

УДК 548 : 537.621

ВЛИЯНИЕ СИЛЬНОГО КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МАГНЕТИКОВ С БИКВАДРАТНЫМ ОБМЕНОМ

В. В. Вальков, Г. Н. Мацулева, С. Г. Овчинников

Исследуются спектральные свойства сильноанизотропных магнетиков с биквадратным обменным взаимодействием. Получено дисперсионное уравнение, описывающее квантовый спектр возбуждений негейзенберговских магнетиков при точном учете одноионной анизотропии произвольной симметрии. Для двухосного негейзенберговского магнетика с $S=1$ при $H=0$ построена фазовая диаграмма, определяющая структуру основного состояния системы при произвольных значениях констант анизотропии и биквадратного обмена. Во всех фазах в аналитическом виде вычислены две ветви спектра коллективных возбуждений. Показано, что при изменении констант анизотропии либо величины биквадратного обмена, когда происходит переход из одной фазы в другую, имеет место смягчение либо продольной, либо поперечной ветви. На границе раздела фаз спектр возбуждений сильноанизотропного магнетика содержит одну бесщелевую ветвь с линейным по квазиимпульсу законом дисперсии в длинноволновой области.

Известно, что магнитные свойства кристаллов с магнитоактивными ионами, находящимися в орбитальных S -состояниях, достаточно полно описываются гейзенберговской моделью лишь для величины спина $S=1/2$. При больших значениях спина обменное взаимодействие между локализованными моментами определяется выражением, содержащим, вообще говоря, инварианты, отличные от гейзенберговского [1]. Так, например, обстоит дело при учете квадрупольного взаимодействия [2, 3]. Экспериментально исследовано большое число магнетиков (DySb, TbTe, TmCu, CsMnBr₃ и т. д.), в которых взаимодействие высших мультиполей играет существенную роль в формировании свойств основного состояния, спектральных и термодинамических характеристик (обзор современного состояния теории и эксперимента негейзенберговских магнетиков см. в [4, 5]). Среди таких объектов имеются как изотропные магнетики (например, EuSe, GdMg [4]), так и соединения, обладающие значительной анизотропией (TbMg [4], TmZn, TmCd [6-8]).

Между тем теоретические модели с биквадратным обменом исследовались в основном в изотропном пределе. Так, в [2, 3, 9-12] определены свойства основного состояния в зависимости от величины биквадратного обмена и вычислен спектр элементарных возбуждений. Коллективный спектр изотропной квадрупольной фазы получен в [9].

Влияние двухионного анизотропного квадрупольного взаимодействия кубической симметрии на свойства негейзенберговского магнетика с $S=1$ исследовано в [13]. Вычислены две ветви спектра возбуждений в ферромагнитной и квадрупольной фазах при двух направлениях оси легкого намагничивания. Особенности элементарных возбуждений в четырехподрешеточном UO_2 при учете одноионной анизотропии и взаимодействий высших мультиполей были исследованы в [14].

Для многих магнетиков с биквадратным обменным взаимодействием и сильными эффектами кристаллического поля наблюдаются низкие температуры магнитного упорядочения (так, для TmZn $T_c=8.12$ K [6]).

Поэтому в таких объектах характерные энергии одноионной анизотропии оказываются сравнимыми с характерными энергиями обменных взаимодействий. Это обстоятельство приводит к необходимости развития теории негейзенберговских магнетиков при точном учете одноионной анизотропии.

Другая сторона затрагиваемой здесь проблемы состоит в том, что симметрия кристаллического поля, в котором находятся магнитоактивные ионы, может быть, например, гексагональной, ромбической или кубической. Поэтому представляет интерес развить теорию негейзенберговских магнетиков при точном учете одноионной анизотропии произвольной симметрии и получить, в частности, дисперсионное уравнение, описывающее спектр квантовых возбуждений таких систем. Используя такое дисперсионное уравнение, можно проследить за изменением спектральных характеристик негейзенберговских магнетиков в области значений констант анизотропии, сравнимых с обменными параметрами.

Решению поставленных выше задач посвящена данная работа. Использование диаграммной техники в атомном представлении позволило получить явный вид искомого дисперсионного уравнения. Теория применена для исследования спектральных свойств двухосного магнетика с биквадратным обменным взаимодействием и $S=1$ в нулевом внешнем магнитном поле. Получена фазовая диаграмма, определяющая структуру основного состояния при различных значениях констант анизотропии B_2^0 и B_2^2 , величин гейзенберговского и биквадратного обменов. Для всех фаз найдены аналитические выражения для двух ветвей спектра. Точный учет анизотропии позволил определить характеристики системы при произвольных соотношениях между параметрами модели и исследовать особенности изменения спектральных свойств при переходах между различными фазами, когда константы анизотропии сравнимы с интегралами обменных взаимодействий.

1. Гамильтониан негейзенберговского магнетика с одноионной анизотропией | в атомном представлении

Влияние сильного кристаллического поля на свойства магнетиков с биквадратным обменом будем исследовать на основе следующего гамильтониана:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{fg} [I_{fg}(S_f S_g) + K_{fg}(S_f S_g)^2] + \sum_f [\mathcal{H}_a(f) - HS_f], \quad (1)$$

где учтено гейзенберговское, биквадратное обменное и зеемановское взаимодействия. Член

$$\mathcal{H}_a(f) = \sum_{nm} B_n^m O_n^m(f)$$

описывает действующее на магнитоактивные ионы кристаллическое поле [15]; $O_n^m(f)$ — операторы Стевенса. Набор отличных от нуля коэффициентов B_n^m определяет конкретную симметрию одноионной анизотропии (ОА). Развиваемая ниже теория позволяет провести рассмотрение для произвольного случая, не ограничиваясь заранее той или иной симметрией кристаллического поля. При сильной ОА слагаемое $\mathcal{H}_a(f)$ необходимо учитывать точно. Этого можно достичь, если перейти к атомному представлению [13, 16, 17], в котором все одноузельные корреляции описываются корректным образом.

Для записи гамильтониана (1) в атомном представлении необходимо ввести базис одноионных состояний, который должен строиться не только с учетом обычного обменного самосогласованного поля, но и при учете самосогласованного поля, которое обусловлено существованием квадрупольного взаимодействия. Эти поля удобно выделить, если обменную часть гамильтониана переписать в эквивалентной форме

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{exch}} = & -\frac{1}{6} NK_0 S^2 (S+1)^2 - \frac{1}{2} \sum_{fg} \left(I_{fg} - \frac{1}{2} K_{fg} \right) (S_f S_g) - \\ & - \frac{1}{4} \sum_{fg} K_{fg} \left[\frac{1}{3} O_{2f}^0 O_{2g}^0 + \sum_{t=2, xy, yz, zx} O_{2f}^t O_{2g}^t \right], \end{aligned} \quad (2)$$

где операторы O_{2f}^p ($p=0, 2, xy, yz, zx$) связаны со спиновыми операторами соотношениями

$$O_{2f}^0 = 3(S_f^z)^2 - S(S+1), \quad O_{2f}^2 = \frac{1}{2} [(S^+)^2 + (S^-)^2], \quad O_{2f}^{xy} = S_f^x S_f^y + S_f^y S_f^x, \dots$$

Тогда из (1), (2) следует, что одноионный гамильтониан может быть представлен следующим образом:

$$\mathcal{H}_0(f) = \varepsilon_0 - \bar{H} S_f - \frac{1}{2} K_0 \left(\frac{1}{3} q_2^0 O_{2f}^0 + \sum_t q_2^t O_{2f}^t \right) + \sum_{nm} B_n^m O_n^m(f), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 = & -\frac{1}{6} K_0 S^2 (S+1)^2 + \frac{1}{2} \left(I_0 - \frac{1}{2} K_0 \right) \langle S \rangle^2 + \frac{K_0}{12} (q_2^0)^2 + \frac{K_0}{4} \sum_t (q_2^t)^2, \\ \bar{H} = & H + \left(I_0 - \frac{1}{2} K_0 \right) \langle S \rangle, \quad q_2^p = \langle O_{2f}^p \rangle. \end{aligned}$$

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением области положительных значений I_0 и K_0 . В противном случае необходимо учитывать возможность образования двухподрешеточных структур [3-5, 10].

Гамильтониан (3) определяет базис одноионных состояний

$$\mathcal{H}_0(f) | \Psi_n(f) \rangle = E_n | \Psi_n(f) \rangle, \quad n = 1, 2, \dots, 2S+1, \quad (4)$$

на котором обычным образом строятся операторы Хаббарда

$$X_f^{nm} = | \Psi_n(f) \rangle \langle \Psi_m(f) |. \quad (5)$$

Для получения компактной записи гамильтониана (1) через операторы X_f^{nm} введем параметры представления $\gamma_i^{\pm(\lambda)}$ (λ), определение которых следует из разложений одноузельных операторов по операторам Хаббарда

$$\begin{aligned} S_f^+ &= \sum_{\lambda} \gamma_1^+(\lambda) X_f^{\lambda}, \quad S_f^z = \sum_{\lambda} \gamma_1^0(\lambda) X_f^{\lambda}, \\ (S_f^+)^2 &= \sqrt{2} \sum_{\lambda} \gamma_2^+(\lambda) X_f^{\lambda}, \quad (S_f^z)^2 = \sqrt{\frac{2}{3}} \sum_{\lambda} \gamma_2^0(\lambda) X_f^{\lambda}, \\ S_f^z S_f^+ &= \sum_{\lambda} \gamma_3^0(\lambda) X_f^{\lambda}. \end{aligned} \quad (6)$$

Индекс λ является либо индексом одноионного состояния и тогда $X^{\lambda} \equiv X^{nn}$ (если $\lambda = n$), либо корневым вектором [17] и тогда $X^{\lambda} \equiv X^{\alpha(n, m)} \equiv X^{nm}$ (если $\lambda = \alpha(n, m)$). Из сказанного следует, что параметры представления являются матричными элементами разлагаемого оператора в базисе (4). Так, например,

$$\gamma_3^0(\lambda) = \begin{cases} \langle \Psi_n | S^z S^+ | \Psi_n \rangle, & \text{если } \lambda = n, \\ \langle \Psi_n | S^z S^+ | \Psi_m \rangle, & \text{если } \lambda = \alpha(n, m). \end{cases}$$

Используя (4)–(6), получим, что гамильтониан анизотропного магнетика с биквадратным взаимодействием в атомном представлении может быть записан в виде

$$\mathcal{H} = \sum_f \sum_n E_n X_f^{nn} - \frac{1}{2} \sum_{fg} \sum_{\lambda\lambda'} \{ c(\lambda), A_{fg} c(\lambda') \} \Delta X_f^{\lambda} \Delta X_g^{\lambda'}, \quad (7)$$

где матричный элемент двухузельного взаимодействия $V_{fg}^{\lambda\lambda'}$ записан через скалярное произведение восьмимерного вектора

$$c(\lambda) = \{\gamma_1^+(\lambda), \gamma_1^-(\lambda), \gamma_1^{*+}(-\lambda), \gamma_2^+(\lambda), \gamma_2^-(\lambda), \gamma_2^{*+}(-\lambda), \gamma_3^+(\lambda), \gamma_3^{*+}(-\lambda)\}$$

на вектор $\hat{A}_{fg} c(\lambda')$ с матрицей \hat{A}_{fg} , распадающейся на прямую сумму двух матриц

$$\hat{A}_{fg} = \hat{A}_{fg}^{(3)} \oplus \hat{A}_{fg}^{(5)},$$

$$\hat{A}_{fg}^{(3)} = \left(I_{fg} - \frac{1}{2} K_{fg} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{A}_{fg}^{(5)} = K_{fg} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Параметр $\gamma_3^+(\lambda) = 1/\sqrt{2} \cdot [2\gamma_3'(\lambda) - \gamma_1^+(\lambda)]$ и $c(-n) = c(n)$, $\Delta X_j^\lambda = X_j^\lambda - \langle X_j^\lambda \rangle$.

2. Дисперсионное уравнение

Спектр элементарных возбуждений рассматриваемого магнетика может быть получен из анализа полюсов Фурье-образа функции Грина [17]

$$D_{\alpha\beta}(f\tau; g\tau') = - \langle T_\tau \hat{X}_f^\alpha(\tau) \hat{X}_g^{-\beta}(\tau') \rangle. \quad (8)$$

Вычисление функции $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega_n)$ будем проводить методом диаграммной техники для операторов Хаббарда [13, 17]. В качестве малого параметра, позволяющего применить теорию возмущений, используется, как и в [18], обратный объем взаимодействия. В нулевом приближении по r_0^{-3} система уравнений для нахождения $D_{\alpha\beta}$ в графической форме записывается следующим образом:

$$\begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array} = \begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \uparrow \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} \xrightarrow{\alpha} \\ \text{---} \\ \xrightarrow{\gamma} \\ \xrightarrow{\beta} \end{array}. \quad (9)$$

Мы используем систему обозначений, которая была принята в [13, 17, 19, 20]. Сопоставляя (9) с аналитической записью, получим

$$D_{\alpha\beta}^{(0)} = D_\alpha(\omega_n) b(z) \delta_{\alpha\beta} - \sum_\gamma D_\alpha(\omega_n) b(a) V_k^{-\alpha\gamma} D_{\gamma\beta}^{(0)}. \quad (10)$$

Решение этой системы $2S(2S+1)$ уравнений может быть записано для произвольного S , если учесть расщепленный характер зависимости $V_k^{-\alpha\gamma}$ от индексов α и γ

$$V_k^{-\alpha\gamma} = \{c(-a), \hat{A}_k c(\gamma)\}.$$

Тогда, применяя методикку, изложенную в [19, 20], получим, что исконое дисперсионное уравнение может быть записано в виде

$$\Delta(\mathbf{k}, \omega) = \det \| 1 + \hat{L}(\omega) \hat{A}_k \| = 0. \quad (11)$$

Компоненты восьмимерной матрицы $\hat{L}(\omega)$ выражаются через параметры представления

$$L_{ij} = \sum_a \frac{c_i(a) c_j(-a) b(a)}{\omega + aE + i\delta}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (12)$$

Дисперсионное уравнение (11) получено для произвольной геометрии задачи, любой величины спина и пригодно для исследования спектральных свойств анизотропных магнетиков с биквадратным обменным взаимодействием. Поскольку при выводе (11) симметрия системы заранее не оговаривалась, а все одноузельные корреляции учтены точно, то уравнение (11) описывает спектр возбуждений при произвольной симметрии кристаллического поля и любых значениях констант анизотропии. Конкретность

задачи проявляется через параметры представления, спектр одноионных уровней энергий, Фурье-образы обменных интегралов и т. д.

Заметим, что в рамках используемого нами метода задача сохранения правильных коммутационных соотношений для спиновых операторов и учета конечности одноионных состояний решается автоматически, поскольку представление (6) является точным, а особенности алгебры операторов Хаббарда принимаются во внимание на всех этапах вычисления.

Учет биквадратного обмена привел к увеличению размерности детерминанта (11) с трех, как было в [19, 20], до восьми. Это обусловлено тем, что в нашем случае алгебра операторов, описывающих тензорный характер парного взаимодействия, является алгеброй SU (3), число образующих которой равно восьми.

3. Спектральные свойства двухосного негейзенберговского магнетика с $S=1$ при $H=0$

Применим полученное дисперсионное уравнение (11) для анализа влияния сильной ОА на спектр квантовых возбуждений магнетика с биквадратным обменом. Для спина $S=1$ наиболее общий вид оператора энергии ОА записывается следующим образом [15]:

$$\mathcal{H}_\alpha = -B_2^2 O_2^2 - B_2^2 O_2^2 \quad (13)$$

Не ограничивая общности, можно считать, что $B_2^2 > 0$, поскольку при $B_2^2 < 0$ после поворота системы координат вокруг оси Oz на угол $\pi/2$ мы получили бы тот же гамильтониан, но с заменой $B_2^2 \rightarrow |B_2^2|$. Далее нетрудно убедиться, что в рассматриваемом нами случае $H=0$ спонтанный момент $\langle S \rangle$, если он отличен от нуля, может ориентироваться либо вдоль оси Oz , либо вдоль оси Ox . Ферромагнитное состояние с направлением $\langle S \rangle$ вдоль оси Oz будем обозначать через ΦM_z , а при ориентации $\langle S \rangle$ вдоль оси Ox — ΦM_x . Теоретический анализ второго случая может быть сведен к первому, если учесть, что после поворота системы координат вокруг оси Oy на угол $\pi/2$ направление $\langle S \rangle$ будет совпадать с направлением оси Oz , а оператор (13) сохраняет свою форму при следующем преобразовании констант анизотропии:

$$B_2^2 \rightarrow B_2'^2 = \frac{1}{2} (B_2^2 - B_2^2), \quad B_2^2 \rightarrow B_2'^2 = \frac{1}{2} |B_2^2 + 3B_2^2|. \quad (14)$$

Практически это означает, что формулы, описывающие характеристики системы в ΦM_x -фазе, будут описывать эти же характеристики и в ΦM_z -фазе, если совершить преобразование (14). Заметим, что последнее утверждение справедливо для рассматриваемого случая изотропного парного взаимодействия. Для анизотропного обменного взаимодействия пришлось бы внести коррекцию, связанную с изменением вида парного взаимодействия при используемых преобразованиях координат.

Из сказанного следует, что для построения атомного представления и последующего вычисления спектральных свойств рассматриваемого магнетика можно использовать базис одноионных состояний, задаваемый следующим одноионным гамильтонианом (индекс узла f опущен):

$$\mathcal{H}_0 = \varepsilon_0 - \hat{H} S^z - \tilde{B}_2^2 O_2^2 - \tilde{B}_2^2 O_2^2, \quad (15)$$

где

$$\varepsilon_0 = -\frac{2}{3} K_0 + \frac{1}{2} \left(I_0 - \frac{1}{2} K_0 \right) \sigma^2 + \frac{1}{4} K_0 \left[\frac{1}{3} (q_2^2)^2 + (q_2^2)^2 \right],$$

$$\hat{H} = (I_0 - 1/2 K_0) \sigma, \quad \sigma = \langle S^z \rangle.$$

Наличие биквадратного обменного взаимодействия приводит к перенормировке «затраченных» констант ОА

$$\tilde{B}_2^2 = B_2^2 + 1/6 K_0 q_2^2, \quad \tilde{B}_2^2 = B_2^2 + 1/2 K_0 q_2^2.$$

Собственными состояниями \mathcal{H}_0 , как и в [17], являются функции

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |-1\rangle, & E_1 &= \varepsilon_0 - \bar{B}_0^2 - \sqrt{H^2 + (\bar{B}_0^2)^2}, \\ |\Psi_2\rangle &= |0\rangle, & E_2 &= \varepsilon_0 + 2\bar{B}_0^2, \\ |\Psi_3\rangle &= \cos \varphi |-1\rangle - \sin \varphi |1\rangle, & E_3 &= \varepsilon_0 - \bar{B}_0^2 - \sqrt{H^2 + (\bar{B}_0^2)^2}, \end{aligned} \quad (16)$$

где угол φ определяется соотношениями

$$\cos 2\varphi = H/\sqrt{H^2 + (\bar{B}_0^2)^2}, \quad \sin 2\varphi = \bar{B}_0^2/\sqrt{H^2 + (\bar{B}_0^2)^2} \quad (17)$$

и находится самосогласованным образом.

Предположим, что в интересующей нас области параметров $E_2 > E_1$. Тогда функция $|\Psi_1\rangle$ соответствует основному состоянию магнитоактивного иона, причем при $0 \leq \varphi < \pi/4$ имеем ферромагнитное упорядочение с $\sigma = \cos 2\varphi$, а при $\varphi = \pi/4$ — квадрупольное (см. ниже). Следовательно, вычислив спектр возбуждений при использовании базиса (16) с функцией $|\Psi_1\rangle$ в качестве функции основного состояния, мы будем знать энергии возбуждений как в ФМ_x-состоянии, так и в квадрупольной фазе. С учетом же преобразований (14) находится спектр и в ФМ_x-состоянии.

Вычислим прежде всего матричные элементы от одноузельных операторов (6) в базисе (16). Здесь мы приведем лишь отличные от нуля параметры представления, которые необходимы для вычисления спектральных свойств в низкотемпературной области

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} c_2(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} c_3(2, 1) = c_7(1, 2) = c_8(2, 1) = \cos \varphi, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} c_2(2, 1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} c_3(1, 2) = -c_7(2, 1) = -c_8(1, 2) = \sin \varphi, \\ c_1(1, 3) &= c_1(3, 1) = -\sin 2\varphi, \quad c_5(1, 3) = c_5(3, 1) = \sqrt{2} \cos^2 \varphi, \\ c_6(1, 3) &= c_6(3, 1) = -\sqrt{2} \sin^2 \varphi, \quad c_i(n, m) = c_i(\alpha(n, m)). \end{aligned}$$

Воспользовавшись далее формулой (12), получаем явный вид матрицы $\hat{L}(\omega)$. После чего из решения дисперсионного уравнения (11) находим, что спектр возбуждений рассматриваемого магнетика с $S = 1$ состоит из продольной и поперечной ветвей

$$\Omega_{\parallel}(q) = \{(\varepsilon_{31} - K_q)[\varepsilon_{31} - K_q - 2(I_q - K_q) \sin^2 2\varphi]\}^{1/2}, \quad (18)$$

$$\Omega_{\perp}(q) = \{(\varepsilon_{21} - I_q)^2 - (I_q - K_q)^2 \sin^2 2\varphi\}^{1/2}, \quad (19)$$

где $\varepsilon_{nm} = E_n - E_m$ есть разность одноионных уровней энергий.

Полученные выражения для $\Omega_{\parallel}(q)$ и $\Omega_{\perp}(q)$ пригодны для области параметров, когда $E_2 > E_1$. Если же $E_2 < E_1$, то основное состояние магнитоактивного иона в исходной системе координат описывается функцией $|0\rangle$. Поэтому непосредственно формулами (18) и (19) в этом случае пользоваться нельзя. Однако повторного расчета спектра по описанной методике можно избежать, если учесть симметричные свойства модели. Для этого заметим, что после двух последовательных поворотов системы координат вокруг оси Oy на угол $\pi/2$, а затем вокруг новой оси Oz на тот же угол функция основного состояния переходит в функцию $\sim(|1\rangle + |-1\rangle)$. При этом формулы (15)–(17) сохраняют свой формальный вид, если сделать преобразование (14). Это означает, что после вычисления вида спектра мы придем к формулам (18) и (19), в которых следует положить $\varphi = \pi/4$, а в зависимости ε_{nm} от параметров анизотропии сделать замену по правилу (14).

Итак, выражения (18) и (19) определяют спектр возбуждений во всех фазах и надо лишь найти конкретные зависимости величин ε_{21} , ε_{31} , $\sin 2\varphi$ от параметров модели при различных типах основного состояния. Для этого вернемся к анализу самосогласованной одноионной задачи. Не останавливаясь на деталях, опишем полученные результаты, акценти-

руя внимание главным образом на роли эффектов кристаллического поля в формировании характеристик системы.

а) $0 < K_0 < I_0$. Напомним, что в изотропном случае, когда $B_2^0 = B_0^0 = 0$, основному состоянию системы при рассматриваемом здесь соотношении параметров K_0 и I_0 соответствует только ферромагнитное упорядочение. При этом

$$\langle S^z \rangle = 1, \quad q_2^0 = 1, \quad q_3^0 = 0.$$

Включение анизотропии приводит к возможности реализации четырех фаз:

1) ФМ_z-фаза

$$\sigma = \langle S^z \rangle = \cos 2\varphi, \quad q_2^0 = 1, \quad q_3^0 = \sin 2\varphi = B_2^0 / (I_0 - K_0),$$

2) ФМ_x-фаза

$$\sigma = \langle S^z \rangle = \cos 2\varphi, \quad q_2^0 = (3 \sin 2\varphi - 1) / 2, \\ q_3^0 = (1 + \sin 2\varphi) / 2, \quad \sin 2\varphi = 1/2 (B_2^0 + 3B_3^0) / (I_0 - K_0),$$

3) фаза квадрупольного упорядочения (КУ₁-фаза)

$$\langle S \rangle = 0, \quad q_2^0 = 1, \quad q_3^0 = 1, \quad \sin 2\varphi = 1,$$

4) КУ₂-фаза

$$\langle S \rangle = 0, \quad q_2^0 = -2, \quad q_3^0 = 0.$$

При записи решений одноионной задачи мы использовали только исходную систему координат. В этом случае различия между фазами прослеживаются нагляднее.

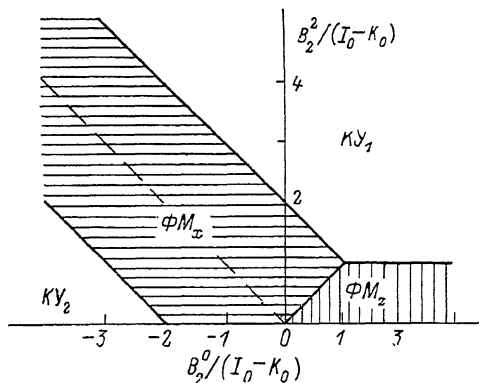


Рис. 1. Фазовая диаграмма двухионного негейзенберговского магнетика с $S=1$ ($0 < K_0 < I_0$).

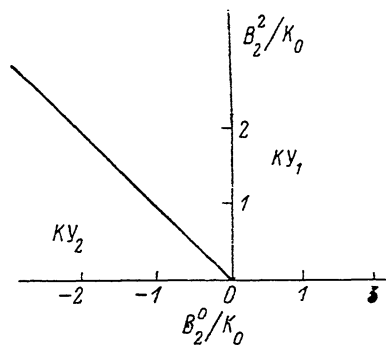


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропного магнетика с $S=1$ при $K_0 \geq I_0$.

Области изменения параметров модели, в пределах которых отмеченные фазы соответствуют основному состоянию системы, показаны на фазовой диаграмме (рис. 1). Уравнения характеристических линий, являющихся границами раздела фаз, имеют вид

$$B_3^0 = 3B_2^0, \quad B_2^0 = I_0 - K_0, \quad B_3^0 = 3B_2^0 \pm 2(I_0 - K_0).$$

Точки на оси абсцисс, когда $B_2^0 = 0$, соответствуют либо легкоосному ферромагнетнику ($B_2^0 > 0$), либо легкоплоскостному ($2K_0 - 2I_0 < 3B_2^0 < 0$). При уменьшении B_2^0 происходит переход в КУ₂-фазу, рассматривавшийся ранее в работах [17, 21, 22], но без учета биквадратного обмена. Включение последнего приводит к смещению точки перехода в сторону меньших $|B_2^0|$. Тенденция к такому переходу экспериментально наблюдалась на фторсиликате никеля под давлением [23].

В ФМ_z-фазе намагниченность равна 1 только при $B_2^0 = 0$. Если же $B_2^0 \neq 0$, то $\sigma < 1$ и уменьшается по мере увеличения B_2^0 . На границе раздела с КУ₁-фазой $\sigma = 0$, и при пересечении этой границы происходит фазовый

переход второго рода в KY_1 -фазу. Если $3B_2^0 < I_0 - K_0$, то при возрастании B_2^0 имеет место вначале ориентационный переход в FM_x -фазу, а затем в KY_1 -фазу.

В области реализации FM_x -фазы имеется линия $B_2^0 = -3B_2^0$, когда $\sigma = 1$. При этом мы также имеем легкоосный ферромагнетик, но ось легкого намагничивания параллельна оси Ox . При движении от этой линии к границам раздела с KY_1 - и KY_2 -фазами намагниченность σ уменьшается до нуля. На границах раздела система путем фазового перехода 2-го рода переходит либо в KY_1 , либо в KY_2 -фазу (рис. 1).

б) $0 < I_0 < K_0$. В этой области значений биквадратного обмена реализуется только квадрупольное упорядочение [3, 9, 13, 24]. Если $B_2^0 = 0$, то фазы KY_1 и KY_2 отвечают основному состоянию системы соответственно для $B_2^0 > 0$ и $B_2^0 < 0$. Следуя [24], их можно классифицировать как «легкоосную» и «легкоплоскотную» квадрупольные фазы. В случае двухосной анизотропии, когда $B_2^0 \neq 0$, $B_2^0 \neq 0$, границей раздела KY_1 - и KY_2 -фаз является линия $B_2^0 = -3B_2^0$ (рис. 2).

Итак, после проведенного анализа одноионной задачи мы знаем конкретные значения компонент параметра порядка для произвольных соотношений между константами модели. Поэтому теперь нетрудно записать явный вид спектра возбуждений во всех фазах. Так, из (18), (19) находим, что в FM_x -фазе

$$\Omega_{\parallel}(\mathbf{q}) = \left\{ (2I_0 - K_0 - K_{\mathbf{q}}) \left[2I_0 - K_0 - K_{\mathbf{q}} - 2(I_{\mathbf{q}} - K_{\mathbf{q}}) \left(\frac{B_2^0}{I_0 - K_0} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}, \quad (20)$$

$$\Omega_{\perp}(\mathbf{q}) = \left\{ (3B_2^0 + I_0 - I_{\mathbf{q}})^2 - (I_{\mathbf{q}} - K_{\mathbf{q}}) \left(\frac{B_2^0}{I_0 - K_0} \right)^2 \right\}^{1/2}. \quad (21)$$

Учитывая, что в KY_1 -фазе $\sin 2\varphi = 1$, $\varepsilon_{21} = 3B_2^0 + B_2^0 + K_0$, получаем спектр в KY_1 -фазе

$$\Omega_{\parallel}(\mathbf{q}) = \{ (2B_2^0 + K_0 - K_{\mathbf{q}}) (2B_2^0 + K_0 + K_{\mathbf{q}} - 2I_{\mathbf{q}}) \}^{1/2}, \quad (22)$$

$$\Omega_{\perp}(\mathbf{q}) = \{ (3B_2^0 + B_2^0 + K_0 - K_{\mathbf{q}}) (3B_2^0 + B_2^0 + K_0 + K_{\mathbf{q}} - 2I_{\mathbf{q}}) \}^{1/2}. \quad (23)$$

Если в полученных выражениях сделать преобразование (14), то, как отмечалось ранее, мы получим из (20), (21) спектр в FM_x -фазе

$$\Omega_{\parallel}(\mathbf{q}) = \left\{ (2I_0 - K_0 - K_{\mathbf{q}}) \left[2I_0 - K_0 - K_{\mathbf{q}} - \frac{1}{2} (I_{\mathbf{q}} - K_{\mathbf{q}}) \left(\frac{B_2^0 + 3B_2^0}{I_0 - K_0} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}, \quad (24)$$

$$\Omega_{\perp}(\mathbf{q}) = \left\{ \left[\frac{3}{2} (B_2^0 - B_2^0) + I_0 - I_{\mathbf{q}} \right]^2 - \frac{1}{4} (I_{\mathbf{q}} - K_{\mathbf{q}})^2 \left(\frac{B_2^0 + 3B_2^0}{I_0 - K_0} \right)^2 \right\}^{1/2}, \quad (25)$$

а из формул (22), (23) спектр в KY_2 -фазе

$$\Omega_{\parallel}(\mathbf{q}) = \{ (B_2^0 + 3B_2^0 - K_0 + K_{\mathbf{q}}) (B_2^0 + 3B_2^0 - K_0 - K_{\mathbf{q}} + 2I_{\mathbf{q}}) \}^{1/2}, \quad (26)$$

$$\Omega_{\perp}(\mathbf{q}) = \{ (B_2^0 - 3B_2^0 + K_0 - K_{\mathbf{q}}) (B_2^0 - 3B_2^0 + K_0 + K_{\mathbf{q}} - 2I_{\mathbf{q}}) \}^{1/2}. \quad (27)$$

Из (21) следует, что в FM_x -фазе вблизи границы с FM_x -фазой происходит смягчение поперечной ветви. На самой границе $\Omega_{\perp}(0)$ обращается в нуль, а зависимость от квазиимпульса в области больших длин волны приобретает линейный характер. Аналогично в FM_x -фазе происходит смягчение $\Omega_{\perp}(\mathbf{q})$.

На границе раздела KY_1 - и FM_x -фаз $\Omega_{\parallel}(0) = 0$. При переходе из KY_1 -фазы в FM_x -фазу смягчается мода $\Omega_{\perp}(\mathbf{q})$, что связано с неустойчивостью системы по отношению к появлению спонтанной намагниченности, параллельной оси Ox . При переходе из KY_2 -фазы в FM_x -фазу происходит смягчение продольной (по отношению к собственной системе координат) ветви. При этом во всех рассмотренных случаях спектр смягченной ветви на границе раздела фаз линеен по квазиимпульсу.

При $K_0 > I_0 > 0$, когда реализуются только KY -фазы, спектр возбуждений описывается формулами (22), (23) либо (26), (27). Заметим здесь,

что для изотропного случая $\Omega_{\parallel}(\mathbf{q}) = \Omega_{\perp}(\mathbf{q})$ и совпадают с полученным ранее в [9] выражением для спектра возбуждений квадрупольной фазы. Включение одноионной анизотропии приводит к снятию вырождения для спектра и появлению разной зависимости частоты продольной и поперечной ветвей от констант анизотропии.

Спектр продольных колебаний гейзенберговского двухосного магнетика в ФМ_z-фазе вычислся в [25]. Наша формула (20) для $\Omega_{\parallel}(\mathbf{q})$ в этой фазе совпадает с соответствующим результатом работы [25], если в (20) положить $K_q \equiv 0$. Поперечные колебания в [25] не рассматривались.

В заключение заметим, что рассчитанные спектры могут быть использованы при обработке экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов в негейзенберговских магнетиках. В настоящее время известны эксперименты по исследованию спектра коллективных возбуждений в синглетном магнетике $\text{Cs}_2\text{Cr}_2\text{Br}_9$ [26-28].

При развитии общего формализма мы ограничились случаем изотропного обмена. Для анизотропного обменного взаимодействия общие формулы сохраняют свой структурный вид с той лишь разницей, что матрица $\hat{A}_{\mathbf{q}}$ будет иметь большее число отличных от нуля компонент.

Авторы выражают благодарность И. Е. Дзялошинскому за полезные замечания по постановке задачи, С. С. Аплеснину, А. Ф. Садрееву, Е. В. Кузьмину и В. А. Игнатченко за обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] Вонсовский С. В. Магнетизм. М.: Наука, 1967. 388 с.
- [2] Nauciel-Bloch M., Sarma G., Castets A. // Phys. Rev. 1972. V. 5B. N 11. P. 4603—4609.
- [3] Chen H. H., Levy P. M. // Phys. Rev. 1973. V. 7B. N 9. P. 4267—4284.
- [4] Нагаев Э. Л. // УФН. 1982. Т. 136. № 1. С. 61—103.
- [5] Нагаев Э. Л. Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. М.: Наука, 1988. 232 с.
- [6] Morin P., Rouchy J., Schmitt D. // Phys. Rev. 1978. V. 17B. N 9. P. 3684—3694.
- [7] Leonard R., Morin P. // Phys. Rev. 1979. V. 19B. N 8. P. 3868—3872.
- [8] Morin P., Schmitt D. // Phys. Rev. 1983. V. 27B. N 7. P. 4412—4420.
- [9] Матвеев В. М. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. № 4. С. 1626—1636.
- [10] Матвеев В. М. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 6. С. 1635—1643.
- [11] Матвеев В. М. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 12. С. 3655—3664.
- [12] Баряхтар В. Г., Ганн В. В., Яблонский Д. А. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 6. С. 1744—1748.
- [13] Зайцев Р. О. // Препринт ИАЭ-2361. М., 1974. 18 с.
- [14] Дзялошинский И. Е., Кухаренко Б. Г. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 6. С. 2290—2294.
- [15] Звездин А. К., Матвеев В. М., Мухин А. А., Попов А. И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М.: Наука, 1985. 296 с.
- [16] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238—257.
- [17] Зайцев Р. О. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 1. С. 207—215.
- [18] Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 1. С. 281—299; № 3. С. 1089—1106.
- [19] Вальков В. В., Валькова Т. А. // ФНТ. 1985. Т. 11. № 9. С. 951—959.
- [20] Вальков В. В., Мацулева Г. Н. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 1. С. 217—226.
- [21] Обухов С. П. // ФТТ. 1976. Т. 18. № 4. С. 1098—1105.
- [22] Онуфриева Ф. П. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 6. С. 2270—2287.
- [23] Баряхтар В. Г., Витебский И. М., Галкин А. А., Дьяконов В. П., Фита И. М., Цинцадзе Г. А. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 3. С. 1083—1090.
- [24] Андреев А. Ф., Грищук И. А. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 2. С. 467—475.
- [25] Островский В. С. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 5. С. 1690—1701.
- [26] Leuenberger B., Güdel H. U., Feile R., Kjems J. K. // Phys. Rev. 1983. V. 28B. N 9. P. 5368—5370.
- [27] Leuenberger B., Stebles A., Güdel H. U., Furrer A., Feile R., Kjems J. K. // Phys. Rev. 1984. V. 30B. N 11. P. 6300—6307.
- [28] Leuenberger B., Güdel H. U., Horne R., Duyneveldt A. J. // JMMM. 1985. V. 49. N 1—2. P. 131—136.