченная указанным выше параллелограммом, представляет собой область сосуществования нематической и ОН-фаз, а переход между этими фазами является фазовым переходом первого рода.

Таким образом, можно констатировать, что влияние одноионной анизотропии на фазовые состояния и динамические свойства негейзенберговского магнетика с $S = 1$ сохраняет фазовые состояния, присущие изотропной модели работы [14], но существенно меняет картину фазовых переходов. Так, фазовые переходы между дипольными (ФМ и АФМ) и нематическими (нематическая и ОН) фазами являются фазовыми переходами первого рода, в то время как в изотропной модели эти переходы являются вырожденными переходами первого рода. Кроме того, в рассматриваемом нами случае возникает переход первого рода между нематической и ОН-фазами, тогда как в изотропной модели прямой переход между нематическими состояниями не реализуется. Вместо такого перехода в изотропном случае реализуется так называемая

$SU(3)$ -точка, в которой энергии всех четырех фаз совпадают.

Благодарности. Авторы благодарят Б. А. Иванова и О. А. Космачева за плодотворные дискуссии и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. F. Andreev and I. A. Grishchuk, ЖЭТФ **87**, 467 (1984).
2. С. Л. Гинзбург, ФТТ **12**, 1805 (1970).
3. Y. Y. Hsieh and M. Blume, Phys. Rev. B **8**, 2684 (1972).
4. В. М. Матвеев, ЖЭТФ **65**, 1626 (1973).
5. Э. Л. Нагаев, УФН **136**, 61 (1982).
6. В. М. Локтев, В. С. Островский, ФНТ **20**, 983 (1994).
7. Ф. П. Онуфриева, ЖЭТФ **80**, 2372 (1981).
8. Ф. П. Онуфриева, ЖЭТФ **89**, 2270 (1988).
9. А. М. Переломов, УФН **123**, 23 (1977).
10. A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, Berlin (1986).
11. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Наука, Москва (1988).
12. В. А. Иванов and A. K. Kolezhuk, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003).
13. K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza, and J. Sólyom, Phys. Rev. B **72**, 054433 (2005).
14. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klepets, J. Magn. Magn. Mater. **325**, 125 (2013).
15. A. Läuchli, G. Schmid, and S. Trebst, Phys. Rev. B **74**, 144426 (2006).
16. L. E. Svistov, T. Fujita, H. Yamaguchi, S. Kimura, K. Omura, A. Prokofiev, A. I. Smirnov, Z. Honda, and M. Hagiwara, Письма в ЖЭТФ **93**, 24 (2011).
17. M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, Europhys. Lett. **92**, 37001 (2010).
18. V. G. Bar'yakhtar, V. I. Butrim, A. K. Kolezhuk, and B. A. Ivanov, Phys. Rev. B **87**, 224407 (2013).
19. V. I. Butrim, B. A. Ivanov, A. S. Kuznetsov, and R. S. Khymyn, Low Temp. Phys. **34**, 997 (2008).

20. В. И. Бутрим, Б. А. Иванов, А. С. Кузнецов, Письма в ЖЭТФ **92**, 172 (2010).
21. E. G. Galkina, V. I. Butrim, Yu. A. Fridman, B. A. Ivanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 144420 (2013).
22. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, В. И. Бутрим, ФНТ **40**, 817 (2014).
23. E. G. Galkina, B. A. Ivanov, S. Savel'ev, and F. Nori, Phys. Rev. B **77**, 134425 (2008).
24. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, О. А. Космачев, Ю. А. Фридман, ФНТ **41**, 490 (2015).
25. H. Tsunetsugu and M. Arikawa, J. Phys. Soc. Jpn **75**, 083701 (2006).
26. Yu. A. Sakhratov, L. E. Svistov, P. L. Kuhns, H. D. Zhou, and A. P. Reyes, Phys. Rev. B **94**, 094410 (2016).
27. Yu. A. Sakhratov, J. J. Kweon, E. S. Choi, H. D. Zhou, L. E. Svistov, and A. P. Reyes, Phys. Rev. B **97**, 094409 (2018).
28. T. A. Toth, A. Läuchli, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. B **85**, 140403(R) (2012).
29. A. Läuchli, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).
30. A. Smerald and N. Shannon, Phys. Rev. B **88**, 184430 (2013).
31. M. Arikawa and H. Tsunetsugu, J. Magn. Magn. Mater. **310**, 1308 (2007).
32. Ribhu K. Kaul, Phys. Rev. B **86**, 104411 (2012).
33. T. Momoi, P. Sindzingre, and K. Kubo, Phys. Rev. Lett. **108**, 057207 (2012).
34. P. Corboz, A. M. Läuchli, K. Totsuka, and H. Tsunetsugu, Phys. Rev. B **76**, 220404(R) (2007).
35. A. L. Wysocki, K. D. Belashchenko, and V. P. Antropov, Nature Phys. **7**, 485 (2011).
36. H. H. Chen and P. M. Levy, Phys. Rev. B **7**, 4267 (1973).
37. В. М. Калита, В. М. Локтев, ФНТ **45**, 1450 (2003).
38. Yu. A. Fridman and O. A. Kosmachev, J. Magn. Magn. Mater. **236**, 272 (2001).
39. В. П. Дьяконов, Э. У. Зубов, Ф. П. Онуфриева, А. В. Сайко, И. М. Фита, ЖЭТФ **93**, 1775 (1987).
40. Yu. A. Fridman, D. V. Spirin, and C. N. Alexeyev, J. Magn. Magn. Mater. **234**, 174 (2001).
41. Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман, О. В. Кожемяко, О. А. Космачев, ФНТ **25**, 690 (1999).
42. T. Moriya, Phys. Rev. **117**, 635 (1960).
43. В. С. Островский, ЖЭТФ **91**, 1960 (1986).
44. Б. А. Иванов, Р. С. Химин, ЖЭТФ **131**, 343 (2007).
45. N. Paraniakolaou, Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).
46. A. V. Chubukov, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 1593 (1990).
47. K. Stevens, Proc. Phys. Soc. A **65**, 209 (1952).
48. В. В. Вальков, ТМФ **76**, 143 (1988).
49. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
50. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klepets, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 435 (2008).
51. Ю. Н. Мицай, Ю. А. Фридман, ТМФ **81**, 263 (1989).
52. A. K. Kolezhuk and T. Vekua, Phys. Rev. B **83**, 014418 (2011).
53. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильнокоррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
54. В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наук. думка, Киев (1984).
55. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ **53**, 1089 (1967).