

ДИНАМИЧЕСКИЕ И СТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО АНИЗОТРОПНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА ПРИ НЕНУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

*Е. А. Ярыгина, В. В. Козачек, Я. Ю. Матюнина, О. А. Космачев, Ю. А. Фридман**

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

Поступила в редакцию 22 июля 2023 г.,
после переработки 31 августа 2023 г.
Принята к публикации 31 августа 2023 г.

В приближении среднего поля исследовано влияние как температуры, так и одноионной анизотропии типа «легкая ось» на фазовые состояния и спектры возбуждений негейзенберговского антиферромагнетика с $S = 1$. Определены температурные зависимости векторных и тензорных параметров порядка как в фазах с векторными, так и тензорными параметрами порядка. Исследована зависимость спектров возбуждений от температуры и константы анизотропии. Показано, что при отличной от нуля температуре возникает дополнительная (нерелаксационная) ветвь возбуждений. Исследована температурная зависимость фазовой диаграммы.

DOI: 10.31857/S0044451024010103

1. ВВЕДЕНИЕ

В современных устройствах микроэлектроники и спинтроники активно используются магнитные материалы со скомпенсированным магнитным моментом, т. е. магнетики с антиферромагнитным упорядочением [1]. Такой выбор обусловлен тем, что в антиферромагнетиках наблюдается эффект обменного усиления, что существенно повышает частоту антиферромагнитного резонанса до терагерцового диапазона, а также существенно усиливает другие динамические характеристики системы, такие как предельные скорости доменных стенок [2] и магнитных вихрей [3, 4]. Также спиновый ток существенно влияет на свойства скомпенсированных магнетиков [5–12], и именно это обстоятельство делает их столь привлекательными для использования в спинтронике. При этом одной из наиболее «горячих» тем физики магнетизма является поиск новых фазовых состояний магнитоупорядоченных систем.

Стандартное магнитное упорядочение характеризуется векторным параметром порядка (средним

значением спина $\langle S_n \rangle$ на узле) [13–15], инвариантным относительно обращения времени. Однако кроме стандартного магнитного порядка (ферро-, или антиферромагнитного) существуют системы, такие как редкоземельные диэлектрики [16], сверхпроводники на основе железа [17–21] и ряд других, в которых магнитное упорядочение является более сложным, чем стандартное. К такому упорядочению относится нематическое [14, 15, 22–33]. Это состояние подобно упорядочению в жидких кристаллах [34], откуда, собственно, и произошло название «спиновый нематик». Состояния спинового нематика обнаружены в магнетике LiCuVO_4 [33, 35, 36], редкоземельных магнетиках [37] и низкоразмерных системах (см., например, [30]).

В магнетике с $S = 1$ учет большого биквадратичного обменного взаимодействия вида $K(S_n S_{n'})^2$ приводит к реализации состояния спинового нематика [38]. Спиновый нематик характеризуется спонтанным нарушением вращательной симметрии, которое связано со спиновыми квадрупольными параметрами

$$Q_{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta + S^\beta S^\alpha \rangle - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} S(S+1),$$

$$\alpha, \beta = x, y, z,$$

см. [26–32]. Отметим, что квадрупольные средние, характеризующие нематическое состояние, инвари-

* E-mail: yurifridman@gmail.com

антны относительно обращения времени. Геометрическим образом этих средних является квадрупольный эллипсоид с осями e_1 , e_2 и e_3 , выбранным таким образом, чтобы $\langle S_\alpha S_\beta + S_\beta S_\alpha \rangle = 0$ при $\alpha \neq \beta$, $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, а полуоси последнего равны $\langle S_1^2 \rangle$, $\langle S_2^2 \rangle$ и $\langle S_3^2 \rangle$. При нулевой температуре $T = 0$ квадрупольный эллипсоид вырождается в плоский диск, $\langle S_1^2 \rangle = \langle S_2^2 \rangle = 1$, $\langle S_3^2 \rangle = 0$. При температуре, отличной от нуля, но меньшей критической температуры $T < T_c$, величина $0 < \langle S_3^2 \rangle < \langle S_{1,2}^2 \rangle$, при $T > T_c$ восстанавливается вращательная симметрия $Q_{\alpha\beta}$ [22, 39–42].

В силу изотропности обменных взаимодействий направление оси квантования z произвольно, состояние спинового нематика можно описать введением вектора-директора $\mathbf{n}$, который направлен вдоль оси вращения квадрупольного эллипсоида. Понятно, что состояния с $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ неразличимы, и величина $Q_{\alpha\beta}$ является квантовым аналогом параметра порядка Де Жена, который вводится для обычных нематических жидких кристаллов [34].

В том случае, когда обменный интеграл $J < 0$ отрицателен, для кристаллического магнетика возникают состояния с двумя магнитными подрешетками. Если гейзенберговский обмен превышает биквадратичный, то в магнетике реализуется обычное антиферромагнитное состояние. В противоположном случае ситуация является более интересной и вопрос об основном состоянии является нетривиальным, поскольку состояния с $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ тождественны. В рамках приближения среднего поля можно показать, что в системе реализуется состояние ортогонального нематика, для которого в двух подрешетках направления $\mathbf{n}$ ортогональны [25, 26, 43]. Поскольку существуют три таких направления вектора $\mathbf{n}$, в одномерном случае это состояние трактуется как не полностью упорядоченное (semiorordered) [25], хотя устойчивость двухподрешеточной фазы в рамках приближения среднего поля доказана для квадратной решетки [26], а трехподрешеточного — для треугольной решетки [27, 28], см. рис. 1, 2 в работе [28]. Фазовые переходы ортогональный нематик–ферромагнетик и ортогональный нематик–антиферромагнетик, происходящие при изменении параметра J/K , являются вырожденными переходами первого рода [26].

Большинство исследований спиновых нематиков ограничивалось случаем низких температур при рассмотрении изотропной модели [26–32], либо модели с учетом одноионной анизотропии [43–45]. Как было показано в [43], влияние одноионной анизотропии типа «легкая ось» приводит к существенным

изменениям в динамике спинового нематика даже при $T = 0$, хотя и не изменяет фазовой картины по сравнению с изотропным случаем. Влияние температуры, т.е. тепловых флуктуаций, на свойства спинового нематика изучены недостаточно [40, 46–49]. В работах [47, 48] исследовано влияние температуры на поведение как параметров порядка, так и спектров возбуждений магнетика с большой одноионной анизотропией, сравнимой или даже превышающей константу билинейного обменного взаимодействия. Однако эти модели не описывают состояние спинового нематика. В связи с этим, представляет интерес изучить влияние как одноионной анизотропии типа «легкая ось», так и температуры на поведение параметров порядка и спектров возбуждений при различных соотношениях материальных параметров системы.

2. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ СОСТОЯНИЯ

В качестве модели рассмотрим негейзенберговский антиферромагнетик, в котором кроме билинейного обменного взаимодействия учитывается биквадратичное обменное взаимодействие, а также одноионная анизотропия типа «легкая ось». Спин магнитного иона $S = 1$. Гамильтониан такой модели можно представить в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n,n'} [J(n-n')(S_n \cdot S_{n'}) + K(n-n')(S_n \cdot S_{n'})^2] - \frac{D}{2} \sum_n (S_n^z)^2, \quad (1)$$

где S_n — спиновый оператор в n -ом узле, J, K — константы билинейного и биквадратичного обменных взаимодействий соответственно, $D > 0$ — константа одноионной анизотропии типа «легкая ось». Мы ограничимся рассмотрением решеток, которые допускают разбиение на две эквивалентные подрешетки, например, кубическую или квадратную. Ранее аналогичные модели рассматривались только при $T = 0$. В работах [26, 43] было показано, что в негейзенберговском магнетике с $S = 1$ при $T = 0$ возможна реализация четырех фазовых состояний: ферромагнитная фаза при преобладающем билинейном обменном взаимодействии ($J > K$), при $J < 0$ и $|J| > K$ реализуется антиферромагнитное состояние, если же $J > 0, K > 0$ и $J < K$, в системе устойчива нематическая фаза, и, наконец, ес-

ли $J < 0, K < 0$ и $|J| < |K|$, то реализуется ортогонально-нематическая фаза.

Рассмотрим поведение системы, описываемой гамильтонианом (1), при температуре, отличной от нуля, но не превышающей критическую. Используя диаграммную технику для операторов Хаббарда [26, 44, 45, 50–52], определим энергетические уровни магнитного иона

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

где

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle, \\ B_2^0 &= \frac{K_0}{6} q_2^0, \quad B_2^2 = \frac{K_0}{2} q_2^2, \end{aligned}$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \langle S^z \rangle^2 + \frac{K_0}{12} (q_2^0)^2 + \frac{K_0}{4} (q_2^2)^2,$$

ε — аддитивная константа, не зависящая от спиновых операторов,

$$q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - 2, \quad q_2^2 = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle$$

— компоненты тензора квадрупольных моментов.

Используя связь спиновых операторов с операторами Хаббарда [26, 46, 53, 54]

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

можно определить зависимость векторных и тензорных параметров порядка как от температуры, так и от материальных параметров системы, т. е. от величины обменных интегралов и константы анизотропии:

$$\langle S^z \rangle = \cos 2\theta \frac{\exp(-E_1/T) - \exp(-E_{-1}/T)}{Z}, \quad (3)$$

$$q_2^0 = 3 \frac{\exp(-E_1/T) + \exp(-E_{-1}/T)}{Z} - 2, \quad (4)$$

$$q_2^2 = \sin 2\theta \frac{(\exp(-E_1/T) - \exp(-E_{-1}/T))}{Z}, \quad (5)$$

В (3)–(5) Z — статистическая сумма, которая в данном случае равна

$$Z = \sum_{M=-1,0,1} \exp\left(-\frac{E_M}{T}\right) =$$

$$= \exp\left(\frac{-E_1}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_0}{T}\right) + \exp\left(\frac{-E_{-1}}{T}\right),$$

E_M — энергетические уровни магнитного иона, определяемые выражениями (2). Также в формулах (3)–(5) и выражении для статистической суммы постоянная Больцмана равна единице, а температура измеряется в единицах энергии. θ — параметр u - v -преобразования Боголюбова [47], определяемый соотношением

$$\bar{H} \sin 2\theta = B_2^2 \cos 2\theta.$$

Отметим, что параметр θ явно не зависит от константы одноионной анизотропии, а зависит как от констант обменных взаимодействий, так и параметров порядка $\langle S^z \rangle$ и q_2^2 .

3. ПАРАМЕТРЫ ПОРЯДКА НЕГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

3.1. Ферромагнитная фаза

Как показано в [26, 43], в случае низких температур и преобладающем билинейном обменном взаимодействии ($J > K$) параметр θ равен нулю ($\theta = 0$). С учетом этого, а также того, что низшим энергетическим уровнем магнитного иона при $T \rightarrow 0$ является E_1 , из соотношений (3)–(5) следует

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

Эти значения параметров порядка свидетельствуют о том, что при $J > K$ и $\theta = 0$ в системе реализуется ферромагнитная фаза (FM). Численный анализ системы уравнений (3)–(5) позволяет определить влияние тепловых флуктуаций на поведение параметров системы в FM-фазе. На рис. 1 a, b, c приведены эти результаты для FM-фазы при различных значениях константы одноионной анизотропии.

Все переменные на рис. 1 приведены в отнесенных единицах ($D/J, T/J$). Как видно на рис. 1 a, b, c , среднее значение магнитного момента (на один узел) с ростом температуры уменьшается, что связано с ростом тепловых флуктуаций. Обращение в нуль среднего магнитного момента позволяет определить температуру Кюри (см. рис. 1 a, b, c), которая растет с ростом константы одноионной анизотропии. Это легко понять, если вспомнить, что магнитный момент в ферромагнитной фазе ориентирован вдоль оси легкого намагничивания, и чем больше константа анизотропии, тем больше энергии

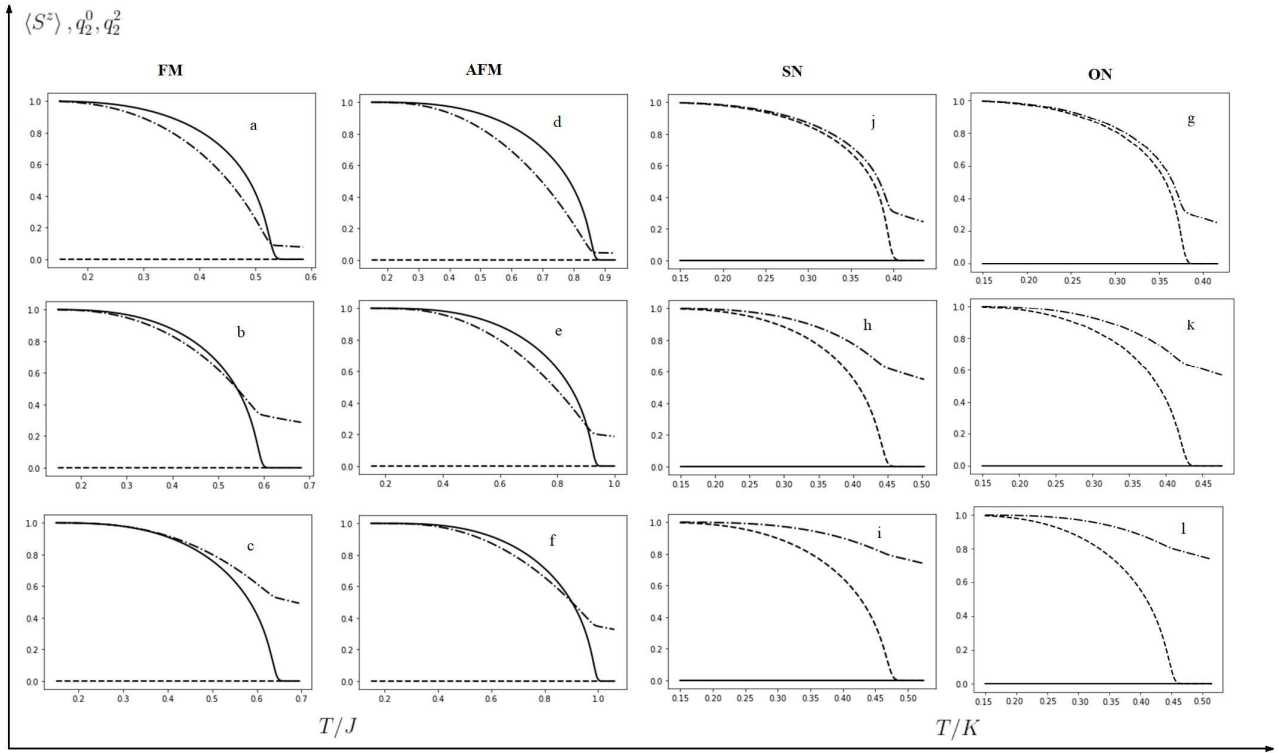


Рис. 1. Зависимости параметров порядка негейзенберговского анизотропного ферромагнетика с $S = 1$ от температуры в различных фазах. $a-c$ — FM-фаза, обменные интегралы $J = 1$, $K = 0.5$, $d-f$ — AFM-фаза, обменные интегралы $J = -1$, $K = 0.5$, $D/J = 0.1$ (a, d), $D/J = 0.5$ (b, e), $D/J = 1.0$ (c, f). $j-i$ — SN-фаза, обменные интегралы $J = 0.2$, $K = 1.0$, $g-l$ — ON-фаза, обменные интегралы $J = -0.3$, $K = -1.9$, $D/K = 0.1$ (j, g), $D/K = 0.5$ (h, k), $D/K = 1.0$ (i, l). Сплошные линии — $\langle S^z \rangle$, штриховые линии — q_2^2 , штрихпунктирные линии — q_2^0

необходимо для разрушения векторного магнитного порядка, а следовательно, и выше критическая температура.

Анализ уравнений (3)–(5) позволяет оценить температуру Кюри в FM-фазе:

$$T_C = \left(J_0 - \frac{K_0}{2} \right) \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Если пренебречь биквадратичным обменным взаимодействием, то это выражение для температуры Кюри соответствует стандартному результату, полученному в приближении среднего поля [55]. Кроме того, необходимо отметить, что полученная нами оценка температуры Кюри неявно зависит от величины константы одноионной анизотропии. Как следует из (3)–(5), а также на рис. 1 a, b, c , при температурах близких к T_C параметр q_2^0 тем сильнее отличается от нуля, чем больше значение константы одноионной анизотропии, поскольку большое значение D стабилизирует ось квадрупольного эллипсоида.

Что касается поведения тензорных параметров порядка в FM-фазе, то оно вполне ожидаемо: параметр $q_2^2 = 0$ во всем температурном интервале, поскольку в этой фазе

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

а параметр q_2^0 отличен от нуля во всем температурном интервале, поскольку он пропорционален $\langle (S^z)^2 \rangle$ и не зависит от ориентации магнитного момента. При $T > T_C$ в изотропном случае вращательная симметрия тензора

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \langle S^\alpha S^\beta + S^\beta S^\alpha \rangle$$

восстанавливается, т. е

$$\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = \frac{2}{3}.$$

Однако как видно на рис. 1 a, b, c , наличие одноионной анизотропии типа «легкая ось» приводит к

тому, что компонента квадрупольного тензора q_2^0 существенно зависит от величины константы анизотропии, что нарушает вращательную симметрию тензора $Q_{\alpha\beta}$ при $T > T_C$.

3.2. Нематическая фаза

Рассмотрим теперь ситуацию, когда биквадратичное обменное взаимодействие является преобладающим, т. е. когда параметр θ в этом случае равен $\pi/4$ [26, 43]. Кроме того, в этом случае при $T \rightarrow 0$ в магнетике реализуется состояние спинового нематика (SN), которое характеризуется следующими параметрами порядка:

$$\langle S^z \rangle = 0, q_2^0 = 1, q_2^2 = 1.$$

Геометрическим образом этого состояния при низких температурах является одноосный эллипсоид с полуосями

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

т. е. бесконечно тонкий диск, лежащий в плоскости zx . Вектор-директор перпендикулярен плоскости диска, т. е. направлен по оси y .

Поведение параметров порядка негейзенберговского ферромагнетика с $S = 1$ как функций температуры и константы анизотропии приведено на рис. 1 j, h, i . Как видно на рис. 1 j, h, i , с ростом температуры квадрупольный параметр q_2^2 становится меньше единицы. Это означает, что $\langle (S^y)^2 \rangle \neq 0$ и, следовательно, квадрупольный эллипсоид становится двухосным, причем его ориентация определяется осью анизотропии.

Как показывает численный анализ уравнений (3)–(5), приведенный на рис. 1 j, h, i , среднее значение магнитного момента (на один узел) в SN-фазе равно нулю во всем температурном интервале и при любых значениях константы анизотропии. Что касается тензорных параметров порядка, компонента тензора квадрупольных моментов

$$q_2^2 = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle$$

равна нулю при температуре T_Q , определяющей температуру фазового перехода из SN-фазы в парамагнитную. Необходимо отметить, что эта температура растет с ростом константы одноионной анизотропии (хотя этот рост не столь велик, как при фазовом переходе FM-фаза–парамагнитная фаза).

Температурная зависимость параметра порядка q_2^0 показывает, что при $T > T_Q$ вращательная симметрия тензора $Q_{\alpha\beta}$ нарушается, что связано с наличием анизотропии типа «легкая ось». Кроме того, используя соотношения (3)–(5), в приближении среднего поля мы провели оценку температуры перехода (T_Q) из состояния спинового нематика в парамагнитную фазу:

$$T_Q = \frac{K_0}{2} \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Как видно, эта температура, как и следовало ожидать, определяется только биквадратичным обменным взаимодействием и тензорными параметрами порядка.

3.3. Антиферромагнитная фаза

Рассмотрим теперь ситуацию, в которой константы обменных взаимодействий связаны соотношением $|J| > K$, где $J < 0$, $K > 0$. В этом случае системе энергетически выгодно разбиться на две эквивалентные подрешетки, т. е. перейти в антиферромагнитное состояние (AFM). Как было показано в [26, 43], при $T \rightarrow 0$ параметр u - v -преобразования принимает значения $\theta_1 = 0$ и $\theta_2 = \pi/2$ для первой и второй подрешеток соответственно. Параметры порядка первой и второй подрешеток при $T = 0$ имеют вид [43]

$$\langle S_1^z \rangle = |\langle S_2^z \rangle| = 1, q_{2(1)}^0 = q_{2(2)}^0 = 1, q_{2(1)}^2 = q_{2(2)}^2 = 0.$$

Здесь учтено, что намагниченности первой и второй подрешеток антипараллельны. Представляет интерес исследовать поведение параметров порядка при произвольных температурах в AFM-фазе, используя соотношения (3)–(5). При этом нам достаточно рассмотреть одну подрешетку, поскольку они эквивалентны. Численный анализ зависимости параметров порядка негейзенберговского легкоплоскостного магнетика от температуры и величины константы анизотропии в AFM-фазе приведены на рис. 1 d, e, f .

Из рис. 1 d, e, f следует, что поведение среднего значения магнитного момента (на один узел) аналогично его поведению в FM-фазе, т. е. с ростом температуры уменьшается, что связано с влиянием тепловых флуктуаций. Так же, как и в FM-фазе, обращение в нуль среднего магнитного момента позволяет определить температуру Нееля. Однако как видно на рис. 1 j, h, i и рис. 1 d, e, f , температура Нееля значительно выше, чем температура Кюри и растет с увеличением константы одноионной анизотропии.

Зависимость температуры Нееля от константы анизотропии легко понять, если вспомнить, что магнитный момент подрешетки в AFM-фазе параллелен оси легкого намагничивания, и чем больше константа анизотропии, тем больше энергии необходимо для разрушения векторного магнитного порядка, а следовательно, и выше критическая температура. Более интересен вопрос роста температуры Нееля по сравнению с температурой Кюри при одних и тех же значениях константы анизотропии. Так, если не учитывать биквадратичное обменное взаимодействие (гейзенберговский магнетик), то температуры Кюри и Нееля совпадают, и соответствуют стандартному результату, полученному в приближении среднего поля [47]. При включении биквадратичного обменного взаимодействия ситуация изменяется. Так, при $J > K > 0$ билинейное обменное взаимодействие стремится установить ферромагнитное упорядочение, а биквадратичное — «квазиантиферромагнитное». Такая конкуренция приводит к уменьшению температуры Кюри (см. выражение для T_C в FM-фазе). В AFM-фазе (при $J < 0, K > 0, |J| > K$) как билинейное обменное взаимодействие, так и биквадратичное, стремятся к установлению антиферромагнитного упорядочения. Это обстоятельство и приводит к увеличению температуры Нееля по сравнению с температурой Кюри. Кроме того, анализ уравнений (3)–(5) позволяет оценить температуру Нееля в AFM-фазе:

$$T_N = \left(|J_0| + \frac{K_0}{2} \right) \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Что касается температурной зависимости тензорных параметров порядка в AFM-фазе, то оно аналогично их поведению в FM-фазе.

3.4. Ортогонально-нематическая фаза

Если константы обменных взаимодействий связаны соотношением $J < 0, K < 0, |J| < |K|$, то магнетику выгодно разбиение на две подрешетки. Однако упорядочение в этом случае является не антиферромагнитным, а ортогонально-нематическим (ON) [26, 56]. Это состояние можно рассматривать как нематическое состояние в каждой из подрешеток, но векторы состояний подрешеток ортогональны (подробнее см. [26]). При $T = 0$ параметры порядка в ON-фазе равны

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

В случае температур, отличных от нуля, поведение параметров порядка определяется соотношениями (3)–(5). Численный анализ этих соотношений позволяет определить зависимость параметров порядка как от температуры, так и величины константы одноионной анизотропии. Результаты такого анализа приведены на рис. 1 g, k, l . При этом учтено, что подрешетки эквивалентны и достаточно рассмотреть поведение одной из подрешеток.

Как следует из проведенного нами анализа соотношений (3)–(5), ортогонально-нематическое состояние сохраняется во всем температурном интервале (исключая флуктуационную область), т. е.

$$\langle S_i^z \rangle = 0, \quad i = 1, 2,$$

а поведение тензорных параметров порядка q_2^0, q_2^2 аналогично их поведению в SN-фазе. Необходимо отметить, что обращение в нуль параметра q_2^2 позволяет оценить температуру перехода магнетика из ортогонально-нематической фазы в парамагнитную. Как видно из сравнения рис. 1 d, e, f и рис. 1 g, k, l , эта температура (T_{Q1}) существенно меньше, чем температура перехода SN-фаза–парамагнитная фаза. При описании как AFM-, так и ON-фаз мы использовали схемы расширенных зон. В данном случае оказывается, что это представление достаточно удобно и наглядно, поскольку подрешетки эквивалентны. В этой схеме необходимо в энергетических уровнях магнитного иона (2) заменить константу биквадратичного обменного взаимодействия

$$K \rightarrow -\frac{K}{2} = \frac{|K|}{2}.$$

Тогда аналитическая оценка температуры перехода ON-фаза–парамагнитная фаза имеет вид

$$T_{Q1} = \frac{|K_0|}{4} \frac{2 + q_2^0}{3}.$$

Таким образом, как численный анализ, так и аналитическая оценка показали, что температура T_{Q1} существенно меньше температуры T_Q .

4. ДИНАМИКА СПИНОВОГО НЕМАТИКА ПРИ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Исследуем поведение спектров элементарных возбуждений рассматриваемой системы при температурах, отличных от нуля. Спектры возбуждений определяются полюсами функции Грина [44, 45, 47, 49, 51, 52], которую в рамках техники опе-

раторов Хаббарда определим следующим образом [32, 46, 49, 51, 52]:

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

где

$$\tilde{X}_n^\lambda(\tau) = \exp(H\tau) X_n^\lambda \exp(-H\tau)$$

— оператор Хаббарда в представлении Гейзенберга, $\hat{T}$ — оператор Вика, λ — корневые векторы, определяющиеся алгеброй операторов Хаббарда [44, 47]. Вывод дисперсионного уравнения подробно изложен в работах [39, 44, 46, 51, 52], поэтому здесь приведем лишь вид этого уравнения

$$\det \|\delta_{ij} + x_{ij}\| = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, 8, \quad (6)$$

$$x_{ij} = G_0^\alpha(\omega_n) b(\alpha) c_{ij}(\alpha),$$

где

$$G_0^\alpha(\omega_n) = [i\omega_n + \alpha E]^{-1}$$

— нулевая функция Грина,

$$c_{ij}(\alpha, \beta) = a_{ik}(\alpha, \beta) A_{kj},$$

$$a_{ik}(\alpha, \beta) = c_i(\alpha) c_k(-\beta).$$

Компоненты вектора $c(\lambda)$ определяются из связи спиновых операторов с операторами Хаббарда, а матрицу $\hat{A}_{nn'}$ можно представить в виде

$$\hat{A}_{n_1 n_2} = \hat{A}_{n_1 n_2}^3 \oplus \hat{A}_{n_1 n_2}^5,$$

$b(\alpha) = \langle \alpha \mathbf{X} \rangle$ — концевые множители, явный которых можно представить как [51, 55]

$$b(\alpha_1) = -b(\alpha_2) = \frac{-\exp(-E_1/T) + \exp(-E_0/T)}{Z},$$

$$b(\alpha_3) = -b(\alpha_4) = \frac{\exp(-E_1/T) - \exp(-E_{-1}/T)}{Z}, \quad (7)$$

$$b(\alpha_5) = -b(\alpha_6) = \frac{\exp(-E_0/T) - \exp(-E_{-1}/T)}{Z}.$$

где E_i — энергетические уровни магнитного иона ($i = 1, 0, -1$), определяемые соотношениями (2), а α_i — корневые векторы ($i = 1, \dots, 6$), компоненты которых определяются алгеброй операторов Хаббарда [39], и в данном случае равны:

$$\alpha_1 = \alpha(0, 1) = (-1, 1, 0), \quad \alpha_2 = \alpha(1, 0) = (1, -1, 0),$$

$$\alpha_3 = \alpha(1, -1) = (1, 0, -1), \quad \alpha_4 = \alpha(-1, 1) = (-1, 0, 1),$$

$$\alpha_5 = \alpha(0, -1) = (0, 1, -1), \quad \alpha_6 = \alpha(-1, 0) = (0, -1, 1).$$

Необходимо отметить, что дисперсионное уравнение (6), определяющее спектры возбуждений, справедливо при произвольном соотношении материальных констант, т. е. в различных фазовых состояниях

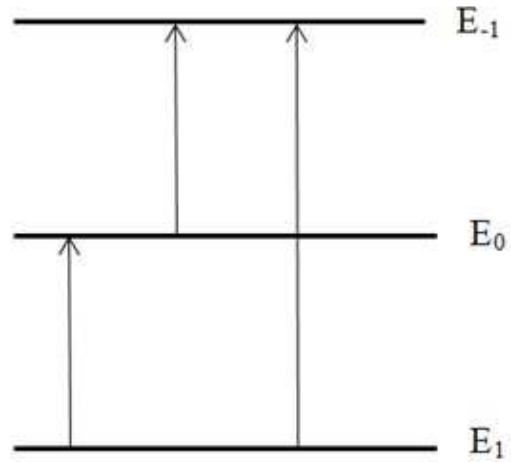


Рис. 2. Энергетические уровни магнитного иона и переходы между ними

и температурном интервале существования магнитного упорядочения (исключая флуктуационную область).

В работах [32–36, 53] были подробно исследованы решения дисперсионного уравнения (6) при $T = 0$ как для изотропного спинового нематика с $S = 1$, так и для негейзенберговского магнетика, обладающего одноосной анизотропией. Было показано, что при $T = 0$ в магнетике реализуются две ветви элементарных возбуждений, одна из которых является прецессионной и связана с переходом магнитного иона из основного состояния (E_1) в первое невозбужденное (E_0), т. е. в этой моде «поперечные» колебания спиновой плотности связаны с поворотами направления главной оси квадрупольного эллипсоида. Вторая ветвь возбуждений связана с переходом магнитного иона из основного состояния E_1 в состояние E_{-1} . Эта мода включает продольные колебания модуля вектора намагниченности, направление которого остается параллельным главной оси эллипсоида квадрупольных моментов, деформацию эллипсоида и его поворот вокруг намагниченности, т. е. эта мода является «продольной» ветвью возбуждений. Необходимо отметить, что в изотропном негейзенберговском магнетике с $S = 1$ в нематической фазе обе ветви возбуждений совпадают (см. [26]). Кроме указанных ветвей возбуждений в исследуемой здесь модели реализуется еще одна ветвь, связанная с возбужденными состояниями магнитного иона $E_0 \rightarrow E_{-1}$ (см. рис. 2), т. е. температура «размораживает» степени свободы магнитного

иона. Причем ветвь возбуждений, связанная с переходом магнитного иона E_{0-1} , не является релаксационной. Исследуем подробнее спектры возбуждений негейзенберговского анизотропного антиферромагнетика при различных соотношениях обменных интегралов.

4.1. Спектры возбуждений в FM-фазе при $T \neq 0$

Как уже отмечалось ранее, FM-фаза реализуется в рассматриваемой системе при $J > K$ и $T < T_C$. Рассмотрим решения дисперсионного уравнения (6) в этом состоянии. При ненулевых температурах это уравнение определяет три ветви спиновых возбуждений, две из которых условно можно назвать «поперечными», поскольку они связаны с колебаниями квадрупольного эллипсоида, а одну — «продольной», связанной с колебанием модуля магнитного момента (квантовое сокращение спина). Явный вид спектров этих возбуждений имеет вид

$$\varepsilon_1^{\parallel}(k) = -E_{1-1} - K(k)b(\alpha_3), \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2,3}^{\perp} = & \frac{1}{2} \left[E_{10} + E_{0-1} + J(k)(b(\alpha_2) + b(\alpha_5)) \right] \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \left\{ [E_{10} - E_{0-1} + J(k)(b(\alpha_2) - b(\alpha_5))]^2 + \right. \\ & \left. + 4b(\alpha_2)b(\alpha_5)(J(k) - K(k))^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (9)$$

В (8) и (9) E_{ij} — разность энергетических уровней магнитного иона (см. выражения (2)), $b(\alpha_i)$ — концевые множители, определяемые соотношениями (7).

Учитывая явный вид энергетических уровней магнитного иона в FM-фазе и концевых множителей, а также тот факт, что в этом случае параметр u - v -преобразования $\theta = 0$, спектры (8) и (9) можно представить в более компактном виде:

$$\varepsilon_1^{\parallel}(k) = (2J_0 - K_0 - K(k)) \langle S^z \rangle, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2,3}^{\perp}(k) = & \frac{1}{2} (2J_0 - K_0 - J(k)) \langle S^z \rangle \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \left\{ (J(k) - K(k))^2 [\langle S^z \rangle^2 - (q_2^0)^2] + \right. \\ & \left. + (D - (J(k) - K(k))q_2^0)^2 \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Кроме того, при получении выражений (10) и (11) было учтено, что в FM-фазе

$$b(\alpha_3) = \langle S^z \rangle,$$

а также

$$q_2^0 = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 2.$$

Температурная зависимость спектров элементарных возбуждений в FM-фазе определяется зависимостью от температуры среднего значения магнитного момента $\langle S^z \rangle$ и компоненты тензора квадрупольных моментов q_2^0 (см. выражения (3)–(5)).

Рассмотрим поведение спектров магнонов при различных значениях константы одноионной анизотропии и при ненулевых температурах. Отметим, что температуры, о которых идет речь, существенно ниже температуры Кюри, что связано с тем, что задача рассматривается в приближении среднего поля.

Прежде всего рассмотрим «продольную» ветвь возбуждений $\varepsilon_1^{\parallel}$. Как видно на рис. 3 *a–d* и рис. 3 *e–h*, а также следует из формулы (10), эта ветвь зависит от волнового вектора как k^2 , причем эта зависимость слабо меняется с изменением температуры и константы одноионной анизотропии. Кроме того, в спектре «продольных» магнонов имеется энергетическая щель, которая явно не зависит от анизотропии (от константы анизотропии неявно зависят $\langle S^z \rangle$, q_2^0 , q_2^2):

$$\varepsilon_1^{\parallel}(0) = 2(J_0 - K_0) \langle S^z \rangle. \quad (12)$$

Поведение «поперечных» ветвей возбуждений является более сложным. Как следует из соотношений (9) и (11), эти две ветви «запутаны», причем чем выше температура, тем менее проявляется эта «запутанность». Так, при достаточно низких температурах и малых значениях константы анизотропии (см. рис. 3 *a, b*) ветви $\varepsilon_2^{\perp}$ и $\varepsilon_3^{\perp}$ практически переходят друг в друга. Это поведение легко понять, если обратить внимание на поведение параметров порядка $\langle S^z \rangle$ и q_2^0 (см. рис. 1 *a, b, c*). Как следует из этих графиков, при очень низких температурах $t = 0.003$ и малой анизотропии $d/j = 0.1$, выражение

$$\langle S^z \rangle^2 - (q_2^0)^2 \rightarrow 0.$$

Тогда, как следует из (11), «поперечная» ветвь ε_2 , при малых волновых векторах, ведет себя следующим образом:

$$\varepsilon_2^{\perp} = \alpha k^2 + D/2,$$

а вторая «поперечная» ветвь является бездисперсионной:

$$\varepsilon_3^{\perp} = J_0 - K_0 - D/2.$$

С ростом волнового вектора ветви $\varepsilon_2^{\perp}$ и $\varepsilon_3^{\perp}$ переходят друг в друга, т. е. при больших k ветвь $\varepsilon_2^{\perp}$ становится

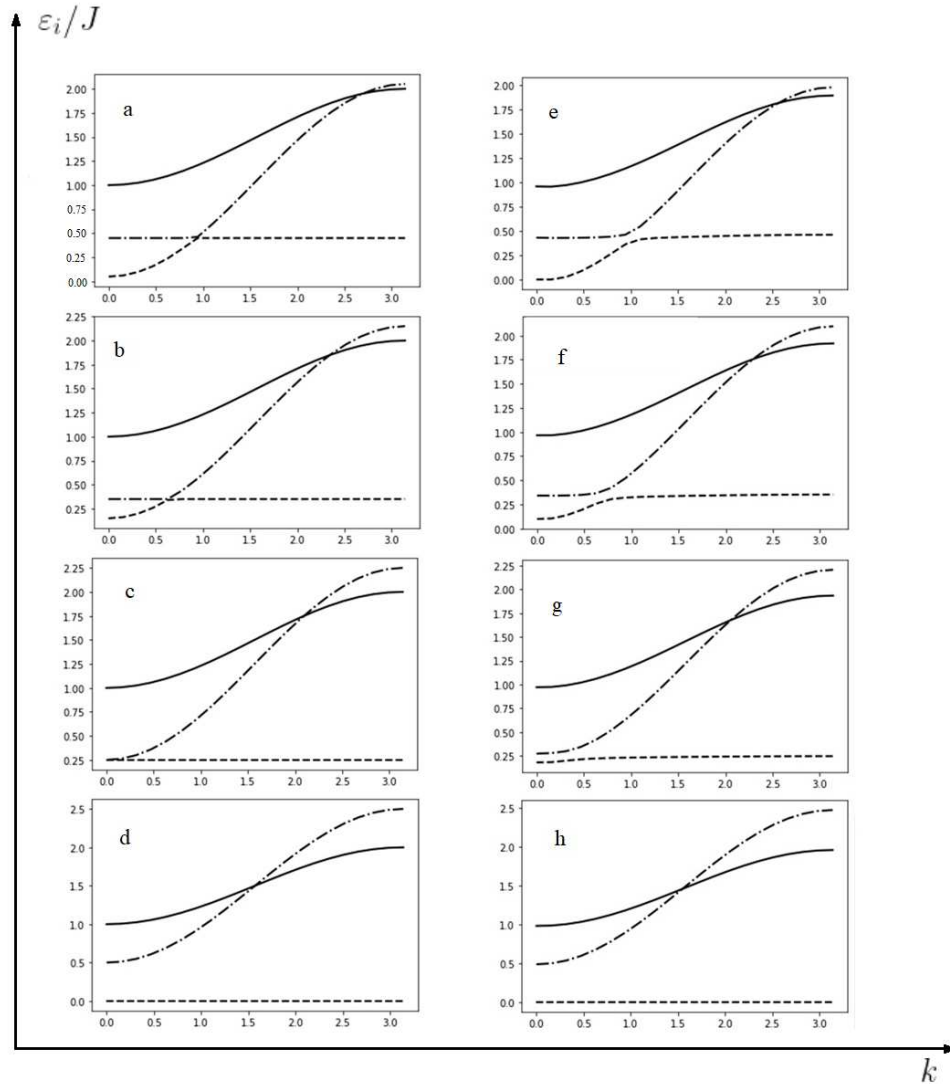


Рис. 3. Спектры элементарных возбуждений в FM-фазе при $T/J = 0.003$ (a–d) и 0.3 (e–h) и значениях анизотропии $D/J = 0.1$ (a, e), 0.3 (b, f), 0.5 (c, g), 1.0 (d, h). Сплошной линиям соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_1^{\parallel}/J$, штриховым линиям — «поперечная» ветвь $\varepsilon_2^{\perp}/J$, а штрихпунктирным — «поперечная» ветвь $\varepsilon_3^{\perp}/J$, обменные интегралы $J = 1$, $K = 0.5$

бездисперсионной, а $\varepsilon_3^{\perp}$ ведет себя как квадратичная парабола.

С ростом температуры, например при $T/J = 0.3$, как следует из рис. 1 a, b, c, величина

$$\langle S^z \rangle^2 - (q_2^0)^2 \neq 0.$$

Это приводит к тому, что «поперечные» ветви начинают «расталкиваться», и чем выше анизотропия магнетика, тем активнее происходит расталкивание. Так, при $D/J = 1$ «поперечная» ветвь $\varepsilon_2^{\perp}$ становится бездисперсионной, а ветвь $\varepsilon_3^{\perp}$ ведет себя как k^2 , причем энергетическая щель этой ветви существен-

но зависит от величины константы анизотропии (см. рис. 3).

4.2. Спектры возбуждений в SN-фазе при $T \neq 0$

Рассмотрим теперь поведение спектров возбуждений в SN-фазе при различных значениях константы анизотропии и произвольных температурах (исключая флуктуационную область). При этом предполагается, что $J < K$, а параметр u - v -преобразования θ в этом случае равен $\pi/4$. Учиты-

вая, что в этой фазе $\langle S^z \rangle = 0$, а q_2^2 совпадает с концевым множителем $b(\alpha_3)$, спектры всех трех ветвей возбуждений можно представить в виде

$$\varepsilon_4^{\parallel}(k) = b(\alpha_3) \times \left\{ (K_0 - K(k))(K_0 + K(k) - 2J(k)) \right\}^{1/2}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_5^{\perp}(k) = & \left\{ \left(\frac{D}{2} + b(\alpha_2)(K_0 - K(k)) \right) \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{D}{2} + b(\alpha_2)(K_0 + K(k) - 2J(k)) \right) \right\}^{1/2}, \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_6^{\perp}(k) = & \left\{ \left(\frac{D}{2} + b(\alpha_6)(K_0 - K(k)) \right) \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{D}{2} + b(\alpha_6)(K_0 + K(k) - 2J(k)) \right) \right\}^{1/2}. \quad (15) \end{aligned}$$

Зависимость спектров возбуждений от температуры определяется концевыми множителями $b(\alpha_i)$. Как и в FM-фазе, в SN-фазе имеются три ветви возбуждений, одна из которых (13) является «продольной» и связана с колебанием длины вектора магнитного момента, а две другие (14) и (15) — «поперечные» и связаны с колебаниями квадрупольного эллипсоида.

На рис. 4 приведены спектры возбуждений негеизенберговского ферромагнетика при различных температурах и различных значениях константы анизотропии. Как видно на рис. 4 а–д, одна из «поперечных» ветвей возбуждений ($\varepsilon_6^{\perp}$) является бездисперсионной при низких температурах и при произвольных значениях константы анизотропии. Однако с ростом температуры и константы анизотропии у этой ветви возбуждений проявляется зависимость от волнового вектора, хотя и неярко выраженная. Этот результат можно понять, если учесть, что концевой множитель $b(\alpha_6)$ определяется только возбужденными энергетическими уровнями E_0, E_{-1} , а следовательно, мало отличается от нуля при произвольных температурах и значениях константы анизотропии D . Величина энергетической щели в этом спектре определяется константой анизотропии и существенно растет с

ростом D (см. рис. 4). «Поперечная» ветвь $\varepsilon_5^{\perp}$ обладает энергетической щелью, которая существенно зависит от константы анизотропии. Кроме того, вклад в щель дают также фурье-образы обменных интегралов K_0, J_0 . Как видно на рис. 4, эта ветвь возбуждений как функция волнового вектора ведет себя как $\sqrt{k^2 + a}$, а температурная зависимость определяется концевым множителем $b(\alpha_2)$, т.е. энергетическими уровнями E_1 и E_0 .

Необходимо отметить, что «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_4^{\parallel}$ является безщелевой и, как следует из (13), не должна зависеть от константы анизотропии. Однако, как видно на рис. 4, эта ветвь хоть и слабо, но все же зависит от анизотропии. Эта зависимость обусловлена влиянием компоненты q_2^2 тензора квадрупольных моментов (в SN-фазе $q_2^2 = b(\alpha_2)$), которая связана с константой анизотропии через энергетические уровни E_1 и E_{-1} магнитного иона (2), т.е. связана с переходом магнитного иона из основного состояния в наиболее возбужденное.

4.3. Спектры возбуждений в АФМ-фазе при $T \neq 0$

Рассмотрим поведение спектров возбуждений в АФМ-фазе. В этой фазе обменные константы связаны соотношением $|J| > K, (J < 0)$ и системе выгодно разбиться на две эквивалентные подрешетки. Поскольку подрешетки являются эквивалентными, то достаточно рассмотреть спектры возбуждений одной подрешетки. Как и ранее, спектры элементарных возбуждений определяются дисперсионным уравнением (6), справедливым при произвольных температурах и произвольном соотношении материальных параметров системы. Решение уравнения (6) дает три ветви спектров магнонов, которые имеют вид

$$\varepsilon_7^{\parallel} = b(\alpha_3) \times \left\{ (2J_0 - K_0 - K(k))(2J_0 - K_0 + K(k)) \right\}^{1/2}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{8,9}^{\perp}(k))^2 = & \frac{1}{2} \left[E_{10}^2 + E_{0-1}^2 + 2(J(k))^2 b(\alpha_1) b(\alpha_5) - \right. \\ & \left. - (b^2(\alpha_1) + b^2(\alpha_5)) (J(k) - K(k))^2 \right] \pm \\ & \pm \frac{1}{2} \sqrt{B}, \quad (17) \end{aligned}$$

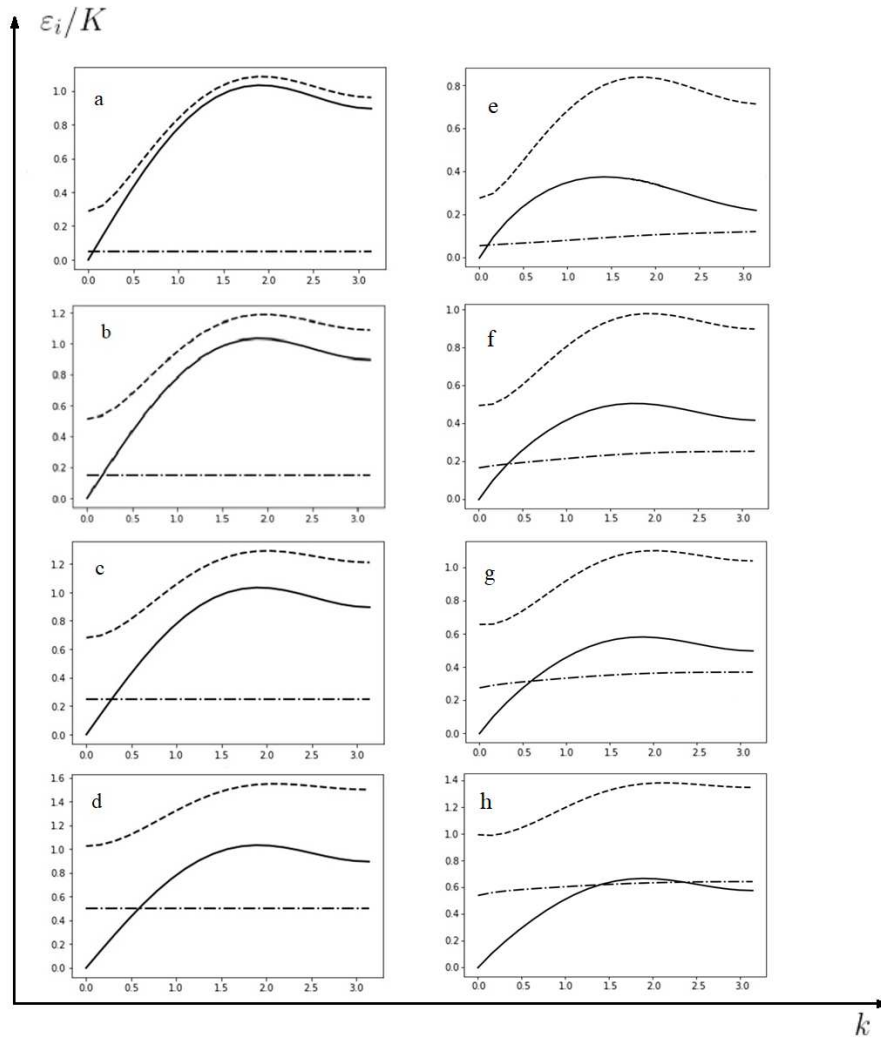


Рис. 4. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика в SN-фазе при $T/K = 0003$ (a–d) и 0.4 (e–h) и значениях $D/K = 0.1$ (a, e), 0.3 (b, f), 0.5 (c, g), 1.0 (d, h). Сплошным линиям соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_4^{\parallel}/K$, штриховым линиям — «поперечная» ветвь $\varepsilon_5^{\perp}/K$, а штрихпунктирным — «поперечная» ветвь $\varepsilon_6^{\perp}/K$, обменные интегралы $J = 0.2$ $K = 1.0$

где

$$\begin{aligned}
 B = & (E_{10}^2 - E_{0-1}^2)^2 + \\
 & + 4(J(k))^2 b(\alpha_1)b(\alpha_5) (E_{10} - E_{0-1})^2 - \\
 & - 2(J(k) - K(k))^2 (E_{10}^2 - E_{0-1}^2) (b^2(\alpha_1) - b^2(\alpha_5)) + \\
 & + \left[(J(k) - K(k))^2 (b^2(\alpha_1) + b^2(\alpha_5)) - \right. \\
 & \quad \left. - (J(k))^2 b(\alpha_1)b(\alpha_5) \right]^2 - \\
 & - 4 \left[(2J(k) - K(k)) K(k)b(\alpha_1)b(\alpha_5) \right]^2. \quad (18)
 \end{aligned}$$

В соотношениях (16), (17) учтено, что в AFM-фазе параметры u - v -преобразования равны $\theta = 0$, $\theta = \pi/2$ для первой и второй подрешеток соответственно.

Проанализируем полученные ветви возбуждений. Ветвь $\varepsilon_7^{\parallel}(k)$ (см. формулу (17)) является «продольной» ветвью возбуждений, т. е. связана с переходом магнитного иона из основного состояния (E_1) в наиболее возбужденное (E_{-1}) и с колебанием длины вектора магнитного момента. Как следует из выражения (16) и рис. 5, эта ветвь возбуждений является симметричной относительно $k = 0$ и $k = \pi$, причем зависимость от волнового вектора довольно

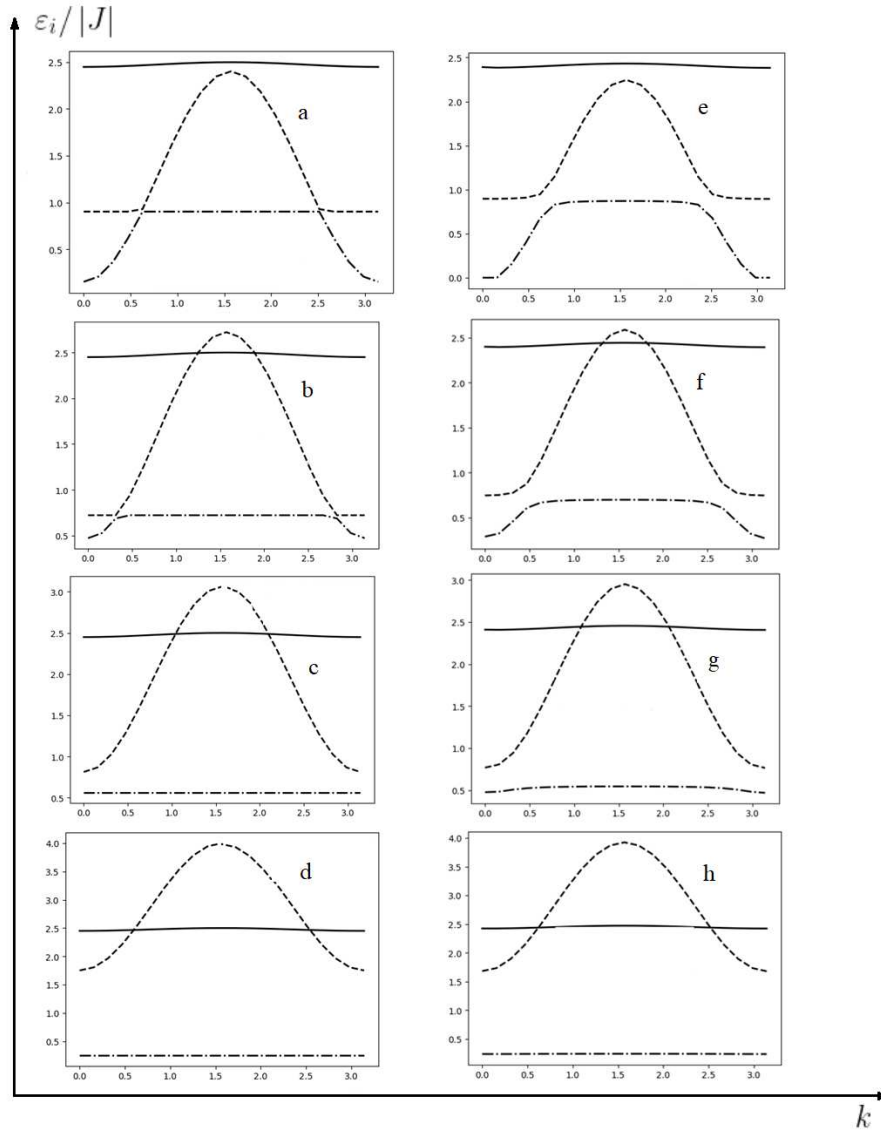


Рис. 5. Спектры элементарных возбуждений негейзенберговского ферромагнетика AFM-фазе при $T/|J| = 0.003$ (a–d) и 0.4 (e–h). $D/|J| = 0.1$ (a, e), 0.3 (b, f), 0.5 (c, g), 1.0 (d, h). Сплошной линиям соответствует «продольная» ветвь возбуждений $\varepsilon_7^{\parallel}/|J|$, штриховым линиям — «поперечная» ветвь $\varepsilon_8^{\perp}/|J|$, а штрихпунктирным — «поперечная» ветвь $\varepsilon_9^{\perp}/|J|$, обменные интегралы $J = -1.0$, $K = 0.5$

слабая. Кроме того, эта ветвь практически не зависит от температуры и константы одноионной анизотропии, а энергетическая щель в спектре «продольных» возбуждений определяется нулевыми фурье-компонентами обменных интегралов.

Кроме «продольной» ветви возбуждений в AFM-фазе существуют две «поперечные» ветви возбуждений (см. выражение (17)). Как следует из (17) и рис. 5, эти ветви являются «запутанными», и с ростом температуры и константы анизотропии эта «запутанность» уменьшается и между ветвями $\varepsilon_8^{\perp}$

и $\varepsilon_9^{\perp}$ возникает существенное расталкивание. Отметим, что возбуждение, описываемое спектром $\varepsilon_8^{\perp}$, связано с переходом магнитного иона из основного состояния (E_1) в первое возбужденное (E_0). Эта ветвь возбуждений имеет достаточно стандартный для AFM-фазы вид, а энергетическая щель в спектре $\varepsilon_8^{\perp}$ существенно зависит как от температуры, так и от константы анизотропии. Что касается ветви $\varepsilon_9^{\perp}$, то она связана с переходом магнитного иона из первого возбужденного состояния (E_0) в наиболее возбужденное состояние (E_{-1}). Необходимо отметить,

что это возбуждение не является релаксационным и имеет целый ряд особенностей. Так, при достаточно низких температурах эта ветвь возбуждений существенно зависит от волнового вектора (при малых ($k \sim 0$) и больших ($k \sim \pi$) волновых векторах), а в остальной области волнового вектора является бездисперсионной. С ростом температуры и анизотропии эта ветвь становится все более бездисперсионной во всем интервале волновых векторов.

5. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Проведенные исследования позволяют построить сечение фазовой диаграммы негейзенберговского ферромагнетика на плоскости (J, K) при различных значениях температуры. Как уже отмечалось ранее, такая фазовая диаграмма была получена для исследуемой нами системы при $T = 0$ (см. [26, 43]).

Как известно, линия фазового перехода определяется из условия равенства термодинамических потенциалов, определенных в соответствующих фазах [13]. Таким образом, линии фазовых переходов FM–SN, SN–AFM, AFM–ON, ON–FM можно получить из условия равенства свободных энергий в соответствующих фазах. Свободная энергия равна $F = -T \ln Z$, где Z — статистическая сумма в соответствующей фазе, которая определяется соотношением

$$Z = \sum_{M=-1,0,1} \exp(-E_M/T).$$

С учетом соотношений (2), (3)–(5) и (7), а также значений параметров u - v -преобразования в соответствующих фазах численный анализ позволяет построить фазовую диаграмму при различных значениях константы одноионной анизотропии и произвольных температурах (исключая флуктуационную область).

Так, из равенства свободных энергий в FM- и SN-фазах получаем линию фазового перехода между ними:

$$J_0 = K_0. \quad (19)$$

Сравнивая свободные энергии в фазах SN и AFM, получим, что линия фазового перехода между ними имеет вид

$$J_0 = 0. \quad (20)$$

Если приравнять свободные энергии в фазах AFM и ON, получим линию фазового перехода между ними вида

$$|J_0| = |K_0|, \quad (21)$$

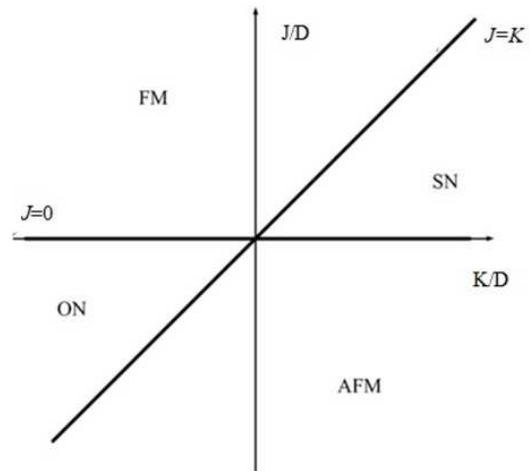


Рис. 6. Фазовая диаграмма негейзенберговского анизотропного магнетика с $S = 1$

а из равенства свободных энергий в фазах ON и FM получим

$$J_0 = 0. \quad (22)$$

Как следует из соотношений (18)–(21), фазовая диаграмма негейзенберговского анизотропного магнетика с $S = 1$ не зависит ни от температуры, ни от величины константы анизотропии и в точности совпадает с фазовой диаграммой аналогичной системы, полученной ранее для случая $T = 0$ (см. [26, 42]). Явный вид фазовой диаграммы негейзенберговского анизотропного магнетика с $S = 1$ приведен на рис. 6.

Необходимо отметить, что линии фазовых переходов (18)–(21) можно определить, анализируя спектры возбуждений в соответствующих фазах. Так, в FM-фазе спектр «продольных» магнонов теряет устойчивость (при $k = 0$) на линии $J_0 = K_0$ (см. (10)). На этой же линии теряет устойчивость (при $k = \pi$) ветвь «продольных» магнонов в SN-фазе (см. (13)). Следовательно, линия, определяемая соотношением (18) — линия фазового перехода FM–SN. При $k = 0$ теряет устойчивость спектр «продольных» магнонов (13) в SN-фазе на линии $J_0 = 0$. Аналогично, в AFM-фазе становится неустойчивым спектр (16) «продольных» возбуждений при $k = \pi$ на линии $J_0 = 0$, т. е. эта линия является линией фазового перехода SN–AFM. Этот же спектр (16) теряет устойчивость при $k = 0$ на линии $|J_0| = |K_0|$, что свидетельствует о фазовом переходе AFM–ON. Кроме того, неустойчивость «продольной» ветви возбуждений (10) при $k = \pi$ свидетельствует о том,

что на линии $|J_0| = 0$ происходит фазовый переход АМ–ОН.

Анализ фазовой диаграммы и спектров возбуждений негейзенберговского ферромагнетика с анизотропией типа «легкая ось» свидетельствует о том, что фазовый переход FM–SN является вырожденным переходом первого рода.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен анализ зависимости параметров порядка, плотности свободной энергии и спектров элементарных возбуждений от температуры и величины константы одноионной анизотропии типа «легкая ось» негейзенберговского анизотропного магнетика с $S = 1$ с размерностью $d = 3$ в приближении среднего поля.

Численный анализ как векторных, так и тензорных параметров порядка в ферромагнитной, нематической, антиферромагнитной и ортогонально-нематической фазах позволяет определить температуру перехода в парамагнитное состояние. Кроме того, температурная зависимость компоненты тензора квадрупольных моментов q_2^0 (см. рис. 1 $a, \dots, l$) свидетельствует, что при $T > T_Q$, т. е. в парамагнитной фазе вращательная симметрия тензора $Q_{\alpha\beta}$ также нарушается, что связано с наличием одноионной анизотропии типа «легкая ось». Отметим, что температуры переходов существенно растут с ростом константы одноионной анизотропии типа «легкая ось» (см. рис. 1), что вполне ожидаемо, поскольку большая легкоосная анизотропия препятствует разрушению магнитного порядка тепловыми флуктуациями. Также в приближении среднего поля нами проведена аналитическая оценка температур переходов в более симметричную фазу как из фаз с векторным параметром порядка (FM, AFM), так и фаз, характеризующихся тензорными параметрами (SN и ON). Эти оценки показывают, что температуры переходов существенно зависят от тензорных параметров порядка и биквадратичного обменного взаимодействия.

Особый интерес представляет зависимость спектров элементарных возбуждений негейзенберговского анизотропного ферромагнетика со спином магнитного иона единица как от температуры, так и от константы анизотропии. Прежде всего отметим, что в отличие от ранее рассмотренного случая $T = 0$ [43], в рассматриваемом случае возникает дополни-

тельная ветвь возбуждений, связанная с переходом магнитного иона из первого возбужденного состояния магнитного иона (E_0) в наиболее возбужденное (E_{-1}), причем эта ветвь не является релаксационной. Таким образом, в негейзенберговском магнетике при произвольных температурах (ниже критической) реализуются три ветви элементарных возбуждений: две из которых являются «поперечными» и связаны с прецессионным движением квадрупольного эллипсоида, а одна — «поперечной», связанной с изменением длины вектора магнитного момента. Поведение спектров возбуждений в дипольных и тензорных фазах принципиально различны. Так, в FM- и AFM-фазах «поперечные» ветви возбуждений при малых значениях константы легкоосной анизотропии и достаточно низких температурах являются сильно «гибридизованными» (см. рис. 3 и 5) и существенно зависят от величины анизотропии. С ростом константы анизотропии «поперечные» ветви начинают расталкиваться, и при больших значениях константы одноионной анизотропии «поперечные» ветви, связанные с переходом магнитного иона E_{0-1} , становятся бездисперсионными. В SN-фазе «поперечные» ветви элементарных возбуждений не «гибридизованы», что связано с равенством нулю среднего значения магнитного момента (на узле). Кроме того, в этой фазе учет одноионной анизотропии снимает вырождение ветвей возбуждений, как это наблюдается, например, в изотропном спиновом нематике [26].

Анализ плотности свободной энергии и спектров «продольных» возбуждений позволяет построить фазовую диаграмму исследуемой системы при произвольных температурах и произвольных значениях константы одноионной анизотропии. Результат этих исследований приведен на рис. 6. Как показано на этом рисунке, в системе сохраняются те же фазовые состояния, которые реализуются при $T = 0$. Кроме того, линии фазовых переходов аналогичны случаю $T = 0$, т. е. не зависят ни от температуры, ни от величины константы анизотропии. Таким образом, полученная нами фазовая диаграмма совпадает с фазовой диаграммой исследуемой системы при $T = 0$ [53]. Кроме того, фазовый переход в рассматриваемом случае является вырожденным фазовым переходом первого рода, так же как и при $T = 0$. Однако это совершенно не означает, что температура и одноионная анизотропия не влияют на свойства спинового нематика. Как показано в данной работе, температура и одноионная анизотропия принципиально изменяют динамические свойства системы.

Необходимо также отметить, что в данной работе не проведен анализ спектров элементарных возбуждений в ОН-фазе. Это является предметом отдельного рассмотрения.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, ФНТ **44**, 794 (2018).
2. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Ивснгов, М. В. Четкин, УФН **146**, 416 (1985).
3. B. A. Ivanov and D. D. Sheka, Phys. Rev. Lett. **72**, 404 (1994).
4. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **61**, 495 (1995).
5. H. V. Gomonay and V. M. Loktev, Phys. Rev. B **81**, 144427 (2010), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.144427>
6. O. A. Tretiakov, D. Clarke, G.-W. Chern, Y. B. Bazaliy, and O. Tchernyshyov, Phys. Rev. Lett. **100**, 127204 (2008), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.127204>
7. E. G. Galkina, B. A. Ivanov, S. Savel'ev, and F. Nori, Phys. Rev. B **77**, 134425 (2008), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.134425>
8. O. Gomonay, T. Jungwirth, and J. Sinova, Phys. Rev. Lett. **117**, 017202 (2016), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.017202>
9. E. G. Galkina, B. A. Ivanov, Low Temp. Phys. **44**, 618 (2018), <https://doi.org/10.1063/1.5041427>
10. R. Cheng, D. Xiao, and A. Brataas, Phys. Rev. Lett. **116**, 207603 (2016), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.207603>
11. R. Khymyn, I. Lisenkov, V. Tyberkevych, B. A. Ivanov and A. Slavin, Sci. Rep. **7**, 43705 (2017), <https://doi.org/10.1038/srep43705>
12. R. V. Ovcharov, E. G. Galkina, B. A. Ivanov, and R. S. Khymyn, Phys. Rev. Appl. **18**, 024047 (2022), <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.18.024047>
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
14. А. Ф. Андреев, В. И. Марченко, УФН **130**, 39 (1980).
15. A. F. Andreev and I. A. Grishchuk, Sov. Phys. JETP **60**, 267 (1984).
16. R. Okazaki, T. Shibauchi, H. J. Shi, Y. Haga, T. D. Matsuda, E. Yamamoto, Y. Onuki, H. Ikeda, and Y. Matsuda, Science **331**, 439 (2011), <https://doi.org/10.1126/science.1197358>.
17. S. Kasahara, T. Shibauchi, K. Hashimoto, K. Ikada, S. Tonegawa, R. Okazaki, H. Shishido, H. Ikeda, H. Takeya, K. Hirata, T. Terashima, and Y. Matsuda, Phys. Rev. B **81**, 184519 (2010), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.184519>
18. R. Fernandes, A. Chubukov, and J. Schmalian, Nat. Phys. **10**, 97 (2014), <https://doi.org/10.1038/nphys2877>
19. S. Kasahara, H. J. Shi, K. Hashimoto, S. Tonegawa, Y. Mizukami, T. Shibauchi, K. Sugimoto, T. Fukuda, T. Terashima, A. H. Nevidomskyy, and Y. Matsuda, Nature (London) **486**, 382 (2012), <https://doi.org/10.1038/nature11178>
20. X. Lu, J. Park, R. Zhang, H. Luo, A. H. Nevidomskyy, Q. Si, and P. Dai, Science **345**, 657 (2014), <https://doi.org/10.1126/science.1251853>
21. A. E. Bohmer and A. Kreisel, J. Phys.: Condens. Matt. **30**, 023001 (2018), <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa9caa>
22. A. M. Perelomov, Sov. Phys. Usp. **20**, 703 (1977), <https://doi.org/10.1070/PU1977v020n09ABEH005459>
23. A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, Berlin (1986).
24. B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.052401>
25. N. Papanikolaou, Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).
26. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, JMMM **325**, 125 (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.08.027>
27. A. Lauchli, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.229901>
28. A. Smerald and N. Shannon, Phys. Rev. B **88**, 184430 (2013), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.184430>
29. G. Fath and J. Solyom, Phys. Rev. B **44**, 11836 (1991), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.11836>
30. A. A. Zvyagin and V. V. Slavin, Phys. Rev. B **106**, 054429 (2022), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.054429>

31. Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, A.K. Kolezhuk, and B.A. Ivanov, Phys. Rev. Lett. **106**, 097202 (2011), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.097202>
32. O. A. Kosmachev, Yu. A. Fridman, E. G. Galkina, and B. A. Ivanov, JETP **120**, 281 (2015), <https://doi.org/10.7868/S0044451015020121>
33. L. E. Svistov, T. Fujita, H. Yamaguchi, S. Kimura, K. Omura, A. Prokofiev, A. I. Smirnov, and Z. Honda, M. Hagiwara, JETP Lett. **93**, 2 (2011).
34. П. Де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
35. M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu, Europhys. Lett. **92**, 37001 (2010), <https://doi.org/10.1209/0295-5075/92/37001>
36. С. Л. Гинзбург, ФТТ **12**, 1805 (1970).
37. Y. Y. Hsieh and M. Blume, Phys. Rev. B **8**, 2684 (1972), <https://doi.org/10.1063/1.1853192>
38. Е. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, Наука, Москва, (1988)
39. V. M. Matveev, Sov. Phys. JETP **38**, 81 (1974).
40. Yu. A. Fridman and D.V.Spirin, Phys. Stat. Sol. (b) **231**, 165 (2002), [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200205\)](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200205))
41. D. V. Spirin and Yu. A. Fridman, J. Magn. Magn. Mater. **260**, 215 (2003).
42. A. V. Chubukov, J. Phys. Cond. Matt. **2**, 1593 (1990).
43. E. A. Yarygina, Ya. Yu. Matyunina, Ph. N. Klevets, and Yu. A. Fridman, J. Magn. Magn. Mater. **167043** (2020), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167043>
44. Yu. N. Mitsai and Yu. A. Fridman, TMF **81**, 263 (1989).
45. V. V. Val'kov, Sov. J. Theor. Math. Phys. **76**, 766 (1988), <https://doi.org/10.1134/S1063783412070128>
46. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, J. Magn. Magn. Mater. **320**, 435 (2008). [doi:10.1016/j.jmmm.2007.07.001](https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2007.07.001)
47. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
48. Ю.А.Изюмов, Ф.А.Кассан-оглы, Ю.Н.Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, Москва (1974).
49. В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наук. думка, Киев (1984), с. 336.
50. Yu. A. Fridman and O. A. Kosmachev, Phys. Sol. St. **51**, 1167 (2009), <https://doi.org/10.1134/S1063783409060146>
51. V. V. Val'kov, T. A. Val'kova, and S. G. Ovchinnikov, JETP **88**, 550 (1985).
52. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Издательство СО РАН, Новосибирск (2001), с.277.
53. E. A. Yarygina, Ya. Yu. Matyunina, Ph. N. Klevets, and Yu. A. Fridman, JETP **129**, 1070 (2019), <https://doi.org/10.1134/S1063776119110086>
54. V. I. Butrim, B. A. Ivanov, O. A. Kosmachev, and Yu. A. Fridman, Phys. Sol. St. **54**, 1363 (2012).
55. V. I. Butrim, B. A. Ivanov, and Yu. A. Fridman, Low Temp. Phys. **38**, 395 (2012), <http://dx.doi.org/10.1063/1.4709439>
56. O. A. Kosmachev, Yu. A. Fridman, and B. A. Ivanov, JETP Lett. **105**, 453 (2017), <https://doi.org/10.1134/S0021364017070086>