

УДК 538.1

©1993

МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ В СОЕДИНЕНИИ Fe_2P

Ю.Д.Заворотнев

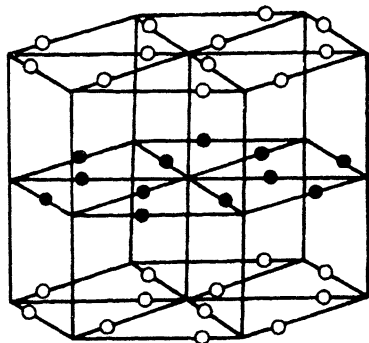
Рассмотрено соединение Fe_2P с треугольной структурой. С помощью симметричного анализа определены магнитные структуры, описываемые неприводимыми представлениями пространственной группы с волновым вектором \mathbf{k} , отличным от нуля. Найдены условия существования и величина вектора распространения возможных несоизмерных структур.

Соединение Fe_2P является одним из наиболее изучаемых в силу наличия довольно редких особенностей поведения его магнитных характеристик [1–10]. В частности, в этом веществе фазовый переход по температуре из магнитоупорядоченного в неупорядоченное состояние является переходом первого рода. Необходимо также отметить, что фосфид железа весьма чувствителен к изменению стехиометрического состава, что позволяет имитировать наложение высокого давления [11], а также к изменению внешних воздействий, таких как температура, магнитное поле, давление. Последнее обстоятельство служит причиной реализации ряда магнитных фаз. Идентификация этих фаз возможна только при помощи нейтронно-дифракционных исследований, что экспериментально представляет собой сложную задачу. Проведение теоретической классификации возможных в Fe_2P магнитных структур существенно упрощает задачу выбора. Кроме того, определение круга этих структур позволяет провести анализ и определить тип спинового упорядочения, реализующегося при внешних воздействиях. Для этого с помощью симметричного анализа необходимо найти все возможные магнитные структуры Fe_2P . Такая работа была начата в [12], где изучены состояния с волновым вектором $\mathbf{k} = 0$. В настоящей работе в приближении ближайших соседей рассмотрены структуры при $\mathbf{k} \neq 0$, а также возможные несоизмерные состояния.

Соединение Fe_2P имеет пространственную группу $P\bar{6}2m - D_{3h}^3$ [13], которая является симморфной. Элементарная гексагональная ячейка содержит шесть атомов Fe, расположенных в двух трехкратных кристаллографических положениях: Fe(1) и Fe(2). Атомы обеих групп каждые в своей плоскости образуют треугольную решетку (рис. 1).

1. Обменная симметрия

Рассмотрим возможные структуры, описываемые неприводимыми представлениями пространственной группы с вектором \mathbf{k} , лежащим в



○ 1 ● 2

Рис. 1. Положения магнитных атомов в гексагональной ячейке.

1 — Fe(1), 2 — Fe(2).

симметричных точках границы зоны Бриллюэна. В соответствии с результатами работы [14] магнитным структурам могут отвечать одно-, двух- и трехлучевые звезды. Этому критерию в группе D_{3h}^3 удовлетворяют одна однолучевая звезда $k_{17} = 0.5b_3$ и две трехлучевые звезды $k_{12} = 0.5b_1$ и $k_{14} = 0.5(b_1 + b_3)$, где b_i ($i = 1, 2, 3$) — векторы обратной решетки. Классификация звезд здесь дана согласно Ковалеву [15].

Найдем возможные магнитные структуры, возникающие благодаря трехлучевой звезде k_{12} , которая имеет группу собственной симметрии C_{2v} . Проекция соответствующей магнитной ячейки на плоскость расположения атомов Fe изображена на рис. 2. Необходимо отметить, что на рис. 2 приведена одна из возможных ориентаций оси второго порядка, соответствующая одному из лучей звезды k_{12} . Другим звездам необходимо сопоставить другие оси, повернутые на углы $\pm\pi/3$. Вдоль этих же направлений будет происходить и удвоение ячейки.

Как показано в [16], проблема диагонализации всего гамильтониана сводится к диагонализации однолучевого вклада. Рассмотрим сначала состояния, обусловленные лучом $k = 0.5b_1$ звезды k_{12} . Поскольку обменное взаимодействие является функцией скалярных произведений атомных спинов, то для проведения анализа гамильтониана в обменном приближении достаточно ограничиться перестановочной симметрией [17]. При этом необходимо учитывать взаимодействие между 26 атомами каждой плоскости, входящими в элементарную магнитную ячейку. Однако если ограничиться приближением ближайших соседей, то симметрия матрицы обменного взаимодействия повышается и она приобретает блочный вид. В каждый из этих блоков размерностью 3×3 входят взаимодействия только между тремя атомами, группирующимися вблизи узла элементарной ячейки (рис. 2). Поэтому при диагонализации гамильтониана

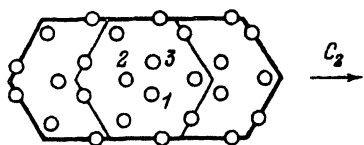


Рис. 2. Проекция соответствующей магнитной ячейки на плоскость расположения атомов Fe. Тонкими и жирными линиями приведены элементарные кристаллическая и магнитная ячейки. Кружками обозначены магнитные атомы Fe.

Таблица 1

Результат действия операторов
группы C_{2v} на позиции
магнитных ионов Fe

№иона	E	C_2	σ_v	σ_v^1
1	1	3	3	1
2	2	2	2	2
3	3	1	1	3

ограничимся рассмотрением только трех атомов (например, 1, 2, 3 на рис. 2).

Построим перестановочное представление группы волнового вектора C_{2v} для луча $\mathbf{k} = 0.5\mathbf{b}_1$. Необходимо отметить, что, поскольку группа D_{3h}^3 является симморфной, то под действием элементов группы волнового вектора атомы нулевой ячейки не переходят в атомы другой ячейки. Иными словами, возвращающая трансляция равна нулю. В табл. 1 представлены результаты действий операторов группы C_{2v} на позиции магнитных ионов. Отсюда получаем следующие матрицы перестановочного представления:

$$d(E) = d(\sigma_v^1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$d(C_2) = d(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Состав этого представления является следующим:

$$d = 2A_1 + B_2. \quad (2)$$

С помощью этих матриц можно определить все связи между элементами обменной матрицы

$$I = \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & E & B \\ C & B & A \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Используя стандартный оператор проектирования, легко определить неприводимые векторы

$$\mathbf{F}_f = \sqrt{0.5}(\mathbf{s}_{1f} + \mathbf{s}_{3f}), \quad \mathbf{F}_g = \sqrt{0.5}(\mathbf{s}_{1g} + \mathbf{s}_{3g}), \quad (4)$$

$$\mathbf{Q}_f = \mathbf{s}_{2f}, \quad \mathbf{Q}_g = \mathbf{s}_{2g}, \quad (5)$$

$$\mathbf{L}_f = \sqrt{0.5}(\mathbf{s}_{1f} - \mathbf{s}_{3f}), \quad \mathbf{L}_g = \sqrt{0.5}(\mathbf{s}_{1g} - \mathbf{s}_{3g}), \quad (6)$$

где $\mathbf{s}_{\nu f}$ и $\mathbf{s}_{\nu g}$ — спины атомов в подрешетках f и g соответственно ($\nu = 1, 2, 3$). Необходимо отметить, что, согласно экспериментальным данным, спины соответствующих атомов различных слоев различны [18].

В соответствии с (2) векторы \mathbf{F}_i и \mathbf{Q}_i ($i = f, g$) преобразуются по полносимметричному представлению A_1 группы C_{2v} и являются векторами ферромагнетизма. Векторы антиферромагнетизма \mathbf{L}_i преобразуются по

представлению B_2 этой же группы. Нетрудно показать, что в переменных F , Q , L квадратичная часть обменной энергии системы при учете только первой координатной сферы имеет вид

$$E_0 = \delta_1 \mathbf{F}_f^2 + \delta_2 \mathbf{F}_g^2 + \delta_3 \mathbf{F}_f \mathbf{Q}_f + \delta_4 \mathbf{F}_g \mathbf{Q}_g + \delta_5 (\mathbf{F}_f \mathbf{Q}_g + \mathbf{Q}_f \mathbf{F}_g) + \delta_6 \mathbf{F}_f \mathbf{F}_g + \delta_7 \mathbf{L}_f \mathbf{L}_g + \delta_8 \mathbf{Q}_f \mathbf{Q}_g + \delta_9 \mathbf{Q}_f^2 + \delta_{10} \mathbf{Q}_g^2 + \delta_{11} \mathbf{L}_f^2 + \delta_{12} \mathbf{L}_g^2. \quad (7)$$

Проведем анализ этого выражения.

$$1) \delta_1 > 0, \quad \delta_2 > 0, \quad \delta_9 < 0, \quad \delta_{11} < 0, \quad \delta_{12} < 0.$$

В этом случае минимум будет достигаться, если $\mathbf{F}_f = \mathbf{F}_g = 0$. Значит, $\mathbf{s}_{1f} = -\mathbf{s}_{3f}$, $\mathbf{s}_{1g} = -\mathbf{s}_{3g}$, т.е. между спинами атомов 1 и 3 имеет место антиферромагнитное упорядочение. Если $\delta_7 < 0$, то $\mathbf{L}_f \parallel \mathbf{L}_g$. Это означает, что относительная ориентация спинов атомов 1 и 3 в соседних слоях параллельная. При а) $\delta_8 < 0$ имеем $\mathbf{Q}_f \parallel \mathbf{Q}_g$, а при б) $\delta_8 > 0$ — $\mathbf{Q}_f \uparrow \downarrow \mathbf{Q}_g$. В первом случае имеет место ферромагнитное упорядочение атомов 2 в соседних слоях, а во втором — ферримагнитное (ФИМ), так как величина спинов в разных слоях различна. Очевидно, что упорядочение атомов 2 происходит вдоль цепочек. Понятно, что такая ситуация возможна при пренебрежении взаимодействия атомов 2 во второй координационной сфере. Если последнее взаимодействие имеет более высокую температуру упорядочения, то возможно упорядочение атомов 2 в слоях. При более высоких температурах атомы 2 находятся в парафазе. Необходимо отметить, что в данном приближении невозможно установить взаимную ориентацию атомов 2 с атомами 1 и 3.

$$2) \delta_1 > 0, \quad \delta_2 > 0, \quad \delta_7 > 0, \quad \delta_{11} > 0, \quad \delta_{12} < 0;$$

$$а) \delta_8 < 0,$$

$$б) \delta_8 > 0.$$

Этот случай отличается от предыдущего только тем, что ориентация спинов атомов 1 и 3 соседних слоев антипараллельная ($\mathbf{L}_f \uparrow \downarrow \mathbf{L}_g$).

$$3) \delta_1 < 0, \quad \delta_2 < 0, \quad \delta_9 < 0, \quad \delta_{11} > 0, \quad \delta_{12} > 0.$$

Минимум энергии возможен, если $\mathbf{L}_f = \mathbf{L}_g = 0$. Отсюда $\mathbf{s}_{1f} = \mathbf{s}_{3f}$, $\mathbf{s}_{1g} = \mathbf{s}_{3g}$, т.е. между спинами атомов 1 и 3 одного слоя имеет место ферромагнитное упорядочение. При $\delta_6 > 0$ между атомами 1 и 3 разных слоев упорядочение ферримагнитное ($\mathbf{F}_f \uparrow \downarrow \mathbf{F}_g$). Ориентация и величина векторов \mathbf{Q}_f и \mathbf{Q}_g в данном случае также произвольные. Если $\delta_3 > 0$ и $\delta_4 > 0$, то $\mathbf{F}_f \uparrow \downarrow \mathbf{Q}_f$ и $\mathbf{F}_g \uparrow \downarrow \mathbf{Q}_g$, т.е. ориентация векторов \mathbf{F} и \mathbf{Q} ферримагнитная. Необходимо отметить, что в этом случае может реализоваться только $\delta_5 < 0$ и $\delta_8 > 0$, так как из вышеизложенного следует, что $\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{Q}_g$ и $\mathbf{Q}_f \uparrow \downarrow \mathbf{Q}_g$.

$$4) \delta_1 < 0, \quad \delta_2 < 0, \quad \delta_3 > 0, \quad \delta_4 > 0, \quad \delta_5 > 0, \quad \delta_6 < 0, \quad \delta_8 < 0.$$

Конфигурация спинов внутри каждого слоя такая же, как и в предыдущем случае. Между атомами 1 и 3, а также атомами двух разных слоев

Классификация компонент неприводимых векторов по неприводимым представлениям группы C_{2v}

Представление	Компоненты неприводимых векторов
A_1	$F_{fy}, Q_{fy}, L_{fx}, F_{gy}, Q_{gy}, L_{gx}$
B_2	$F_{fx}, Q_{fx}, L_{fy}, F_{gx}, Q_{gx}, L_{gy}$
A_2	L_{fz}, L_{gz}
B_1	$F_{fz}, Q_{fz}, F_{gz}, Q_{gz}$

упорядочение ферромагнитное ($\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{F}_g, \mathbf{Q}_f \parallel \mathbf{Q}_g$). Возможности $\delta_5 < 0$ и $\delta_8 > 0$ в этом случае не реализуются.

$$5) \delta_1 < 0, \delta_2 < 0, \delta_3 < 0, \delta_4 < 0, \delta_5 > 0, \delta_6 > 0, \delta_8 > 0,$$

$$\delta_9 < 0, \delta_{11} > 0, \delta_{12} > 0.$$

В этом случае $\mathbf{L}_f = \mathbf{L}_g = 0$, т. е. $s_{1f} = s_{3f}, s_{1g} = s_{3g}$ — конфигурация ферромагнитная ($\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{F}_g$). Между атомами 1, 3 и 2 — упорядочение также ферромагнитное ($\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{Q}_f, \mathbf{F}_g \parallel \mathbf{Q}_g$). Между соответствующими атомами разных слоев имеем ферромагнитное упорядочение ($\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{F}_g, \mathbf{Q}_f \parallel \mathbf{Q}_g$). В этом случае возможность $\delta_5 < 0$ не реализуется.

$$6) \delta_1 < 0, \delta_2 < 0, \delta_3 < 0, \delta_4 < 0, \delta_5 < 0, \delta_6 < 0, \delta_8 < 0,$$

$$\delta_9 < 0, \delta_{11} > 0, \delta_{12} > 0.$$

Внутри каждого слоя конфигурация спинов такая же, как и в предыдущем случае. Однако между соответствующими атомами разных слоев имеем ферромагнитное упорядочение ($\mathbf{F}_f \parallel \mathbf{F}_g, \mathbf{F}_f \parallel \mathbf{Q}_g, \mathbf{Q}_f \parallel \mathbf{Q}_g$). Случай $\delta_5 > 0$ не возможен.

Рассмотренными выше структурами исчерпываются возможные спиновые конфигурации в обменном приближении.

2. Релятивистские взаимодействия

Для учета релятивистских взаимодействий, которые фиксируют ориентацию атомных спинов, необходимо провести классификацию по неприводимым представлениям компонент векторов $\mathbf{F}_f, \mathbf{Q}_f, \mathbf{L}_f, \mathbf{F}_g, \mathbf{Q}_g, \mathbf{L}_g$ и найти все возможные квадратичные инварианты. Пользуясь оператором проектирования, легко установить, по какому представлению преобразуются компоненты этих векторов. Результаты вычислений сведены в табл. 2.

С учетом релятивистских взаимодействий энергию системы можно представить в виде

$$E = E_0 + E_{rf} + E_{rg} + E_{rfg}, \quad (8)$$

где

$$E_{rf} = \alpha_1 \mathbf{F}_{fy}^2 + \alpha_2 \mathbf{Q}_{fy}^2 + \alpha_3 \mathbf{L}_{fx}^2 + \alpha_4 \mathbf{F}_{fx}^2 + \alpha_5 \mathbf{Q}_{fx}^2 + \alpha_6 \mathbf{L}_{fy}^2 + \alpha_7 \mathbf{L}_{fz}^2 + \alpha_8 \mathbf{F}_{fz}^2 + \alpha_9 \mathbf{Q}_{fz}^2 +$$

$$+\alpha_{10}\mathbf{F}_{fy}\mathbf{Q}_{fy} + \alpha_{11}\mathbf{F}_{fy}\mathbf{L}_{fx} + \alpha_{12}\mathbf{Q}_{fy}\mathbf{L}_{fx} + \alpha_{13}\mathbf{F}_{fx}\mathbf{Q}_{fx} + \alpha_{14}\mathbf{F}_{fx}\mathbf{L}_{fy} + \\ +\alpha_{15}\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{L}_{fy} + \alpha_{16}\mathbf{F}_{fz}\mathbf{Q}_{fz},$$

$$E_{rg} = \beta_1\mathbf{F}_{gy}^2 + \beta_2\mathbf{Q}_{gy}^2 + \beta_3\mathbf{L}_{gx}^2 + \beta_4\mathbf{F}_{gx}^2 + \beta_5\mathbf{Q}_{gx}^2 + \beta_6\mathbf{L}_{gy}^2 + \beta_7\mathbf{L}_{gz}^2 + \beta_8\mathbf{F}_{gz}^2 + \beta_9\mathbf{Q}_{gz}^2 + \\ +\beta_{10}\mathbf{F}_{gy}\mathbf{Q}_{gy} + \beta_{11}\mathbf{F}_{gy}\mathbf{L}_{gx} + \beta_{12}\mathbf{Q}_{gy}\mathbf{L}_{gx} + \beta_{13}\mathbf{F}_{gx}\mathbf{Q}_{gx} + \beta_{14}\mathbf{F}_{gx}\mathbf{L}_{gy} + \\ +\beta_{15}\mathbf{Q}_{gx}\mathbf{L}_{gy} + \beta_{16}\mathbf{F}_{gz}\mathbf{Q}_{gz},$$

$$E_{rgf} = \gamma_1\mathbf{F}_{fy}\mathbf{F}_{gy} + \gamma_2\mathbf{F}_{fy}\mathbf{Q}_{gy} + \gamma_3\mathbf{F}_{fy}\mathbf{L}_{gx} + \gamma_4\mathbf{Q}_{fy}\mathbf{F}_{gy} + \gamma_5\mathbf{Q}_{fy}\mathbf{Q}_{gy} + \gamma_6\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{L}_{gx} + \\ +\gamma_7\mathbf{L}_{fx}\mathbf{F}_{gy} + \gamma_8\mathbf{L}_{fx}\mathbf{Q}_{gy} + \gamma_9\mathbf{L}_{fx}\mathbf{L}_{gx} + \gamma_{10}\mathbf{F}_{fx}\mathbf{F}_{gx} + \gamma_{11}\mathbf{F}_{fx}\mathbf{Q}_{gx} + \gamma_{12}\mathbf{F}_{fx}\mathbf{L}_{gy} + \\ +\gamma_{13}\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{F}_{gx} + \gamma_{14}\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{Q}_{gx} + \gamma_{15}\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{L}_{gy} + \gamma_{16}\mathbf{Q}_{fx}\mathbf{L}_{gy} + \gamma_{17}\mathbf{L}_{fy}\mathbf{Q}_{gx} + \gamma_{19}\mathbf{L}_{fz}\mathbf{L}_{gz} + \\ +\gamma_{20}\mathbf{F}_{fz}\mathbf{F}_{gz} + \gamma_{21}\mathbf{F}_{fz}\mathbf{Q}_{gz} + \gamma_{22}\mathbf{Q}_{fz}\mathbf{F}_{gz} + \gamma_{23}\mathbf{Q}_{fz}\mathbf{Q}_{gz}. \quad (9)$$

Рассмотрим, как упорядочены рассмотренные выше структуры.

1) $F_f = F_g = 0$. ФМ-структура атомов 2 внутри слоев может быть только типа «легкая ось» с направлениями вдоль одной из осей OX , OY , OZ и соответствовать представлениям B_2 , A_1 и B_1 . Независимо от этого АФМ-структура также упорядочивается вдоль одной из осей OX , OY , OZ , что соответствует представлениям A_1 , B_2 , A_2 . Всего здесь возможно 9 типов упорядочения.

2) Возможные структуры аналогичны случаю 1), но ФИМ-структуры соседних слоев ориентированы противоположно ($\mathbf{L}_f \uparrow\downarrow \mathbf{L}_g$).

3) ФМ-структура внутри слоев типа «легкая ось» с упорядочением по одной из осей OX , OY , OZ , что соответствует представлениям B_2 , A_1 , B_1 . Векторы \mathbf{Q} в каждом слое антипараллельны векторам \mathbf{F} и направлены вдоль одной из осей («легкая ось»).

4) Здесь имеют место такие же структуры, как и в случае 3). Однако между соответствующими векторами разных слоев имеет место ФМ-упорядочение.

5) ФМ-структура внутри слоев также типа «легкая ось». Векторы \mathbf{Q} в каждом слое параллельны векторам \mathbf{F} . Между соответствующими векторами различных слоев ФИМ-упорядочение.

6) Аналогично случаю 5), но между соответствующими векторами различных слоев ФМ-упорядочение.

Необходимо отметить, что во все вышеприведенные формулы нигде не входит волновой вектор звезды. Следовательно, аналогичные структуры возникнут и при рассмотрении других лучей звезды k_{12} . Однолучевая звезда $k_{17} = 0.5b_3$ имеет группу собственной симметрии D_{3h} . Поэтому образующиеся магнитные структуры будут аналогичны рассмотренным в [12].

Выше были рассмотрены температуры, достаточные для упорядочения всех подсистем. Однако легко показать, что при промежуточных температурах возможны индуцированные упорядочения. Рассмотрим часть термодинамического потенциала, относящуюся к одному из слоев.

$$E = \delta_1\mathbf{F}^2 + \delta_9\mathbf{Q}^2 + \delta_{11}\mathbf{L}^2 + C_Q\mathbf{Q}^4 + C_L\mathbf{L}^4 + \alpha_1\mathbf{F}_y^2 + \alpha_2\mathbf{Q}_y^2 + \alpha_3\mathbf{L}_x^2 + \alpha_4\mathbf{F}_x^2 + \alpha_5\mathbf{Q}_x^2 +$$

$$\begin{aligned}
& +\alpha_6 L_y^2 + \alpha_7 L_z^2 + \alpha_8 F_z^2 + \alpha_9 Q_z^2 + \alpha_{10} F_y Q_y + \alpha_{11} F_y L_x + \alpha_{12} Q_y L_x + \\
& +\alpha_{13} F_x Q_x + \alpha_{14} F_x L_y + \alpha_{15} Q_x L_y + \alpha_{16} F_x Q_x - FH. \quad (10)
\end{aligned}$$

Здесь, как обычно, $\delta_i = 0.5\rho_i(T - T_{Ni})$, H — напряженность магнитного поля.

Пусть температура такова, что произошло упорядочение только подсистемы атомов 1 и 3 (основная мода — L). Пусть магнитное поле направлено по оси OX . Тогда намагниченность

$$F_x = \frac{H_x}{2\delta_1}. \quad (11)$$

Проигрыш обменной энергии при упорядочении подсистемы атомов 2

$$\begin{aligned}
\Delta E_1 = \rho_{11} L^2 (T - T_{NL}) - \rho_9 Q^2 (T - T_{NQ}) = (\rho_9 Q^2 T_{NQ} - \rho_{11} L^2 T_{NL}) + \\
+ T (\rho_{11} L^2 - \rho_9 Q^2), \quad (12)
\end{aligned}$$

где $T_{NQ} < T < T_{NL}$. При возрастании напряженности магнитного поля может наступить момент, когда этот проигрыш будет перекрыт выигрышем в магнитной энергии

$$\Delta E_2 = \alpha_{13} Q_x \frac{H_x}{2\delta_1}. \quad (13)$$

Отсюда для критического поля H_{xc} получаем следующее выражение:

$$H_{xc} = \frac{2\delta_1}{\alpha_{13} Q_x} [(\rho_{11} L^2 T_{NL} - \rho_9 Q^2 T_{NQ}) + T (\rho_9 Q^2 - \rho_{11} L^2)]. \quad (14)$$

В полях $H_x > H_{xc}$ имеем

$$F_x = \frac{1}{2\delta_1} (H_x + \alpha_{13} Q_x). \quad (15)$$

Отсюда следует, что при индуцированном упорядочении подсистемы атомов 2 должен возникнуть скачок намагниченности.

Нетрудно заметить, что при $H \parallel OX$ возможна также и смена основного состояния L_z на L_y , L_x на L_y , которые также сопровождаются скачками намагниченности.

Если $H \parallel OY$, то возможны индуцирование состояния Q_y и смена основного состояния L_z на L_x и L_y на L_x , причем все эти переходы сопровождаются скачками намагниченности.

Нетрудно заметить, что в общем случае рассмотренные выше структуры должны быть неколлинеарными. В частности, как следует из вида потенциала (9), к состояниям F_x , F_y могут примешиваться компоненты L_y и L_x соответственно, т.е. при доминирующем ферромагнетизме может появиться слабый антиферромагнетизм. Аналогично при основной моде L может появиться слабый ферромагнетизм, так как среди инвариантов имеются произведения $L_x F_y$ и $L_y F_x$. Интересной возможностью является также наведенные ферро- или антиферромагнетизм в системе атомов 1 и 3 от подсистемы атомов 2 благодаря наличию инвариантов $Q_y L_x$, $Q_x L_y$, $Q_z F_z$, $Q_y F_y$, $Q_x F_x$.

3. Несоразмерные структуры

В работе [19] на примере соединения Cr_2BeO_4 показано, что несоразмерные структуры возникают благодаря наличию составленных из производных первого порядка инвариантов. В [12] указано, что часть линейной по первым производным обменной энергии в случае $k_{16} = 0$ имеет вид

$$E_1 = \Delta_f \left(\mathbf{L}_1 \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} - \mathbf{F} \frac{\partial \mathbf{L}_1}{\partial x} + \mathbf{L}_2 \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} - \mathbf{F} \frac{\partial \mathbf{L}_2}{\partial y} \right) + \\ + \Delta_g \left(\mathbf{l}_1 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} - \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{l}_1}{\partial x} + \mathbf{l}_2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial y} - \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{l}_2}{\partial y} \right) + \Delta_{fg} \left(\mathbf{L}_1 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} - \mathbf{F} \frac{\partial \mathbf{l}_1}{\partial x} + \mathbf{L}_2 \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial y} - \mathbf{F} \frac{\partial \mathbf{l}_2}{\partial y} \right) + \\ + \Delta_{gf} \left(\mathbf{l}_1 \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} - \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{L}_1}{\partial x} + \mathbf{l}_2 \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} - \mathbf{f} \frac{\partial \mathbf{L}_2}{\partial y} \right) + \Delta_{f1} \left[\frac{\partial \mathbf{L}_1}{\partial x} \right]^2 + \Delta_{g1} \left[\frac{\partial \mathbf{l}_1}{\partial x} \right]^2, \quad (16)$$

где

$$\mathbf{F} = \mathbf{s}_{1f} + \mathbf{s}_{2f} + \mathbf{s}_{3f}, \quad \mathbf{f} = \mathbf{s}_{1g} + \mathbf{s}_{2g} + \mathbf{s}_{3g}, \\ \mathbf{L}_1 = \mathbf{s}_{1f} + \mathbf{s}_{2f} - 2\mathbf{s}_{3f}, \quad \mathbf{l}_1 = \mathbf{s}_{1g} + \mathbf{s}_{2g} - 2\mathbf{s}_{3g}, \\ \mathbf{L}_2 = \sqrt{3}(\mathbf{s}_{1f} - \mathbf{s}_{2f}), \quad \mathbf{l}_2 = \sqrt{3}(\mathbf{s}_{1g} - \mathbf{s}_{2g}), \quad (17)$$

где \mathbf{F} , \mathbf{f} — векторы ферромагнетизма; \mathbf{L}_1 , \mathbf{L}_2 , \mathbf{l}_1 , \mathbf{l}_2 — векторы антиферромагнетизма. Покажем, как отмечалось в [12], что при определенных условиях в системе должна возникнуть несоразмерная структура с вектором распространения \mathbf{q} в базисной плоскости ($\mathbf{q} \perp z$). Пусть соотношение между параметрами квадратичной по операторам (17) части обменной энергии таково, что реализуется АФМ-ФИМ структура [12]. Тогда $\mathbf{L}_2 = \mathbf{l}_2 = 0$ [12]. Решение задачи будем искать по аналогии с [19] в виде двойной гармонической циклоидальной структуры

$$F_x = F \cos(q_1 x), \quad L_x = L \cos(q_2 x), \\ F_y = F \sin(q_1 x), \quad L_y = L \sin(q_2 x), \\ f_x = f \cos(q_2 x - \varphi_2), \quad l_x = l \cos(q_1 x - \varphi_1), \\ f_y = f \sin(q_2 x - \varphi_2), \quad l_y = l \sin(q_1 x - \varphi_1). \quad (18)$$

Подставляя эти решения в (16), а также в выражение для квадратичной части обменной энергии [12]

$$E_{0ex} = 0.5\delta_F \mathbf{F}^2 + 0.5\delta_f \mathbf{f}^2 + \delta_{Ff} \mathbf{F}\mathbf{f} + 0.5\delta_L (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2) + \\ + 0.5\delta_l (\mathbf{l}_1^2 + \mathbf{l}_2^2) + \delta_{Ll} (\mathbf{L}_1 \mathbf{l}_1 + \mathbf{L}_2 \mathbf{l}_2), \quad (19)$$

получим, что энергия системы $E = E(\mathbf{F}, \mathbf{f}, \mathbf{L}, \mathbf{l}, q_1, q_2, \varphi_1, \varphi_2)$.

Минимизируя последнюю по этим параметрам, получаем систему из восьми уравнений, которая распадается на две подсистемы. Первая зависит от переменных \mathbf{F} , \mathbf{l} , q_1 , φ_1 , а вторая — от переменных \mathbf{f} , \mathbf{L} , q_2 , φ_2 . По своей структуре эти системы идентичны. Решая их, легко показать, что $\varphi_1 = \pi/2$, если $\Delta_{fg} < 0$, и $\varphi_1 = 3\pi/2$ при $\Delta_{fg} > 0$. Аналогично $\varphi_2 = \pi/2$ и

$\varphi_2 = 3\pi/2$ при $\Delta_{gf} < 0$ и $\Delta_{gf} > 0$ соответственно. Условиями существования сверхструктур является

$$q_1^2 = \frac{\delta_F \delta_l}{2(\Delta_{fg}^2 - \delta_F \Delta_{gf})} > 0,$$

$$q_2^2 = \frac{\delta_f \delta_L}{2(\Delta_{gf}^2 - \delta_f \Delta_{fg})} > 0. \quad (20)$$

Необходимо отметить, что в данном случае в образовании сверхструктуры участвуют все слои.

Рассмотрим несоразмерные структуры при $\mathbf{k} \neq 0$. В этом случае соответствующая часть обменной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} E_2 = & \Delta_{f1} \left[\frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial z} \right]^2 + \Delta_{f2} \left[\frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial z} \right]^2 + \Delta_{g1} \left[\frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial z} \right]^2 + \Delta_{g2} \left[\frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial z} \right]^2 + \\ & + \Delta_{f3} \left[\frac{\partial \mathbf{L}_f}{\partial y} \right]^2 + \Delta_{g3} \left[\frac{\partial \mathbf{L}_g}{\partial y} \right]^2 + \\ & + \Delta_{f4} \left[\mathbf{Q}_f \frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial z} - \mathbf{F}_f \frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial z} \right] + \Delta_{g4} \left[\mathbf{Q}_g \frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial z} - \mathbf{F}_g \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial z} \right] + \\ & + \Delta_{f5} \left[\mathbf{F}_f \frac{\partial \mathbf{L}_f}{\partial y} - \mathbf{L}_f \frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial y} \right] + \Delta_{g5} \left[\mathbf{F}_g \frac{\partial \mathbf{L}_g}{\partial y} - \mathbf{L}_g \frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial y} \right] + \\ & + \Delta_{f6} \left[\mathbf{Q}_f \frac{\partial \mathbf{L}_f}{\partial y} - \mathbf{L}_f \frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial y} \right] + \Delta_{g6} \left[\mathbf{Q}_g \frac{\partial \mathbf{L}_g}{\partial y} - \mathbf{L}_g \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial y} \right] + \\ & + \Delta_{gf1} \left[\mathbf{F}_f \frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial z} - \mathbf{F}_g \frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial z} \right] + \Delta_{gf2} \left[\mathbf{Q}_f \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial z} - \mathbf{Q}_g \frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial z} \right] + \\ & + \Delta_{gf3} \left[\mathbf{F}_f \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial z} - \mathbf{Q}_g \frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial z} \right] + \Delta_{gf4} \left[\mathbf{F}_g \frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial z} - \mathbf{Q}_f \frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial z} \right] + \\ & + \Delta_{gf5} \left[\mathbf{F}_f \frac{\partial \mathbf{L}_g}{\partial y} - \mathbf{L}_g \frac{\partial \mathbf{F}_f}{\partial y} \right] + \Delta_{gf6} \left[\mathbf{Q}_f \frac{\partial \mathbf{L}_g}{\partial y} - \mathbf{L}_g \frac{\partial \mathbf{Q}_f}{\partial y} \right] + \\ & + \Delta_{gf7} \left[\mathbf{L}_f \frac{\partial \mathbf{F}_g}{\partial y} - \mathbf{F}_g \frac{\partial \mathbf{L}_f}{\partial y} \right] + \Delta_{gf8} \left[\mathbf{L}_f \frac{\partial \mathbf{Q}_g}{\partial y} - \mathbf{Q}_g \frac{\partial \mathbf{L}_f}{\partial y} \right]. \quad (21) \end{aligned}$$

Как видно из (21), двойную циклоидальную структуру могут образовывать векторы одной подрешетки. Такой случай реализуется, если отличны от нуля коэффициенты $\Delta_{f1}, \Delta_{f2}, \Delta_{g1}, \Delta_{g2}, \Delta_{f3}, \Delta_{g3}, \Delta_{f4}, \Delta_{g4}$. Решение задачи ищем в виде

$$\begin{aligned} F_x &= F \sin(qz), & Q_x &= Q \sin(qz - \varphi), \\ F_y &= F \cos(qz), & Q_z &= Q \cos(qz - \varphi). \end{aligned}$$

Минимизируя энергию системы, получаем $\varphi = \pi/2$ при $\Delta_{f4} < 0$ и $\varphi = 3\pi/2$, если $\Delta_{f4} > 0$. Условием возникновения сверхструктуры является соотношение

$$q^2 = \frac{\Delta_{f4} - \delta_1 \Delta_{f2}}{\Delta_{f1} \Delta_{f2}} > 0. \quad (22)$$

Аналогичные условия существования имеют сверхструктуры, образованные векторами $(\mathbf{Q}_f \mathbf{L}_f)$, $(\mathbf{Q}_g \mathbf{L}_g)$, $(\mathbf{F}_f \mathbf{Q}_g)$, $(\mathbf{F}_g \mathbf{Q}_f)$. Если отличны от нуля коэффициенты Δ_{f1} , Δ_{g1} , Δ_{gf1} , то в сверхструктуру, образованную векторами $(\mathbf{F}_f \mathbf{F}_g)$ входит каждый слой. Рассмотрение условий существования аналогично проведенному в [19]. Если же существенными являются коэффициенты Δ_{g2} , Δ_{f2} , Δ_{gf2} , то сверхструктура существует при выполнении соотношения

$$q^2 = \frac{\Delta_{gf2}^2}{\Delta_{f2} \Delta_{g2}} > 0. \quad (23)$$

Автор благодарит Л.И.Медведеву за плодотворное обсуждение результатов данной работы.

Список литературы

- [1] Fujii H., Hokabe T., Kamigach T. et al. // J. Phys. Soc. Jap. 1977. V. 43. N 1. P. 41-46.
- [2] Wappling R., Haggstrom L., Erricsson T. // J. Sol. St. Chem. 1975. V. 13. N 1. P. 258-271.
- [3] Lundgren L., Tormohamed G., Beckman O. et al. // Phys. Scrs. 1978. V. 17. N 1. P. 38-48.
- [4] Kadomatzu H., Isoda M., Tohma K. et al. // J. Phys. Soc. Jap. 1985. V. 54. N 7. P. 2690-2699.
- [5] Медведева Л.И. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 12. С. 3682-3684.
- [6] Zavadskii E.A., Medvedeva L.I., Filippov A.E. // J. Magn. and Magn. Mater. 1984. V. 43. N 1. P. 54-58.
- [7] Zvada S.S., Medvedeva L.I., Sivachenko A.P., Khartsev S.I. // J. Magn. and Magn. Mater. 1988. V. 72. N 3. P. 349-356.
- [8] Fujii H., Uwatoko I., Motoya K. et al. // J. Phys. Soc. Jap. 1988. V. 57. N 6. P. 2143-2156.
- [9] Eriksson O., Sjostrom J., Johansson B. // J. Magn. and Magn. Mater. 1988. V. 74. N 2. P. 347-358.
- [10] Медведева Л.И., Харцев С.И. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 78-83.
- [11] Khartsev S.I., Medvedeva L.I., Zavadskii E.A. // J. Magn. and Magn. Mater. 1992. V. 111. N 1. P. 189-198.
- [12] Yablonsky D.A., Medvedeva L.I. // Physica B. 1990. V. 167. P. 125-132.
- [13] Goodenough J.B. // J. Solid State Chem. 1973. V. 7. N 1. P. 428-447.
- [14] Барьяхтар В.Г., Яблонский Д.А. // ФНТ. 1980. Т. 6. № 3. С. 345-357.
- [15] Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 367 с.
- [16] Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. Т. 2. М.: Атомиздат, 1981. 311 с.
- [17] Яблонский Д.А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 1(7). С. 365-376.
- [18] Fujii H., Komura S., Takeda T. et al. // J. Phys. Soc. Jap. 1979. V. 46. N 5. P. 1616-1621.
- [19] Барьяхтар В.Г., Стефановский Е.П., Яблонский Д.А. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 42. № 6. С. 257-260.

Донецкий физико-технический институт
АН Украины

Поступило в Редакцию
5 января 1993 г.