

УДК 537.612

НЕМАТИЧЕСКИЕ ФАЗЫ В МАГНЕТИКЕ С $S = 2$

Космачев О.А.

Таврический национальный университет имени В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

E-mail: lkosma@tnu.crimea.ua

В работе исследованы спиновые состояния негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 2$. Показано, что учет высших спиновых инвариантов приводит к реализации специфических фаз с тензорными параметрами порядка, реализация которых невозможна в магнетиках с $S=1$. Исследована свободная энергия системы в различных спиновых состояниях. Определены геометрические образы тензорных фаз в спиновом пространстве.

Ключевые слова: негейзенберговский магнетик, высшие спиновые инварианты, спиновый нематик, тетрогональное спиновое состояние.

ВВЕДЕНИЕ

Наличие обменного взаимодействия в кристаллах приводит к возникновению (при достаточно низких температурах) ферромагнитного/антиферромагнитного [1, 2] или более сложного [3, 4] упорядочения. Это упорядочение характеризуется спонтанным нарушением симметрии относительно отражения времени $t \rightarrow -t$. При этом, гамильтониан, описывающий такие состояния является билинейным по спиновым операторам и инвариантным относительно вращений в спиновом пространстве. Однако, такой инвариант является единственным только для систем со спином $S = 1/2$. Для магнитоупорядоченных систем с $S > 1/2$ спиновые инварианты, участвующие в обменном взаимодействии, имеют вид $(\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^m$, где $m = 2S$, S – величина спина. Учет такого вида инвариантов может приводить к реализации спиновых состояний с невекторным типом упорядочения. Эти состояния симметричны относительно инверсии времени, то есть для них среднее значение спина на узле обращается в ноль, но имеет место спонтанное нарушение непрерывной симметрии, связанное с нетривиальными квадрупольными средними, т.е. средними значениями величин, билинейных по компонентам спина [5, 6]. Возможность существования таких (нематических) состояний для магнитных систем обусловлена высокой симметрией обменного взаимодействия, инвариантного относительно произвольных вращений в спиновом пространстве. Статические и динамические свойства нематических фаз активно изучаются в последнее время не только в связи с описанием фазовых состояний кристаллических магнетиков, но и для описания бозе-эйнштейновских конденсатов нейтральных атомов с целым спином [7, 8]. Необходимо отметить, что подобные исследования относятся, в основном, к магнетикам со спином магнитного иона $S = 1$. Казалось бы, с увеличением величины спина магнитного иона влияние квантовых эффектов должно уменьшаться. Однако, исследования магнетиков со спином магнитного иона больше единицы показывают, что

учет высших спиновых инвариантов приводит к возникновению новых фаз, таких как антинематическая, для магнетика с $S = 3/2$ [9].

Целью данной работы является исследование возможных фазовых состояний изотропного негейзенберговского магнетика со спином магнитного иона $S = 2$ при различных соотношениях констант обменного взаимодействия.

1. ОДНОПОДРЕШЕТОЧНЫЙ МАГНЕТИК

Гамильтониан исследуемой системы можно представить в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'} \left\{ J(n-n')(\vec{S}_n \vec{S}_{n'}) + K(n-n')(\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^2 + \right. \\ \left. + D(n-n')(\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^3 + F(n-n')(\vec{S}_n \vec{S}_{n'})^4 \right\}, \quad (1)$$

где J, K, D, F – обменные интегралы, соответствующие различным спиновым инвариантам. Предполагается, что рассматриваемая система находится при низких температурах ($T \ll T_c$, T_c – температура Кюри), поскольку именно в этом случае наиболее ярко проявляются квантовые свойства системы.

Поскольку гамильтониан (1) инвариантен относительно вращений в спиновом пространстве, для упрощения дальнейших вычислений удобно переписать его в терминах генераторов группы вращений $SU(5)$:

$$\mathcal{H} = -\sum_{n \neq n'} \sum_{i \leq j} a^j(n-n') \varepsilon_i O_{jn}^i O_{jn'}^i, \quad (2)$$

где a^j – линейные комбинации обменных интегралов, ε_i – числовые коэффициенты. Поскольку рассматривается случай низких температур, вполне адекватным приближением является приближение среднего поля. Выделяя в гамильтониане (2) средние поля, связанные с векторными ($\langle O_1^i \rangle_0 \equiv \langle S^i \rangle$, $i = x, y, z$) и тензорными параметрами порядка ($\langle O_j^i \rangle_0 \equiv q_j^i$, $i = 0, 2, xy, yz, zx$; и т.д.), гамильтониан (2) можно представить в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_0,$$

где

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -\sum_{n \neq n'} \sum_{i \leq j} a_{nn'}^j \varepsilon_i \left(O_{jn}^i - \langle O_j^i \rangle_0 \right) \left(O_{jn'}^i - \langle O_j^i \rangle_0 \right), \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_0 = -2 \sum_{i \leq j} a_0^j \varepsilon_i \langle O_j^i \rangle_0 \sum_n O_{jn}^i - N \sum_{i \leq j} a_0^j \varepsilon_i \langle O_j^i \rangle_0^2. \quad (4)$$

Для диагонализации одноузельного гамильтониана (4) необходимо провести $M(M-1)$ поворотов в спиновом пространстве ($M = 5$ – число энергетических уровней магнитного иона). Для этой процедуры воспользуемся методом диагонализации гамильтониана N -уровневой системы, в основе которого лежит использование алгебры операторов Хаббарда [10]. Прежде всего, перейдём в

собственную систему координат, в которой OZ – ось квантования и $\langle S^x \rangle_0 = \langle S^y \rangle_0 = 0$, а тензор квадрупольного момента q_2^i приведён к главным осям – $q_2^i = 0$ ($i = xy, yz, zx$).

Построим на базисе оператора S^z операторы Хаббарда $X^{ij} \equiv |i\rangle\langle j|$. Связь спиновых операторов с операторами Хаббарда

$$S^+ = 2(X^{21} + X^{-1-2}) + \sqrt{6}(X^{10} + X^{0-1}); S^- = (S^+)^+; 2S^z = [S^+, S^-]_-.$$

Формальная запись одноузельного гамильтониана в представлении операторов Хаббарда имеет вид:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i E'_i X^{ii} + \sum_{i \neq j} V_{ij} X^{ij}, \quad V_{ji} = (V_{ij})^*,$$

где E'_i – «затравочный» спектр исходных состояний $|i\rangle$; V_{ij} – недиагональные слагаемые гамильтониана. В результате унитарных преобразований одноузельный гамильтониан примет диагональный вид:

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = U \mathcal{H}_0 U^+ = \sum_i E_i X^{ii}, \quad (5)$$

$$U = U(\alpha_{21}, \alpha_{20}, \dots) = \prod U_{ij}(\alpha_{ij}),$$

$$U_{ij}(\alpha) = \hat{1} + (\cos \alpha - 1)(X^{ii} + X^{jj}) + \sin \alpha (X^{ij} - X^{ji}).$$

Параметры преобразований определяются системой уравнений

$$\tilde{V}_{ij}(\alpha_{21}, \alpha_{21}, \dots) = 0.$$

В общем случае для диагонализации 5-и уровневой системы должно проведено 20 унитарных поворотов. Однако, поскольку мы находимся в собственной системе координат, в которой, в частности $\langle S^y \rangle_0 = 0$, и другие средние равны нулю, то число поворотов уменьшается вдвое. Кроме того, недиагональные элементы V_{ii+1} и V_{ii-1} равны нулю, следовательно, для приведения одноузельного гамильтониана (4) к диагональному виду достаточно провести 6 поворотов. Поскольку мы рассматриваем только случай низких температур ($T \rightarrow 0$), можно предположить, что магнитные ионы находятся в основном состоянии $|\psi_{g.s.}\rangle = |\psi_2\rangle$. Из шести преобразований на вид основного состояния оказывают влияние только три поворота $U_{2-2}(\varphi)$, $U_{20}(\beta)$, $U_{2-1}(\theta)$. Если основное состояние не вырождено, его можно представить в виде

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= U_{2-1}^+(\theta) U_{20}^+(\beta) U_{2-2}^+(\varphi) |2\rangle = \\ &= \cos \varphi \cdot \cos \beta \cdot \cos \theta |2\rangle + \sin \beta |0\rangle + \sin \theta |-1\rangle + \sin \varphi \cdot \cos \beta |-2\rangle. \end{aligned}$$

Решая уравнение Шредингера с гамильтонианом (5), найдем энергию основного состояния

$$\begin{aligned}
 E_2 = & - \left[\tilde{J} \cos^2 2\varphi \cos^4 \beta - \frac{3}{2} \tilde{K} (1 - \sin 2\varphi) \sin^2 2\beta + 3\tilde{K} \right] \cos^4 \theta + \\
 & + \frac{1}{4} \left[\tilde{J} \cos 2\varphi \cos^2 \beta + 3\tilde{K} \cos 2\beta + 18(D - 5F) (1 - \cos 2\varphi \cos^2 \beta) - \right. \\
 & \left. - 9(D - 8F) \sin^2 \beta \right] \sin^2 2\theta - \frac{1}{4} (\tilde{J} + 3\tilde{K}) \sin^4 \theta
 \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь введены следующие обозначения: $\tilde{J}_0 = 2J_0 - K_0 + 41D_0 - 79F_0$, $\tilde{K}_0 = K_0 - 5D_0 + 43F_0$.

Поскольку мы рассматриваем поведение магнетика в случае низких температур ($T \rightarrow 0$), для анализа спиновых состояний достаточно ограничиться учетом нижайшего энергетического уровня. В этом случае плотность свободной энергии системы совпадает с энергией основного состояния (6). Анализ плотности свободной энергии позволяет сделать некоторые выводы о спиновых состояниях системы при различных соотношениях обменных интегралов.

1. Предположим, что соотношение обменных интегралов таково, что $J_0 > K_0, D_0, F_0$. Это условие на материальные константы соответствует следующим параметрам унитарных преобразований: $\varphi = \beta = \theta = 0$. В этом случае нижайшим энергетическим уровнем является E_2 , а волновая функция основного состояния имеет вид $|\psi_2\rangle = |2\rangle$. С учетом этого, средние по этому состоянию равны:

$$\langle S^z \rangle = 2, \langle (S^z)^2 \rangle = 4, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1.$$

Следовательно, параметры порядка в этом состоянии равны

$$\begin{aligned}
 \langle S^z \rangle = 2, \quad q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle = 3 \langle (S^z)^2 \rangle - 6 = 6, \quad q_3^0 = \langle O_3^0 \rangle = 5 \langle (S^z)^3 \rangle - 17 \langle S^z \rangle = 6, \\
 q_4^0 = \langle O_4^0 \rangle = 35 \langle (S^z)^4 \rangle - 155 \langle (S^z)^2 \rangle + 72 = 12
 \end{aligned}$$

Это состояние назовем ферромагнитным (FM).

2. Предположим теперь, что $K_0 > J_0, D_0, F_0$, т.е. параметры обобщенного u - v преобразования равны $\varphi = \pi/4$, $\theta = 0$, а «угол» β – неопределен. В этом случае волновая функция основного состояния имеет вид

$$|\psi_{g.s.}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \beta (|2\rangle + |-2\rangle) + \sin \beta |0\rangle. \quad (7)$$

Как и ранее, нижайшим энергетическим уровнем является E_2 . В этом состоянии параметры порядка имеют вид:

$$\begin{aligned}\langle S^z \rangle &= 0, \quad q_2^0 = 6 \cos 2\beta, \quad q_2^2 = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle = 2\sqrt{3} \sin 2\beta, \\ q_4^0 &= \langle O_4^0 \rangle = 12(6 - 5 \cos^2 \beta), \\ q_4^4 &= \langle O_4^4 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^4 \rangle + \langle (S^-)^4 \rangle \right) = 12 \cos^2 \beta.\end{aligned}$$

Это спиновое состояние назовем «спиновый нематик» или «квадрупольное состояние» и обозначим его QU .

Это состояние в спиновом пространстве можно представить как эллипсоид вращения (с осью вращения OZ), поскольку для него $\langle (S^z)^2 \rangle = 4 \cos^2 \beta$, $\langle (S^{x(y)})^2 \rangle = \frac{1}{2} (\sqrt{6} \sin \beta \pm \sqrt{2} \cos \beta)^2$. Однако, в отличие от FM – состояния (образом которого также является эллипсоид вращения с «осями» $\langle (S^z)^2 \rangle = 4$, $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1$), в QU -состоянии эллипсоид является «гофрированным» в плоскости XOY , т.е. $\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^4 \rangle = \frac{3}{2} \cos^2 \beta \cos 4\chi + \frac{5}{2} \cos^2 \beta + 12 \sin^2 \beta + 4\sqrt{3} \cos 2\beta \cos 2\chi$, $\langle (S^z \cos \chi + S^i \sin \chi)^4 \rangle_{i=x,y} \sim const.$

На Рис. 1 представлена зависимость «гофрировки» эллипсоида в QU -фазе от параметра унитарного преобразования β . Из этого Рисунка видно, что параметр β перемешивает квадрупольные состояния: $|\psi\rangle = (|2\rangle + |-2\rangle)/\sqrt{2}$ – осевой нематик ($\beta = 0$) и $|\psi\rangle = |0\rangle$ – плоскостной нематик ($\beta = \pi/2$). Следовательно, геометрическим образом рассматриваемого спинового состояния является двухосный эллипсоид. В этом состоит специфика системы с $S = 2$ по сравнению со случаем $S = 1$. Для магнетика с $S = 1$ топология нематической фазы такова, что геометрическим образом этого состояния является либо осевой нематик (одноосный эллипсоид), либо плоскостной нематик (бесконечно тонкий диск).

Необходимо также отметить, что параметр унитарного преобразования β , «смешивающий» состояния $|2\rangle$ и $|0\rangle$, в рамках данной модели является неопределенным. Эта неопределенность является следствием симметрии гамильтониана системы, и исчезает на линиях фазовых переходов, где симметрия нарушается. Включение одноосной одноионной анизотропии $\sim (S^z)^2$ или магнитоупругого взаимодействия снимет вырождение по β . Однако, анализ спектров элементарных возбуждений позволяет уточнить параметр β во всяком случае на линиях неустойчивости QU – фазы [7,8].

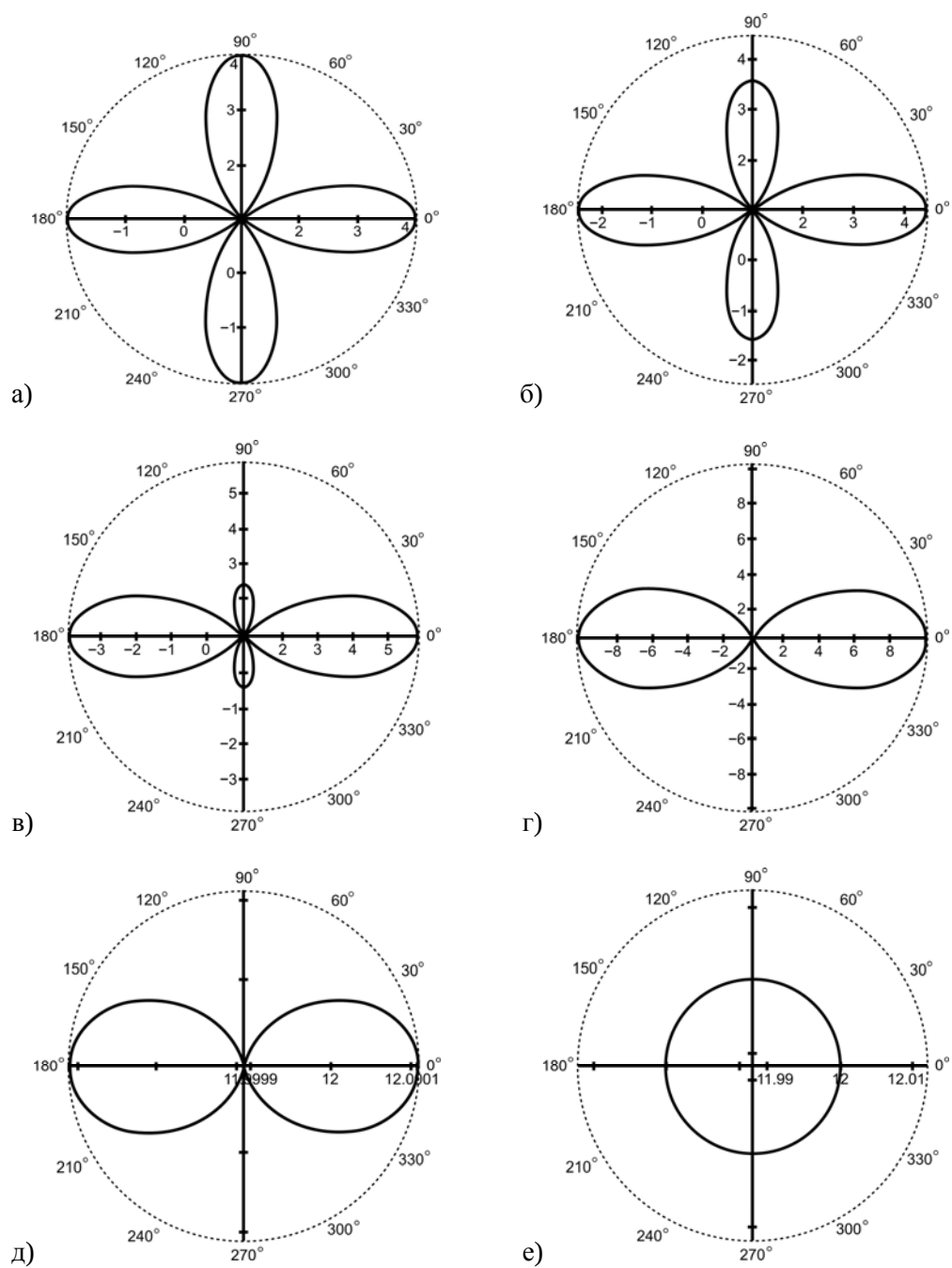


Рис. 1. Зависимость «гофрировки» эллипсоида от параметра β : а) $\beta = 0$, б) $\beta = \frac{\pi}{100}$, в) $\beta = \frac{\pi}{25}$, г) $\beta = \frac{\pi}{10}$, д) $\beta = \frac{\pi}{2,00001}$, е) $\beta = \frac{\pi}{2}$.

3. Рассмотрим еще один случай: $D_0 > K_0, F_0$. В этом случае нижайший энергетический уровень – E_2 , а волновая функция основного состояния имеет вид $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)$. Средние от спиновых операторов в этом состоянии равны:

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

а параметры порядка равны:

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = 0, \quad q_3^0 = 10, \quad q_3^3 = \langle O_3^3 \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle \right) = 4\sqrt{2}, \quad q_4^0 = -28;$$

$$q_4^3 = \langle O_4^3 \rangle = \frac{1}{4} \left\langle \left[S^z, \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right) \right] \right\rangle_+ = 2\sqrt{2}.$$

Это состояние также является нематическим, несмотря на то, что оно напоминает парамагнитное, поскольку все средние от квадратов спиновых операторов одинаковы. Необходимо отметить, что в этом состоянии возбужденные энергетические уровни магнитного иона трехкратно вырождены, т.е. $E_1 = E_{-1} = E_0$.

Геометрическим образом этого состояния (в спиновом пространстве) является не сфера, а тетраэдр. Это видно из анализа следующих корреляторов:

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

$$\langle (S^z \cos \chi + S^x \sin \chi)^3 \rangle = 2 \cos^3 \chi + \frac{1+\sqrt{2}}{2} \sin^3 \chi - \frac{7}{3} \cos \varphi \sin^2 \chi,$$

$$\langle (S^z \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle = 2 \cos^3 \chi - \frac{7}{3} \cos \chi \sin^2 \chi.$$

Легко видеть, что коррелятор $\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle$ инвариантен

относительно поворотов в плоскости $ХОУ$ на угол $\frac{2\pi}{3}$, следовательно, в этой плоскости лежит равносторонний треугольник. Если в спиновом пространстве сделать два поворота, так, чтобы коррелятор $\langle (\tilde{S}^z \cos \chi + \tilde{S}^x \sin \chi)^3 \rangle$ лежал в

плоскости $ЗОХ$ ($\tilde{S}^i$ – компоненты спиновых операторов в «подвернутой» системе координат), то он также будет пропорционален $\cos 3\chi$. Следовательно, эта грань также представляет собой равносторонний треугольник. Таким образом, геометрическим образом этого спинового состояния является тетраэдр. Это фазовое состояние назовем TQ -состоянием [7, 8].

Кроме того, TQ -состояние обладает еще одним интересным свойством. Если волновую функцию этого состояния представить в виде

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle e^{i\gamma}), \quad \text{то легко показать, что}$$

$$\sigma^{(\pm)} = \left\langle (S^x \pm iS^y)^3 \right\rangle = \left\langle (S^\pm)^3 \right\rangle = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}. \quad \text{Тогда мы можем сформировать вектор}$$

$$\vec{\sigma} \quad \text{с компонентами} \quad \sigma^x = \frac{\sigma^+ + \sigma^-}{2} = 4\sqrt{2} \cos \gamma, \quad \sigma^y = \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{2i} = 4\sqrt{2} \sin \gamma :$$

$$\vec{\sigma} = \vec{e}^x \sigma^x + \vec{e}^y \sigma^y = 4\sqrt{2} (\vec{e}^x \cos \gamma + \vec{e}^y \sin \gamma). \quad \text{Этот вектор, при отражении времени,}$$

ведет себя как вектор намагниченности, поэтому вектор $\vec{\sigma}$ является псевдоспином [9]. Таким образом, в рассматриваемой системе имеется еще один дополнительный параметр порядка, описываемый ненулевыми средними от кубических по спиновым операторам выражений. Переменная γ определяет ориентацию $\mathbf{m}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ в плоскости $ХОУ$. Еще раз подчеркнем, что $\boldsymbol{\sigma}$ меняет знак при обращении времени, поэтому он ведет себя как “псевдоспин”.

2. ДВУХПОДРЕШЕТОЧНЫЙ МАГНЕТИК

Рассмотрим теперь случай отрицательной константы билинейного (гейзенберговского) обменного взаимодействия $J_0 < 0$, что соответствует реализации двухподрешеточной магнитоупорядоченной системы. Предполагается, что подрешетки эквивалентны, а спин магнитного иона, как и ранее, $S = 2$. Дальнейшее рассмотрение будем проводить для случая низких температур ($T \rightarrow 0$). Магнетик описывается гамильтонианом (1), но теперь индексы n, n' – номера подрешеток ($n, n' = 1, 2$). Выберем в качестве оси квантования ось z , при этом среднее значение спина первой подрешетки (на один узел) $\langle \mathbf{S} \rangle$ параллельно оси z , $\langle \mathbf{S} \rangle = \langle S_z \rangle \mathbf{e}_z$, а среднее значение спина второй подрешетки антипараллельно этой оси. Удобно повернуть вторую подрешетку так, чтобы направление осей квантования обеих подрешеток совпадали. Унитарный поворот $U(\varphi) = \prod_{n'} \exp(i\varphi S_{n'}^x)$ на угол $\varphi = \pi$ приводит к следующим преобразованиям

(сохраняющим стандартные коммутационные соотношения) компонент оператора спина второй подрешетки:

$$S_{n'}^x \rightarrow S_{n'}^x, S_{n'}^y \rightarrow -S_{n'}^y, S_{n'}^z \rightarrow -S_{n'}^z.$$

Дальнейшие вычисления аналогичны приведенным ранее, при рассмотрении одноподрешеточного магнетика. Поэтому мы можем сразу выписать плотность свободной энергии при низких температурах

$$\begin{aligned}
 F = & \left[\tilde{J}' \cos^2 2\varphi \cos^4 \beta + \frac{3}{2} \tilde{K}' (1 - \sin 2\varphi) \sin^2 2\beta - 3\tilde{K}' \right] \cos^4 \theta - \\
 & - \left[\tilde{J}' \cos 2\varphi \cos^2 \beta - 3\tilde{K}' \cos 2\beta + 18(D - 5F)(1 - \cos 2\varphi) \cos^2 \beta + \right. \\
 & \left. + 9(D - 8F) \sin^2 \beta \right] \sin^2 \theta \cos^2 \theta + \frac{1}{4} (\tilde{J}' - 3\tilde{K}') \sin^4 \theta
 \end{aligned} \quad (8)$$

где введены следующие обозначения $\tilde{J}'_0 = 2J_0 - K_0 + 41D_0 - 61F_0$, $\tilde{K}'_0 = K_0 + D_0 + 13F_0$, а параметры φ, β, θ являются «углами» поворотов в спиновом пространстве, и определяют основное состояние системы:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{gr.st}\rangle &= U_{2-1}^+(\theta) U_{20}^+(\beta) U_{2-2}^+(\varphi) |2\rangle = \\
 &= \cos \varphi \cos \beta \cos \theta |2\rangle + \sin \beta |0\rangle + \sin \theta |-1\rangle + \sin \varphi \cos \beta |-2\rangle
 \end{aligned} \quad (9)$$

Из условия минимума плотности свободной энергии (9) можно определить равновесные значения параметров β, θ, φ . Причем, существует три набора равновесных параметров, соответствующие различным спиновым состояниям:

1. $\varphi = \beta = \theta = 0$. Это решение, соответствующее условию максимального насыщения $\langle S^z \rangle = 2$, устойчиво при $\tilde{J}'_0 < 0$ и $\tilde{J}'_0 - 3\tilde{K}'_0 < 0$. Кроме того, в этом состоянии отличными от нуля являются только осевые тензорные моменты: $q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1) = 6$, $q_3^0 = 5\langle (S^z)^3 \rangle - \langle S^z \rangle (3S(S+1) - 1) = 6$, $q_4^0 = 35\langle (S^z)^4 \rangle - \langle (S^z)^2 \rangle [30S(S+1) - 25] - 3S(S+1)[2 - S(S+1)] = 12$. Во

второй подрешетке параметры порядка: $\langle S^z \rangle = -2$, $q_2^0 = 6$, $q_3^0 = -6$, $q_4^0 = 12$. Функция основного состояния $|\psi_{g.s.}\rangle = |2\rangle$. Такое состояние назовем антиферромагнитным.

2. Второй случай $\varphi = \pi/4$, $\theta = 0$ реализуется при $\tilde{J}'_0 > 0$ и $\tilde{K}'_0 > 0$. В этом состоянии намагниченность системы $\langle S \rangle = 0$ и в системе реализуется QU-фаза, абсолютно аналогичная описанной выше. При данных условиях в системе не может реализоваться антиквадрупольная фаза (как это наблюдается, например, для $S = 3/2$ [9]), поскольку параметры порядка в этом спиновом состоянии определяются средними от четных степеней спиновых операторов, и поворот на π во второй подрешетке не меняют вид параметров порядка. Функция основного состояния $|\psi_{g.s.}\rangle = \cos \beta (|2\rangle + |-2\rangle) / \sqrt{2} + \sin \beta |0\rangle$. Данное состояние, как и ранее, является нематической фазой.

3. В третьем случае $\varphi = 0$, $\theta = 0$, $\cos 2\beta = -1/3$. Это решение устойчиво при $\tilde{K}'_0 < 0$ и $\tilde{J}'_0 - 3\tilde{K}'_0 > 0$. Спиновое состояние, соответствующее этому случаю,

характеризуется следующими параметрами порядка: $\langle S \rangle = 0$, $q_2^0 = q_2^2 = 0$. На первый взгляд, такое состояние напоминает парамагнитное, поскольку $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = 2$. Однако, поскольку в модели учитываются высшие спиновые инварианты, то спиновое состояние характеризуется высшими тензорными компонентам: $q_3^0 = 10$, $q_3^3 = \frac{1}{2} \left(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle \right) = 4\sqrt{2}$, $q_4^0 = -28$, $q_4^3 = \frac{1}{4} \left\langle \left[S^z, \left((S^+)^3 + (S^-)^3 \right) \right]_+ \right\rangle = 2\sqrt{2}$. Во второй подрешетке компоненты тензора имеют вид: $q_3^0 = -10$, $q_3^3 = -4\sqrt{2}$, $q_4^0 = -28$, $q_4^3 = 2\sqrt{2}$. Функция основного состояния первой подрешетки имеет вид $|\psi_{g.s.}\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)/\sqrt{3}$, а второй подрешетки – $|\psi_{g.s.}\rangle = (-|2\rangle - \sqrt{2}|1\rangle)/\sqrt{3}$. Как отмечалось ранее, геометрическим образом этого состояния в спиновом пространстве является тетраэдр. Причем, во второй подрешетке этот тетраэдр развернут относительно тетраэдра первой подрешетки на угол π , что видно из соответствующего коррелятора

$$\langle (S_2^x \cos \chi + S_2^y \sin \chi)^3 \rangle = -\sqrt{2} \cos 3\chi,$$

где S_2^i – компоненты спинного оператора во второй подрешетке.

Такое поведение параметров порядка подрешеток и геометрических образов в спиновом пространстве позволяет рассматривать данное спиновое состояние как антинематическое (антиквадрупольное), аналогичное случаю с $S=3/2$, рассмотренному в [9]. Однако, в отличие от ситуации, рассмотренной в [9] подрешетки отличаются не ориентацией главных осей эллипсоидов квадрупольных моментов, а ориентацией соответствующих тетраэдров.

Такое состояние назовем *ATQ*- антитетраэдрической фазой, в котором в отличие от модели одноподрешеточника (*TQ*- тетраэдрическая фаза) средние от операторов $\langle O_3^i \rangle$ ($i=0,3$) во второй подрешетке, как показано выше, имеют противоположный знак, а геометрические образы в спиновом пространстве повернуты друг относительно друга на угол π .

Кроме того, *ATQ*-состояние обладает следующим свойством. Если волновую функцию этого состояния представить в виде $|\psi\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}e^{i\gamma}|-1\rangle)/\sqrt{3}$, то можно показать, что $\sigma^{(\pm)} = \langle (S^x \pm iS^y)^3 \rangle = \langle (S^\pm)^3 \rangle = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}$. Тогда можно

сформировать вектор $\vec{\sigma}$ с компонентами $\sigma^x = (\sigma^+ + \sigma^-)/2 = 4\sqrt{2} \cos \gamma$,
 $\sigma^y = (\sigma^+ - \sigma^-)/2i = 4\sqrt{2} \sin \gamma$:

$$\vec{\sigma}_{(1)} = \sigma^x \vec{e}_x + \sigma^y \vec{e}_y = 4\sqrt{2} (\cos \gamma \vec{e}_x + \sin \gamma \vec{e}_y).$$

Этот вектор, при обращении времени, ведёт себя как вектор намагниченности, поэтому вектор $\vec{\sigma}$ является псевдоспином. Во второй подрешётке $\vec{\sigma}_{(2)} = -4\sqrt{2} (\cos \gamma \vec{e}_x + \sin \gamma \vec{e}_y)$, что также поясняет приставку «анти» в названии фазы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований установлено, что увеличение спина магнитного иона приводит к возникновению новых квантовых эффектов, в частности, возникновению новых нематических фаз: тетраэдрической и антитетраэдрической; в которых основным состоянием является $|\psi\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)/\sqrt{3}$. Кроме того, нематическая фаза становится вырожденной по параметру поворота в спиновом пространстве. Показано, что геометрическим образом нематического состояния является двухосный эллипсоид, в отличие от случая $S=1$ [11], где геометрическим образом в нематической фазе является одноосный эллипсоид. В системе не реализуется антинематическая фаза как в случае полуцелого спина $S = 3/2$, – её аналогом становится антитетраэдрическая фаза. В тетраэдрической и антитетраэдрической фазах возникает дополнительный параметр – псевдоспин, который при отражении времени $t \rightarrow -t$ преобразуется как вектор истинного спина. Следующим этапом исследований в данной области является исследование поведения спектров элементарных возбуждений в окрестностях линий фазовых переходов.

Список литературы

1. Барьяхтар В.Г. Функции Грина в теории магнетизма / Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. – Киев : Наук. Думка, 1984. – 336 с.
2. Ахиезер А.И. Спиновые волны / Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. – М. : Наука, 1967. – 368 с.
3. Нагаев Э.Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями / Нагаев Э.Л. – М. : Наука, 1988. – 232 с.
4. Chen H. H. Quadrupole Phase Transitions in Magnetic Solids / Chen H. H., Levy P. M. // Phys. Rev. Lett. – 1971. – Vol. 27, No 20. – P. 1383-1385.
5. Papanikolaou N. Unusual phases in quatum spin-1 systems / Papanikolaou N. // Nucl. Phys. – 1988. – Vol. 305. – P. 367-395.
6. Chubukov A. V. Quantum ferrimagnets / Chubukov A. V., Ivanova K. I., Ivanov P. Ch. and Korutcheva E. R. // J. Phys. : Condens. Matter. – 1991. – Vol. 3. – P. 2665-2677.
7. Turner A. M. Nematic order by spin-2 Bose-Einstein condensates / Turner A. M., Barnett R., Demler E., and Vishwanath A. // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol. 98. – P. 190404.
8. Barnett R. Classifying novel phases of spinor atoms / Barnett R., Turner A. M., Demler E. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 97. – P. 180412.

9. Fridman Yu. A. Spin nematic and antinematic state in a spin $S=3/2$ isotropic non-Heisenberg magnet / Fridman Yu. A. Kosmachev O. A., Kolezhuk A. K. and Ivanov B. A. // Phys. Rev. Lett. – 2011. – Vol. 106. – P. 097202.
10. Зайцев Р. О. Обобщенная диаграмная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Зайцев Р. О. // ЖЭТФ. – 1975. – Т. 68, № 1. – С. 207-215.
11. Fridman Yu. A. Spin nematic and orthogonal nematic states in $S = 1$ non-Heisenberg magnet / Fridman Yu. A., Kosmachev O. A., Klevets Ph. N. // JMMM. – 2012 (в печати).

Космачов О. О. Нематічеські фази в магнетик з $S = 2$ / Космачов О. О. // Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2012. – Т. 25(64), № 1. – С. 59-70.

У роботі досліджені стани спінів негайзенберґівського магнетика із спіном магнітного іона $S = 2$. Показано, що облік вищих інваріантів спінів призводить до реалізації специфічних фаз з тензорними параметрами порядку, реалізація яких неможлива в магнетиках з $S=1$. Досліджена вільна енергія системи у різних станах. Визначені геометричні образи тензорних фаз в просторі спіну.

Ключові слова: негайзенберґівський магнетик, вищі інваріанти спінів, спіновий нематик, тетрагональний стан спіну.

Kosmachev O. A. Nematic phases in Spin-2 magnetic / Kosmachev O. A. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2012. – Vol. 25(64), No 1. – P. 59-70.

The spin states of non-Heisenberg Spin-2 magnetic are investigated. It is shown that the account of high order spin invariants results in the realization of the specific phases with tensor order parameters which realization is impossible in Spin-1 magnets. The free energy of the system is investigated for different spin states. Geometrical appearances of tensor phases are determined in spin space.

Keywords: non-Heisenberg magnetic, higher spin invariants, spin nematic, tetragonal spin state.

Поступила в редакцію 14.04.2012 г.