

УДК 537.612

О.О. Космачов

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ НЕМАТИЧНОЇ ФАЗИ В МАГНЕТИКУ З  $S=2$ 

This paper investigates the nematic phase of isotropic non-Heisenberg magnet with spin magnetic ion 2. The spectrum behavior of elementary excitations in the vicinity of phase transition lines with other phases is implemented in this model. To solve the site problem, we use the method of diagonalization  $N$ -level system based on employing Hubbard algebra. The research found that the nematic phase in this phase is the geometric image of “corrugated” bi-axial ellipsoid because of the additional parameter  $\beta$ . The spectra analysis on lines of the phase transition and additional analysis of the free energy with thermal fluctuations makes it possible to specify parameter  $\beta$ . We also show that the nematic phase is divided into “axial” and “planar” phases. The research conducted allows defining more precisely the phase diagram of the isotropic non-Heisenberg magnet with  $S=2$ .

## Вступ

Вивчення магнітних систем з ізотропною обмінною взаємодією більш складною, ніж гейзенберґівська взаємодія, дає змогу виявити зовсім нові й незвичайні властивості магнетиків [1, 2]. Так, для квантової системи зі спіном  $S=1$ , при врахуванні біквадратичної обмінної взаємодії, перехід між феромагнітною й антиферомагнітною фазами при зміні знака білінійного обміну неможливий, а відбувається через проміжні нематичну або ортонематичну фази [3]. Крім того, є особливості поведінки спектрів елементарних збуджень на лініях фазового переходу з ортонематичної у феромагнітну або антиферомагнітну фази, а саме зміна закону дисперсії, що є свідченням вироджених переходів першого роду. Для системи  $S=2$  ситуація стає ще цікавішою: крім звичних фаз, що характеризуються дипольним параметром порядку  $\langle S^i \rangle$  – феромагнітним або квадрупольними параметрами упорядкування  $q_2^0$  і  $q_2^2$  залежні від  $\langle (S^i)^2 \rangle$ , можлива реалізація фаз, що характеризуються параметрами більш високого порядку, так звані тетраедричні фази [4, 5].

Дослідження моделі локалізованих спінових моментів стикається з таким питанням: наскільки значним є внесок інтегралів негейзенберґівських обмінів, пропорційних  $(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})^{2S}$ . Як показано в [1], внесок біквадратичного обміну може становити десятки відсотків від білінійного обміну. У [4, 5] розглядався конденсат бозонних спіночних атомів для  $S=2$ , оператор взаємодії яких може бути поданий у вигляді розкладання по ступенях добутку спінових операторів  $(\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n'})$ . Є абсолютна відповідність фазових діаграм для  $S=2$  бозонів в усамі-

тненому оптичному вловлювачі [4, 5] й одно-підґраткового магнетика зі спіном  $S=2$  [6]. При діагоналізації гамільтоніана у нематичній фазі залишається невизначеним один із параметрів повороту, який переміщує площинний і осьовий нематика. Це виродження відразу ж знімається включенням у гамільтоніан одноіонної анізотропії найпростішого виду. Однак воно не відповідає симетрії гамільтоніана й тому його можна зняти, не ускладнюючи вид гамільтоніана, що, зокрема, вдається зробити, проводячи аналіз вільної енергії з урахуванням температурних поправок.

## Постановка задачі

Метою роботи є дослідження нематичної фази ізотропного негейзенберґівського магнетика зі спіном магнітного іона 2. Особливий інтерес становлять умови зняття виродження нематичної фази і, крім того, можливість вивчення поведінки спектрів елементарних збуджень в околі ліній фазових переходів з іншими можливими фазами, що реалізуються у цій моделі.

## Гамільтоніан системи й одновузлова задача

Гамільтоніан ізотропного магнетика зі спіном  $S=2$  із врахуванням повного набору двоспінових інваріантів має такий вигляд:

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

де  $J, K, D, F$  – обмінні інтеграли, що відповідають різним спіновим інваріантам. Припускається,

що розглянута система перебуває при низьких температурах ( $T \ll T_c$ ,  $T_c$  – температура Кюрі), оскільки саме у цьому випадку найбільш яскраво проявляються квантові властивості системи.

Оскільки гамільтоніан (1) інваріантний щодо обертань у спіновому просторі, для спрощення подальших обчислень зручно переписати його в термінах генераторів групи обертань  $SU(5)$ :

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

де  $a^j$  – лінійні комбінації обмінних інтегралів;  $\epsilon_i$  – числові коефіцієнти. Оскільки розглядається випадок низьких температур, цілком адекватним наближенням є наближення середнього поля. Виділяючи у гамільтоніані (2) середні поля, пов'язані з векторними ( $\langle O_i^i \rangle_0 \equiv \langle S^i \rangle$ ,  $i = x, y, z$ ) і тензорними параметрами порядку ( $\langle O_j^i \rangle_0 \equiv q_j^i$ ,  $i = 0, 2, xy, yz, zx$  і т.д.), гамільтоніан (2) можна подати у вигляді

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_0, \quad (3)$$

де

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

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

Для визначення власних станів і власних функцій одноузлового гамільтоніана, скористаємось методом діагоналізації гамільтоніана  $N$ -рівневої системи [7], в основі якого лежить використання алгебри операторів Хаббарда [7, 8].

Побудуємо на базисі власних функцій оператора  $S^z$  оператори Хаббарда  $X^{MM} \equiv |\Psi(M')\rangle\langle\Psi(M)|$ . Зв'язок спінових операторів з операторами Хаббарда має вигляд

$$\begin{aligned} S^+ &= 2(X^{21} + X^{-1-2}) + \sqrt{6}(X^{10} + X^{0-1}); \\ S^- &= (S^+)^+; \quad 2S^z = [S^+, S^-]_-. \end{aligned} \quad (4)$$

Формально одноузловий гамільтоніан у поданні операторів Хаббарда має такий вигляд:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \epsilon_i X^{ii} + \sum_{i \neq j} V_{ij} X^{ij}, \quad V_{ji} = (V_{ij})^*, \quad (5)$$

де  $\epsilon_i$  – “запалювальний” спектр вихідних станів  $|\Psi(M)\rangle$ ;  $V_{ij}$  – недиагональні члени гамільтоніана.

Для діагоналізації одноузлового гамільтоніана необхідно провести  $N(N-1)$  “поворотів” у спіновому просторі (у нашому випадку  $N=5$  –

число енергетичних рівнів магнітного іона). У власній для кожного вузла системі координат, у якій, зокрема,  $\langle S^y \rangle_0 = 0$  і  $\langle S^x \rangle_0 = 0$ , а також  $q_t^1 (t=2,3,4) = 0$  число “поворотів”, необхідних для повної діагоналізації одноузлового гамільтоніана дорівнює шести.

У результаті унітарних перетворень

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = U \mathcal{H}_0 U^+,$$

$$U \equiv U(\alpha_{0-2}, \alpha_{20}, \alpha_{2-2}) U(\alpha_{1-1}) U(\alpha_{2-1}, \alpha_{1-2}) \quad (6)$$

одноузловий гамільтоніан набуде діагонального вигляду:

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_i E_i X^{ii}.$$

Параметри перетворень визначаються системою рівнянь

$$\tilde{V}_{ij}(\alpha_{1-1}, \alpha_{0-2}, \alpha_{20}, \alpha_{2-2}, \alpha_{2-1}, \alpha_{1-2}) = 0.$$

Із шести перетворень на вид основного стану впливають тільки три повороти  $U_{2-2}(\varphi)$ ,  $U_{20}(\beta)$ ,  $U_{2-1}(\theta)$ . Якщо основний стан не вироджений, його можна навести у вигляді

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= U_{2-1}^+(\theta) U_{20}^+(\beta) U_{2-2}^+(\varphi) |2\rangle = \\ &= \cos \varphi \cos \beta \cos \theta |2\rangle + \sin \beta |0\rangle + \\ &+ \sin \theta |-1\rangle + \sin \varphi \cos \beta |-2\rangle. \end{aligned}$$

Вирішуючи рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (5), знайдемо енергію основного стану магнітного іона:

$$\begin{aligned} E_2 &= \\ &= - \left[ \tilde{J} \cos^2 2\varphi \cos^4 \beta - \frac{3}{2} \tilde{K} (1 - \sin 2\varphi) \sin^2 2\beta + 3\tilde{K} \right] \times \\ &\times \cos^4 \theta - \frac{1}{4} (\tilde{J} + 3\tilde{K}) \sin^4 \theta + \frac{1}{4} [\tilde{J} \cos 2\varphi \cos^2 \beta + \\ &+ 3\tilde{K} \cos 2\beta + 18(D - 5F)(1 - \cos 2\varphi \cos^2 \beta) - \\ &- 9(D - 8F) \sin^2 \beta] \sin^2 2\theta + 9D - \frac{22}{5} F. \end{aligned} \quad (7)$$

Тут введені такі позначення:

$$\tilde{J}_0 = 2J_0 - K_0 + 41D_0 - 79F_0$$

$$\text{і } \tilde{K}_0 = K_0 - 5D_0 + 43F_0.$$

Оскільки ми розглядаємо поведінку магнетика у випадку низьких температур, вільна енергія системи збігається з енергією основного стану (6). Аналіз вільної енергії дає змогу визначити стани, які реалізуються у системі при різних співвідношеннях обмінних інтегралів.

Припустимо, що співвідношення обмінних інтегралів таке, що  $J_0 > K_0, D_0, F_0$ . Ця умова на матеріальні константи відповідає таким параметрам унітарних перетворень:  $\varphi = \beta = \theta = 0$ , – і у цьому випадку реалізується насичена феромагнітна фаза (FM) з параметром порядку  $\langle S^z \rangle = 2$  і функцією основного стану  $|\psi_{g.s.}\rangle = |2\rangle$ .

Ще один випадок –  $D_0 > K_0, F_0$ . Параметри  $u$ - $v$  перетворення в цьому випадку рівні  $\varphi = 0$ ,  $\beta = 0$ ,  $\cos 2\theta = -\frac{1}{3}$ . Хвильова функція основного стану має вигляд  $|\psi_{g.s.}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|2\rangle + \sqrt{2}|-1\rangle)$ . Середні від спінових операторів у цьому стані рівні:

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

Геометричним образом цього стану (у спіновому просторі) є не сфера, а тетраedr. Цей фазовий стан назовемо  $TQ$ -станом. Фаза характеризується параметрами порядку, пропорційними третьому і четвертому ступеням по спінових операторах:  $q_3^3 = \langle O_3^3 \rangle = \frac{1}{2}(\langle (S^+)^3 \rangle + \langle (S^-)^3 \rangle) = 4\sqrt{2}$  і т.д.

Припустимо тепер, що  $K_0 > J_0, D_0, F_0$ . Параметри унітарних перетворень рівні  $\varphi = \frac{\pi}{4}$ ,  $\theta = 0$ . Хвильова функція основного стану має такий вигляд:

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

Векторний параметр порядку  $\langle S^z \rangle = 0$  – система характеризується тензорними параметрами порядку  $\langle (S^z)^2 \rangle = 4 \cos^2 \beta$ ,  $\langle (S^x)^2 \rangle = 4 \cos^2 \times \left(\beta - \frac{\pi}{3}\right)$ ,  $\langle (S^y)^2 \rangle = 4 \cos^2 \left(\beta + \frac{\pi}{3}\right)$ ,  $q_2^0 = 3\langle (S^z)^2 \rangle - S \times (S+1) = 6 \cos 2\beta$ ,  $q_2^2 = \langle (S^x)^2 \rangle - \langle (S^y)^2 \rangle = 2\sqrt{3} \sin 2\beta$ .

Цей стан із невизначеним параметром  $\beta$  назовемо “спіновим нематиком”, позначимо його  $N$ . У спіновому просторі його можна подати як двохосьовий еліпсоїд, оскільки для нього

$$\begin{aligned} \langle (S^z)^2 \rangle &= 4 \cos^2 \beta, \quad \langle (S^x)^2 \rangle = \frac{1}{2}(\sqrt{6} \sin \beta + \sqrt{2} \cos \beta)^2, \\ \langle (S^y)^2 \rangle &= \frac{1}{2}(\sqrt{6} \sin \beta - \sqrt{2} \cos \beta)^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Як зазначалось, геометричним образом нематичної фази є двохосьовий еліпсоїд, параметри якого позначаються компонентами тензора мультипольного моменту. Цей тензор може бути представлений як пряма сума тензорів дипольного, квадрупольного моментів, а також моментів четвертого порядку. Квадрупольні моменти  $q_2^0$  і  $q_2^2$  визначають орієнтацію головних осей еліпсоїда, а моменти четвертого за ступенем спіну порядку  $q_4^0 = 35\langle (S^z)^4 \rangle - 155\langle (S^z)^2 \rangle + 72$  і  $q_4^4 = \frac{\langle (S^+)^4 \rangle + \langle (S^-)^4 \rangle}{2}$  визначають залежність розподілення компонентів від параметра  $\beta$  в площині  $XOY$ . Таку поведінку компонентів тензора мультипольних моментів назовемо “гофруванням”. Це “гофрування” визначається одвизовим корелятором четвертого ступеня:

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

На рис. 1 наведено залежність величини деформації еліпсоїда в  $N$ -стані від параметра унітарного перетворення  $\beta$ . Із цього рисунка видно, що параметр  $\beta$  “перемішує” нематичні стани:  $|\psi\rangle = \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}}$  – “осьовий” нематик ( $\beta = 0$ ) і  $|\psi\rangle = |0\rangle$  – “площинний” нематик ( $\beta = \frac{\pi}{2}$ ). Отже, геометричним образом розглянутого спінового стану є двохосьовий еліпсоїд. У цьому полягає специфіка системи з  $S=2$  порівняно з випадком  $S=1$  [3, 9]. Для магнетика з  $S=1$  топологія нематичної фази така, що геометричним образом цього стану є або осьовий нематик (одноосьовий еліпсоїд), або площинний нематик (нескінченно тонкий диск).

Крім того, еліпсоїд з компонентами тензора квадрупольного моменту  $\langle (S^x)^2 \rangle, \langle (S^y)^2 \rangle, \langle (S^z)^2 \rangle$  трикратно вироджений за напрямками, як неважко помітити з (8), якщо параметр  $\beta$  подати у вигляді  $\beta \rightarrow \beta_i = \beta + \frac{2\pi}{3}i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Включення одноіонної анізотропії або магнітопружної взаємодії зніме виродження по  $\beta$ . Але як зазначено в [5], це виродження може бути зняте

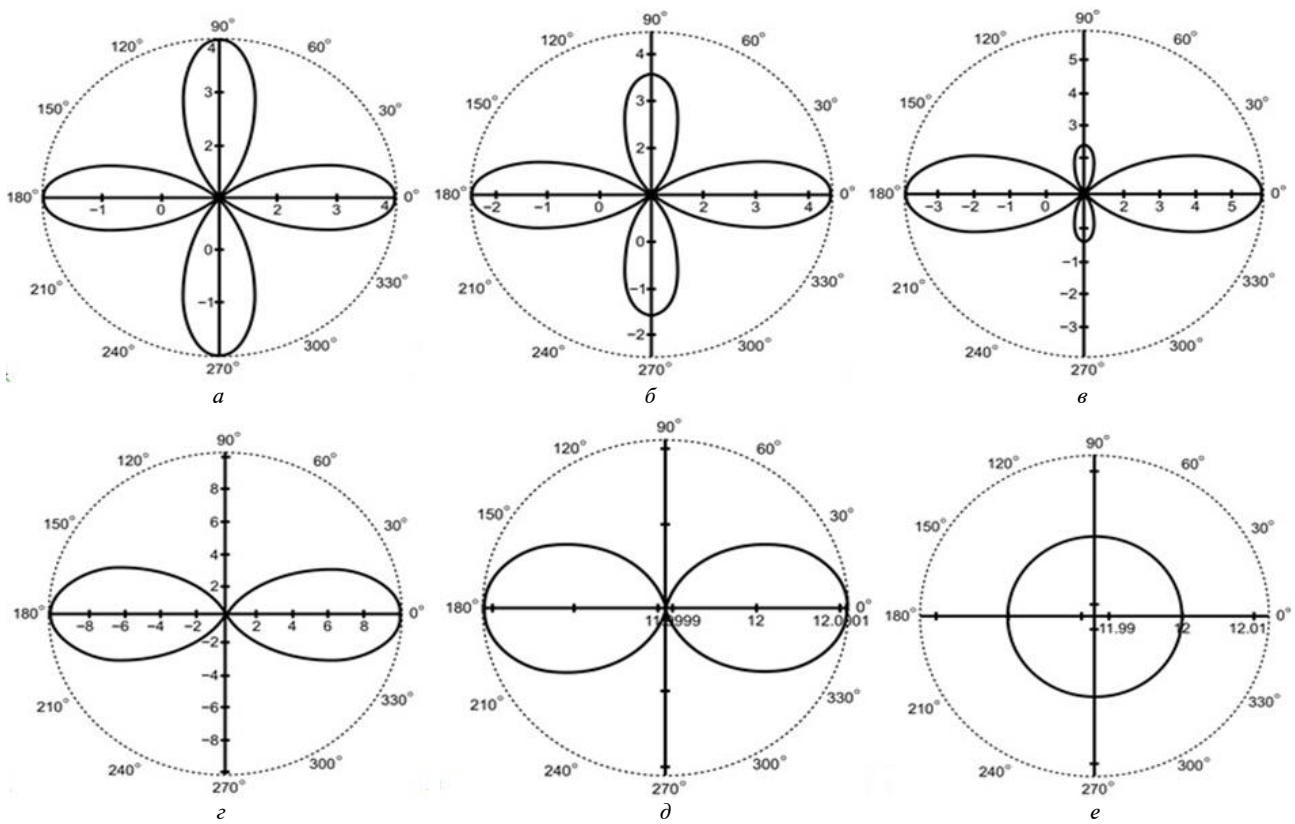


Рис. 1. Зрізи еліпсоїда в площині  $XOY$  при фіксованих значеннях параметра  $\beta$ :  $a - \beta = 0$ ,  $б - \beta = \frac{\pi}{100}$ ,  $в - \beta = \frac{\pi}{25}$ ,  $г -$

$$\beta = \frac{\pi}{10}, \quad д - \beta = \frac{\pi}{2,00001}, \quad e - \beta = \frac{\pi}{2}$$

у випадку розгляду вільної енергії із врахуванням теплових флуктуацій над основним станом. Тому виникає необхідність у знаходженні й аналізі спектрів елементарних збуджень.

**Спектри елементарних збуджень і їх аналіз**

Відомо, що спектри елементарних збуджень визначаються полюсами функції Гріна [10]:

$$G^{\alpha\alpha'}(n, \tau; n', \tau') = -\langle \tilde{T} \tilde{X}_n^\alpha(\tau) \tilde{X}_{n'}^{\alpha'}(\tau') \rangle, \quad (9)$$

де  $\tilde{X}_n^\alpha(\tau) = \exp(\mathcal{H}\tau) X_n^\alpha \exp(-\mathcal{H}\tau)$  – оператор Хаббарда у гейзенбергівському вигляді;  $\tilde{T}$  – оператор Віка,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}$ .

Оскільки обчислення проводяться у наближенні середнього поля, нам знадобиться тільки “поперечна” частина обмінного гамільтоніана  $\mathcal{H}_{int}$ , яка має вигляд

$$\mathcal{H}_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq n'; \alpha, \beta} \{c(\alpha), \hat{A}_{nn'} c(\beta)\} X_n^\alpha X_{n'}^\beta, \quad (10)$$

де компоненти вектора  $c(\alpha)$  визначаються зі зв'язку спінових і тензорних операторів з опе-

раторами Хаббарда, а матриця  $\hat{A}_{nn'}$  представляє пряму суму матриць:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{nn'} = & \frac{a_{nn'}^{(1)}}{2} (2\hat{E} \oplus \hat{I}) \oplus \frac{a_{nn'}^{(2)}}{2} (6\hat{E} \oplus \hat{I} \oplus \hat{I}) \oplus \\ & \oplus \frac{a_{nn'}^{(3)}}{160} (16\hat{E} \oplus 3\hat{I} \oplus 30\hat{I} \oplus 20\hat{I}) \oplus \\ & \oplus \frac{a_{nn'}^{(4)}}{560} (2\hat{E} \oplus 10\hat{I} \oplus 5\hat{I} \oplus 70\hat{I} \oplus 35\hat{I}), \end{aligned}$$

де  $\hat{E} \equiv \hat{E}^{(1)}$  – одиниця;  $\hat{I} \equiv \hat{I}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ .

Дисперсійне рівняння, що описує спектри елементарних збуджень, можна подати у такому вигляді [11]:

$$\det \|\delta_{ij} + Y_{ij}\| = 0, \quad i, j = 1, \dots, 24, \quad (11)$$

де  $Y_{ij}$  – функції констант обмінної взаємодії і нульових функцій Гріна.

Рівняння (11) справедливе для довільного значення спіна й довільної симетрії одноіонної задачі. Розв'язання його визначають спектри

збуджень у різних фазах. Тут становить особливий інтерес розгляд розв'язку дисперсійного рівняння у нематичній фазі. Спектри елементарних збуджень у  $N$ -фазі

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^2(k) = & (12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k) \times \\ & \times \sin^2 \beta_i + 36(F_0 - F_k) \cos^2 \beta_i) \times \\ & \times (12(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \sin^2 \beta_i + \\ & + 4(9F_0 - 2I_k + K_k - 41D_k + 70F_k) \cos^2 \beta_i); \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_4^2(k) = & 144(K_0 - 2D_0 + 28F_0 - 3D_k + 15F_k) \times \\ & \times (K_0 - 2D_0 + 28F_0 - K_k + 2D_k - 28F_k); \quad (13) \end{aligned}$$

де  $\beta_i = \beta + \frac{2\pi}{3}i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Зазначимо, що (12) описує три гілки збуджень.

Досліджуємо поведінку спектрів на лініях фазового переходу.

У центрі зони Бріллюєна ( $k \rightarrow 0$ ) на лінії фазового переходу в  $FM$ -фазу  $\tilde{J}_0 = 0$  розм'якшуються гілки (12) при значенні параметра  $\beta_i = 0$ , і набувають вигляду

$$\varepsilon_i(k \rightarrow 0) = 36\delta k^2,$$

де  $\delta k^2 = F_0 - F_k$ .

Поблизу цієї лінії спіновий нематик прямує до одноосьового нематика. На лінії ФП розм'якшується одна з гілок сімейства (12). Цей ефект пов'язаний із виродженням головних осей тензора квадрупольних моментів по напрямку.

Якщо  $i=1$ , то  $\beta = \frac{4\pi}{3}$  і  $\langle (S^z)^2 \rangle = 1$ ,  $\langle (S^x)^2 \rangle = 4$ ,  $\langle (S^y)^2 \rangle = 1$  і на лінії ФП  $\tilde{J}_0 = 0$  розм'якшується гілка  $\varepsilon_1$  з (12); якщо  $i=2$ , то  $\beta = \frac{2\pi}{3}$  і  $\langle (S^z)^2 \rangle = 1$ ,  $\langle (S^x)^2 \rangle = 1$ ,  $\langle (S^y)^2 \rangle = 4$  і на лінії ФП  $\tilde{J}_0 = 0$  розм'якшується гілка  $\varepsilon_2$ ; якщо  $i=3$ , то  $\beta = 0$  і  $\langle (S^z)^2 \rangle = 4$ ,  $\langle (S^x)^2 \rangle = 1$ ,  $\langle (S^y)^2 \rangle = 1$  і на лінії ФП  $\tilde{J}_0 = 0$  розм'якшується гілка  $\varepsilon_3$ . Такі ж особливості у спектрах мають місце, якщо спіновий нематик прямує до площинного нематика.

При значенні параметра  $\beta_i = 0$  на краю зони Бріллюєна ( $k \rightarrow \pi$ ) гілка (12) розм'якшується на лінії  $\tilde{J}'_0 = 0$

$$\varepsilon_i(k \rightarrow \pi) = 6\sqrt{2F_0}\delta k,$$

і система переходить у  $AFM$ -фазу.

Поблизу лінії  $\tilde{K}_0 = 0$  спіновий нематик прямує до площинного нематика. На лінії  $\tilde{K}_0 = 0$  довізначається параметр  $\beta_i = \frac{\pi}{2}$ , система переходить у  $TQ$ -фазу й у центрі зони Бріллюєна ( $k \rightarrow 0$ ) (12) набуває вигляду

$$\varepsilon_i(k \rightarrow 0) = 36(\gamma - 5\delta)k^2,$$

де  $\gamma k^2 = D_0 - D_k$ .

Крім того, на цій лінії  $\tilde{K}_0 = 0$  гілка (13) має той самий закон дисперсії:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow 0) = 36(\gamma - 5\delta)k^2.$$

На краю зони Бріллюєна ( $k \rightarrow \pi$ ) на лінії  $\tilde{K}'_0 = 0$  система переходить в  $ATQ$ -фазу й (12) набуває вигляду

$$\varepsilon_i(k \rightarrow \pi) = 6\sqrt{6(D_0 - 5F_0)(\gamma - 5\delta)}k.$$

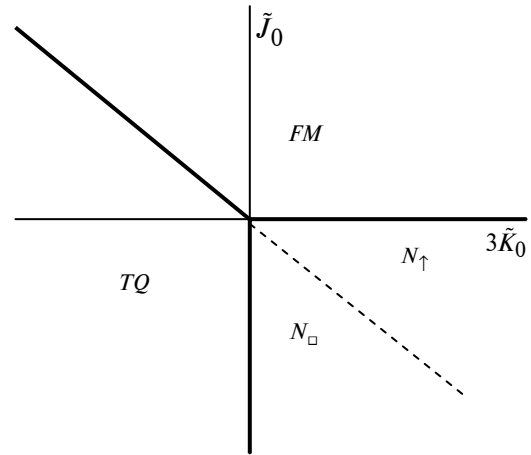


Рис. 2. Фазова діаграма негеїзенбергівського феромагнетика з  $S=2$  у змінних  $(\tilde{J}_0, \tilde{K}_0)$

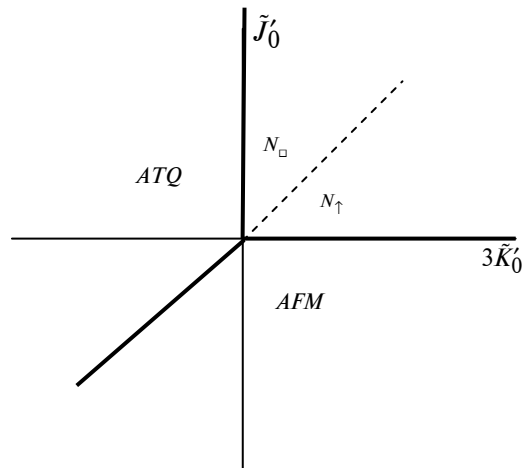


Рис. 3. Фазова діаграма двопідграткового негеїзенбергівського магнетика з  $S=2$  в змінних  $(\tilde{J}'_0, \tilde{K}'_0)$

Також при ( $k \rightarrow \pi$ ) на лінії  $\tilde{K}'_0 = 0$  гілка (13) має той самий закон дисперсії:

$$\varepsilon_4(k \rightarrow \pi) = 6\sqrt{6(D_0 - 5F_0)(\gamma - 5\delta)}k.$$

Зазначимо, що умови реалізації антиферомангнітної *AFM* і антитетраедричної *ATQ*-фаз були отримані з аналізу вільної енергії для двопідграткового магнетика в [6]. Крім того,  $\tilde{J}'_0 = 2J_0 - K_0 + 41D_0 - 61F_0$ ,  $\tilde{K}'_0 = K_0 + D_0 + 13F_0$ .

Як ми вже зазначали, аналіз вільної енергії не дає змоги визначити точно параметр  $\beta$ . Це вдається зробити, проводячи аналіз вільної енергії із врахуванням температурних поправок [5, 12].

$$\Delta F = -\sum_{i=1}^3 \left[ \frac{T}{v(\beta_i)} \right]^2, \quad (14)$$

де  $v(\beta_i)$  – “жорсткість” магнонів (12):  $v(\beta_i)_{k \rightarrow 0} = 3\tilde{K} \sin^2 \beta_i - \tilde{J} \cos^2 \beta_i$  і  $v(\beta_i)_{k \rightarrow \pi} = 3\tilde{K}' \sin^2 \beta_i + \tilde{J}' \cos^2 \beta_i$ . Таким чином, параметр  $\beta_i = 0$  при  $\tilde{J} + 3\tilde{K} > 0$  для  $k \rightarrow 0$  ( $3\tilde{K}' - \tilde{J}' > 0$  для  $k \rightarrow \pi$ ) і в цій області реалізується “осьовий” нематик  $N_{\uparrow} |\psi\rangle = \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}}$ , якщо ж  $\beta_i = \frac{\pi}{2}$  при  $\tilde{J} + 3\tilde{K} < 0$  для  $k \rightarrow 0$  ( $3\tilde{K}' - \tilde{J}' < 0$  для  $k \rightarrow \pi$ ), реалізується “площинний” нематик  $N_{\square}$  із хвильовою функцією  $|\psi\rangle = |0\rangle$  (рис. 2, 3). Лінії  $\tilde{J} + 3\tilde{K} = 0$  і  $3\tilde{K}' - \tilde{J}' = 0$  – межі нематичних осьової і площинної фаз.

## Висновки

Проведені дослідження нематичної фази негейзенбергівського магнетика зі спіном магнітного іона  $S=2$  дали змогу виявити особливості нематичної фази. На відміну від системи з  $S=1$ , у якій нематична фаза являє собою одноосьовий еліпсоїд, у розглянутому випадку геометричним образом нематичної фази є деформований двохосьовий еліпсоїд через додатковий параметр  $\beta$ . Дослідження величини деформації показало, що  $\beta$  “перемішує” нематичні

стани:  $|\psi\rangle = \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}}$  – “осьовий” нематик ( $\beta = 0$ ) і  $|\psi\rangle = |0\rangle$  – “площинний” нематик ( $\beta = \frac{\pi}{2}$ ). Аналіз спектрів збудження показав, що на лініях фазових переходів параметр  $\beta$  точно визначається. А додатковий аналіз вільної енергії із врахуванням теплових флуктуацій над основним станом дає змогу знайти межу розділу осьового й площинного немагнітників.

Становить інтерес вивчення поведінки спектрів елементарних збуджень в околі ліній фазових переходів у всіх можливих фазах, які реалізуються у цій моделі. Цікавим є дослідження статистичних і динамічних властивостей двопідграткових немагнітних фаз.

1. *Нагаев Е.Л.* Магнетики со сложными обменными взаимодействиями. – М.: Наука, 1988. – 232 с.
2. *Н.Н. Chen, and P.M. Levy*, “Quadrupole Phase Transitions in Magnetic Solids”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 27, no. 20, pp. 1383–1385, 1971.
3. *N. Papanikolaou*, “Unusual Phases in Quantum Spin-1 Systems”, *Nucl. Phys.*, vol. 305, pp. 367–395, 1988.
4. *R. Barnett et al.*, “Classifying Novel Phases of Spinor Atoms”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, 180412, 2006.
5. *A.M. Turner et al.*, “Nematic Order by Spin-2 Bose-Einstein Condensates”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, 190404, 2007.
6. *Космачев О.А., Фридман Ю.А.* Особенности формирования фазовых состояний в негейзенберговском магнетике с  $S = 2$  // *ФТТ*. – 2013. – 55. – С. 678–683.
7. *Вальков В.В.* Унитарные преобразования  $N$ -уровневых систем // *ТМФ*. – 1988. – 76. – С. 143–150.
8. *Зайцев Р.О.* Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике, *ЖЭТФ*. – 1975. – 68. – С. 207–215.
9. *Yu.A. Fridman et al.*, “Spin Nematic and Orthogonal Nematic States in  $S=1$  Non-Heisenberg Magnet”, *JMMM*, vol. 325, pp. 125–129, 2013.
10. *Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А.* Функции Грина в теории магнетизма. – К.: Наук. думка, 1984. – 336 с.
11. *Мицай Ю.Н., Фридман Ю.А.* Использование операторов Хаббарда в теории связанных магнитоупругих волн // *ТМФ*. – 1989. – 81. – С. 263–270.
12. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. I. – М.: Наука, 1976. – 582 с.