ЖЭТФ, 2025, том 167, вып. 1, стр. 95–114

КВАНТОВЫЙ $SU(3)$-ФЕРРИМАГНЕТИК НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. С. Мартынов, Д. М. Дзебисашвили [*]

Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 21 июля 2024 г.,
после переработки 30 августа 2024 г.
Принята к публикации 4 сентября 2024 г.

Построены фазовые диаграммы (магнитное поле H–одноионная анизотропия D) для трехподрешеточного $SU(3)$-ферримагнетика на треугольной решетке с разными спинами подрешеток ($S = 1, 1/2, 1/2$) при различных значениях параметров обмена I (между спинами $S = 1$ и $S = 1/2$) и J (между спинами $S = 1/2$). Для корректного учета алгебры генераторов группы $SU(3)$, включающей квадрупольные операторы, использовалось представление операторов Хаббарда. Показано, что в зависимости от значений параметров системы могут быть реализованы ферримагнитные Y- или перевернутая Y ($\bar{Y}$)-фазы, скошенная V-фаза (спины $S = 1/2$ параллельны), веерная W-фаза, а также коллинеарные ферримагнитная и ферромагнитная фазы. В случае $I < J$ на фазовой диаграмме возникает линия, на которой $SU(3)$-ферримагнетик распадается на две независимые подсистемы, одна из которых парамагнитная со спинами $S = 1$, а вторая антиферромагнитная со спинами $S = 1/2$ в нулевом эффективном магнитном поле. В спин-волновом приближении рассчитаны зависимости средних значений квадрупольного момента и дипольных моментов трех подрешеток от магнитного поля и параметра одноионной анизотропии. Проанализирован спектр спин-волновых возбуждений как при $I > J$, так и при $I < J$. Показано, что при $I = J$ в $SU(3)$-ферримагнетике возникает случайное вырождение, которое может быть снято при учете квантовых флуктуаций.

DOI: 10.31857/S0044451025010092

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время значительно возрос интерес к материалам, в которых релятивистское спин-орбитальное взаимодействие приводит к проявлению квантовых эффектов на макроскопическом уровне [1, 2]. Такие материалы принято называть квантовыми магнетиками [3]. Одним из наиболее ярких проявлений квантовых эффектов является значительное сокращение среднего значения спина в магнетиках с $S > 1/2$ [4]. Причина сокращения спина обусловлена учетом одноионной анизотропии (ОА), возникающей вследствие спин-орбитального взаимодействия, или учетом парных взаимодействий, связанных с высшими спиновыми инвариантами вида $(\mathbf{S}_f\mathbf{S}_g)^{2S}$ [5–15]. Для магнитных систем, в которых указанные негейзенберговские взаимодействия достаточно сильны, были обнаружены фазы спинового нематика, которые характеризуются нулевой намагниченностью даже при нулевой температуре (т. е. полное сокращение спина), но в которых имеется спонтанное нарушение симметрии за счет квадрупольных параметров порядка (средних значений операторов, билинейных по компонентам спина) [10]. Усилению указанных квантовых эффектов способствуют фрустрации [2], низкая температура, низкая размерность системы [16], а также фактор многоподрешеточности.

Например, в многоподрешеточных ферримагнетиках с различными магнитными ионами проявление квантовых эффектов может быть значительно усилено за счет возможной компенсации эффективного поля, действующего на спины магнитоактивных ионов [17–26]. Действительно, как было показано в работе [27], в ферримагнетике с двумя подрешетками квантовое сокращение спина в анизотроп-

[*] E-mail: ddm@iph.krasn.ru

ной подрешетке (с $S = 1$) при низких температурах может быть существенно уменьшено под действием поля обменного взаимодействия со стороны изотропной подрешетки ($S = 1/2$). Если же имеется более двух подрешеток, то суммарное эффективное поле двух изотропных антиферромагнитно связанных подрешеток, действующее на ионы третьей анизотропной подрешетки, может обратиться в нуль, устраняя тем самым упомянутый механизм подавления квантового сокращения спина.

В этой связи одна из задач теории квантовых магнетиков видится в поиске такой микроскопической модели, которая позволила бы предсказать и изучить новые квантовые эффекты, имеющие перспективы как с экспериментальной точки зрения, так и с прикладной. С учетом сказанного выше очевидно, что один из путей в данном направлении состоит в изучении совместного действия нескольких различных аспектов, способствующих реализации явлений квантового магнетизма.

В контексте данного направления развития теории были выполнены, например, работы [28–30], в которых была предложена модель трехподрешеточного ферримагнетика со смешанными спинами $S = 1, 1/2, 1/2$ на треугольной решетке с изинговским обменным взаимодействием и ОА в подсистеме спинов с $S = 1$. В указанных работах главный акцент исследований, основанных на методе Монте-Карло, был сделан на построении фазовых диаграмм температура–ОА, а также на поиске интересного с технологической точки зрения режима компенсации, в котором достигается нулевая полная намагниченность при температуре ниже критической. Важно отметить, что наряду с ОА в подсистеме спинов $S = 1$ предложенная в [28–30] модель обладала такими важными свойствами, как низкая размерность и геометрическая фрустрация, которые, как отмечалось выше, способствуют усилению квантовых эффектов.

В недавней работе [31] авторами была исследована модель $SU(3)$-ферримагнетика (SU3F), которая в основных моментах совпадает с моделью, предложенной в [28–30], однако имеет два важных обобщения. Во-первых, вместо изинговского обменного взаимодействия в модели SU3F используется изотропный гейзенберговский обмен. Как известно, в неколлинеарных магнитных структурах поперечные вклады в обменное взаимодействие являются источником нулевых квантовых колебаний и, как следствие, антиферромагнитных флуктуаций (АФ). Эти АФ, так же как и ОА, могут приводить к квантовому сокращению спина, и поэтому квантовые эффекты, обусловленные АФ и ОА, следует различать. Второе важное отличие SU3F от модели, предложенной в [28–30], состоит в использовании разных значений интегралов I и J обменных взаимодействий между подрешетками со спином $S = 1$ и $S = 1/2$, и между двумя подрешетками с $S = 1/2$ соответственно. Как будет показано ниже, для разных соотношений между обменными интегралами фазовые диаграммы SU3F качественно отличаются.

Кроме того, необходимо указать на важную концептуальную особенность модели SU3F. Она связана с тем, что наличие немалой ОА, как известно [8–12, 14, 15, 27, 32–36], приводит к необходимости учета полного набора генераторов алгебры $SU(3)$, действующих в гильбертовом пространстве состояний спина $S = 1$. Поэтому для описания таких систем алгебры обычных спиновых операторов недостаточно. Чтобы подчеркнуть данное обстоятельство, предложенная в работе [31] модель была названа моделью квантового $SU(3)$-ферримагнетика.

Общая особенность модели SU3F состоит в одновременном учете нескольких из перечисленных выше аспектов, способствующих проявлению квантовых эффектов: ОА, АФ, многоподрешеточность, низкая размерность, фрустрация обменных связей.

Исследование SU3F в работе [31] проводилось в отсутствие внешнего магнитного поля и при нулевой температуре. Были рассчитаны зависимости средних моментов подрешеток и квадрупольного момента от параметра ОА при различных соотношениях обменных интегралов I/J. Оказалось, что критическое значение ОА D_c, при котором SU3F переходит в квадрупольную фазу, может быть много меньше как I, так и J. Кроме того, при $I > J$ в зависимости полного момента M от параметра ОА наблюдалась точка компенсации, т. е. обращение в нуль M при $D < D_c$.

Данная работа является логическим продолжением проведенных в [31] исследований. Ее основная цель состоит в построении фазовой диаграммы SU3F в координатах внешнее магнитное поле — параметр ОА, а также в анализе модификации магнитной структуры и параметров порядка при пересечении границ различных фаз. Расчет энергии основного состояния и определение спиновой конфигурации, отвечающей данной энергии, проводятся в приближении среднего поля в пределе нулевых температур. Последнее условие, как известно, является недостижимым для метода Монте-Карло, использованного в цитированных выше работах [28–30]. Для корректного учета алгебры генераторов группы $SU(3)$ в подсистеме спинов $S = 1$ применяется формализм операторов Хаббарда [11,35,37]. При расчете параметров порядка проводится бозонизация спиновых операторов: для подсистемы спинов $S = 1/2$ используются преобразования Гольштейна – Примакова, а для подсистемы спинов $S = 1$ — формализм индефинитной метрики [11,14].

Дальнейшее изложение статьи организовано следующим образом. Во втором разделе сформулирован гамильтониан SU3F во внешнем магнитном поле, лежащем в плоскости легкого намагничивания. В разд. 3 проводится $SU(2)$-преобразование спиновых операторов с $S = 1/2$, отвечающее повороту локальных осей координат. В разд. 4 проводится преобразование Гольштейна – Примакова для подсистемы спинов с $S = 1/2$. В пятом разделе описывается переход к представлению операторов Хаббарда и их трехкратное $SU(3)$-преобразование для диагонализации одноионного гамильтониана подсистемы спинов с $S = 1$. Бозонизация операторов Хаббарда с последующим получением дисперсионного уравнения описывается в разд. 6. В седьмом и восьмом разделах анализируются особенности фазовых диаграмм и характер изменений параметров порядка при $I < J$ и $I > J$ соответственно. В разд. 9 продемонстрировано вырождение среднеполевого основного состояния SU3F при $I = J$. В разд. 10 обсуждаются изменения спектра спин-волновых возбуждений при увеличении магнитного поля при разных соотношениях параметров обмена. Основные выводы работы представлены в разд. 11.

2. МОДЕЛЬ $SU(3)$-ФЕРРИМАГНЕТИКА

Кристаллическая структура рассматриваемого SU3F представлена на рис. 1. Красными кружками отмечены узлы подрешетки со значением спина $S = 1$, обозначаемой далее как L-подрешетка. Зеленым и синим цветом отмечены узлы подрешеток со значением спина $S = 1/2$. Эти подрешетки далее обозначаются символами F и G соответственно. Периодичность системы определяется одинаковыми по модулю базисными векторами $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$. Векторы $\boldsymbol{\zeta}$ и $\boldsymbol{\xi}$ соединяют узлы из разных подрешеток.

Гамильтониан SU3F во внешнем магнитном поле может быть представлен в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_{exch} + \mathcal{H}_{field}, \tag{1}$$

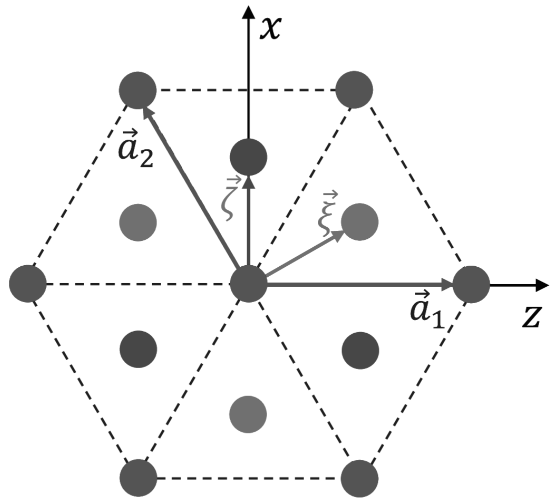

Рис. 1. Кристаллическая структура трехподрешеточного SU3F на треугольной решетке. Красными, зелеными и синими кружками обозначены положения узлов в L-, F- и G-подрешетках соответственно, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ — векторы решетки Браве, а ξ и ζ — векторы базиса

где

$$\begin{aligned} &\mathcal{H}_{exch} = J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g + I \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_l + I \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \mathbf{S}_l, \\ &\mathcal{H}_A = D \sum_l \left(S_l^y\right)^2, \\ &\mathcal{H}_{field} = -h \sum_f S_f^z - h \sum_g S_g^z - h_L \sum_l S_l^z. \end{aligned} \tag{2}$$

Оператор $\mathcal{H}_{exch}$ описывает парное обменное взаимодействие между ближайшими спинами из разных подрешеток. Нижние индексы f, g и l у операторов спина обозначают узлы из F-, G- и L-подрешеток соответственно. Обменный интеграл J определяет интенсивность антиферромагнитных взаимодействий между ближайшими спинами из F- и G-подрешеток, а интеграл I — из $F(G)$- и L-подрешеток. Фигурные скобки под тремя символами суммы в (2) означают, что суммирование ведется только по ближайшим узлам, и каждая пара узлов учитывается только один раз. Оператор $\mathcal{H}_A$ описывает влияние ОА типа легкая плоскость на спины $S = 1$ в L-подрешетке. Параметр одноионной анизотропии D — положительный. Ось y направлена перпендикулярно плоскости ферримагнетика xz, являющейся, следовательно, плоскостью легкого намагничивания. Оператор $\mathcal{H}_{field}$ учитывает зеемановскую энергию спинов во внешнем магнитном поле H, лежащем в плоскости ферримагнетика (легкой плоскости) и определяющем параметры $h = g\mu_B H$ и $h_L = g_L \mu_B H$, где μ_B — магнетон Бора, а g и g_L — факторы Ланде для $F(G)$-подрешетки со спином $S = 1/2$ и L-подрешетки с $S = 1$ соответственно. В общем случае g-факторы могут различаться для разных подрешеток. В данной работе мы будем считать, что моменты формируются без участия орбитальных степеней свободы, т. е. являются чисто спиновыми, и, таким образом, $g_L = g = 2$.

Направление магнитного поля и тип ОА способствуют тому, что средней момент L-подрешетки $\mathbf{R}_L$ оказывается ориентированным в плоскости xz, перпендикулярной оси анизотропии y. Кроме того, учитывая характер обменных взаимодействий, а также результаты работы [38], можно утверждать, что магнитная структура основного состояния SU3F при любых значениях D и H характеризуется планарной конфигурацией средних значений спинов. Поэтому без ограничения общности будем считать, что спины всех трех подрешеток лежат в плоскости ферримагнетика xz. Ось z исходной системы координат удобно направить вдоль магнитного поля.

3. $SU(2)$-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГАМИЛЬТОНИАНА

Вычисление энергии основного состояния SU3F целесообразно начать с проведения унитарного преобразования гамильтониана $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H}(\theta_F, \theta_G) = U_2(\theta_F, \theta_G)\, \mathcal{H}\, U_2^+(\theta_F, \theta_G), \tag{3}$$

с оператором

$$U_2(\theta) = \prod_{f\in F} \exp\left(-i\theta_F S_f^y\right) \prod_{g\in G} \exp\left(-i\theta_G S_g^y\right). \tag{4}$$

Преобразование (3) позволяет перейти для F- и G-подрешеток к новым локальным координатам, в которых оси квантования z' и z'' повернуты на углы θ_F и θ_G вокруг оси y и направлены вдоль равновесных намагниченностей $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ соответственно (см. рис. 2).

Унитарное преобразование (3) гамильтониана (1) отвечает следующей формальной замене спиновых операторов из F- и G-подрешеток [39]:

$$\begin{aligned} &S_f^x \to S_f^x \cos\theta_F + S_f^z \sin\theta_F, \quad S_f^y \to S_f^y, \\ &S_f^z \to S_f^z \cos\theta_F - S_f^x \sin\theta_F, \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} &S_g^x \to S_g^x \cos\theta_G + S_g^z \sin\theta_G, \quad S_g^y \to S_g^y, \\ &S_g^z \to S_g^z \cos\theta_G - S_g^x \sin\theta_G. \end{aligned} \tag{6}$$

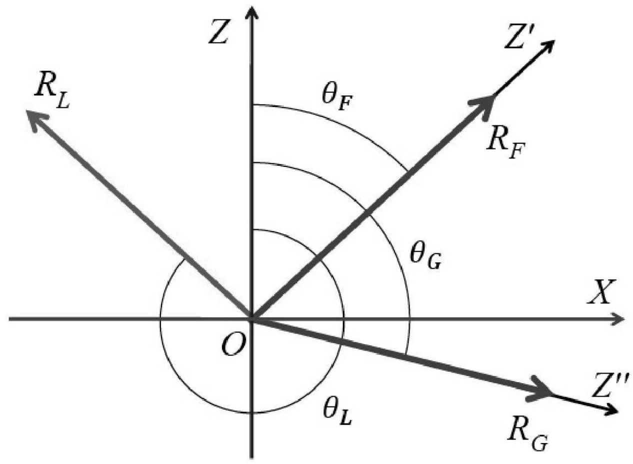

Рис. 2. Поворот локальных осей координат при унитарном преобразовании (3). В F- и G-подрешетках с $S = 1/2$ оси z поворачиваются на углы θ_F и θ_G и занимают новые положения z' и z''. Локальные координаты в L-подсистеме с $S = 1$ остаются неизменными, а угол, образованный моментом R_L и осью z, обозначен посредством θ_L

В результате оператор Гамильтона (1) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = D \sum_l (S_l^y)^2 &+ \\ + J \sum_{\{fg\}} \{(S_f^x S_g^x + S_f^z S_g^z) \cos(\theta_F - \theta_G) &+ \\ + S_f^y S_g^y + (S_f^z S_g^x - S_f^x S_g^z) \sin(\theta_F - \theta_G)\} &+ \\ + I \sum_{\{fl\}} \{(S_f^x S_l^x + S_f^z S_l^z) \cos\theta_F + S_f^y S_l^y &+ \\ + (S_f^z S_l^x - S_f^x S_l^z) \sin\theta_F\} &+ \\ + I \sum_{\{gl\}} \{(S_g^x S_l^x + S_g^z S_l^z) \cos\theta_G + S_g^y S_l^y &+ \\ + (S_g^z S_l^x - S_g^x S_l^z) \sin\theta_G\} &- \\ - h \sum_f \{S_f^z \cos\theta_F - S_f^x \sin\theta_F\} &- \\ - h \sum_g \{S_g^z \cos\theta_G - S_g^x \sin\theta_G\} - h_L \sum_l S_l^z&, \end{aligned} \tag{7}$$

где операторы S_f^β и S_g^β $(\beta = x, y, z)$, относящиеся к F- и G-подсистемам, определяют проекции спиновых моментов на соответствующую индексу β ось в новых (повернутых) локальных системах координат.

4. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГОЛЬШТЕЙНА–ПРИМАКОВА

Согласно изложенной во введении стратегии вычисления энергии основного состояния SU3F, проведем преобразование Гольштейна–Примакова отдельно для F- и G-подрешеток:

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S - a_f^+ a_f} \cdot a_f, \quad S_f^z = S - a_f^+ a_f, \\ S_g^+ &= \sqrt{2S - b_g^+ b_g} \cdot b_g, \quad S_f^z = S - b_g^+ b_g, \end{aligned} \tag{8}$$

где операторы рождения $a_f^+(b_g^+)$ и уничтожения $a_f(b_g)$ бозонов описывают переходы спина в $F(G)$-подрешетке на узле $f(g)$ из состояния $|\uparrow'\rangle(|\uparrow''\rangle)$, отвечающего ориентации спина вдоль оси $z'(z'')$, в состояние с противоположной ориентацией $|\downarrow'\rangle(|\downarrow''\rangle)$ и обратно.

Результат подстановки (8) в гамильтониан (7) запишем в виде

$$\mathcal{H} = E_0 + \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} + \mathcal{H}^{(2)}. \tag{9}$$

В этом выражении

$$\begin{aligned} E_0 = J_0 S^2 N \cos(\theta_F - \theta_G) - \\ -hSN(\cos\theta_F + \cos\theta_G), \end{aligned} \tag{10}$$

а следующие три операторных слагаемых $H^{(n)}$ $(n = 0, 1, 2)$ классифицируются по степеням бозе-операторов n. Величина N в формуле (10) обозначает число узлов в подрешетке.

Оператор $\mathcal{H}^{(0)}$ представляет собой сумму одноионных гамильтонианов L-подсистемы:

$$\mathcal{H}^{(0)} = \sum_l \mathcal{H}_0(l),$$

где

$$\mathcal{H}_0(l) = D(S_l^y)^2 + \bar{H}_z S_l^z + \bar{H}_x S_l^x, \tag{11}$$

а эффективные поля определяются выражениями

$$\begin{aligned} \bar{H}_z &= I_0 S(\cos\theta_F + \cos\theta_G) - h_L, \\ \bar{H}_x &= I_0 S(\sin\theta_F + \sin\theta_G), \quad I_0 = 3I. \end{aligned} \tag{12}$$

Линейное по бозе-операторам слагаемое гамильтониана (9) запишем в следующей форме:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)} = \sum_{\{fl\}} I\sqrt{\frac{S}{2}} \left[\cos\theta_F S_l^x - \sin\theta_F S_l^z\right](a_f + a_f^+) + \\ + \sum_f \sqrt{\frac{S}{2}} \left[J_0 S \sin(\theta_G - \theta_F) + h\sin\theta_F\right](a_f + a_f^+) + \\ + \sum_{\{gl\}} I\sqrt{\frac{S}{2}} \left[\cos\theta_G S_l^x - \sin\theta_G S_l^z\right](b_g + b_g^+) + \\ + \sum_g \sqrt{\frac{S}{2}} \left[J_0 S \sin(\theta_F - \theta_G) + h\sin\theta_G\right](b_g + b_g^+) + \\ + \frac{I}{i}\sqrt{\frac{S}{2}} \left\{\sum_{\{fl\}} S_l^y (a_f - a_f^+) + \sum_{\{gl\}} S_l^y (b_g - b_g^+)\right\}, \end{aligned} \tag{13}$$

где $J_0 = 3J$.

Последнее слагаемое в выражении (9) описывает возбуждения в F- и G-подсистемах и имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(2)} = J\frac{S}{2} \sum_{\{f,g\}} \Big\{ \Big[(a_f + a_f^+)(b_g + b_g^+) - \\ -2(a_f^+ a_f + b_g^+ b_g)\Big] \cos(\theta_F - \theta_G) - \\ -(a_f - a_f^+)(b_g - b_g^+)\Big\} - \\ -I \sum_{\{f,l\}} (\cos\theta_F S_l^z + \sin\theta_F S_l^x) a_f^+ a_f - \\ -I \sum_{\{g,l\}} (\cos\theta_G S_l^z + \sin\theta_G S_l^x) b_g^+ b_g + \\ +h\cos\theta_F \sum_f a_f^+ a_f + h\cos\theta_G \sum_g b_g^+ b_g. \end{aligned} \tag{14}$$

Далее, логика среднего поля диктует проведение замены в выражениях для $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ спиновых операторов L-подсистемы их средними значениями. В рассматриваемом режиме нулевых температур усреднение операторов S_l^α $(\alpha = x, y, z)$ достаточно проводить по основному состоянию одноузельного гамильтониана (11).

5. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ОДНОИОННОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

Для диагонализации одноионного гамильтониана (11), как и в работе [31], воспользуемся подходом развитым в [40]. Перейдем от спиновых операторов к операторам Хаббарда [37] $X_l^{m,n} = |m\rangle\langle n|$, где $m, n = \{-1, 0, +1\}$ — собственные значения оператора S_l^z, а $|m\rangle$ и $|n\rangle$ — соответствующие собственные состояния: $S_l^z|n\rangle = n|n\rangle$. Подставляя выражения

$$\begin{aligned}
S_l^x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X_l^{1,0} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,1} + X_l^{0,\bar{1}}\right),\\
S_l^y &= \frac{i}{\sqrt{2}}\left(-X_l^{1,0} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,1} - X_l^{0,\bar{1}}\right),\\
(S_l^y)^2 &= \frac{1}{2}\left(X_l^{1,\bar{1}} + X_l^{\bar{1},1} - X_l^{1,1} - X_l^{\bar{1},\bar{1}}\right) + X_l^{0,0},\\
S_l^z &= X_l^{1,1} - X_l^{\bar{1},\bar{1}}, \qquad \bar{1} \equiv -1,
\end{aligned} \tag{15}$$

описывающие переход к представлению операторов Хаббарда, в одноионный гамильтониан (11) получаем

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_0(l) = \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right) X_l^{1,1} + D X_l^{0,0} + \\
+ \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right) X_l^{\bar{1},\bar{1}} - \frac{D}{2}\left(X_l^{1,\bar{1}} + X_l^{\bar{1},1}\right) + \\
+ \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}\left(X_l^{1,0} + X_l^{0,1} + X_l^{\bar{1},0} + X_l^{0,\bar{1}}\right).
\end{aligned} \tag{16}$$

В отсутствие магнитного поля основное состояние системы вырождено относительно вращения вокруг оси y. Тогда, выбирая направление оси z вдоль вектора $\mathbf{R}_L$ и учитывая справедливое в силу эквивалентности F- и G-подрешеток равенство $\theta_F = -\theta_G$, получаем, что величина $\bar{H}_x$ обращается в нуль, а последнее слагаемое в выражении (16) исчезает. В этом случае гамильтониан $\mathcal{H}_0(l)$ перемешивает только два из трех состояния ($|+1\rangle$ и $|-1\rangle$) и для его диагонализации достаточно провести одно унитарное преобразование (см. [31]). Наличие магнитного поля приводит к тому, что перемешанными оказываются все три состояния $|n\rangle$ ($n = \{-1, 0, +1\}$), а для диагонализации одноионного гамильтониана необходимо проводить три последовательных преобразования.

Унитарный оператор $U_{nm}(\alpha, l)$ каждого преобразования определяется своим генератором $\Gamma_{nm}(l) = X_l^{nm} - X_l^{mn}$ из группы $SU(3)$, согласно выражению

$$\begin{aligned}
U_{nm}(\alpha, l) = \exp\{\alpha \Gamma_{nm}(l)\} = \\
= 1 + (\cos\alpha - 1)(X_l^{nm} + X_l^{mn}) + \sin\alpha\ \Gamma_{nm}(l).
\end{aligned} \tag{17}$$

Новые операторы Хаббарда $X_l^{\tilde{r}\tilde{s}} = |\tilde{r}, l\rangle\langle\tilde{s}, l|$, определенные посредством новых состояний

$$|\tilde{r}, l\rangle = U_{nm}(-\alpha, l)|r, l\rangle, \tag{18}$$

выражаются через исходные операторы Хаббарда следующим образом:

$$X_l^{\tilde{r}\tilde{s}} = U_{nm}(-\alpha, l)\ X_l^{rs}\ U_{nm}^{+}(-\alpha, l). \tag{19}$$

Тогда рассматриваемое унитарное преобразование сводится к простой замене в одноузельном гамильтониане:

$$X_l^{rs} \to U_{\tilde{n}\tilde{m}}(\alpha, l)\ X_l^{\tilde{r}\tilde{s}}\ U_{\tilde{n}\tilde{m}}^{+}(\alpha, l). \tag{20}$$

Явные выражения для правой части последней формулы в общем случае были получены в работе [40] и для полноты изложения приведены в Приложении А. Вариационный параметр α в формуле (17) подбирается из условия обращения в нуль численного коэффициента перед недиагональными операторами $X_l^{\tilde{n}\tilde{m}}$ и $X_l^{\tilde{m}\tilde{n}}$ в преобразованном с помощью подстановки (20) гамильтониане.

Проводя последовательно три унитарных преобразования с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,-1}(\alpha_3)$ и $U_{1,-1}(\alpha_1)$ по правилу (20) и сохраняя в конечном выражении прежние обозначения для индексов новых состояний $n = \{-1, 0, +1\}$ (т. е. без тильды), получаем диагональную по операторам Хаббарда форму для одноионного гамильтониана $\mathcal{H}_0(l)$:

$$\mathcal{H}_0(l) = \sum_n \epsilon_n X_l^{nn}, \quad n = -1, 0, +1. \tag{21}$$

Собственные значения ϵ_n одноионного гамильтониана можно представить в виде ($\bar{1} = -1$)

$$\begin{aligned}
\epsilon_1 &= e_{\bar{1},\bar{1}} \sin^2\alpha_1 + e_{1,1}\cos^2\alpha_1 + e_{1,\bar{1}}\sin 2\alpha_1,\\
\epsilon_{\bar{1}} &= e_{\bar{1},\bar{1}} \cos^2\alpha_1 + e_{1,1}\sin^2\alpha_1 - e_{1,\bar{1}}\sin 2\alpha_1,\\
\epsilon_0 &= e_{0,0},
\end{aligned} \tag{22}$$

где

$$\begin{aligned}
& e_{1,1} = D\sin^2\alpha_2 + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right)\cos^2\alpha_2 + \\
& + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}\sin 2\alpha_2,\\
& e_{\bar{1},\bar{1}} = D\cos^2\alpha_2\sin^2\alpha_3 - \frac{D}{2}\sin\alpha_2\sin 2\alpha_3 + \\
& + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right)\sin^2\alpha_2\sin^2\alpha_3 + \\
& + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right)\cos^2\alpha_3 - \\
& - \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2\sin^2\alpha_3),\\
& e_{0,0} = D\cos^2\alpha_2\cos^2\alpha_3 + \frac{D}{2}\sin\alpha_2\sin 2\alpha_3 + \\
& + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right)\sin^2\alpha_2\cos^2\alpha_3 + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right)\sin^2\alpha_3 + \\
& + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2\cos^2\alpha_3),
\end{aligned} \tag{23}$$

$$e_{1,\bar{1}} = \left(\frac{\bar{H}_z}{2} - \frac{D}{4}\right)\sin(2\alpha_2)\sin\alpha_3 - \\ -\frac{D}{2}\cos\alpha_2\cos\alpha_3 + \\ +\frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}(-\cos 2\alpha_2\sin\alpha_3 + \sin\alpha_2\cos\alpha_3).$$

Из требования обращения в нуль коэффициентов при недиагональных X-операторах в преобразованном гамильтониане получается следующая система уравнений для углов α_j $(j = 1, 2, 3)$:

$$\operatorname{tg}\alpha_3 = \frac{\left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right)\sin 2\alpha_2 + \sqrt{2}\,\bar{H}_x\cos 2\alpha_2}{D\cos\alpha_2 - \sqrt{2}\,\bar{H}_x\sin\alpha_2},$$

$$\operatorname{tg}2\alpha_3 = \frac{\sqrt{2}\,\bar{H}_x\cos\alpha_2 + D\sin\alpha_2}{2\bar{H}_z + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right)\cos^2\alpha_2 - \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}}\sin 2\alpha_2}, \quad (24)$$

$$\operatorname{tg}2\alpha_1 = 2e_{1,\bar{1}}/(e_{1,1} - e_{\bar{1},\bar{1}}).$$

Аналогичным образом применяя к представлению (15) последовательно три раза формулу (20) с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,\bar{1}}(\alpha_3)$ и $U_{1,\bar{1}}(\alpha_1)$, можно выразить спиновые операторы S_l^x, S_l^y, S_l^z и $(S_l^y)^2$ через новые (преобразованные) X-операторы. Тогда коэффициенты разложения операторов спина S_l^α по новым операторам Хаббарда X_l^{nm} будут представлять матричные элементы спиновых операторов по новым состояниям: $s^\alpha_{n,m} \equiv \langle n|S_l^\alpha|m\rangle$ $(\alpha = x, y, z)$. Явные выражения для этих матричных элементов приведены в Приложении B.

В рамках приближения среднего поля следует заменить в гамильтониане $\mathcal{H}^{(1)}$ спиновые операторы их средними значениями, т. е. диагональными матричными элементами $s^\alpha_{n,n}$, вычисленными по основному состоянию $|n\rangle$, отвечающему минимальному значению ϵ_n. Ниже мы будем выбирать набор решений уравнений (24) для углов α_j $(j = 1, 2, 3)$ так, чтобы состояние $|+1\rangle$ было основным.

Поскольку $s^y_{nn} = 0$ для любого n (см. Приложение B), то последние две суммы в формуле (13) для $\mathcal{H}^{(1)}$ обращаются в нуль. Сокращение же остальных слагаемых в (13) имеет место при выполнении равенств

$$\begin{aligned} &I_0(s^x_{1,1}\cos\theta_F - s^z_{1,1}\sin\theta_F) + \\ &+ J_0S\sin(\theta_G - \theta_F) + h\sin\theta_F = 0, \\ &I_0(s^x_{1,1}\cos\theta_G - s^z_{1,1}\sin\theta_G) + \\ &+ J_0S\sin(\theta_F - \theta_G) + h\sin\theta_G = 0, \end{aligned} \quad (25)$$

используемых далее для определения равновесных значений углов θ_F и θ_G. Угол θ_L, введенный на рис. 2 для наглядности, параметром согласования не является и может быть определен через отношение средних значений проекций спиновых операторов S_l^z и S_l^x.

Магнитная структура основного состояния SU3F определяется решениями пяти уравнений (24) и (25) для углов α_j $(j = 1, 2, 3)$, θ_F и θ_G с последующем выбором того набора решений, который отвечает минимальному значению среднеполевой энергии всей системы

$$E_{MF} = E_0 + N\,\epsilon_1, \quad (26)$$

где величины E_0 и ϵ_1 определены уравнениями (10) и (22) соответственно. В разд. 7 будут представлены фазовые h–D-диаграммы SU3F, рассчитанные на основе изложенной здесь методики.

6. БОЗОНИЗАЦИЯ L-ПОДСИСТЕМЫ И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

В рамках выбранного приближения энергия основного состояния E_{MF} определяется без учета АФ. Поэтому вклады от последнего слагаемого в гамильтониане (9), квадратичные по бозе-операторам, в выражении (26) для E_{MF} отсутствуют. Тем не менее при расчете зависимостей параметров порядка от магнитного поля и ОА требуется энергетический спектр спин-волновых возбуждений, и для определения этого спектра оператор $\mathcal{H}^{(2)}$ уже необходимо учитывать.

Для вычисления энергетического спектра в спин-волновом приближении выразим сначала спиновые операторы через новые (преобразованные) X-операторы. Используя (15) и формулы из Приложения А, получим для S-операторов выражения вида

$$S_l^\alpha = \sum_{n,m} s^\alpha_{nm}\,X_l^{nm}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (27)$$

где матричные элементы s^α_{nm} приведены в Приложении B.

Далее учитывая, что спектр состояний $\mathcal{H}_0(l)$ характеризуется тремя уровнями, а основным состоянием одноионного гамильтониана является состояние $|+1\rangle$, введем, следуя работам [11, 14], два сорта бозе-операторов: c и d. Рождение одного $c(d)$-бозона на узле l описывается действием оператора рождения $c_l^+(d_l^+)$ и отвечает переходу системы из «вакуумного» состояния $|+1\rangle$ в состояние $|0\rangle(|-1\rangle)$ с одним $c(d)$-бозоном. Эрмитово-сопряженный оператор $c_l(d_l)$, действуя в обратном направлении, уничтожает $c(d)$-бозон. Состояния с большим числом бозонов отсекаются метрическим оператором как нефизические.

Представление операторов Хаббарда через бозе-операторы, предложенное в работе [40] в рамках формализма индефенитной метрики [41], имеет вид

$$\begin{aligned} &X_l^{1,0} = (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l) c_l, \quad X_l^{0,1} = c_l^+, \\ &X_l^{1,\bar{1}} = (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l) d_l, \quad X_l^{\bar{1},1} = d_l^+, \\ &X_l^{0,\bar{1}} = c_l^+ d_l, \quad X_l^{\bar{1},0} = d_l^+ c_l, \quad X_l^{0,0} = c_l^+ c_l, \\ &X_l^{\bar{1},\bar{1}} = d_l^+ d_l, \quad X_l^{1,1} = (1 - c_l^+ c_l - d_l^+ d_l). \end{aligned} \tag{28}$$

Используем представление (28) в формулах (27) и подставим полученные выражения для S-операторов (см. Приложение C) в слагаемые $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ гамильтониана (9). В результате возникает выражение, в котором необходимо оставить только вклады не выше второго порядка по a, b, c и d-операторам. Проводя фурье-преобразование

$$\begin{aligned} &a_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} a_k, \quad b_g = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikg} b_k, \\ &c_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} c_k, \quad d_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} d_k, \end{aligned} \tag{29}$$

получаем искомый гамильтониан, который можно записать следующим образом:

$$\mathcal{H} = E_{MF} + \mathcal{H}_{SW}. \tag{30}$$

Здесь первое слагаемое E_{MF} отвечает энергии основного состояния в приближении среднего поля (см. формулу (26)), а второе слагаемое $\mathcal{H}_{SW}$ описывает спин-волновые возбуждения и определяется выражением

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SW} = \sum_k \{ &E_a a_k^+ a_k + E_b b_k^+ b_k + E_c c_k^+ c_k + E_d d_k^+ d_k + \\ &+ J_+ \left(\gamma_k \, a_k^+ b_k + \gamma_k^* \, b_k^+ a_k \right) \} + \\ &+ J_- \left(\gamma_k \, a_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k^* \, a_k b_{-k} \right) + \\ &+ I_{0F}^+ \left(\gamma_k \, c_k^+ a_k + \gamma_k^* \, a_k^+ c_k \right) + \\ &+ I_{0F}^- \left(\gamma_k \, c_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* \, c_k a_{-k} \right) + \\ &+ I_{\bar{1}F}^+ \left(\gamma_k \, d_k^+ a_k + \gamma_k^* a_k^+ d_k \right) + \\ &+ I_{\bar{1}F}^- \left(\gamma_k \, d_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* \, d_k a_{-k} \right) + \\ &+ I_{0G}^+ \left(\gamma_k^* \, c_k^+ b_k + \gamma_k \, b_k^+ c_k \right) + \\ &+ I_{0G}^- \left(\gamma_k^* \, c_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k \, c_k b_{-k} \right) + \\ &+ I_{\bar{1}G}^+ \left(\gamma_k^* \, d_k^+ b_k + \gamma_k \, b_k^+ d_k \right) + \\ &+ I_{\bar{1}G}^- \left(\gamma_k^* \, d_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k \, d_k b_{-k} \right). \end{aligned} \tag{31}$$

При записи этого выражения были введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} E_a &= -J_0 S \cos(\theta_F - \theta_G) + h \cos\theta_F - \\ &\quad - I_0 (s_{11}^z \cos\theta_F + s_{11}^x \sin\theta_F), \\ E_b &= -J_0 S \cos(\theta_G - \theta_F) + h \cos\theta_G - \\ &\quad - I_0 (s_{11}^z \cos\theta_G + s_{11}^x \sin\theta_G), \\ E_c &= \epsilon_0 - \epsilon_1, \quad E_d = \epsilon_{\bar{1}} - \epsilon_1, \\ J_\pm &= \frac{J_0 S}{2} \left(\cos(\theta_F - \theta_G) \pm 1 \right), \\ I_{nA}^\pm &= I_0 \sqrt{\frac{S}{2}} \left(s_{n1}^x \cos\theta_A - s_{n1}^z \sin\theta_A \pm \frac{s_{n1}^y}{i} \right), \\ &\quad n = \{0, \bar{1}\}, \quad A = \{F, G\}, \\ \gamma_k &= \frac{1}{3} \sum_\delta e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos\frac{k_z}{2} e^{i\frac{k_x}{2\sqrt{3}}} + e^{-i\frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right). \end{aligned} \tag{32}$$

В сумме, определяющей инвариант треугольной решетки γ_k, вектор δ пробегает три значения: $\{\xi, -\zeta, \zeta - \xi\}$ (см. рис. 1). Зона Бриллюэна, ограничивающая область значений квазиимпульса k, представлена на рис. 3.

Для получения дисперсионного уравнения определим матричную запаздывающую функцию Грина $\langle\langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle\rangle_\omega$, где

$$\mathbf{X}_k^+ = (a_k^+, b_k^+, c_k^+, d_k^+, a_{-k}, b_{-k}, c_{-k}, d_{-k}).$$

Из требования существования нетривиальных решений уравнения движения для $\langle\langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle\rangle_\omega$ следует уравнение для спектра

$$\begin{vmatrix} \omega - \mathbf{A}_k & -\mathbf{B}_k \\ \mathbf{B}_k & \omega + \mathbf{A}_k \end{vmatrix} = 0, \tag{33}$$

где

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} E_a & J_+ \gamma_k & I_{0F}^+ \gamma_k^* & I_{\bar{1}F}^+ \gamma_k^* \\ J_+ \gamma_k^* & E_b & I_{0G}^+ \gamma_k & I_{\bar{1}G}^+ \gamma_k \\ I_{0F}^+ \gamma_k & I_{0G}^+ \gamma_k^* & E_c & 0 \\ I_{\bar{1}F}^+ \gamma_k & I_{\bar{1}G}^+ \gamma_k^* & 0 & E_d \end{pmatrix} \tag{34}$$

и

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 0 & J_- \gamma_k & I_{0F}^- \gamma_k^* & I_{\bar{1}F}^- \gamma_k^* \\ J_- \gamma_k^* & 0 & I_{0G}^- \gamma_k & I_{\bar{1}G}^- \gamma_k \\ I_{0F}^- \gamma_k & I_{0G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \\ I_{\bar{1}F}^- \gamma_k & I_{\bar{1}G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{35}$$

Дисперсионное уравнение (33) является уравнением четвертой степени относительно ω^2, а его решения ε_{jk} $(j = 1, \ldots, 4)$ представляют четыре ветви коллективных спиновых возбуждений рассматриваемого SU3F.

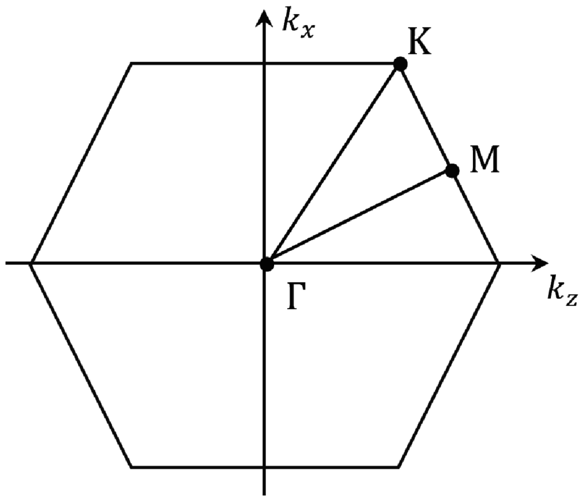

Рис. 3. Зона Бриллюэна треугольной решетки и три точки высокой симметрии: Γ, K, M

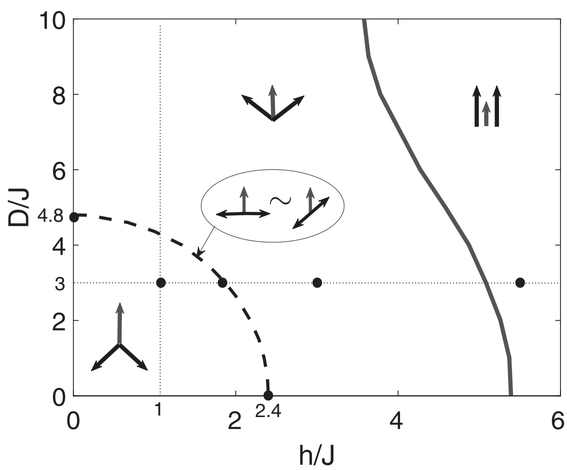

Рис. 4. Фазовая h–D-диаграмма основного состояния SU3F при $I/J = 0.8$. Черная штриховая линия отвечает границе между $\bar{Y}$- и W-фазами, а сплошная красная — между W-фазой и ферромагнитной. На пиктограммах, условно изображающих магнитную структуру SU3F, красная стрелка символизирует вектор $\mathbf{R}_L$, синие стрелки — $\mathbf{R}_{F(G)}$, а магнитное поле h считается направленным вверх. На штриховой линии реализуется фаза, в которой подсистемы со спинами $S = 1$ и $1/2$ становятся эффективно независимыми

7. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА SU3F ПРИ $I < J$

Обсуждение фазовой диаграммы SU3F в координатах магнитное поле — параметр ОА проведем отдельно для трех вариантов соотношений между обменными параметрами: $I < J$, $I > J$, $I = J$. В данном разделе мы рассмотрим первый вариант: $I < J$.

На рис. 4 изображена фазовая диаграмма основного состояния SU3F, рассчитанная согласно методике, изложенной в разд. 5, при соотношении обменных параметров $I/J = 0.8$. Видно, что в рассматриваемом режиме реализуются три фазы: перевернутая Y-фаза (обозначаемая далее как $\bar{Y}$), W-фаза и ферромагнитная фаза.

В $\bar{Y}$-фазе вектор среднего значения спина L-подрешетки $\mathbf{R}_L$ направлен вдоль направления магнитного поля (оси z), а векторы средних значений спинов F- и G-подрешеток $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ составляют с осью z одинаковые по модулю, но противоположные по знаку углы: $\theta_F = -\theta_G$. При этом модуль углов θ_F и θ_G изменяется в интервале $[\pi/2, \pi]$. В симметричной W-фазе углы θ_F и θ_G также равны по модулю и противоположны по знаку, однако, в отличие от $\bar{Y}$-фазы, интервал изменения модулей этих углов другой: $[0, \pi/2]$. В этом случае проекции всех трех векторов $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ на ось x положительны. Граница раздела $\bar{Y}$- и W-фаз на рис. 4 обозначена штриховой линией. Справа от красной линии на фазовой диаграмме реализуется ферромагнитная фаза: векторы средних значений спинов из L-, F- и G-подрешеток направлены вдоль магнитного поля.

Эволюция магнитной структуры при $I < J$ характеризуется монотонным уменьшением абсолютных значений углов θ_F и θ_G с увеличением H и обращением их в нуль при некотором значении поля, зависящем от параметра ОА (см. красную линию на рис. 4). Сказанное поясняется тремя пиктограммами, условно изображающими магнитную структуру в каждой из трех областей фазовой диаграммы.

Для понимания представленной фазовой диаграммы рассчитаем зависимости параметров порядка SU3F от магнитного поля при фиксированном значении параметра ОА и от параметра ОА при фиксированном h.

Средние значения спинов R_F и R_G в F- и G-подрешетках можно рассчитать, воспользовавшись представлением Гольштейна–Примакова (8), согласно которому

$$R_F = \langle S_f^{z'} \rangle = S - n_a,$$
$$R_G = \langle S_g^{z''} \rangle = S - n_b, \tag{36}$$

где числа заполнения бозонов $n_a = \langle a_f^+ a_f \rangle$ и $n_b = \langle b_g^+ b_g \rangle$ вычисляются по спектральной теореме из матричной функции Грина $\langle\langle \mathbf{X}_k | \mathbf{X}_k^+ \rangle\rangle_\omega$, введенной в разд. 6.

Средний спиновый магнитный момент L-подрешетки R_L можно найти по формуле

$$R_L = \sqrt{\left(R_L^z\right)^2 + \left(R_L^x\right)^2}, \tag{37}$$

где величины R_L^z и R_L^x определяются средними числами заполнения c- и d-бозонов: $n_c = \langle c_k^+ c_k \rangle$ и $n_d = \langle d_k^+ d_k \rangle$, а также корреляторами $\langle c_k^+ d_k \rangle$ и $\langle d_k^+ c_k \rangle$. Соответствующие выражения получаются в результате усреднения формул, приведенных в Приложении C. Поскольку суммарный магнитный момент $\mathbf{M} = \mathbf{R}_F + \mathbf{R}_G + \mathbf{R}_L$ направлен вдоль внешнего магнитного поля (т. е. оси z), то его поперечная компонента должна обращаться в нуль тождественно

$$R_L^x + R_F \sin\theta_F + R_G \sin\theta_G = 0,$$

а продольная компонента равна

$$M = R_L^z + R_F \cos\theta_F + R_G \cos\theta_G. \tag{38}$$

Среднее значение квадрупольного момента [42]

$$Q_2^0(l) = 3\left(S_l^y\right)^2 - 2 \tag{39}$$

рассчитывается аналогичным образом после усреднения соответствующих формул из Приложения C.

Графики, демонстрирующие зависимость полного момента M, средних значений спиновых магнитных моментов R_L, $R_{F(G)}$ и квадрупольного момента Q_2^0 от внешнего поля h при значении параметра ОА $D/J = 3$ и соотношении между обменными интегралами I/J, равном 0.8, представлены на рис. 5. Изменению магнитного поля на этом рисунке отвечает движение по горизонтальной пунктирной линии на фазовой диаграмме рис. 4. Видно, что в точке перехода из W-фазы в ферромагнитную все кривые на рис. 5 испытывают излом. При этом значения M и R_L ожидаемо увеличиваются при увеличении поля h, а квадрупольный момент — уменьшается.

Зависимости параметров порядка M, R_L, R_F, R_G и Q_2^0 от параметра D при значении магнитного поля $h/J = 1$ представлены на рис. 6. Изменению параметра D на этом рисунке отвечает движение по вертикальной пунктирной линии на фазовой диаграмме рис. 4. Видно, что при пересечении границы $\bar{Y}$- и W-фаз зависимости параметров $R_{F(G)}$ от D испытывают излом, а квадрупольный момент выходит на насыщение. Среднее значение момента L-подрешетки быстро уменьшается в окрестности границы, но при дальнейшем увеличении D спадает медленно. Очевидно, что именно уменьшение R_L способствует развороту вверх векторов $\mathbf{R}_{F(G)}$, поскольку уменьшает проигрыш в обменной энергии между спинами $S = 1$ и $S = 1/2$.

Важной особенностью фазовой диаграммы, представленной на рис. 4, является то, что на всей

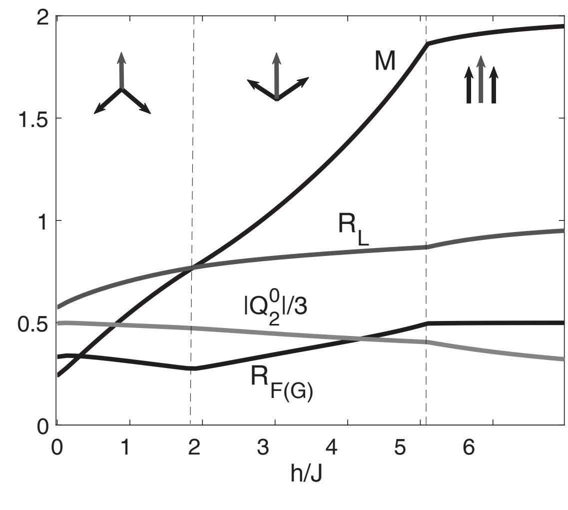

Рис. 5. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зеленая линия) от магнитного поля h. Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $D/J = 3$. Три пиктограммы, составленные из одной красной и двух синих стрелок, имеют тот же смысл, что и на рис. 4

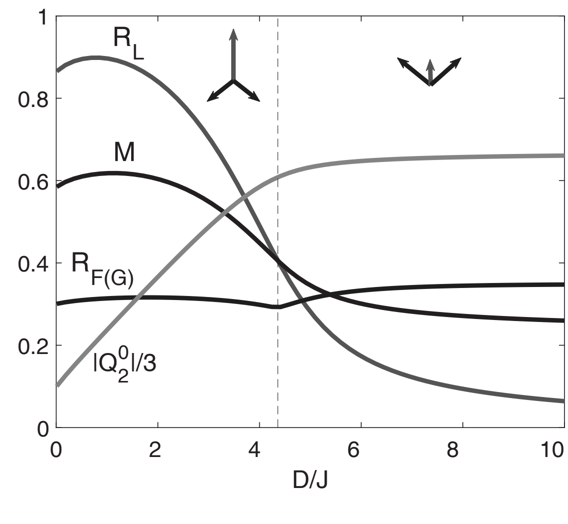

Рис. 6. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зеленая линия) от параметра ОА D. Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $h/J = 1$

границе между $\bar{Y}$- и W-фазами (черная штриховая линия) угол между векторами $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ равен π. В этом случае из выражений (12) для эффективных полей находим

$$\bar{H}_z = -h_L, \quad \bar{H}_x = 0. \tag{40}$$

При учете этих соотношений и при условии $h_L \neq 0$ решения уравнений (24) для углов α_j $(j = 1, 2, 3)$ получаются в виде

$$\operatorname{tg} 2\alpha_1 = \frac{D}{2h_L}(-1)^{n+m}, \quad \alpha_2 = \pi n, \quad \alpha_3 = \pi m, \quad (41)$$

где n и m — целые числа. Подстановка этих решений в выражения для матричных элементов спиновых операторов из приложения B дает

$$s_{11}^z = \cos 2\alpha_1, \quad s_{11}^x = 0. \quad (42)$$

Поскольку $s_{11}^x = 0$ и $\theta_F - \theta_G = \pi$, то из уравнений (25) для углов θ_F и θ_G находим условие

$$s_{11}^z = h/I_0, \quad (43)$$

которому должен удовлетворять элемент s_{11}^z на границе раздела $\bar{Y}$- и W-фаз. Уравнение, описывающее границу этих фаз, нетрудно получить из условия совместности трех уравнений для угла α_1 и матричный элемент s_{11}^z в формулах (41), (42) и (43). В результате получается следующая связь между параметрами модели и магнитным полем:

$$D = \frac{2\,g_L}{g}\sqrt{I_0^2 - h^2}. \quad (44)$$

Это выражение описывает аналитически штриховую линию на рис. 4.

Важно отметить, что в точках фазовой диаграммы, лежащих на этой штриховой линии, ориентация (антипараллельных) векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ относительно оси z не фиксирована. Последнее обстоятельство означает вырождение основного состояния SU3F относительно одновременного вращения спинов из F- и G-подрешеток вокруг оси y при условии, что векторы $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ остаются антипараллельными.

Действительно, подставляя решения (41) для углов α_j $(j = 1, 2, 3)$ в формулы (22) и (23), а также фиксируя в выражении (10) разницу в π между углами θ_F и θ_G, получаем

$$\epsilon_1 = D/2 - \sqrt{h_L^2 + (D/2)^2}, \quad E_0 = -J_0 S^2 N.$$

Следовательно, в точках фазовой диаграммы, лежащих строго на границе $\bar{Y}$- и W-фаз (т. е. на штриховой линии на рис. 4), энергия основного состояния $E_{MF} = E_0 + N\epsilon_1$ (см. (26)) не зависит от углов θ_F и θ_G.

Физическая причина такого поведения обусловлена тем, что при $\theta_F - \theta_G = \pi$ два эффективных поля, действующих на спины из L-подрешетки со стороны F- и G-подсистем, компенсируют друг друга (см. формулу (12)). В результате L-подрешетка перестает «чувствовать» как F-, так и G-подсистемы. При этом внешнее магнитное поле h_L продолжает действовать на L-подсистему, ориентируя вектор $\mathbf{R}_L$ вдоль направления $\mathbf{h}_L$.

Одновременно с этим F- и G-подрешетки перестают «чувствовать» L-подсистему, поскольку создаваемые ею эффективные поля в F- и G-подрешетках полностью компенсируются внешним магнитным полем h. Действительно, как следует, например, из выражения (7), величины E_a и E_b (см. обозначения (32)) являются теми самыми эффективными полями, которые действуют на спины соответственно из F- и G-подрешеток. Поскольку в точках, лежащих на штриховой линии фазовой диаграммы рис. 4, выполняются соотношения (42) и (43), то указанные выше вклады в эффективные поля E_a и E_b от L-подсистемы $(-I_0 s_{11}^z \cos\theta_{F(G)})$ и от внешнего магнитного поля $(h\cos\theta_{F(G)})$ взаимно сокращаются.

Таким образом, в точках, принадлежащих пунктирной линии на фазовой диаграмме на рис. 4, SU3F распадается на две эффективно невзаимодействующие подсистемы, одна из которых образована из спинов $S = 1$ (L-подрешетка), а вторая — из спинов $S = 1/2$ (F- и G-подрешетки). При этом спины с $S = 1$ ведут себя как парамагнетик во внешнем магнитном поле, поскольку они продолжают испытывать действие поля h_L, а взаимодействие между ними отсутствует. Спины $S = 1/2$ ведут себя как двухподрешеточный (F и G) коллинеарный антиферромагнетик в эффективном нулевом магнитном поле. Последнее обстоятельство, допускающее произвольную ориентацию вектора антиферромагнетизма в плоскости zx, обуславливает дополнительное вырождение основного состояния.

8. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА SU3F ПРИ $I/J > 1$

При $I > J$ фазовая диаграмма SU3F в магнитном поле качественно меняется. На рис. 7 представлена фазовая диаграмма, рассчитанная при соотношении обменных параметров $I/J = 1.2$. Видно, что в этом случае реализуются четыре магнитные фазы: Y-фаза, коллинеарная ферримагнитная фаза, $V(\bar{V})$-фаза, ферромагнитная фаза.

В Y-фазе вектор $\mathbf{R}_L$ среднего значения спина в L-подрешетке (красная стрелка на пиктограммах рис. 7) направлен против магнитного поля (оси z), а векторы $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ среднего спина в F-

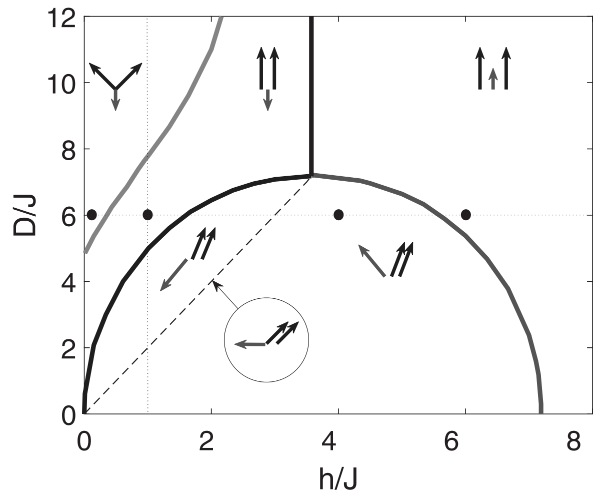

Рис. 7. Фазовая диаграмма основного состояния SU3F при $I/J = 1.2$. Зеленая линия обозначает границу раздела между Y-фазой и коллинеарной ферримагнитной фазой, синяя линия — между коллинеарной ферримагнитной и $\bar{V}$-фазой, черная линия — между ферромагнитной и коллинеарной ферримагнитной фазами, красная линия — между ферромагнитной и V-фазами, штриховая линия — между $\bar{V}$- и V-фазами (на этой линии $\theta_L = -\pi/2$)

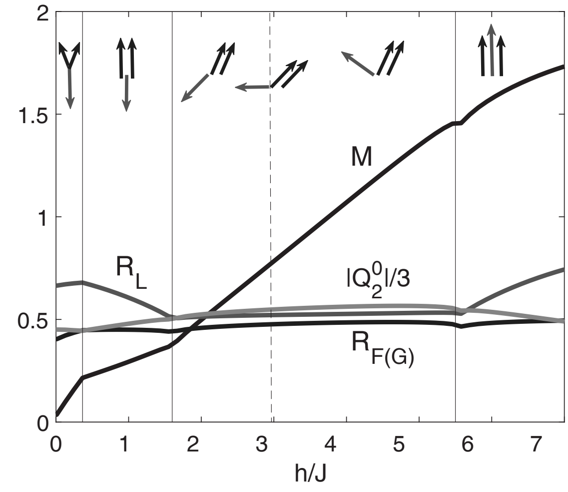

Рис. 8. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|$ (зеленая линия) от напряженности внешнего магнитного поля h при $I/J = 1.2$ и $D/J = 6$

и G-подрешетках (синие стрелки) составляют одинаковые по модулю, но противоположные по знаку углы с осью z: $\theta_F = -\theta_G$. При этом $|\theta_{F(G)}| \in [0, \pi/2]$.

При переходе из Y-фазы в коллинеарную ферримагнитную углы θ_F и θ_G одновременно обращаются в нуль и все три вектора $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ оказываются коллинеарны: первые два направлены по полю, а третий — против.

В области под синей и красной кривыми на рис. 7 реализуется так называемая V-фаза, в которой вектор $\mathbf{R}_L$ составляет с осью z ненулевой угол θ_L, а векторы $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ — равные друг другу углы θ_F и θ_G. Последние принимают значения в интервале $(0, \pi/2)$. Данную область можно разделить прямой линией (штриховой на рис. 7) на две подобласти. Справа от этой линии угол $|\theta_L| < \pi/2$, а слева угол $|\theta_L| > \pi/2$. За первой областью оставим обозначение V-фаза, а вторую, чтобы отличать от первой, обозначим $\bar{V}$-фазой. Во всех точках штриховой линии угол θ_L строго равен $\pi/2$.

В ферромагнитной фазе все три вектора $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ ориентированы вдоль магнитного поля.

Как и в предыдущем разделе, для понимания магнитной структуры рассмотрим изменения параметров порядка при движении по двум направлениям на фазовой диаграмме: вдоль горизонтальной пунктирной линии при фиксированном значении $D/J = 6$ и вдоль вертикальной пунктирной линии при значении поля $h/J = 1$ (см. рис. 7).

На рис. 8 представлены зависимости величин R_L, $R_{F(G)}$, M и Q_2^0 от внешнего магнитного поля h при $D/J = 6$. Это отвечает движению по горизонтальной пунктирной линии на рис. 7. Видно, что изменения $R_{F(G)}$ и Q_2^0 при увеличении поля h на указанном интервале незначительны, причем сокращение среднего значения спина $R_{F(G)}$ из-за АФ невелико. Средний момент L-подрешетки, напротив, подавлен существенно как за счет АФ, так и ОА. В ферримагнитной фазе вектор $\mathbf{R}_L$ направлен против поля, и величина R_L ожидаемо уменьшается с увеличением h. В ферромагнитной фазе вектор $\mathbf{R}_L$ направлен по полю, и величина R_L — увеличивается.

Важный факт, который демонстрируют графики на рис. 8, состоит в том, что эволюция магнитной структуры происходит в той же последовательности, что и для антиферромагнетика на треугольной решетке (АФМТР) с $S = 1/2$, но без ОА [38,43]. При этом если в АФМТР существование протяженной ферримагнитной (или uud) фазы может быть описано только при учете квантовых флуктуаций (снимающих случайное вырождение), то в SU3F эта фаза возникает исключительно за счет ОА. Кроме того, поведение полного момента M качественно воспроизводит основные этапы эволюции M в АФМТР: монотонное возрастание M в Y-, $\bar{V}$- и V-фазах; поло-

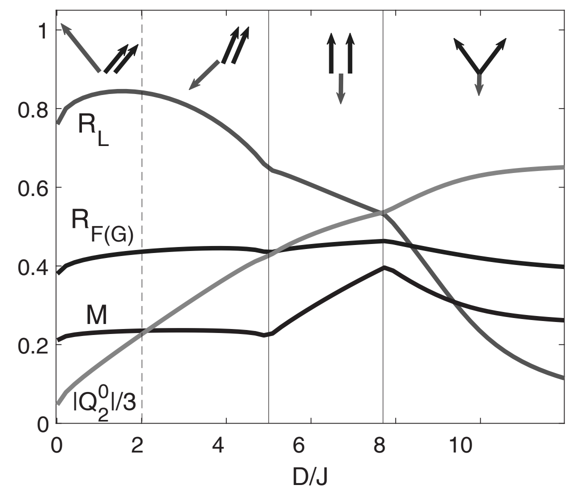

Рис. 9. Зависимости величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (черная линия) и $|Q_2^0|$ (зеленая линия) от параметра D для $I/J = 1.2$ и при $h/J = 1$

гий участок в ферримагнитной (uud) фазе (то, что в АФМТР принято называть 1/3-плато намагниченности); и область насыщения M в ферромагнитной фазе которое, однако, вследствие учета ОА слабо выражено.

Отметим также, что при увеличении параметра ОА интервал существования $\bar{V}$- и V-фаз на рис. 8 сжимается и, как следует из фазовой диаграммы на рис. 7, при $D/J \gtrsim 7$ этот интервал схлопывается в точку.

На рис. 9 представлена зависимость величин R_L, $R_{F(G)}$, M и $|Q_2^0|$ от параметра анизотропии D при $I/J = 1.2$ и величине магнитного поля $h/J = 1$. Эти зависимости строятся при движении вдоль вертикальной пунктирной линии на рис. 7. Видно, что квадрупольный момент при увеличении h ожидаемо возрастает, в то время как спиновый момент R_L из L-подрешетки после небольшого увеличения в области малых полей далее монотонно уменьшается. Спиновые моменты $R_{F(G)}$ из F- и G-подрешеток не меняют существенно своих значений на всем интервале изменения D. Поэтому заметное увеличение полного момента M в ферримагнитной фазе связано не с изменением ориентации моментов или абсолютных значений $R_{F(G)}$, а именно с уменьшением величины R_L за счет ОА. При переходе в Y-фазу полный момент M начинает уменьшаться, поскольку поворот векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ вокруг оси y уменьшает их проекцию на ось z.

Три вертикальные линии на рис. 9 разделяют четыре описанные выше фазы. При переходе из V-фазы в ферримагнитную и из ферримагнитной в Y-фазу все зависимости параметров порядка испытывают излом. В то же время переход из V-фазы в $\bar{V}$-фазу не сопровождается никакими аномалиями в представленных зависимостях.

9. ВЫРОЖДЕНИЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ $I = J$

Случай $I = J$ является особым, поскольку классический аналог гамильтониана SU3F, как мы сейчас покажем, имеет непрерывное случайное вырождение.

Действительно, определим зависящий от параметра λ гамильтониан:

$$\mathcal{H}_\lambda = J\sum_{\{fg\}}\mathbf{S}_f\mathbf{S}_g + \lambda J\sum_{\{fl\}}\mathbf{S}_f\mathbf{S}_l + \lambda J\sum_{\{gl\}}\mathbf{S}_g\mathbf{S}_l + \\ + D\sum_l \left(S_l^y\right)^2 - \mathbf{h}\left(\sum_f \mathbf{S}_f + \sum_g \mathbf{S}_g + \lambda\sum_l \mathbf{S}_l\right), \quad (45)$$

где направление магнитного поля $\mathbf{h} = g\mu_B\mathbf{H}$ в общем случае произвольно. Все обозначения в формуле (45) такие же, как и в гамильтониане (1). Видно, что если для λ удовлетворяются сразу два условия: $\lambda = I/J = g_L/g$ и поле $\mathbf{h}$ направлено вдоль оси z, то гамильтониан (45) совпадает с оператором $\mathcal{H}$, определенным формулой (1).

С другой стороны, нетрудно проверить, что гамильтониан (45) с точностью до константы

$$-JN\left(\frac{3}{2}\lambda^2 S_L(S_L+1) + \frac{9}{4} + \frac{h^2}{6J^2}\right), \quad S_L = 1, \quad (46)$$

может быть представлен в виде

$$\mathcal{H}_\lambda = D\sum_l \left(S_l^y\right)^2 + \\ + \frac{J}{4}\sum_p \left(\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda\mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J}\right)^2, \quad (47)$$

где сумма по p обозначает суммирование по треугольным плакетам, а нижние индексы F, G и L у спиновых операторов указывают на их принадлежность к соответствующей подрешетке в p-ом плакете.

Таким образом, если для параметров SU3F выполняется соотношение

$$\frac{I}{J} = \frac{g_L}{g}, \quad (48)$$

то гамильтониан SU3F в выражении (1) может быть представлен в виде (47) с $\mathbf{h}$, направленным вдоль оси z.

Если теперь вместо операторов спина в (47) рассмотреть классические моменты, т. е. обычные векторы фиксированной длины, то, как нетрудно заметить, минимальное значение гамильтониана (47) будет достигаться при равенстве нулю обоих его слагаемых. Обращение в нуль первого слагаемого означает, что спины L-подрешетки лежат в плоскости легкого намагничивания zx. Требование обращения в нуль второго слагаемого в (47) сводится к уравнению

$$\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda \mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J} = 0. \tag{49}$$

Очевидно, что в определенном интервале значений магнитных полей h это уравнение может быть удовлетворено бесконечным множеством решений, т. е. ориентаций трех векторов $\mathbf{R}_L$, $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, даже в том случае, когда поле $\mathbf{h}$ не лежит в плоскости zx. Кроме того, если направление магнитного поля параллельно плоскости zx (как в рассматриваемом нами случае), то ориентация векторов $\mathbf{R}_L$, $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, реализующая минимум гамильтониана (47), может и не быть компланарна с плоскостью zx.

Проведенный анализ классического предела гамильтониана (47) позволяет предположить, что отмеченное (непрерывное) вырождение основного состояния SU3F будет иметь место и в квантовом случае при выполнении соотношения (48). Выполненные нами расчеты в приближении среднего поля при $I = J$ и $g_L = g$ показали, что это действительно так.

Аналогичное рассмотренному вырождение имеет место и в других квантовых магнетиках, например, в АФМТР с $S = 1/2$ [43]. Как было впервые показано в работе [38], указанное вырождение может быть снято при учете нулевых квантовых колебаний. Такой подход требует учета более высоких порядков (по сравнению с гармоническим приближением, использованным в данной работе) при бозонизации спиновых операторов в рамках представления Гольштейна – Примакова для F- и G-подсистем и в формализме индефинитной метрики для L-подсистемы.

По этой причине построение фазовой диаграммы SU3F при критических параметрах, удовлетворяющих соотношению (48), будет проведено авторами в рамках отдельного исследования.

10. СПИН-ВОЛНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В SU3F В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Спектральные свойства SU3F в нулевом магнитном поле были подробно исследованы в работе авторов [31]. В данном разделе мы проведем анализ изменений спектра в ненулевом магнитном поле при фиксированном значении параметра ОА. Четыре дисперсионные кривые $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ ($j = 1, \ldots, 4$) рассчитывались для каждого набора параметров модели на основе уравнения (33), полученного в разд. 6.

На рис. 10 представлены результаты численных расчетов дисперсионных кривых для четырех значений магнитного поля при параметрах модели $I/J = 0.8$ и $D/J = 3$. На фазовой диаграмме на рис. 4 указанным четырем значениям поля h отвечают четыре черные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной прямой. Видно, что при $h/J = 1$ реализуется $\bar{Y}$-фаза; при $h/J = 1.87$ — антипараллельная фаза для F- и G-подрешеток; при $h/J = 3$ — W-фаза; и при $h/J = 5.5$ — ферромагнитная фаза. На каждом из четырех графиков рис. 10 имеются четыре дисперсионные кривые в соответствии с четырьмя типами введенных бозонов. Но только в отношении одной кривой (черной на всех графиках) можно утверждать, что ее природа почти полностью определяется высокоэнергетическими d-бозонами; остальные три ветви в той или иной степени формируются с учетом гибридизации состояний a-, b- и c-бозонов.

Важное наблюдение состоит в том, что на трех первых графиках, *a, b* и *c*, имеется как минимум одна голдстоуновская мода (синие кривые), связанная с нарушением симметрии основного состояния относительно вращения спинов F- и G-подрешеток на один и тот же угол относительно направления магнитного поля. В ферромагнитной фазе (рис. 10 *d*) основное состояние не нарушает указанную симметрию и соответственно голдстоуновская (безщелевая) мода отсутствует.

Кроме того, на рис. 10 *b* голдстоуновских мод две (совпадающие синяя и красная кривые). Происхождение второй моды связано с обсуждавшейся в конце разд. 7 особенностью точек фазовой диаграммы, лежащих на штриховой кривой (см. рис. 4). В этом случае моменты $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ лежат в плоскости zx вдоль одной линии и противоположно направлены, а энергия системы оказывается вырождена относительно вращения линии векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ вокруг оси y.

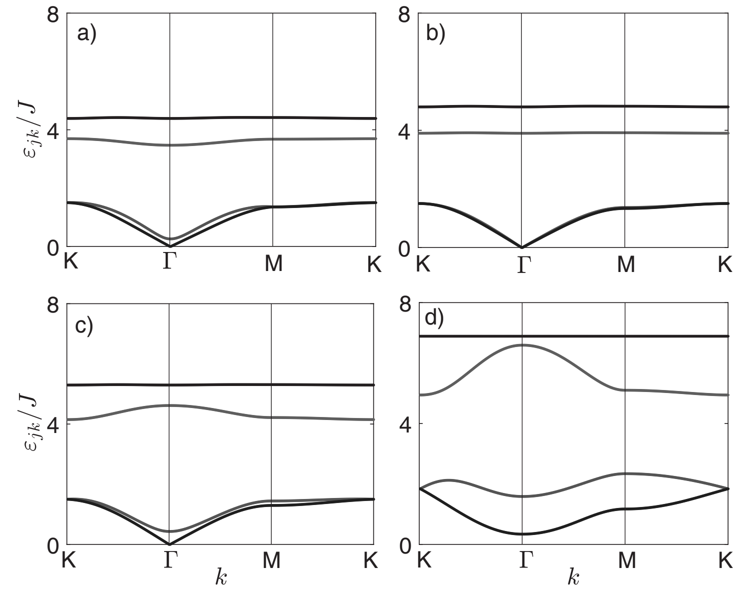

Рис. 10. Спектры спин-волновых возбуждений при $I/J = 0.8$, $D/J = 3$ и при четырех значениях напряженности внешнего магнитного поля: $h/J = 1\,(a)$, $1.87\,(b)$, $3\,(c)$, $5.5\,(d)$. Вектор k пробегает по треугольнику ΓKM в зоне Бриллюэна (см. рис. 3)

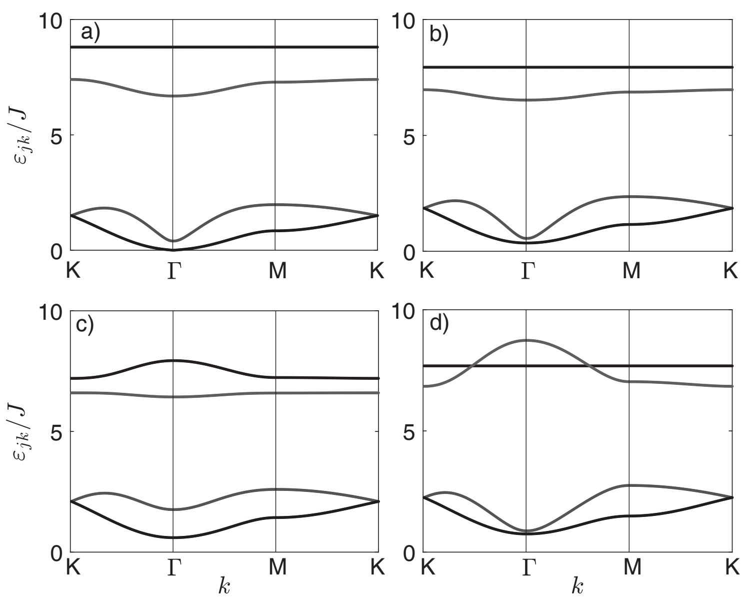

Рис. 11. Спектры спин-волновых возбуждений при $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ и при четырех значениях напряженности внешнего магнитного поля: $h/J = 0.3\,(a)$, $1\,(b)$, $4\,(c)$, $6\,(d)$. Вектор k пробегает по треугольнику ΓKM в зоне Бриллюэна (см. рис. 3)

Как отмечалось в разд. 7, такое поведение связано с обращением эффективных полей в нуль и фактической независимостью L-подсистемы от F- и G-подсистем. В такой ситуации узлы L-подрешетки оказываются эффективно изолированными (в том числе друг от друга), чем, в частности, и объясняется бездисперсность двух высокоэнергетических ветвей (черной и коричневой) на рис. 10 *b*.

На рис. 11 представлены графики дисперсионных зависимостей $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$, рассчитанные при следующих параметрах модели: $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ для четырех значений внешнего магнитного поля: $h/J = 0.3$, 1, 4 и 6. На фазовой диаграмме на рис. 7 указанным четырем значениям поля h отвечают четыре черные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной прямой. При увеличении магнитного поля h в указанных точках фазовой диаграммы последовательно реализуются четыре фазы: $\bar{Y}$-фаза при $h/J = 0.3$; ферримагнитная — при $h/J = 1$; V-фаза при $h/J = 4.3$; ферромагнитная — при $h/J = 6$.

Из графиков, представленных на рис. 11 следует, что голдстоуновская мода реализуется только в первом случае (рис. 11 *a*), поскольку нарушение симметрии основного состояния (относительно вращений вокруг оси z) имеет место только в $\bar{Y}$-фазе. Во всех других областях фазовой диаграммы на рис. 7 спектр возбуждения спиновых волн всегда щелевой.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главным итогом проведенного исследования является построение фазовой диаграммы $SU(3)$-ферримагнетика на треугольной решетке в координатах магнитное поле h (лежащее в плоскости легкого намагничивания)–параметр одноионной анизотропии D при нулевой температуре. Среди характерных особенностей модели рассмотренного SU3F выделим следующие три: 1) разная величина спина в магнитных подрешетках — в двух подрешетках (F и G) спины $S = 1/2$, в третьей L-подрешетке $S = 1$; 2) наличие одноионной анизотропии типа легкая плоскость на узлах L-подрешетки со спинами $S = 1$; 3) разные значения обменных интегралов между спинами из F- и G- подрешеток (J) и между спинами из L- и $F(G)$-подрешеток (I).

Результаты численных расчетов в приближении среднего поля показали, что в зависимости от соотношения между обменными интегралами I и J имеются два типа фазовой диаграммы SU3F, качественно различающихся как по количеству реализующихся фаз, так и по типу их магнитной структуры.

При $I < J$ основное состояние SU3F в разных областях фазовой диаграммы может быть охарактеризовано тремя магнитными конфигурациями: $\bar{Y}$, W и ферромагнитной (см. рис. 4). При этом в точках, лежащих на границе между $\bar{Y}$- и W-фазами (штриховая линия на рис. 4), реализуются состояния, в которых SU3F можно представить в виде двух не связанных между собой магнитных подсистем. Одна из этих подсистем состоит из спинов $S = 1$ на треугольной решетке и ведет себя как парамагнетик. Вторая подсистема состоит из спинов $S = 1/2$, образующих плоскую гексагональную решетку и находящихся в фазе двухподрешеточного коллинеарного антиферромагнетика в эффективном нулевом магнитном поле. Последнее обстоятельство приводит к дополнительному вырождению основного состояния относительно вращения вектора антиферромагнетизма в плоскости легкого намагничивания и проявляется в виде дополнительной голдстоуновской моды в спектре спин-волновых возбуждений.

При обратном соотношении между обменными интегралами ($I > J$) фазовая h–D-диаграмма SU3F качественно модифицируется. Теперь на ней можно выделить уже четыре области, различающиеся типом магнитной структуры основного состояния, а именно: Y-фазу, две коллинеарные ферри- и ферромагнитные фазы и V-фазу. При этом последнюю можно разделить еще на две фазы $\bar{V}$ и V в зависимости от того, превышает угол θ_L величину $\pi/2$ или нет.

Для случаев $I < J$ и $I > J$ проанализированы зависимости квадрупольного и дипольных параметров порядка как от магнитного поля при фиксированном значении ОА, так и от параметра ОА при фиксированном значении h. Важным результатом этой части исследования следует считать зависимость полного момента M от внешнего магнитного поля, которая при $I > J$ и определенном конечном значении параметра ОА качественно воспроизводит аналогичную зависимость, наблюдаемую в хорошо известных квантовых антиферромагнетиках на треугольной решетке с одинаковым значением спина $S = 1/2$ для всех подрешеток и без ОА [38, 43]. В частности, на определенном интервале магнитного поля в зависимости $M(h)$ имеется плато намагниченности (имеющее, однако, в нашем случае небольшой наклон), которое в АФМТР возникает за счет квантовых антиферромагнитных флуктуаций, а в SU3F за счет ОА.

Важно отметить, что качественное различие двух фазовых диаграмм при $I < J$ и при $I > J$ таково, что при $I \to J$ непрерывная трансформация одной диаграммы в другую не имеет места. Дело в том, что при равенстве обменных интегралов ($I = J$) возникает случайное вырождение, приводящее при среднеполевом рассмотрении к неопределенности магнитной конфигурации при заданных значениях магнитного поля и ОА. Наше предположение состоит в том, что, как и в случае АФМТР, учет квантовых флуктуаций должен снять отмеченное случайное вырождение (как, возможно, и отмечавшееся выше дополнительное вырождение при $I < J$). Однако эта задача является предметом отдельного исследования.

Завершая обсуждение полученных в работе результатов, еще раз отметим, что в рассмотренном нами случае магнитное поле $\mathbf{h}$, приложенное к квантовому SU3F, ориентировано в плоскости легкого намагничивания. При ориентации магнитного поля вдоль нормали к этой плоскости поведение параметров порядка квантового магнетика может быть качественно иным.

Благодарности. Авторы выражают благодарность профессору В.В. Валькову за помощь в постановке задачи исследования, полезные советы и стимулирующее обсуждение полученных результатов.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках научной тематики госзадания ИФ СО РАН.

ПРИЛОЖЕНИЕ A. УНИТАРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ОПЕРАТОРОВ ХАББАРДА

В результате унитарных преобразований операторов Хаббарда по формуле (20) с унитарным оператором $U_{\tilde{n}\tilde{m}}(\alpha)$ $(n \neq m)$, определенным формулой (17), получаются следующие выражения [40]:

$$X^{nn} = \cos^2\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{n}} + \sin^2\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{m}} - -\frac{1}{2}\sin 2\alpha\left(X^{\tilde{n}\tilde{m}} + X^{\tilde{m}\tilde{n}}\right),$$

$$X^{mm} = \cos^2\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{m}} + \sin^2\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{n}} + +\frac{1}{2}\sin 2\alpha\left(X^{\tilde{n}\tilde{m}} + X^{\tilde{m}\tilde{n}}\right),$$

$$X^{nm} = \cos^2\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{m}} - \sin^2\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{n}} + +\frac{1}{2}\sin 2\alpha\left(X^{\tilde{n}\tilde{n}} - X^{\tilde{m}\tilde{m}}\right),$$

$$X^{mn} = \cos^2\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{n}} - \sin^2\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{m}} + +\frac{1}{2}\sin 2\alpha\left(X^{\tilde{n}\tilde{n}} - X^{\tilde{m}\tilde{m}}\right),$$

$$X^{np} = \cos\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{p}} - \sin\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{p}},$$

$$X^{pn} = \cos\alpha\, X^{\tilde{p}\tilde{n}} - \sin\alpha\, X^{\tilde{p}\tilde{m}},$$

$$X^{pm} = \cos\alpha\, X^{\tilde{p}\tilde{m}} + \sin\alpha\, X^{\tilde{p}\tilde{n}},$$

$$X^{mp} = \cos\alpha\, X^{\tilde{m}\tilde{p}} + \sin\alpha\, X^{\tilde{n}\tilde{p}},$$

$$X^{pq} = X^{\tilde{p}\tilde{q}},$$

в которых все четыре индекса состояний p, q, n и m разные, а индексы узлов опущены. В основном тексте для индексов трехкратно преобразованных операторов Хаббарда знак тильды, обозначающий новые (преобразованные) состояния, для краткости не используется.

ПРИЛОЖЕНИЕ B. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ СПИНОВЫХ ОПЕРАТОРОВ

В данном приложении представлен явный вид матричных элементов $s^{\alpha}_{nm} \equiv \langle n|S^{\alpha}_{l}|m\rangle$ $(\alpha = \{x, y, z\}$ и $n, m = \{\bar{1}, 0, 1\})$, использованных в разложении (27). Эти элементы получены в результате трех последовательных преобразований операторов Хаббарда с помощью трех унитарных операторов, $U_{1-1}(-\alpha_1)$, $U_{0-1}(-\alpha_3)$ и $U_{10}(-\alpha_2)$, и последующей подстановке результата преобразования в представление (15) для спиновых операторов L-подрешетки.

Матричные элементы в разложении для оператора S^{z}_{l}:

$$s^{z}_{11} = (\cos\alpha_1\cos\alpha_2 + \sin\alpha_1\sin\alpha_2\sin\alpha_3)^2 - -\sin^2\alpha_1\cos^2\alpha_3,$$

$$s^{z}_{\bar{1}\bar{1}} = (\cos\alpha_1\sin\alpha_2\sin\alpha_3 - \sin\alpha_1\cos\alpha_2)^2 - -\cos^2\alpha_1\cos^2\alpha_3,$$

$$s^{z}_{00} = \sin^2\alpha_2\cos^2\alpha_3 - \sin^2\alpha_3,$$

$$s^{z}_{10} = s^{z}_{01} = -\frac{1}{2}\sin\alpha_1(1+\sin^2\alpha_2)\sin 2\alpha_3 - -\frac{1}{2}\cos\alpha_1\sin(2\alpha_2)\cos\alpha_3,$$

$$s^{z}_{\bar{1}0} = s^{z}_{0\bar{1}} = -\frac{1}{2}\cos\alpha_1(1+\sin^2\alpha_2)\sin 2\alpha_3 + +\frac{1}{2}\sin\alpha_1\sin(2\alpha_2)\cos\alpha_3,$$

$$s^z_{\bar{1}1} = s^z_{1\bar{1}} = \frac{1}{2}\cos 2\alpha_1\ \sin 2\alpha_2\ \sin\alpha_3 +$$
$$+\frac{1}{2}\sin 2\alpha_1(\sin^2\alpha_2\ \sin^2\alpha_3 - \cos^2\alpha_3 - \cos^2\alpha_2).$$

Для оператора S^x_l:

$$s^x_{11} = \sqrt{2}(\cos\alpha_1\sin\alpha_2 -$$
$$-\sin\alpha_1\sin\alpha_3\cos\alpha_2)(\cos\alpha_1\cos\alpha_2 +$$
$$+\sin\alpha_1\sin\alpha_3\sin\alpha_2 + \sin\alpha_1\cos\alpha_3),$$

$$s^x_{\bar{1}\bar{1}} = \sqrt{2}(\sin\alpha_1\sin\alpha_2 +$$
$$+\cos\alpha_1\sin\alpha_3\cos\alpha_2)(\sin\alpha_1\cos\alpha_2 -$$
$$-\cos\alpha_1\sin\alpha_3\sin\alpha_2 - \cos\alpha_1\cos\alpha_3),$$

$$s^x_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2\cos^2\alpha_3),$$

$$s^x_{\bar{1}1} = \frac{\cos 2\alpha_1}{\sqrt{2}}(\sin\alpha_2\cos\alpha_3 - \sin\alpha_3\cos 2\alpha_2) -$$
$$-\frac{\sin 2\alpha_1}{2\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2(1+\sin^2\alpha_3)),$$

$$s^x_{10} = \frac{\cos\alpha_1}{\sqrt{2}}(\cos 2\alpha_2\cos\alpha_3 + \sin\alpha_2\sin\alpha_3) +$$
$$+\frac{\sin\alpha_1}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2}\sin 2\alpha_2\sin 2\alpha_3),$$
$$s^x_{\bar{1}0} = -\frac{\sin\alpha_1}{\sqrt{2}}(\cos 2\alpha_2\cos\alpha_3 + \sin\alpha_2\sin\alpha_3) +$$
$$+\frac{\cos\alpha_1}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_2\cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2}\sin 2\alpha_2\sin 2\alpha_3),$$
$$s^x_{\bar{1}1} = s^x_{1\bar{1}}, \quad s^x_{10} = s^x_{01}, \quad s^x_{\bar{1}0} = s^x_{0\bar{1}}.$$

Для оператора S^y_l:

$$s^y_{11} = s^y_{\bar{1}\bar{1}} = s^y_{00} = 0,$$
$$s^y_{01} = \frac{i}{\sqrt{2}}(-\sin\alpha_1\cos\alpha_2 +$$
$$+\cos\alpha_1(\cos\alpha_3 + \sin\alpha_2\sin\alpha_3)),$$

$$s^y_{\bar{1}0} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\cos\alpha_1\cos\alpha_2 +$$
$$+\sin\alpha_1(\cos\alpha_3 + \sin\alpha_2\sin\alpha_3)),$$

$$s^y_{\bar{1}1} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\sin\alpha_2\cos\alpha_3 - \sin\alpha_3),$$

$$s^y_{\bar{1}1} = -s^y_{1\bar{1}}, \quad s^y_{10} = -s^y_{01}, \quad s^y_{\bar{1}0} = -s^y_{0\bar{1}}.$$

Для оператора $(S^y_l)^2$:

$$\langle 1|(S^y_l)^2|1\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos^2\alpha_1\sin^2\alpha_2 +$$
$$+\frac{1}{2}\sin^2\alpha_1(\cos^2\alpha_2\sin^2\alpha_3 - \sin\alpha_2\sin 2\alpha_3) -$$
$$-\frac{1}{2}\sin 2\alpha_1\cos\alpha_2(\sin\alpha_2\sin\alpha_3 + \cos\alpha_3),$$

$$\langle\bar{1}|(S^y_l)^2|\bar{1}\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sin^2\alpha_1\sin^2\alpha_2 +$$
$$+\frac{1}{2}\cos^2\alpha_1(\cos^2\alpha_2\sin^2\alpha_3 - \sin\alpha_2\sin 2\alpha_3) +$$
$$+\frac{1}{2}\sin 2\alpha_1\cos\alpha_2(\sin\alpha_2\sin\alpha_3 + \cos\alpha_3),$$
$$\langle 0|(S^y_l)^2|0\rangle = \frac{1}{2}(\sin\alpha_2\sin 2\alpha_3 +$$
$$+1 + \cos^2\alpha_2\cos^2\alpha_3),$$
$$\langle\bar{1}|(S^y_l)^2|1\rangle = \frac{1}{4}(\cos^2\alpha_2\sin^2\alpha_3 -$$
$$-\sin\alpha_2\sin 2\alpha_3 - \sin^2\alpha_2)\sin 2\alpha_1 -$$
$$-\frac{1}{2}\cos 2\alpha_1\cos\alpha_2(\sin\alpha_2\sin\alpha_3 + \cos\alpha_3),$$

$$\langle\bar{1}|(S^y_l)^2|0\rangle = \frac{1}{2}\sin\alpha_1\cos\alpha_2(\sin\alpha_3 - \sin\alpha_2\cos\alpha_3) +$$
$$+\frac{1}{2}\cos\alpha_1\left(\sin\alpha_2\cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2}\cos^2\alpha_2\sin(2\alpha_3)\right),$$

$$\langle 1|(S^y_l)^2|0\rangle = \frac{1}{2}\cos\alpha_1\cos\alpha_2(\sin\alpha_2\cos\alpha_3 - \sin\alpha_3) +$$
$$+\frac{1}{2}\sin\alpha_1\left(\sin\alpha_2\cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2}\cos^2\alpha_2\sin(2\alpha_3)\right),$$
$$\langle 1|(S^y_l)^2|\bar{1}\rangle = \langle\bar{1}|(S^y_l)^2|1\rangle, \quad \langle 0|(S^y_l)^2|\bar{1}\rangle = \langle\bar{1}|(S^y_l)^2|0\rangle,$$
$$\langle 0|(S^y_l)^2|1\rangle = \langle 1|(S^y_l)^2|0\rangle.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ C. БОЗОНИЗАЦИЯ СПИНОВЫХ ОПЕРАТОРОВ ДЛЯ $S = 1$

Используя представление (28) в формулах (27) и оставляя только слагаемые не выше второго порядка по бозе-операторам, получаем следующее представление спиновых операторов через бозевские:

$$S_l^x = \frac{1}{\sqrt{2}}[(s^x_{0,1}(c_l^+ + c_l) + s^x_{\bar{1},1}(d_l^+ + d_l) +$$

$$+ s^x_{\bar{1},0}(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + s^x_{1,1} + (s^x_{0,0} - s^x_{1,1})c_l^+ c_l +$$

$$+ (s^x_{\bar{1},\bar{1}} - s^x_{1,1})d_l^+ d_l],$$

$$S_l^y = \frac{i}{\sqrt{2}}[s^y_{0,1}(c_l^+ - c_l) + s^y_{\bar{1},1}(d_l^+ - d_l) +$$

$$+ s^y_{\bar{1},0}(d_l^+ c_l - c_l^+ d_l)],$$

$$S_l^z = s^z_{0,1}(c_l^+ + c_l) + s^z_{\bar{1},1}(d_l^+ + d_l) +$$

$$+ s^z_{\bar{1},0}(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + s^z_{1,1} + (s^z_{0,0} - s^z_{1,1})c_l^+ c_l +$$

$$+ (s^z_{\bar{1},\bar{1}} - s^z_{1,1})d_l^+ d_l,$$

$$(S_l^y)^2 = \frac{1}{2}[((s^y_{\bar{1},0})^2 - (s^y_{\bar{1},1})^2)c_l^+ c_l +$$

$$+ ((s^y_{\bar{1},0})^2 - (s^y_{0,1})^2)d_l^+ d_l -$$

$$- s^y_{\bar{1},0} s^y_{0,1}(d_l^+ + d_l) + s^y_{\bar{1},0} s^y_{\bar{1},1}(c_l^+ + c_l) +$$

$$+ ((s^y_{0,1})^2 + (s^y_{\bar{1},1})^2) + s^y_{0,1} s^y_{\bar{1},1}(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l)].$$

Приведенные выражения после усреднения и применения спектральной теоремы для вычисления средних от бозе-операторов использовались для получения формул, на основе которых рассчитывались параметры порядка R_L, M и Q_2^0.

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Barbara, Y. Imry, G. Sawatzky, and P. C. E. Stamp, *Quantum Magnetism*, NATO Science for Peace and Security, Series B: Physics and Biophysics, Springer (2008).

2. *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences, ed. by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer (2011).

3. A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York, Inc. (1994).

4. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Операторы Хаббарда и спин-волновая теория гейзенберговских магнетиков с произвольным спином*, ТМФ **50**, 466 (1982).

5. H. H. Chen and P. M. Levy, *Quadrupole Phase Transitions in Magnetic Solids*, Phys. Rev. Lett. **27**, 1383 (1971).

6. V. M. Matveev, *Quantum Quadrupolar Magnetism and Phase Transitions in the Presence of Biquadratic Exchange*, JETP **38**, 813 (1973).

7. M. P. Kashchenko, N. F. Balakhonov, and L. V. Kurbatov, *Spin Waves in an Heisenberg Ferromagnetic Substance with Single-Ion Anisotropy*, JETP **37**, 201 (1973).

8. V. M. Loktev and V. S. Ostrovskii, *Quantum Theory of Uniaxial Ferromagnetic in Transverse Magnetic Field*, Ukr. J. Phys. **23**, 1717 (1978).

9. F. P. Onufrieva, *Exact Solution of the One-Ion Problem for a Magnet with One-Ion Anisotropy in a Field of Arbitrary Direction*, JETP **53**, 1241 (1981).

10. A. F. Andreev and I. A. Grishchuk, *Spin Nematics*, JETP **60**, 267 (1984).

11. F. P. Onufrieva, *Low-Temperature Properties of Spin Systems with h Tensor Order Parameters*, JETP **62**, 1311 (1985).

12. N. Papanicolaou, *Unusual Phases in Quantum Spin-1 Systems*. Nucl. Phys. B **305**, 367 (1988).

13. A. V. Chubukov, *Fluctuations in Spin Nematics*, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 1593 (1990).

14. V. V. Val'kov and T. A. Val'kova, *Application of an Indefinite Metric to Go Over to a Bose Description of Su(3) Hamiltonians: The Excitation Spectrum of Spin Nematics*, JETP **72**, 1053 (1991).

15. Yu. A. Fridman, O. A. Kosmachev, and Ph. N. Klevets, *Spin Nematic and Orthogonal Nematic States in S=1 Non-Heisenberg Magnet*, J. Magn. Magn. Mat. **325**, 125 (2013).

16. А. И. Смирнов, *Магнитный резонанс спинонов в квантовых магнетиках*, УФН **186**, 633 (2016) [A. I. Smirnov, *Magnetic Resonance of Spinons in Quantum Magnets*, Physics Uspekhi **59**, 564 (2016)].

17. O. A. Kosmachev, Ya. Yu. Matyunina, and Yu. A. Fridman, *Dynamic and Static Properties of a Non-Heisenberg Ferrimagnet with Single-Ion Easy-Axis Anisotropy*, JETP **135**, 354 (2022).

18. H. F. Verona de Resende, F. C. SaBarreto, and J. A. Plascak, *Renormalization Group Treatment of the Mixed-Spin System in D-Dimensional Lattices*, Physica A **149**, 606 (1988).

19. G. M. Zhang and C. Z. Yang, *Monte-Carlo Study of the Two-Dimensional Quadratic Ising Ferromagnet with Spins $S = 1/2$ and $S = 1$ and with Crystal-Field Interactions*, Phys. Rev. B **48**, 9452 (1993).

20. A. Bobak and M. Jurcisin, *A Discussion of Critical Behaviour in a Mixed-Spin Ising Model*, Physica A **240**, 647 (1997)

21. G. M. Buendia and M. A. Novotny, *Numerical Study of a Mixed Ising Ferrimagnetic System*, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 5951 (1997).

22. M. Godoy and W. Figueiredo, *Competing Dynamics in the Mixed-Spin Ising Model with Crystal-Feld Interaction*, Physica A **339**, 392 (2004).

23. T. Iwashita and N. Uryu, *The Curie Temperature of the Two-Dimensional Quadratic Ising Ferromagnet with Mixed Spins of* $S = 1/2$ *and S=1*, J. Phys. Soc. Japan **53**, 721 (1984).

24. J. Oitmaa, *Ferrimagnetism and the Existence of Compensation Points in Layered Mixed Spin (1/2,1) Ising Models*, Phys. Rev. B **72**, 224404 (2005).

25. J. Oitmaa and I. G. Enting, *A Series Study of a Mixed-Spin* $S = (1/2, 1)$ *Ferrimagnetic Ising Model*, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 10931 (2006).

26. W. Selke and J. Oitmaa, *Monte Carlo Study of Mixed-Spin* $S = (1/2, 1)$ *Ising Ferrimagnets*, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 076004 (2010).

27. Ю. А. Фридман, О. А. Космачев, *Квантовые эффекты в анизотропном ферримагнетике*, ФТТ **51**, 1104 (2009).

28. M. Zukovic and A. Bobak, *Frustrated Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferrimagnets on a Triangular Lattice*, Phys. Rev. E **91**, 052138 (2015).

29. M. Zukovic and A. Bobak, *Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising Ferromagnets on a Triangular Lattice*, Physica A **436** 509 (2015).

30. E. S. de Santana, A. S. de Arruda, and M. Godoy, *Random-Anisotropy Mixed-Spin Ising on a Triangular Lattice*, Condensed Matter Physics, **26**, 23601 (2023)

31. A. S. Martynov and D. M. Dzebisashvili, *Quantum Su(3)-Ferrimagnet on Triangular Lattice*, J. Magn. Magn. Mat. **584**, (2024) 171906.

32. B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk, *Effective Field Theory for the S=1 Quantum Nematic*, Phys. Rev. B **68**, 052401 (2003).

33. A. Lauchli, F. Mila, and K. Penc, *Quadrupolar Phases of the S=1 Bilinear-Biquadratic Heisenberg Model on the Triangular Lattice*, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).

34. В. В. Вальков, М. С. Шустин, *Квантовые перенормировки в анизотропных многоподрешеточных магнетиках и модификация магнитной восприимчивости при облучении*, ЖЭТФ **148**, 984 (2015) [V. V. Val'kov and M. S. Shustin, *Quantum Renormalizations in Anisotropic Multisublattice Magnets and the Modification of Magnetic Susceptibility Under Irradiation*, JETP **121**, 860 (2015)].

35. V. V. Val'kov and M. S. Shustin, *Quantum Theory of Strongly Anisotropic Two- and Four-Sublattice Single-Chain Magnets*, J. Low Temp. Phys. **185**, 564 (2016).

36. Yu. A. Fridman and D. V. Spirin, *Spin Waves in Two-Dimensional Ferromagnet with Large Easy-Plane Anisotropy*, J. Magn. Magn. Mat. **253**, 111 (2002).

37. J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands III. An Improved Solutions*, Proc.Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).

38. A. V. Chubukov and D. I. Golosov, *Quantum Theory of an Antiferromagnet on a Triangular Lattice in a Magnetic Field*, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 69 (1991).

39. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, Wiley-VCH (2019), Vol. 1.

40. V. V. Val'kov, *Unitary Transformations of the Group* $U(n)$ *and Diagonalization of Multilevel Hamiltonians*, Theor. Math. Phys. **76**, 766 (1988).

41. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, Москва (1967).

42. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Elsevier (2013), Vol. 3.

43. T. Coletta, T. A. Toth, K. Penc at al., *Semiclasical Theory of the Magnetization Process on the Triangular Lattice Heisenberg Model*, Phys. Rev. B **94**, 075136 (2016).