

УДК 538.1 : 548

© 1990

МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД В ТЕОРИИ МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, СОПРОВОЖДАЮЩИХСЯ СМЕЩЕНИЯМИ АТОМОВ

О. В. Ковалев

Метод индуцированных копредставлений применяется для исследования магнитных переходов в несоизмеримые структуры. Учитываются смещения атомов.

1. Микроскопическая модель, применявшаяся в [1] при исследовании магнитной спирали и основанная на методе индуцированных копредставлений, здесь распространяется на случай, когда магнитное упорядочение сопровождается смещениями атомов. Главная задача — это получить выражения для коэффициентов при инвариантных комбинациях (ИК), в которых фигурируют величины, близкие к величинам парного взаимодействия. Хотя эти величины трудно оценить экспериментально, тем не менее содержащаяся в коэффициентах информация позволяет установить относительный вклад разных взаимодействий, зависимость последних от вектора \mathbf{k} , характеризующего структуру. Удастся объяснить и предсказать эффекты, анализ которых в феноменологии невозможен.

Ниже используются результаты, терминология и обозначения из [2]; в очевидных случаях не указываются индексы суммирования.

2. Вектор магнитной плотности запишем в нескольких формах

$$\mathbf{M} = \sum \mu(\alpha p a) \mathbf{e}_\alpha \varphi(p a) = \sum \mu(\alpha F j i k) \mathbf{e}_\alpha \varphi(F j i k) = \sum m(F j i k) \psi(F j i k), \quad (1)$$

$\alpha, \beta = x, y, z$; \mathbf{e}_α — магнитные орты; p — номер позиции в ячейке; \mathbf{a} — вектор-номер ячейки; $(p a)$ — символ позиции ($\mathbf{r}(p a)$ — ее радиус-вектор); $\varphi(p a)$ — функция координат, локализованная в позиции $(p a)$ (удобно считать, что это δ -функция).

$\varphi(F j i k)$ — базисный вектор (БВ) перестановочного копредставления (КП) P , которое предполагаем разложенным на неприводимые копредставления (НКП) $D^{F j}$, где F — сорт эквивалентности, j — номер НКП сорта F в КП P . Индекс i нумерует БВ, относящиеся к некоторому \mathbf{k} . Всюду речь идет о КП группы $G + KG$, где G — федоровская группа в парамагнитной фазе; K — оператор комплексного сопряжения, отражающий свойство вещественности магнитной плотности и не связанный с унитарным оператором обращения времени. $\psi(F j i k)$ — БВ магнитного КП $D_m = P \times V_m$; по V_m преобразуются орты \mathbf{e}_α . Для P и D_m наборы $F j i$ различны. Считаем их известными в связи с [2].

Примем следующие определения ($n^2 = N$ — число ячеек):

$$\varphi(p k) = n^{-1} \varepsilon(p) \sum \varphi(p a) \exp(i \mathbf{k} a), \quad \varphi(F j i k) = \sum R_{3j}(p/F j i) \varphi(p k), \quad (2), (3)$$

$$\psi(\alpha p k) = \mathbf{e}_\alpha \varphi(p k), \quad \psi(F j i k) = \sum R_{21}(\alpha p/F j i) \psi(\alpha p k), \quad (4), (5)$$

$$\psi(F j i k) = \sum S(\alpha F' j' i' / F j i) \mathbf{e}_\alpha \varphi(F' j' i' k), \quad \varepsilon(p) = \exp i \mathbf{k} \left[\mathbf{r}(p 0) - \frac{1}{2} \alpha_0 \right], \quad (6), (7)$$

α_0 — трансляция в антиунитарном элементе $\alpha_0 = K g_0 = K(\alpha_0 / \hbar_0)$ со свойством $\hbar_0 \mathbf{k} = -\mathbf{k}_0 + \mathbf{b}$. Для разных \mathbf{k} из звезды K -представления в общем

случае поворота h_0 различны, однако в окончательные формулы войдет h_0 со свойством $h_0 \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_1 + \mathbf{b}$, где \mathbf{k}_1 — первый вектор [2].

Величина $\varepsilon(p)$, матрица S и все матрицы R зависят от \mathbf{k} , что не всегда отмечается.

Из сделанных определений следует, что

$$\mu(\alpha p a) = n^{-1} \sum \varepsilon(p) m(Fj\mathbf{k}) R_{21}(\alpha p/Fji) \exp i\mathbf{k}a, \quad (8)$$

$$\mu(\alpha Fj\mathbf{k}) = \sum S(\alpha Fji/F'j'i') m(F'j'i'\mathbf{k}), \quad (9)$$

$$R_{21}(\alpha p/Fji) = \sum S(\alpha F'j'i'/Fji) R_3(p/F'j'i'). \quad (10)$$

Для магнитной энергии во втором порядке примем разложение по компонентам магнитных моментов

$$H = \frac{1}{2} \sum \Phi(\alpha p a | \alpha' p' a') \mu(\alpha p a)^* \mu(\alpha' p' a'). \quad (11)$$

Локальные координаты $\mu(\alpha p a)$ вещественны, $\Phi(\dots)$ — производные по ним. Подставляя (8) в (11) и частично используя то обстоятельство, что H — ИК относительно группы $G+KG$, получим, что $H = \Sigma H(F\mathbf{K})$ — сумма по звездам \mathbf{K} и сортам НКП из $D_m(\mathbf{K})$,

$$H(F\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum \varphi(ji/j'i'; \mathbf{k}) m(j\mathbf{k})^* m(j'i'\mathbf{k}), \quad (12)$$

где величины φ и симметризованные магнитные координаты m принадлежат определенному сочетанию $F\mathbf{K}$

$$\varphi(\dots) = \sum_{\alpha\alpha' p p'} D(\alpha p | \alpha' p') R_{21}(\alpha p/ji)^* R_{21}(\alpha' p' / j'i'), \quad (13)$$

$$D(\dots) = \varepsilon(p)^* \varepsilon(p') \sum_a \Phi(\alpha p a | \alpha' p' a') \exp(-i\mathbf{k}a), \quad (14)$$

$$\varphi = \varphi^+, D = D^+, D(\dots; \mathbf{k})^* = D(\dots; -\mathbf{k}). \quad (15)$$

Вычисления по (12)–(15) можно упростить, однако способы упрощения (предварительное суммирование по векторам звезды, индексам i) зависят от звезды и некоторых свойств НКП, например типа НКП, способа ввода БВ, связанных с $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1$. Эту задачу рассмотрим позже.

3. Выделим обменное взаимодействие способом, удобным для ряда задач. (Выделение обменного взаимодействия тривиально при $\mathbf{k}=0$ и несложно, если \mathbf{k} — вектор без текущих компонент, так как при этом можно ввести суперячейку. Нас же интересует общий случай). Из (1)–(3) следует, что

$$\mu(\alpha p a) = n^{-1} \sum \varepsilon(p) R_3(p/Fji) \mu(\alpha Fj\mathbf{k}) \exp i\mathbf{k}a. \quad (16)$$

Полагая в (11) $\alpha = \alpha'$ и $\Phi(\alpha p a | \alpha' p' a') = \Phi(p a | p' a')$, получим обменную часть H_e энергии (с точностью до необменной). После подстановки (16) найдем, что $H_e = \Sigma H_e(F\mathbf{K})$,

$$H_e(F\mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum \varphi_e(ji/j'i'; \mathbf{k}) \sum_a \mu(\alpha j\mathbf{k})^* \mu(\alpha' j'i'\mathbf{k}), \quad (17)$$

$$\varphi_e(\dots) = \sum D_e(p/p'; \mathbf{k}) R_3(p/ji)^* R_3(p' / j'i'), \quad (18)$$

$$D_e(\dots) = \varepsilon(p)^* \varepsilon(p') \sum_a \Phi(p a | p' a') \exp(-i\mathbf{k}a). \quad (19)$$

В (16)–(18) индексы Fj нумеруют НКП из КП P .

Стоящая в (17) сумма по α под действием элементов из $G+KG$ преобразуется как произведение $c(j\mathbf{k})^* c(j'i'\mathbf{k})$, где c — коэффициенты (симметризованные скалярные координаты), которые имеют место в разло-

жении заданной в позициях скалярной функции F по БВ перестановочного КП P

$$F = \sum c(pa) \varphi(pa) = \sum c(Fjik) \varphi(Fjik).$$

Поэтому в обменном приближении можно использовать величины c , тем более что вычисления сводятся к составлению инвариантов из БВ НКП, содержащихся в КП P , переходу к ИК и определению коэффициентов при них. Особенно это удобно в задачах о спонтанных деформации и электрической поляризации. Замена в (17) суммы по a произведением c^*c — это следствие того, что в указанной сумме слагаемые равноправны, а $H_a(FK)$ разбивается на три однотипных выражения. Если же учитываются и релятивистские слагаемые и желательно перейти к координатам $m(Fjik)$, то следует воспользоваться (9). При этом обменные и необменные ИК будут четко разделены.

4. Поскольку теория НКП не столь привычна, как теории представлений, остановимся на некоторых моментах.

Матрицы R , S и вообще все матрицы, связывающие БВ унитарных КП, можно выбрать унитарными. Для этого достаточно формально ввести эрмитовы скалярные произведения

$$(\varphi(pa), \varphi(p'a')) = \delta_{pp'} \delta_{aa'}, \quad (e_\alpha, e_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$$

и, опираясь на них, вводить лишь ортонормированные новые БВ.

Энергия H является суммой ИК. Последние удобно строить так. Рассмотрим одну из сумм в (1), записав ее в виде $M = \sum m_i e_i$, где i — необходимый набор индексов, e_i — БВ КП D . Под действием g вектор M преобразуется в вектор с компонентами $m'_i = \sum D(g)_{ik} m_k$, так что инвариантность $gH = H$ означает, что мы должны прийти к исходному выражению для H , если сначала в H формально заменим m_i на m'_i (проставим штрихи), а затем по приведенным формулам m'_i заменим на m_i .

Инвариантность $KH = H$ основывается на инвариантности $KM = M$. Имеем

$$M = \sum m_i^* e_i^* = \sum m_i^* D(K)_{ki} e_k, \quad m_i^* = \sum D(K)_{ik}^* m_k.$$

Инвариантность $KH = H$ означает, что мы должны прийти к исходному выражению для H , если в KH выразим m_i^* через m_i (без звездочек) по полученной формуле. Специфичность формулировки условия $KH = H$ связана с тем, что в общем случае набор БВ копредставления состоит из векторов e_i без звездочек, тогда же как e_i^* может оказаться линейной комбинацией БВ e_i .

Линейные комбинации наборов $e_i e_k \dots$ (в наборе БВ просто выписаны рядом, умножение не предполагается), не меняющиеся при применении к ним операторов из $G + KG$, называем инвариантами. Под ИК понимаем формы (квадратичные, кубические и т. д.), которые составлены из магнитных координат и не меняются при преобразованиях, о которых говорилось при обсуждении инвариантности H . Если $\sum h_{ik} \dots e_i e_k \dots$ — инвариант, то, как можно показать, $\sum h_{ik}^* \dots m_i m_k \dots$ — ИК. Поскольку по НКП преобразуются именно БВ e_i , на практике удобно сначала строить инварианты, а затем по ним — ИК.

Здесь рассмотрим только два варианта упрощения сумм вида (13), (17). Для любого варианта общий принцип заключается в том, что, выбрав БВ НКП, строим соответствующие ИК, а затем линейную комбинацию этих ИК с произвольными коэффициентами A приравниваем (13), (17) или другой соответствующей сумме. Отсюда находим коэффициенты A .

Вариант IIa: $k = -k + b$. Полагаем, что $a_0 = K$, рассматриваем НКП типа a . Индекс F опускаем. Малые НКП d^j и $d^{j'}$ группы $G(k_1, K)$ берем в вещественной форме. Однородные и смешанные ИК в рассматриваемом случае равны

$$i_{jj} = \sum m(jik)^2, \quad i_{j,j'} = \sum m(jik) m(j'ik) \quad (20)$$

(суммы по k и i). Полагая

$$H(FK) = \frac{1}{2} \sum_{jj'} (A_{jj} i_{jj} + A_{jj'} i_{jj'}) \quad (21)$$

и учитывая, что БВ, координаты m , матрицы R_{21} , φ и D вещественны, из сравнения с (13) находим, что

$$A_{jj} = \varphi(ji/ji) = \varphi(j1/j1), \quad A_{jj'} = A_{j'j} = \varphi(ji/j'i) = \varphi(j1/j'1), \quad (22)$$

$$\varphi(ji/j'i) = \varphi(ji/j'i') = 0, \quad i \neq i'. \quad (23)$$

При этом φ не зависит от вектора звезды, вычисления проводятся при $k = k_1$.

Вариант IIб: звезда K -представления содержит вектор $-k_1$, но $k_1 \neq -k_1 + b$. Ограничиваемся НКП типа a . Вводим БВ полного НКП следующим образом. Пусть $e(i, k_1)$ — БВ малого НКП, $g_1^i = (\alpha_1^i / h_1^i)$ — элемент со свойством $h_1^i k_1 = k_p$. Остальные БВ вводим по схеме

$$e(i, -k_1) = Ke(i, k_1), \quad e(i, k_2) = g_2^i e(i, k_1), \quad e(i, -k_2) = Ke(i, k_2), \dots \quad (24)$$

Суть схемы в том, что половина БВ вводится при помощи оператора K . Всякий раз g_1^i выбирается так, чтобы он не приводил к ранее учтенному вектору звезды. Тот из двух векторов k и $-k$, который в схеме встречается первым, условно назовем положительным. Из схемы следует, что

$$R_{21}(a_p/ji; k)^* = R_{21}(a_p/ji; -k), \quad \varphi(ji/j'i'; k)^* = \varphi(ji/j'i'; -k), \quad (25)$$

$$H(FK) = \frac{1}{2} \sum_{k>0} \varphi(ji/j'i'; k) m(jik)^* m(j'i'k) + \text{к. с.} \quad (26)$$

В рассматриваемом варианте имеем ИК

$$i_{jj} = \sum_{k>0} m(jik)^* m(jik), \quad i_{j'j'} = \sum_{k>0} m(j'ik)^* m(j'ik) + \text{к. с.} \quad (27)$$

Снова используя запись (21), получаем соотношения, полностью совпадающие с (22), (23). Описанный способ применим к (17).

5. Магнитное упорядочение ведет к смещениям атомов. Мы ограничимся случаем, когда смещения обусловлены обменным взаимодействием, причем будем говорить лишь о смещениях магнитных атомов. Смещения условно разделим на деформационные и локальные. Под первыми понимаем такие, которые можно удовлетворительно описать тензором деформации (точнее, тензором $\partial u_\alpha / \partial r_\beta = u_{\alpha\beta}$); соседние атомы смещаются почти одинаково, т. е. окружение магнитных атомов немагнитными практически не меняется. Пьезоэлектрическим эффектом пренебрежем, даже если он допускается симметрией. Локальные смещения — это изменения положений магнитных атомов относительно соседних (немагнитных). Эти смещения могут обусловить появление (изменение) электрической поляризации. Соответственно двум видам смещений будем подразумевать два вида производных величин $\Phi(pa|p'a')$ по координатам указанных в аргументах позиций.

В этом пункте рассматриваем деформационные смещения. Вместо (17) имеем $H_e = H_{e0} + \Delta H_{en}$, где H_{e0} — энергия в отсутствие смещений,

$$\Delta H_{en} = \frac{1}{2} \sum [\Phi(pa|p'a')_{1\alpha}^* - \Phi(pa|p'a')_{2\alpha}] u_\beta(pa|p'a') u_{\alpha\beta} c(pa)^* c(p'a'),$$

$$u_\beta(pa|p'a') = r_\beta(p'a') - r_\beta(pa).$$

В скобках записаны производные (знак штрих) по координатам позиций (pa) (индекс 1) и $(p'a')$ (индекс 2). Воспользовавшись подстановками

$$c(pa) = n^{-1} \sum \varepsilon(p) c(pk) \exp ika, \quad c(pk) = \sum R_s(p/Fji) c(Fjik),$$

получим ($f \equiv Fj$), что

$$\Delta H_{eu} = \sum \varphi_e (fi/f'i'; k)_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} c (fik)^* c (f'i'k), \quad (28)$$

$$\varphi_e (\dots)_{\alpha\beta} = \sum \Phi (pa/p'0)'_{1\alpha} u_{\beta} (pa/p'0) R_3 (p/fi)^* R_3 (p'/f'i') \exp(-ika). \quad (29)$$

В (29) суммируется по векторам k , участвующим в описании магнитной структуры. В конкретных случаях нужно выписать линейную комбинацию всех интересующих нас ИК, линейных по $u_{\alpha\beta}$ и квадратичных по c , а затем из сравнения ее с (28) получить коэффициенты при ИК.

6. Перейдем к локальным смещениям. Хотя величины $\Phi(\dots)$ внешне напоминают константы парного взаимодействия и именно так часто истолковываются, в действительности они являются производными энергии по компонентам магнитных моментов и как таковые суть функции координат всех атомов, в том числе и немагнитных. Поэтому, строго говоря, следовало бы производить их разложение по смещениям всех атомов. Мы, однако, сделаем два упрощающих предположения: 1) при переходе в магнитную фазу электрическая поляризация возникает за счет смещения магнитных атомов; 2) можно ограничиться производными величины $\Phi(pa|p'a')$ лишь по координатам указанных в аргументе позиций. Весьма важно, что две упомянутые неточности ведут только к неточности в определении коэффициентов при ИК (первой степени по P_α и второй по c), но на числе и виде ИК не сказываются.

Вводим вектор смещений

$$U = \sum u(\alpha pa) \varepsilon'(\alpha pa) = \sum u(fik) \Psi(fik),$$

подобный вектору (1), с тем отличием, что орты $\varepsilon(\alpha pa)$ являются полярными. ВВ КП смещений $D_u = \Sigma D^f (f \equiv Fj)$ вводим аналогично тому, как это делалось в разделе 2, но теперь используем матрицу R_2 , отличия которой от R_{21} полностью определяется отличием векторов ε от векторов e . Мы не будем выписывать формулы, в общем случае сходные с формулами раздела 2, а ограничимся симметризованными смещениями, преобразующимися по НКП, связанным с $k=0$. Поэтому

$$u(fi0) = n^{-1} \sum_{\alpha p} R_2(\alpha p/fi; 0) \sum_a u(\alpha pa), \quad (30)$$

$$u(\alpha pa) = n^{-1} \sum_{j'ik} R_2(\alpha p/fi; k) u(fik) \exp(ika). \quad (31)$$

Поскольку предполагается, что $u(fi0) \neq 0$, но $u(fik) = 0$ при $k \neq 0$, то

$$u(fi0) = n \sum_{\alpha p} R_2(\alpha p/fi; 0) u_0(\alpha p), \quad (30a)$$

$$u(\alpha pa) = n^{-1} \sum R_2(\alpha p/fi; 0) u(fi0) = u(\alpha p0) \equiv u_0(\alpha p). \quad (31a)$$

Приращение обменной энергии, обязанное смещению магнитных подрешеток как целых, равно

$$\Delta H_{ei} = \frac{1}{2} \sum [\Phi(pa/p'a')'_{1\alpha} u_0(\alpha p) + \Phi(pa/p'a')'_{2\alpha} u_0(\alpha p')] c(pa)^* c(p'a').$$

Переход к симметризованным магнитным координатам и симметризованным смещениям ведет к выражениям

$$H_{ei} = \sum_{f'j''i'i''} \varphi_e (fi/j'i'; k)_{f''j''} u(j''i''0) c(fik)^* c(f'i'k), \quad (32)$$

$$\varphi_e (\dots)_{f''j''} = \frac{1}{2n} \sum \Phi(pa/p'0)'_{1\alpha} R_2(\alpha p'/f''i''; 0) q, \quad (33)$$

$$q = R_3(p/fi; k)^* R_3(p'/f'i'; k) \exp(-ika) + R_3(p'/fj; k)^* R_3(p/f'i'; k) \exp(ika). \quad (34)$$

Если в (32), (33) оставить индексы $f''i''$, соответствующие векторному КП точечной группы, получим изменение ΔH_{eP} , связанное с появлением поляризации P . Когда некоторое сочетание $f''i''$ соответствует β -компоненте ($f''i'' = \beta$), то $u(\beta 0) = \lambda P_\beta$, где значение λ следует из условия $P_\beta = Zn^2 \Sigma u_0(\beta p)$ при заряде Z магнитного иона и единичном объеме кристалла. При этом $P_\beta = Zn(m)^{1/2} u(\beta 0)$, где m — число магнитных подрешеток ($p = 1, 2, \dots, m$), и (из (32))

$$\Delta H_{eP} = \sum \varphi_e(ji/f''i''; k)_\beta P_\beta c(fik)^* c(f'i'k), \quad (35)$$

$$\varphi_e(\dots)_\beta = (Z\sqrt{Nm})^{-1} \varphi_e(\dots)_\beta. \quad (36)$$

7. Вводившиеся выше матрицы R легко находятся в каждом конкретном случае при построении БВ НКП из соответствующих локальных векторов (функций); см. также [2].

Симметричные соображения нужно использовать при вычислении всех упомянутых матриц φ . Если $g = (\alpha/h)$ переводит позиции (pa) , $(p'a')$ в позиции (qt) , $(q't')$ соответственно, $h_{\alpha\beta}$ — матрица поворота h (полярных или аксиальных векторов; это нужно учитывать), то

$$\begin{aligned} \Phi(pa/p'a') &= \Phi(qt/q't'), \quad \Phi(pa/p'a')'_{i\alpha} = h_{\alpha\beta} \Phi(qt/q't')'_{i\beta}, \\ \Phi(\alpha pa/\alpha' p'a') &= h_{\alpha\beta} h_{\alpha'\beta'} \Phi(\beta qt/\beta' q't'), \\ \Phi(pa/p'a')'_{i\alpha} u_\beta(pa/p'a') &= h_{\alpha\alpha'} h_{\beta\beta'} \Phi(qt/q't')'_{i\alpha'} u_{\beta'}(qt/q't'). \end{aligned}$$

Эти соотношения можно применять в виде усреднения по множеству основных элементов группы G .

Иногда магнитные атомы занимают позиции, которые сами по себе образуют кристаллическую решетку, описываемую группой G' , являющейся надгруппой группы G . При установлении соотношений типа вышеприведенных нельзя применять элементы из G' , не содержащиеся в G . Использовать такие элементы — это значит пренебречь окружением магнитных атомов (пренебречь, например, косвенным взаимодействием). Подмена группы G надгруппой (истинной федоровской группы так называемой собственной группой магнитной решетки), как правило, приводит к потере некоторых ИК.

Список литературы

- [1] Ковалев О. В. // ФНТ. 1980. Т. 6. № 1. С. 94—100.
 [2] Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986. 368 с.

Харьковский физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
6 марта 1990 г.