

УДК 538.1:548

©1994

НЕСОИЗМЕРИМЫЕ МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ В СЛУЧАЕ ДВУХ СИСТЕМ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ПОЗИЦИЙ

O.B. Ковалев

Путем минимизации общего вида термодинамического потенциала в обменном приближении установлены возможные виды несоизмеримых магнитных структур в кристалле с двумя системами позиций для магнитных атомов. В каждой системе магнитная плотность разлагается по базисам одномерных малых неприводимых копредставлений.

В теоретических исследованиях несоизмеримых магнитных структур имеется в виду несоизмеримость, связанная с некоторым одним несимметричным вектором \mathbf{k} из зоны Бриллюэна, причем независимо от того, какие инвариантные комбинации (ИК) используются: ИК без производных для вектора \mathbf{k} или ИК с производными, записанные для симметричного вектора. Указанное ограничение предопределяет результат: компоненты магнитных моментов атомов изменяются по закону

$$m(\alpha p) \sim m_{\alpha p} \sin(\mathbf{k}\mathbf{a} + \varphi_{\alpha p}),$$

где p — номер позиции в ячейке, $\alpha = x, y, z$.

Обычно обсуждается случай, когда магнитные атомы заполняют одну систему эквивалентных позиций. Однако интерес представляют и кристаллы, в которых такие атомы располагаются в двух или более системах позиций, тем более что иногда магнитному упорядочению предшествует фазовый переход, в результате которого ранее эквивалентные атомы превращаются в неэквивалентные. Ниже мы найдем все несоизмеримые магнитные структуры при наличии двух систем эквивалентных позиций, причем возможные не в силу просто геометрических соображений, а в смысле соответствия минимуму термодинамического потенциала. Последний считается произвольной (по непрерывной) функцией ИК, в результате чего, с одной стороны, симметрия учитывается исчерпывающим образом, а с другой — рассмотрение оказывается достаточно общим. Принимаются следующие ограничения: 1) используется упомянутый принцип одного вектора \mathbf{k} ; 2) учитывается только обменное взаимодействие, причем в предложенной в работе [1] форме; 3) малое неприводимое копредставление (НКП) (из соответствующего перестановочного копредставления), по базисным векторам которого разлагается магнитная плотность, предполагается одномерным; следовательно, относящимся к типу a . О последнем условии ниже сказано подробнее.

1. Магнитная плотность, локализованная на атомах некоторой системы эквивалентных позиций, записывается в виде разложений по локальным функциям и по базисным векторам НПК

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum m(\alpha p\mathbf{a}) \mathbf{e}_\alpha \varphi(p\mathbf{a}) = \sum \mu(\alpha Fjik) \mathbf{e}_\alpha \varphi(Fjik). \quad (1)$$

Предполагается, что функция $\varphi(p\mathbf{a})$ в достаточной мере локализована в позиции $(p\mathbf{a})$ и преобразуется по единичному представлению локальной группы этой позиции; $\varphi(Fjik)$ — базисный вектор перестановочного копредставления P , принадлежащий НПК D^{F^j} , где F — сорт эквивалентности (номер НПК в полном списке неэквивалентных НПК соответствующей группы); j — нумерует эквивалентные НПК сорта F , содержащиеся в P ; i — номер базисного вектора малого НПК $d^{F^j}(\mathbf{k})$. Разумеется, всюду речь идет о копредставлениях группы $G + KG$, где G — федоровская группа кристалла в парамагнитной фазе, K — оператор комплексного сопряжения, вводимый с целью учета вещественности координат $m(\alpha p\mathbf{a})$ и не имеющий никакого отношения к операции обращения времени.

Как обычно, считается, что магнитная плотность, возникающая вследствие фазового перехода кристалла из парамагнитного состояния, представлена координатами $\mu(Fjik)$, относящимися к некоторому одному сорту F ; остальные координаты равны нулю. Мы рассмотрим случай, когда НПК D^{F^j} входят по одному разу в перестановочные копредставления как для первой, так и для второй систем позиций. Имея в виду некоторые определенные сорт F и вектор \mathbf{k} , а также одномерность НПК d^{F^j} , приведенную справа в (1) сумму запишем для первой и второй систем в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1(\mathbf{r}) &= \sum \mu(\alpha 1) \mathbf{e}_\alpha \varphi(1\mathbf{k}) + \text{с.с.}, \\ \mathbf{M}_2(\mathbf{r}) &= \sum \mu(\alpha 2) \mathbf{e}_\alpha \varphi(2\mathbf{k}) + \text{с.с.} \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь опущены индексы F и i , индекс j отнесен к системам позиций. В (2) суммирование производится лишь по α . Предполагаемое в (1) общее суммирование по \mathbf{k} при сделанных предположениях свелось к тому, что в разложениях (2) имеются лишь слагаемые с базисными векторами $\varphi(j\mathbf{k})$ и $\varphi(j, -\mathbf{k}) = K\varphi(j\mathbf{k})$.

Заметим, наконец, что далее используются результаты работы [1], в частности формулы (2), (3), (7), (16)–(19), а также некоторые сведения из книги [2].

2. Координаты μ определяются при минимизации обменной части Φ термодинамического потенциала. Поскольку $\mu(\alpha 1)$ и $\mu(\alpha 2)$ комплексны, мы считаем их компонентами комплексных векторов \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_2 . Потенциал Φ является функцией ИК, причем инвариантных, во-первых, относительно группы $G + KG$ и, во-вторых, инвариантных относительно любых поворотов магнитных моментов всех атомов. Другими словами, в ИК должны входить лишь скалярные произведения векторов \mathbf{M}_j и \mathbf{M}_j^* , ИК должны быть вещественными и не должны меняться под действием элементов группы G . ИК второго порядка суть

$$f_1 = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_1^* = R_1^2 + J_1^2, \quad f_2 = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_2^* = R_2^2 + J_2^2,$$

$$f_3 = \frac{1}{2} (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2^* + \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^*) = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 + \mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2, \quad (3)$$

где

$$\mathbf{M}_j = \mathbf{R}_j + i\mathbf{J}_j,$$

\mathbf{R} и \mathbf{J} — вещественные векторы.

Магнитная структура в обменном приближении определяется величиной и взаимной ориентацией векторов \mathbf{R} , \mathbf{J} , т.е. девятью величинами. Считая, что Φ зависит от этих величин через ИК, мы должны принять, что Φ является функцией некоторой совокупности ИК, в которой имеется девять ИК, не зависимых друг от друга функционально. В связи с этим вводим еще ИК четвертого порядка

$$\begin{aligned} f_4 &= -\frac{1}{4} (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2^* - \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^*) = (\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_2 - \mathbf{R}_2 \mathbf{J}_1)^2, \\ f_5 &= \mathbf{M}_1^2 \mathbf{M}_1^{*2} = (R_1^2 - J_1^2)^2 - 4(\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_1)^2, \\ f_6 &= \mathbf{M}_2^2 \mathbf{M}_2^{*2}, \\ f_7 &= \frac{1}{4} [\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2 (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2)^* - (\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1^*)(\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2^*)] = \\ &= (\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_2)(\mathbf{R}_2 \mathbf{J}_1) - (\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2)(\mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2), \\ f_8 &= \mathbf{M}_1^2 \mathbf{M}_2^{*2} + \text{c.c.} = (R_1^2 - J_1^2)(R_2^2 - J_2^2) + 4(\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_1)(\mathbf{R}_2 \mathbf{J}_2), \\ f_9 &= \frac{1}{2} [\mathbf{M}_1^2 (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2)^* + \text{c.c.}] = \\ &= (R_1^2 - J_1^2)(\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 - \mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2) + 2(\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_1)(\mathbf{R}_1 \mathbf{J}_2 + \mathbf{R}_2 \mathbf{J}_1), \\ f_{10} &= \frac{1}{2} [\mathbf{M}_2^2 (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2)^* + \text{c.c.}] . \end{aligned} \quad (4)$$

Опущены ИК, выражающиеся через f_1, f_2, f_3 .

Мы предположим, что среди величин f_1-f_{10} имеется девять функционально независимых и что, следовательно, эти десять величин связаны некоторым функциональным соотношением. Оно настолько сложно, что воспользоваться им практически невозможно. В рассматриваемой далее задаче мы будем считать все десять величин f_1-f_{10} функционально независимыми. Возможность этого упрощения в какой-то мере подтверждается тем обстоятельством, что, решая ту же задачу с исключением какой-либо из ИК четвертого порядка, автор получал те же результаты, что и в случае, когда все десять ИК считаются независимыми. Итак, далее величины f_1-f_{10} полагаются взаимно независимыми и обеспечивающими зависимость Φ от векторов \mathbf{R}, \mathbf{J} .

Векторы \mathbf{R}, \mathbf{J} запишем в сферической системе координат

$$\mathbf{R}_1(0, 0, R_1), \quad \mathbf{R}_2(R_2 \sin \theta_1, 0, R_2 \cos \theta_1),$$

$$\mathbf{J}_1(J_1 \sin \theta_2 \cos \varphi_2, J_1 \sin \theta_2 \sin \varphi_2, J_1 \cos \theta_2),$$

для J_2 — углы θ_3, φ_3 . Оси системы не ориентируются специальным образом относительно кристалла. Далее имеется в виду, что ИК выражены через введенные координаты.

3. Решить задачу по минимизации Φ невозможно даже в случае, если бы мы разложили ИК и ограничились ИК четвертого порядка. Приняв, что Φ — произвольная функция, мы будем минимизировать с целью получить лишь стабильные решения, находимые на основе следующих физических соображений.

Уравнения, соответствующие производным по длинам R_1, R_2, J_1, J_2 (радиальные уравнения) и углам (угловые уравнения), запишем в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi}{\partial m} &= \sum F_i \frac{\partial f_i}{\partial m} = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} &= \sum F_i \frac{\partial f_i}{\partial \gamma} = 0, \\ F_i &= \frac{\partial \Phi}{\partial f_i},\end{aligned}\tag{5}$$

где

$$m = R_1, R_2, J_1, J_2, \quad \gamma = \theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_2, \varphi_3.$$

Величины F_i являются функциями переменных f_i , а также температуры, давления, примесей и т.п. Производные f_i по m и γ суть полиномы от синусов и косинусов углов γ . Их и сами уравнения (5) в конкретном виде выписывать на будем, но поясним ход рассуждений. Левые части уравнений (5) переписываем в виде суммы слагаемых, каждое из которых состоит из двух множителей. Один множитель — линейная комбинация величин F_i с коэффициентами, содержащими R и J ; в ней не входят углы γ . Второй множитель — некоторое выражение, содержащее $\sin \gamma$ и $\cos \gamma$, но не содержащее F_i и R, J . Условно, вместо (5) получим систему

$$\sum F^j(F_i, m) \Gamma^j(\gamma) = 0.\tag{6}$$

Эту систему явно не выписываем, но именно из ее конкретного вида далее получаем результаты.

Решения системы (6) разобьем на стабильные и переходные. Первые соответствуют магнитным структурам, качественно не изменяющимся при изменении численных значений величин F_i . Для этих решений R и J зависят от F_i , но углы γ не зависят от F_i . Каждое стабильное решение, отвечающее определенной взаимной ориентации векторов R_j и J_j , имеет место для заметных на эксперименте интервалов внешних параметров. По существу соответствующие структуры наблюдаются на эксперименте.

Любые другие решения, т.е. решения, в которых углы γ существенно зависят от F_i , назовем переходными. Соответствующие структуры сильно зависят от внешних параметров: они либо являются промежуточными между стабильными, либо реализуются в столь малых интервалах внешних параметров, что практически не наблюдаются.

Ниже ищем только стабильные решения следующим образом: выясняем все варианты значений углов, при которых система (6) сводится к непротиворечивой системе уравнений для радиальных величин

R, J. Для пояснения несколько конкретизируем систему (6), а именно выпишем в урезанном виде уравнения, соответствующие производным функции Φ последовательно по $R_1, R_2, J_1, J_2, \theta_1, \theta_2, \theta_3, \varphi_2, \varphi_3$

$$2R_1 [F_1 + 2F_5 (R_1^2 - J_1^2) + F_8 (R_2^2 - J_2^2)] + \dots = 0, \quad (7)$$

$$2R_2 [F_2 + 2F_6 (R_2^2 - J_2^2) + F_8 (R_1^2 - J_1^2)] + \dots = 0, \quad (8)$$

$$2J_1 [F_1 - 2F_5 (R_1^2 - J_1^2) - F_8 (R_2^2 - J_2^2)] + \dots = 0, \quad (9)$$

$$2J_2 [F_2 - 2F_6 (R_2^2 - J_2^2) - F_8 (R_1^2 - J_1^2)] + \dots = 0, \quad (10)$$

$$[F_3 + F_9 (R_1^2 - J_1^2)] R_1 R_2 \sin \theta_1 + \dots = 0, \quad (11)$$

$$F_{39} J_1 J_2 (\cos \theta_2 \sin \theta_3 \cos \psi - \sin \theta_2 \cos \theta_3) + \dots = 0, \quad (12)$$

$$F_{39} J_1 J_2 (\sin \theta_2 \cos \theta_3 \cos \psi - \cos \theta_2 \sin \theta_3) + \dots = 0, \quad (13)$$

$$F_{39} J_1 J_2 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \sin \psi + \dots = 0, \quad (14)$$

$$F_{39} J_1 J_2 \sin \theta_2 \sin \theta_3 \cos \psi + \dots = 0, \quad (15)$$

$$\psi = \varphi_3 - \varphi_2, \quad F_{39} = F_3 - F_9 (R_1^2 - J_1^2).$$

Здесь в каждом уравнении явно выписано одно слагаемое. В уравнениях (7)–(10) невыписанные слагаемые содержат множители $\Gamma(\gamma)$, в уравнениях (11)–(15) все невыписанные слагаемые содержат четвертые степени переменных R, J и все имеют множители $\Gamma(\gamma)$.

Приведем примеры. Оказывается, что при $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0$ и произвольных φ_2 и φ_3 левые части уравнений (11)–(15) обращаются в нуль, а левые части уравнений (7)–(10) содержат лишь переменные R_1, R_2, J_1, J_2 и, следовательно, образуют непротиворечивую систему. Это пример стабильного решения. Напротив, случай, когда все радиальные величины отличны от нуля и $\sin \theta_1 \neq 0$, не ведет к стабильному решению, так как при этом, как видно из системы (7)–(15), при любых значениях других углов четыре радиальные величины должны удовлетворять пяти уравнениям (7)–(11).

4. Ситуации, когда одна или несколько величин R, J равны нулю, требуют специального рассмотрения, поскольку при этом некоторые из уравнений (11)–(15) могут упроститься. Рассмотрим, например, важный случай: $R_1 = R \neq 0, J_1 = J \neq 0, R_2 = J_2 = 0$ (ему эквивалентен вариант $R_2 \neq 0, J_2 \neq 0, R_1 = J_1 = 0$). Как можно проверить, уравнения (11), (13)–(15) удовлетворяются автоматически, уравнение (12) превращается в уравнение $F_5 \sin 2\theta_2 = 0$, ведущее к трем возможным направлениям: 1) $F_5 = 0$, 2) $\sin \theta_2 = 0$, 3) $\cos \theta_2 = 0$. В частности, последнее условие приводит, например, к решению

$$\cos \theta_1 = \sin \theta_3 = \cos \theta_2 = 0, (0, 0, R), \quad (R \cos \varphi_2, R \sin \varphi_2, 0), \quad R_2 = J_2 = 0,$$

величина R определяется из уравнения $F_1 = 0$. Но описанное выше решение и все решения, полученные при использовании всех трех направлений, обладают тем странным свойством, что они содержат условия

для углов, характеризующих равные нулю векторы \mathbf{R}_2 и \mathbf{J}_2 . Для прояснения вопроса мы заменим уравнения (7)–(15) уравнениями, возникающими в том случае, когда приравниваются нулю не производные по углам, а компоненты градиентов в сферической системе координат. Оказалось, что возникающие уравнения не имеют решений при $R_2 = J_2 = 0$. Не имеют решений и уравнения в том случае, когда используются обычные декартовы координаты. На этих основаниях автор заключает: случай, когда отличны от нуля магнитные моменты атомов только одной из двух систем эквивалентных позиций, в действительности не реализуется (это заключение, разумеется, относится лишь к рассматриваемому в работе случаю). Отметим, что противоположное утверждение содержится в работе [3], основывающейся на модели с инвариантами Лифшица–Дзялошинского.

5. Описанный выше подход приводит к следующим угловым решениям ($-\infty < a_i, b_i < \infty$):

L. Коллинеарная структура, $\theta_{1,2,3} = 0$ или π ,

$$\mathbf{R}_1(0, 0, a_1), \quad \mathbf{R}_2(0, 0, a_2), \quad \mathbf{J}_1(0, 0, b_1), \quad \mathbf{J}_2(0, 0, b_2).$$

P. Компланарная структура, $\theta_1 = 0$ или π , $2\theta_{2,3} = \pi$,

$$\mathbf{R}_1(0, 0, a_1), \quad \mathbf{R}_2(0, 0, a_2), \quad \mathbf{J}_1(b_1 \cos \varphi, b_1 \sin \varphi, 0),$$

$$\mathbf{J}_2(b_2 \cos \varphi, b_2 \sin \varphi, 0).$$

L'. Коллинарная структура, $\theta_2 = 0$ или π ,

$$\mathbf{R}_1(0, 0, a_1), \quad \mathbf{R}_2(0, 0, a_2), \quad J_1 = J_2 = 0.$$

L''. Коллинарная структура,

$$R_1 = R_2 = 0,$$

$$\mathbf{J}_1(b_1 \sin \theta \cos \varphi, b_1 \sin \theta \sin \varphi, b_1 \cos \theta),$$

$$\mathbf{J}_2(b_2 \sin \theta \sin \varphi, b_2 \sin \theta \cos \varphi, b_2 \cos \theta).$$

Любые другие структуры невозможны. Это утверждение — главный результат.

Полученные решения можно уточнить, обратившись к соответствующим радиальным уравнениям.

Рассмотрим ИК для решения *L*. Как можно показать, при этом

$$f_3 = a_1 a_2 + b_1 b_2, \quad f_4 = f_1 f_2 - f_3^2, \quad f_5 = f_1^2, \quad f_6 = f_2^2,$$

$$f_7 = 0, \quad f_8 = f_3^2 - f_4, \quad f_9 = f_1 f_3, \quad f_{10} = f_2 f_3,$$

так что Φ является функцией только ИК f_1 , f_2 и f_3 . Положим

$$a_1 + i b_1 = \rho_1 \exp i \chi_1, \quad a_2 + i b_2 = \rho_2 \exp i \chi_2.$$

Поскольку $f_3 = \rho_1 \rho_2 \cos(\chi_2 - \chi_1)$, функция Φ зависит только от разности $\chi = \chi_2 - \chi_1$. В частности, при минимизации получаем систему

$$2F'_1 \rho_1 + F'_3 \rho_2 \cos \chi = 2F'_2 \rho_2 + F'_3 \rho_1 \cos \chi = -F'_3 \rho_1 \rho_2 \sin \chi = 0 \quad (16)$$

уравнений. Знак штрих означает, что функция Φ записывается как зависящая только от f_1 , f_2 и f_3 . Поскольку, как мы уже знаем, случай $\rho_i = 0$ невозможен, учитываем два решения

$$L_1. \quad \cdot \sin \chi = 0,$$

$$L_2. \quad F'_1 = F'_3 = F'_2 = 0.$$

Решение L_1 ведет к равенству $a_1 b_2 = a_2 b_1$. Оно означает определенное значение разности $\Delta\varphi = \varphi_{1p} - \varphi_{2p'}$ фаз, фигурирующих в выражениях для магнитных моментов атомов

$$m(zpa)_j \sim \sin(ka + \varphi_{jp}).$$

Разность $\Delta\varphi$ не зависит от значений a_i и b_i .

Автор не имеет соображений относительно возможности существования решения L_2 . Отметим лишь, что теперь разность $\Delta\varphi$ зависит от значений a_i и b_i .

При рассмотрении компланарной структуры положим $\varphi = 0$, что не уменьшает общности, и, как и выше, введем переменные ρ и χ . Угловые уравнения приводят к двум сериям решений.

$$1. \quad 4\chi_1 = 4\chi_2 = \pm\pi, \pm 3\pi,$$

$$2. \quad 4\chi_1 = 4\chi_2 - 4\pi = \pm\pi, \pm 3\pi.$$

Все они соответствуют вращениям магнитных моментов атомов в обеих системах эквивалентных позиций. Длины моментов не меняются (нет эллиптичности). Поскольку оси используемой сферической системы координат выбраны произвольно, в рассматриваемом обменном приближении ось вращения магнитных моментов не ориентируется каким-либо образом относительно вектора k , т.е. относительно кристалла. Таким образом, в рамках обменного приближения оказываются равноправными в энергетическом смысле круговая спираль, циклоидальная спираль и т.п. Ориентацию обеспечивает необменная энергия.

Кроме указанных серий решений, для компланарной структуры имеют место, например, решения при $\chi_1 = \chi_2 = 0, \pi/2, \pi$. Они сводятся к структурам L' и L'' . Выяснение условий, при которых реализуются те или иные структуры, целесообразно делать применительно к конкретному кристаллу и модельной функции Φ .

6. Хотя для получения стабильных структур следует минимизировать термодинамический потенциал, некоторые качественные результаты можно получить из вида магнитной энергии E . Предположим, что

$$E = F_1 f_1 + F_2 f_2 + F_3 f_3,$$

где f_i имеют прежний смысл, а F_i — функции лишь вектора k . Численно новые F_i близки к значениям старых. Энергия E — квадратичная эрмитова форма комплексных декартовых координат $M_{1\alpha}$ и $M_{2\alpha}$ и как таковая может быть приведена к сумме квадратов

$$E = F_1^0 f'_1 + F_2^0 f'_2.$$

Здесь f'_i — сумма квадратов смешанных координат $a_{1j}M_{1\alpha} + a_{2j}M_{2\alpha}$. Чем больше $|F_3|$, тем больше степень смешивания, смешивание отсутствует лишь при $F_3 = 0$. Так как $F_3 \neq 0$ при $k \neq 0$, то мы приходим к выводу п.4 о том, что невозможна реализация магнитной плотности только в одной системе позиций.

Величины F_1 , F_2 , F_1^0 и F_2^0 можно условно назвать уровнями магнитной энергии и построить графики их зависимости от k , положив для простоты $k(0, 0, k)$. Для определенности будем считать, что при k , близких к нулю, $F_1 < F_2$ и что благодаря взаимодействию $F_3 f_3$ уровень F_1 преобразуется в F_1^0 , а F_2 — в F_2^0 . Смещение $\Delta \bar{E}(k) = F_1^0 - F_1 < 0$ и по абсолютной величине тем больше, чем больше $|F_3|$. Пусть НПК d^1 в точке $k = 0$ совместно с НПК d_0^1 , а НПК d^2 — с НПК d_0^2 . Возможны два случая.

1) НПК d_0^1 и d_0^2 неэквивалентны. Тогда $F_3(k = 0) = 0$ (согласно (1), грубо $F_3 \sim \sin ka_3$ в предположении, что a_3 — основной период, параллельный вектору k). В точке $k = 0$ смешивание координат $M_{1\alpha}$ и $M_{2\alpha}$ отсутствует, а $\Delta \bar{E}(k = 0) = 0$. Однако степень смешивания и $|\Delta \bar{E}(k)|$ возрастают с ростом k и, главное, может случиться так, что коэффициент F_1^0 будет иметь минимум при некотором значении $k = \kappa \neq 0$, хотя коэффициент F_1 минимален при $k = 0$. Мы можем, таким образом, условно говорить о несоизмеримости, обусловленной взаимодействием уровней магнитной энергии.

2) НПК d_0^1 и d_0^2 эквивалентны. При этом $F_3(k = 0) \neq 0$ (грубо $F_3 \sim \cos ka_3$). Смещение $\Delta \bar{E}$ значительно уже при $k = 0$, и с ростом k величина $|\Delta \bar{E}|$ уменьшается. Тенденция к образованию несоизмеримой структуры отсутствует при k , близком к нулю.

При сформулированных в п.1) условиях существует ИК

$$\lambda(k)P(M_1 M_2^* - M_2 M_1^*),$$

где P — величина вектора электрической поляризации, параллельного вектору k . Выражение в скобках отлично от нуля для коллинеарной структуры и равно нулю для компланарной. Поэтому коллинеарной структуре должна сопутствовать электрическая поляризация.

Работа частично поддержана Фондом фундаментальных исследований ГКНТ Украины, грант 2/151.

Список литературы

- [1] Ковалев О.В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 8. С. 2381–2385.
- [2] Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления фёдоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.
- [3] Барьяхтар В.Г., Стефановский Е.П., Яблонский Д.А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 2. С. 505–510.

Харьковский физико-технический институт
ННЦ Украины

Поступило в Редакцию
6 января 1994 г.