

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ  
“ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ  
им. Б. П. КОНСТАНТИНОВА”

УДК 538.115

На правах рукописи

СИЗАНОВ  
Алексей Владимирович

**КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И  
НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВОЙСТВА МАГНЕТИКОВ С  
ЦЕЛЫМ СПИНОМ И БОЛЬШОЙ ОДНОИОННОЙ  
АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА “ЛЕГКАЯ ПЛОСКОСТЬ”**

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Гатчина  
2012

Работа выполнена в Отделении теоретической физики Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
А. В. Сыромятников

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук  
В. И. Козуб

кандидат физико-математических  
наук А. С. Овчинников

Ведущая организация: Институт физики металлов УрО РАН

Защита диссертации состоится " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2012 г. в \_\_\_\_ часов  
на заседании диссертационного совета Д 002.115.01 при Петербургском  
институте ядерной физики им. Б. П. Константинова по адресу: 188300,  
Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова Роща.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ПИЯФ.

Автореферат разослан " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2012 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

И. А. Митропольский

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ

Квантовые критические явления и экзотические низкотемпературные фазы без магнитного порядка являются сейчас интенсивно развивающимися областями физики конденсированного состояния, что во многом обусловлено открытием высокотемпературной сверхпроводимости. При этом особое внимание уделяется квантовым критическим точкам (ККТ), которые достигаются путем варьирования легко контролируемых в эксперименте параметров, таких как магнитное поле, давление, уровень легирования и т. д. Среди экзотических фаз особое место занимают спин-жидкостные фазы, в которых нет ни дальнего, ни ближнего магнитного порядка, т. е., средний спин на узле равен нулю, а спиновые корреляторы экспоненциально убывают с расстоянием (отсюда и название „спиновая жидкость“). Поскольку квантовые фазовые переходы отличаются от фазовых переходов по температуре, а спин-жидкостные фазы совершенно не похожи на привычные фазы с дальним магнитным порядком, актуальной является задача о разработке удобных методов исследования в этих областях.

Очень продуктивным способом описания спиновых систем является их представление через ансамбль бозе- или ферми-частиц. При помощи преобразований спиновых операторов через бозе- или ферми-операторы записываются бозевские (фермиевские) аналоги спиновых гамильтонианов, которые затем анализируются с использованием стандартной диаграммной техники. Поскольку форма представления зависит от особенностей основного состояния и первых возбужденных уровней рассматриваемой системы, нельзя написать универсального спинового представления. Например, представления Холстейна–Примакова и Дайсона–Малеева являются наиболее удобными для исследования магнитно-упорядоченных фаз, представление Йордана–Вигнера оказывается полезным для цепочек со спином  $S = 1/2$ , формализм “операторов связи” был предложен для описания спиновых жидкостей с димерным основным состоянием, и т. д.

Одним из классов исследуемых сейчас систем, которые демонстрируют спин-жидкостное поведение и для которых до сих пор не существовало удобного спинового представления, являются квантовые магнетики с целым спином и большой одноионной анизотропией  $D > 0$

типа “легкая плоскость” (ОАЛП), описываемой в гамильтониане членом  $D \sum_i (S_i^z)^2$ . В основном состоянии такой системы все спины находятся преимущественно в состоянии с нулевой проекцией спина на выделенную ось  $z$ . До сих пор помимо большого количества численных исследований этой модели аналитические выражения для некоторых наблюдаемых величин были получены лишь в случае  $S = 1$  с помощью приближения случайных фаз [1], стандартной теории возмущений [2] (только для цепочек), “обобщенного спин-волнового подхода” [3, 4] и некоторых других самосогласованных процедур, недостатком которых является неконтролируемая точность вычислений. С другой стороны введение удобного спинового представления позволило бы реализовать заманчивую идею использования обменного взаимодействия между спинами системы в качестве возмущения на фоне большой ОАЛП и нахождения выражений для наблюдаемых величин в нескольких первых порядках этой теории возмущений.

Такое представление позволило бы также исследовать поведение магнетиков с большой ОАЛП вблизи ККТ по магнитному полю  $H$  параллельному „трудной“ оси  $z$ , которое вызывает сейчас большой интерес. В этом случае система имеет как минимум две ККТ. Например, в системе с  $S = 1$  без фрустрации их ровно две (см. Рис. 1). Для простой квадратной или простой кубической решеток с антиферромагнитным взаимодействием между ближайшими соседями одна ККТ  $H = H_{c1}$  разделяет парамагнитную (спин-жидкостную) фазу и фазу с дальним магнитным порядком, которая имеет скошенную антиферромагнитную спиновую структуру. Вторая ККТ  $H = H_{c2}$  разделяет фазы с дальним магнитным порядком и полностью поляризованную (см. Рис. 1).

Известно довольно много соединений, являющихся магнетиками с большой ОАЛП:  $\text{CsFeBr}_3$ ,  $\text{NiSnCl}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CeFeCl}_3$ ,  $\text{Sr}_3\text{NiPtO}_6$ ,  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$ ,  $(\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_5\text{NO})_6)(\text{NO}_3)_2$  и ряд других. Из них наиболее хорошо исследованным является  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$  (dichloro-tetrakis thiourea-nickel (II), сокращенно DTN) [3, 4, 5]. Несмотря на то что ККТ по магнитному полю в DTN вызывают очень большой интерес, уровень многочисленных экспериментальных работ чрезвычайно высок, а их результаты опубликованы в самых престижных научных изданиях, до сих пор не существовало удовлетворительного теоретического описания всех экспериментальных результатов. Хотя во всех статьях есть теоретические расчеты, которые выполнены на основе модели, предложенной в одной из первых работ, параметры этой модели меняются от статьи к

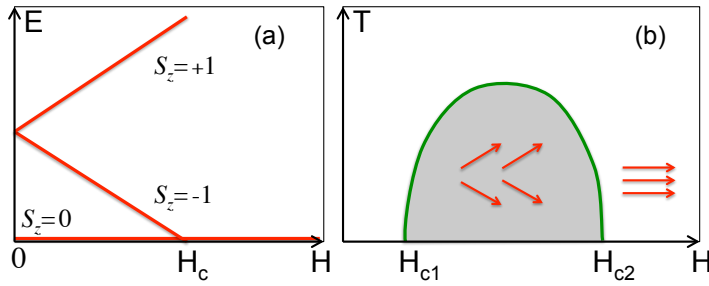


Рис. 1: (а) Показана эволюция уровней одного спина с  $S = 1$  и сильной одноионной анизотропией при увеличении магнитного поля, направленного вдоль трудной оси (гамильтониан  $D(S^z)^2 + HS^z$ ). При  $H > H_c = D$  спин оказывается в состоянии с  $S^z = -1$  (т.е., полностью поляризованным). Обменное взаимодействие (для определенности, антиферромагнитное) между такими спинами на решетке „размывает“ этот переход, и при  $T = 0$  в интервале полей  $H_{c1} < H < H_{c2}$  возникает „скошенная“ антиферромагнитная фаза, а на плоскости  $H$ – $T$  область существования этой фазы имеет форму купола, показанного на панели (b).

статье. Кроме того, некоторые экспериментальные данные предложенная модель не может объяснить принципиально (подробнее см. ниже). Поэтому весьма актуальной задачей является разработка модели, которая описывала бы весь набор экспериментальных данных, полученных в DTN до сих пор.

### Цель и задачи работы

Данная диссертационная работа имеет следующие цели:

1. найти представление операторов проекций целого спина через бозе-операторы, удобное для описания низкотемпературной парамагнитной фазы магнетиков с большой ОАЛП;
2. с помощью найденного представления вычислить спектр элементарных возбуждений и энергию основного состояния гейзенберговского магнетика с большой ОАЛП при нулевой температуре; полученные результаты сравнить с имеющимися в литературе данными

ми численных исследований этой модели; найденные выражения для спектра применить для описания экспериментальных данных, полученных в соединении  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$ ;

3. в рассматриваемых системах вычислить температурные поправки к спектру, намагниченности и теплоемкости в окрестности ККТ по магнитному полю  $H$ , разделяющую парамагнитную фазу и фазу с дальним магнитным порядком; полученные выражения применить для описания соответствующих экспериментов в  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$ ;
4. в первом порядке по  $1/S$  вычислить спектр гейзенберговского магнетика с объемноцентрированной решеткой и ОАЛП в скошенной антиферромагнитной фазе, индуцированной магнитным полем; найти спектр указанной модели также вблизи от ККТ  $H = H_{c2}$ , где  $H_{c2}$  — поле насыщения, при помощи техники бозе-конденсации магнонов; применить полученные результаты к описанию ЭПР-экспериментов в  $\text{NiCl}_2\text{-4SC}(\text{NH}_2)_2$ .

#### **Основные положения диссертации, выносимые на защиту.**

1. Предложено новое представление операторов целого спина через бозе-операторы. На его основе разработан новый подход к описанию низкотемпературной парамагнитной фазы магнетиков с большой одноионной анизотропией  $D$  типа “легкая плоскость”.
2. Рассматривая произвольное обменное взаимодействие  $(J_{ij})$  между спинами в системе с произвольной решеткой Браве как возмущение, в рамках этого подхода с помощью диаграммной техники найдены спектр элементарных возбуждений и энергия основного состояния гейзенберговского магнетика в третьем порядке теории возмущений (называемой далее, для краткости, разложение по степеням  $J/D$ ) при нулевой температуре. Сравнение полученных результатов и результатов других аналитических методов с численными расчетами, выполненными в частном случае  $S = 1$  на квадратной решетке, показало, что разработанный метод точнее и удобнее в применении.
3. С помощью разработанного метода и диаграммной техники исследована окрестность квантового фазового перехода по магнитному

полю в фазу с дальним магнитным порядком. Найдены температурные поправки к спектру низколежащих возбуждений, намагниченность и теплоемкость в главных порядках по  $J/D$  и температуре. Найдено уравнение для фазовой границы на плоскости  $H-T$ .

4. С помощью  $1/S$ -разложения и техники бозе-конденсации магнонов изучены свойства магнетика рассматриваемого типа, состоящего из двух слабовзаимодействующих тетрагональных магнитных подрешеток, вблизи от ККТ  $H = H_{c2}$ , разделяющей скошенную антиферромагнитную и полностью поляризованную фазы. При  $H \lesssim H_{c2}$  найдено расщепление спектра, двукратно вырожденного в отсутствие межподрешеточного взаимодействия. Показано что даже слабое обменное взаимодействие подрешеток приводит к значительной щели в одной из ветвей спектра.
5. Все полученные результаты применены для интерпретации экспериментальных данных в  $\text{NiCl}_2-4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ , наиболее хорошо исследованном веществе с большой ОАПЛ. Продемонстрировано, что существовавшая ранее модель этого соединения неудовлетворительно описывает ряд экспериментов, а в некоторых случаях находится в остром противоречии с ними. Предложена новая модель этого вещества, хорошо описывающая весь набор экспериментальных данных.

### **Научная новизна и практическая ценность**

Все результаты, полученные в работе и выносимые на защиту, являются новыми. Полученные выражения для спектра элементарных возбуждений, теплоемкости и намагниченности могут быть использованы при интерпретации экспериментальных данных во всех веществах с большой ОАПЛ и целым спином. Выражения для спектра магнонов в магнетике с двумя слабо связанными подрешетками в магнитном поле могут быть использованы также в соответствующих веществах без ОАПЛ, например, в большом количестве гранатов.

### **АПРОБАЦИЯ РАБОТЫ**

Результаты, изложенные в диссертации, были представлены и обсуждались на следующих российских и международных конференциях:

- Зимняя школа ПИЯФ (Санкт–Петербург, 2011)
- International simposium "Spin Waves" (Санкт–Петербург, 2011);
- Moscow International Simposium on Magnetism 2011 (Москва , 2011);

## СТРУКТУРА И ОБЪЕМ РАБОТЫ

Диссертация состоит из четырех глав, заключения, двух приложений и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 73 страницах и включает 18 рисунков и список литературы, состоящий из 72 ссылок.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Глава I является введением. В ней обоснована актуальность темы, дается обзор литературы, посвященной магнетикам с большой ОАЛП. Ставится цель и формулируются задачи диссертационной работы, дается краткое содержание диссертации, характеристика научной новизны и практической ценности полученных результатов.

В главе II предложен новый подход к изучению магнетиков с большой ОАЛП и целым спином. Такие системы описываются гамильтонианом

$$\mathcal{H} = D \sum_i (S_i^z)^2 + \mathcal{H}_{int}, \quad (1)$$

где  $D > 0$  — величина анизотропии, а  $\mathcal{H}_{int}$  описывает произвольное обменное взаимодействие спинов. При  $\mathcal{H}_{int} = 0$  и  $T = 0$  все спины находятся в состояниях  $|S_i^z = 0\rangle$  с нулевой проекцией на ось  $z$ . Нижние возбужденные уровни образуют дважды вырожденную плоскую зону с энергией  $D$  и получают замену на одном из узлов состояния  $|S_i^z = 0\rangle$  на  $|S_i^z = \pm 1\rangle$ . Обменное взаимодействие  $\mathcal{H}_{int}$ , которое мы будем рассматривать как возмущение, приводит к дисперсии спектра элементарных возбуждений.

Для исследования фазы, в которой все спины находятся преимущественно в состоянии с нулевой проекцией на ось  $z$ , в диссертации



предложено следующее новое представление спиновых операторов:

$$S_i^z = n_{b,i} - n_{a,i}, \quad (2)$$

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = b_i^\dagger \sqrt{\frac{(S - n_{b,i})(S + 1 + n_{b,i})}{1 + n_{b,i}}} + \sqrt{\frac{(S - n_{a,i})(S + 1 + n_{a,i})}{1 + n_{a,i}}} \cdot a_i, \quad (3)$$

где  $n_{a,i} = a_i^\dagger a_i$  и  $n_{b,i} = b_i^\dagger b_i$ . При этом состояние  $|S_i^z = 0\rangle$  является вакуумным, и операторы  $a_i^\dagger$  и  $b_i^\dagger$  создают из него состояния с  $S^z < 0$  и  $S^z > 0$ , соответственно. Легко проверить, что представление (2)–(3) воспроизводит коммутационные соотношения спиновых операторов на физическом подпространстве. Чтобы исключить вклад нефизических состояний, в которых на одном узле одновременно присутствуют частицы двух типов (типа  $a$  и типа  $b$ ), в гамильтониан вводится член с бесконечным отталкиванием между ними

$$\mathcal{H}_U = \frac{U}{N} \sum_i a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i, \quad U \rightarrow +\infty. \quad (4)$$

Если плотность частиц достаточно мала, можно разложить корень в выражении (3) в ряд и ограничиться, как это обычно делается в подобных случаях, учетом лишь первых членов получившегося нормально упорядоченного выражения. В результате приходим к упрощенному представлению

$$S_i^+ \approx b_i^\dagger \left( c_1 - c_2 b_i^\dagger b_i \right) + \left( c_1 - c_2 a_i^\dagger a_i \right) a_i, \quad (5)$$

$$c_1 = \sqrt{S(S+1)}, \quad (6)$$

$$c_2 = \sqrt{S(S+1)} - \sqrt{\frac{(S-1)(S+2)}{2}} > 0. \quad (7)$$

Для определенности рассмотрим гейзенберговский магнетик с произвольным обменом на произвольной решетке Браве:

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (8)$$

Подставляя (2) и (5) в (1) и (8), приходим к бозевскому аналогу спинового гамильтониана, который исследуется при помощи стандартной

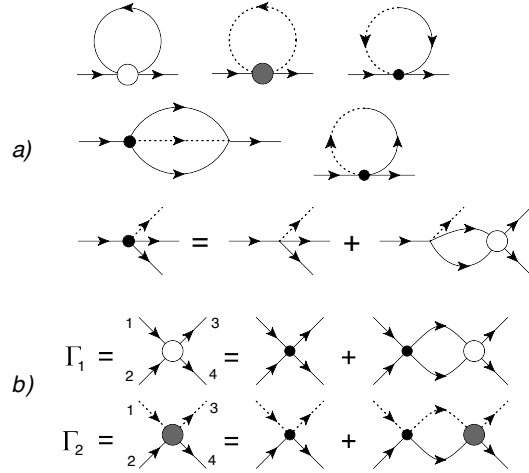


Рис. 2: (а) Диаграммы для собственно энергетической части второго порядка по  $J/D$ . Сплошные и пунктирные линии обозначают, соответственно, функции Грина (9) для частиц типа  $a$  и  $b$ . Линии, содержащие сплошную и пунктирную части, обозначают аномальную функцию Грина (10). (б) Вершинные функции, которые входят в диаграммы для собственно-энергетической части.

диаграммной техники с использованием следующих функций Грина:

$$G(p) = -i\langle a_p a_p^\dagger \rangle = -i\langle b_p b_p^\dagger \rangle, \quad (9)$$

$$F(p) = -i\langle b_{-p}^\dagger a_p^\dagger \rangle. \quad (10)$$

В качестве иллюстрации на Рис.2 приведены диаграммы для собственно энергетической части второго порядка по  $J/D$ . В результате вычисления этих и других диаграмм находим для спектра элементар-

ных возбуждений в третьем порядке по  $J/D$

$$\begin{aligned} \epsilon_{3\mathbf{p}} = & D + \frac{c_1^2}{2} J_{\mathbf{p}} + \frac{2c_1^4 + 2c_1^3 c_2 - c_1^2 c_2^2}{8D} (J^2)_0 - \frac{c_1^4}{8D} J_{\mathbf{p}}^2 \\ & + \frac{3c_1^4 + 2c_1^3 c_2 - c_1^2 c_2^2}{16D^2} (J^3)_0 - \frac{11c_1^6 + 8c_1^5 c_2 - 5c_1^4 c_2^2}{64D^2} J_{\mathbf{p}} (J^2)_0 \\ & + \frac{3c_1^6 + 4c_1^5 c_2 - 2c_1^4 c_2^2}{32D^2} (J^3)_{\mathbf{p}} - \frac{c_1^4}{8D^2} J_{\mathbf{p}} (J^2)_{\mathbf{p}} + \frac{c_1^6}{16D^2} J_{\mathbf{p}}^3, \quad (11) \end{aligned}$$

где  $(J^n)_{\mathbf{p}} = \sum_i J_{ij}^n e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}_{ij}}$ . В частном случае цепочки спинов с  $S = 1$  и обменным взаимодействием только между ближайшими соседями выражение (11) совпадает с соответствующим выражением, полученным в работе [2] только для этого частного случая при помощи стандартной квантовомеханической теории возмущений. Вычисление энергии основного состояния в третьем порядке по  $J/D$  дает

$$E_{gs} = -\frac{c_1^4}{8D} (J^2)_0 - \frac{c_1^4}{16D^2} (J^3)_0. \quad (12)$$

Далее в Главе II предлагается ряд упрощенных представлений спиновых операторов для случая  $S = 1$  и с их помощью воспроизводятся результаты (11) и (12).

После этого проводится сравнение результатов (11) и (12) с предыдущими численными расчетами, выполненными для  $S = 1$ , квадратной решетки и антиферромагнитного обменного взаимодействия  $J$  между ближайшими соседями. Сделан вывод о том, что разработанный подход работает в целом лучше предыдущих аналитических методов, при этом пользоваться им проще (так, наиболее точный из существующих аналитических методов “обобщенный спин-волновой подход” (ОСВП) [3, 4] требует численного решения самосогласованных уравнений). Для примера на Рис.3 изображены соответствующие графики для  $D = 10J$ .

Далее рассматривается применение полученных результатов к описанию экспериментальных данных в соединении  $\text{NiCl}_2\text{-}4\text{SC}(\text{NH}_2)_2$  (DTN), которому было посвящено множество работ в последнее время.

Магнитная подсистема DTN состоит из ионов  $\text{Ni}^{++}$ , расположенных в узлах двух тетрагональных подрешеток, „вложенных“ друг в друга так, что общая магнитная решетка является тетрагональной объемно-центрированной. Взаимодействие между атомами внутри каждой тетрагональной подрешетки антиферромагнитное и сильно анизотропное

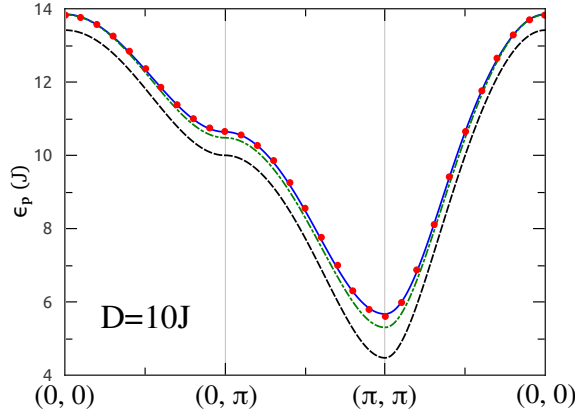


Рис. 3: Спектр элементарных возбуждений магнетика на квадратной решетке с большой ОАЛП, с  $S = 1$ , с антиферромагнитным обменным взаимодействием  $J$  между ближайшими спинами и с  $D = 10J$ . Точки представляют результаты численных расчетов работы [6], пунктирная кривая — аналитический результат работы [1], штрих-пунктирная — “обобщенный спин-волновой подход”, использованный в работах [3, 4], сплошная линия — результат данной работы.

— обмен вдоль одного из направлений решетки  $J_z$  примерно в 10 раз больше, чем в двух других направлениях  $J_{xy}$ . Таким образом, DTN — квазиодномерное соединение, состоящее из слабо связанных цепочек. Трудная ось направлена вдоль цепочек. Взаимодействием между магнитными тетрагональными подрешетками в абсолютном большинстве предыдущих работ пренебрегали.

В магнитном поле  $H$ , параллельном трудной оси, фазовая диаграмма на плоскости  $H$ - $T$  имеет вид купола, показанного на Рис. 1. Было экспериментально обнаружено, что  $H_{c1}(T) - H_{c1}(0) \sim T^{3/2}$  при  $T \rightarrow 0$ . Так что квантовый фазовый переход в  $H = H_{c1}$  принадлежит к классу универсальности БЭК (бозе-эйнштейновская конденсация).

Для интерпретации большинства экспериментальных данных ранее

использовалась модель (1), (8) с параметрами

$$\begin{aligned}
 D &= 8.9 \text{ К}, \\
 J_z &= 2.2 \text{ К}, \\
 J_{xy} &= 0.18 \text{ К}.
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

Хотя в этой модели при помощи “обобщенного спин–волнового подхода” было получено хорошее согласие с рядом экспериментальных данных (см., например, [3, 4]), в диссертации показано, что она не описывает нейтронный спектр, полученный в одном из первых экспериментов [3]. Более того, данная модель принципиально не может объяснить возникновения щели в одной из акустических ветвей в скошенной антиферромагнитной фазе, обнаруженных в ЭПР-эксперименте [7]. Для объяснения этой щели в работе [7] было предположено, что соседние спины из разных тетрагональных подрешеток связаны взаимодействием Дзялошинского-Мория. В тоже время сами авторы работы [7] признавали, что вводят в рассмотрение обычно более слабое взаимодействие релятивистской природы, опуская более сильное обменное взаимодействие, лишь для упрощения вычислений. С другой стороны, как было показано Е.Ф. Шендером [8], обменное взаимодействие двух одинаковых антиферромагнитных подрешеток приводит к щели в одной из ветвей спектра в результате взаимодействия флуктуаций (эффект „порядок из беспорядка“). По этой причине мы ввели в диссертации обменное взаимодействие  $V$  между ближайшими атомами из разных тетрагональных подрешеток и постарались описать весь имеющийся на сегодняшний день набор экспериментальных данных.

В Главе II показано, что формула (11) хорошо описывает экспериментальные данные нейтронного рассеяния со следующим набором параметров, который несколько отличается от общепринятого набора (13),

$$\begin{aligned}
 D &= 7.72 \text{ К}, \\
 J_z &= 1.86 \text{ К}, \\
 J_{xy} &= 0.2 \text{ К}, \\
 V &= 0.1 \text{ К}.
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

При этом набор (14) воспроизводит значения критических полей  $H_{c1}$  и  $H_{c2}$  в DTN, известные из других экспериментов. На рис. 4 изображен результат подгонки спектра при помощи (11) к экспериментальным

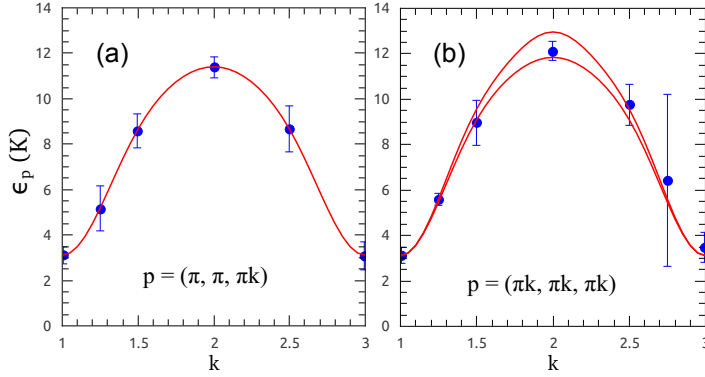


Рис. 4: Спектр элементарных возбуждений DTN. Синие точки — экспериментальные данные, полученные в работе [3] методом неупругого рассеяния нейтронов, сплошные кривые — результат, полученный в данной работе при помощи формулы (11) и параметров (14). Небольшое расщепление сплошной линии на панели b) вызвано взаимодействием  $V$  между подрешетками DTN, введенным в настоящей работе.

данным работы [3]. Видно, что теоретические кривые довольно хорошо ложатся на эксперимент. Небольшое расщепление сплошной линии на панели b) вызвано взаимодействием  $V$  между подрешетками, которое снимает двойное вырождение спектра. Одна из этих ветвей немного выходит за рамки экспериментальных ошибок в точке  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . В диссертации показано, однако, что величина этого расщепления дается плохо сходящимся рядом по  $J/D$  и для нахождения ее точного значения необходим учет членов высших порядков по  $J/D$ , что выходит за рамки данной работы.

В главе III с помощью разработанной техники рассматривается окрестность ККТ  $H = H_{c1}$ , разделяющей парамагнитную и магнитно упорядоченную фазы, трехмерного гейзенберговского магнетика с большой ОАЛП в магнитном поле, параллельном трудной оси, при  $T \neq 0$ .

Взаимодействие спинов с магнитным полем  $\mathcal{H}_h = H \sum_i S_i^z$  снимает двукратное вырождение спектра элементарных возбуждений (частицы  $a$  и  $b$  перестают быть эквивалентными) так, что энергия  $a$ -частиц с увеличением поля уменьшается, а энергия  $b$ -частиц — увеличивает-

ся. В поле  $H_{c1} = \epsilon_{\mathbf{p}_0}$ , где  $\mathbf{p}_0$  – точка минимума спектра при  $H = 0$ , спектр частиц  $a$  становится неустойчивым и образуется дальний магнитный порядок, характеризуемый волновым вектором  $\mathbf{p}_0$ . Частицы  $b$  оказываются, напротив, очень массивными. Считая температурные поправки малыми и вычисляя поправки к спектру в главных порядках по  $T$  и  $J/D$ , получены выражения для кривой раздела двух фаз  $H_{c1}(T)$  на плоскости  $H$ – $T$  и для намагниченности на этой кривой. Показано, что для этого достаточно вычислить температурную часть простой диаграммы Хартри-Фока для собственно энергетической части  $\Sigma_{a,h}(p)$   $a$ -частиц (первая диаграмма на Рис. 2(а)) с вершиной, найденной в лестничном приближении в первом порядке по  $J/D$ . В результате получены выражения

$$\delta_T \epsilon_{a,h}(\mathbf{p}) = 4\Gamma_a(\epsilon(\mathbf{p}) - H, 0, \mathbf{p})M(H, T), \quad (15)$$

$$H_{c1}(T) = \epsilon(\mathbf{p}_0) + 4\Gamma_a(0, 0, \mathbf{k}_0)M(H, T), \quad (16)$$

$$M(H, T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} N(\epsilon(\mathbf{k}) - H), \quad (17)$$

где  $\Gamma_a(\Omega, \mathbf{p}, \mathbf{q})$  – вершинная функция, запись  $\delta_T X$  обозначает температурную поправку к величине  $X$  и  $M(H, T)$  – намагниченность.

Намагниченность в критической области  $M_c = M(H = H_{c1}(T), T)$  и кривая разделения фаз  $H_{c1}(T)$  для DTN были измерены в работах [9] и [10]. Теоретические результаты, полученные при помощи формул (16), (17) и предложенных в диссертации параметров (14) очень хорошо описывают эти эксперименты при  $T \lesssim 0.3$  К. В диссертации показано, что это как раз та область, в которой еще не так сильно проявляется квазиодномерность DTN и предложенная теория применима. На Рис. 5 в качестве иллюстрации приведены результаты для  $H_{c1}(T)$ .

В главе III найдено также выражение для теплоемкости в окрестности ККТ  $H = H_{c1}$  в главном порядке по температуре и  $J/D$  и показано, что оно хорошо описывает соответствующие экспериментальные данные, полученные для DTN в работе [4].

В главе IV с помощью  $1/S$ -разложения и техники бозе-конденсации магнонов [11, 12] исследуются свойства гейзенберговского антиферромагнетика с ОАЛП, описываемого гамильтонианом (1), (8) в магнитном поле параллельном трудной оси. При этом предполагается, что решетка является тетрагональной объемноцентрированной, которую можно се-

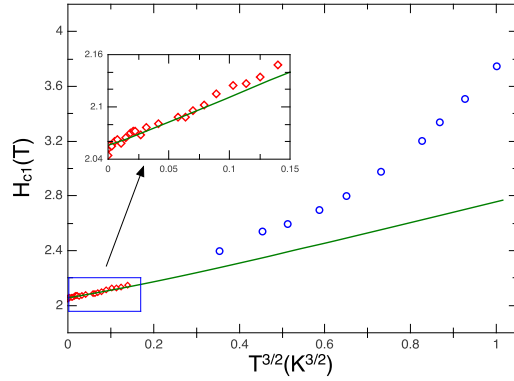


Рис. 5: Критическое поле  $H_{c1}$  как функция от  $T^{3/2}$  в DTN. Круги и ромбы — экспериментальные данные работ [9] и [10], соответственно. Линии получены при помощи формул (16), (17) и параметров (14), предложенных в диссертации.

бе представить в виде двух тетрагональных решеток „вложенных друг в друга“. Такой структурой обладают, например, DTN и ряд гранатов (см. работу [8]). Величина ОАЛП не важна для анализа, проведенного в этой главе. В случае большой ОАЛП полученные результаты относятся лишь к индуцированной полем фазе с дальним магнитным порядком (см. Рис. 1).

При отсутствии взаимодействия между подрешетками спектр является дважды вырожденным и бесцелевым (голдстоуновские моды). Взаимодействие между подрешетками снимает это вырождение несмотря на то, что атомы одной подрешетки находятся в нулевом молекулярном поле атомов другой. Расщепление оптической ветви спектра происходит уже в спин-волновом приближении (в нулевом порядке по  $1/S$ ). Е.Ф. Шендер в работе [8] показал, что в случае  $D = H = 0$  учет квантовых и температурных флуктуаций приводит в динамическому нарушению симметрии относительного вращения намагниченности подрешеток и одна из мод приобретает щель (эффект „порядок из беспорядка“), которая наблюдается в экспериментах на гранатах. Задачей данной главы является обобщение результата работы [8] на случай  $D \neq 0$  и  $H \neq 0$  и применение полученных формул для интерпретации результатов ЭПР-



эксперимента [7] в DTN.

В первом порядке по  $1/S$  и в старшем порядке по обменному взаимодействию между подрешетками получено следующее выражение для щели в спектре в скошенной антиферромагнитной фазе:

$$\Delta^2 = 4S^2 \sin^4 \theta (J_0 + \tilde{D}) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 (\Sigma_{0\mathbf{k}} - \Pi_{0\mathbf{k}})^2 \epsilon_{\mathbf{k}}^{-3}, \quad (18)$$

где  $J_{\mathbf{k}}$  и  $V_{\mathbf{k}}$  — фурье-образы внутри- и межподрешеточного обменов,

$$\tilde{D} = D \left( 1 - \frac{1}{2S} \right), \quad (19)$$

$$\cos \theta = H/H_{c2}, \quad (20)$$

$$\Sigma_{0\mathbf{k}} = (SJ_0 + SJ_{\mathbf{k}}) \cos^2 \theta + (SJ_0 + S\tilde{D}) \sin^2 \theta, \quad (21)$$

$$\Pi_{0\mathbf{k}} = (SJ_0 + SJ_{\mathbf{k}}) \cos^2 \theta - (SJ_0 + S\tilde{D}) \sin^2 \theta, \quad (22)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = S \sqrt{(J_0 + J_{\mathbf{k}}) \left( J_0 + J_{\mathbf{k}} \cos 2\theta + 2\tilde{D} \sin^2 \theta \right)}. \quad (23)$$

Выражение (18) является обобщением результата Е.Ф. Шендера [8] на случай  $D \neq 0$  и  $H \neq 0$ .

В спин-волновом приближении найдено следующее выражение для величины расщепления оптической ветви спектра:

$$\delta\epsilon_{max} \approx SV_0 \frac{2J_0 \cos^2 \theta + \tilde{D} \sin^2 \theta}{\sqrt{J_0^2 \cos^2 \theta + J_0 \tilde{D} \sin^2 \theta}}. \quad (24)$$

В диссертации показано, что в случае больших значений ОАЛП  $1/S$ -разложение не применимо при малых полях из-за сильных флуктуаций. С другой стороны хорошо известно, что в окрестности ККТ  $H = H_{c2}$  флуктуации также сильны и  $1/S$ -разложение при  $S \sim 1$  может плохо работать (см. работы [11, 12]). Чтобы уточнить результат для щели при  $H \sim H_{c2}$  в диссертации с использованием техники бозе-конденсации магнонов [11, 12], хорошо учитывающей квантовые флуктуации вблизи ККТ  $H = H_{c2}$ , получено следующее выражение:

$$\Delta_{BEC} = (H_{c2} - H) \left[ 4\sqrt{|\gamma|/\lambda} \right], \quad (25)$$

где  $\lambda$  и  $\gamma$  — вершинные функции.

Выражение (18) при  $H \sim H_{c2}$  имеет ту же зависимость от поля, что и (25), но коэффициенты в (18) и (25) перед  $(H_{c2} - H)$  отличаются. Как показано в диссертации, это различие может быть существенным для систем с большими флуктуациями (например, для квази-одномерных систем с  $S \sim 1$ , к числу которых принадлежит DTN).

При помощи выражений (18), (24) и (25) проанализированы данные ЭПР-экспериментов в DTN [7]. К сожалению, неприменимость найденных выражений вдали от ККТ  $H = H_{c2}$  и отсутствие экспериментальных данных вблизи нее не позволило найти точное значение величины обмена между подрешетками  $V$ , а лишь оценить его —  $V \sim 0.1$  К. Эта оценка согласуется с результатом главы II (см. (14)).

Заключение содержит основные результаты диссертации, а также сведения, касающиеся апробации данной работы.

В Приложении А приведены ангармонические члены гамильтониана, изученного в главе IV.

В Приложении В приведены некоторые детали вычисления вершинных функций.

## Список литературы

- [1] *Lindgard P.* // *Physica B.* — 1983. — Vol. 120. — P. 190.
- [2] *Papanicolaou N., Spathis P.* // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 1990. — Vol. 2, no. 31. — P. 6575.
- [3] *Zapf V. S., Zocco D., Hansen B. R. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96. — P. 077204.
- [4] *Kohama Y., Sologubenko A. V., Dilley N. R. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 106. — P. 037203.
- [5] *Orendáč M., Zvyagin S., Orendáčová A. et al.* // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60. — Pp. 4170–4175.
- [6] *Oitmaa J., Hamer C. J.* // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 224435.
- [7] *Zvyagin S. A., Wosnitzer J., Kolezhuk A. K. et al.* // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 092413.

- [8] Шендер Е. Ф. // ЖЭТФ. — 1982. — Т. 83. — С. 326.
- [9] Raduan-Filho A., Al-Hassanieh K. A., Sengupta P., Jaime M. // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 077204.
- [10] Yin L., Xia J. S., Zapf V. S. et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 187205.
- [11] Батыев Е. Г., Брагинский Л. С. // ЖЭТФ. — 1984. — Т. 87. — С. 1361.
- [12] Батыев Е. Г. // ЖЭТФ. — 1985. — Т. 89. — С. 308.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

1. A. V. Sizanov, A. V. Syromyatnikov. Antiferromagnet with two coupled antiferromagnetic sublattices in a magnetic field. // *J. Phys.: Condens. Matter.* **23**, 146002 (2011) [8 pages];
2. A. V. Sizanov, A. V. Syromyatnikov. Bosonic representation of quantum magnets with large single-ion easy-plane anisotropy // *Phys. Rev. B* **84**, 054445 (2011) [11 pages];
3. A. V. Sizanov, A. V. Syromyatnikov. Quantum magnets with large single-ion easy-plane anisotropy in magnetic field. // *Письма в ЖЭТФ* **94**, Т. 8, С. 710–715 (2011).
4. А.В. Сизанов, А.В. Сыромятников. Свойства магнетиков с сильной одноионной анизотропией “лёгкая плоскость”. // Программа, тезисы и список участников, XLV Школа ПИЯФ РАН, Гатчина, секция физики конденсированного состояния С. 25 (2011).
5. A. V. Sizanov, A. V. Syromyatnikov. Magnetism with large single-ion anisotropy. // *Book of Abstracts, Moscow International Symposium on Magnetism*, p. 648 (2011).