

УДК 538.1:548

©1995

НЕСОИЗМЕРИМЫЕ МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛЕ С ДВУМЯ СИСТЕМАМИ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ ПОЗИЦИЙ Cr_2BeO_4

О.В.Ковалев

Харьковский физико-технический институт,
310108, Харьков, Украина
(Поступила в Редакцию 18 января 1995 г.
В окончательной редакции 24 апреля 1995 г.)

Показано, что для кристаллов с двумя системами эквивалентных позиций при определенной симметрии существуют большие области обменных параметров, которым соответствуют несоизмеримые структуры. Эти области исследованы для Cr_2BeO_4 .

1. Если в кристалле с двумя системами эквивалентных позиций магнитные плотности в каждой из систем разлагаются по базисам одномерных малых неприводимых копредставлений (НКП) d и d' из соответствующих перестановочных копредставлений P_1 и P_2 , то несоизмеримые структуры в рамках обменного приближения могут быть только двух видов: 1) круговые спирали в обеих системах (компланарная структура); 2) одинаково направленные коллинеарные структуры в обеих системах. Это было показано в [1] методом независимых инвариантных комбинаций (ИК). Там же было указано, что имеет место сильная тенденция к образованию несоизмеримости, если смешанная ИК обращается в нуль в точке $k = 0$. Для этого необходима совместность эквивалентных НКП d и d' с неэквивалентными НКП d_0 и d'_0 . Для образования несоизмеримой структуры нужно также, чтобы меньшее собственное значение λ , соответствующее нормальной скалярной координате, имело максимум при $k = 0$ и минимум при $k \neq 0$. Это возможно при определенных соотношениях констант обменного взаимодействия атомов. Выражение «сильная тенденция» означает, что требуемым соотношениям удовлетворяет большая область параметров.

Сформулированные выше симметричные условия выполняются в кристалле Cr_2BeO_4 для некоторых НКП. В этом кристалле экспериментально была установлена несоизмеримая магнитная структура: в каждой системе позиций имеет место антиферромагнитная спираль, что соответствует одной из указанных в [1] возможностей. В настоящей и следующей работах исследуются магнитные структуры, возможные в упомянутом кристалле. В них получено следующее. 1) Для всех НКП из P_1 и P_2 вычислены спиральные структуры с $k_7 = (k, 0, 0)$ и соответствующие области параметров; 2) показано, что особенности кристаллографической структуры (расположение атомов в немагнит-

ной фазе) ведут к реализации нормальных скалярных координат преимущественно симметрии $D^{F'}$ с $F' = 3$ или 4, тогда как реализация координат с $F' = 1$ или 2 возможна лишь в малой области обменных параметров; 3) показано, что появление несоизмеримой фазы — следствие указанного в [1] «взаимодействия» уровней магнитной энергии, здесь последнее пояснено примером; 4) теоретически обосновывается экспериментально установленное неравенство магнитных моментов (ММ) атомов в разных системах позиций; 5) предложен метод учета необменного взаимодействия для несоизмеримых структур, на его основе установлена ориентация плоскости поворотов ММ атомов, а также показано, что ориентация обуславливается индексом F' . Разумеется, необменное взаимодействие деформирует круговую спираль в эллиптическую.

Уделено внимание методике; используются терминология и положения работ [1-3].

Для обсуждаемого кристалла в [4-6] в качестве исходных были взяты известные экспериментальные данные о магнитной структуре с целью выразить шаг спирали через коэффициенты в феноменологической модели с инвариантами Лифшица [7]. По поводу этих работ заметим следующее. 1) Оправданно обсуждать вопрос о принципиальной возможности существования спирали. Но сколько-нибудь достоверно оценить ее шаг невозможно до тех пор, пока мы не установим физического смысла ИК четвертого порядка или хотя бы числовые значения коэффициентов при них. 2) В [4-6] не объяснены ориентация плоскости поворотов ММ атомов и неравенство ММ атомов в разных системах позиций. 3) Авторы ошибочно приходят, в частности, к структуре, в которой магнитная плотность отлична от нуля лишь в одной системе позиций. В действительности магнитная плотность в одной системе индуцирует плотность в другой. 4) Некорректен сам метод разложения в ряд около одной экстремальной точки с целью получить вторую экстремальную точку. Такой подход равносильен просто предположению о том, что вторая точка существует.

2. Приведем данные из [8]. Поскольку там используется установка $R\bar{b}m$, а ниже $G = D_{2h}^{16}K = R\bar{b}m\bar{b}$ из [3], данные из [8] мы преобразуем. К указанным в [8] координатам позиций и элементам группы применим преобразование $(-\tau_x/2, -\tau_y/2, 0/h_{25})$, соответствующим образом переименуем оси координат и т.п. Читатель может не вникать в эту процедуру просто воспользоваться списком основных элементов и всеми необходимыми сведениями из [3], а также рис. 1 и далее следующим перечнем координат позиций атомов хрома в нулевой ячейке.

Система 1:

$$1(\tau_x/2, \tau_y/2, 0), \quad 2(3\tau_x/2, \tau_y/2, 0), \quad 3(\tau_x/2, -\tau_y/2, \tau_z), \quad 4(3\tau_x/2, -\tau_y/2, \tau_z).$$

Система 2:

$$\begin{aligned} &5(\tau_x, \tau_y/2 - y, z), \quad 6(2\tau_x, \tau_y/2 + y, -z), \\ &7(2\tau_x, -\tau_y/2 + y, \tau_z + z), \quad 8(\tau_x, -\tau_y/2 - y, \tau_z - z). \\ &2\tau_x = 5.663, \quad 2\tau_y = 9.792, \quad 2\tau_z = 4.555, \\ &\tau_y/2 - y = -0.176, \quad \tau_y/2 + y = 5.072, \quad z = -0.022. \end{aligned}$$

Число перед скобкой — номер p -позиции. Длины даны в ангстремах. Номера позиций здесь и в [8] совпадают.

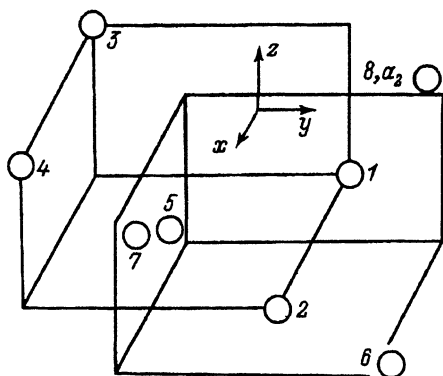


Рис. 1. Положения атомов хрома. Указаны их номера. Вместо позиции (8,0) изображена позиция (8, a_2).

Ниже температуры 28 К наблюдается магнитное упорядочение. ММ атома хрома в системе 1 равен $1.56\mu_B$, в системе 2 — $2.75\mu_B$. Соответственно восьми позициям в ячейке имеют место восемь циклоидальных ферромагнитных спиралей. В каждой спирали при трансляции вдоль оси X на один период ММ поворачиваются приблизительно на 30° в плоскости XZ. Поэтому $k = k_7$.

3. В этом разделе вычислим коэффициент при обменных ИК. ИК составлены из симметризованных магнитных координат, которые преобразуются согласно НКП группы $G + KG$, где K — оператор комплексного сопряжения. Начнем с теоретико-группового анализа.

Речь идет о неприводимых представлениях (НП) и НКП, содержащихся в соответствующих перестановочных представлениях P_1 и P_2 для первой и второй систем. С вектором k связаны четыре малых НП, каждое порождает малое НКП d типа a (табл. 1, $\nu = \exp(i\chi)$, $2\chi = k\tau_x$).

Соотношения совместимости следует записать отдельно для каждой системы позиций (табл. 2). Во второй строке записаны НП τ , в сумме составляющие в левой части таблицы копредставление P_1 , в правой — P_2 . В первой и третьей строках указаны совместные НП. НПТ двумерны. Некоторые НП кроме индекса F^j (сорт эквивалентности) содержат второй индекс j . Он нумерует НП одного сорта в сумме $P_1 + P_2$. Индекс $j = 1$ относится к первой системе позиций, $j = 2$ — ко второй.

Уже приведенные сведения позволяют сделать некоторые выводы. Напомним, что существуют только такие смешанные ИК, которые строятся из координат, преобразующихся согласно НКП с одинаковым индексом F^j . Поэтому магнитная энергия в обменном приближе-

Таблица 1
Малые НКП для $k = k_7$

	g_2	g_{27}	g_{28}	a_0
d^1	ν^{-2}	ν^{-2}	1	1
d^2	ν^{-2}	$-\nu^{-2}$	-1	1
d^3	$-\nu^{-2}$	ν^{-2}	-1	1
d^4	$-\nu^{-2}$	$-\nu^{-2}$	1	1

Соотношения совместности, привязанные к системам позиций

$k_0 = 0$	τ_0^{11}	τ_0^7	τ_0^{31}	τ_0^5	τ_0^{12}	τ_0^6	τ_0^{32}	τ_0^8
$k_7 = (k, 0, 0)$	τ^{11}	τ^{41}	τ^{21}	τ^{31}	τ^{12}	τ^{42}	τ^{22}	τ^{32}
$k_{20} = b_1/2$	$T^{21} = D^{21}$		$T^{11} = D^{11}$		$T^{22} = D^{22}$		$T^{12} = D^{12}$	

нии для некоторого значения F' имеет вид суммы $H = \Sigma H(F')$, где

$$H(F') = A(F')_{11}M(F'1)*M(F'1) + A(F')_{22}M(F'2)*M(F'2) + \\ + A(F')_{12} [M(F'1)*M(F'2) + M(F'1)M(F'2)*]. \quad (1)$$

$M(F'j)$ — невещественный вектор с компонентами $\mu(\alpha F'j; k) \equiv \mu(\alpha F'j)$ (формула (1) в [2]). Здесь и далее индекс i опущен, индекс k без необходимости не указывается.

Поскольку не существуют антисимметризованные квадраты НКП $D_0 = d_0$, то все коэффициенты $A(F')_{jj}$ как функции k в точке $k = 0$ экстремальны. Поведение коэффициентов $A(F')_{12}$ при $k \rightarrow 0$ зависит от индекса F' . Действительно, если $F' = 1$ или 2 , то $d^{F'1}$ и $d^{F'2}$ совместны с соответствующими $d_0^{F'1}$ и $d_0^{F'2}$, т.е. смешанная ИК сохраняется при $k = 0$. Следовательно, $A(F')_{12} \neq 0$ при $k = 0$. Напротив, d^{31} и d^{32} совместны с неэквивалентными d_0^5 и d_0^8 соответственно, смешанная ИК не существует, коэффициент $A(3)_{12}$ (а также $A(4)_{12}$) обращается в нуль в точке $k = 0$.

Обратимся к точке k_{20} . Можно установить, что 1) антисимметризованный квадрат НКП D^1 (и D^2) содержит только НКП d_0^4 из всех НКП, связанных с $k = 0$. По d_0^4 преобразуется координата X ; 2) из таблицы НКП d усматриваются соотношения $d'(k) = d^4(k \pm b_1)$ и $d^2(k) = d^3(k \pm b_1)$. Из этих результатов и четности уровней H как функций k следуют соотношения в точке k_{20}

$$\frac{\partial H(1)}{\partial k} = -\frac{\partial H(4)}{\partial k} \neq 0, \quad \frac{\partial H(2)}{\partial k} = -\frac{\partial H(3)}{\partial k} \neq 0$$

и равенства

$$H(1, k_{20} + k) = H(4, k_{20} - k), \quad H(2, k_{20} + k) = H(3, k_{20} - k),$$

$$H(1, k) = H(4, b_1 - k), \quad H(2, k) = H(3, b_1 - k).$$

Подобным равенствам удовлетворяют A_{jj} и $|A_{12}|$. Из сказанного, в частности, вытекает, что практически не осуществляется магнитное упорядочение, характеризуемое вектором k_{20} . Оно не соответствует минимуму энергии, обусловленному симметрией. При поиске параметра X несоизмеримости возможны два равносильных подхода. Можно исследовать уровни $H(1)$ и $H(4)$ (или $H(2)$ и $H(3)$) в области $-\pi < 2k\tau_x = 4X < \pi$, т.е. в пределах первой зоны Бриллюэна. Но можно исследовать уровень $H(4)$ (или $H(3)$) в удвоенной области $-\pi < 2X < \pi$.

Диагональные блоки матрицы R_3

$F'j$	11	21	31	41	$F'j$	12	22	32	42
1	1	1	1	1	5	1	1	i	i
2	1	1	-1	-1	6	1	1	$-i$	$-i$
3	1	-1	-1	1	7	1	-1	i	$-i$
4	1	-1	1	-1	8	1	-1	$-i$	i

Перейдем к количественному анализу. Коэффициенты A вычислим по формулам из [2]. Матрица R_3 оказывается квазидиагональной с двумя отличными от нуля блоками: левым для первой системы позиций, правым для второй (табл. 3). Левые столбцы — номера позиций. Нормирующий множитель опущен. Два следующих обстоятельства упрощают вычисления.

а) Суммирование по k имеет в виду только два вектора: $(k, 0, 0)$ и $(-k, 0, 0)$. При этом $\varphi(j/j'; -k) = K_\varphi(j/j'; k)$ в связи с принятым определением базисных векторов (БВ) полных НКП, а именно $K_\varphi(F'j; k)$ — БВ полного НКП. В принципе вместо K можно было бы взять любой оператор из множества $KG(\mathbf{k}) + g_{25}G(\mathbf{k})$.

б) В матрицу $\varphi(j/j'; k)$ входят 16 величин $D(p/p'; k)$. Последние, однако, связаны между собой в силу соотношения $\Phi(pa/p'a') = \Phi(qa''/q'a''')$, если в группе G имеется элемент, преобразующий позиции (p, a) , (p', a') в позиции (q, a'') , (q', a''') . Например, применяя $g = g_{25}$, получим

$$\sum \Phi(7a/10) \exp(-ika) = \sum \Phi(8a/10) \exp(ika + 4i\chi).$$

Окончательные результаты с точностью до несущественного для нас нормировочного множителя суть

$$A(1)_{11} = \sum [\Phi(1a/10) + \Phi(3a/10)] \cos ka + [\Phi(2a/10) + \Phi(4a/10)] \cos(ka + 2\chi), \quad (2)$$

$$A(1)_{22} = \sum [\Phi(5a/50) + \Phi(8a/50)] \cos ka + [\Phi(6a/50) + \Phi(7a/50)] \cos(ka + 2\chi), \quad (3)$$

$$A(1)_{12} = \sum [\Phi(8a/10) + \Phi(5a/10)] \cos(ka + \chi), \quad (4)$$

$$A(3)_{12} = \sum [\Phi(8a/10) - \Phi(5a/10)] \sin(ka + \chi). \quad (5)$$

Суммирование производится по a , $\Phi(pa/10)$ — константа обменного взаимодействия между атомами в позициях (p, a) и $(1, 0)$. Из (2) получаются остальные $A(F')_{11}$: для $F' = 2$ — изменением знаков перед $\Phi(3\dots)$ и $\Phi(4\dots)$, для $F' = 3$ — перед $\Phi(2\dots)$ и $\Phi(3\dots)$, для $F' = 4$ — перед $\Phi(2\dots)$ и $\Phi(4\dots)$. Из (3) получаются $A(F')_{22}$: для $F' = 2$ — изменением знаков перед $\Phi(7\dots)$ и $\Phi(8\dots)$, для $F' = 3$ — перед $\Phi(6\dots)$ и $\Phi(8\dots)$, для $F' = 4$ — перед $\Phi(6\dots)$ и $\Phi(7\dots)$. $A(2)_{12}$ получается из $A(1)_{12}$, а $A(4)_{12}$ — из $A(3)_{12}$ изменением знаков перед $\Phi(8\dots)$.

4. Уровни магнитной энергии соответствуют собственным значениям $\lambda(F', k)_1$ и $\lambda(F', k)_2$ квадратичной формы (1) симметризованных координат (далее $\lambda = \lambda_2 < \lambda_1$). В немагнитной фазе $\lambda(F', k) > 0$. В точке фазового перехода минимум одного из четырех значений $\lambda(F', k)$ становится отрицательным. Соответствующая величина параметра k приблизительно характеризует шаг спирали, а нормальная магнитная координата — отношение величин магнитных плотностей, реализующихся на первой и второй системах позиций. В действительности следовало бы минимизировать по k не уровень $\lambda(F', k)$, а термодинамический потенциал W , т.е. включить в рассмотрение ИК высокого порядка. Такая задача математически неразрешима, особенно в случае двух систем позиций. Кроме того, коэффициенты при ИК высокого порядка пока не определяются ни теоретически, ни экспериментально. Мы предполагаем, что существование минимума $\lambda(F', k)$ обуславливает существование и минимума W , и не претендуем на более или менее точное определение шага спирали. Собственно, такого определения нет ни в одной теоретической работе.

Формулы (2)–(5) подтверждают ранее сделанные заключения о поведении коэффициентов A . Добавим лишь, что в точке $k = 0$ собственные значения экстремальны. Вдали от этой точки формально можно допустить любое поведение функций A и λ ; мы, однако, в суммах (2)–(5) учтем взаимодействие только сравнительно близких атомов. В расчеты войдут синусы и косинусы углов χ , 2χ , 3χ и 4χ , а кривые A и λ будут иметь малое число экстремальных точек. Для определенности примем, что при $k = 0$ $A(F')_{22} < A(F')_{11}$. В частности, это означает, что в этой точке $\lambda(F') = A(F')_{22}$, если $F' = 3, 4$, и $\lambda(F') < A(F')_{22}$, если $F' = 1, 2$. Это предположение соответствует экспериментальным данным о более сильном эффекте магнитоупорядочения во второй системе позиций.

Проанализируем формулы (2)–(5) для $F' = 3$. При оценке коэффициентов A примем, что константы Φ значительны лишь для близких атомов. Здесь, в обменном приближении, учтены взаимодействия атомов в позициях, удаленных от первой позиции не более чем на 8 \AA . Для обоснования дальнейших упрощений заменим в обозначениях констант Φ пары символов позиций расстояниями между позициями. Получим

$$\begin{aligned}
 A_{11} &\approx 2\Phi(4.555) - 4\Phi(5.400) + \left[8\Phi(6.097) - 4\Phi(5.363) - 2\Phi(2.831) \right] \cos 2\chi + \\
 &\quad + \left[2\Phi(5.663) + 4\Phi(7.267) - 8\Phi(7.824) \right] \cos 4\chi, \\
 A_{22} &\approx 2\Phi(4.555) - 2\Phi(5.419) - 2\Phi(5.381) + \left[4\Phi(3.650) - 2\Phi(5.963) - 2\Phi(5.354) \right] \times \\
 &\quad \times \cos 2\chi + \left[2\Phi(5.663) + 4\Phi(7.267) - 4\Phi(7.878) - 4\Phi(7.812) \right] \cos 4\chi, \\
 A_{12} &\approx \left[\Phi(3.529) + \Phi(3.500) - 2\Phi(2.981) \right] \sin \chi + \\
 &\quad + \left[\Phi(4.992) - \Phi(5.319) - \Phi(5.338) \right] \sin 3\chi.
 \end{aligned}$$

Явно видно, что, пренебрегая влиянием немагнитных атомов на величины Φ и небольшими различиями расстояний, вполне допустимо положить

$$\begin{aligned} A_{11} &= a - b_1 \cos 2\chi + c \cos 4\chi, & A_{22} &= a - b_2 \cos 2\chi + c \cos 4\chi, \\ A_{12} &= d \sin \chi + e \sin 3\chi. \end{aligned} \quad (6)$$

Для $F' = 4$ коэффициенты A строятся из констант Φ несколько иначе, однако соображения, приводящие к упрощенным выражениям (6), остаются в силе. Поскольку далее числа $a-e$ рассматриваются как параметры, исследование оказывается одинаковым для $F' = 3$ и $F' = 4$. Результат не зависит от знака A_{12} , так что примем, что $d > 0$. Остальные параметры и коэффициенты будем измерять в единицах d , далее $d = 1$.

5. Если A_{22} имеет минимум в некоторой точке $k \neq 0$, то вблизи от этой точки имеет минимум и λ . Этот случай мы считаем неинтересным, так как при этом несоизмеримость, по существу, просто предполагается. Далее все внимание мы уделим случаю, когда несоизмеримость возникает за счет, как будем говорить, «взаимодействия уровней» (напоминаем, что $F' = 3$). Она возможна даже тогда, когда A_{22} минимален при $k = 0$, но взаимодействие A_{12} ведет к понижению $A_{22} \rightarrow \lambda$, в результате которого λ максимально при $k = 0$ и минимально при $k \neq 0$. С физической точки зрения это означает, что в самой по себе c -системе позиций спираль не реализуется, но реализуется при наличии магнитных атомов в a - и c -системах.

В точке $k = 0$ коэффициент A_{22} минимален, а собственное значение λ максимально, если выполняются неравенства

$$b_2 - 4c > 0, \quad 2(b_2 - b_1)(b_2 - 4c) - d^2 < 0 \quad (7)$$

соответственно. Они непротиворечивы, поскольку из условия $A(0)_{11} > A(0)_{22}$ следует, что $b_2 - b_1 > 0$. Заметим также, что первое условие в (7) означает также, что A_{22} не имеет минимума при $k \neq 0$, поскольку из его существования следовало бы, что в нем $4c \cos 2\chi = b_2$, и потому $b_2 < 4c$. Разумеется, этот факт — следствие предположенного простого вида $A_{jj'}$ в (6).

Поскольку нас не интересует точный вид области параметров, примем, что $c = e = 0$. Введем параметры ρ и φ по формуле $b_2 + ib_1 = \rho \exp(i\varphi)$, найдем λ ; минимизируя λ по χ , установим значение $\chi_m \neq 0$, соответствующее спирали

$$\begin{aligned} 2(\lambda - a) &= -\rho(\cos \varphi + \sin \varphi) \cos 2\chi - D^{1/2}, \\ D &= \rho^2(1 - \sin 2\varphi) \cos^2 2\chi - 2 \cos 2\chi + 2, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\rho(\cos \varphi + \sin \varphi) D^{1/2} = 1 - \rho^2(1 - \cos 2\varphi) \cos 2\chi. \quad (9)$$

Иррациональное уравнение (9) ведет к двум значениям $\cos 2\chi_m$, а именно

$$\begin{aligned} &\rho^2(1 - \sin 2\varphi) \cos 2\chi_m = \\ &= 1 \pm (2 \sin 2\varphi)^{-1} \left\{ 2 \sin 2\rho(1 + \sin 2\varphi) \left[1 - 2\rho^2(1 - \sin 2\varphi) \right] \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (10)$$

из которых одно должно быть отброшено на основании неравенства

$$\frac{1 - \rho^2(1 - \sin 2\varphi) \cos 2\chi_m}{\cos \varphi + \sin \varphi} > 0. \quad (11)$$

Ищем область, допускающую существование спирали. Она симметрична относительно прямой $\cos \varphi = \sin \varphi$: Мы ограничимся нижней правой полуплоскостью, в которой $A_{22} < A_{11}$ и $b_2 < b_1$. В ней условие минимума значения λ при $\chi_m \neq 0$, совпадающее, кстати, с условием максимума λ при $\chi = 0$, сводится к неравенству

$$2\rho^2 \cos \varphi (\cos \varphi - \sin \varphi) < 1. \quad (12)$$

Полуплоскость разобьем на секторы лучами $2\varphi = -\pi$, $4\varphi = -\pi$, $\varphi = 0$.

I. Сектор $-3\pi < 4\varphi < -2\pi$. В силу (11) следует взять в (10) перед радикалом знак плюс. Но тогда с учетом неравенства $D > 0$ получим, что $\cos 2\chi_m > 1$. Существование спирали невозможно.

II. Сектор $-2\pi < 4\varphi < -\pi$. Перед радикалом в (10) берем знак минус. Решение неравенства $\cos 2\chi_m < 1$ приводит к двум вариантам: либо $\rho < \rho_-$, либо $\rho > \rho_+$, где

$$-2\rho_-^2 \sin \varphi (\cos \varphi - \sin \varphi) = 1, \quad 2\rho_+^2 \cos \varphi (\cos \varphi - \sin \varphi) = 1, \quad \rho_+ > \rho_-.$$

Первому варианту мешает осуществиться неравенство (11), второму — (12). Существование спирали невозможно.

III. Сектор $-\pi < 4\varphi < 0$. В (10) перед радикалом берем знак плюс. Неравенство $\cos 2\chi_m < 1$ приводит к условию $\rho_+ < \rho < \rho_-$, причем сейчас $\rho_+ < \rho_-$. Ввиду (12) существование спирали невозможно.

IV. Сектор $0 < 4\varphi < \pi$. В (10) перед радикалом берем знак минус. Уравнение $\cos 2\chi_m = 1$ является уравнением гиперболы $2b_2(b_2 - b_1) = 1$ с осью симметрии $8\varphi = -\pi$ и асимптотами $4\varphi = \pi$ и $2\varphi = -\pi$. Уравнение $\cos 2\chi_m = 0$ — уравнение $\sqrt{2}(b_1 + b_2) = 1$ прямой. Наконец, уравнение $\cos 2\chi_m = -1$ сводится к уравнению

$$L = 4b_1b_2(b_1^2 + b_2^2 - 2b_1b_2) + 2(b_1^2 + b_2^2 + 6b_1b_2) - 1 = 0 \quad (13)$$

кривой с осью симметрии $4\varphi = \pi$. Обе кривые и прямая проходят через точку $b_1 = 0, \sqrt{2}b_2 = 1$. Кривые и луч $4\varphi = -\pi$ ограничивают область, в которой реализуется спираль при $b_2 > b_1$ (рис. 2). Правее прямой

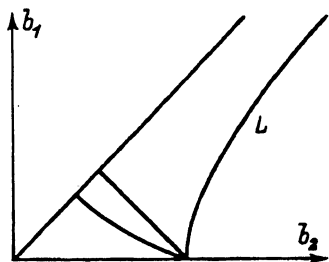


Рис. 2. Область параметров при $F' = 3$ или 4.

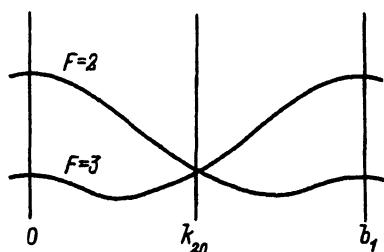


Рис. 3. Вид кривых $\lambda(k) = \lambda(\chi)$ для $F' = 3$ и $F' = 2$ в области $0 \leq k \leq |b_1|$.

$\sqrt{2}(b_1 + b_2) = 1$ в весьма большой подобласти спираль характеризуется индексом $F' = 3$ и вектором в первой зоне Бриллюэна ($0 < k < k_{20}$, $0 < 4\chi_m < \pi$). Левее прямой в малой подобласти $k > k_{20}$. Здесь спираль можно также характеризовать вектором $k < k_{20}$, но при этом индексом $F' = 2$.

Включение в рассмотрение слагаемых $c \sin 3\chi$ и $\cos 4\chi$ деформирует «спиральную» область. Автор численно построил кривые при $\rho^2 = 2$ и $\varphi = 40^\circ$ для следующих вариантов: 1) $c = e = 0$; 2) $c = 0.05$, $e = 0$; 3) $c = 0.05$, $e = 0.1$; 4) $c = 0.05$, $e = -0.1$. Для вариантов 1–3 кривые имеют максимумы при $\chi = 0$ и минимумы при $\chi_m \approx 8-15^\circ$. Вид кривых показан в следующей работе. Для варианта 4 спираль отсутствует, но к ней можно прийти при выбранных значениях c и e и несколько измененных значениях ρ и φ .

Проведенное в этом разделе исследование в равной мере справедливо для $F' = 3$ и 4. Какой из этих случаев реализуется, зависит от кривых $\lambda(3)$ и $\lambda(4)$. Если обе кривые имеют минимумы при $k \neq 0$, то, учитывая плавность кривых λ и малость величины $\lambda(k=0) - \lambda(k=k_m)$, можно принять, что разность между минимумами имеет тот же знак, что и разность в точке $k = 0$. Например, должен реализоваться случай $F' = 3$, если

$$A(3, k=0)_{22} - A(4, k=0)_{22} = 2 \sum \Phi(7a/50) - \Phi(8a/50) < 0$$

или, грубо, $\Phi(70/50) - \Phi(80/50) < 0$. Согласно эксперименту, в позициях (8,0) и (5,0) ММ атомов антипараллельны, а в позициях (7,0) и (5,0) параллельны, т.е. $\Phi(80/50) > 0$, $\Phi(70/50) < 0$. Эти рассуждения показывают, что характер структуры определяется в основном взаимодействием ближайших атомов.

Итак, численные расчеты показывают, что при $F' = 3$ или 4 действительно имеется довольно значительная область параметров b_1 , b_2 и d , в которой реализуется спираль с вектором k внутри первой зоны Бриллюэна.

В заключение подтвердим численным расчетом основанное на теоретико-групповом анализе соотношение между результатами для $F' = 3$ и $F' = 2$ (или $F' = 4$ и $F' = 1$). Если взять те же константы взаимодействия $\Phi(pa/p'a')$, которые привели к (6), то в случае индекса $F' = 2$ мы получим вместо (6) выражения

$$A(2)_{11} = a + b_1 \cos 2\chi + c \cos 4\chi, \quad A(2)_{22} = a + b_2 \cos 2\chi + c \cos 4\chi,$$

$$A(2)_{12} = d \cos \chi + e \cos 3\chi.$$

Исходя из этих результатов, можно провести такое же исследование, как для $F' = 3$, и в частности построить кривую $\lambda(2)$ как функцию χ . Кривые $\lambda(3)$ и $\lambda(2)$ изображены на рис. 3. Кривые вычислены для одних и тех же параметров ρ и φ , они наглядно демонстрируют соотношение $\lambda(3, k_{20} - k) = \lambda(2, k_{20} + k)$ и то, что «спиральная» область параметров в первой зоне Бриллюэна весьма мала при $F' = 2$ (или $F' = 1$).

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

Список литературы

- [1] Ковалев О.В. ФТТ **36**, 7, 2074 (1994).
- [2] Ковалев О.В. ФТТ **32**, 8, 2381 (1990).
- [3] Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М. (1986). 368 с. (Kovalev O.V. Representations of the Crystallographic Space Groups. Gordon and Breach Science Publishers (1993). 390 p.)
- [4] Барьяхтар В.Г., Стефановский Е.П., Яблонский Д.А. ФТТ **28**, 2, 504 (1986).
- [5] Барьяхтар В.Г., Стефановский Е.П., Яблонский Д.А. Письма в ЖЭТФ. **42**, 258 (1985).
- [6] Барьяхтар В.Г., Стефановский Е.П., Яблонский Д.А. Изв. АН СССР **51**, 10, 1667 (1987).
- [7] Cox D.E., Fraser B.C., Newnham R.E., Santaro R.P. J. Appl. Phys. **40**, 3, 1124 (1969).
- [8] Newnham R.E., Kramer J.J., Schulze W.A., Gross L.E. J. Appl. Phys. **49**, 12, 6088 (1978).