

05

Особенности формирования фазовых состояний в негейзенберговском магнетике с $S = 2$

© О.А. Космачев, Ю.А. Фридман

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

E-mail: frid@tnu.crimea.ua

(Поступила в Редакцию 1 августа 2012 г.)

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

1. Введение

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

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

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

2. Одноподрешеточный магнетик

Гамильтониан исследуемой системы можно представить в виде

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

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

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

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

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

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

где

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

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

Для диагонализации одноузельного гамильтониана (4) необходимо провести $M(M - 1)$ поворотов в спиновом пространстве ($M = 5$ — число энергетических уровней магнитного иона). Для этой процедуры воспользуемся методом диагонализации гамильтониана N -уровневой системы, в основе которого лежит использование алгебры операторов Хаббарда [10,11]. Прежде всего перейдем в собственную систему координат, в которой OZ — ось квантования и $\langle S^x \rangle_0 = \langle S^y \rangle_0 = 0$, а тензор квадрупольного момента q_2^i приведен к главным осям — $q_2^i = 0$ ($i = xy, yz, zx$).

На базисе оператора S^z построим операторы Хаббарда $X^{ij} \equiv |i\rangle\langle j|$, которые связаны со спиновыми операторами соотношениями

$$S^+ = 2(X^{21} + X^{-1-2}) + \sqrt{6}(X^{10} + X^{0-1});$$

$$S^- = (S^+)^+; \quad 2S^z = [S^+, S^-].$$

Формально одноузельный гамильтониан в представлении операторов Хаббарда можно представить как

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

где E_i' — „затравочный спектр“ энергетических уровней магнитного иона; V_{ij} — недиагональные амплитуды. В результате унитарных преобразований одноузельный гамильтониан примет диагональный вид

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

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

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

Параметры преобразований определяются системой уравнений

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

В общем случае для диагонализации 5-уровневой системы должно быть проведено 20 унитарных преобразований. Однако, поскольку мы находимся в собственной системе координат, в которой, в частности $\langle S^y \rangle_0 = 0$, и другие средние равны нулю, то число „поворотов“ уменьшается вдвое. Кроме того, недиагональные амплитуды V_{i+1} и V_{i-1} равны нулю, следовательно, для приведения одноузельного гамильтониана (4) к диагональному виду достаточно провести 6 „поворотов“. Поскольку мы рассматриваем только случай низких температур ($T \rightarrow 0$), можно предположить, что магнитные ионы находятся в основном состоянии $|\psi_{g.s.}\rangle = |\psi_2\rangle$.

Из шести преобразований на вид основного состояния оказывают влияние только три $U_{2-2}(\varphi)$, $U_{20}(\beta)$, $U_{2-1}(\theta)$. Если основное состояние не вырождено, его можно представить в виде

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

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

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

Здесь введены следующие обозначения:

$$\tilde{J}_0 = 2J_0 - K_0 + 41D_0 - 79F_0, \quad \tilde{K}_0 = K_0 - 5D_0 + 43F_0.$$

Поскольку мы рассматриваем поведение магнетика в случае низких температур ($T \rightarrow 0$), для анализа спиновых состояний достаточно ограничиться учетом нижайшего энергетического уровня. В этом случае плотность свободной энергии системы совпадает с энергией основного состояния (6). Анализ плотности свободной энергии позволяет сделать некоторые выводы о спиновых состояниях системы при различных соотношениях обменных интегралов. При этом предполагается, что константа билинейного взаимодействия положительна ($J_0 > 0$), что соответствует одноподрешеточному магнетиту.

1. Предположим, что соотношение обменных интегралов таково, что $\tilde{J}_0 > K_0, D_0, F_0$. Это условие на материальные константы соответствует следующим параметрам унитарных преобразований: $\varphi = \beta = \theta = 0$. В этом случае нижайшим энергетическим уровнем является E_2 , а волновая функция основного состояния имеет вид $|\psi_2\rangle = |2\rangle$. С учетом этого, средние по этому состоянию равны

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

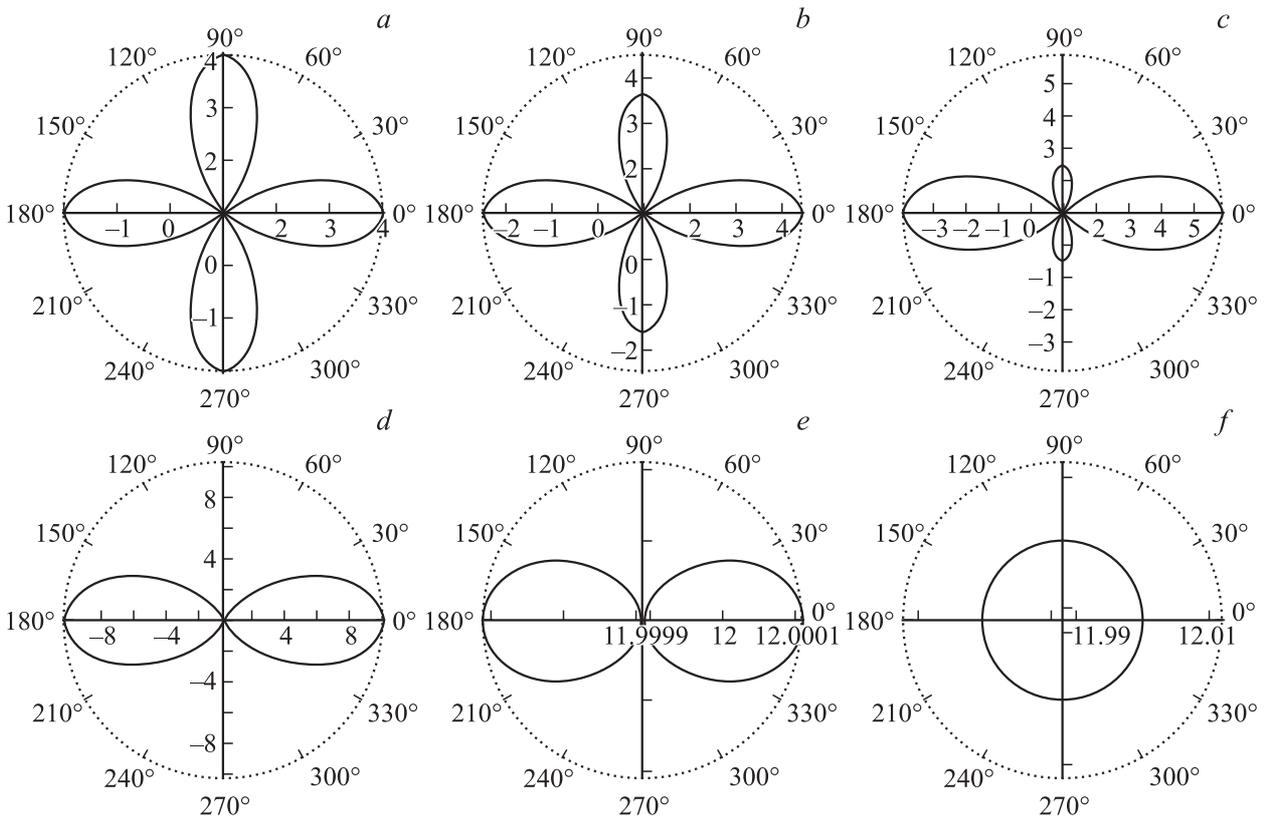
Следовательно, параметры порядка в этом состоянии равны

$$\langle S^z \rangle = 2, \quad q_2^0 = \langle O_2^0 \rangle = 3\langle (S^z)^2 \rangle - 6 = 6,$$

$$q_3^0 = \langle O_3^0 \rangle = 5\langle (S^z)^3 \rangle - 17\langle S^z \rangle = 6,$$

$$q_4^0 = \langle O_4^0 \rangle = 35\langle (S^z)^4 \rangle - 155\langle (S^z)^2 \rangle + 72 = 12.$$

Это состояние назовем ферромагнитным (FM).



Зависимость „гофрировки“ эллипсоида от параметра β : $a - \beta = 0$, $b - \beta = \frac{\pi}{100}$, $c - \beta = \frac{\pi}{25}$, $d - \beta = \frac{\pi}{10}$, $e - \beta = \frac{\pi}{2.00001}$, $f - \beta = \frac{\pi}{2}$.

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

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

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

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

Это спиновое состояние назовем „спиновый нематик“ или „квадрупольное состояние“ и обозначим его QU . Это состояние в спиновом пространстве можно представить как эллипсоид вращения (с осью вращения OZ), поскольку для него

$$\begin{aligned} \langle (S^z)^2 \rangle &= 4 \cos^2 \beta, \\ \langle (S^{x(y)})^2 \rangle &= \frac{1}{2} (\sqrt{6} \sin \beta \pm \sqrt{2} \cos \beta)^2. \end{aligned}$$

Однако в отличие от FM-состояния (образом которого также является эллипсоид вращения с „осями“) $\langle (s^z)^2 \rangle = 4, \langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = 1$ в QU -состоянии эллипсоид является „гофрированным“ в плоскости XOY , т.е.

$$\begin{aligned} \langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^4 \rangle &= \frac{2}{3} \cos^2 \beta \cos 4\chi + \frac{5}{2} \cos^2 \beta \\ &+ 12 \sin^2 \beta + 4\sqrt{3} \cos 2\beta \cos 2\chi, \\ \langle (S^z \cos \chi + S^i \sin \chi)^4 \rangle_{i=x,y} &\sim \text{const.} \end{aligned}$$

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

Необходимо также отметить, что параметр унитарного преобразования β , „смешивающий“ состояния $|2\rangle$

и $|0\rangle$, в рамках данной модели является неопределенным. Эта неопределенность является следствием симметрии гамильтониана системы, и исчезает на линиях фазовых переходов, где симметрия нарушается. Включение одноионной анизотропии или другого релятивистского взаимодействия, например, магнитоупругого, снимет вырождение по этому параметру. Однако анализ спектров элементарных возбуждений позволяет уточнить параметр β во всяком случае на линиях неустойчивости QU -фазы [7,8].

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

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

а параметры порядка равны

$$\langle S^z \rangle = 0, \quad q_2^0 = 0, \quad q_3^0 = 10,$$

$$q_3^3 = \langle O_3^3 \rangle = \frac{1}{2}(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle) = 4\sqrt{2},$$

$$q_4^0 = -28;$$

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

где символ $[A, B]_+$ означает антикоммутиатор.

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

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

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

$$\langle (S^z \cos \chi + S^x \sin \chi)^3 \rangle = 2 \cos^3 \chi$$

$$+ \frac{1 + \sqrt{2}}{2} \sin^3 \chi - \frac{7}{3} \cos \chi \sin^2 \chi,$$

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

Легко видеть, что коррелятор $\langle (S^x \cos \chi + S^y \sin \chi)^3 \rangle$ инвариантен относительно поворотов в плоскости XOY на угол $\frac{2\pi}{3}$, следовательно, в этой плоскости лежит равносторонний треугольник. Если в спиновом пространстве сделать два поворота, так, чтобы коррелятор $\langle (S^z \cos \chi + S^x \sin \chi)^3 \rangle$ лежал в плоскости ZOX (\hat{S}^i — компоненты спиновых операторов в „подвернутой“ системе координат), то он также будет пропорционален $\cos 3\chi$. Следовательно, эта грань также представляет собой равносторонний треугольник. Таким образом,

геометрическим образом этого спинового состояния является тетраэдр. Это фазовое состояние назовем TQ -состоянием [7,8].

Кроме того, TQ -состояние обладает еще одним интересным свойством. В магнетиках со спином бóльшим единицы имеется еще один дополнительный параметр порядка, описываемый ненулевыми средними от кубических по спиновым операторам выражений [12]. Если волновую функцию этого состояния представить в виде $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle + \sqrt{2}| -1\rangle e^{i\gamma})$, то легко показать, что $\sigma^{(\pm)} = \langle (S^x \pm iS^y)^3 \rangle = \langle (S^\pm)^3 \rangle = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}$. Тогда мы можем сформировать вектор σ с компонентами $\sigma^x = \frac{\sigma^+ + \sigma^-}{2} = 4\sqrt{2} \cos \gamma$, $\sigma^y = \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{2i} = 4\sqrt{2} \sin \gamma$:

$$\sigma = \mathbf{e}^x \sigma^x + \mathbf{e}^y \sigma^y = 4\sqrt{2}(\mathbf{e}^x \cos \gamma + \mathbf{e}^y \sin \gamma).$$

Этот вектор, при отражении времени, ведет себя как вектор намагниченности, поэтому вектор σ является псевдоспином [12]. Таким образом, в рассматриваемой системе имеется еще один дополнительный параметр порядка, описываемый ненулевыми средними от кубических по спиновым операторам выражений. Переменная γ определяет ориентацию \mathbf{m} и σ в плоскости XOY . Еще раз подчеркнем, что σ меняет знак при обращении времени, поэтому он ведет себя как „псевдоспин“.

3. Двухподрешеточный магнетик

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

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

Дальнейшие вычисления аналогичны приведенным ранее, при рассмотрении одноподрешеточного магнетика. Поэтому мы можем сразу выписать плотность свобод-

ной энергии при низких температурах

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

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

$$|\psi_{\text{grst.}}\rangle = U_{2-1}^+(\theta) U_{20}^+(\beta) U_{2-2}^+(\varphi) |2\rangle = \cos \varphi \cos \beta \cos \theta |2\rangle \\ + \sin \beta |0\rangle + \sin \theta | - 1\rangle + \sin \varphi \cos \beta | - 2\rangle. \quad (9)$$

Из условия минимума плотности свободной энергии (8) можно определить равновесные значения параметров β, θ, φ . Причем, существует три набора равновесных параметров, соответствующие различным спиновым состояниям.

1. $\varphi = \beta = \theta = 0$. Это решение, соответствующее условию максимального насыщения $\langle S^z \rangle = 2$, устойчиво при $\tilde{J}'_0 < 0$ и $\tilde{J}'_0 - 3\tilde{K}'_0 < 0$. Кроме того, в этом состоянии отличными от нуля являются только осевые тензорные моменты:

$$q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S(S+1) = 6, \\ q_3^0 = 5\langle (S^z)^3 \rangle - \langle S^z \rangle (3S(S+1) - 1) = 6, \\ q_4^0 = 35\langle (S^z)^4 \rangle - \langle (S^z)^2 \rangle [30S(S+1) - 25] \\ - 3S(S+1)[2 - S(S+1)] = 12.$$

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

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

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

$q_2^0 = q_2^2 = 0$. На первый взгляд, такое состояние напоминает парамагнитное, поскольку $\langle (S^x)^2 \rangle = \langle (S^y)^2 \rangle = \langle (S^z)^2 \rangle = 2$. Однако, поскольку в модели учитываются высшие спиновые инварианты, то спиновое состояние характеризуется высшими тензорными компонентам:

$$q_3^0 = 10, \quad q_3^3 = \frac{1}{2} (\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle) = 4\sqrt{2}, \\ q_4^0 = -28, \quad q_4^3 = \frac{1}{4} \langle [S^z, ((S^+)^3 + (S^-)^3)]_+ \rangle = 2\sqrt{2}.$$

Во второй подрешетке компоненты тензора имеют вид: $q_3^0 = -10$, $q_3^3 = -4\sqrt{2}$, $q_4^0 = -28$, $q_4^3 = 2\sqrt{2}$. Функция основного состояния первой подрешетки имеет вид $|\psi_{\text{grst.}}\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle) / \sqrt{3}$, а второй подрешетки — $|\psi_{\text{grst.}}\rangle = (|-2\rangle - \sqrt{2}|1\rangle) / \sqrt{3}$. Как отмечалось ранее, геометрическим образом этого состояния в спиновом пространстве является тетраэдр. Причем во второй подрешетке этот тетраэдр развернут относительно тетраэдра первой подрешетки на угол π , что видно из соответствующего коррелятора

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

где S_2^i — компоненты спинового оператора во второй подрешетке.

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

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

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

$$\sigma^{(\pm)} = \langle (S^x \pm iS^y)^3 \rangle = \langle (S^{\pm})^3 \rangle = 4\sqrt{2}e^{\pm i\gamma}.$$

Тогда можно сформировать вектор σ с компонентами

$$\sigma^x = (\sigma^+ + \sigma^-) / 2 = 4\sqrt{2} \cos \gamma,$$

$$\sigma^y = (\sigma^+ - \sigma^-) / 2i = 4\sqrt{2} \sin \gamma :$$

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

Этот вектор, при обращении времени, ведет себя как вектор намагниченности, поэтому вектор σ является псевдоспином. Во второй подрешетке $\sigma_{(2)} = -4\sqrt{2} \times (\cos \gamma \mathbf{e}_x + \sin \gamma \mathbf{e}_y)$, что также поясняет приставку „анти“ в названии фазы.

4. Заключение

В результате проведенных исследований установлено, что учет высших спиновых инвариантов, связанных с величиной спина магнитного иона, приводит к возникновению новых квантовых эффектов, в частности, возникновению новых нематических фаз: тетраэдрической и антитетраэдрической, в которых основным состоянием является $|\psi\rangle = (|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)/\sqrt{3}$. Кроме того, нематическая фаза становится вырожденной по параметру поворота в спиновом пространстве. Показано, что геометрическим образом нематического состояния является двухосный эллипсоид, в отличие от случая $S = 1$ [5], где геометрическим образом в нематической фазе является одноосный эллипсоид. В системе не реализуется антинематическая фаза как в случае полупрочного спина $S = 3/2$, — ее аналогом становится антитетраэдрическая фаза. В тетраэдрической и антитетраэдрической фазах возникает дополнительный параметр — псевдоспин, который при отражении времени $t \rightarrow -t$ преобразуется как вектор истинного спина. В работе показано, что негејзенберговский магнетик с $S = 2$ содержит спиновые нематические и антинематические состояния, которые в добавок к спонтанному нарушению вращательной симметрии, характеризуемому дальним магнитным упорядочением нематического, обнаруживают нарушение симметрии обращения времени, описываемое вектором псевдоспина σ , и соответствующее октопольному упорядочению. Новая антинематическая (антитетраэдрическая) фаза отличается от нематической типом упорядочения по σ (однородное или шахматное). Необходимо отметить, что возникновение состояний с параметром порядка „псевдоспин“ возможно лишь для негејзенберговских магнетиков с $S > 1$, поскольку этот параметр описывается ненулевыми средними от кубических по спиновым операторам выражений.

Авторы благодарят Б.А. Иванова за интерес, проявленный к данной работе, плодотворную дискуссию и полезные замечания.

Список литературы

- [1] В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.Ф. Яблонский. Функции Грина в теории магнетизма. Наук. думка, Киев (1984). 336 с.
- [2] А.И. Ахиезер, В.Г. Барьяхтар, С.В. Пелетминский. Спиновые волны. Наука, М. (1967). 368 с.
- [3] Э.Л. Нагаев. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. Наука, М. (1988). 232 с.
- [4] Н.Н. Chen, P.M. Levy. Phys. Rev. Lett. **27**, 1383 (1971).
- [5] N. Papanikolaou. Nucl. Phys. **305**, 367 (1988).
- [6] A.V. Chubukov, K.I. Ivanova, P.Ch. Ivanov, E.R. Korutcheva. J. Phys.: Cond. Matter **3**, 2665 (1991).
- [7] A.M. Turner, R. Barnett, E. Demler, A. Vishwanath. Phys. Rev. Lett. **98**, 190 404 (2007).
- [8] R. Barnett, A.M. Turner, E. Demler. Phys. Rev. Lett. **97**, 180 412 (2006).
- [9] Yu.A. Fridman, O.A. Kosmachev, A.K. Kolezhuk, B.A. Ivanov. Phys. Rev. Lett. **106**, 097 202 (2011).
- [10] P.O. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- [11] В.В. Вальков. ТМФ **76**, 143 (1988).
- [12] В.И. Марченко. Письма в ЖЭТФ **48**, 7, 387 (1988).