

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН)
Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской
академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

На правах рукописи

Мартынов Александр Сергеевич

**ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ
НА ФАЗОВУЮ ДИАГРАММУ
И ТЕМПЕРАТУРУ УПОРЯДОЧЕНИЯ
МАГНЕТИКОВ С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКОЙ**

1.3.8. физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических
наук Дзедзисашвили Д. М.

Красноярск 2025

Оглавление

	Стр.
Список сокращений и обозначений	4
Введение	5
 Глава 1. Обзор магнитных свойств фрустрированных трёхподрешёточных систем	 16
1.1. Обзор теоретических работ	16
1.1.1. Методы исследования анизотропных систем	16
1.1.2. Методы исследования треугольных систем	21
1.1.3. Методы исследования систем с большой величиной спина	25
1.2. Обзор экспериментальных работ	27
 Глава 2. Квантовый SU3F на треугольной решётке	 35
2.1. Модель квантового SU3F	35
2.2. Диагонализация одноионного гамильтониана. Метод унитарного преобразования в атомном представлении	37
2.3. Зависимость параметров порядка квантового SU3F от параметра ОА	52
2.4. Спектр коллективных спиновых возбуждений квантового SU3F . .	61
 Глава 3. Квантовый SU3F на треугольной решётке в магнитном поле	 68
3.1. Диагонализация одноионного гамильтониана квантового SU3F в магнитном поле с помощью трёх последовательных унитарных преобразований в атомном представлении	68
3.2. Фазовая диаграмма квантового SU3F в координатах магнитное поле - анизотропия	81
3.2.1. Фазовая диаграмма квантового SU3F в случае $I < J$	81
3.2.2. Фазовая диаграмма квантового SU3F в случае $I > J$	88

3.2.3. Вырождение основного состояния $SU(3)_F$ при $I = J$	93
3.3. Спектр коллективных спиновых возбуждений квантового $SU(3)_F$ в магнитном поле	95
Глава 4. Температура Нееля квазидвумерного АФМТР с произвольным спином	100
4.1. Модель квазидвумерного АФМТР с произвольным спином	100
4.2. Метод исследования квазидвумерного АФМТР с произвольным спином	102
4.3. Среднее значение спина квазидвумерного АФМТР	106
4.4. Температура Нееля квазидвумерного АФМТР с произвольным спином	109
4.5. Квантовые эффекты и эффекты пониженной размерности	110
Заключение	117
Благодарности	120
Литература	121

Список сокращений и обозначений

АФ - антиферромагнитные флуктуации.

АФМ фаза - антиферромагнитна

АФМТР - антиферромагнетик на треугольной решётке.

КАФМ - квадрупольная антиферромагнитная фаза. я фаза

ОА - одноионная анизотропия.

СВП - спин-волновое приближение.

ФГ - функции Грина.

ФМ фаза - ферромагнитная фаза

D_c - критическая анизотропия.

D_* - граница раздела коллинеарной антиферромагнитной фазы и скошенной Y -фазы по анизотропии.

SU3F - $SU(3)$ -ферримагнетик.

T_N - температура Нееля.

W - интеграл Ватсона.

Λ -фаза - перевёрнутая Y -фаза

Введение

Фрустрированные магнитные системы активно исследуются экспериментально и теоретически более пятидесяти лет [1–27]. В значительной степени интерес к таким магнетикам обусловлен большим разнообразием необычных магнитных состояний и переходами между ними как по температуре, так и по магнитному полю. Отдельный интерес вызывают квантовые эффекты, оказывающие сильное влияние на различные физические свойства магнитных систем. Примером такого влияния может служить снятие вырождения основного состояния квантовыми флуктуациями и установление дальнего порядка в двумерном магнетике даже в отсутствии внешнего магнитного поля [28]. В низкомерных магнетиках квантовые флуктуации приводят к существенному сокращению магнитного момента на узле [29] и, следовательно, изменению полевой зависимости намагниченности по сравнению с трехмерными системами. Простейшим случаем модельной геометрически фрустрированной системы является магнетик со спином $S = \frac{1}{2}$ и антиферромагнитным обменом между ближайшими соседями на треугольной решетке. Характерной особенностью полевой зависимости намагниченности в такой модели является существование интервала полей, так называемое «плато намагниченности», находящееся около одной трети магнитного момента насыщения. В этом промежутке поля реализуется предсказанная Чубуковым и Голосовым фаза, в которой спины двух подрешеток параллельны, а третьей антипараллельны магнитному полю (up-up-down (uud)-фаза) [1]. Квантовые флуктуации определяют устойчивость этой и других фаз в магнетике [22]. Еще одним перспективным направлением исследования фрустрированных магнетиков на треугольной решетке является поиск в них сверхтвёрдого упорядоченного состояния, обладающего сверхтекучим поведением [30–36]. Впервые сверхтвёрдая фаза была экспериментально обнаружена в $He - 4$ [30]. Поиск подобных сверххолодных тел ведётся до сих пор. Дополнительной мотивацией к

продолжению поисков данной фазы стало теоретическое предсказание её реализации в треугольной системе сверххолодных Бозе атомов [37–40]. Одним из эквивалентов этой системы может являться магнетик с АФМ обменным взаимодействием на треугольной решётке с анизотропией типа лёгкая ось. В коллинеарной фазе состояния со спином вверх и вниз можно представить как присутствие и отсутствие Бозе атома, соответственно.

Растущий в последние три десятилетия интерес к фрустрированным магнетикам с большими значениями спина вызван, прежде всего, возможностью существования в них дополнительного механизма, кардинально меняющего магнитные свойства - анизотропии. Её существование приводит к появлению новых, необычных магнитных фаз с нетривиальным изменением параметров порядка как по полю, так и по температуре. В зависимости от типа анизотропии параметры порядка системы могут уменьшаться или увеличиваться по абсолютному значению, например, ОА типа «лёгкая плоскость» способствует уменьшению величины спина, в тоже время ОА типа «лёгкая ось» способствует увеличению компоненты спина вдоль направления «лёгкой оси». Радикально меняются и резонансные свойства магнетика [20], например, в спектре спиновых возбуждений может возникать щель. Также наличие анизотропии ведёт к неэквидистантности одноузельных уровней и возрастанию числа ветвей спектра.

Одним из перспективных направлений в развитии магнитных технологий является изучение материалов с хорошей проводимостью спинового тока для создания различных спинтронных устройств. В этой задаче важным аспектом является существование высокоэнергетических частот магнитного резонанса, которые встречаются в материалах с антиферромагнитным обменом. Помимо этого дополнительной особенностью, способствующей стабилизации спинпроводимого состояния, является присутствие в материалах точки компенсации. Оба этих свойства обнаруживаются в ферримагнетиках. В таких системах, в связи с конкурирующими $SU(N)$ типами симметрии в разных

подрешётках возникают необычные и сложные для описания явления [21]. Значительно реже однородных по спину магнетиков на треугольной решётке рассматриваются системы, в которых спины разных подрешеток различны. До настоящего времени исследованы свойства ферримагнетиков $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1)$ и $(\frac{1}{2}, 1, 1)$ с изинговским обменным взаимодействием между спинами [25–27]. Такое упрощение исключает квантовые флуктуации и значительно сужает область применения теоретического описания для анализа реальных магнетиков. Гейзенберговский обмен между подрешетками с одноионной анизотропией и без неё стимулирует формирование новых неколлинеарных ферримагнитных структур с необычными статическими и резонансными свойствами.

Помимо эффектов анизотропии в системах с большим значением спина возникает проблема теоретического описания намагниченности с учётом квантовых и температурных флуктуаций и при наличии фрустраций обменных связей. Обычно для расчёта намагниченности используют метод двухвременных температурных спиновых функций Грина (ФГ). Сложность этого подхода состоит в том, что при больших значениях спина $S > \frac{1}{2}$ для расчёта намагниченности не достаточно нахождения ФГ $\langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$ необходимо также вычислить вспомогательные ФГ типа $\langle\langle S^+ | (S^z)^n S^- \rangle\rangle$. В анизотропном случае дополнительной проблемой является необходимость учёта ФГ высокого порядка. В связи с этим важной задачей является развитие методов изучения магнитных свойств систем с произвольным значением спина [45] на решётках с фрустрированными обменными связями.

Таким образом, тема данной диссертационной работы представляет интерес для решения ряда фундаментальных вопросов физики конденсированного состояния и для решения некоторых прикладных задач.

Связь работы с научными программами, планами, темами. Работа выполнена в лаборатории теоретической физики института физики имени Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН. Исследования, определяющие содержание диссертации, были выполнены в рамках научной тематики Госзадания

ИФ СО РАН.

Цели и задачи исследования. Целью данной диссертационной работы является теоретическое исследование влияния анизотропии и внешнего магнитного поля на свойства основного состояния и спектр элементарных возбуждений квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ с гейзенберговским обменным взаимодействием, а также изучение температурных эффектов в квазидвумерном фрустрированном АФМТР с произвольным спином. В соответствие с целью диссертационной работы были поставлены и решены следующие задачи:

1. Определить влияние квантовых флуктуаций, обусловленных ОА типа «легкая плоскость», на структуру основного состояния, значения магнитных параметров порядка и спектр коллективных спиновых возбуждений в SU3F при нулевой температуре в трёх случаях: 1) обменный интеграл между подрешётками с разными величинами спина (I) больше обменного интеграла между подрешётками с одинаковыми величинами спина (J) - $I > J$; 2) обменный интеграл между подрешётками с одинаковыми величинами спина больше обменного интеграла между подрешётками с разными величинами спина - $J > I$; 3) равенство обменных интегралов - $I = J$.

2. Исследовать влияние внешнего магнитного поля на конкурирующие механизмы, обуславливающие квантовые флуктуации в квантовом SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ при нулевой температуре.

3. Построить и описать фазовую диаграмму основного состояния квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ при нулевой температуре в координатах внешнее магнитное поле - анизотропия.

4. Исследовать влияние температурных флуктуаций на магнитный параметр порядка квазидвумерного АФМТР с произвольной величиной спина в случае антиферромагнитного гейзенберговского обменного взаимодействия между ближайшими соседями внутри слоя и ферромагнитного гейзенбергов-

ского обменного взаимодействия между ближайшими соседями из разных слоев.

5. Получить аналитическое выражение для температуры Нееля квазидвумерного АФМТР.

Объектами исследования являются квантовый $SU(3)$ ферримагнетик на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ с гейзенберговским обменным взаимодействием и с одноионной анизотропией типа «легкая плоскость», а также квазидвумерный антиферромагнетик на треугольной решётке с произвольным спином.

Предметом исследования являются магнитная структура основного состояния, параметры порядка, спектр спин-волновых возбуждений и фазовая диаграмма квантового $SU(3)$ со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ на треугольной решётке при нулевой температуре. Параметры порядка, спектр коллективных спиновых возбуждений и температура Нееля квазидвумерного АФМТР.

Методы исследования. Для корректного учёта $SU(3)$ симметрии спинов подрешётки с $S = 1$ и немалой одноионной анизотропии производился переход к операторам Хаббарда [41]. Диагонализация одноионного гамильтониана подрешётки с $S = 1$ в атомном представлении проводилась методом унитарных преобразований для операторов Хаббарда [42]. В рамках формализма индефинитной метрики был выполнен переход от операторов Хаббарда к бозе операторам [43, 44]. Для спиновых операторов подрешёток с $S = \frac{1}{2}$ применялось преобразование Гольштейна-Примакова. Величина и направление среднего значения спина каждой подрешётки определялись в приближении среднего поля. Дисперсионные уравнения найдены с использованием уравнений движения для матричных запаздывающих $\Phi\Gamma$, а необходимые для расчёта параметров порядка $SU(3)$ числа заполнения бозонов получены по спектральной теореме. Для нахождения зависимости параметра порядка и температуры Нееля от параметров модели квазидвумерного АФМТР приме-

нялся метод комбинированных ФГ, предложенный в работе [45]. В рамках теории спиновых волн [29] рассчитаны значения параметра порядка и квантового сокращения спина.

Научная новизна полученных результатов. Все поставленные в диссертационной работе задачи были сформулированы и решены впервые. Решением поставленных задач являются следующие новые результаты:

1. Показано, что по мере увеличения параметра ОА типа «легкая плоскость» D в квантовом SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ в отсутствие внешнего магнитного поля последовательно реализуются три фазы основного состояния: 1) коллинеарная ферримагнитная *uid*-фаза при величинах параметра ОА меньших некоторого значения $< D_*$; 2) скошенная Y -фаза при величинах параметра ОА, находящихся в интервале $D_* < D < D_c = 6I^2/J$; 3) КАФМ фаза при величинах параметра ОА больших критического значения $D > D_c$. При этом коллинеарная ферримагнитная *uid*-фаза реализуется только в случае $I > J$, так как для $I < J$ значение D_* равно нулю.

2. Построены зависимости параметров порядка квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ от величины параметра ОА D при различных соотношениях обменных интегралов I/J . При $I > J$ в данных зависимостях обнаружены точки компенсации, в которых сумарный магнитный момент системы обращается в ноль $M = 0$ в случае $D < D_c$.

3. Рассчитан спектр коллективных спиновых возбуждений квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ в отсутствие внешнего магнитного поля для различных соотношений обменных интегралов I/J и значений параметра ОА D . Показано, что спектр характеризуется четырьмя ветвями, две из которых при $D \neq 0$ всегда щелевые. Третья ветвь – голдстоуновская, связанная с нарушением симметрии основного состояния относительно вращения вокруг оси перпендикулярной к плоскости «легкого намагничивания». Четвертая ветвь характеризуется конечной

щелью Δ в коллинеарной ферримагнитной udd -фазе, которая обращается в ноль $\Delta = 0$ в скошенной Y -фазе.

4. Впервые построена фазовая диаграмма квантового $SU(3)_F$ на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ в координатах магнитное поле h – параметр ОА D . Показано, что структура фазовой диаграммы существенно зависит от соотношения обменных интегралов I/J . При $I < J$ вектор $\mathbf{R}_L$ среднего значения магнитного момента подсистемы со спином $S = 1$ всегда направлен вдоль магнитного поля, а при увеличении напряжённости магнитного поля h в квантовом $SU(3)_F$ последовательно реализуются три фазы: 1) Λ -фаза; 2) веерная W -фаза и 3) коллинеарная ФМ фаза. Обнаружено нетривиальное поведение системы на границе между Λ - и W -фазами, где действие внешнего магнитного поля на подсистему спинов с $S = \frac{1}{2}$ полностью компенсируется эффективным полем, создаваемым спинами подрешётки с $S = 1$, а эффективное поле подсистемы с $S = \frac{1}{2}$, действующее на подсистему спинов с $S = 1$, обращается в ноль. В результате подсистемы с $S = \frac{1}{2}$ и $S = 1$ оказываются полностью независимы друг от друга. При этом подсистема с $S = \frac{1}{2}$ оказывается в АФМ фазе, а подсистема с $S = 1$ в парамагнитной фазе. Получено аналитическое выражение, описывающее границу между Λ - и W -фазами. Для $I > J$ проекция вектора $\mathbf{R}_L$ среднего значения магнитного момента подсистемы со спином $S = 1$ на направление магнитного поля и вектор магнитного поля $\mathbf{h}$ противоположны друг другу при малых h и не слишком малых D , и сонаправлены – при больших h . При этом для $D \lesssim D_*$ разворот вектора $\mathbf{R}_L$ происходит монотонно с увеличением напряжённости магнитного поля h , а модель квантового $SU(3)_F$ проходит последовательно через три фазы: коллинеарная ферримагнитная uid -фаза; веерная V -фаза; ФМ-фазу. Для $D > D_*$ система при малых h находится в Y -фазе, которая при увеличении магнитного поля сменяется коллинеарной ферримагнитной uid -фазой. Переход из последней в ФМ-фазу при дальнейшем увеличении h может происходить как монотонно через V -фазу, так и скачком, в зависимо-

сти от величины анизотропии.

5. Построены зависимости как дипольных, так и квадрупольных параметров порядка от величины магнитного поля h и анизотропии D . Установлено, что при увеличении параметра ОА D квадрупольный параметр порядка возрастает и выходит на насыщение. Показано, что зависимость полного момента квантового SU3F от магнитного поля при $I > J$ и при $D \gtrsim D_*$ качественно повторяет аналогичную зависимость для АФМТР со спином $S = \frac{1}{2}$ при учёте квантовых флуктуаций как по последовательности реализуемых фаз (Y , uid , V и ФМ) при увеличении напряжённости магнитного поля h , так и по наличию «квази-плато» в коллинеарной ферримагнитной uid -фазе.

6. Для квазидвумерного АФМТР с произвольной величиной спина S впервые получено аналитическое выражение для температуры Нееля T_N , зависящее как от величины спина S , так и от отношения внутри- и межплоскостного обмена. Показано, что относительный параметр порядка R/S уменьшается при росте относительной температуры T/T_N тем быстрее, чем больше значение спина.

Научные положения, выносимые на защиту.

1. Реализация трех фаз основного состояния квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ при нулевой температуре и магнитном поле при увеличении параметра ОА: 1) коллинеарная ферримагнитная uid -фаза; 2) скошенная Y -фаза; 3) КАФМ фаза.

2. Точка компенсации в квантовом SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ в зависимости суммарного магнитного момента от параметра ОА при $I > J$.

3. Наличие в спектре элементарных возбуждений ветви, которая характеризуется в коллинеарной ферримагнитной udd -фазе конечной щелью, обращаемой в ноль при переходе в Y -фазу.

4. Фазовая диаграмма квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ с ОА типа «легкая плоскость» в координатах

магнитное поле h - параметр анизотропии D для двух случаев: 1) $J > I$; 2) $I > J$.

5. Зависимость полного момента квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ от магнитного поля при $I > J$ и при $D \gtrsim D_*$ которая качественно повторяет аналогичную зависимость для АФМТР со спином $S = \frac{1}{2}$ при учёте квантовых флуктуаций как по последовательности реализуемых фаз (Y , uud , V и ФМ) при увеличении h , так и по наличию «квази»-плато в uud -фазе.

6. Аналитическое выражение для температуры Нееля, зависящее от величины спина S , и от отношения внутри- и межплоскостного обмена квазидвумерного АФМТР с произвольным спином.

Достоверность полученных результатов обусловлена выбором методов математического анализа магнитоупорядоченных систем. Подходы, используемые в диссертационной работе, показали свою высокую эффективность для более простых моделей с квадратной и квазидвумерной квадратной решётками. Выбранный способ описания сложных систем, представленных в работе, позволяет успешно достичь всех поставленных в диссертационной работе задач. Представленные в работе подходы позволяют осуществить проверку полученных результатов методом проведения предельных переходов от описываемых систем к упрощённым моделям.

Научная и практическая ценность полученных результатов. Представленные в диссертационной работе исследования квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ и квазидвумерного АФМТР с произвольным спином позволяют предоставить довольно точное и универсальное описание свойств схожих моделей с различными соотношениями между параметрами магнитных систем. Рассчитаны зависимости параметров порядка от параметра ОА, напряженности внешнего магнитного поля и температуры. Определены и описаны фазы основного состояния для исследуемых в диссертационной работе моделей, что существенно для

создания магнитных материалов с изначально определёнными свойствами. Результаты работы согласуются со свойствами ранее исследованных моделей, являющихся предельным переходом изучаемых систем. Реализация в рамках модели квантового SU3F на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ нескольких точек компенсации может представлять практический интерес для спинтроники и служить дополнительной мотивацией к созданию материалов с подобной структурой.

Апробация результатов диссертации. Результаты диссертационного исследования представлялись на научных международных и Всероссийских конференциях: IX Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism». September 13-17, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia, 2025; XIV Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2023, Россия, Красноярский край, Красноярск, 2023; Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых учёных, аспирантов и студентов. Секция физика, Россия, Красноярский край, Красноярск, 2024; Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых учёных, аспирантов и студентов. Секция физика, Россия, Красноярский край, Красноярск, 2025.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 7 работ, из которых 3 работы [46–48] опубликованы в журналах, индексируемых базами Scopus и Web of Science и входящих в перечень ВАК Минобрнауки России, а также опубликованы в сборниках материалов 4 конференций [49–52].

Личный вклад автора. Автор принимал активное участие в постановке задач, их решении, а также в интерпретации и анализе полученных результатов. В работах [46, 49, 50] автор принимал участие в проведении аналитических преобразований для диагонализации одноионного гамильтониана методом унитарного преобразования в атомном представлении и выводе гамильтониана в бозонном представлении с помощью перехода от операторов Хаббарда к двум сортам бозе операторов для SU3F. Частично были выполнены расчёты спектров коллективных спиновых возбуждений для разных соот-

ношений между параметрами модели. В работах [47, 51] автором была выдвинута гипотеза о возможности существования V -фазы в модели квантового $SU(3)_F$ на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ с ОА типа «легкая плоскость» при определённых значениях напряжённости внешнего магнитного поля. Была построена фазовая диаграмма в координатах внешнее магнитное поле - анизотропия для двух соотношений между обменными интегралами: 1) $I > J$; 2) $J > I$. Рассчитаны графики зависимости параметров порядка от параметра ОА при некотором значении напряжённости внешнего магнитного поля и графики зависимости параметров порядка от напряжённости внешнего магнитного поля при некотором значении параметра ОА. Построены графики спектра коллективных спиновых возбуждений для случаев нахождения системы в разных фазах основного состояния. В работах [48, 52] автором были построены графики зависимости относительного параметра порядка от относительной температуры к температуре Нееля для различных значений спина в модели квазидвумерного АФМТР. Для нескольких значений степени квазидвумерности были построены графики зависимости параметра порядка от температуры в случае $S = \frac{1}{2}$. Также автором рассчитан параметр порядка и квантовое сокращение спина для нескольких значений S и разной степени квазидвумерности модели. Проведено сравнение результатов полученных в рамках использованного в диссертации метода [45] с результатами вычислений в рамках спин-волнового приближения [29].

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка используемой литературы из 63 наименований. Общий объём диссертации составляет 128 страниц текста с 27 рисунками.

Глава 1

Обзор магнитных свойств фрустрированных трёхподрешёточных систем

В современной теории магнетизме активно развивается направление связанное с исследованием нескольких механизмов приводящих к квантовым эффектам в магнетиках. В данной главе будут описаны ряд экспериментальных и теоретических работ, в которых рассматриваются методы, модели и соединения, близкие к используемым в диссертационной работе.

1.1. Обзор теоретических работ

В теоретической части обзора представлены публикации, в которых впервые применялись методы, используемые в диссертационной работе. Также рассмотрены статьи посвященные исследованию влияния механизмов квантовых флуктуаций, таких как анизотропия, фрустрация, низкая размерность, на структуру основного состояния, параметры порядка и спектр возбуждений.

1.1.1. Методы исследования анизотропных систем

Одним из механизмов, влияющих на величину квантовых флуктуаций, является ОА. Строгий учёт ОА обычными методами спиновых ФГ является сложным из-за необходимости учёта большого количества ФГ и квадрупольных моментов. В этом подразделе рассматриваются работы, в которых исследован вклад анизотропии в свойства системы.

Впервые вид собственных волновых функций анизотропного ферромагнетика с $S = 1$ был предсказан в работе Локтева и Островского [53]. В ней авторы самосогласованно исследовали спектр ферромагнетика с анизотропным обменным взаимодействием в поперечном магнитном поле с ОА типа

«лёгкая ось» для спинов $S = 1$. Опираясь на уравнение:

$$\langle \psi_{\vec{n}}^{(0)} | S_{\vec{n}}^{\xi, \eta} | \psi_{\vec{n}}^{(0)} \rangle = 0,$$

где $\psi_{\vec{n}}^{(0)}$ - собственная волновая функция основного состояния оператора энергии, η, ξ - оси, лежащие в плоскости перпендикулярной «лёгкой оси», $S_{\vec{n}}^{\xi}, S_{\vec{n}}^{\eta}$ - поперечные компоненты спинового оператора на узле n , авторами [53] был предсказан вид собственных волновых функций:

$$|\psi_{\vec{n}}^{(0)}\rangle = \cos \alpha | +1 \rangle + \sin \alpha | -1 \rangle, \quad (1.1)$$

зависящий от собственных функций $|\pm 1\rangle$ оператора S_n^z и некоторого параметра α в анизотропном случае. Это предположение позволило найти систему уравнений на параметр α и среднее значение спина. Усредняя гамильтониан по волновой функции 1.1 был получен спектр энергии основного состояния при нулевой температуре.

Один из подходов для исследования анизотропных систем с величиной спина $S = 1$ был разработан Онуфриевой [43], в котором после использования атомного представления для спиновых операторов, впервые был проведен переход от операторов Хаббарда к бозе операторам. При рассмотрении ферромагнетика со спином $S = 1$ и анизотропией типа «лёгкая плоскость» во внешнем магнитном поле, направленном перпендикулярно «лёгкой плоскости», гамильтониан этого ферромагнетика

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i S_j) + D \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z, \quad D > 0,$$

в три этапа был приведен к квадратичному по бозе операторам виду. На первом шаге было применено $SU(2)$ -преобразование, описывающее переход к новым локальным осям координат, ось Oz расположена вдоль направления равновесной намагниченности. Вторым этапом был произведён переход от спиновых операторов к операторам Хаббарда [41]. Оператор Хаббарда определяется выражением: $X^{m,n} = |m\rangle\langle n|$, где $(S^z |n\rangle = n|n\rangle)$, $|n\rangle$ - собственные

состояния оператора S^z). Последним третьим этапом стал переход от операторов Хаббарда к бозе операторам, предложенный в форме:

$$\begin{aligned} X^{\tilde{0},\tilde{1}} &= c^+, & X^{\tilde{1},\tilde{0}} &= (1 - c^+c - d^+d)c, & X^{-\tilde{1},\tilde{0}} &= d^+c, \\ X^{-\tilde{1},\tilde{1}} &= d^+, & X^{\tilde{1},-\tilde{1}} &= (1 - c^+c - d^+d)d, & X^{\tilde{0},-\tilde{1}} &= c^+d, \\ X^{\tilde{1},\tilde{1}} &= (1 - c^+c - d^+d), & X^{\tilde{0},\tilde{0}} &= c^+c, & X^{-\tilde{1},-\tilde{1}} &= d^+d/. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Эти формулы следуют из анализа энергетической диаграммы трехуровневой системы с неэквидистантным спектром, а $c^+(c)$ и $d^+(d)$ - бозе операторы рождения(уничтожения) двух сортов, описывающие переходы из основного состояния в два возбужденных соответственно.. Этот подход позволил показать, что в анизотропном ферромагнетике основное состояние является суперпозицией квадрупольного и ферромагнитного состояний и найти значения магнитного поля, при которых происходили переходы в КАФМ-фазу или ФМ-фазу.

С помощью представления (1.2) были исследованы корреляционные функции ферромагнетика в отсутствие внешнего магнитного поля. В работе [20] рассматривался ферромагнетик с ОА типа «лёгкая плоскость» и спином $S = 1$. Гамильтониан модели был записан в виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle f,g \rangle} (\vec{S}_f \vec{S}_g) + \frac{\beta}{2} \sum_f (S_f^y)^2.$$

В приближении среднего поля решалось уравнение Шрёдингера для одноузельного гамильтониана. В результате для этого гамильтониана были получены собственные волновые функции

$$\begin{aligned} \psi(1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle), & \psi(0) &= |0\rangle, \\ \psi(-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|1\rangle + |-1\rangle), \end{aligned}$$

с помощью которых строились операторы Хаббарда. Используя формулы (1.2) и пренебрегая слагаемыми выше второго порядка по бозе операторам,

был получен гамильтониан в представлении бозе операторов. Для перехода к диагональной форме гамильтониана использовался метод Боголюбова. Основным результатом работы стало вычисление корреляционных функций для разных значений константы анизотропии β .

Отдельно рассмотрим метод, разработанный Вальковым в работе [42]. В ней было предложено и использовано унитарное преобразование операторов Хаббарда для диагонализации многоуровневого гамильтониана. Набор унитарных операторов имеет вид:

$$U_{nm}(\alpha) = \exp \{ \alpha X^{nm} - \alpha^* X^{mn} \} \quad n < m, n, m = \mathbf{N}. \quad (1.3)$$

Здесь $\mathbf{N}$ -целые числа, α -комплексный параметр унитарного преобразования. Используя алгебру операторов Хаббарда и представление комплексных чисел $\alpha = |\alpha| \exp(i\mu)$, унитарные операторы можно переписать в виде:

$$U_{nm}(\alpha) = 1 + (\cos |\alpha| - 1) (X^{nn} + X^{mm}) + \\ + \sin |\alpha| [\exp(i\mu) X^{nm} - \exp(-i\mu) X^{mn}]. \quad (1.4)$$

С помощью предложенных унитарных операторов был получен закон для преобразования операторов Хаббарда,

$$X^{\tilde{p}\tilde{q}} = U_{nm}(\alpha) X^{pq} U_{nm}^+(\alpha) = X^{pq}(\alpha) \quad (1.5)$$

Из определения унитарного оператора U_{nm} следует:

$$\Gamma_{\tilde{n}\tilde{m}} = U_{nm}(-\alpha) \Gamma_{nm} U_{nm}^+(-\alpha) = \Gamma_{nm},$$

где $\Gamma_{nm} = X^{nm} - X^{mn}$. В связи с симметричностью унитарного преобразования исходные операторы X^{nm} можно выразить через новые в виде:

$$X^{pq} = U_{nm}(\alpha) X^{\tilde{p}\tilde{q}} U_{nm}^+(\alpha) = U_{\tilde{n}\tilde{m}}(\alpha) X^{\tilde{p}\tilde{q}} U_{\tilde{n}\tilde{m}}^+(\alpha).$$

Используя (1.5) для диагональных и недиагональных операторов Хаббарда, были получены явные выражения

$$\begin{aligned}
X^{nn}(\alpha) &= \cos^2 |\alpha| X^{nn} + \sin^2 |\alpha| X^{mm} - \frac{1}{2} \sin 2|\alpha| (e^{i\mu} X^{nm} + e^{-i\mu} X^{mn}), \\
X^{mm}(\alpha) &= \cos^2 |\alpha| X^{mm} + \sin^2 |\alpha| X^{nn} + \frac{1}{2} \sin 2|\alpha| (e^{i\mu} X^{nm} + e^{-i\mu} X^{mn}), \\
X^{nm}(\alpha) &= \cos^2 |\alpha| X^{nm} - \sin^2 |\alpha| e^{-i2\mu} X^{mn} + \frac{1}{2} \sin 2|\alpha| e^{-i\mu} (X^{nn} - X^{mm}), \\
X^{mn}(\alpha) &= \cos^2 |\alpha| X^{mn} - \sin^2 |\alpha| e^{i2\mu} X^{nm} + \frac{1}{2} \sin 2|\alpha| e^{i\mu} (X^{nn} - X^{mm}), \\
X^{np}(\alpha) &= \cos |\alpha| X^{np} - \sin |\alpha| e^{-i\mu} X^{mp}, \quad p \neq n, m \\
X^{pn}(\alpha) &= \cos |\alpha| X^{pn} - \sin |\alpha| e^{i\mu} X^{pm}, \quad p \neq n, m \\
X^{pm}(\alpha) &= \cos |\alpha| X^{pm} + \sin |\alpha| e^{-i\mu} X^{pn}, \quad p \neq n, m \\
X^{mp}(\alpha) &= \cos |\alpha| X^{mp} + \sin |\alpha| e^{i\mu} X^{np}, \quad p \neq n, m \\
X^{pq}(\alpha) &= X^{pq}, \quad (p, q \neq n, m). \quad (1.6)
\end{aligned}$$

При диагонализации конкретного оператора Гамильтона, система уравнений на углы унитарного преобразования возникает из условия равенства нулю коэффициентов при недиагональных операторах Хаббарда в выражении для преобразованного гамильтониана. Данный метод был успешно применен автором для квазидвумерного и квазитрёхмерного случая. Разработанный в работе [42] подход для диагонализации гамильтониана с помощью унитарного преобразования операторов Хаббарда был назван «унитарным преобразованием в атомном представлении».

Преимущество метода «унитарного преобразования в атомном представлении» состоит в его применимости для моделей с разной величиной спина S и при конечной температуре. В совокупности с представлением операторов Хаббарда через бозе операторы, предложенным Онуфриевой, [43], это позволило описать влияние одноионной анизотропии на квантовые флуктуации анизотропного иона с величиной спина $S = 1$.

1.1.2. Методы исследования треугольных систем

В фрустрированных системах квантовые флуктуации возникают в следствие конкуренции обменных взаимодействий между спинами из разных подрешеток. В таких системах не существует состояния, удовлетворяющего минимуму энергии каждой обменной связи. В связи с чем, такие системы демонстрируют многообразие реализующихся фаз и сложные зависимости параметров порядка как от внешнего магнитного поля так и от температуры.

Наиболее простой моделью, обладающей сильной фрустрацией, значительно влияющей на свойства модели, является АФМТР. Основопологающей теоретической работой по АФМТР является статья Чубукова и Голосова [1], в которой впервые было предсказано существование «плато намагниченности» с реализацией в нем коллинеарной антиферромагнитной фазы. В этой работе авторы в рамках СВП использовали стандартное разложение $1/S$. Учитывая специфику системы производился переход к трём сортам бозе операторов с помощью преобразования Гольштейна-Примакова. Данный подход позволил определить тип магнитной структуры основного состояния, которая даже при малых полях оказалась планарной. Такой тип структуры отличается от случая классического рассмотрения данной системы, в котором зонтичная структура имеет приоритет. Система может находиться в одной из четырёх фаз. В низких полях реализовывалась Y -фаза, в которой спины одной из подрешёток находятся противоположно внешнему магнитному полю, а спины двух других подрешёток находятся под одинаковыми по модулю, но противоположными по знаку углами относительно направления внешнего магнитного поля. Далее при увеличении поля Y -фаза переходила в коллинеарную антиферромагнитную uid -фазу, в которой спины двух подрешёток направлены вдоль поля, в тоже время спины третьей подрешётки направлены против поля. Было предсказано, что коллинеарная антиферромагнитная uid -фаза при квантовом рассмотрении, в отличие от классической теории, существует в небольшом интервале магнитных полей, находящихся около одной

третьей магнитного момента насыщения. Данное предположение основывалось на отсутствии непрерывного вырождения основного состояния, полученного из вычисления спектров энергии. При дальнейшем увеличении внешнего поля реализовывалась V -фаза, в которой спины двух подрешёток находятся под одинаковым углом от магнитного поля, а спины третьей подрешётки под углом другим по модулю и противоположным по знаку. V -фаза оставалась приоритетной на всём остальном участке фазовой диаграммы вплоть до насыщения, где система переходила в ФМ фазу. Авторам удалось описать зависимость намагниченности треугольной решётки от напряжённости внешнего магнитного поля при нулевой температуре с учётом квантовых флуктуаций. Полученные в данной работе фазы основного состояния также были обнаружены в объектах диссертационной работы. Помимо простой модели треугольной решётки авторам работы [1] удалось показать, что при добавлении ОА типа «лёгкая плоскость» перпендикулярной направлению внешнего магнитного поля вышеописанное плато намагниченности, являющееся интервалом магнитных полей, в котором реализуется коллинеарная антиферромагнитная фаза, разрушается.

Доказательство существования «плато намагниченности» было представлено в работе [22]. Аналогично работе [1], в СВП проводилось преобразование Гольштейна-Примакова для перехода от спиновых к трём сортам бозе операторов. Однако в данном случае авторы ограничились линейным по бозе операторам приближением для спиновых операторов. С помощью классического UV -преобразования Боголюбова в матричной форме

$$T_k = \begin{pmatrix} U_k & V_k \\ V_k & U_k \end{pmatrix},$$

где U_k, V_k удовлетворяют условиям:

$$U_k U_k^+ - V_k V_k^+ = Y, \quad U_k V_k^+ - v_k U_k^+ = 0,$$

а Y -единичная матрица, была произведена диагонализация гамильтониана:

$$T_k^+ M_k T_k = \Omega_k,$$

где

$$\Omega_k = \begin{pmatrix} \omega_k & 0 \\ 0 & \omega_k \end{pmatrix},$$

В данном случае U_k , V_k и ω_k - квадратные матрицы размером 3×3 . Используя классическое представление для намагниченности системы, как производной энергии основного состояния по внешнему полю

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial E_0}{\partial H},$$

были рассчитаны и построены графики намагниченности, обладающие горизонтальной «полкой» на уровне одной третьей намагниченности насыщения. На графиках намагниченности авторы представили экспериментально полученные зависимости для $Ba_3NiSb_2O_9$ и $RbFe(MoO_4)_2$, на которых видно хорошее сходство рассчитанных результатов с экспериментом. Однако на границах фазовых переходов возникал сильный излом кривой в отличие от измеренных в эксперименте значений. Эти изломы связаны с используемыми слагаемыми не выше второго порядка по бозе операторам. Однако учёт более высоких порядков ведёт к существенному усложнению расчётов, в связи с чем для данного полуклассического подхода важной проблемой остаются вычислительные ресурсы, поскольку даже в линейном приближении по спиновым операторам для нахождения коэффициентов Боголюбова необходимо разрешить систему, состоящую из большого числа тригонометрических уравнений.

Большой интерес с теоретической точки зрения вызывают ферримагнетики с несколькими конкурирующими $SU(N)$ типами симметрии подрешёток. В многоподрешёточных ферримагнетиках возможно усиление квантовых эф-

фектов за счёт компенсации эффективных полей разных подрешёток. Примером подобных систем является ферримагнетик со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ или $S = 1, 1, \frac{1}{2}$ с изинговским типом обменного взаимодействия и ОА типа «лёгкая плоскость» на треугольной решётке [25–27].

В работах [25,26] авторы использовали моделирование Монте-Карло с правилом обновления Метрополиса и периодическими граничными условиями. Определив число частиц Монте-Карло и показав достаточность их количества, были установлены границы фаз. Границы фаз определялись как возникновение максимумов в некоторых термодинамических функциях, в частности, удельной теплоемкости, внутренней энергии. Были рассчитаны зависимости восприимчивости и параметров порядка обеих моделей ферримагнетика от параметра ОА и температуры. Построены фазовые диаграммы в координатах температура - анизотропия для обоих типов ферримагнетика. Для ферримагнетика со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, 1, 1$ существуют только две фазы - парамагнитная и ферримагнитная $FR_2(\pm\frac{1}{2}, \pm 1, \pm 1)$, разделённые критической кривой фазового перехода второго рода. Для ферримагнетика со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ помимо парамагнитной фазы и ферримагнитной $FR_2(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm 1)$ фазы при малых значениях ОА и низкой температуре реализуется $FR_1(\pm\frac{1}{2}, \pm 1, 0)$ фаза. Между парамагнитной и двумя ферримагнитными фазами как и в другой модели ферримагнетика происходит фазовый переход второго рода, в тоже время между FR_1 и FR_2 происходит фазовый переход первого рода. Произведено сравнение возможных фаз и критических параметров у однородных по спину антиферромагнетиков и ферромагнетиков $S = \frac{1}{2}$ и $S = 1$ для трех подрешёток с указанными двумя типами ферримагнетика. В отличие от однородных по спину моделей в этих ферримагнетиках отсутствуют некоторые фазы и существуют точки компенсации, в которых поле, действующее на ионы одной подрешётки со стороны ионов другой подрешётки, компенсируется полем, действующим со стороны ионов третьей подрешётки.

Более сложный вариант модели ферримагнетика со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ и случайной анизотропией представлен в работе Сантана и др. [27]. В данном случае под случайной анизотропией подразумевалось существование вероятности для каждого спина с $S = 1$ иметь анизотропию. Авторами было найдено значение вероятности случайной анизотропии, при котором петли гистерезиса на графике зависимости намагниченности от анизотропии исчезают, что послужило причиной к исчезновению линии фазового перехода первого рода. При дальнейшем увеличении этого параметра RF_1 фаза исчезает, в связи с чем исчезает трикритическая точка.

В совокупности в данном подразделе рассмотрены публикации описывающие уникальное свойство существования «плато намагниченности» в АФМТР. Помимо этого приведены работы, в которых изучались свойства упрощенной модели одного из объектов диссертационного исследования: квантового SU3F на треугольной решетке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$.

1.1.3. Методы исследования систем с большой величиной спина

Проблема изучения систем с большой величиной спина состоит в получении нетривиального выражения для среднего значения спина. В этом подразделе рассматриваются два метода описания таких систем. Первый основан на применении спин-волновой теории в случае нулевой температуры. Второй - на применении комбинированных ФГ для произвольного значения температуры.

Работа Андерсона [29] представляет применение теории спиновых волн для описания антиферромагнетиков с произвольной величиной спина модели. В этой работе рассматривается одномерная цепочка, квадратная и кубическая решётки. Постулируя вид основного состояния и перейдя от спиновых операторов к операторам спиновых волн, автор в гармоническом приближении находит функцию энергии основного состояния от параметров системы

и среднее значение спина для двумерного и трёхмерного случаев:

$$\langle E_g \rangle_{D=2} = -2NJS^2(1 + 0.158/S)$$

$$\langle E_g \rangle_{D=3} = -3NJS^2(1 + 0.097/S).$$

Здесь $\langle E_g \rangle_{D=2}$, $\langle E_g \rangle_{D=3}$ - энергия основного состояния, N - число узлов решётки, J - обменный интеграл, S - значение спина системы. Числа 0.158 и 0.096 обозначают квантовое сокращение спина в двух и трёхмерном случае. Интересной особенностью полученных результатов является независимость квантового сокращения от величины спина с учётом нулевых колебаний. Этот результат плохо согласуется с экспериментальными данными намагниченности соединений с разным значением спина, имеющих похожую магнитную структуру, что послужило дополнительным стимулом к созданию нового метода для нахождения параметров порядка систем с произвольной величиной спина.

Впоследствии были разработаны подходы, основанные на спиновых ФГ, которые успешно применялись для изучения изотропных систем с небольшой величиной спина $S = \frac{1}{2}, 1$. Однако при возрастании величины спина и учёте анизотропии происходило существенное усложнение аналитических выражений для средних значений и ФГ. Ферромагнетик с кубической решёткой и произвольной величиной спина системы во внешнем магнитном поле для изотропного и анизотропного случаев был рассмотрен в работе [45]. Авторы предложили метод, основанный на комбинированных функциях Грина, состоящих из спиновых операторов и их парциальных составляющих в виде операторов Хаббарда. Этот метод позволил аналитически выразить температуру Нееля через обобщенный интеграл Ватсона для произвольной величины спина решётки. Также были получены выражения для самосогласованного расчёта спектра спин-волновых возбуждений и намагниченности системы. Результаты расчетов в предельном случае стремились к результатам, полученным другими методами. Сравнение полученных значений со значениями,

расчитанными методом спиновых волн в работе Андерсона [29], показало хорошее согласие в случае больших величин спина системы.

Рассмотренный в работе [45] метод, основанный на использовании комбинированных ФГ, будет обобщен для квазидвумерного АФМТР в Гл. 4.

Таким образом, приведенные выше работы [1, 42, 43, 45] свидетельствуют о применимости используемых методов для описания влияния анизотропии, фрустрации и размерности системы на структуру основного состояния, параметры порядка и спектр возбуждения. Кроме того, эти работы демонстрируют теоретический интерес к исследованию моделей, обладающих совокупностью этих квантовых механизмов.

1.2. Обзор экспериментальных работ

По соединениям с треугольной структурой имеется множество публикаций. В данном подразделе рассмотрены экспериментальные работы по соединениям, наиболее близким к двумерной и квазидвумерной треугольной решётке и обладающим схожими свойствами с объектами диссертации. К таким свойствам можно отнести, например, структуру основного состояния или существование «квази-плато намагниченности». Кроме того представлены основные методы определения этих свойств.

Одним из таких соединений является $RbFe(MoO_4)_2$. Особенностью данного квазидвумерного соединения является наличие ОА типа «лёгкая плоскость» и слабого антиферромагнитного межплоскостного обмена. В работах [12–15] авторы исследовали свойства $RbFe(MoO_4)_2$ с магнитоактивным ионом Fe , имеющим величину спина $S = \frac{5}{2}$. В статье [13] были получены графики зависимости: намагниченности, магнитной восприимчивости и резонансных частот от внешнего магнитного поля, приложенного в плоскости треугольного слоя. Важной особенностью полученных результатов является существование «полки намагниченности» в окрестности значения одной тре-

ти от намагниченности насыщения. Обнаружено, что в диапазоне магнитных полей, в котором существует «полка намагниченности», магнитная восприимчивость значительно снижается. В связи с чем было выдвинуто предположение о присутствии в этой области коллинеарной антиферромагнитной *uid*-фазы, существующей за счёт квантовых и температурных флуктуаций. В промежутке магнитных полей, меньших одной трети поля насыщения, был обнаружен фазовый переход первого рода, обусловленный разворотом спинов соседних слоёв в АФМ фазу. Кроме того, в работе успешно описан график зависимости резонансных частот от внешнего магнитного поля при помощи классической модели двумерного АФМТР. В работах [12, 15] авторы дополнительно получили графики зависимости удельной теплоёмкости и намагниченности от внешнего магнитного поля направленного 1) в плоскости треугольной решётки; 2) вдоль «трудной оси» (перпендикулярно треугольным слоям). Из представленных результатов были определены нижняя граница коллинеарной антиферромагнитной *uid*-фазы как точка, в которой образуется пик удельной теплоёмкости, и верхняя граница, как точка, в которой происходит расщепление спектра. Численные расчёты двумерной ХУ-модели хорошо согласовались с экспериментальными данными при низких температурах. Ещё одним важным результатом было построение фазовой диаграммы для случая, когда магнитное поле направлено вдоль «трудной оси». В данном случае фазовая диаграмма имела всего две фазы: парамагнитную и зонтичную. В работе [14] была предпринята попытка экспериментального доказательства флуктуационной природы образования «плато намагниченности» в $RbFe(MoO_4)_2$. При облучении образца атомами алюминия «полка намагниченности» при низких температурах исчезала. Это было продемонстрировано на графиках производной намагниченности по магнитному полю, направленному в плоскости треугольных слоёв $\delta M/\delta H$. При увеличении легирования уменьшался спад восприимчивости, характеризующий образование коллинеарной антиферромагнитной *uid*-фазы. Однако с увеличением температуры

графики частично восстанавливались. Последнее обстоятельство означает, что природа существования «плато намагниченности» флуктуационная.

К квазидвумерным АФМТР относят соединения $Na_2BaT(PO_4)_2$ ($T = Co, Ni, Mn$), в которых магнитные ионы T -группы образуют друг под другом слои с треугольной решёткой и антиферромагнитным обменным взаимодействием. В этих соединениях магнитные ионы имеют октаэдрическое кристаллическое окружение и точку инверсии, поэтому в них отсутствует взаимодействие Дзялошинского-Мория. В работах [16, 17] исследовалось соединение $Na_2BaCo(PO_4)_2$, в котором магнитный ион Co обладает эффективной величиной спина $S = \frac{1}{2}$. Несмотря на это в соединении существует выбранное направление (**c**), перпендикулярное плоскости слоя, вдоль которого имеется ОА типа «лёгкая ось» или анизотропия обмена (см. [16]):

$$H_{ij} = \sum_{\alpha, \beta} J^{\alpha\beta} S_i^{\alpha} S_j^{\beta}$$

где

$$J^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} J_{xy} + 2J_{PD} \cos \phi & -2J_{PD} \sin \phi & -J_{\Gamma} \sin \phi \\ -2J_{PD} \sin \phi & J_{xy} - 2J_{PD} \cos \phi & J_{\Gamma} \cos \phi \\ -J_{\Gamma} \sin \phi & J_{\Gamma} \cos \phi & J_z \end{pmatrix}.$$

Здесь система координат была выбрана так, чтобы кристаллографическая ось (**c**) совпадала с осью координат z и $\phi = [0, \frac{2\pi}{3}, -\frac{2\pi}{3}]$. J_{xy} , J_{PD} , J_{Γ} - симметричные и псевдодипольные обменные связи. Авторы измерили и сопоставили с расчётами в рамках анизотропии обмена такие величины как: удельная теплоёмкость, магнитная восприимчивость и намагниченность. Одним из важных результатов является обнаружение «полки намагниченности», находящейся около одной трети поля насыщения, ранее предсказанной Чубуковым-Голосовым [1]. Помимо этого была получена фазовая диаграмма в координатах температура - магнитное поле, в которой реализуются четыре фазы. Однако было высказано предположение о возможности существования дополнительных фаз основного состояния. В работе [18] исследовано соединение

$Na_2BaNi(PO_4)_2$, в котором магнитный ион Ni обладает эффективной величиной спина $S = 1$. Аналогично соединению $Na_2BaCo(PO_4)_2$ в нем присутствует небольшое искажение октаэдрического окружения, вытянутого вдоль оси (с). Были получены графики зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля, направленного отдельно вдоль каждой из кристаллографических осей при конечной температуре $T = 2$ К, графики зависимости прямой и обратной восприимчивости от температуры при внешнем магнитном поле, приложенном вдоль оси (с), $B = 0.1$ Т. Построены графики зависимости удельной теплоёмкости от температуры для разных значений магнитного поля. Приведена фазовая диаграмма в координатах температура - магнитное поле, которая имеет упрощённый вид фазовой диаграммы $Na_2BaCo(PO_4)_2$. Несмотря на существование анизотропии обмена, графики зависимости намагниченности от магнитного поля, взятые по трём направлениям кристаллографических осей оказались практически идентичны. В связи с чем, авторы предположили возможность упрощённой записи гамильтониана,

$$H = H_{TL} + H_c,$$

разделённого на симметричный гамильтониан межплоскостного обмена H_c и гамильтониан двумерного АФМТР с ОА типа «лёгкая плоскость» H_{TL} . В СВП были рассчитаны зависимости параметров порядка и намагниченности от внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси (с). Основным результатом расчёта этих зависимостей стало доказательство существования нематической фазы. С теоретической точки зрения важным результатом было описание свойств $Na_2BaNi(PO_4)_2$ с помощью квазидвумерного гамильтониана. Для соединения $Na_2BaMn(PO_4)_2$ с магнитным ионом Mn , обладающим эффективной величиной спина $S = \frac{5}{2}$, в работе [19] были построены графики зависимости намагниченности и удельной теплоёмкости от внешнего магнитного поля, из которых, аналогично предыдущей работе, следовала незначительность внутривоскостной обменной анизотро-

пии. На фазовой диаграмме в координатах температура - магнитное поле реализовались три фазы: Y -фаза, коллинеарная антиферромагнитная *uid*-фаза и парамагнитная фаза. Магнитные моменты подрешёток в первых двух фазах расположены в плоскости перпендикулярной слоям магнитных ионов. Несмотря на это, в результате исследования был сделан вывод о пренебрежимо малом значении межплоскостного обмена, что в свою очередь говорит о возможности рассмотрения данного соединения как двумерного АФМТР с ОА типа «лёгкая плоскость».

Соединение $Ba_3CoSb_2O_9$ является высокосимметричным квазидвумерным АФМТР с магнитоактивным ионом Co^{2+} , обладающим эффективной величиной спина $S = \frac{1}{2}$, с антиферромагнитным обменным взаимодействием. Высокосимметричность заключается в отсутствии выделенного направления, вдоль которого октаэдры Co^{2+} были бы вытянуты. Это соединение представляет для нас интерес, поскольку в нём между октаэдрами Co также расположен один слой Ba и два октааэдра Sb_2O_9 , откуда следует, что межслойный обмен значительно слабее внутрислойного обмена. Соединение $Ba_3CoSb_2O_9$ исследовалось в работах [2–6]. В статье [2] были построены графики зависимости намагниченности и магнитной восприимчивости от внешнего магнитного поля и температуры, а также график зависимости удельной теплоёмкости от температуры, благодаря которым было обнаружено подобие «плато намагниченности», находящееся около одной трети поля насыщения. Несмотря на линейный рост намагниченности авторы предположили существование в нем коллинеарной антиферромагнитной *uid*-фазы. Это предположение обосновывалось возникновением пика удельной теплоёмкости на границе этого промежутка полей, что, в свою очередь, аналогично ситуации в соединении $RbFe(MoO_4)_2$ сигнализирует о фазовом переходе в коллинеарную антиферромагнитную *uid*-фазу. Важным выводом работы [2] являлось описание данного соединения с помощью двумерной XXZ -модели

с гамильтонианом:

$$H_{ex} = \sum_{\{ij\}} [J_{\perp} \{s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y\} + J_{\parallel} s_i^z s_j^z].$$

Воспользовавшись двумя разными методами расчёта, авторы получили теоретические кривые намагниченности, согласующиеся с экспериментальными данными. Это подтвердило возможность описания соединения $Ba_3CoSb_2O_9$ как двумерного АФМТР. Также важным результатом было получение температуры Нееля, при которой соединение приобретало магнитное упорядочение $T_N = 3.8$ К. Однако при изучении спектральных свойств $Ba_3CoSb_2O_9$ методом неупругого рассеяния нейтронов в работе [3], были обнаружены значительные расхождения высокоэнергетических ветвей спектра с результатами СВП XXZ -модели. Существование этого несоответствия обосновывало невозможность теоретического описания данного соединения при помощи двумерной модели, поскольку несмотря на существенное отличие межслойного и внутрислойного обменных взаимодействий, вклад первого становится значительным в высокоэнергетическом случае. К такому же заключению пришли авторы работы [4], в которой, исследуя удельную теплоёмкость и теплопроводность, обнаружили дополнительные фазовые переходы. Авторами были составлены фазовые диаграммы для случаев, когда внешнее магнитное поле направлено в плоскости слоёв Co и перпендикулярно им. Также авторы предложили три способа улучшения теоретического описания: 1) включение спин-орбитального взаимодействия более высоких порядков; 2) рассмотрение следующих соседей в внутрислойном взаимодействии; 3) рассмотрение соединения в виде шестиподрешёточной системы. В работе [5] авторы получили фазовую диаграмму $Ba_3CoSb_2O_9$ и сравнили с результатами теоретических расчётов квазидвумерного АФМТР с гамильтонианом:

$$H = \sum_{\{ij\}} [J \{S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\} + J_2 S_i^z S_j^z] + J' \sum_{\{ij\}} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \mathbf{S}_i,$$

выполненных методом среднего поля кластера большого размера в сочета-

нии со схемой масштабирования. Полученные результаты подтвердили возможность использования данной модели для описания $Ba_3CoSb_2O_9$. Чуть позже в работе [6], используя метод тензорной сети для XYZ -модели, были получены высокоэнергетические ветви спектра, схожие с обсуждаемыми ранее [3]. Было установлено, что основной вклад в высокоэнергетическую ветвь вносят продольные флуктуации, а именно моды Хиггса. При этом не было дано объяснение появлению дополнительных фаз, представленных на фазовой диаграмме в работе [5].

Ещё одним соединением со свойствами двумерного квантового АФМТР является $CsYbSe_2$. Здесь магнитные ионы Yb^{3+} образуют треугольные слои, разделённые двумя слоями Se и одним слоем Cs . В работе [8] изучался $CsYbSe_2$ с эффективной величиной спина $S = \frac{1}{2}$. Были получены графики зависимости намагниченности от внешнего магнитного поля и графики спектра спиновых возбуждений, а также построена фазовая диаграмма в координатах температура - магнитное поле. Эти экспериментальные графики обладали сходством с аналогичными для двумерной модели Гейзенберга на треугольной решётке. Численные расчеты, в рамках гамильтониана XXZ -модели, показали хорошее согласование с экспериментальными результатами. Экспериментально полученное малое значение обмена между вторыми соседями позволило упростить модель, используемую для исследования соединения $CsYbSe_2$. В соединении $CsCeSe_2$ имеется аналогичная структура с $CsYbSe_2$. В нём вместо магнитного иона Yb^{3+} образуются треугольные слои Ce^{3+} с эффективной величиной спина $S = \frac{1}{2}$. Примечательно, что в отличие от соединения с Yb , в котором основное состояние ниже температуры Нееля имеет скошенную Y -фазу, в магнетике с Ce реализуется коллинеарная антиферромагнитная uud -фаза при упорядочении ниже $T_N = 0.35$. Это было определено из отсутствия безцелевых ветвей спектра в $CsCeSe_2$. Авторам в

статье [9] удалось подогнать параметры гамильтониана

$$H = \sum_{\{ij\}} S_i J_{ij} S_j - \mu_B g_{ab} \sum_i S_i^x,$$

где

$$J^{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} J + 2J_{\pm\pm} & 0 & 0 \\ 0 & J - 2J_{\pm\pm} & J_{z\pm} \\ 0 & J_{z\pm} & \Delta J \end{pmatrix}.$$

для описания экспериментально полученных графиков спектра. На основе нейтронного рассеяния в [8, 9] также исследовались влияние взаимодействия одномагнитного и многомагнитных возбуждений на спектр и его эволюцию в разных точках зоны Бриллюэна при изменении магнитного поля.

Такие же исследования были проведены для $CeCd_3As_3$ [11]. Как и в соединении $CsCeSe_2$ основное состояние в упорядоченном состоянии соответствует коллинеарной антиферромагнитной *uud*-фазе, поскольку в спектре отсутствовали безщелевые моды [9].

Таким образом, в приведённых нами экспериментальных работах обращает на себя внимание многообразие соединений, различных квантовых явлений и теоретических подходов к их описанию. Несмотря на всё это многообразие, общим для всех вышеперечисленных публикаций было обнаружение «плато намагниченности», теоретически предсказанное Чубуковым и Голосовым (см. Гл. 1.1.).

Основными результатами данной главы является ознакомление с теоретическими методами, используемыми в диссертационной работе, а также демонстрация соединений и методов их экспериментального исследования в рамках модели двумерного и квазидвумерного АФМТР.

Глава 2

Квантовый SU3F на треугольной решётке

2.1. Модель квантового SU3F

Кристаллическая структура трёхподрешёточного анизотропного SU3F на треугольной решётке представлена на Рис. 2.1. Здесь узлы, содержащие спины $S = 1$, выделены красным цветом. Эти узлы образуют подрешётку, которая далее будет обозначена символом L . Зелёные и синие узлы определяют спины $S = \frac{1}{2}$. Подрешётки, сформированные этими узлами, обозначены, как F - и G -подрешётки, соответственно. Периодичность каждой подрешётки определена базисными векторами $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$. ξ и ζ - вектора, соединяющие узлы из разных подрешёток.

Гамильтониан рассматриваемого трёхподрешёточного SU3F имеет вид:

$$H = H_A + H_{exch}, \quad (2.1)$$

где

$$H_A = D \sum_l (S_l^y)^2, \\ H_{exch} = J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_g + I \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_l + I \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \cdot \mathbf{S}_l. \quad (2.2)$$

В выражении (2.1), оператор H_A определяет энергию ОА в L -подрешётке с величиной спина $S = 1$ и положительным параметром ОА D . Индекс узлов, входящих в L -подрешётку, ниже обозначается с помощью l для соответствующих проекций спиновых операторов S_l^α ($\alpha = x, y, z$). Ось Oy направлена перпендикулярно к плоскости ферримагнетика. Соответственно, оси Ox и Oz находятся в плоскости ферримагнетика. Индексы узлов для других двух F -и G -подрешёток со величиной спина $S = \frac{1}{2}$ обозначаются с помощью f и g

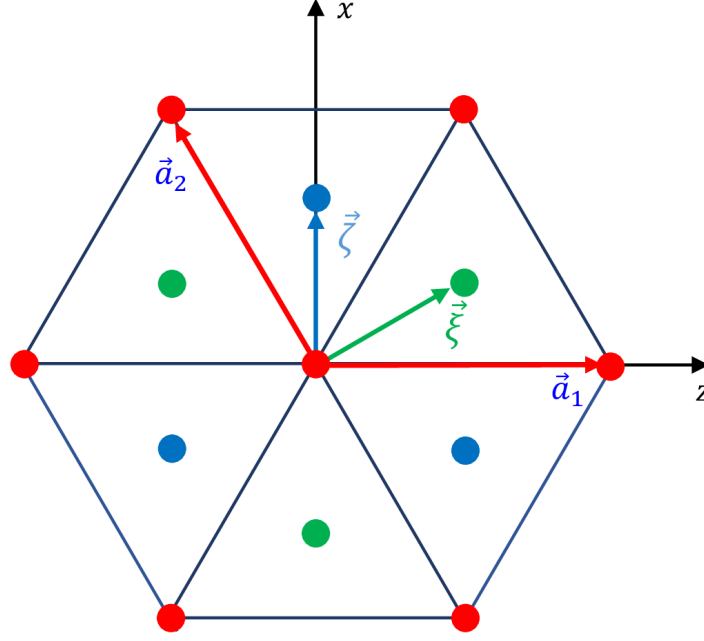


Рис. 2.1. Три треугольные подрешетки: L -подрешетка со спином $S = 1$ (красная), F - и G -подрешетки со спином $S = \frac{1}{2}$ (зеленая и синяя соответственно). Здесь $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ базисные вектора, и ξ , ζ - вектора, соединяющие узлы из разных подрешёток.

соответственно. Оператор энергии H_{exch} описывает обменное взаимодействие между подсистемой спинов-1 и двумя подсистемами спинов- $\frac{1}{2}$, а также обменное взаимодействие между двумя подсистемами спинов- $\frac{1}{2}$. Интенсивность этих антиферромагнитных взаимодействий определяется с помощью интегралов I и J соответственно. Угловые скобки под тремя символами сумм в (2.2) обозначают, что суммирование ведётся только по ближайшим узлам, и каждая пара узлов учитывается только один раз.

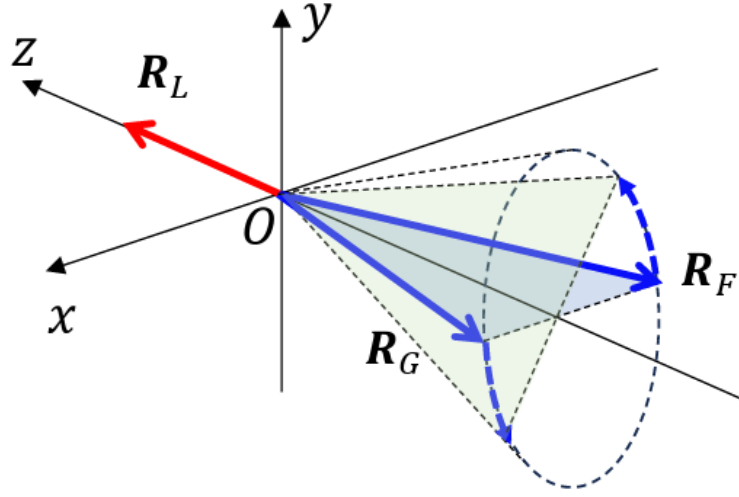


Рис. 2.2. Планарная магнитная структура SU3F. Все спины лежат в плоскости zOx , которая является «легкой плоскостью». Вращение плоскости векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ предположительно неблагоприятно из-за косвенного влияния ОА на спины в F - и G -подрешётках (смотри обсуждение в основном тексте).

2.2. Диагонализация одноионного гамильтониана. Метод унитарного преобразования в атомном представлении

Для разных подрешёток g -факторы Ланде различаются, и существование, например, точки компенсации для полного механического момента не гарантирует, что полный магнитный момент также обращается в ноль в этой точке [54]. Однако, впоследствии мы будем предполагать что все моменты имеют одинаковую, чисто спиновую (не орбитальную) природу, и поэтому g -факторы всех подрешёток равны между собой ($g = 2$). Это позволяет для удобства включить множитель $g\mu_B$ в определение $\mathbf{R} = -g\mu_B\langle\mathbf{S}\rangle$, связывающее магнитный $\mathbf{R}$ и спиновый $\langle\mathbf{S}\rangle$ моменты и определить равновесные вектора намагниченности в каждой подрешётке в единицах $g\mu_B$ как $\mathbf{R}_A = \langle\mathbf{S}_A\rangle$ ($A = L, F$ and G), принимая во внимание, что из-за знака минус истинное направление намагниченности противоположное. Последнее обстоятельство не существенно в отсутствии магнитного поля.

ОА типа «легкая плоскость» предполагает, что вектор намагниченности L -подрешётки $\mathbf{R}_L$ лежит в плоскости zOx (т.е. перпендикулярно оси ОА Oy). Мы выбрали направление Oz -оси вдоль вектора $\mathbf{R}_L$ (Рис. 2.2). В тоже время, из-за антиферромагнитного обменного взаимодействия между спинами всех трёх подрешёток магнитная структура должна быть планарной. Видно, что, по крайней мере, в приближении среднего поля энергия SU3F постоянна по отношению к вращению плоскости векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ вокруг Oz -оси, что показано на Рис. 2.2. Это означает, что вектора $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ не обязаны лежать в плоскости zOx . Тем не менее, мы предполагаем, что спины из F - и G -подрешёток косвенно могут чувствовать ОА через L -подсистему, из высоких порядков теории возмущений, и это заставит вектора $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ лежать в плоскости zOx . Однако в этом исследовании не будут учитываться поправки высшего порядка и будет рассматриваться выбранная конфигурация векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ как спонтанное нарушение вращательной симметрии. Этот момент будет существенным при обсуждении спектральных свойств SU3F в подразделе 2.4.

Для изучения основного состояния и энергии спектра SU3F сначала проведём $SU(2)$ -преобразование гамильтониана, которое широко применяется в теории неколлинеарных антиферромагнетиков и соответствует переходу к локальным осям координат. В нашем случае это достигнуто с помощью вращения исходной системы координат на угол $\theta(-\theta)$ вокруг оси Oy для ионов из G -(F -) подрешётки, в таком направлении, что новая ось $Oz''(Oz')$ ориентирована вдоль вектора равновесной намагниченности $\mathbf{R}_G(\mathbf{R}_F)$, как показано на Рис. 2.3. Вышесказанное, означает выполнение следующего $SU(2)$ -преобразования гамильтониана.

$$H \rightarrow H(\theta) = U_2(\theta) H U_2^\dagger(\theta) \quad (2.3)$$

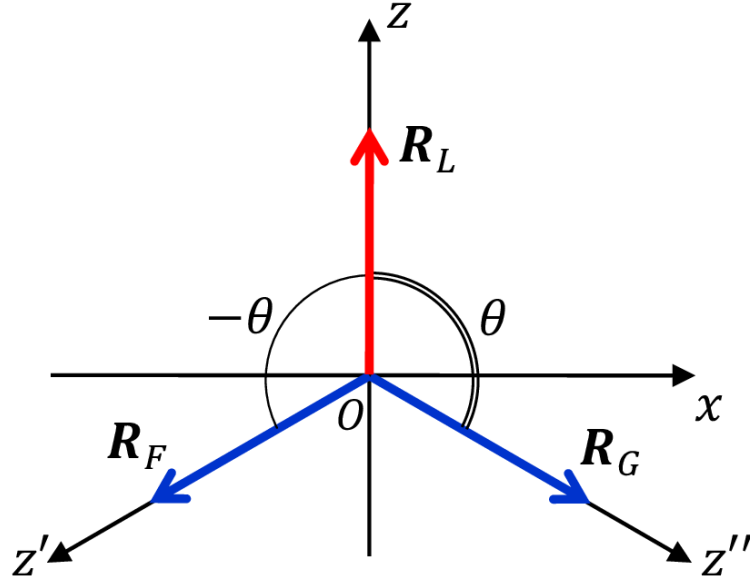


Рис. 2.3. Вращение локальных осей координат при унитарном преобразовании (2.3). В F - и G -подрешётках с $S = \frac{1}{2}$ оси Oz поворачиваются на углы $-\theta$ и θ и занимают новые положения Oz' и Oz'' вдоль равновесных намагниченностей подрешёток $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, соответственно. Ось Oz в L -подрешётке с $S = 1$ инвариантна относительно преобразования (2.3).

где унитарный оператор имеет вид:

$$U_2(\theta) = \prod_{f \in F} \exp(-i\theta S_f^y) \prod_{g \in G} \exp(i\theta S_g^y). \quad (2.4)$$

Выразим спиновые операторы одной системы координат, $Oxyz$, через спиновые операторы другой системы координат, $Ox'y'z'$, полученные вращением первой вокруг оси Oy (см. рис. 2.4). Для определённости рассмотрим спиновый оператор S^z , который определяет проекцию спина вдоль оси Oz в первой системе координат. Вращая оператор S^z вокруг оси Oy на угол θ , получим спиновый оператор $S^{z'}$, описывающий проекцию спина вдоль оси Oz' . Математически это вращение соответствует унитарному преобразованию: $S^{z'} = e^{-i\theta S^y} S^z e^{i\theta S^y}$ (см. например, [55]). Учитывая, что $S^{y'} \equiv S^y$, можно

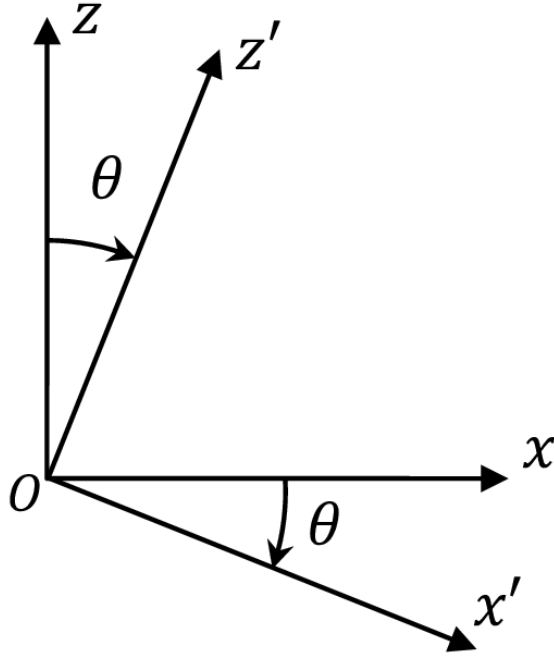


Рис. 2.4. Две системы координат, связанные друг с другом поворотом вокруг оси Oy на угол θ . Отметим, что оси Oy и Oy' совпадают.

переписать:

$$\begin{aligned} S^z &= e^{i\theta S^y} S^{z'} e^{-i\theta S^y} = e^{i\theta S^{y'}} S^{z'} e^{-i\theta S^{y'}} \\ &= S^{z'} \cos \theta - S^{x'} \sin \theta, \end{aligned}$$

Аналогично (2.5), используя $H(\theta)$, можно записать законы преобразования спиновых операторов.

$$\begin{aligned} S_g^x &\rightarrow S_g^x \cos \theta + S_g^z \sin \theta, & S_g^y &\rightarrow S_g^y, \\ S_g^z &\rightarrow S_g^z \cos \theta - S_g^x \sin \theta, \end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned} S_f^x &\rightarrow S_f^x \cos \theta - S_f^z \sin \theta, & S_f^y &\rightarrow S_f^y, \\ S_f^z &\rightarrow S_f^z \cos \theta + S_f^x \sin \theta. \end{aligned} \tag{2.6}$$

В результате получим:

$$\begin{aligned}
H_{exch}(\theta) = & \\
= J \sum_{\{fg\}} & \left[\sin 2\theta (S_f^x S_g^z - S_f^z S_g^x) + S_f^y S_g^y + \cos 2\theta (S_f^x S_g^x + S_f^z S_g^z) \right] \\
+ I \sum_{\{fl\}} & \left[\sin \theta (S_f^x S_l^z - S_f^z S_l^x) + S_f^y S_l^y + \cos \theta (S_f^x S_l^x + S_f^z S_l^z) \right] \\
+ I \sum_{\{gl\}} & \left[\sin \theta (S_g^z S_l^x - S_g^x S_l^z) + S_g^y S_l^y + \cos \theta (S_g^x S_l^x + S_g^z S_l^z) \right]. \quad (2.7)
\end{aligned}$$

Оператор энергии ОА остаётся неизменным $H_A(\theta) = H_A$.

Оператор H_A является квадратичным в спиновом представлении, описывает квадрупольные эффекты. Соответственно, H_A инициирует участие квадрупольных степеней свободы в формировании статических и динамических свойств SU3F. Во многих работах обсуждалось, что для одно и двух-подрешёточных магнитных систем проявление квантовых эффектов обусловлено существованием H_A [43, 44, 53, 56–58]. Далее с помощью приближения среднего поля будет рассмотрено влияние квантовых эффектов на структуру основного состояния трёхподрешёточного анизотропного SU3F.

Прежде всего, отметим, что, согласно работе [53], при наличии ОА, учитываемой оператором H_A , основное состояние магнитного иона в L -подрешётке стоит искать в виде (1.1). Отметим, что из-за немалой ОА состояние $|0\rangle$ выпадает из вариационной функции $|\psi\rangle$ [53]. Тогда, учитывая (2.7), энергия SU3F элементарной ячейки в приближении среднего поля имеет вид:

$$E(\theta, \alpha) = J_0 S^2 \cos 2\theta + 2I_0 S \cos \theta \cos 2\alpha + D (1 - \sin 2\alpha) / 2, \quad (2.8)$$

где $J_0 = 3J$, $I_0 = 3I$ и $S = \frac{1}{2}$. В выражении (2.8), первые два члена описывают вклад обменного взаимодействия между спинами из разных подрешёток, а последний член - вклад ОА. При записи (2.8), также учитывалось среднее поле равновесное значение намагниченности L -подрешётки

$$R_L^{MF} = \langle \psi | S_l^z | \psi \rangle = \cos 2\alpha. \quad (2.9)$$

Это значение может сильно отличаться от номинального из-за квантовых эффектов.

Среднее значение оператора квадрупольного момента [59]

$$\hat{Q}_{yy} = 3(S_l^y)^2 - 2 \quad (2.10)$$

исходя из (1.1)

$$Q^{MF} = \langle \psi | \hat{Q}_{yy} | \psi \rangle = 3(1 - \sin 2\alpha)/2 - 2 \quad (2.11)$$

зависит от параметра α . Это означает, что в SU3F квадрупольный момент становится дополнительной (по отношению к спину) степенью свободы, влияющей как на статические свойства системы, так и на её динамические характеристики.

При $I, J > 0$ в изотропном пределе ($D = 0$) из выражения (2.8) следует, что:

$$\begin{aligned} \alpha = 0, \quad \theta = \pi, \quad \text{если } I_0 \geq 2J_0S, \\ \alpha = 0, \quad \cos \theta = -\frac{I_0}{2J_0S}, \quad \text{если } I_0 \leq 2J_0S. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Для $D > 0$, существует критическое значение

$$D_c = 2I_0^2/J_0 \quad (2.13)$$

такое, что при $D < D_c$ равновесные значения параметров α и θ определяются выражением

$$\begin{aligned} \sin 2\alpha = D/D_c, \quad \cos \theta = -(I_0/2J_0S) \cdot R_L^{MF}, \\ R_L^{MF} = \sqrt{1 - (D/D_c)^2}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Если $D > D_c$, тогда

$$\alpha = \pi/4, \quad \theta = \pi/2, \quad R_L = 0. \quad (2.15)$$

Такое решение соответствует конфигурации, в которой спины из F - и G -подрешёток антиферромагнитно упорядочены относительно друг друга, в то же время ионы из L -подрешётки находятся в «немагнитном» состоянии, но с $Q^{MF} = -2$, т.е. в КАФМ.

Важно отметить, что квантовые эффекты в SU3F могут проявляться, когда $D \ll I_0 \ll J_0$, т.е. даже при слабой ОА. Это следует из (2.13), из которого видно, что для $I_0 \ll J_0$, значение D_c может быть существенно меньше, чем I_0 . Это обстоятельство выделяет SU3F в особый класс квантовых магнетиков, в которых квантовые эффекты могут проявляться не только при большой ОА.

Следующим шагом к расчёту энергии спектра в SU3F является выражение спиновых операторов F - и G -подрешёток через бозе операторы в СВП. Поскольку спиновая динамика в F - и G -подсистемах включает в себя только дипольные степени свободы, преобразование Гольштейна-Примакова может быть использовано для операторов S_f^α и S_g^α ($\alpha = \pm, z$):

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sqrt{2S - a_f^+ a_f} \ a_f, \quad S_f^z = S - a_f^+ a_f, \\ S_g^+ &= \sqrt{2S - b_g^+ b_g} \ b_g, \quad S_g^z = S - b_g^+ b_g. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Здесь бозе операторы $a_f(a_f^+)$ и $b_g(b_g^+)$ описывают переходы между состояниями $|\uparrow\rangle \leftrightarrow |\downarrow'\rangle$ и $|\uparrow''\rangle \leftrightarrow |\downarrow''\rangle$ с различными спиновыми проекциями вдоль новых осей намагниченности Oz' и Oz'' , соответственно (см. Рис. 2.5а,б).

В терминах новых переменных, оператор $H(\theta)$ в квадратичном прибли-

жении по операторам a_f и b_g имеет вид:

$$\begin{aligned}
H(\theta) = & \sum_l H_0(l) + I \sum_{\{fl\}} \left\{ \cos \theta \left(\sqrt{\frac{S}{2}} (a_f + a_f^+) S_l^x - a_f^+ a_f S_l^z \right) \right. \\
& + \sin \theta \left(\sqrt{\frac{S}{2}} (a_f + a_f^+) S_l^z + a_f^+ a_f S_l^x \right) + \frac{1}{i} \sqrt{\frac{S}{2}} (a_f - a_f^+) S_l^y \left. \right\} \\
& + I \sum_{\{gl\}} \left\{ \cos \theta \left(\sqrt{\frac{S}{2}} (b_g + b_g^+) S_l^x - b_g^+ b_g S_l^z \right) \right. \\
& - \sin \theta \left(\sqrt{\frac{S}{2}} (b_g + b_g^+) S_l^z + b_g^+ b_g S_l^x \right) + \frac{1}{i} \sqrt{\frac{S}{2}} (b_g - b_g^+) S_l^y \left. \right\} \\
& + J \sum_{\{fg\}} \left\{ \cos 2\theta \left(S^2 - S a_f^+ a_f - S b_g^+ b_g + \frac{S}{2} (a_f + a_f^+) (b_g + b_g^+) \right) \right. \\
& \left. - \frac{S}{2} (a_f - a_f^+) (b_g - b_g^+) + S \sqrt{\frac{S}{2}} \sin 2\theta (a_f + a_f^+ - b_g - b_g^+) \right\}, \quad (2.17)
\end{aligned}$$

где одноузельный оператор

$$H_0(l) = D (S_l^y)^2 + \bar{H} S_l^z \quad (2.18)$$

из L -подрешётки определяет неэквидистантные уровни энергии l -ионов. Эффективное поле

$$\bar{H} = 2I_0 S \cos \theta, \quad (2.19)$$

как отмечено выше, может оказаться малым по сравнению с энергией ОА, и тогда недиагональность $H_0(l)$ становится существенным фактором. Чтобы учесть это обстоятельство, воспользуемся представлением операторов Хаббарда для спиновых операторов S_l^α ($\alpha = \pm, z$).

$$\begin{aligned}
S_l^+ &= \sqrt{2} \left(X_l^{1,0} + X_l^{0,-1} \right), \quad S_l^- = (S_l^+)^+, \\
S_l^z &= X_l^{1,1} - X_l^{-1,-1}, \quad (2.20)
\end{aligned}$$

где $X_l^{n,m} = |n, l\rangle \langle m, l|$, и кет вектора - собственные вектора оператора S_l^z : $S_l^z |n, l\rangle = n |n, l\rangle$ ($n = -1, 0, +1$).

В представлении операторов Хаббарда, имеем:

$$H_0(l) = \left(\frac{D}{2} - \bar{H}\right) X_l^{-1,-1} + DX_l^{00} + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}\right) X_l^{1,1} - \frac{D}{2} \left(X_l^{1,-1} + X_l^{-1,1}\right). \quad (2.21)$$

Последний член в (2.21) включает в динамику квадрупольные степени свободы.

Для диагонализации оператора $H_0(l)$ используется подход, предложенный в работе [42], кратко описанный в Гл. 1. Поскольку в нашем случае происходит запутывание состояний $|+1\rangle, |-1\rangle$, то из (1.3), запишем унитарный оператор:

$$U_{1,-1}(\alpha, l) = \exp\{\alpha \Gamma_{1,-1}(l)\}, \quad (2.22)$$

где генератор $\Gamma_{1,-1}(l) = X_l^{1,-1} - X_l^{-1,1}$, также для определённости будем считать α реальным параметром преобразования. Аналогично подходу из Гл. 1 выразим старые операторы Хаббарда X_l^{nm} ($n, m = -1, 0, +1$) через новые.

$$X_l^{nm} = U_{\tilde{1},-\tilde{1}}(\alpha, l) X_l^{\tilde{n}\tilde{m}} U_{\tilde{1},-\tilde{1}}^+(\alpha, l). \quad (2.23)$$

При записи этого выражения учитывалось, что $U_{\tilde{1},-\tilde{1}}(\alpha, l) = U_{1,-1}(\alpha, l)$. Используя выражения для новых операторов Хаббарда (1.6), выражение для спиновых операторов (2.20) и учитывая, что в нашем случае $n = 1$ и $m = -1$, можно легко получить выражение спиновых операторов через операторы Хаббарда,

$$\begin{aligned} S^x(\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos \alpha + \sin \alpha) \left(X^{\tilde{1},\tilde{0}} + X^{\tilde{0},\tilde{1}}\right) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos \alpha - \sin \alpha) \left(X^{-\tilde{1},\tilde{0}} + X^{\tilde{0},-\tilde{1}}\right), \\ S^y(\alpha) &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\sin \alpha - \cos \alpha) \left(X^{\tilde{1},\tilde{0}} - X^{\tilde{0},\tilde{1}}\right) \\ &\quad + \frac{i}{\sqrt{2}}(\cos \alpha + \sin \alpha) \left(X^{-\tilde{1},\tilde{0}} - X^{\tilde{0},-\tilde{1}}\right), \\ S^z(\alpha) &= \cos 2\alpha \left(X^{\tilde{1},\tilde{1}} - X^{-\tilde{1},-\tilde{1}}\right) - \sin 2\alpha \left(X^{\tilde{1},-\tilde{1}} + X^{-\tilde{1},\tilde{1}}\right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Новые операторы Хаббарда $X_l^{\tilde{n}\tilde{m}}$ определяются с помощью новых собственных состояний $X_l^{\tilde{n}\tilde{m}} = |\tilde{n}, l\rangle\langle\tilde{m}, l|$, которые получаются действием унитарного оператора на изначальные собственные состояния,

$$|\tilde{n}, l\rangle = U_{1,-1}(-\alpha, l)|n, l\rangle. \quad (2.25)$$

Распишем выражение для новых трёх основных состояний.

$$\begin{aligned} |+\tilde{1}\rangle &= \cos\alpha | +1\rangle + \sin\alpha | -1\rangle, \\ |\tilde{0}\rangle &= |0\rangle, \\ |-\tilde{1}\rangle &= \cos\alpha | -1\rangle - \sin\alpha | +1\rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Можно видеть, что состояние $|+\tilde{1}\rangle$ совпадает с $|\psi\rangle$ из выражения (1.1) (см. Гл. 1), которое было предположено в работе [53].

Заменяя в выражении (2.23) оператор Хаббарда на гамильтониан из (2.17), можно формально получить $SU(3)$ -преобразования (см. работу [42]):

$$H(\theta) \rightarrow H(\theta, \alpha) = U_3(\alpha) H(\theta) U_3^\dagger(\alpha), \quad (2.27)$$

с обобщённым унитарным оператором:

$$U_3(\alpha) = \prod_{l \in L} U_{1,-1}(\alpha, l). \quad (2.28)$$

Подставляя (2.21) в это выражение и зануляя коэффициенты при недиагональных операторах Хаббарда, получим следующую диагональную форму для преобразованного одноузельного гамильтониана:

$$H_0(l, \alpha) = \varepsilon_{-1} X_l^{-\tilde{1}, -\tilde{1}} + \varepsilon_0 X_l^{\tilde{0}\tilde{0}} + \varepsilon_1 X_l^{\tilde{1}\tilde{1}}, \quad (2.29)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_{-1} &= \frac{D}{2}(1 + \sin 2\alpha) + |\bar{H}| \cos 2\alpha, \\ \varepsilon_0 &= D, \\ \varepsilon_1 &= \frac{D}{2}(1 - \sin 2\alpha) - |\bar{H}| \cos 2\alpha. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Уравнение для определения угла α оказывается тривиальным: $D \cos 2\alpha = -2\bar{H} \sin 2\alpha$, и выражается через тригонометрические функции следующим образом:

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{|\bar{H}|}{\nu}}, \quad \sin 2\alpha = \frac{D}{\nu}, \\ \cos \alpha &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{|\bar{H}|}{\nu}}, \quad \cos 2\alpha = \frac{2|\bar{H}|}{\nu}, \\ \nu &= \sqrt{D^2 + 4\bar{H}^2}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Учитывая эти выражения, собственные значения (2.30) гамильтониана $H_0(l, \alpha)$ можно представить в виде:

$$\varepsilon_{-1} = \frac{D + \nu}{2}, \quad \varepsilon_0 = D, \quad \varepsilon_1 = \frac{D - \nu}{2}. \quad (2.32)$$

Когда $\bar{H} = 0$, энергия $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_{-1} = \varepsilon_0 = D$.

Выражение для преобразованного полного гамильтониана (2.27), полученное в результате подстановки оператора $H_0(l)$ в уравнения (2.23), не представлено из-за его громоздкости.

Одноузельный гамильтониан (2.29) описывает трёхуровневую систему в терминах новых операторов Хаббарда (Рис. 2.5с). При низких температурах удобно воспользоваться описанием гамильтониана с помощью бозе операторов а не операторами Хаббарда, из-за сложных коммутационных соотношений между последними. Следуя этой цели, согласно работам [43, 44, 60] были введены два сорта бозонов (c и d). Создание бозонов на узле l с помощью операторов c_l^+ или d_l^+ подразумевает переход трёхуровневой системы из основного состояния $|+\tilde{1}\rangle$ в возбуждённое $|\tilde{0}\rangle = c_l^+|+\tilde{1}\rangle$ или $|-\tilde{1}\rangle = d_l^+|+\tilde{1}\rangle$, соответственно. Состояния с большим числом бозонов отсекаются с помощью метрического оператора как нефизичные.

Новые операторы Хаббарда согласно работам [43, 60] выражаются через бозе операторы по формулам (1.2) (см. Гл. 1).

Используя выражения (1.2) вместе с уравнениями (2.24), связывающими

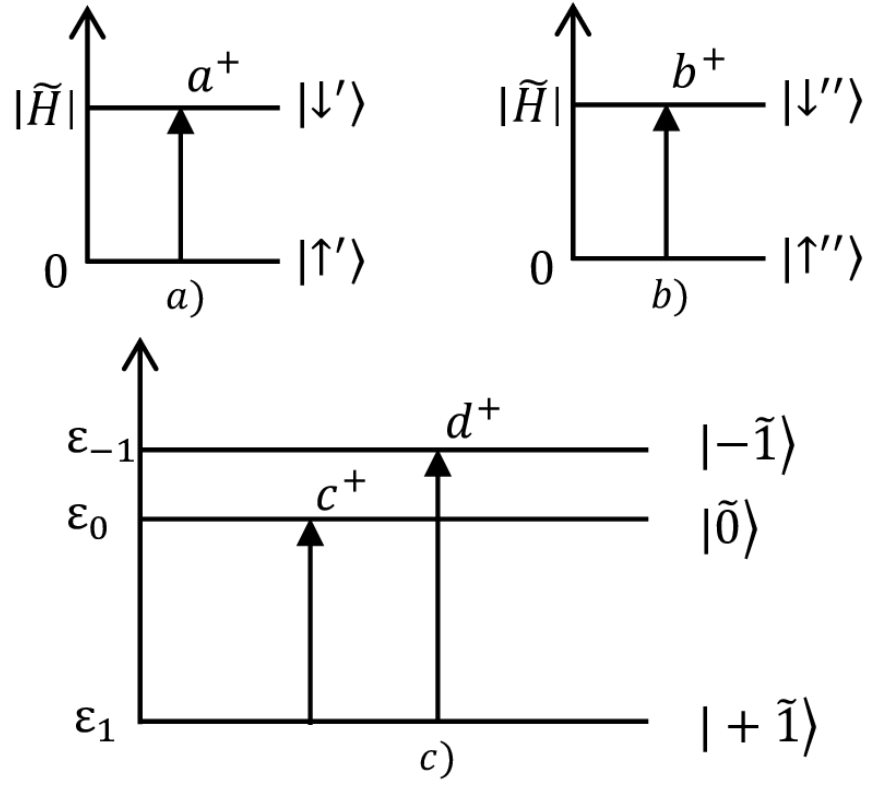


Рис. 2.5. Энергетическая диаграмма, описывающая действие бозе операторов: а) оператор a_f^+ в F -подрешётке; б) оператор b_f^+ в G -подрешётке; в) операторы c_f^+ и d_f^+ в трёхуровневой системе L -подрешётки, описываемой гамильтонианом $H_0(l, \alpha)$. Определения всех используемых состояний и энергий даны после уравнения (2.16) и в выражениях (2.26), (2.32), (2.34).

спиновые операторы с новыми операторами Хаббарда преобразованный га-

мильтониан (2.27) записывается:

$$\begin{aligned}
H = & E_G + E_c \sum_l c_l^+ c_l + E_d \sum_l d_l^+ d_l - \tilde{H} \sum_f a_f^+ a_f - \tilde{H} \sum_g b_g^+ b_g \\
& + \frac{JS}{2} \sum_{\{fg\}} \left(\cos 2\theta (a_f + a_f^+)(b_g + b_g^+) - (a_f - a_f^+)(b_g - b_g^+) \right) \\
& + I \sqrt{\frac{S}{2}} \sum_{\{fl\}} \left(\phi_+ \cos \theta (a_f + a_f^+)(c_l + c_l^+) - \phi_- (a_f - a_f^+)(c_l - c_l^+) \right. \\
& \quad \left. - \sin \theta \sin 2\alpha (a_f + a_f^+)(d_l + d_l^+) \right) \\
& + I \sqrt{\frac{S}{2}} \sum_{\{gl\}} \left(\phi_+ \cos \theta (b_g + b_g^+)(c_l + c_l^+) - \phi_- (b_g - b_g^+)(c_l - c_l^+) \right. \\
& \quad \left. + \sin \theta \sin 2\alpha (b_g + b_g^+)(d_l + d_l^+) \right), \quad (2.33)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
E_c = \varepsilon_0 - \varepsilon_1 &= \frac{D + \nu}{2}, \quad E_d = \varepsilon_{-1} - \varepsilon_1 = \nu, \\
\tilde{H} &= J_0 S \cos 2\theta + I_0 \cos \theta \cos 2\alpha, \\
\phi_{\pm} &= (\cos \alpha \pm \sin \alpha) / \sqrt{2}, \quad E_G = N(\varepsilon_1 + J_0 S^2 \cos 2\theta), \quad (2.34)
\end{aligned}$$

и N - число узлов в подрешётке.

При записи выражения (2.33) оставлены только члены не превышающие второй степени по бозе операторам. Кроме того коэффициенты при членах первой степени зануляются. Отсюда можно получить уравнение на угол θ :

$$\cos \theta = -I_0 \cos 2\alpha / 2J_0 S, \quad (2.35)$$

которое согласуется с ранее приведенными выражениями (2.9) и (2.14). Уравнение (2.35) вместе с выражением (2.31) для $\cos 2\alpha$ и выражение (2.19) для $\tilde{H}$ образуют систему с решениями,

$$\cos 2\alpha = \sqrt{1 - \left(\frac{D}{D_c} \right)^2}, \quad (2.36)$$

$$\cos \theta = -\frac{I_0}{2J_0 S} \sqrt{1 - \left(\frac{D}{D_c} \right)^2}, \quad (2.37)$$

совпадающими с решением (2.14), полученным ранее в приближении среднего поля. Значение D_c (см. уравнение (2.13)) определяет верхнюю границу параметра D для которого существуют нетривиальные решения на углы α и θ , соответствующих скошенной ферромагнитной Y -фазе. При $D > D_c$ система переходит в КАФМ (см. ранее), в которой углы остаются постоянными и равными $\alpha = \pi/4$, $\theta = \pi/2$.

В квазиимпульсном представлении гамильтониан (2.33) принимает компактный вид.

$$\begin{aligned}
H = \sum_k \Big\{ & E_c c_k^+ c_k + E_d d_k^+ d_k - \tilde{H} a_k^+ a_k - \tilde{H} b_k^+ b_k \\
& + I_- [\gamma_k a_k c_{-k} + \gamma_k^* a_k^+ c_{-k}^+ + \gamma_k^* b_k c_{-k} + \gamma_k b_k^+ c_{-k}^+] \\
& + I_+ [\gamma_k^* a_k^+ c_k + \gamma_k c_k^+ a_k + \gamma_k b_k^+ c_k + \gamma_k^* c_k^+ b_k] \\
& + I_d [\gamma_k^* b_k d_{-k} + \gamma_k b_k^+ d_{-k}^+ - \gamma_k a_k d_{-k} - \gamma_k^* a_k^+ d_{-k}^+ \\
& + \gamma_k b_k^+ d_k + \gamma_k^* d_k^+ b_k - \gamma_k^* a_k^+ d_k - \gamma_k d_k^+ a_k] \\
& + J_- [\gamma_k^* a_k b_{-k} + \gamma_k a_k^+ b_{-k}^+] + J_+ [\gamma_k a_k^+ b_k + \gamma_k^* b_k^+ a_k] \Big\} + E_G, \quad (2.38)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
I_{\pm} &= I_0 \sqrt{\frac{S}{2}} (\phi_+ \cos \theta \pm \phi_-), \quad I_d = I_0 \sqrt{\frac{S}{2}} \sin \theta \sin 2\alpha, \\
J_{\pm} &= J_0 \frac{S}{2} (\cos 2\theta \pm 1), \\
\gamma_k &= \frac{1}{3} \sum_{\delta} e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos \frac{k_z}{2} e^{i \frac{k_x}{2\sqrt{3}}} + e^{-i \frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right).
\end{aligned}$$

В последнем выражении вектор δ пробегает три значения $\{\xi, -\zeta, \zeta - \xi\}$ (Рис. 2.1). Эти три вектора соединяют каждый узел $L(F(G))$ -подрешётки с тремя ближайшими узлами $F(G(L))$ -подрешётки. Аналогично, три вектора $-\delta$ соединяют каждый узел $L(F(G))$ -подрешётки с тремя ближайшими узлами $G(L(F))$ -подрешётки.

Для расчёта спектра коллективных спиновых возбуждений введём мат-

ричную запаздывающую ФГ $\langle\langle \mathbf{X}_k^\dagger | \mathbf{X}_k \rangle\rangle_\omega$, где

$$\mathbf{X}_k = (a_k^+, b_k^+, c_k^+, d_k^+, a_{-k}, b_{-k}, c_{-k}, d_{-k}). \quad (2.39)$$

Записывая уравнение движения для этой функции и требуя существования нетривиальных решений получим дисперсионное уравнение.

$$\begin{vmatrix} \omega - \mathbf{A}_k & -\mathbf{B}_k \\ \mathbf{B}_k & \omega + \mathbf{A}_k \end{vmatrix} = 0, \quad (2.40)$$

где

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} -\tilde{H} & J_+ \gamma_k & I_+ \gamma_k^* & -I_d \gamma_k^* \\ J_+ \gamma_k^* & -\tilde{H} & I_+ \gamma_k & I_d \gamma_k \\ I_+ \gamma_k & I_+ \gamma_k^* & E_c & 0 \\ -I_d \gamma_k & I_d \gamma_k^* & 0 & E_d \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

и

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 0 & J_- \gamma_k & I_- \gamma_k^* & -I_d \gamma_k^* \\ J_- \gamma_k^* & 0 & I_- \gamma_k & I_d \gamma_k \\ I_- \gamma_k & I_- \gamma_k^* & 0 & 0 \\ -I_d \gamma_k & I_d \gamma_k^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Дисперсионное уравнение (2.40) является уравнением четвёртой степени относительно ω^2 , и его решения описывают четыре ветви спектра коллективных спиновых возбуждений трёхподрешётчного SU3F.

Когда значение параметра ОА D превышает критическое значение, D_c , SU3F находится в КАФМ фазе, и уравнение (2.40) существенно упрощается. В этом случае для ветвей спектра коллективных спиновых возбуждений можно получить следующие аналитические выражения:

$$\begin{aligned} \epsilon_1(k) &= J_0 S \sqrt{1 - |\gamma_k|^2}, & \epsilon_2(k) &= \sqrt{(\epsilon_1(k)^2 + D^2 - \Lambda_k^2) / 2}, \\ \epsilon_3(k) &= D, & \epsilon_4(k) &= \sqrt{(\epsilon_1(k)^2 + D^2 + \Lambda_k^2) / 2}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

где

$$\Lambda_k^2 = \sqrt{(\epsilon_1(k)^2 - D^2)^2 + 8S^2 I_0^2 J_0 D \Gamma_k}, \quad \Gamma_k = 2|\gamma_k|^2 - 2\operatorname{Re}\{\gamma_k^3\}. \quad (2.44)$$

Отметим, что в уравнении (2.43) третья бездисперсионная ветвь $\epsilon_3(k)$ описывает энергию локализованных возбуждений d -бозонов в случае $D > D_c$.

В дальнейшем полученные выражения используются для определения магнитной структуры основного состояния и спектральных характеристик SU3F.

2.3. Зависимость параметров порядка квантового SU3F от параметра ОА

Как было отмечено ранее, при больших значениях ОА в качестве параметров порядка в квантовых магнетиках стоит рассматривать не только дипольные моменты (т.е. момент одного иона в отдельной подрешётке), но и квадрупольный момент (2.10).

Среднее значение магнитного момента R для F - и G -подрешёток в СВП можно рассчитать по формуле:

$$R = \langle S_f^z \rangle = \langle S_g^z \rangle = S - n_a, \quad (2.45)$$

следующей из определения (2.16). В случае L -подрешётки выражение для $R_L = \langle S_l^z \rangle$ получается из уравнения (2.24) при подстановке бозе операторов вместо операторов Хаббарда, согласно (1.2):

$$R_L = \cos 2\alpha \cdot (1 - n_c - 2n_d). \quad (2.46)$$

Средние числа бозонов n_ρ , $\rho = a, b, c, d$ -типа в уравнениях (2.45) и (2.46) определяются выражением:

$$n_\rho = \frac{1}{N} \sum_k \langle \rho_k^+ \rho_k \rangle, \quad (2.47)$$

и вычисляются с помощью спектральной теоремы, которая применяется к каждой компоненте матричной ФГ $\langle\langle \mathbf{X}_k^\dagger | \mathbf{X}_k \rangle\rangle_\omega$.

Видно, что выражение (2.46) для параметра порядка R_L отличается от выражения (2.9) для R_L^{MF} в приближении среднего поля возникновением дополнительных флуктуационных членов, влияющих на величину квантового сокращения спина в L -подрешётке.

Выражение для среднего значения квадрупольного момента (2.10) получается аналогично формуле (2.46). Используя (2.24) и (1.2) для вывода квадрата оператора S_l^y , получим:

$$Q_2^0 = \frac{3}{2}(1 + n_c) - \frac{3}{2} \sin 2\alpha (1 - n_c - 2n_d) - 2. \quad (2.48)$$

Это выражение также отличается от (2.11) для Q^{MF} , полученного в приближении среднего поля, присутствием поправок на квантовые флуктуации.

Другой величиной, несущей важную информацию, является полный магнитный момент M . Его, как правило, определяют с помощью векторной суммы $\mathbf{R}_F + \mathbf{R}_G + \mathbf{R}_L$, направленной вдоль оси Oz :

$$M = R_L + 2R \cos \theta. \quad (2.49)$$

Вектор $\mathbf{M}$ в выбранной системе координат всегда направлен вдоль оси Oz (Рис. 2.1).

Расчёт четырёх величин R , R_L , Q_2^0 и M проводится при нулевой температуре. Результаты численных расчётов существенно зависят от соотношения между обменными интегралами I/J .

Рассмотрим для начала случай малого обмена I . Возьмём $I/J = 0.5$. При выбранном соотношении I/J и отсутствии ОА ($D = 0$) равновесный угол θ оказывается равным 120° . Таким образом, все три угла между тремя равновесными компланарными намагниченностями подрешёток равны. Это происходит потому что обменный интеграл I , будучи вдвое меньше J , описывает взаимодействие между спинами подрешёток, в одной из которых спин вдвое

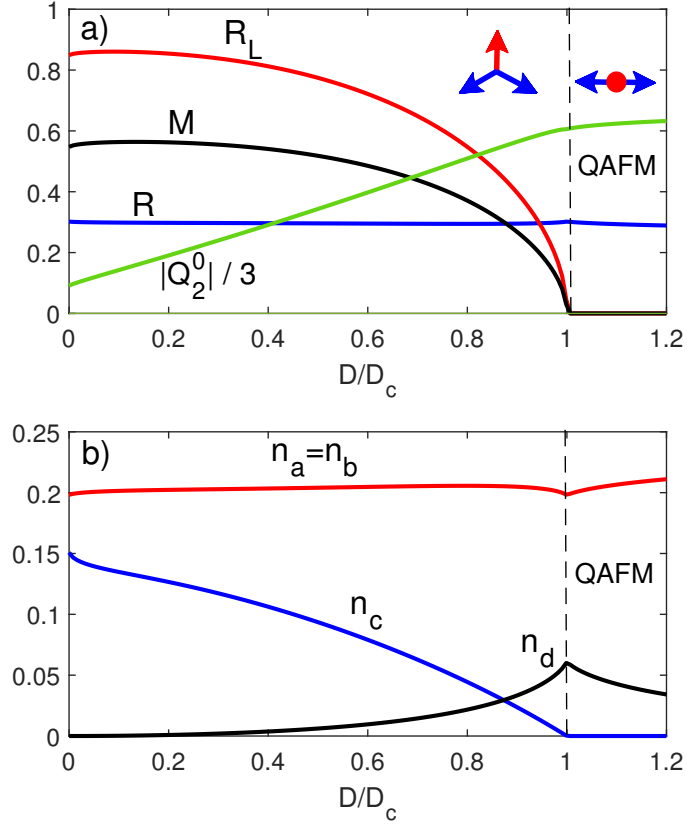


Рис. 2.6. (а) Зависимость величин R_L (красная кривая), R (синяя кривая), M (чёрная кривая) и $|Q_2^0|$ (зелёная кривая) от параметра ОА D . Для удобства, значение $|Q_2^0|$ уменьшено в три раза. (б) Зависимость числа бозонов n_ρ ($\rho = a, b, c, d$) от параметра ОА D . Отношение обменных интегралов $I/J = 0.5$. При этом, $D_c/J = 1.5$.

больше чем во второй. В результате этого, энергия обменного взаимодействия между всеми тремя парами трёх подрешёток оказывается идентичной.

Зависимость полного магнитного момента M , квадрупольного момента Q_2^0 , а также дипольных моментов R_L и R от параметра анизотропии D для соотношения $I/J = 0.5$ показано на Рис. 2.6а. Видно, что спины всех трёх подрешёток демонстрируют сильное сокращение за счёт квантовых флуктуаций. Однако в то время как среднее R практически не изменяется от параметра D , величины R_L и M обращаются в ноль при $D = D_c$ примерно по закону квадратного корня. В это же время угол θ уменьшается от 120° до 90° .

В свою очередь квадрупольный момент L -подрешётки Q_2^0 с ростом параметра ОА D демонстрирует монотонный рост (по абсолютной величине, так как $Q_2^0 < 0$) до значения насыщения в точке $D = D_c$. Зануление параметров R_L и M , выход на насыщение величины Q_2^0 означает, что в точке $D = D_c$ система переходит в КАФМ фазу. В этом случае спины L -подрешётки характеризуются квадрупольным упорядочением, а магнитные моменты других двух подрешёток равны по модулю и противоположны по направлению.

Описанное поведение показано на Рис. 2.6а двумя пиктограммами, показывающими магнитную структуру SU3F слева и справа от критической точки $D = D_c$. Положение этой точки обозначено вертикальной пунктирной линией. Использование красного круга вместо стрелки символизирует обращение в ноль среднего значения $R_L = 0$.

На Рис. 2.6b показана зависимость числа бозонов каждого сорта от величины параметра ОА D . Характер этих зависимостей существенно влияет на форму кривых на Рис. 2.6а. Видно, что в отсутствии ОА $D = 0$ величина n_c конечна, в тоже время $n_d = 0$. Это означает, что за счёт обменных взаимодействий происходят переходы только между состояниями $|\tilde{0}\rangle$ и $|+\tilde{1}\rangle$ (Рис. 2.5с). Напротив в критической точке $D = D_c$ величина n_d конечна и $n_c = 0$. В этом случае только состояние $|-\tilde{1}\rangle$ взаимодействует с состоянием $|+\tilde{1}\rangle$. Именно резкое увеличение числа бозонов n_c в окрестностях малого параметра ОА D объясняет небольшое увеличение среднего R_L в начале координат (см. красная кривая на Рис. 2.6а). Числа бозонов a и b сортов слабо зависят от параметра ОА D и определяют квантовое сокращение спина F - и G -подрешёток.

В случае отсутствия ОА $D = 0$ увеличение обменного интеграла I приводит к росту равновесного угла θ , так что при $I = J$ угол оказывается равным 180° : моменты F - и G -подрешёток направлены против оси Oz и вместе полностью компенсируют полный момент L -подрешётки R_L . В связи с чем полный момент системы зануляется $M = 0$. Отметим, что точка компенсации об-

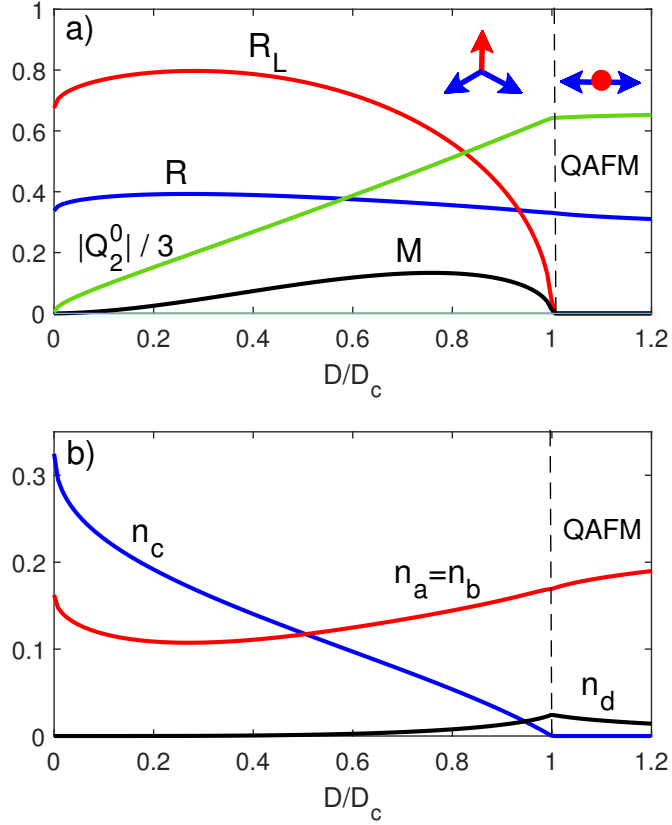


Рис. 2.7. (а) Зависимость значений R_L (красная кривая), R (синяя кривая), M (чёрная кривая) и $|Q_2^0|$ (зелёная кривая) от параметра ОА D . (б) Зависимость числа бозонов n_ρ ($\rho = a, b, c, d$) от параметра ОА D . Соотношение между обменными интегралами: $I/J = 1$. Критическое значение параметра ОА: $D_c = 6J$.

разуется несмотря на существенное квантовое сокращение спинов всех трёх подрешёток. Это видно из Рис. 2.7а, который показывает зависимость магнитных моментов R_L , R и M от величины ОА D . Сравнение этих кривых с аналогичными из Рис. 2.6а показывает, что увеличение величины I приводит к: 1) уменьшению квантового сокращения спина в F - и G -подрешётках (синяя линия); 2) более значительному увеличению R_L около начала координат (красная линия); 3) полный момент M обращается в ноль при двух значениях параметра ОА: $D = 0$, $D = D_c$ (чёрная линия на Рис. 2.7а). В первом случае при $D = 0$, магнитные моменты всех трёх подрешёток отличны от нуля.

Как и в предыдущем случае ($I/J = 0.5$), момент L -подрешётки направлен вдоль оси Oz , в тоже время моменты F - и G -подрешёток направлены против неё. В этой фазе моменты всех трёх подрешёток полностью компенсируют друг друга. Во втором случае $D = D_c$ момент $R_L = 0$, магнитные моменты F - и G -подрешёток направлены друг против друга и перпендикулярно оси Oz , а также их полный момент $M = 0$. При всех промежуточных значениях ОА система находится в скошенной Y -фазе (см. пиктограмму на Рис. 2.7а), а суммарный магнитный момент не равен нулю и направлен вдоль оси Oz . Квадрупольный момент Q_2^0 , как и в случае $I/J = 0.5$, монотонно возрастает по абсолютной величине и при $D \geq D_c$ в области, соответствующей КАФМ фазе, возрастает до максимальных значений. Незначительные отличия от предыдущего случая, показанного на Рис. 2.6а, связано с тем, что зелёная кривая, описывающая зависимость Q_2^0 от D , практически выходит из начала координат, так что при $D = 0$ квадрупольный параметр порядка обращается в ноль $Q_2^0 = 0$.

Зависимости чисел бозонов от параметра ОА D в случае $I/J = 1$ показаны на Рис.2.7b. Видно, что увеличение обменного интеграла I приводит к уменьшению чисел бозонов n_a и n_b , что также уменьшает квантовое сокращение спина в F - и G -подрешётках. В остальном качественно вид зависимости n_ρ ($\rho = a, b, c, d$) от параметра ОА D аналогичен кривым на Рис. 2.6b.

Наиболее интересным является случай, когда обменный интеграл I больше обменного интеграла J . Результаты расчётов $I/J = 1.2$ представлены на Рис. 2.8. Из Рис. 2.8а видно, что в отличие от ранее рассмотренных соотношений между I и J теперь проекция полного момента M на ось Oz оказывается отрицательной, когда отношение D/D_c изменяется от 0.1 до 0.762 (красные точки на чёрной кривой) и положительной (или нулевой) для значений D/D_c вне этой области. Такое поведение объясняется разворотом магнитных моментов F - и G -подрешёток и специфической зависимостью числа бозонов n_ρ ($\rho = a, b, c, d$), определяющих величины R и R_L , от параметра ОА D . Перегиб

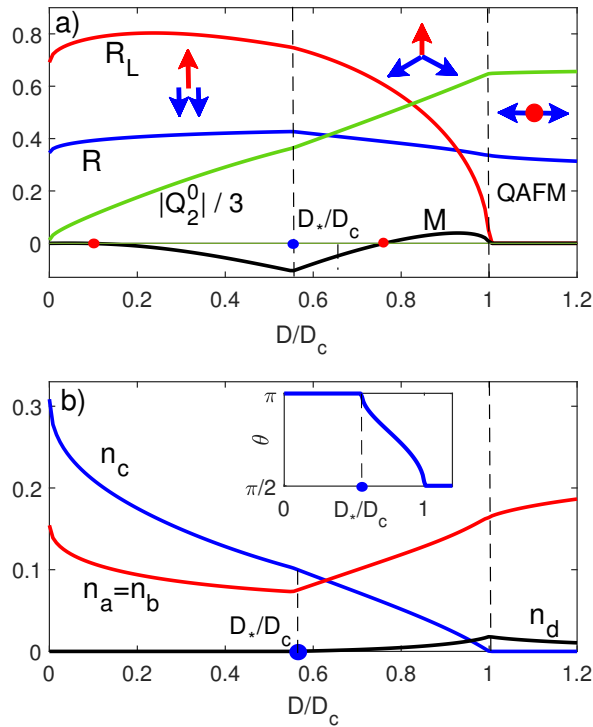


Рис. 2.8. (а) Зависимости величин R_L (красная кривая), R (синяя кривая), M (чёрная кривая) и $|Q_2^0|$ (зелёная кривая) от параметра ОА D . (б) Зависимость числа бозонов n_ρ ($\rho = a, b, c, d$) от параметра ОА D . Отношение между обменными интегралами: $I/J = 1.2$. В этом случае, $D_c/J = 8.64$. На вставке нижнего графика показана зависимость угла θ от параметра ОА D . Величина параметра ОА D_* , соответствующая началу скоса магнитных моментов в F - и G -подрешётках, обозначена синими точками на осях абсцисс.

кривых на Рис. 2.8а и 2.8б в точке $D_* \cong 0.54 D_c$ (синие точки на осях абсцисс) обусловлен началом уменьшения равновесного угла θ . Угол θ на всём интервале слева от точки D_* постоянен и равен 180^0 , в тоже время справа от D_* монотонно уменьшается и при $D = D_c$ принимает значение 90^0 (см. вставку на Рис. 2.8б).

Таким образом, если при $I = J$ коллинеарная конфигурация спинов (когда $\mathbf{R}_L$ направлен вдоль оси Oz , в тоже время $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ развёрнуты в противоположном направлении) существовала только при нулевом значении пара-

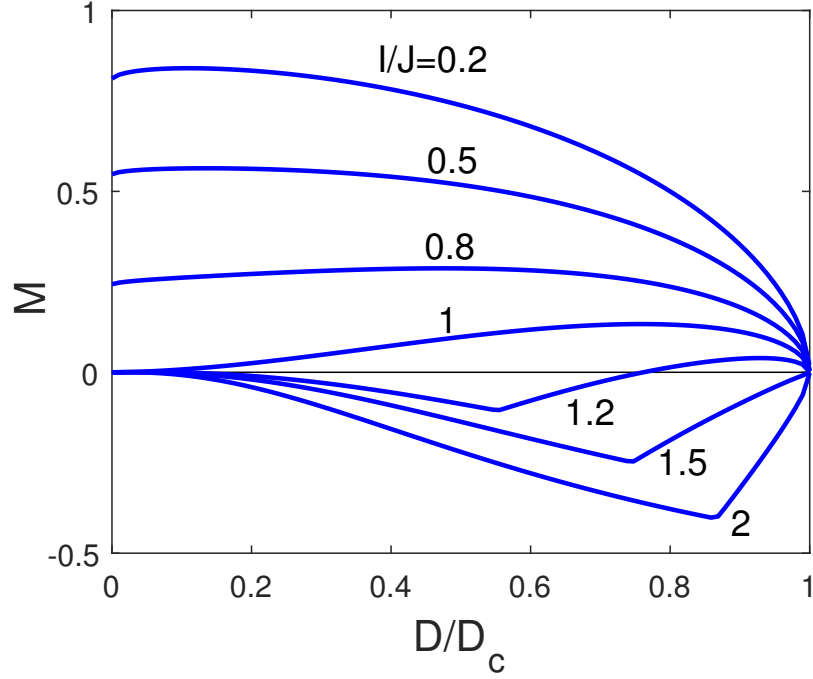


Рис. 2.9. Зависимость полного магнитного момента M от параметра ОА D при разных соотношениях между обменными интегралами I и J . Значения I/J указаны рядом с соответствующими кривыми.

метра ОА D (см. обсуждение Рис. 2.7а), то в случае $I > J$ эта коллинеарная конфигурация сохраняется на всём диапазоне D от нуля до D_* . Области, соответствующие трём указанным магнитным конфигурациям: коллинеарной ферромагнитной, скошенной ферромагнитной, квадрупольной антиферромагнитной, обозначены на Рис. 2.8а соответствующими пиктограммами.

Зависимость квадрупольного параметра порядка Q_2^0 от параметра ОА D (зелёная линия на Рис. 2.8а) повторяет аналогичную зависимость при $I = J$ на Рис. 2.7а.

На Рис. 2.9 показана зависимость проекции полной намагниченности на ось Oz от параметра ОА D для нескольких соотношений I/J . Справа от D_c $SU3 - F$ находится в КАФМ фазе при всех значениях соотношения I/J . Поэтому при $D \geq D_c$ проекция полного момента M тождественно равна нулю. При $I < J$ для любого значения параметра ОА D из диапазона $[0, D_c]$ реа-

лизуется только скошенная ферромагнитная Y -фаза ($\theta < \pi$). В этом случае при всех значениях $D < D_c$ проекция полного момента M положительная. Минимальное значение обменного интеграла I , при котором возникает коллинеарная ферромагнитная uid -фаза ($\theta = 0$), равно J . Причём при $I = J$ эта фаза возникает только в изотропном случае $D = 0$, именно в этой точке (из всего интервала $[0, D_c]$) значение полного момента M впервые становится равным нулю. При дальнейшем росте обменного интеграла I область, в которой реализуется коллинеарная ферромагнитная uid -фаза, увеличивается и характеризуется интервалом $[0, D_*)$, где значение D_* , разделяющее коллинеарную и скошенную фазы, можно визуальнo определить, как точку перегиба зависимости $M(D)$ (см. три нижние кривые на Рис. 2.9, рассчитанные для $I/J = 1.2; 1.5; 2$). Из рисунка видно, что в точке $D = 0$ проекция полной намагниченности M остаётся равной нулю при всех значениях $I > J$.

Важный факт, вытекающий из анализа кривых на Рис.2.9, состоит в изменении знака проекции полного магнитного момента M как только соотношение I/J становится больше единицы. Изменение направления момента $\mathbf{M}$ осуществляется не поворотом вектора $\mathbf{M}$, а уменьшением его длины до нуля и последующим увеличением в противоположном направлении. Изменение знака M может произойти при любом значении D из интервала $(0, D_c)$ в зависимости от соотношения I/J . В результате может возникнуть ситуация, рассмотренная выше на Рис. 2.8а для $I/J = 1.2$, в которой знак M изменяется дважды при увеличении D , что приводит к двум точкам компенсации.

2.4. Спектр коллективных спиновых возбуждений квантового SU3F

На Рис. 2.10 показан спин-волновой спектр в случае $I/J = 0.8$ для трёх значений параметра ОА: $D/D_c = 0, 0.5$ и 1 . Волновой вектор k пробегает по

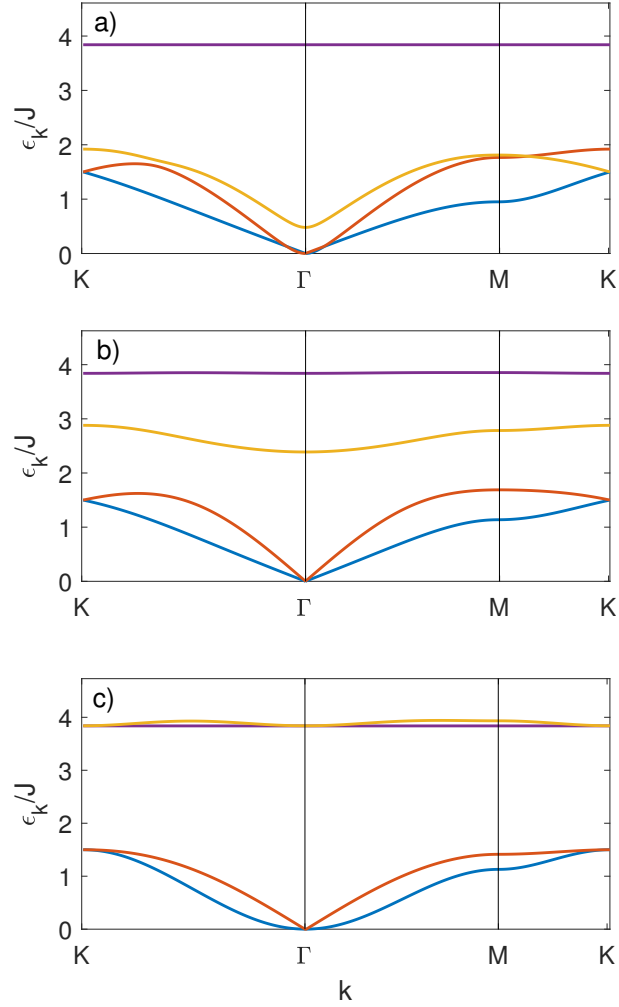


Рис. 2.10. Спектр спин-волновых возбуждений в случае $I/J = 0.8$ при трёх значениях параметра ОА: а) $D = 0$; б) $D = 0.5D_c$ и в) $D = D_c$. В данном случае $D_c/J = 3.84$. Положения точек Γ , K и M определены на Рис. 2.11.

треугольнику, определённому точками Γ , K и M в зоне Бриллюэна. Положение этих точек показано на Рис. 2.11.

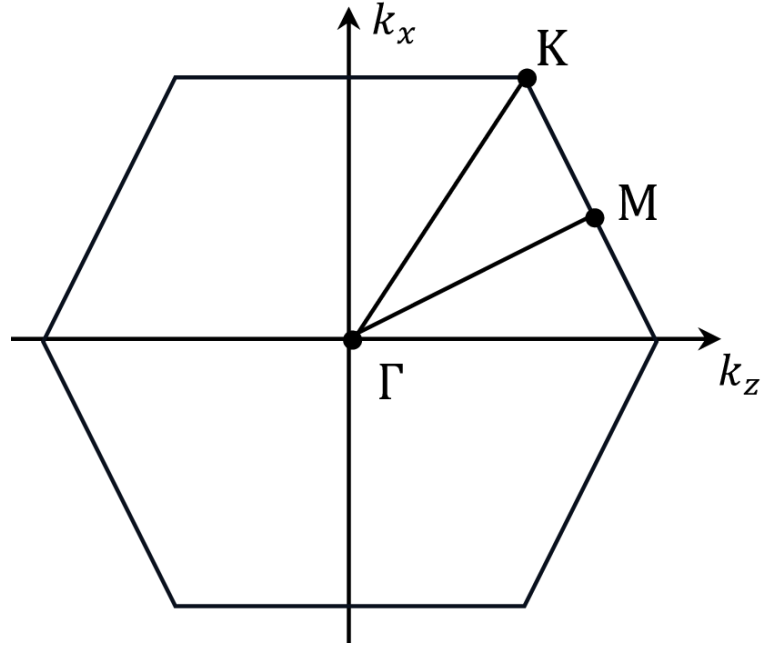


Рис. 2.11. Зона Бриллюэна треугольной решётки и точки высокой симметрии.

Видно, что при $D = 0$ (Рис. 2.10а) существуют две безщелевые ветви (синяя и красная), которые обращаются в ноль при $k = 0$. Другие две ветви (жёлтая и фиолетовая) описывают возбуждения с конечной энергией для всех волновых векторов k . В тоже время высокоэнергетическая и практически бездисперсионная фиолетовая ветвь соответствует возбуждению d -бозонов с энергией E_d (2.34).

При увеличении параметра OA D , жёлтая (щелевая) ветвь движется вверх (Рис. 2.10b) и при $D = D_c$ сливается с высокоэнергетической фиолетовой ветвью (Рис. 2.10с).

Описанное поведение жёлтой дисперсионной ветви на Рис. 2.10 коррелирует с изменением угла θ . Как было отмечено в предыдущем разделе (см. также (2.2.)) для $I < J$ угол θ меньше π для всех значений D . В данном случае спектр возбуждений жёлтой кривой является щелевым для всех значений D . При $D = 0$ угол θ принимает максимальное значение, а щель имеет минимум (Рис. 2.10а). При увеличении параметра OA угол θ , как обсуждалось в предыдущем разделе, уменьшается вплоть до минимального значения

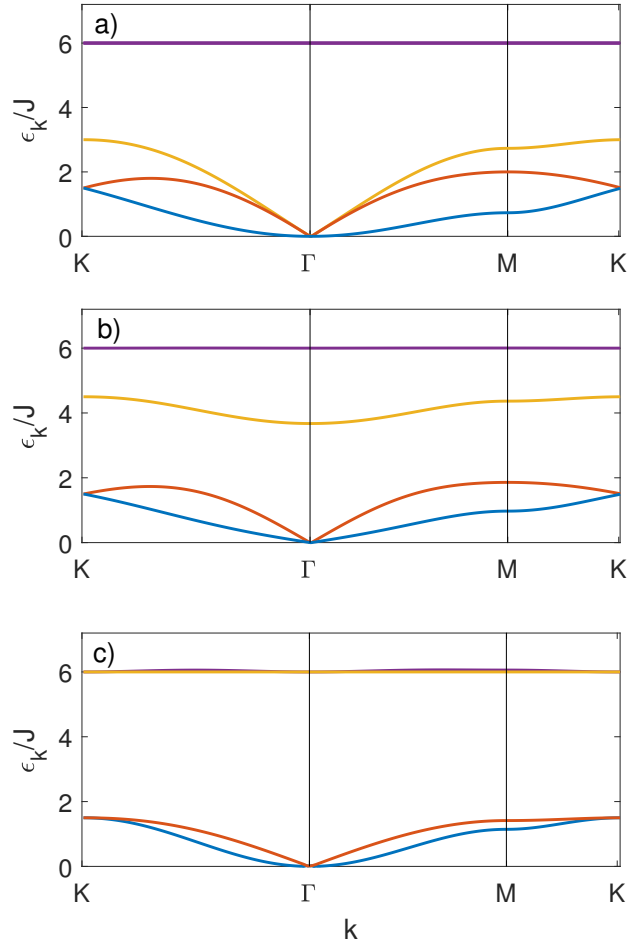


Рис. 2.12. Спектр коллективных спиновых возбуждений в случае $I = J$ при трёх значениях параметра ОА: а) $D = 0$, б) $D = D_c/2$, в) $D = D_c$. В данном случае $D_c/J = 6$. Положения точек Γ , K и M описаны на Рис. 2.11.

$\pi/2$ при $D = D_c$, а щель, наоборот, увеличивается и достигает максимума при $D = D_c$ (Рис. 2.10с).

Учитывая описанную корреляцию между углом θ и толщиной щели для жёлтой дисперсионной кривой, можно ожидать исчезновение щели в случае $\theta = \pi$. Это возможно для $I \geq J$.

На Рис. 2.12 показан численный расчёт спектра коллективных спиновых возбуждений в случае равных обменных интегралов ($I = J$) для трёх значений параметра ОА D . Как отмечено выше, когда обменные интегралы I и J

равны, угол θ равен π только в одном случае: $D = 0$ (см. (2.2.)). И именно в этой точке, как ожидалось, жёлтая дисперсионная ветвь становится безщелевой (Рис. 2.12а). Для всех остальных значений D щель конечна. Отсутствие щели у жёлтой дисперсионной кривой на Рис. 2.12а является её основным отличием от похожей кривой на Рис. 2.10а. При остальных (не нулевых) параметрах ОА, дисперсионные кривые на Рис. 2.10 и 2.12, рассчитанные при $I/J = 0.8$ и $I/J = 1$, демонстрируют схожую динамику с увеличением D : две ветви всегда безщелевые, а одна (жёлтая) поднимается. При $D = D_c$ жёлтая кривая сливается с бездисперсионной высокоэнергетической фиолетовой кривой с энергией E_d .

Полезный факт означает, что возбуждения описанные жёлтой и фиолетовой кривыми имеют одинаковую природу. Поскольку, как ранее отмечалось, фиолетовая ветвь соответствует возбуждениям d -бозонов, жёлтая ветвь должна быть связана с возбуждением c -бозонов. Оба этих типа бозонов обусловлены возбуждением L -подсистемы (с $S = 1$), которая при $D = D_c$ переходит в КАФМ фазу с $R_L = 0$.

Наиболее интересная эволюция дисперсионных кривых с изменением параметра ОА D имеет место в случае $I/J > 1$. На Рис. 2.13 показан пример такой эволюции при соотношении между обменными интегралами $I/J = 1.2$. При нулевом значении параметра ОА (Рис. 2.13а) только две из четырёх дисперсионных кривых безщелевые (на Рис. 2.12а таких кривых три). Одна из них, жёлтая, соответствует возбуждению c -бозонов, как и ранее с увеличением параметра ОА D становится щелевой, поднимается и, в конце концов, сливается с фиолетовой бездисперсионной ветвью, описывающей возбуждение d -бозонов.

Вторая безщелевая ветвь (красная на Рис. 2.13) изменяется незначительно и остаётся безщелевой при любом значении параметра ОА. Эта ветвь описывает Голдстоуновскую моду, связанную с нарушением непрерывной симметрии по отношению к вращению вокруг оси Oy , перпендикулярной к плоскости

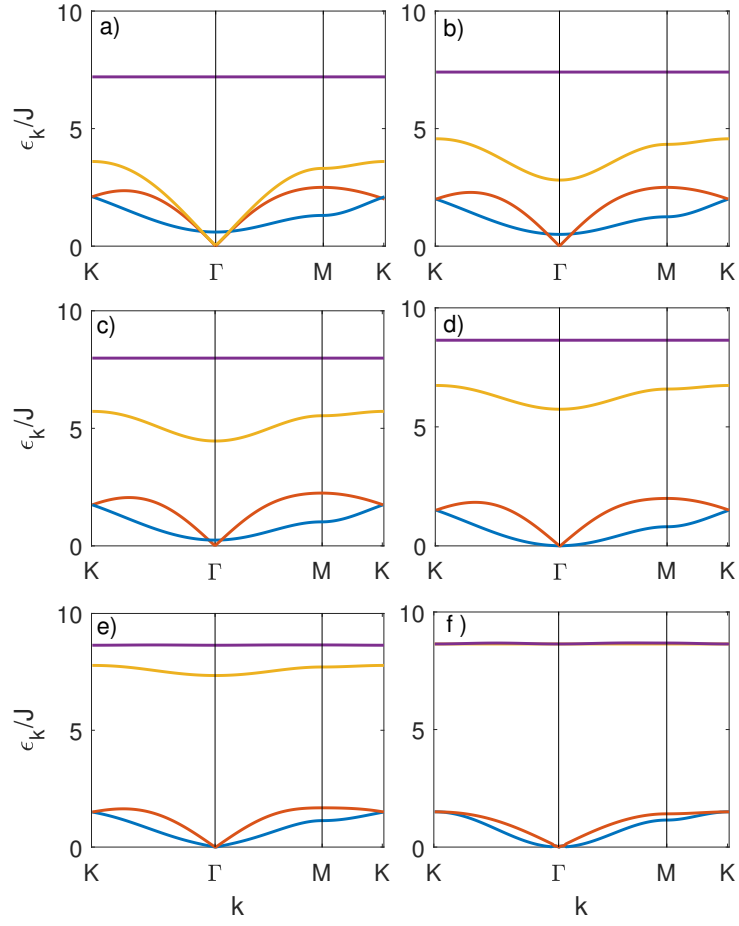


Рис. 2.13. Спектр коллективных спиновых возбуждений в случае $I/J = 1.2$. Параметр ОА: а) $D = 0$; б) $D = 0.2D_c$; в) $D = 0.4D_c$; д) $D = D_* = 0.56D_c$; е) $D = 0.8D_c$; ф) $D/D_c = 1$. В данном случае $D_c/J = 8.64$. Положения точек Γ , K и M определено на Рис. 2.11.

рассматриваемой треугольной решётки (Рис. 2.3).

Своеобразное поведение на Рис. 2.13 демонстрирует синяя дисперсионная ветвь. При $D = 0$ (Рис. 2.13а) эта кривая описывает коллективные спиновые возбуждения с конечной энергией для всех k . Обозначим через Δ_0 минимальную энергию возбуждения при $k = 0$. Когда параметр ОА D увеличивается, щель Δ_0 начинает уменьшаться (см. Рис. 2.13б, 2.13с) и при некотором значении $D = D_*$ обращается в ноль (Рис. 2.13д). При дальнейшем увеличении D синяя ветвь остаётся безщелевой для всех D на промежутке от D_* до D_c (Рис.

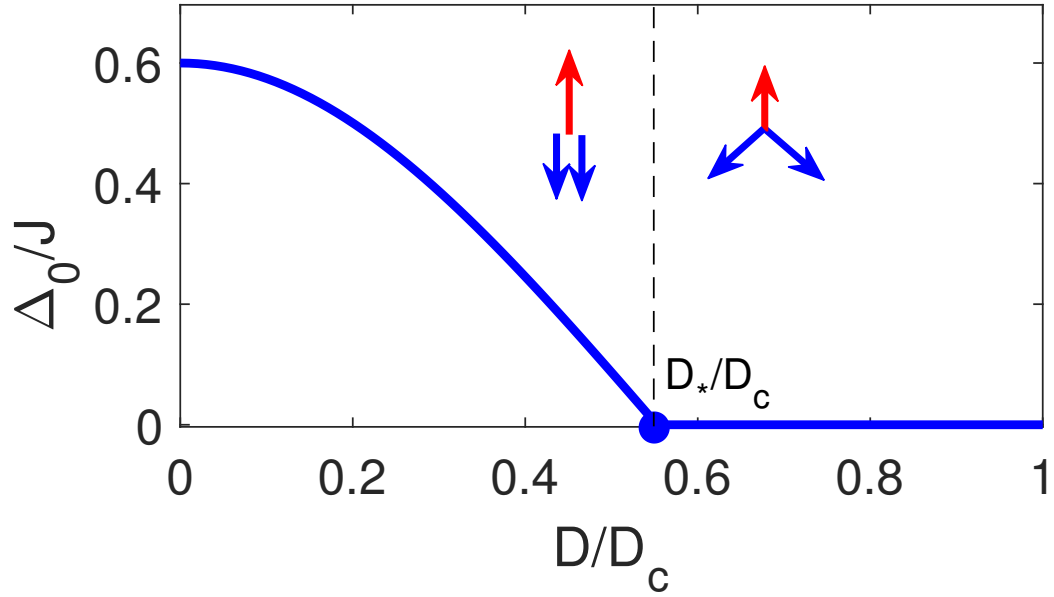


Рис. 2.14. Щель Δ_0 (см. текст) как функция от параметра ОА в случае $I/J = 1.2$.

2.13d, 2.13e, 2.13f). Описываемая природа щели Δ_0 как функции параметра ОА показана на Рис. 2.14.

Преобразование синей дисперсионной ветви показано на Рис. 2.13, и в частности характер изменения толщины щели при $k = 0$ (Рис. 2.14 позволяет сделать вывод, что возбуждения, описываемые с помощью этой кривой, связаны с вращением магнитных моментов в F - и G -подрешётках вокруг оси Oz параллельно магнитным моментам L -подрешётки (Рис. 2.3). Действительно, при $D \in (D_*, D_c)$ система находится в скошенной ферромагнитной Y -фазе (угол $\theta < \pi$). Поскольку, в рассматриваемом основном состоянии магнитные моменты всех спинов из L -подрешётки ориентированы параллельно друг другу и оси Oz , энергия системы остаётся постоянной по отношению к вращению вокруг оси Oz двух векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, находящихся под произвольным, но одинаковым углом θ к оси Oz . Для гамильтониана такая инвариантность, в соответствие с теоремой Голдстоуна, будет означать существование безщелевой моды, связанной с нарушением непрерывной симметрии относительно

вращения вокруг оси Oz плоскости, создаваемой осями векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$. Поскольку в этом случае можно говорить только об инвариантности средней энергии (не оператора Гамильтона) и, более того, в специфичном скошенном ферромагнитном основном состоянии в специальном диапазоне D , его безщелевая синяя дисперсионная ветвь на Рис. 2.13 не является Голдстоуновской модой в строгом понимании.

Важным вопросом, на который нельзя однозначно ответить в рамках только численных расчётов, является характер зависимости от k синей дисперсионной ветви в окрестности начала координат (k малы) при значениях D близких к D_c . Как видно из Рис. 2.10с, 2.12с и 2.13f, структура спектра при $D \sim D_c$ качественно одинакова для всех соотношений I/J : существуют две слабодисперсионные ветви с высокой энергией $\sim D$ (фиолетовая и жёлтая ветви), одна Голдстоуновская мода с линейной по k дисперсией (красная ветвь) и синяя дисперсионная ветвь с визуально не обнаруженным типом зависимости от k в окрестности $k = 0$.

Поскольку, структура спектра $SU3F$ перестаёт качественно меняться при $D > D_c$, то для определения дисперсии синей ветви при малых k можно рассмотреть значение параметра ОА справа от D_c . В этом случае рассматриваемым ветвям спектра соответствуют аналитические выражения (2.43).

Используя эти выражения, получим следующие формулы для функции $\epsilon_2(k)^2$ (рассматриваемой синей ветви спектра) до четвёртой степени по абсолютному значению безвременного волнового вектора $k = \sqrt{k_z^2 + k_x^2}$:

$$(\epsilon_2(k))^2 \simeq \rho \frac{J_0^2 S^2}{6} k^2 + \left[2 - \rho \left(3 + \frac{8}{3} \left(\frac{J_0}{D} \right)^2 \frac{D_c}{D} S^2 \right) \right] \frac{J_0^2 S^2}{96} k^4, \quad (2.50)$$

где $\rho = 1 - D_c/D$ положительный малый параметр. Как видно из формулы (2.50), пока $\rho \neq 0$ (т.е. пока D больше и не равна D_c), зависимость $\epsilon_2(k)$ от k линейна: $\epsilon_2(k) \simeq (J_0 S \sqrt{\rho/6}) k$. Но как только ρ обратится в ноль (для $D = D_c$), спектр $\epsilon_2(k)$ станет квадратичным при малых k : $\epsilon_2(k) \simeq (J_0 S / 4\sqrt{3}) k^2$. Очевидно, когда D движется к D_c слева, спектр $\epsilon_2(k)$ меняется аналогично.

Глава 3

Квантовый SU3F на треугольной решётке в магнитном поле

3.1. Диагонализация одноионного гамильтониана квантового SU3F в магнитном поле с помощью трёх последовательных унитарных преобразований в атомном представлении

В данной главе рассматривается SU3F во внешнем магнитном поле, кристаллическая структура которого представлена в Гл. 2 на Рис. 2.1. Гамильтониан SU3F во внешнем магнитном поле может быть представлен в виде

$$H = H_A + H_{exch} + H_{field}, \quad (3.1)$$

где

$$\begin{aligned} H_{exch} &= J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g + I \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_l + I \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \mathbf{S}_l, \\ H_A &= D \sum_l (S_l^y)^2, \\ H_{field} &= -h \sum_f S_f^z - h \sum_g S_g^z - h_L \sum_l S_l^z. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Здесь, как и в прошлой главе, оператор H_{exch} описывает парное обменное взаимодействие между ближайшими спинами из разных подрешёток. Нижние индексы f , g и l у операторов спина обозначают узлы из F -, G - и L -подрешёток соответственно. Обменный интеграл J определяет интенсивность антиферромагнитных взаимодействий между ближайшими спинами из F - и G -подрешёток, а интеграл I — из $F(G)$ - и L -подрешёток. Фигурные скобки под тремя символами суммы в (3.2) означают, что суммирование ведётся только по ближайшим узлам, и каждая пара узлов учитывается только один раз. Оператор H_A описывает влияние ОА типа «лёгкая плоскость» на спины

$S = 1$ в L -подрешётке. Параметр ОА D – положительный. Ось Oy направлена перпендикулярно плоскости ферромагнетика xOz , являющейся, следовательно, плоскостью «лёгкого намагничивания». Оператор H_{field} учитывает зеемановскую энергию спинов во внешнем магнитном поле H , лежащем в плоскости ферромагнетика («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 $F(G)$ -подрешётки со спином $S = \frac{1}{2}$ и L -подрешётки с $S = 1$, соответственно. В общем случае g -факторы могут отличаться для разных подрешеток. Однако далее будем считать, что моменты формируются без участия орбитальных степеней свободы, т.е. являются чисто спиновыми, и, таким образом, $g_L = g = 2$, аналогично Гл. 2.

Направление магнитного поля и тип ОА способствуют тому, что средний момент L -подрешётки $\mathbf{R}_L$ оказывается ориентированным в плоскости xOz , перпендикулярной оси ОА Oy . Кроме того, учитывая характер обменных взаимодействий, а также результаты работы [1], можно утверждать, что магнитная структура основного состояния $SU(3)_F$ при любых значениях D и H характеризуется планарной конфигурацией средних значений спинов. Поэтому без ограничения общности будем считать, что спины всех трёх подрешёток лежат в плоскости ферромагнетика xOz . Ось Oz исходной системы координат удобно направить вдоль магнитного поля.

Вычисление энергии основного состояния $SU(3)_F$ целесообразно начать с проведения унитарного преобразования $SU(2)$ поворота гамильтониана H :

$$H(\theta_F, \theta_G) = U_2(\theta_F, \theta_G) H U_2^+(\theta_F, \theta_G), \quad (3.3)$$

с оператором

$$U_2(\theta_F, \theta_G) = \prod_{f \in F} \exp(-i\theta_F S_f^y) \prod_{g \in G} \exp(-i\theta_G S_g^y). \quad (3.4)$$

В данном случае в отличие от формул (2.3) и (2.4) каждая из F - и G -подрешёток разворачивается на свой угол от оси Oz . Преобразование (3.3)

позволяет перейти для F - и G -подрешёток к новым локальным координатам, в которых оси квантования z' и z'' повернуты на углы θ_F и θ_G вокруг оси Oy и направлены вдоль равновесных намагниченностей $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ соответственно (см. Рис. 3.1).

Унитарное преобразование (3.3) гамильтониана (3.1) отвечает следующей формальной замене спиновых операторов из F - и G - подрешёток [55]:

$$\begin{aligned} S_f^x &\rightarrow S_f^x \cos \theta_F + S_f^z \sin \theta_F, & S_f^y &\rightarrow S_f^y, \\ S_f^z &\rightarrow S_f^z \cos \theta_F - S_f^x \sin \theta_F, \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} S_g^x &\rightarrow S_g^x \cos \theta_G + S_g^z \sin \theta_G, & S_g^y &\rightarrow S_g^y, \\ S_g^z &\rightarrow S_g^z \cos \theta_G - S_g^x \sin \theta_G. \end{aligned} \quad (3.6)$$

В результате оператор Гамильтона (3.1) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} H = & D \sum_l (S_l^y)^2 + J \sum_{\{fg\}} [(S_f^x S_g^x + S_f^z S_g^z) \cos(\theta_F - \theta_G) + \\ & S_f^y S_g^y + (S_f^z S_g^x - S_f^x S_g^z) \sin(\theta_F - \theta_G)] + \\ & I \sum_{\{fl\}} [(S_f^x S_l^x + S_f^z S_l^z) \cos \theta_F + S_f^y S_l^y + (S_f^z S_l^x - S_f^x S_l^z) \sin \theta_F] + \\ & I \sum_{\{gl\}} [(S_g^x S_l^x + S_g^z S_l^z) \cos \theta_G + S_g^y S_l^y + (S_g^z S_l^x - S_g^x S_l^z) \sin \theta_G] - \\ & h \sum_f [S_f^z \cos \theta_F - S_f^x \sin \theta_F] - h \sum_g [S_g^z \cos \theta_G - S_g^x \sin \theta_G] - h_L \sum_l S_l^z, \end{aligned} \quad (3.7)$$

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 (повёрнутых) локальных системах координат.

Согласно изложенной в Гл. 2 стратегии вычисления энергии основного состояния SU3F, проводится преобразование Гольштейна-Примакова отдельно для F - и G -подрешёток аналогично (2.16). Результат подстановки (2.16) в гамильтониан (3.7) запишем в виде:

$$H = E_0 + H^{(0)} + H^{(1)} + H^{(2)}. \quad (3.8)$$

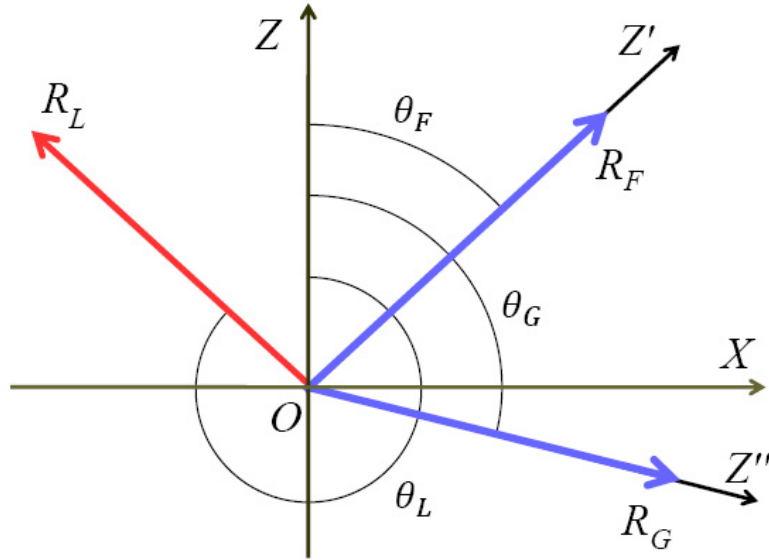


Рис. 3.1. Поворот локальных осей координат при унитарном преобразовании (3.3). В F - и G -подрешетках с $S = \frac{1}{2}$ оси Oz поворачиваются на углы θ_F и θ_G и занимают новые положения Oz' и Oz'' . Локальные координаты в L -подсистеме с $S = 1$ остаются неизменными, а угол, образованный моментом R_L и осью Oz , обозначен посредством θ_L .

В этом выражении

$$E_0 = J_0 S^2 N \cos(\theta_F - \theta_G) - h S N (\cos \theta_F + \cos \theta_G), \quad (3.9)$$

а следующие три операторных слагаемых $H^{(n)}$ ($n = 0, 1, 2$) классифицируются по степеням бозе операторов n . Величина N в формуле (3.9) обозначает число узлов в подрешётке.

Оператор $H^{(0)}$ представляет собой сумму одноионных гамильтонианов L -подсистемы: $H^{(0)} = \sum_l H_0(l)$, где

$$H_0(l) = D(S_l^y)^2 + \bar{H}_z S_l^z + \bar{H}_x S_l^x, \quad (3.10)$$

а эффективные поля определяются выражениями

$$\begin{aligned} \bar{H}_z &= I_0 S (\cos \theta_F + \cos \theta_G) - h_L, \\ \bar{H}_x &= I_0 S (\sin \theta_F + \sin \theta_G), \quad I_0 = 3I. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Линейное по бозе операторам слагаемое гамильтониана (3.8) запишем в следующей форме:

$$\begin{aligned}
H^{(1)} = & \sum_{\{fl\}} I \sqrt{\frac{S}{2}} [\cos \theta_F S_l^x - \sin \theta_F S_l^z] (a_f + a_f^+) + \\
& + \sum_f \sqrt{\frac{S}{2}} [J_0 S \sin(\theta_G - \theta_F) + h \sin \theta_F] (a_f + a_f^+) + \\
& + \sum_{\{gl\}} I \sqrt{\frac{S}{2}} [\cos \theta_G S_l^x - \sin \theta_G S_l^z] (b_g + b_g^+) + \\
& + \sum_g \sqrt{\frac{S}{2}} [J_0 S \sin(\theta_F - \theta_G) + h \sin \theta_G] (b_g + b_g^+) + \\
& + \frac{I}{i} \sqrt{\frac{S}{2}} \left\{ \sum_{\{fl\}} S_l^y (a_f - a_f^+) + \sum_{\{gl\}} S_l^y (b_g - b_g^+) \right\}, \quad (3.12)
\end{aligned}$$

где $J_0 = 3J$.

Последнее слагаемое в выражении (3.8) описывает возбуждения в F и G -подсистемах и имеет вид:

$$\begin{aligned}
H^{(2)} = & J \frac{S}{2} \sum_{\{f,g\}} \left\{ \left((a_f + a_f^+)(b_g + b_g^+) - \right. \right. \\
& \left. \left. 2(a_f^+ a_f + b_g^+ b_g) \right) \cos(\theta_F - \theta_G) - (a_f - a_f^+)(b_g - b_g^+) \right\} - \\
& I \sum_{\{f,l\}} (\cos \theta_F S_l^z + \sin \theta_F S_l^x) a_f^+ a_f - I \sum_{\{g,l\}} (\cos \theta_G S_l^z + \sin \theta_G S_l^x) b_g^+ b_g + \\
& h \cos \theta_F \sum_f a_f^+ a_f + h \cos \theta_G \sum_g b_g^+ b_g. \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Далее, приближение среднего поля требует проведения замены в выражениях для $H^{(1)}$ и $H^{(2)}$ спиновых операторов L -подсистемы их средними значениями. В рассматриваемом случае нулевых температур усреднение операторов S_l^α ($\alpha = x, y, z$) достаточно проводить по основному состоянию одноузельного гамильтониана (3.10).

Для диагонализации одноионного гамильтониана (3.10), как и в Гл. 2, воспользуемся подходом развитым в [42]. Перейдём от спиновых операторов

к операторам Хаббарда [41] $X_l^{m,n} = |m\rangle\langle n|$, 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

$$\begin{aligned} S_l^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_l^{1,0} + X_l^{-1,0} + X_l^{0,1} + X_l^{0,-1} \right), \\ S_l^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-X_l^{1,0} + X_l^{-1,0} + X_l^{0,1} - X_l^{0,-1} \right), \\ (S_l^y)^2 &= \frac{1}{2} \left(X_l^{1,-1} + X_l^{-1,1} - X_l^{1,1} - X_l^{-1,-1} \right) + X_l^{0,0}, \\ S_l^z &= X_l^{1,1} - X_l^{-1,-1}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

описывающие переход к представлению операторов Хаббарда, в одноионный гамильтониан (3.10) получаем:

$$\begin{aligned} H_0(l) &= \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z \right) X_l^{1,1} + D X_l^{0,0} + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z \right) X_l^{-1,-1} \\ &\quad + \frac{D}{2} \left(X_l^{1,-1} + X_l^{-1,1} \right) + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} \left(X_l^{1,0} + X_l^{0,1} + X_l^{-1,0} + X_l^{0,-1} \right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

В отсутствие магнитного поля величина $\bar{H}_x$ равняется нулю, и последнее слагаемое в выражении (3.15) исчезает. В этом случае гамильтониан $H_0(l)$ перемешивает только два из трёх состояний ($|+1\rangle$ и $|-1\rangle$) и для его диагонализации достаточно провести одно унитарное преобразование (см. раздел 2.2.). Наличие магнитного поля приводит к тому, что перемешанными оказываются все три состояния $|n\rangle$ ($n = \{-1, 0, +1\}$). Теперь для диагонализации одноионного гамильтониана необходимо провести три последовательных унитарных преобразования в атомном представлении.

После проведения последовательно трёх унитарных преобразований с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,-1}(\alpha_3)$ и $U_{1,-1}(\alpha_1)$ по правилу (1.3) 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 $H_0(l)$:

$$H_0(l) = \sum_n \epsilon_n X_l^{nn}, \quad n = -1, 0, +1. \quad (3.16)$$

Собственные значения ϵ_n одноионного гамильтониана можно представить в виде:

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= e_{-1,-1} \sin^2 \alpha_1 + e_{1,1} \cos^2 \alpha_1 + e_{1,-1} \sin 2\alpha_1, \\ \epsilon_{-1} &= e_{-1,-1} \cos^2 \alpha_1 + e_{1,1} \sin^2 \alpha_1 - e_{1,-1} \sin 2\alpha_1, \\ \epsilon_0 &= e_{0,0},\end{aligned}\tag{3.17}$$

где

$$\begin{aligned}e_{1,1} &= D \sin^2 \alpha_2 + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right) \cos^2 \alpha_2 + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha_2, \\ e_{-1,-1} &= D \cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2 \sin^2 \alpha_3) + \\ &\quad \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right) \cos^2 \alpha_3 - \frac{D}{2} \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right) \sin^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3, \\ e_{0,0} &= D \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2 \cos^2 \alpha_3) + \\ &\quad \left(\frac{D}{2} + \bar{H}_z\right) \sin^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 + \frac{D}{2} \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \left(\frac{D}{2} - \bar{H}_z\right) \sin^2 \alpha_3, \\ e_{1,-1} &= \left(\frac{\bar{H}_z}{2} - \frac{D}{4}\right) \sin(2\alpha_2) \sin \alpha_3 - \frac{D}{2} \cos \alpha_2 \cos \alpha_3 + \\ &\quad \frac{\bar{H}_x}{\sqrt{2}} (-\cos 2\alpha_2 \sin \alpha_3 + \sin \alpha_2 \cos \alpha_3).\end{aligned}\tag{3.18}$$

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

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

$$\tan 2\alpha_1 = 2e_{1,\bar{1}}/(e_{1,1} - e_{\bar{1},\bar{1}}). \quad (3.19)$$

Аналогичным образом, применяя к представлению (3.14) последовательно три раза формулу (1.3) с операторами $U_{1,0}(\alpha_2)$, $U_{0,-1}(\alpha_3)$ и $U_{1,-1}(\alpha_1)$, можно выразить спиновые операторы S_l^x , S_l^y , S_l^z и $(S_l^y)^2$ через новые (преобразованные) X -операторы.

$$S_l^\alpha = \sum_{n,m} s_{nm}^\alpha X_l^{nm}, \quad \alpha = x, y, z, \quad (3.20)$$

Тогда коэффициенты разложения операторов спина S_l^α по новым операторам Хаббарда X_l^{nm} будут представлять матричные элементы спиновых операторов по новым состояниям: $s_{n,m}^\alpha \equiv \langle n | S_l^\alpha | m \rangle$ ($\alpha = x, y, z$). Для оператора S_l^z :

$$\begin{aligned} s_{11}^z &= (\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)^2 - \sin^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_3, \\ s_{-1-1}^z &= (\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 \sin \alpha_3 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2)^2 - \cos^2 \alpha_1 \cos^2 \alpha_3, \\ s_{00}^z &= \sin^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3 - \sin^2 \alpha_3, \\ s_{10}^z = s_{01}^z &= -\frac{1}{2} \sin \alpha_1 (1 + \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_3 - \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \sin(2\alpha_2) \cos \alpha_3, \\ s_{-10}^z = s_{0-1}^z &= -\frac{1}{2} \cos \alpha_1 (1 + \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_3 + \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \sin(2\alpha_2) \cos \alpha_3, \\ s_{-11}^z = s_{1-1}^z &= \frac{1}{2} \cos 2\alpha_1 \sin 2\alpha_2 \sin \alpha_3 + \\ &+ \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 (\sin^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \cos^2 \alpha_3 - \cos^2 \alpha_2). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Для оператора S_l^x :

$$\begin{aligned} s_{11}^x &= \sqrt{2}(\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 - \sin \alpha_1 \sin \alpha_3 \cos \alpha_2)(\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \\ &+ \sin \alpha_1 \sin \alpha_3 \sin \alpha_2 + \sin \alpha_1 \cos \alpha_3), \\ s_{-1-1}^x &= \sqrt{2}(\sin \alpha_1 \sin \alpha_2 + \cos \alpha_1 \sin \alpha_3 \cos \alpha_2)(\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 - \\ &- \cos \alpha_1 \sin \alpha_3 \sin \alpha_2 - \cos \alpha_1 \cos \alpha_3), \\ s_{00}^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin 2\alpha_2 \cos^2 \alpha_3), \end{aligned}$$

$$s_{-11}^x = \frac{\cos 2\alpha_1}{\sqrt{2}} (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3 \cos 2\alpha_2) - \frac{\sin 2\alpha_1}{2\sqrt{2}} (\cos \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + \sin 2\alpha_2 (1 + \sin^2 \alpha_3)),$$

$$s_{10}^x = \frac{\cos \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos 2\alpha_2 \cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3) + \frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{2}} \left(\cos \alpha_2 \cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_2 \sin 2\alpha_3 \right),$$

$$s_{-10}^x = -\frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{2}} (\cos 2\alpha_2 \cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3) + \frac{\cos \alpha_1}{\sqrt{2}} \left(\cos \alpha_2 \cos 2\alpha_3 + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_2 \sin 2\alpha_3 \right),$$

$$s_{-11}^x = s_{1-1}^x, \quad s_{10}^x = s_{01}^x, \quad s_{-10}^x = s_{0-1}^x. \quad (3.22)$$

Для оператора S_l^y :

$$s_{11}^y = s_{-1-1}^y = s_{00}^y = 0,$$

$$\begin{aligned} s_{01}^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (-\sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + \cos \alpha_1 (\cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)), \\ s_{-10}^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \sin \alpha_1 (\cos \alpha_3 + \sin \alpha_2 \sin \alpha_3)), \\ s_{-11}^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3), \end{aligned}$$

$$s_{-11}^y = -s_{1-1}^y, \quad s_{10}^y = -s_{01}^y, \quad s_{-10}^y = -s_{0-1}^y. \quad (3.23)$$

Для оператора $(S_l^y)^2$:

$$\begin{aligned} \langle 1 | (S_l^y)^2 | 1 \rangle &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha_1 (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3) + \\ &\quad \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_1 \sin^2 \alpha_2 - \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3), \\ \langle -1 | (S_l^y)^2 | -1 \rangle &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_1 (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3) + \\ &\quad \frac{1}{2} \sin^2 \alpha_1 \sin^2 \alpha_2 + \frac{1}{2} \sin 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3), \\ \langle 0 | (S_l^y)^2 | 0 \rangle &= \frac{1}{2} (\sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 + 1 + \cos^2 \alpha_2 \cos^2 \alpha_3), \end{aligned}$$

$$\langle -1|(S_l^y)^2|1\rangle = \frac{1}{4} (\cos^2 \alpha_2 \sin^2 \alpha_3 - \sin \alpha_2 \sin 2\alpha_3 - \sin^2 \alpha_2) \sin 2\alpha_1 - \frac{1}{2} \cos 2\alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \sin \alpha_3 + \cos \alpha_3),$$

$$\begin{aligned} \langle -1|(S_l^y)^2|0\rangle &= \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_3 - \sin \alpha_2 \cos \alpha_3) + \\ &+ \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \left(\sin \alpha_2 \cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_2 \sin(2\alpha_3) \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 1|(S_l^y)^2|0\rangle &= \frac{1}{2} \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 (\sin \alpha_2 \cos \alpha_3 - \sin \alpha_3) + \\ &+ \frac{1}{2} \sin \alpha_1 \left(\sin \alpha_2 \cos 2\alpha_3 - \frac{1}{2} \cos^2 \alpha_2 \sin(2\alpha_3) \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 1|(S_l^y)^2|-1\rangle &= \langle -1|(S_l^y)^2|1\rangle, \quad \langle 0|(S_l^y)^2|-1\rangle = \langle -1|(S_l^y)^2|0\rangle, \\ \langle 0|(S_l^y)^2|1\rangle &= \langle 1|(S_l^y)^2|0\rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

В рамках приближения среднего поля следует заменить в гамильтониане $H^{(1)}$ спиновые операторы их средними значениями, т.е. диагональными матричными элементами $s_{n,n}^\alpha$, вычисленными по основному состоянию $|n\rangle$, отвечающему минимальному значению ϵ_n . Ниже мы будем выбирать набор решений уравнений (3.19) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$) так, чтобы состояние $|+1\rangle$ было основным.

Поскольку $s_{nn}^y = 0$ для любого n (см. (3.23)), то последние две суммы в формуле (3.12) для $H^{(1)}$ обращаются в ноль. Сокращение остальных слагаемых в (3.12) имеет место при выполнении равенств:

$$\begin{aligned} I_0(s_{1,1}^x \cos \theta_F - s_{1,1}^z \sin \theta_F) + J_0 S \sin(\theta_G - \theta_F) + h \sin \theta_F &= 0, \\ I_0(s_{1,1}^x \cos \theta_G - s_{1,1}^z \sin \theta_G) + J_0 S \sin(\theta_F - \theta_G) + h \sin \theta_G &= 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

используемых далее для определения равновесных значений углов θ_F и θ_G . Угол θ_L , введенный на Рис. 3.1 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 (3.19) и (3.25) для углов α_j ($j = 1, 2, 3$), θ_F и θ_G , с последующим выбором такого набора решений, который отвечает минимальному значению среднеполевой энергии всей системы:

$$E_{MF} = E_0 + N \epsilon_1, \quad (3.26)$$

где величины E_0 и ϵ_1 определены уравнениями (3.9) и (3.17) соответственно. В разделе 3.2., будут представлены фазовые $h - D$ -диаграммы SU3F, рассчитанные на основе изложенной здесь методики.

В рамках выбранного приближения энергия основного состояния E_{MF} определяется без учёта АФ. Поэтому вклады от последнего слагаемого в гамильтониане (3.8), квадратичные по бозе операторам, в выражении (3.26) 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 $H^{(2)}$ уже необходимо учитывать.

Для вычисления энергетического спектра в СВП, учитывая, что спектр $H_0(l)$ характеризуется тремя уровнями, а основным состоянием одноионного гамильтониана является состояние $|+1\rangle$, введём, следуя работам [43, 44] (см. Гл. 2), 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 нефизичные.

Используем представление (1.2) (см. Гл. 1) в формулах (3.20) получим

выражение S -операторов через бозе операторы:

$$\begin{aligned}
S_l^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(s_{0,1}^x(c_l^+ + c_l) + s_{1,1}^x(d_l^+ + d_l) + s_{1,0}^x(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + \right. \\
&\quad \left. s_{1,1}^x + (s_{0,0}^x - s_{1,1}^x)c_l^+ c_l + (s_{1,\bar{1}}^x - s_{1,1}^x)d_l^+ d_l \right], \\
S_l^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} [s_{0,1}^y(c_l^+ - c_l) + s_{1,1}^y(d_l^+ - d_l) + s_{1,0}^y(d_l^+ c_l - c_l^+ d_l)], \\
S_l^z &= s_{0,1}^z(c_l^+ + c_l) + s_{1,1}^z(d_l^+ + d_l) + s_{1,0}^z(d_l^+ c_l + c_l^+ d_l) + \\
&\quad s_{1,1}^z + (s_{0,0}^z - s_{1,1}^z)c_l^+ c_l + (s_{1,\bar{1}}^z - s_{1,1}^z)d_l^+ d_l, \\
(S_l^y)^2 &= \frac{1}{2} [((s_{1,0}^y)^2 - (s_{1,1}^y)^2)c_l^+ c_l + ((s_{1,0}^y)^2 - (s_{0,1}^y)^2)d_l^+ d_l - \\
&\quad - s_{1,0}^y s_{0,1}^y (d_l^+ + d_l) + s_{1,0}^y s_{1,1}^y (c_l^+ + c_l) + \\
&\quad + ((s_{0,1}^y)^2 + (s_{1,1}^y)^2) + s_{0,1}^y s_{1,1}^y (d_l^+ c_l + c_l^+ d_l)]. \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Подставляя их в $H^{(1)}$ и $H^{(2)}$ из (3.8) можно получить гамильтониан в представлении бозе операторов, однако из-за своей громоздкости оно не приводится. В полученном выражении для гамильтониана необходимо оставить только вклады, не превышающие второго порядка по a , b , c и d -операторам. Проводя Фурье-преобразование для перехода в квазиимпульсное представление,

$$\begin{aligned}
a_f &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} a_k, & b_g &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikg} b_k, \\
c_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} c_k, & d_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikl} d_k, \quad (3.28)
\end{aligned}$$

получаем искомый гамильтониан, который можно записать следующим образом:

$$H = E_{MF} + H_{SW}. \quad (3.29)$$

Здесь первое слагаемое E_{MF} отвечает энергии основного состояния в приближении среднего поля (см. формулу (3.26)), а второе слагаемое H_{SW} описывает

спин-волновые возбуждения и определяется выражением:

$$\begin{aligned}
H_{SW} = \sum_k \{ & E_a a_k^+ a_k + E_b b_k^+ b_k + E_c c_k^+ c_k + E_d d_k^+ d_k + \\
& J_+ (\gamma_k a_k^+ b_k + \gamma_k^* b_k^+ a_k) \} + J_- (\gamma_k a_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k^* a_k b_{-k}) + \\
& I_{0F}^+ (\gamma_k c_k^+ a_k + \gamma_k^* a_k^+ c_k) + I_{0F}^- (\gamma_k c_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* c_k a_{-k}) + \\
& I_{1F}^+ (\gamma_k d_k^+ a_k + \gamma_k^* a_k^+ d_k) + I_{1F}^- (\gamma_k d_k^+ a_{-k}^+ + \gamma_k^* d_k a_{-k}) + \\
& I_{0G}^+ (\gamma_k^* c_k^+ b_k + \gamma_k b_k^+ c_k) + I_{0G}^- (\gamma_k^* c_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k c_k b_{-k}) + \\
& I_{1G}^+ (\gamma_k^* d_k^+ b_k + \gamma_k b_k^+ d_k) + I_{1G}^- (\gamma_k^* d_k^+ b_{-k}^+ + \gamma_k d_k b_{-k}). \quad (3.30)
\end{aligned}$$

При записи этого выражения были введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
E_a &= -J_0 S \cos(\theta_F - \theta_G) + h \cos \theta_F - I_0 (s_{11}^z \cos \theta_F + s_{11}^x \sin \theta_F), \\
E_b &= -J_0 S \cos(\theta_G - \theta_F) + h \cos \theta_G - I_0 (s_{11}^z \cos \theta_G + s_{11}^x \sin \theta_G), \\
E_c &= \epsilon_0 - \epsilon_1, \quad E_d = \epsilon_{\bar{1}} - \epsilon_1, \quad J_{\pm} = \frac{J_0 S}{2} (\cos(\theta_F - \theta_G) \pm 1), \\
I_{nA}^{\pm} &= I_0 \sqrt{\frac{S}{2}} \left(s_{n1}^x \cos \theta_A - s_{n1}^z \sin \theta_A \pm \frac{s_{n1}^y}{i} \right), \\
&\quad n = \{0, \bar{1}\}, \quad A = \{F, G\}, \\
\gamma_k &= \frac{1}{3} \sum_{\delta} e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos \frac{k_z}{2} e^{i \frac{k_x}{2\sqrt{3}}} + e^{-i \frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right). \quad (3.31)
\end{aligned}$$

В сумме, определяющей инвариант треугольной решётки γ_k , вектор δ пробегает три значения: $\{\xi, -\zeta, \zeta - \xi\}$ (см. Рис. 2.1. Зона Бриллюэна, ограничивающая область значений квазиимпульса k , представлена на Рис. 2.11).

Для получения дисперсионного уравнения, аналогично Гл. 2, используется матричная запаздывающая ФГ $\langle\langle \mathbf{X}_{\mathbf{k}}^+ | \mathbf{X}_{\mathbf{k}} \rangle\rangle_{\omega}$, (2.39). Из требования существования нетривиальных решений уравнения движения для $\langle\langle \mathbf{X}_{\mathbf{k}}^+ | \mathbf{X}_{\mathbf{k}} \rangle\rangle_{\omega}$ следует уравнение на спектр:

$$\begin{vmatrix} \omega - \mathbf{A}_{\mathbf{k}} & -\mathbf{B}_{\mathbf{k}} \\ \mathbf{B}_{\mathbf{k}} & \omega + \mathbf{A}_{\mathbf{k}} \end{vmatrix} = 0, \quad (3.32)$$

где

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} E_a & J_+ \gamma_k & I_{0F}^+ \gamma_k^* & I_{1F}^+ \gamma_k^* \\ J_+ \gamma_k^* & E_b & I_{0G}^+ \gamma_k & I_{1G}^+ \gamma_k \\ I_{0F}^+ \gamma_k & I_{0G}^+ \gamma_k^* & E_c & 0 \\ I_{1F}^+ \gamma_k & I_{1G}^+ \gamma_k^* & 0 & E_d \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

и

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 0 & J_- \gamma_k & I_{0F}^- \gamma_k^* & I_{1F}^- \gamma_k^* \\ J_- \gamma_k^* & 0 & I_{0G}^- \gamma_k & I_{1G}^- \gamma_k \\ I_{0F}^- \gamma_k & I_{0G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \\ I_{1F}^- \gamma_k & I_{1G}^- \gamma_k^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Дисперсионное уравнение (3.32) является уравнением четвёртой степени относительно ω^2 , а его решения ε_{jk} ($j = 1, \dots, 4$) представляют четыре ветви спектра коллективных спиновых возбуждений рассматриваемого SU3F.

3.2. Фазовая диаграмма квантового SU3F в координатах магнитное поле - анизотропия

Обсуждение фазовой диаграммы SU3F в координатах магнитное поле - анизотропия проводится отдельно для трёх вариантов соотношений между обменными параметрами: 1) $I < J$; 2) $I > J$; 3) $I = J$.

3.2.1. Фазовая диаграмма квантового SU3F в случае $I < J$

На Рис. 3.2 изображена фазовая диаграмма основного состояния SU3F, рассчитанная, согласно методике, изложенной в разделе 3.1., при соотношении обменных интегралов $I/J = 0.8$. Видно, что в рассматриваемом случае реализуются три фазы: 1) Λ -фаза; 2) веерная W-фаза; 3) ФМ фаза.

В Λ -фазе вектор среднего значения спина L -подрешётки $\mathbf{R}_L$ направлен вдоль направления магнитного поля (оси Oz), а векторы средних значений

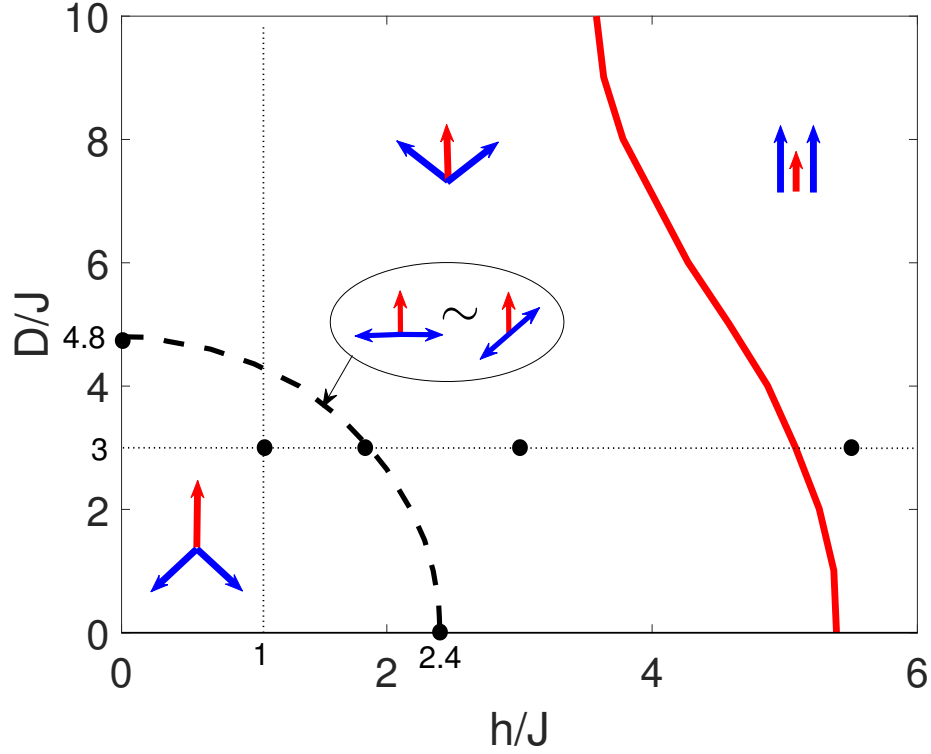


Рис. 3.2. Фазовая $h - D$ -диаграмма основного состояния SU3F при $I/J = 0.8$. Чёрной штриховой линии отвечает граница между перевёрнутый- Y - и W -фазами, а сплошной красной – между W - и ФМ фазами. На пиктограммах, условно изображающих магнитную структуру SU3F, красная стрелка символизирует вектор $\mathbf{R}_L$, 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 $\frac{1}{2}$ становятся эффективно независимыми.

спинов F - и G -подрешёток $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ составляют с осью Oz 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 веерной W -фазе углы θ_F и θ_G также равны по модулю и противоположны по знаку, однако, в отличие от Λ -фазы, интервал изменения модулей этих углов другой: $[0, \pi/2]$. В этом случае проекции всех трёх векторов $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ на ось Oz положительны. Граница раздела Λ - и W -фаз на Рис. 3.2 обозначена штриховой линией. Справа от красной линии на фазовой диаграмме реализуется ФМ фа-

за: векторы средних значений спинов из L -, F - и G -подрешёток 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 ноль при некотором значении поля, зависящем от параметра ОА (см. красную линию на Рис. 3.2). Сказанное выше на Рис. 3.2 поясняется, спомощью трех пиктограмм, условно изображающих магнитную структуру в каждой из трёх областей фазовой диаграммы.

Для понимания представленной фазовой диаграммы рассчитаем зависимости параметров порядка SU3F от напряжённости магнитного поля h при фиксированной величине параметра ОА D и от параметра ОА D при фиксированной величине напряжённости магнитного поля h .

Средние значения спинов R_F и R_G в F - и G -подрешётках можно рассчитывать, воспользовавшись представлением Гольштейна-Примакова (2.16), согласно которому

$$\begin{aligned} R_F &= \langle S_f^{z'} \rangle = S - n_a, \\ R_G &= \langle S_g^{z''} \rangle = S - n_b, \end{aligned} \quad (3.35)$$

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 уравнения движения на матричную запаздывающую ФГ $\langle \langle \mathbf{X}_{\mathbf{k}}^+ | \mathbf{X}_{\mathbf{k}} \rangle \rangle_\omega$, введенную в разделе 3.1..

Средний магнитный момент L -подрешётки R_L можно найти по формуле

$$R_L = \sqrt{(R_L^z)^2 + (R_L^x)^2}, \quad (3.36)$$

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 (3.27), выражающих спиновые операторы L -подрешётки через бозе операторы. Поскольку суммарный магнитный момент $\mathbf{M} = \mathbf{R}_F + \mathbf{R}_G + \mathbf{R}_L$ направлен

вдоль внешнего магнитного поля (т.е. оси Oz), то его поперечная компонента должна тождественно обращаться в ноль

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

а продольная компонента равна:

$$M = R_L^z + R_F \cos \theta_F + R_G \cos \theta_G. \quad (3.37)$$

Среднее значение квадрупольного момента [59]

$$Q_2^0(l) = 3 (S_l^y)^2 - 2 \quad (3.38)$$

рассчитывается аналогичным образом после усреднения соответствующих формул (3.27).

Графики, демонстрирующие зависимость полного момента M , средних значений магнитных моментов R_L , $R_{F(G)}$ и квадрупольного момента Q_2^0 от величины напряжённости внешнего магнитного поля h при значении параметра ОА $D/J = 3$ и соотношении между обменными интегралами $I/J = 0.8$, представлены на Рис. 3.3. Изменению магнитного поля на этом рисунке отвечает движение по горизонтальной пунктирной линии на фазовой диаграмме (см. Рис. 3.2). Видно, что в точке перехода из веерной W -фазы в ФМ фазу все кривые на Рис. 3.3 испытывают излом. При этом значения M и R_L ожидаемо увеличиваются с увеличением напряжённости магнитного поля h , а квадрупольный момент $|Q_2^0|$ - уменьшается.

Зависимости параметров порядка M , R_L , R_F , R_G и $|Q_2^0|$ от параметра ОА D при величине напряжённости магнитного поля $h/J = 1$ представлены на Рис. 3.4. Изменение параметра D на этом рисунке отвечает движению по вертикальной пунктирной линии на фазовой диаграмме (см. Рис. 3.2). Видно, что при пересечении границы Λ - и W - фаз зависимости параметров $R_{F(G)}$ от параметра ОА D испытывают излом, а квадрупольный момент $|Q_2^0|$ выходит на насыщение. Среднее значение момента L -подрешётки быстро уменьшается

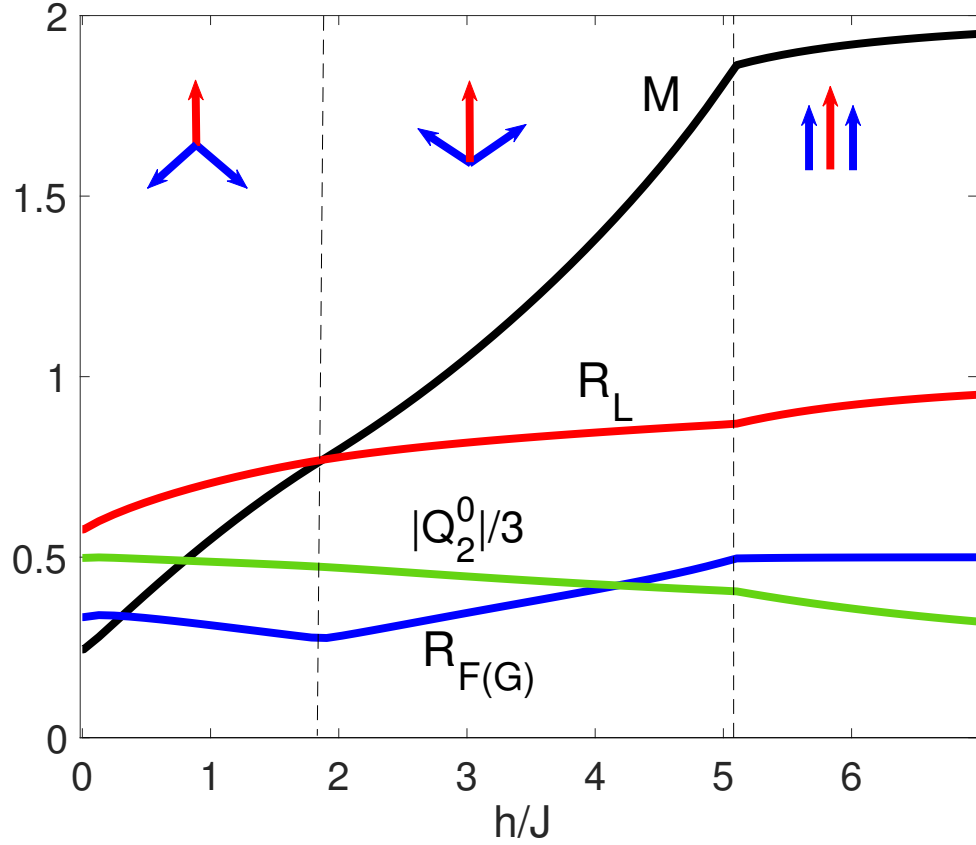


Рис. 3.3. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (чёрная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зелёная линия) от напряжённости магнитного поля h . Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $D/J = 3$. Три пиктограммы, составленные из одной красной и двух синих стрелок, имеют тот же смысл, что и на Рис. 3.2.

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 уменьшается проигрыш в обменной энергии между спинами $S = 1$ и $S = \frac{1}{2}$.

Важной особенностью фазовой диаграммы, представленной на Рис. 3.2, является то, что на всей границе между Λ - и W -фазами (чёрная штриховая линия) угол между векторами $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ равен π . В этом случае из выражений

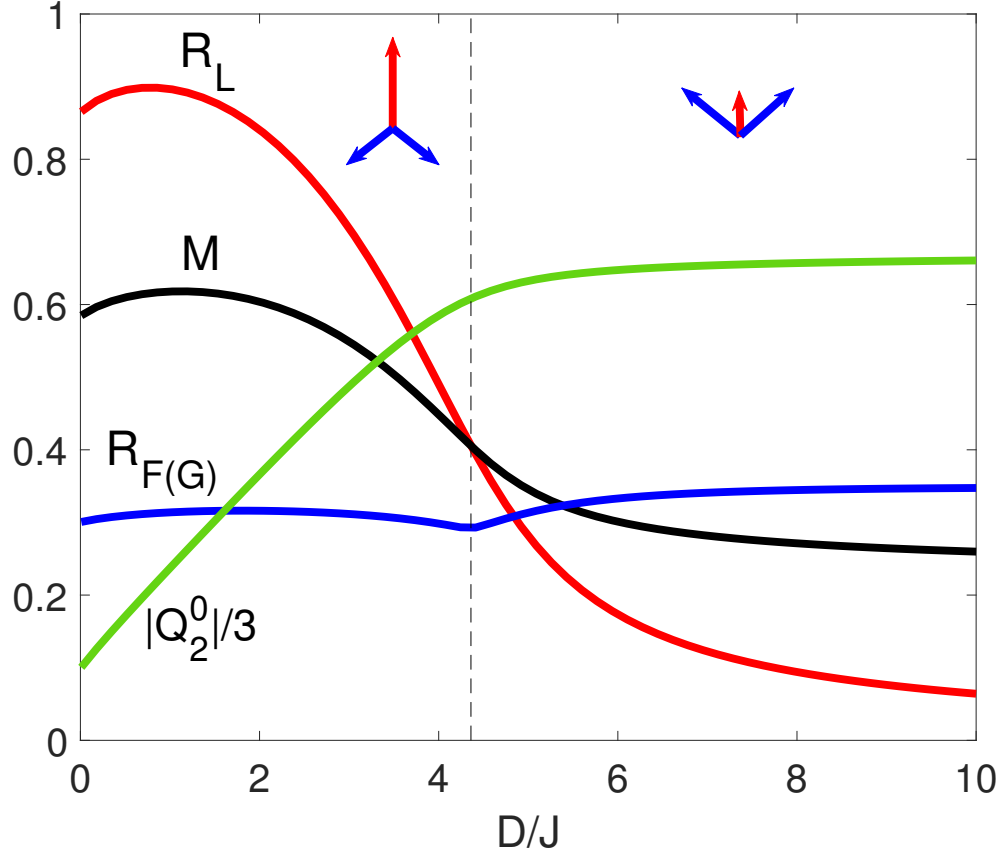


Рис. 3.4. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (чёрная линия) и $|Q_2^0|/3$ (зелёная линия) от параметра ОА D . Соотношение между обменными интегралами $I/J = 0.8$, а $h/J = 1$.

(3.11) для эффективных полей находим:

$$\bar{H}_z = -h_L, \quad \bar{H}_x = 0. \quad (3.39)$$

При учёте этих соотношений и при условии $h_L \neq 0$, решения уравнений (3.19) на углы α_j ($j = 1, 2, 3$) имеют вид:

$$\tan 2\alpha_1 = \frac{D}{2h_L}(-1)^{n+m}, \quad \alpha_2 = \pi n, \quad \alpha_3 = \pi m, \quad (3.40)$$

где n и m – целые числа. Подстановка этих решений в выражения для матричных элементов спиновых операторов (3.21, 3.22) дает:

$$s_{11}^z = \cos 2\alpha_1, \quad s_{11}^x = 0. \quad (3.41)$$

Поскольку $s_{11}^x = 0$ и $\theta_F - \theta_G = \pi$, то из уравнений (3.25) на углы θ_F и θ_G находим условие

$$s_{11}^z = h/I_0, \quad (3.42)$$

которому должен удовлетворять элемент s_{11}^z на границе раздела Λ - и W -фаз. Уравнение, описывающее границу раздела этих фаз, нетрудно получить из условия совместности трёх уравнений, связывающих угол α_1 и матричный элемент s_{11}^z в формулах (3.40), (3.41) и (3.42). В результате получается следующая связь между параметрами модели и магнитным полем:

$$D = \frac{2g_L}{g} \sqrt{I_0^2 - h^2}. \quad (3.43)$$

Это выражение описывает аналитически положение штриховой линии на фазовой диаграмме 3.2.

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

Действительно, подставляя решения (3.40) на углы α_j ($j = 1, 2, 3$) в формулы (3.17) и (3.18), а также фиксируя в выражении (3.9) 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 Λ - и W -фаз (т.е. на штриховой линии на Рис. 3.2), энергия основного состояния $E_{MF} = E_0 + N\epsilon_1$ (см. (3.26)) 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 -подрешётки

со стороны F - и G -подсистем, компенсируют друг друга (см. формулу (3.11)). В результате L -подрешётка перестаёт «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 -подрешётки перестают «чувствовать» L -подсистему, поскольку создаваемые ею эффективные поля в F - и G -подрешётках полностью компенсируются внешним магнитным полем h . Действительно, как следует, например, из выражения (3.30), величины E_a и E_b (см. обозначения (3.31)) являются теми самими эффективными полями, которые действуют на спины, соответственно, из F и G -подрешёток. Поскольку в точках, лежащих на штриховой линии фазовой диаграммы 3.2, выполняются соотношения (3.41) и (3.42), 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 штриховой линии на фазовой диаграмме (Рис. (3.2)), $SU3F$ распадается на две эффективно невзаимодействующие подсистемы, одна из которых образована из спинов с $S = 1$ (L -подрешётка), а вторая – из спинов с $S = \frac{1}{2}$ (F - и G -подрешётки). При этом спины с $S = 1$ ведут себя как парамагнетик во внешнем магнитном поле, поскольку они продолжают испытывать действие магнитного поля h_L , а взаимодействие между ними отсутствует. Спины с $S = \frac{1}{2}$ ведут себя как двухподрешёточный (F и G) коллинеарный антиферромагнетик в эффективно нулевом поле. Последнее обстоятельство, допускающее произвольную ориентацию вектора антиферромагнетизма в плоскости zOx , обуславливает дополнительное вырождение основного состояния.

3.2.2. Фазовая диаграмма квантового $SU3F$ в случае $I > J$

При $I > J$ фазовая диаграмма $SU3F$ в магнитном поле качественно меняется. На Рис. 3.5 представлена фазовая диаграмма, рассчитанная при соотноше-

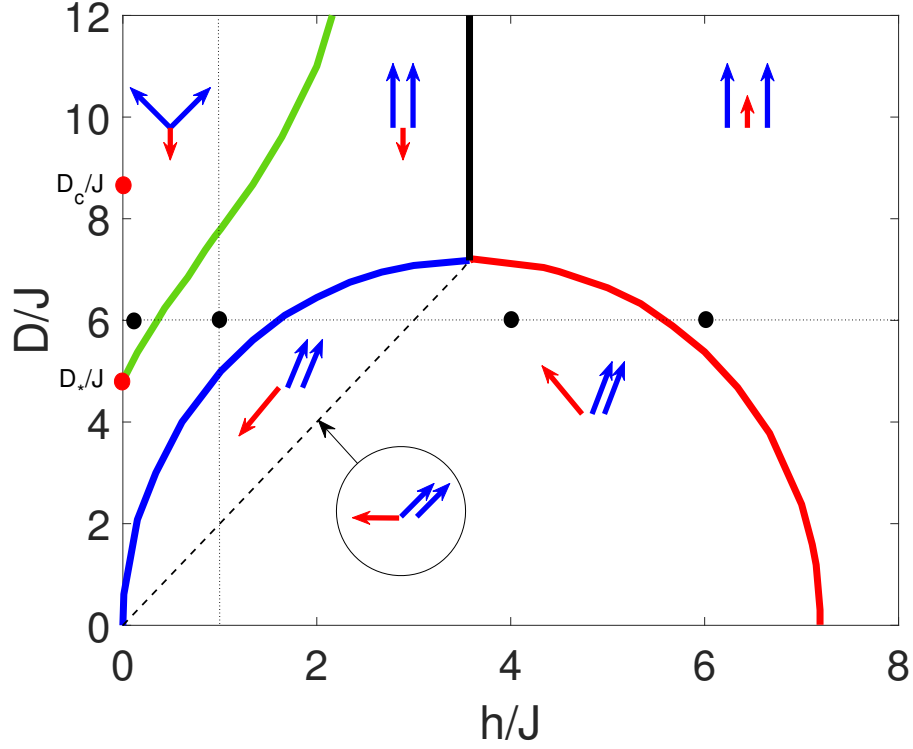


Рис. 3.5. Фазовая диаграмма основного состояния $SU3F$ при $I/J = 1.2$. Зелёная линия обозначает границу раздела между Y -фазой и коллинеарной ферримагнитной uud -фазой, синяя линия – между коллинеарной ферримагнитной uud -фазой и $\bar{V}$ -фазой, чёрная линия – между ФМ фазой и коллинеарной ферримагнитной uud -фазой, красная линия – между ФМ фазой и V -фазой, штриховая линия – между $\bar{V}$ и V -фазой (на этой линии $\theta_L = -\pi/2$). Критическое значение параметра ОА $D_c/J = 8.64$.

нии обменных параметров $I/J = 1.2$. Видно, что в этом случае реализуются четыре магнитные фазы: 1) Y -фаза; 2) коллинеарная ферримагнитная uud -фаза; 3) $V(\bar{V})$ -фаза; 4) ФМ фаза.

В Y -фазе вектор $\mathbf{R}_L$ среднего значения спина в L -подрешётке (красная стрелка на пиктограммах Рис. 3.5) направлен против магнитного поля (оси Oz), а векторы $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ среднего спина в F - и G -подрешётках (синие стрелки) составляют одинаковые по модулю, но противоположные по знаку углы с осью Oz : $\theta_F = -\theta_G$. При этом $|\theta_{F(G)}| \in [0, \pi/2]$. Красной точкой при

$D/J = 8.64$ обозначено критическое значение параметра ОА D_c , выше которого система переходит в КАФМ фазу в случае $h = 0$.

При переходе из Y -фазы в коллинеарную ферримагнитную uud -фазу углы θ_F и θ_G одновременно обращаются в ноль и все три вектора $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ оказываются коллинеарны: первые два направлены по полю, а третий – против. Красной точкой на фазовой диаграмме (Рис. 3.5) при $D = D_*$ обозначен переход из коллинеарной ферримагнитной uud -фазой в Y -фазу при $h = 0$.

В области под синей и красной кривыми на Рис. 3.5 реализуется так называемая V -фаза, в которой вектор $\mathbf{R}_L$ составляет с осью Oz 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 штриховой линией (см. Рис. 3.5) 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 ФМ фазе все три вектора $\mathbf{R}_F$, $\mathbf{R}_G$ и $\mathbf{R}_L$ ориентированы вдоль направления 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. 3.5).

На Рис. 3.6 представлены зависимости величин R_L , $R_{F(G)}$, M и $|Q_2^0|$ от величины напряжённости внешнего магнитного поля h при $D/J = 6$. Это отвечает движению по горизонтальной пунктирной линии на фазовой диаграмме 3.5. Видно, что изменения $R_{F(G)}$ и $|Q_2^0|$ при увеличении поля h на указанном интервале незначительны, причём сокращение среднего значения спина $R_{F(G)}$ из-за АФ относительно невелико. Средний момент L -подрешётки, напротив, подавлен существенно как за счет АФ, так и ОА. В коллинеарной

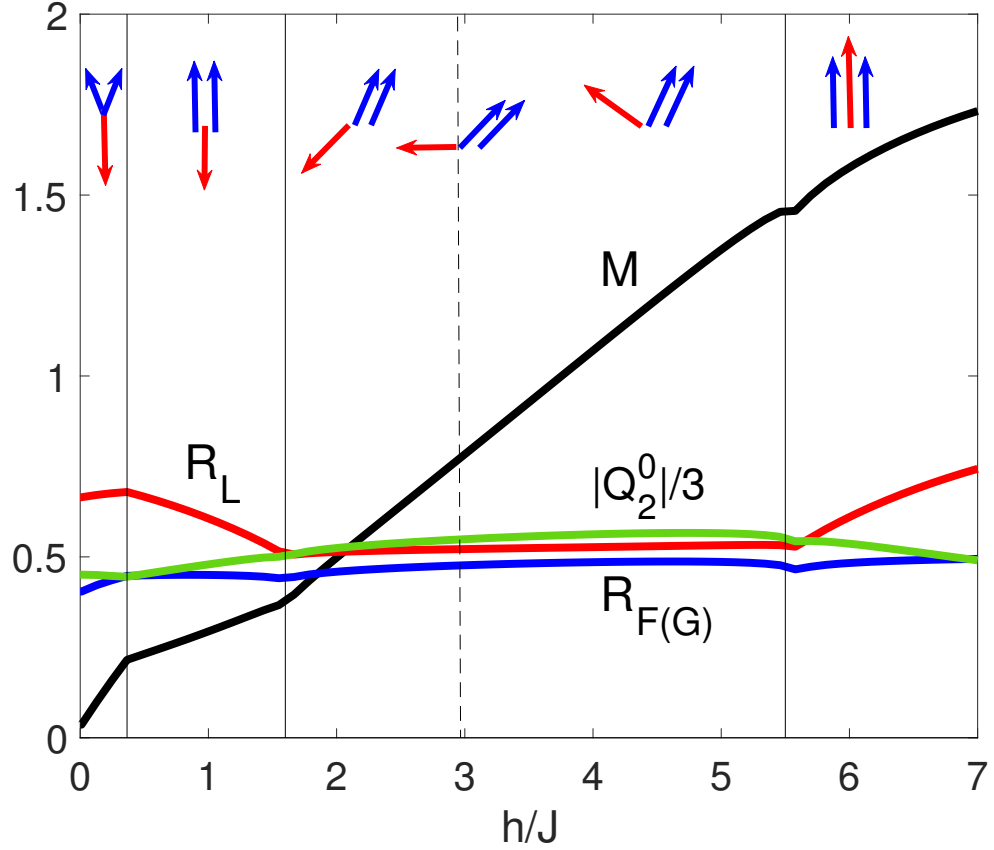


Рис. 3.6. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (чёрная линия) и $|Q_2^0|$ (зелёная линия) от напряжённости внешнего магнитного поля h при $I/J = 1.2$ и $D/J = 6$.

ферромагнитной uud -фазе вектор $\mathbf{R}_L$ направлен против поля, и величина R_L ожидаемо уменьшается с увеличением h . В ФМ фазе вектор $\mathbf{R}_L$ направлен по полю, и величина R_L — увеличивается.

Важный факт, который демонстрируют графики на Рис. 3.6, состоит в том, что эволюция магнитной структуры происходит в той же последовательности, что и для АФМТР с величиной спина $S = \frac{1}{2}$, но без ОА [1, 22]. При этом, если в АФМТР существование протяженной коллинеарной uud -фазы может быть описано только при учёте АФ (снимающих случайное вырождение), то в данном подходе в SU3F эта фаза возникает исключительно за счёт ОА. Кроме того, поведение полного момента M качественно воспроизводит

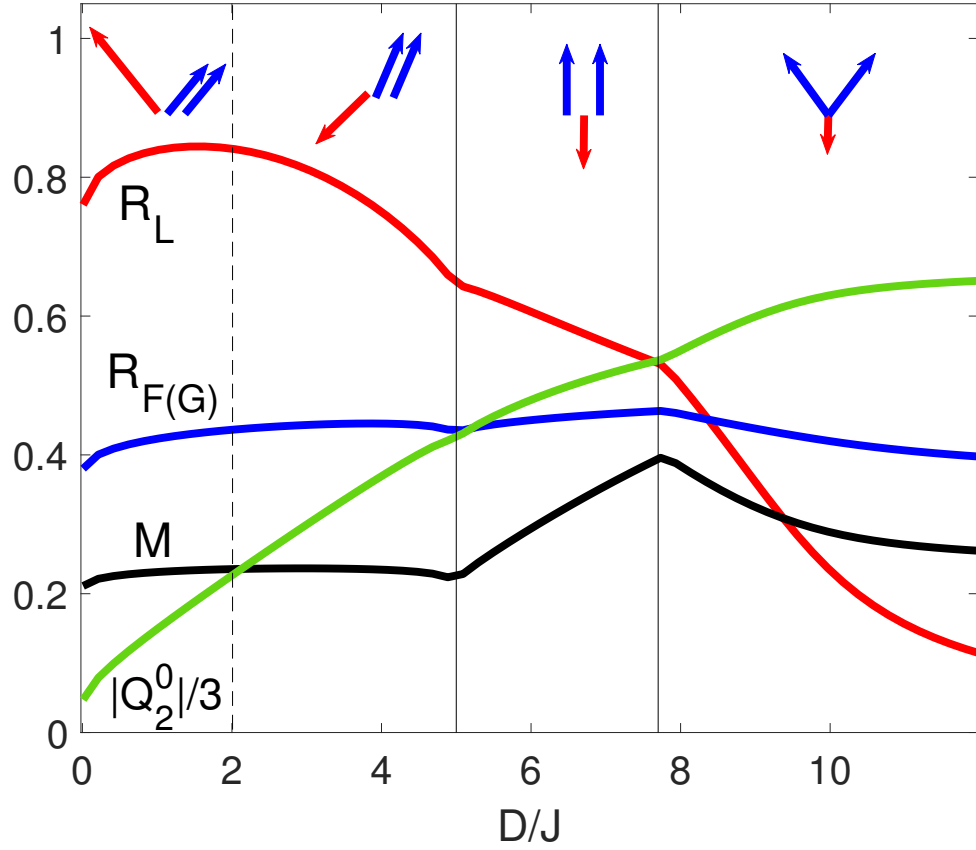


Рис. 3.7. Зависимость величин R_L (красная линия), $R_{F(G)}$ (синяя линия), M (чёрная линия) и $|Q_2^0|$ (зелёная линия) от параметра ОА D для $I/J = 1.2$ и при $h/J = 1$.

основные этапы эволюции M в АФМТР: монотонное возрастание M в Y -, $\bar{V}$ -, и V -фазах; пологий участок в коллинеарной ферромагнитной uid -фазе (то, что в АФМТР принято называть «1/3-плато намагниченности») и область насыщения M в коллинеарной ФМ фазе, которая, однако, вследствие учёта ОА, слабо выражена.

Отметим также, что при увеличении параметра ОА интервал существования общей V -фазы на Рис. 3.6 сжимается, и, как следует из фазовой диаграммы на Рис. 3.5, при $D/J > 7$ этот интервал схлопывается в точку.

На Рис. 3.7 представлена зависимость величин R_L , $R_{F(G)}$, M и $|Q_2^0|$ от параметра ОА D при $I/J = 1.2$ и величине напряжённости магнитного поля

$h/J = 1$. Эти зависимости строятся при движении вдоль вертикальной пунктирной линии на фазовой диаграмме 3.5. Видно, что квадрупольный момент $|Q_2^0|$ при увеличении параметра ОА D ожидаемо возрастает, в то время как спиновый момент R_L из L -подрешётки после небольшого увеличения в области малых полей далее монотонно уменьшается. Спиновые моменты $R_{F(G)}$ из F - и G -подрешёток не меняют существенно своих значений на всём интервале изменения параметра ОА D . Поэтому заметное увеличение полного момента M в коллинеарной ферримагнитной uud -фазе связано не с изменением ориентации моментов или абсолютных значений $R_{F(G)}$, а именно с уменьшением величины R_L за счёт ОА. При переходе в Y -фазу полный момент M начинает уменьшаться, поскольку поворот векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ вокруг оси Oy уменьшает их проекцию на ось Oz .

Три вертикальные линии на Рис. 3.7 разделяют четыре описанные выше фазы. При переходе из V -фазы в коллинеарную ферримагнитную uud -фазу и из коллинеарной ферримагнитной uud -фазы в Y -фазу все зависимости параметров порядка испытывают излом. В тоже время переход из V -фазы в $\bar{V}$ -фазу не сопровождается никакими аномалиями в представленных зависимостях.

Отметим, что изменение значения g_L -фактора приводит исключительно к масштабированию фазовых диаграмм вдоль оси Ox на Рис. 3.2, 3.5.

3.2.3. Вырождение основного состояния SU3F при $I = J$

Случай $I = J$ является особым, поскольку классический аналог гамильтониана SU3F, как будет показано, имеет непрерывное случайное вырождение.

Действительно, определим зависящий от параметра λ гамильтониан:

$$\begin{aligned}
 H_\lambda = & J \sum_{\{fg\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g + \lambda J \sum_{\{fl\}} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_l + \lambda J \sum_{\{gl\}} \mathbf{S}_g \mathbf{S}_l + \\
 & + D \sum_l (S_l^y)^2 - \mathbf{h} \left(\sum_f \mathbf{S}_f + \sum_g \mathbf{S}_g + \lambda \sum_l \mathbf{S}_l \right), \quad (3.44)
 \end{aligned}$$

где направление магнитного поля $\mathbf{h} = g\mu_B \mathbf{H}$ в общем случае произвольно. Все обозначения в формуле (3.44) такие же, как и в гамильтониане (3.1). Видно, что если для λ удовлетворяются сразу два условия: $\lambda = I/J = g_L/g$, и поле $\mathbf{h}$ направлено вдоль оси Oz , то гамильтониан (3.44) совпадает с оператором H , определённым формулой (3.1).

С другой стороны, нетрудно проверить, что гамильтониан (3.44) с точностью до константы

$$-JN \left(\frac{3}{2} \lambda^2 S_L(S_L + 1) + \frac{9}{4} + \frac{h^2}{6J^2} \right), \quad (S_L = 1) \quad (3.45)$$

может быть представлен в виде

$$H_\lambda = D \sum_l (S_l^y)^2 + \frac{J}{4} \sum_p \left(\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda \mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J} \right)^2, \quad (3.46)$$

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 подрешётке внутри p -плакета.

Таким образом, если для параметров SU3F выполняется соотношение

$$\frac{I}{J} = \frac{g_L}{g}, \quad (3.47)$$

то гамильтониан SU3F в выражении (3.1) может быть представлен в виде (3.46) с $\mathbf{h}$ направленным вдоль оси Oz .

Если теперь вместо операторов спина в (3.46) рассмотреть классические моменты, т.е. обычные векторы фиксированной длины, то, как нетрудно заметить, минимальное значение гамильтониана (3.46) будет достигаться при равенстве нулю обоих его слагаемых. Обращение в ноль первого слагаемого означает, что спины L -подрешётки лежат в плоскости «легкого намагничивания» zOx . Требование обращения в ноль второго слагаемого в (3.46) сводится к уравнению

$$\mathbf{S}_{pF} + \mathbf{S}_{pG} + \lambda \mathbf{S}_{pL} - \frac{\mathbf{h}}{3J} = 0. \quad (3.48)$$

Очевидно, что в определённом интервале значений магнитных полей h , это уравнение может быть удовлетворено бесконечным множеством решений, т.е. ориентаций трёх векторов $\mathbf{R}_L$, $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, даже в том случае, когда поле $\mathbf{h}$ не лежит в плоскости zOx . Кроме того, если направление магнитного поля параллельно плоскости zOx (как в рассматриваемом нами случае), то ориентация векторов $\mathbf{R}_L$, $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$, реализующая минимум гамильтониана (3.46), может и не быть компланарна с плоскостью zOx .

Проведенный анализ классического предела гамильтониана (3.46) позволяет предположить, что отмеченное (непрерывное) вырождение основного состояния $SU3F$ будет иметь место и в квантовом случае при выполнении соотношения (3.47). Выполненные нами расчёты 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 величиной спина $S = \frac{1}{2}$ [22]. Как было впервые показано в работе [1], указанное вырождение может быть снято при учёте нулевых квантовых колебаний. Такой подход требует учёта более высоких порядков (по сравнению с гармоническим приближением, использованным в данном подходе) 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 (3.47), из-за отсутствия конкретики основного состояния проводится не будет.

3.3. Спектр коллективных спиновых возбуждений квантового $SU3F$ в магнитном поле

Спектральные свойства $SU3F$ в нулевом магнитном поле были подробно исследованы в Гл. 2. В данном разделе проведён анализ изменений спектра

в ненулевом магнитном поле при фиксированной величине параметра ОА. Четыре дисперсионные ветви $\varepsilon_{j\mathbf{k}}$ ($j = 1, \dots, 4$) рассчитывались для каждого набора параметров модели на основе уравнения (3.32), полученного в разделе 3.1.

На Рис. 3.8 представлены результаты численных расчётов дисперсионных кривых для четырёх значений магнитного поля при параметрах модели $I/J = 0.8$ и $D/J = 3$. На фазовой диаграмме Рис. 3.2 указанным четырём значениям поля h отвечают четыре чёрные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной линии. Видно, что при $h/J = 1$ реализуется Λ -фаза; при $h/J = 1.87$ – АФМ фаза для F - и G -подрешёток и парамагнитной фазой для L -подсистемы; при $h/J = 3$ – веерная W -фаза и при $h/J = 5.5$ – ФМ фаза. На каждом из четырёх графиков Рис. 3.8 имеется четыре дисперсионные ветви в соответствии с четырьмя типами введённых бозонов. Но только в отношении одной ветви (чёрной на всех графиках) можно утверждать, что её природа почти полностью определяется высокоэнергетическими d -бозонами; остальные три ветви, в той или иной степени, формируются с учётом гибридизации состояний a -, b - и c -бозонов.

Важное наблюдение состоит в том, что на трёх первых графиках 3.8a), b), c) имеется как минимум одна Голдстоуновская мода (синие кривые), связанная с нарушением симметрии основного состояния относительно вращения спинов F - и G -подрешёток на один и тот же угол относительно направления магнитного поля (ось Oz). В ФМ фазе (Рис. 3.8d) основное состояние не нарушает указанную симметрию и, соответственно, Голдстоуновская (безщелевая) мода отсутствует.

Кроме того, на Рис. 3.8b Голдстоуновских мод две (совпадающие синяя и красная кривые). Происхождение второй моды связано с обсуждавшейся в конце раздела 3.2.1. особенностью точек фазовой диаграммы, лежащих на штриховой линии (см. Рис 3.2). В этом случае моменты $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ лежат в плоскости zOx вдоль одной линии и противоположно направлены, а энергия

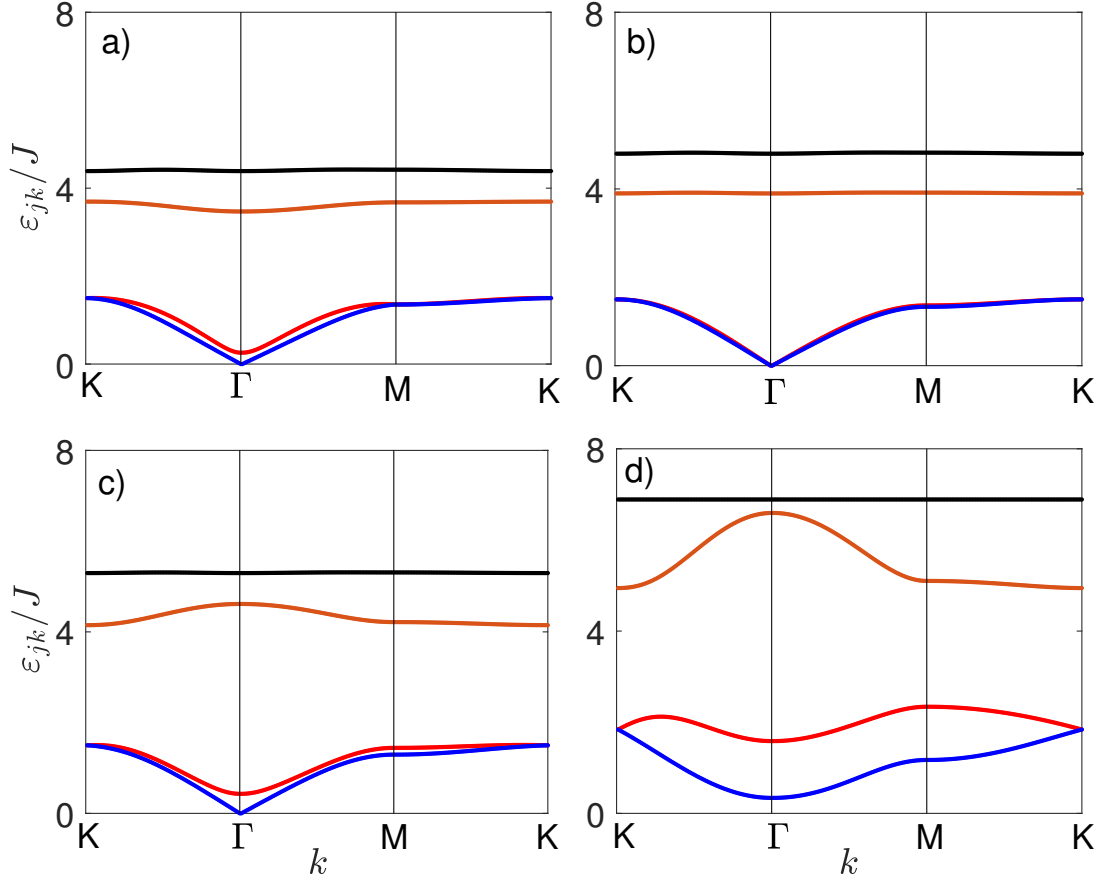


Рис. 3.8. Спектр коллективных спиновых возбуждений при $I/J = 0.8$, $D/J = 3$ для четырёх величин напряженности внешнего магнитного поля: а) $h/J = 1$; б) $h/J = 1.87$; в) $h/J = 3$; г) $h/J = 5.5$. Вектор k пробегает по треугольнику $\triangle \Gamma KM$ в зоне Бриллюэна (см. рисунок 2.11).

системы оказывается вырождена относительно вращения линии векторов $\mathbf{R}_F$ и $\mathbf{R}_G$ вокруг оси Oy .

Как отмечалось в разделе 3.2.1., такое поведение связано с обращением эффективных полей в ноль и фактической независимостью L -подсистемы от F - и G -подсистем. В такой ситуации узлы L -подрешётки оказываются эффективно изолированными (в том числе друг от друга), чем, в частности, и объясняется бездисперсное поведение двух высокоэнергетических ветвей (чёрной и коричневой) на Рис. 3.8б.

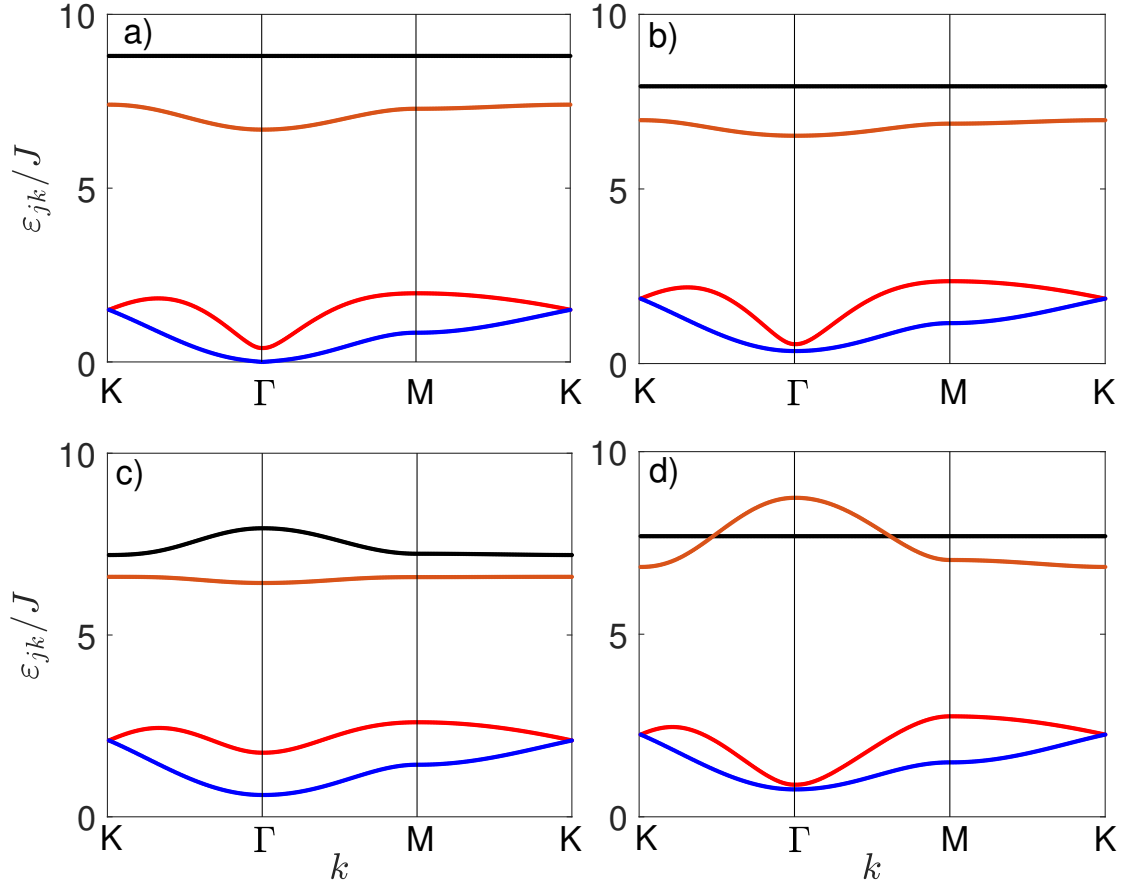


Рис. 3.9. Спектр коллективных спиновых возбуждений при $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ для четырёх значениях напряженности внешнего магнитного поля: а) $h/J = 0.3$; б) $h/J = 1$; в) $h/J = 4$; г) $h/J = 6$. Вектор k пробегает по треугольнику $\triangle \Gamma KM$ в зоне Бриллюэна (см. рисунок 2.11).

На Рис. 3.9 представлены графики спектра коллективных спиновых возбуждений, состоящие из четырёх ветвей ε_{jk} рассчитанные при параметрах модели: $I/J = 1.2$, $D/J = 6$ для четырёх значений внешнего магнитного поля: $h/J = 0.3, 1, 4$ и 6 . На фазовой диаграмме (Рис. 3.5) указанным четырём значениям поля h отвечают четыре чёрные точки, лежащие на горизонтальной пунктирной линии. При увеличении магнитного поля h в указанных точках фазовой диаграммы последовательно реализуются четыре фазы: 1) Y -фаза при $h/J = 0.3$; 2) коллинеарная ферромагнитная uud -фаза при $h/J = 1$; 3)

V -фаза при $h/J = 4.3$; 4) ФМ фаза при $h/J = 6$.

Из графиков, представленных на Рис. 3.9, видно, что Голдстоуновская мода реализуется только в первом случае (Рис. 3.9а), поскольку нарушение симметрии основного состояния (относительно вращений вокруг оси Oz) имеет место только в Y -фазе. Во всех других областях фазовой диаграммы на Рис. 3.5 спектр возбуждения спиновых волн всегда щелевой.

Исследование фазовых диаграмм, спектральных и динамических свойств модели в случае, когда внешнее магнитное поле не находится в плоскости ферритмагнетика, не было проведено, поскольку эта задача является более трудоёмкой как с теоретической так и с технической точки зрения. В частности, при такой ситуации необходимо рассматривать возможность существования не только планарной структуры. В связи с чем необходимо вводить и находить тангенциальные углы F — и G —подрешёток. Эти и другие усложнения приводят к увеличению количества переменных, что в свою очередь требует применения дополнительных методов оптимизации расчётов и значительного увеличения вычислительных мощностей. Тем не менее такая задача является следующим шагом к исследованию SU3F и будет выполнена в будущем.

Глава 4

Температура Нееля квазидвумерного АФМТР с произвольным спином

4.1. Модель квазидвумерного АФМТР с произвольным спином

При формулировке гамильтониана рассматриваемого АФМТР будем ориентироваться на структуру отмеченных в Гл. 1 соединений: $Ba_3CoSb_2O_9$ [2–6]; Cs_2CoBr_4 [7]; $CsYbSe_2$ [8]; $CsCeSe_2$ [9]; $CeCd_3As_3$ [11]; $RbFe(MoO_4)_2$ [12–15]; $Na_2BaT(PO_4)_2$ ($T = Co, Ni, Mn$) [16–19]. Эти соединения обладают слоистой кристаллической структурой. В пределах каждого слоя магнитоактивные ионы образуют треугольную решётку, а обменное взаимодействие между ближайшими спинами в каждом слое носит антиферромагнитный характер. Ионы из разных слоев расположены строго друг над другом и слабо взаимодействуют антиферромагнитным образом. Однако, для простоты будем считать, что обменная связь между ближайшими спинами из разных слоев ферромагнитна. Кроме того, все прочие взаимодействия, присущие реальным соединениям, такие как дальние обменные взаимодействия или эффекты анизотропии, учтены не будут.

Как известно, при низких температурах в АФМТР возникает дальний магнитный порядок со «120⁰-упорядочением». Поэтому с самого начала магнитную структуру каждого слоя рассматриваемого АФМТР будем представлять в виде трех взаимопроникающих треугольных подрешёток (обозначаемых как и ранее символами L , F и G) так, что в пределах каждой из подрешёток направления всех спинов одинаковы (см. Рис. 4.1).

С учётом сказанного гамильтониан квазидвумерного АФМТР запишем в

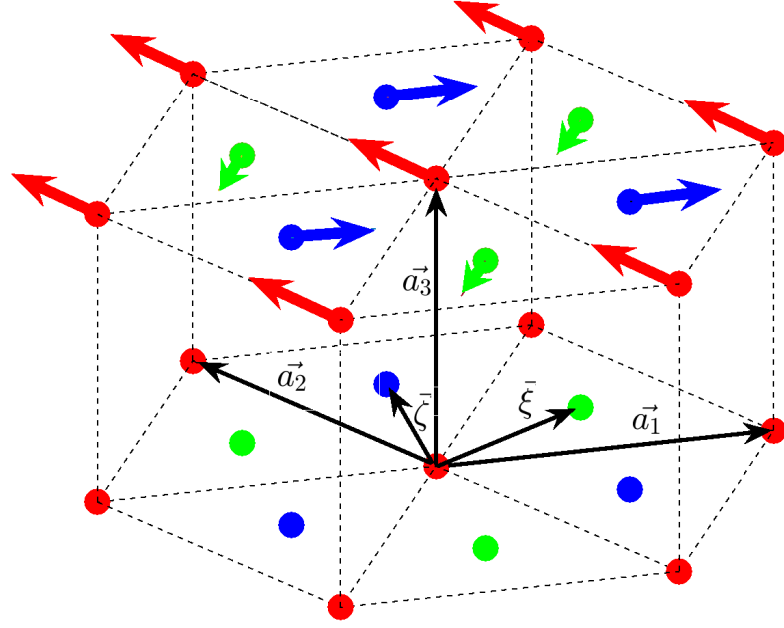


Рис. 4.1. Магнитная структура квазидвумерного АФМТР в упорядоченной фазе. Красными, зелёными и синими кружками обозначены положения узлов из L , F и G - подрешёток соответственно. Стрелочками показаны направления спинов трёх подрешеток. В пределах каждой подрешётки направления спинов совпадают. Вектора решётки Браве обозначены посредством $\mathbf{a}_j$ ($j = 1, 2, 3$, $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$, $|\mathbf{a}_3| = c$), а ξ и ζ – вектора базиса.

виде

$$H_{exch} = H_J + H_I, \quad (4.1)$$

где

$$H_J = J \sum_j \left[\sum_{\{f_j g_j\}} \mathbf{s}_{f_j} \mathbf{s}_{g_j} + \sum_{\{g_j l_j\}} \mathbf{s}_{g_j} \mathbf{s}_{l_j} + \sum_{\{l_j f_j\}} \mathbf{s}_{l_j} \mathbf{s}_{f_j} \right], \quad (4.2)$$

$$H_I = -I \sum_j \left[\sum_{f_j} \mathbf{s}_{f_j} \mathbf{s}_{f_{j+1}} + \sum_{g_j} \mathbf{s}_{g_j} \mathbf{s}_{g_{j+1}} + \sum_{l_j} \mathbf{s}_{l_j} \mathbf{s}_{l_{j+1}} \right]. \quad (4.3)$$

Оператор H_J описывает парное обменное взаимодействие между ближайшими спинами из разных подрешёток, но в одном и том же слое, нумеруемом индексом j . Символ f_j означает, что соответствующий спиновый оператор $\mathbf{S}_{f_j}$ отвечает некоторому узлу с номером f_j из F -подрешётки в j -ом слое. Аналогичный смысл имеют символы g_j и l_j из G - и L -подрешёток, соответственно. Фигурные скобки под символами сумм в (4.2) означают, что суммирование ведётся только по ближайшим узлам, и каждая пара узлов учитывается только один раз. Обменный интеграл $J(> 0)$ определяет интенсивность обменных антиферромагнитных взаимодействий между ближайшими спинами из одного и того же слоя. Оператор H_I описывает обменное взаимодействие с интенсивностью $I(> 0)$ между двумя ближайшими спинами из одной и той же подрешётки, но в разных слоях.

Учет обменной связи между спинами из разных плоскостей необходим для того, чтобы температура Нееля T_N имела конечное значение, а выбранный нами ферромагнитный характер этой связи позволяет наиболее просто эту связь учесть.

4.2. Метод исследования квазидвумерного АФМТР с произвольным спином

Как уже отмечалось, при температурах T меньших температуры Нееля T_N в системе возникает дальний магнитный порядок с планарной магнитной структурой, в которой угол между спинами из разных подрешёток равен 120° (« 120° -упорядочение»). Это обстоятельство обуславливает целесообразность перехода в каждой подрешётке к новым локальным системам отсчёта, в которых равновесные вектора намагниченности ориентированы вдоль новых осей z . С целью реализации указанного перехода направим ось z исходной системы координат вдоль равновесной намагниченности в L -подрешётке, считая, что спины всех подрешёток лежат в плоскости xOz , и проведем уни-

тарное преобразование гамильтониана H_{exch} аналогично (2.3):

$$H_{exch}(\theta) = U_2(\theta) H_{exch} U_2^+(\theta), \quad (4.4)$$

описывающее $SU(2)$ поворот вокруг оси y локальных систем координат на соответствующий угол θ в G -подрешётке и на угол $-\theta$ в F -подрешётке.

Явный вид унитарного оператора поворота представлен в Гл. 2 (см. (2.4)). Исходя из этого, выражения старых спиновых операторов через новые для F - и G -подрешёток имеют вид идентичный (2.6) и (2.5), соответственно.

В результате унитарного преобразования (4.5) гамильтониан (4.2) принимает вид:

$$\begin{aligned} H_J = J \sum_j \left[\sum_{\{f_j g_j\}} \left(\cos 2\theta (S_{f_j}^x S_{g_j}^x + S_{f_j}^z S_{g_j}^z) + \right. \right. \\ \left. \left. S_{f_j}^y S_{g_j}^y + \sin 2\theta (S_{f_j}^x S_{g_j}^z - S_{f_j}^z S_{g_j}^x) \right) + \right. \\ \sum_{\{l_j f_j\}} \left(\cos \theta (S_{l_j}^x S_{f_j}^x + S_{l_j}^z S_{f_j}^z) + S_{l_j}^y S_{f_j}^y + \sin \theta (S_{l_j}^z S_{f_j}^x - S_{l_j}^x S_{f_j}^z) \right) + \\ \left. \sum_{\{g_j l_j\}} \left(\cos \theta (S_{g_j}^x S_{l_j}^x + S_{g_j}^z S_{l_j}^z) + S_{g_j}^y S_{l_j}^y + \sin \theta (S_{g_j}^z S_{l_j}^x - S_{g_j}^x S_{l_j}^z) \right) \right], \quad (4.5) \end{aligned}$$

а оператор H_I , заданный выражением (4.3), остается без изменений.

Значение угла θ определяется из условия: $\langle S_r^x \rangle = \langle S_r^y \rangle = 0$ при $r = f, g, l$. Это значение нетрудно получить, рассматривая оператор (4.5) в приближении среднего поля. В этом случае условие обращения в ноль коэффициентов при операторах $S_{f(g)}^x$ приводит к уравнению

$$\sin 2\theta + \sin \theta = 0, \quad (4.6)$$

нетривиальным решением которого является $\theta = 120^\circ$. Таким образом, в выражении (4.5) следует положить: $\cos 2\theta = \cos \theta = -1/2$, $\sin 2\theta = -\sqrt{3}/2$ и $\sin \theta = \sqrt{3}/2$.

Расчёт параметра порядка $R = \langle S_r^z \rangle$ ($r = f, g, l$) и температуры Нееля при произвольной величине спина S проведем в рамках подхода, предложенного

в работе [45]. Ключевая идея данного подхода состоит в использовании комбинированных запаздывающих двухвременных температурных ФГ [61, 62]

$$\langle\langle X_r^{mn}(t) | S_r^\pm(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle [X_r^{mn}(t), S_r^\pm(t'),] \rangle, \quad (4.7)$$

определяемых через спиновые операторы $S_r^\pm$ и операторы Хаббарда [41]: $X_r^{m,n} = |m\rangle\langle n|$. В выражении (4.7) операторы берутся в представлении Гейзенберга, квадратные скобки означают взятие коммутатора, угловые скобки — термодинамическое усреднение, а $\theta(x)$ является ступенчатой функцией Хэвисайда равной единице при $x > 0$ и — нулю при $x < 0$.

Как показано в [45], для замыкания цепочки уравнений для ФГ (4.7) необходимы только те X -операторы, которые описывают парциальные вклады в представлении для спиновых операторов:

$$\begin{aligned} S_r^+ &= \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m X_r^{m+1,m}, & S_r^- &= \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m X_r^{m,m+1}, \\ S_r^z &= \sum_{m=-S}^S m X_r^{mm}, & S_r^\pm &= S_r^x \pm iS_r^y, \end{aligned} \quad (4.8)$$

где $\gamma_m = \sqrt{(S-m)(S+m+1)}$ — параметры представления.

Система уравнений движения для комбинированных ФГ после вычисления соответствующих коммутаторов и расщепления в рамках приближения Тябликова [62] принимает вид

$$\begin{aligned} [\omega - R(J_0 + I_0)] \langle\langle X_f^{m+1,m} | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega &= \delta_{ff'} b_m - b_m \frac{I}{2} \sum_{\nu=\pm d} \langle\langle S_{f+\nu}^+ | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega - \\ &b_m J \sum_{\delta} \left[\frac{1}{4} \langle\langle S_{f+\delta}^x + S_{f-\delta}^x | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega + \frac{1}{2i} \langle\langle S_{f+\delta}^y + S_{f-\delta}^y | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega \right], \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} [\omega + R(J_0 + I_0)] \langle\langle X_f^{m,m+1} | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega &= b_m \frac{I}{2} \sum_{\nu=\pm d} \langle\langle S_{f+\nu}^- | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega - \\ &b_m J \sum_{\delta} \left[\frac{1}{4} \langle\langle S_{f+\delta}^x + S_{f-\delta}^x | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega - \frac{1}{2i} \langle\langle S_{f+\delta}^y + S_{f-\delta}^y | S_{f'}^- \rangle\rangle_\omega \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

где $J_0 = 3J$, $I_0 = 2I$, $b_m = \gamma_m(N_{m+1} - N_m)$, $N_m = \langle X_r^{mm} \rangle$ – независимые от индекса узла числа заполнения, а вектор δ пробегает три значения $\xi, -\zeta, \xi - \zeta$ (см. Рис. 4.1).

Частичная диагонализация системы (4.9)-(4.10) осуществляется переходом в квазиимпульсное представление для $\Phi\Gamma$

$$\begin{aligned}\langle\langle X_r^{mn} | S_{r'}^- \rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_k D_{AF}^{m,n;-}(k, \omega) e^{ik(r-r')}, \\ \langle\langle S_r^\alpha | S_{r'}^- \rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_k D_{AF}^{\alpha-}(k, \omega) e^{ik(r-r')},\end{aligned}\quad (4.11)$$

где $\alpha = \pm$, N – число узлов в подрешётке, а индекс A принимает значения F, G, L и указывает на принадлежность узла r к типу подрешётки: $r = \{f, g, l\}$.

В квазиимпульсном представлении система уравнений движения (4.9)-(4.10) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned}[\omega - R(J_0 + I_0)] D_{FF}^{m+1,m;-}(k, \omega) = \\ b_m \left[1 - \frac{I_0}{2} \cos k_y D_{FF}^{+-}(k, \omega) - \frac{3}{8} J_0 \nu_k D_{GF}^{--}(k, \omega) - \right. \\ \left. \frac{3}{8} J_0 \nu_k^* D_{LF}^{--}(k, \omega) + \frac{1}{8} J_0 \nu_k D_{GF}^{+-}(k, \omega) + \frac{1}{8} J_0 \nu_k^* D_{LF}^{+-}(k, \omega) \right],\end{aligned}\quad (4.12)$$

$$\begin{aligned}[\omega + R(J_0 + I_0)] D_{FF}^{m,m+1;-}(k, \omega) = \\ b_m \left[\frac{I_0}{2} \cos k_y D_{FF}^{--}(k, \omega) + \frac{3}{8} J_0 \nu_k D_{GF}^{+-}(k, \omega) + \right. \\ \left. \frac{3}{8} J_0 \nu_k^* D_{LF}^{+-}(k, \omega) - \frac{1}{8} J_0 \nu_k D_{GF}^{--}(k, \omega) - \frac{1}{8} J_0 \nu_k^* D_{LF}^{--}(k, \omega) \right],\end{aligned}\quad (4.13)$$

где инвариант треугольной решётки

$$\nu_k = \frac{1}{3} \sum_\delta e^{ik\delta} = \frac{1}{3} \left(2 \cos \frac{k_z}{2} e^{i \frac{k_x}{2\sqrt{3}}} + e^{-i \frac{k_x}{\sqrt{3}}} \right). \quad (4.14)$$

Формулы (4.12) и (4.13) выражают комбинированные $\Phi\Gamma$ через спиновые.

Из представлений (4.8) и коммутационных соотношений для спиновых операторов следует операторное тождество

$$2S_r^z = [S_r^+, S_r^-] = \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m^2 (X_r^{m+1,m+1} - X_r^{m,m}). \quad (4.15)$$

Это тождество после усреднения дает связь между параметром порядка R и числами заполнения N_m :

$$2R = \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m^2 (N_{m+1} - N_m) = \sum_{m=-S}^{S-1} \gamma_m b_m. \quad (4.16)$$

Формула (4.16), позволяет получить из выражений (4.12) и (4.13) уравнения для чисто спиновых ФГ:

$$[\omega - \varepsilon_k] D_{FF}^{+-}(k, \omega) = 2R + \frac{RJ_0}{4} [\nu_k D_{GF}^{+-}(k, \omega) + \nu_k^* D_{LF}^{+-}(k, \omega) - 3\nu_k D_{GF}^{--}(k, \omega) - 3\nu_k^* D_{LF}^{--}(k, \omega)], \quad (4.17)$$

$$[\omega + \varepsilon_k] D_{FF}^{--}(k, \omega) = \frac{RJ_0}{4} [3\nu_k D_{GF}^{+-}(k, \omega) + 3\nu_k^* D_{LF}^{+-}(k, \omega) - \nu_k D_{GF}^{--}(k, \omega) - \nu_k^* D_{LF}^{--}(k, \omega)], \quad (4.18)$$

где $\varepsilon_k = RJ_0 + RI_0(1 - \cos k_y)$. Эти уравнения, а также четыре дополнительных уравнения, получаемых из них с помощью циклической перестановки индексов подрешёток F , G и L , образуют полную замкнутую систему для спиновых ФГ.

4.3. Среднее значение спина квазидвумерного АФМТР

Из требования существования нетривиальных решений, полученной в предыдущем разделе системы уравнений для шести ФГ:

$$D_{FF}^{+-}, D_{GF}^{+-}, D_{LF}^{+-}, D_{FF}^{--}, D_{GF}^{--}, D_{LF}^{--}, \quad (4.19)$$

следует дисперсионное уравнение:

$$\begin{vmatrix} \omega - \varepsilon_k - \frac{1}{4}RJ_0\Lambda_k & \frac{3}{4}RJ_0\Lambda_k \\ -\frac{3}{4}RJ_0\Lambda_k & \omega + \varepsilon_k + \frac{1}{4}RJ_0\Lambda_k \end{vmatrix} = 0, \quad (4.20)$$

где

$$\Lambda_k = \begin{pmatrix} 0 & \nu_k & \nu_k^* \\ \nu_k^* & 0 & \nu_k \\ \nu_k & \nu_k^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Дисперсионное уравнение (4.20) является уравнением третьей степени относительно ω^2 , а три его решения E_{jk} ($j = 1, 2, 3$) представляют три ветви спектра коллективных спиновых возбуждений.

Решения системы (4.17)-(4.18), т.е. шесть ФГ (4.19), позволяют по формулам (4.12), (4.13) получить выражения для парциальных ФГ, по которым, используя спектральную теорему, вычисляются числа заполнения N_m :

$$\gamma_m N_m = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega b(\omega) \frac{1}{N} \sum_k \text{Im} D_{FF}^{m+1,m;-}(k, \omega), \quad (4.22)$$

где $b(\omega) = (\exp(\omega/T) - 1)^{-1}$ – функция распределения Бозе-Эйнштейна. При известных N_m параметр порядка R определяется по формуле (4.16).

Проводя указанные вычисления, получаем из уравнения (4.22) рекуррентное соотношение для чисел заполнения:

$$N_m = N_{m+1} \cdot \alpha(T), \quad \alpha(T) = \frac{P_S(T)}{1 + P_S(T)}, \quad (4.23)$$

где

$$P_S(T) = P_S(0) + \delta P_S(T), \quad (4.24)$$

$$P_S(0) = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{i=1}^3 \frac{A_k(-E_{ik})}{2E_{ik} \prod_{j(\neq i)}^3 (E_{ik}^2 - E_{jk}^2)}, \quad (4.25)$$

$$\delta P_S(T) = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{i=1}^3 \frac{\tilde{A}_k(-E_{ik}) b(E_{ik})}{E_{ik} \prod_{j(\neq i)}^3 (E_{ik}^2 - E_{jk}^2)}. \quad (4.26)$$

Спектральная функция $A_k(\omega)$ из выражений (4.25) имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{A_k(\omega)}{(RJ_0)^5} = & \tilde{\omega}^5 + \tilde{\varepsilon}_k \tilde{\omega}^4 + 2(|\nu_k|^2 - \tilde{\varepsilon}_k^2) \tilde{\omega}^3 + \\ & \left(\frac{9}{4} |\nu_k|^2 \tilde{\varepsilon}_k - \frac{1}{8} (\nu_k^3 + \nu_k^{*3}) - 2\tilde{\varepsilon}_k^3 \right) \tilde{\omega}^2 + \\ & \left(\frac{1}{4} (\nu_k^3 + \nu_k^{*3}) \tilde{\varepsilon}_k + \frac{3}{4} |\nu_k|^4 - \frac{9}{4} |\nu_k|^2 \tilde{\varepsilon}_k^2 + \tilde{\varepsilon}_k^4 \right) \tilde{\omega} - \frac{1}{16} (\nu_k^3 + \nu_k^{*3}) |\nu_k|^2 + \\ & \tilde{\varepsilon}_k^5 - \frac{5}{2} |\nu_k|^2 \tilde{\varepsilon}_k^3 + \frac{7}{16} (\nu_k^3 + \nu_k^{*3}) \tilde{\varepsilon}_k^2 + \frac{3}{4} |\nu_k|^4 \tilde{\varepsilon}_k, \quad (4.27) \end{aligned}$$

где $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k/(RJ_0) = 1 + \frac{I_0}{J_0}(1 - \cos k_y)$ и $\tilde{\omega} = \omega/(RJ_0)$. Функция $\tilde{A}_k(\omega)$ из формулы (4.26) есть чётная по ω часть функции $A_k(\omega)$.

Добавление к $2S$ рекуррентным соотношениям (4.23) условия полноты $1 = \sum_{m=-S}^S N_m$ позволяет получить однозначные решения для $2S+1$ величин N_m и записать выражение для параметра порядка в виде:

$$R = \sum_{m=-S}^S m N_m = S + (2S+1) \frac{\alpha(T)^{2S+1}}{1 - \alpha(T)^{2S+1}} - \frac{\alpha(T)}{1 - \alpha(T)}. \quad (4.28)$$

В работе [45] отмечалось, что если использовать параметризацию функции $\alpha(T)$ через эффективное поле h посредством соотношения $\alpha(T) = e^{-h/T}$, то параметр порядка может быть выражен через функцию Бриллюэна $B_S(x)$:

$$R = S B_S \left(\frac{Sh}{T} \right), \quad (4.29)$$

где $B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \coth(\frac{2S+1}{2S}x) - \frac{1}{2S} \coth(\frac{1}{2S}x)$.

Ещё одно представление для R получится если выразить параметр порядка непосредственно через функцию $P_S(T)$. Подставляя $\alpha(T)$ из формулы (4.23) в выражение (4.28):

$$R = S - P_S(T) + \frac{(2S+1)P_S(T)^{2S+1}}{(P_S(T)+1)^{2S+1} - P_S(T)^{2S+1}}. \quad (4.30)$$

Это представление удобно тем, что явным образом выделяет линейную по $P_S(T)$ поправку, которая мала при $T \ll T_N$. Фактически $P_S(0)$ описывает квантовое сокращение спина в СВП. Третье слагаемое в правой части выражения (4.30) учитывает поправки следующих порядков.

4.4. Температура Нееля квазидвумерного АФМТР с произвольным спином

В пределе $T \rightarrow T_N$ параметр порядка $R \rightarrow 0$, поэтому из выражения (4.30) видно что $P_S(T_N) \gg 1$. В связи с чем аргумент функции Бриллюэна можно представить как первый член разложения:

$$S \ln \left(1 + \frac{1}{P_S(T_N)} \right) = \frac{S}{P_S(T_N)}. \quad (4.31)$$

Использував разложение в ряд $\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$, применив его для (4.29) принимая во внимание (4.31), получим выражение для параметра порядка в случае $T \rightarrow T_N$

$$R = S B_S \left(S \ln \left(1 + \frac{1}{P_S} \right) \right) \approx \frac{S(S+1)}{3 P_S(T_N)}. \quad (4.32)$$

Учтём далее, что в интересующем нас режиме ($T = T_N$) в правой части формулы (4.24) для $P_S(T)$ можно пренебречь первым слагаемым по сравнению со вторым, а аргумент u функции распределения Бозе-Эйнштейна в выражении (4.26) для $\delta P_S(T)$ является малой величиной. В результате из формул (4.24), (4.26) и (4.32) получаем искомое выражение для температуры Нееля

$$T_N = \frac{S(S+1)J_0}{3W}. \quad (4.33)$$

В формуле (4.33) обобщённый интеграл Ватсона, обуславливающий ренормировки температуры Нееля за счёт квантовых флуктуаций, можно представить в виде:

$$W = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{C_k}{Z_k}, \quad (4.34)$$

где

$$C_k = \frac{1}{2} (7 \tilde{\varepsilon}_k^2 - |\nu_k|^2) (\nu_k^3 + \nu_k^{*3}) + 8 \tilde{\varepsilon}_k^5 + (6|\nu_k|^2 - 20 \tilde{\varepsilon}_k^2) |\nu_k|^2 \tilde{\varepsilon}_k,$$

$$Z_k = (\nu_k + \nu_k^* - 2\tilde{\varepsilon}_k) \times (\nu_k + \nu_k^* + \tilde{\varepsilon}_k) \times ((\nu_k - \nu_k^*)^2 + |\nu_k - \tilde{\varepsilon}_k|^2) \times \\ ((\nu_k - \nu_k^*)^2 + |\nu_k + 2\tilde{\varepsilon}_k|^2),$$

а зависимость от обменных интегралов учитывается функцией $\tilde{\varepsilon}_k = 1 + \frac{I_0}{J_0}(1 - \cos k_y)$. Заметим, что значение W от величины спина S не зависит.

4.5. Квантовые эффекты и эффекты пониженной размерности

В рамках используемой теории квантовые эффекты проявляются двояко, во-первых, в уменьшении величины намагниченности подрешётки (R), согласно формуле (4.30), а во-вторых, в ренормировке температуры Нееля T_N через обобщённый интеграл Ватсона в формуле (4.33). Переходу от размерности $d = 3$ к размерности $d = 2$, очевидно, отвечает предел $I \rightarrow 0$.

На Рис. 4.2 представлена зависимость значения обобщённого интеграла Ватсона (4.34) от соотношения обменных интегралов I/J . Нетривиальным представляется тот факт, что при $I = J$ интеграл W равен единице и остается близким к ней на некотором интервале значений отношения I/J в окрестности единицы. Это означает, что при совпадающих интенсивностях антиферромагнитного внутриплоскостного обмена J и ферромагнитного межплоскостного обмена I квантово-флуктуационная ренормировка температуры Нееля формально отсутствует. При этом, однако, сокращение среднего значения спина за счёт квантовых флуктуаций продолжает иметь место (см. ниже Табл. 4.1). Более того, при $I > J$ значение W оказывается меньше единицы, что приводит к увеличению температуры T_N , т.е. к большей устойчивости планарной магнитной структуры с углом в 120° между спинами из разных подрешёток.

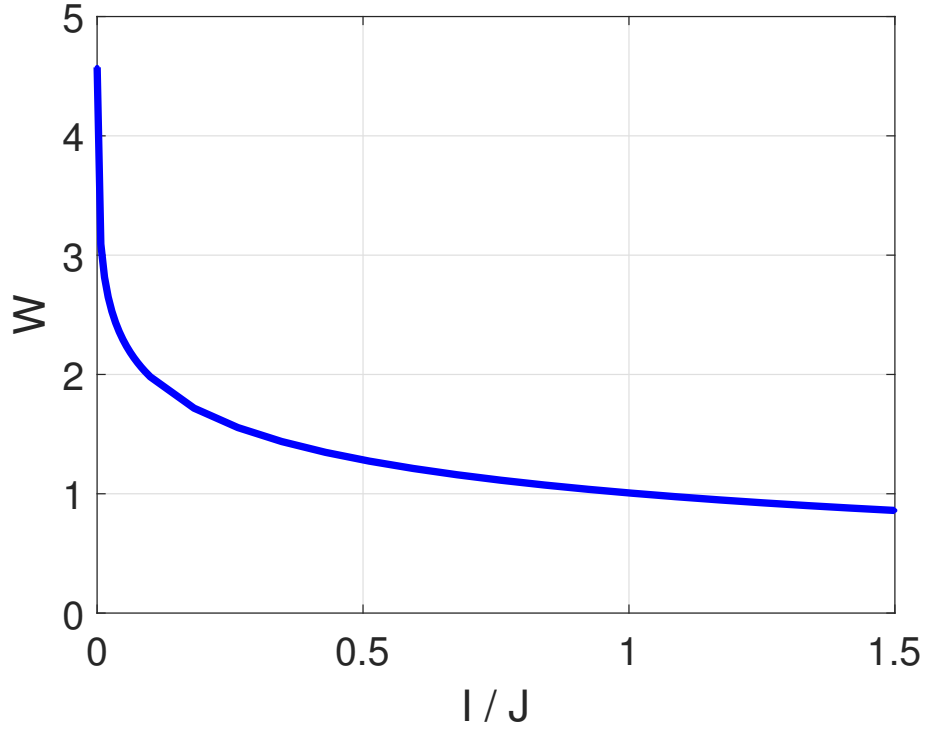


Рис. 4.2. Зависимость обобщенного интеграла Ватсона от отношения обменных интегралов I/J

При обратном соотношении обменных интегралов ($I < J$) стабилизирующее действие межплоскостного ферромагнитного обмена ослабляется, и квантовые флуктуации начинают нарастать. При $I \ll J$ значение W быстро увеличивается и при $I = 0$ стремится к бесконечности, а T_N обращается в ноль в соответствии с теоремой Мермина-Вагнера [63].

В таблицах (4.1) и (4.2) приведены значения параметра порядка R и квантового сокращения спина $S - R$, рассчитанные двумя способами при нулевой температуре для нескольких величин спина S и при различных соотношениях между обменными интегралами I и J . В первой колонке представлены значения указанных величин, вычисленные самосогласованно по формуле (4.30); во второй колонке – в рамках СВП [29].

Из анализа представленных в таблице данных видно, что при малых значениях спина и малом соотношении обменных интегралов I/J значение R ,

$I/J = 1$				
S	R		$S - R$	
	Eq. (4.30)	СВП	Eq. (4.30)	СВП
$, 1/2 ,$	0.44175	$, 0.43407 ,$	0.05824	$, 0.06592 ,$
1	0.93478	0.93407	0.06521	0.06592
3/2	1.43413	1.43407	0.06586	0.06592
2	1.93407	1.93407	0.06592	0.06592
5/2	2.43407	2.43407	0.06592	0.06592
$I/J = 0.001$				
S	R		$S - R$	
	Eq. (4.30)	СВП	Eq. (4.30)	СВП
1/2	0.33473	0.25314	0.16526	0.24685
1	0.77661	0.75314	0.22338	0.24685
3/2	1.25930	1.25314	0.24069	0.24685
2	1.75466	1.75314	0.24533	0.24685
5/2	2.25350	2.25314	0.24649	0.24685

Таблица 4.1

Величины магнитного момента R и квантового сокращения спина $S - R$ при $T = 0$ для различных S и при двух значениях отношения обменных интегралов $I/J = 1$, $I/J = 0.001$. Расчёты проведены двумя способами: на основе уравнения (4.30) и в рамках СВП [29].

$I/J = 0.0001$				
S	R		$S - R$	
	Eq. (4.30)	СВП	Eq. (4.30)	СВП
$, 1/2 ,$	0.33101	$, 0.24473 ,$	0.16898	$, 0.25526 ,$
1	0.77017	0.74473	0.22982	0.25526
3/2	1.25159	1.24473	0.24840	0.25526
2	1.74647	1.74473	0.25352	0.25526
5/2	2.24516	2.24473	0.25483	0.25526
$I/J = 0$				
S	R		$S - R$	
	Eq. (4.30)	СВП	Eq. (4.30)	СВП
1/2	0.32993	0.24226	0.17006	0.25773
1	0.76830	0.74226	0.23169	0.25773
3/2	1.24933	1.24226	0.25066	0.25773
2	1.74407	1.74226	0.25592	0.25773
5/2	2.24271	2.24226	0.25728	0.25773

Таблица 4.2

Величины магнитного момента R и квантового сокращения спина $S - R$ при $T = 0$ для различных S и при двух значениях отношения обменных интегралов $I/J = 0.0001$, $I/J = 0$. Расчёты проведены двумя способами: на основе уравнения (4.30) и в рамках СВП [29].

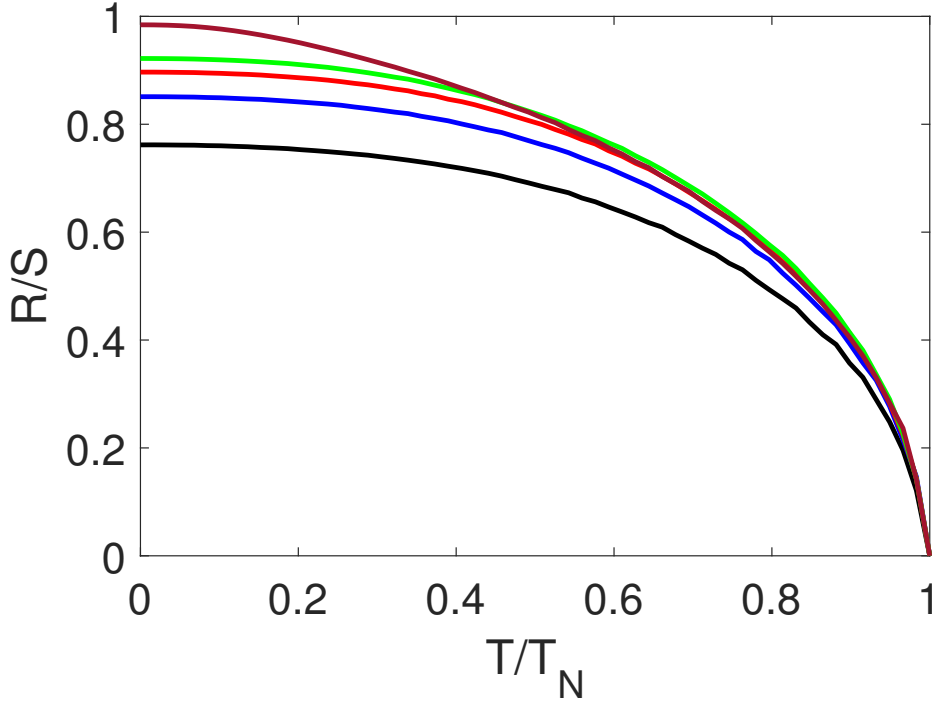


Рис. 4.3. Зависимость относительной намагниченности подрешётки R/S от относительной температуры T/T_N для разных значений спина при $I/J = 0.1$. Чёрная линия – $S = \frac{1}{2}$; синяя линия – $S = 1$; красная линия – $S = \frac{3}{2}$; зелёная линия – $S = 2$; коричневая линия – $S = 10$.

рассчитанное по формуле (4.30), существенно больше значения, полученного в СВП. В то же время при больших значениях спина моменты практически совпадают. Это связано с тем, что квантовое сокращение спина, рассчитанное в рамках СВП, описывается только одним вторым слагаемым в правой части формулы (4.30). Дополнительное третье слагаемое в этой формуле возникает в рамках использованного в данной работе формализма и, как показывают расчеты, приводит к существенному уменьшению квантового сокращения спина при малых значениях S . При увеличении S это слагаемое быстро убывает, что и объясняет представленные в таблице результаты. Также из таблицы видна тенденция увеличения среднего значения спина с увеличением соотношения между обменными интегралами I/J , что обусловлено усилением вклада ферромагнитного взаимодействия, блокирующего квантовые АФ.

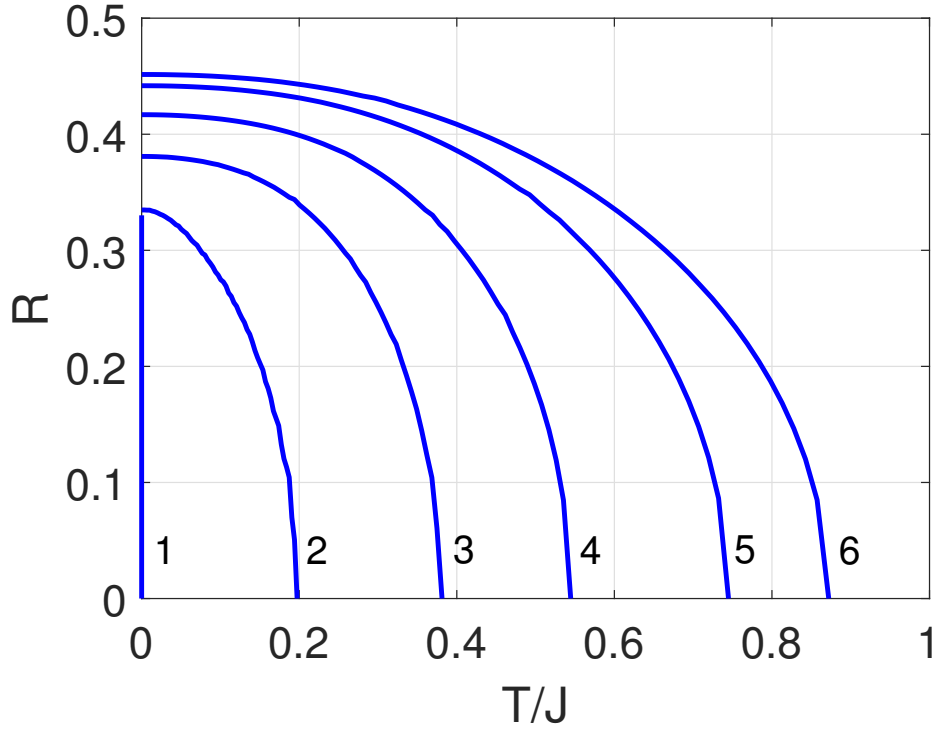


Рис. 4.4. Зависимость намагниченности подрешётки R от температуры T для $S = \frac{1}{2}$ при соотношениях обменных интегралов: 1) $I = 0$; 2) $I/J = 0.001$; 3) $I/J = 0.1$; 4) $I/J = 0.4$; 5) $I/J = 1$; 6) $I/J = 1.5$.

На Рис. 4.3 изображены зависимости относительной намагниченности одной подрешётки R/S от относительной температуры T/T_N при разных значениях спина S в случае $I/J = 0.1$. Представленные зависимости рассчитывались самосогласованно с использованием дисперсионного уравнения (4.20) и выражений (4.30). При выбранном отношении I/J величина намагниченности R для $S = 1/2$ при нулевой температуре подавляется квантовыми флуктуациями до величины: $R \simeq 0.38$. При увеличении величины спина S квантовое сокращение спина $R - S$ для $T = 0$ выходит на насыщение, а отношение R/S приближается к единице. При увеличении температуры значения R для всех S монотонно убывают и обращаются в ноль при $T = T_N$. Величина T_N при каждом S определяется по формуле (4.33).

На Рис. 4.4 представлен график зависимости намагниченности одной под-

решётки (R) от температуры T при $S = \frac{1}{2}$ для разных соотношений между обменными интегралами I/J . Видно, что с уменьшением обменного интеграла I температура Нееля понижается и в пределе $I \rightarrow 0$ в согласии с теоремой Мермина-Вагнера [63] обращается в ноль. С уменьшением интенсивности ферромагнитного межплоскостного обмена усиливается и тенденция к квантовому сокращению спина. Для $I = 0$ величина намагниченности подрешётки при $T = 0$ оказывается минимальной: $R = 0.33$ (см. вертикальную линию 1).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главные результаты проведённого теоретического исследования квантового $SU(3)_F$ на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ и квазидвумерного АФМТР с произвольным спином были сформулированы и получены впервые. Решением поставленных задач являются следующие новые результаты:

1. Показано, что по мере увеличения параметра ОА типа «легкая плоскость» в квантовом $SU(3)_F$ на треугольной решётке со смешанными спинами $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ в отсутствие внешнего магнитного поля последовательно реализуются три фазы основного состояния: 1) коллинеарная ферримагнитная *uud*-фаза; 2) скошенная *Y*-фаза; 3) КАФМ фаза. При этом коллинеарная ферримагнитная *uud*-фаза реализуется только в случае, когда обмен между подрешётками с разными величинами спина сильнее обмена между подрешётками с одинаковыми величинами спина.

2. Построены зависимости параметров порядка $SU(3)_F$ от величины ОА при различных соотношениях обменных интегралов. Для случая, когда обмен между подрешётками с разными величинами спина сильнее обмена между подрешётками с одинаковыми величинами спина, в данных зависимостях обнаружены точки компенсации.

3. Рассчитан спектр коллективных спиновых возбуждений $SU(3)_F$ для различных соотношений обменных интегралов и значений параметра ОА при отсутствии внешнего магнитного поля. Показано, что спектр характеризуется четырьмя ветвями, две из которых в изотропном случае всегда щелевые. Третья ветвь – голдстоуновская, связанная с нарушением симметрии основного состояния относительно вращения вокруг оси перпендикулярной к плоскости «легкого намагничивания». Четвертая ветвь характеризуется конечной щелью в коллинеарной ферримагнитной *udd*-фазе, которая обращается в ноль в *Y*-фазе.

4. Впервые построена фазовая диаграмма $SU3F$ в координатах магнитное поле – анизотропия. Показано, что структура фазовой диаграммы существенно зависит от соотношения обменных интегралов. В случае, когда обмен между подрешётками с разными величинами спина слабее обмена между подрешётками с одинаковыми величинами спина вектор среднего значения магнитного момента подсистемы со спином $S = 1$ всегда направлен вдоль магнитного поля, и при увеличении поля в $SU3F$ последовательно реализуются три фазы: 1) Λ -фаза; 2) всерная W -фаза и 3) коллинеарная ФМ фаза. Обнаружено нетривиальное поведение системы на границе между Λ - и W -фазами, где действие внешнего магнитного поля на подсистему спинов с $S = \frac{1}{2}$ полностью компенсируется эффективным полем со стороны подрешётки с $S = 1$, а эффективное поле подсистемы с $S = \frac{1}{2}$, действующее на подсистему спинов с $S = 1$ обращается в ноль. В результате подсистемы с $S = \frac{1}{2}$ и $S = 1$ оказываются полностью независимы друг от друга. При этом первая оказывается в АФМ фазе, вторая – в парамагнитной фазе. Получено аналитическое выражение, описывающее границу между Λ - и W -фазами. Для случая, когда обмен между подрешётками с разными величинами спина сильнее обмена между подрешётками с одинаковыми величинами спина проекция вектора среднего значения магнитного момента подсистемы со спином $S = 1$ на направление магнитного поля и вектор магнитного поля противоположны друг другу при малых полях и не слишком малой анизотропии и сонаправлены – при больших полях. При этом для параметра ОА меньше некоторого значения разворот вектора среднего значения магнитного момента подсистемы со спином $S = 1$ происходит монотонно с увеличением поля, а $SU3F$ проходит последовательно через: коллинеарную ферромагнитную uid -фазу, V -фазу и ФМ фазу. Когда параметр ОА больше этого значения система при малых полях находится в Y -фазе, которая при увеличении магнитного поля сменяется коллинеарной ферромагнитной uid -фазой. Переход из последней в ФМ фазу при дальнейшем увеличении поля может происходить как монотонно через

V -фазу, так и скачком, в зависимости от величины анизотропии.

5. Построены зависимости как дипольных, так и квадрупольных параметров порядка от величины магнитного поля и анизотропии. Установлено, что при увеличении анизотропии квадрупольный параметр порядка возрастает и выходит на насыщение. Показано, что зависимость полного момента $SU3F$ от магнитного поля в случае, когда обмен между подрешётками с разными величинами спина сильнее обмена между подрешётками с одинаковыми величинами спина и величина параметра ОА больше некоторого значения, качественно повторяет аналогичную зависимость для АФМТР со спином $\frac{1}{2}$ с учётом квантовых флуктуаций: как по последовательности реализуемых фаз (Y , uid , V и ФМ) при увеличении поля, так и по наличию «квази-плато» в коллинеарной ферримагнитной uid -фазе.

6. Для квазидвумерного АФМТР с произвольной величиной спина впервые получено аналитическое выражение для температуры Нееля, зависящее как от величины спина, так и от отношения внутри- и межплоскостного обмена. Показано, что относительный параметр порядка к величине спина уменьшается при росте относительной температуры к температуре Нееля тем быстрее, чем больше величина спина.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает самую искреннюю и сердечную благодарность научному руководителю Дмитрию Михайловичу Дзедзисашвили за постоянную помощь на всех этапах работы, за моральную поддержку и уверенность в успехе этой деятельности.

Отдельную благодарность хочу выразить Валерию Владимировичу Валькову за предоставленную возможность сотрудничества и плодотворное обсуждение результатов и Максиму Михайловичу Коровушкину за критические замечания.

Литература

1. Chubukov A.V. Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field / A.V. Chubukov, D.I. Golosov // J. Phys.: Condens. Matter. - 1991. - V. 3. - P. 69-82.
2. Shirata Y. Experimental Realization of a Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet / Y. Shirata, H. Tanaka, A. Matsuo, K. Kindo // Phys.Rev.Lett. - 2012. - V. 108. - P. 057205.
3. Ito S. Structure of the magnetic excitations in the spin-1/2 triangular lattice Heisenberg antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ / S. Ito, N. Kurita, H. Tanaka, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, S. Itoh, K. Kuwahara, K. Kakurai // Nat. Commun. - 2017. - V. 8. - №. 1. - P. 235.
4. Fortune N.A. Evolution of magnetic field induced ordering in the layered quantum Heisenberg triangular-lattice antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ / N.A. Fortune, Q. Huang, T. Hong, J. Ma, E.S. Choi, S.T. Hannahs, Z.Y. Zhao, X.F. Sun, Y. Takano, H.D. Zhou // Phys.Rev.B. - 2021. - V. 103. - P. 184425.
5. Okada K. Field-orientation dependence of quantum phase transitions in the $S = 1/2$ triangular-lattice antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ / K. Okada, H. Tanaka¹, N. Kurita, D. Yamamoto, A. Matsuo, K. Kindo // Phys.Rev.B. - 2022. - V. 106. - P. 104415.
6. Chi R. Spin Excitation Spectra of Anisotropic Spin-1/2 Triangular Lattice Heisenberg Antiferromagnets / R. Chi, Y. Liu, Y. Wan, H.J. Liao, T. Xiang // Phys.Rev.Lett. - 2022. - V. 129. - P. 227201.
7. Facheris L. Spin Density Wave versus Fractional Magnetization Plateau in a Triangular Antiferromagnet / L. Facheris, K.Yu. Povarov, S.D. Nabi et al. // Phys.Rev.Lett. - 2022. - V. 129. - P. 087201.
8. Xie T. Complete field-induced spectral response of the spin-1/2 triangular-lattice antiferromagnet CsYbSe_2 / T. Xie, A.A. Eberharter, J. Xing et al. // npj Quantum Mater. - 2023. - V. 8. - №. 1. - P. 48.

9. Xie T. Quantum Spin Dynamics Due to Strong Kitaev Interactions in the Triangular-Lattice Antiferromagnet CsCeSe₂ / T. Xie, S. Gozel, J. Xing et al. // Phys.Rev.Lett. - 2024. - V. 133. - P. 096703.
10. Gao B. Disorder-induced excitation continuum in a spin-1/2 cobaltate on a triangular lattice / B. Gao, T. Chen, C.L. Huang et al. // Phys.Rev.B. - 2023. - V. 108. - P. 024431.
11. Avers K.E. Fingerprinting triangular-lattice antiferromagnet by excitation gaps / K.E. Avers, P.A. Maksimov, P.F.S. Rosa, S.M. Thomas, J.D. Thompson, W.P. Halperin, R. Movshovich, A.L. Chernyshev // Phys.Rev.B. - 2021. - V. 103. - №. 1. - P. L180406.
12. Svistov L.E. Magnetic phase diagram, critical behavior, and two-dimensional to three-dimensional crossover in the triangular lattice antiferromagnet RbFe(MoO₄)₂ / L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova et al. // Phys.Rev.B. - 2006. - V. 74. - P. 024412.
13. Smirnov A.I. Triangular lattice antiferromagnet RbFe(MoO₄)₂ in high magnetic fields / A.I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura, M. Hagiwara, Y. Narumi, K. Kindo, A. Kikkawa, K. Katsumata, A.Ya. Shapiro, L.N. Demianets // Phys.Rev.B. - 2007. - V. 75. - P. 134412.
14. Smirnov A.I. Order by Quenched Disorder in the Model Triangular Antiferromagnet RbFe(MoO₄)₂ / A.I. Smirnov, T.A. Soldatov, O.A. Petrenko, A. Takata, T. Kida, M. Hagiwara, A.Ya. Shapiro, M.E. Zhitomirsky // Phys.Rev.Lett. - 2017. - V. 119. - P. 047204.
15. Sakhratov Yu.A. Anisotropy stabilized magnetic phases of the triangular antiferromagnet RbFe(MoO₄)₂ / Yu.A. Sakhratov, L.E. Svistov, A.P. Reyes // JETP. - 2023. - V. 137. - №. 4. - P. 526-532.
16. Gao Y. Spin supersolidity in nearly ideal easy-axis triangular quantum antiferromagnet Na₂BaCo(PO₄)₂ / Y. Gao, Y.-C. Fan, H. Li, F. Yang, X.-T. Zeng, X.-L. Sheng, R. Zhong, Y. Qi, Y. Wan, and W. Li // npj Quantum Materials. - 2022. - V. 7. - P. 89.

17. Xiang J. Giant magnetocaloric effect in spin supersolid candidate $\text{Na}_2\text{BaCo}(\text{PO}_4)_2$ / J. Xiang, C. Zhang, Y. Gao, W. Schmidt, K. Schmalzl, C.-W. Wang, B. Li, N. Xi, X.-Y. Liu, H. Jin, G. Li, J. Shen, Z. Chen, Y. Qi, Y. Wan, W. Jin, W. Li, P. Sun, and G. Su // Nature (London). - 2024. - V. 625. - P.270-275.
18. Sheng J. Bose-Einstein condensation of a two-magnon bound state in a spin-one triangular lattice / J. Sheng, J.-W. Mei, L. Wang, W. Jiang, L. Xu, H. Ge, N. Zhao, T. Li, A. Candini, B. Xi, J. Zhao, Y. Fu, J. Yang, Y. Zhang, G. Biasiol, S. Wang, J. Zhu, P. Miao, X. Tong, D. Yu et al. // arXiv. - 2024. - V. 2. - P. 2306.09695.
19. Zhang C. Successive magnetic transitions in the spin-5/2 easy-axis triangular-lattice antiferromagnet $\text{Na}_2\text{BaMn}(\text{PO}_4)_2$: A neutron diffraction study / C. Zhang, J. Xiang, C. Su, D. Sheptyakov, X. Liu, Y. Gao, P. Sun, W. Li, G. Su, W. Jin // Phys.Rev.B. - 2024. - V. 110. - P. 214405.
20. Fridman Yu.A. Spin waves in two-dimensional ferromagnet with large easy-plane anisotropy / Yu.A. Fridman, D.V. Spirin // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2002. - V. 253. - P. 111-117.
21. Fridman Y.A. Quantum effects in an anisotropic ferrimagnet / Y.A. Fridman, O.A. Kosmachev // Physics of the Solid State. - 2009. - V. 51. - P. 1167-1171.
22. Coletta T. Semiclasical theory of the magnetization process on the triangular lattice Heisenberg model / T. Coletta, T. A. Toth, K. Penc et al. // Phys. Rev. B. - 2016. - V. 94. - P. 075136.
23. Михеенков А.В. Фазовые переходы в двумерной J_1 – J_2 -модели Гейзенберга при произвольных знаках обменных взаимодействий / А.В. Михеенков, А.В. Шварцберг, А.Ф. Барабанов // Письма в ЖЭТФ. - 2013. - Т. 98. - №. 3. - С. 178–182.
24. Барабанов А.Ф. Квантовый фазовый переход в двумерном фрустрированном магнетике в матричном проекционном подходе / А.Ф. Барабанов,

- А.В. Михеенков, Н.А. Козлов // Письма в ЖЭТФ. - 2015. - Т. 102. - №. 5. - С. 333–338.
25. Zukovic M. Frustrated mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnets on a triangular lattice / M. Zukovic, A. Bobak // Phys. Rev. E. - 2015. - V. 91. - P. 052138.
 26. Zukovic M. Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnets on a triangular lattice / M. Zukovic, A. Bobak // Physica A. - 2015. - V. 436. - P. 509-518.
 27. De Santana E.S. Random-anisotropy mixed-spin Ising on a triangular lattice / E.S. de Santana, A.S. de Arruda, M. Godoy // Condensed Matter Physics. - 2023. - V. 26. - P. 23601.
 28. Shender E.F. Order by disorder and topology in frustrated magnetic systems / E.F. Shender, P.C.W. Holdsworth // Fluctuations and Order. - N.Y: Springer, 1996. - P. 259-279.
 29. Anderson P.W. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state / P.W. Anderson // Phys Rev. - 1952. - V. 86. - №. 5. - P. 694-701.
 30. Kim E. Probable observation of a supersolid helium phase / E. Kim, M.H.W. Chan // Nature. - 2004. - V. 427. - P. 225-227.
 31. Kim D.Y. Absence of supersolidity in solid helium in porous vycor glass / D.Y. Kim, M.H.W. Chan // Phys. Rev. Lett. - 2012. - V. 109. - P. 155301.
 32. Li J.R. A stripe phase with supersolid properties in spin-orbit-coupled bose-einstein condensates / J.R. Li, J. Lee, W. Huang, et al. // Nature. - 2017. - V. 543. - P. 91094.
 33. Leonard J. Monitoring and manipulating higgs and goldstone modes in a supersolid quantum gas / J. Leonard, A. Morales, P. Zupancic, et al. // Science. - 2017. - V. 358. - P. 1415-1418.
 34. Меленко А.Г. Сверхтвёрдая магнитная фаза в двумерном изингоподобном антиферромагнетике с большой одноионной анизотропией / А.Г. Ме-

- ленко, Ф.Н. Клевец, Ю.А. Фридман // ФТТ. - 2017. - Т. 59. - В. 9. - С. 1716-1723.
35. Tanzi L. Supersolid symmetry breaking from compressional oscillations in a dipolar quantum gas / L. Tanzi, S.M. Rocuzo, E. Lucioni, et al. // Nature. - 2019. - V. 574. - P. 382-385.
 36. Norcia M.A. Two-dimensional supersolidity in a dipolar quantum gas / M.A. Norcia, C. Roliti, L.Klaus, et al. // Nature. - 2021. - V. 596. - P. 357-361.
 37. Wesel S. Supersolid hard-core Bosons on the triangular lattice / S. Wesel, M. Troyer // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95. - P. 127205.
 38. Heidarian D. Persistent supersolid phase of hard-core Bosons on the triangular lattice / D. Heidarian, K. Damle // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95. - P. 127206.
 39. Melko R.G. Supersolid order from disorder: hard-core Bosons on the triangular lattice / R.G. Melko // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95. - P. 127207.
 40. Boninsegni M. Supersolid phase of hard-core Bosons on a triangular lattice / M. Boninsegni, N. Prokof'ev // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V. 95. - P. 237204.
 41. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solutions / J. Hubbard // Proc.Roy.Soc. A. - 1964. - V. 281. - P. 401-419.
 42. Val'kov V.V. Unitary transformations of the group $U(N)$ and diagonalization of multilevel Hamiltonians / V.V. Val'kov // Theoretical and Mathematical Physics. - 1988. - V. 76. - I. 1. - P. 766-772.
 43. Onufrieva F.P. Low-temperature properties of spin systems with tensor order parameters / F.P. Onufrieva // Zh. Eksp. Teor. Fiz. - 1985. - V. 89. - P. 2270-2287.
 44. Val'kov V.V. Application of an indefinite metric to go over to a Bose description of $SU(3)$ Hamiltonians: The excitation spectrum of spin nematics / V.V. Val'kov, T.A. Val'kova // Zh. Eksp. Teor. Fiz. - 1991. - V. 99. - P. 1881-1897.

45. Val'kov V.V. Hubbard operators and spin-wave theory of Heisenberg magnets with arbitrary spin / V.V. Val'kov, S.G. Ovchinnikov // Theoret. and Math. Phys. - 1982. - V. 50. - I. 3. - P. 306-313.
46. Martynov A.S. Quantum $SU(3)$ -ferrimagnet on triangular lattice / A.S. Martynov, D.M. Dzebisashvili // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2024. - V. 584. - P. 171906.
47. Мартынов А.С. Квантовый $SU(3)$ ферримагнетик на треугольной решётке в магнитном поле / А.С. Мартынов, Д.М. Дзебисашвили // ЖЭТФ. - 2025. - Т. 167. - В. 1. - С. 95-114.
48. Val'kov V.V. Neel temperature of a quasi-two-dimensional triangular-lattice antiferromagnet / V.V. Val'kov, A.S. Martynov, D.M. Dzebisashvili // Theoretical and Mathematical Physics. - 2025. - V. 223. - №. 2. - P. 826-838.
49. Вальков В.В. Спектр спиновых волн и намагниченность в ферримагнетике на треугольной решетке с одноионной анизотропией / В.В. Вальков, А.С. Мартынов, Д.М. Дзебисашвили // XIV Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур (ОКНО-2023): сб. тезисов докладов – Красноярск. – 2023. – С. 76.
50. Мартынов А.С. Квантовый $SU(3)$ ферримагнетик на треугольной решётке с одноионной анизотропией / А.С. Мартынов, Д.М. Дзебисашвили // Тезисы докладов Междисциплинарной конференции молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVII) – Красноярск: ИФ СО РАН. – 2024. – секция: Физика. – С. 5. 15.
51. Мартынов А.С. Фазовая диаграмма квантового $SU(3)$ ферримагнетика с одноионной анизотропией в магнитном поле / Мартынов А.С., Дзебисашвили Д.М. // Тезисы докладов Междисциплинарной конференции молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVIII) – Красноярск: ИФ СО РАН. – 2025. – секция: Физика. – С. 21.

52. Val'kov V.V. Neel temperature and quantum renormalization in quasi-two-dimensional antiferromagnet on triangular lattice with arbitrary spin / Val'kov V.V., Dzebisashvili D.M., Martynov A.S. // Тезисы докладов IX Euro-Assan Symposium Trends in MAGnetism. September 13-17, 2025. – Yuzhno-Sakhalinsk, Russia. – С. 136-137.
53. Loktev V.M. Quantum theory of uniaxial ferromagnetic in transverse magnetic field / V.M. Loktev, V.S. Ostrovskii // Ukrainian Journal of Physics. - 1978. - V. 23. - P. 1708-1717.
54. Kosmachev O.A. Dynamic and static Properties of a non-Heisenberg ferrimagnet with single-ion easy-axis anisotropy / O.A. Kosmachev, Ya.Yu. Matyunina, Yu.A. Fridman // Journal of Experimental and Theoretical Physics. - 2022. - V. 135. - P. 354-363. .
55. Cohen-Tannoudji C. Quantum Mechanics Vol.1. / C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe. - Weinheim: Wiley-VCH, 2019. - 944p.
56. Chen H.H. Quadrupole Phase Transitions in Magnetic Solids / H.H. Chen, P.M. Levy // Phys. Rev. Lett. - 1971. - V. 27. - P. 1383.
57. Matveev V. M. Quantum quadrupolar magnetism and phase transitions in the presence of biquadratic exchange / V. M. Matveev // Zh. Eksp. Teor. Fiz. - 1973. - V. 65. - P. 1626.
58. Fridman Yu.A. Spin nematic and orthogonal nematic states in S=1 non-Heisenberg magnet / Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, Ph.N. Klevets // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2013. - V. 325. - P. 125-129.
59. Landau L.D. Quantum mechanics: non-relativistic theory Vol.3. / L.D. Landau, E.M. Lifshitz. - Elsevier, 2013. - 667C.
60. Val'kov V.V. Anomalies in the quantum excitation spectrum of a magnetic material with a strong quasiparticle interaction / V.V. Val'kov, T.A. Val'kova // JETP Letters. - 1990. - V. 52. - P. 1176.
61. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев. - М: Наука, 1971.- 417с.

62. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. - М: Наука, 1965.- 527с.
63. Mermin N.D. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models / N.D. Mermin, H. Wagner // Phys.Rev.Lett. - 1966. - V. 17. - P. 1133.