

УДК 538.1  
© 1992

## О ВОЗМОЖНОСТИ ОПИСАНИЯ СЛОЖНЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИБЛИЖЕННЫМИ МЕТОДАМИ.

### ТРЕХПОДРЕШЕТОЧНЫЕ МАГНЕТИКИ В ОБМЕННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

А. В. Ведяшкин, Ю. М. Гуфан

Разработана методика проведения полной симметричной классификации решений уравнений состояния для задач с гамильтонианом, инвариантным относительно непрерывных групп симметрии. Рассмотрен случай магнитных структур многоподрешеточных магнетиков в обменном приближении. Показано, что теория, основанная на рассмотрении непрерывного потенциала как функции только алгебраически независимых инвариантов, а не целого рационального базиса инвариантов, приводит к предсказанию физически принципиально не реализуемых структур, так как симметрия модели  $G'$  оказывается выше симметрии физической задачи  $G$ . На примере точно решаемой задачи упорядочения трехподрешеточного магнетика в обменном приближении показано, какие фазы системы, инвариантной относительно группы  $G'$ , не могут быть реальными фазами физической системы, инвариантной относительно группы  $G$ . Предлагаемая методика классификации типов решений позволила провести точное решение задачи определения фаз для потенциала четвертой степени без определения группы симметрии потенциала.

1. Построение теории фазовых переходов в реальных кристаллах зачастую требует рассмотрения моделей, в которых упорядочение происходит по более чем двум подрешеткам [1-4]. В ряде случаев это сочетается с тем, что группа симметрии высокосимметричной фазы, определяющая вид неравновесного потенциала в наиболее интересном приближении, должна рассматриваться как содержащая непрерывные преобразования. Такое положение имеет место при описании поведения жидкого гелия [4], сверхпроводимости, обусловленной тяжелыми фермионами [4,5], магнетизма соединений  $3d$ -металлов [6]. В случае нескольких подрешеток и непрерывной группы симметрии потенциал Ландау (или лагранжиан при описании в рамках квантовой теории поля) при полном учете симметрии имеет очень сложный вид. Получение выводов на его основе является сложной математической задачей. Поэтому в большинстве работ используется ряд упрощений уже на уровне постановки физической задачи при выборе модельного потенциала. В частности, требование ренормируемости теории не позволяет работать с лагранжианами, содержащими переменные в степени выше, чем четвертая [7]. Это или аналогичное, чисто формальное приближение может привести к тому, что группа симметрии потенциала модели будет более широкой, чем группа симметрии, диктуемая физической постановкой задачи. Последствия такой подмены трудно контролируемы и могут привести к существенно неправильным предсказаниям теории. Особенно интересно проанализировать вопрос о последствиях произвольного расширения группы симметрии задачи в случае, когда она является непрерывной.

Аналогичная проблема возникает даже тогда, когда свойства фаз и их симметрию определяют по потенциалу Ландау, содержащему во всех сте-

пенях полный набор, но только алгебраически независимых инвариантов, а не по целому рациональному базису инвариантов (ЦРБИ). С точки зрения теории симметрии это означает, что истинную группу симметрии задачи заменяют ее надгруппой, порожденной отражениями. Ошибки теории, связанные с подменой симметрии задачи при таком упрощении потенциала, точно такие же, как и в случае ограничения степени разложения, но задача их выявления становится математически более строгой, так как даже в самом общем случае можно определить симметрию надгруппы  $G'$ . Поэтому наиболее подробно остановимся именно на таком примере. Один из ошибочных результатов теории, основанной на потенциале с симметрией  $G'$ , может состоять в том, что некоторые из фаз и фазовых границ, предсказываемых моделью с завышенной симметрией, при правильной постановке задачи окажутся просто невозможными для реализации.<sup>1</sup>

Цель нашей статьи — проиллюстрировать этот факт на примере задачи упорядочения трехподрешеточного магнетика в обменном приближении. Нам неизвестно, чтобы анализ на достоверность предсказаний теории проводился кем-нибудь ранее. Кроме этого, в работе впервые приведена методика проведения полной симметричной классификации решений уравнений состояния при фазовых переходах, отличная от [9,10]. Эта методика позволяет проводить классификацию и в случае непрерывных групп симметрии потенциала [11,12].

2. Рассмотрим многоподрешеточный магнетик в обменном приближении. По определению, его потенциал Ландау инвариантен относительно группы

$$G = P \otimes SO(3) \otimes R.$$

Здесь  $P$  — группа перестановок магнитных атомов, генерируемая группой симметрии кристалла ( $P$  действует только на координаты атомов);  $SO(3)$  — операции из группы вращений в спиновом пространстве;  $R$  — операция инверсии времени. Потенциал Ландау  $\Phi(T, P, \eta)$  является рядом по полиномам  $J_k(\eta_i)$ , образующим ЦРБ векторных инвариантов относительно группы  $P \otimes SO(3) \otimes R$ , где  $\eta_i$  — обменные спиновые плотности, являющиеся линейными комбинациями  $S_i$  — средних магнитных моментов ионов.

Уравнения, определяющие возможные упорядоченные состояния такого магнетика, имеют вид

$$\partial\Phi/\partial\eta_i = 0. \quad (1)$$

Для построения ЦРБИ представим полную группу симметрии задачи как группу, порожденную при последовательном вложении  $SO(3) \otimes R \subset SO(3) \times R \otimes P$ . Это позволяет, используя результаты [13] и методику [14], начать с построения ЦРБИ группы  $SO(3) \times R$ . Как известно [13], любой полиномиальный инвариант относительно этой группы представим в виде полиномов от скалярных произведений  $(\eta_j, \eta_k)$ , полный набор которых образует ЦРБИ группы  $SO(3) \otimes R$ . Под действием элементов группы  $P$  произведения  $(\eta_j, \eta_k)$  будут переходить в  $(\eta_j, \eta_m)$ , также инвариантные относительно группы  $SO(3) \times R$ . Следующий шаг построения инвариантов группы  $G$  очевиден: он заключается в построении инвариантов относительно группы  $P$ , перестановок инвариантов относительно

<sup>1</sup> То же самое можно сказать о структуре и симметрии доменных стенок в упорядоченных фазах, так как структуры дефектов упорядочения определяются и теми «виртуальными» фазами, которые не реализуются как равновесные [6].

SO (3)  $\otimes$  R. Термодинамический потенциал  $\Phi$  всегда можно представить в виде бесконечного ряда по конечному числу функций [13], входящих в ЦРБИ

$$\Phi = \sum a_{i_0 \dots i_l} J_1^{i_1} J_2^{i_2} \dots J_s^{i_s}, \quad (2)$$

$$J = J(\psi_i), \quad \psi_i = f(\eta_i, \eta_k),$$

и уравнения состояний принимают вид

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta_i} = \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} \frac{\partial J_k}{\partial \eta_i} \equiv \Phi_k \frac{\partial J_k}{\partial \eta_i} \equiv A_{ik} \Phi_k = 0. \quad (3)$$

Два метода классификации решений этих уравнений по симметрии [9,10] являются чисто геометрическими и специально приспособлены для дискретных групп. В принципе [10] допускает обобщение на непрерывные группы  $L$  [15]. Однако более конструктивной оказалась следующая методика. Рассмотрим (3) как систему линейных однородных уравнений относительно  $\Phi_k$ . В этом случае все качественно различные решения системы (3) можно найти, исследуя ранг матрицы  $A_{ik}$ . Предположим, что  $A_{ik}$  — квадратная матрица. Это реализуется только в том случае, если группа симметрии лагранжиана (или потенциала Ландау) порождена отражениями [15], т. е. число инвариантов равно числу независимых координат.<sup>2</sup> Если  $\det(A_{ik}) \neq 0$ , то система (3) имеет единственное тривиальное решение  $\Phi_k = 0$ . Это решение соответствует самой низкосимметричной фазе, в которой между  $\eta_j$  не существует никаких соотношений. Качественно (симметрично) другие решения системы (3) возможны, если выполняется условие

$$\det(A_{ik}) = 0. \quad (4)$$

Различные варианты выполнения условия (4) дают различные соотношения между  $\eta_k$ . Для групп, порожденных отражениями, (4) можно представить в виде произведения сомножителей, каждый из которых определяет инвариантное подпространство. Приравнявая к нулю каждый из сомножителей, получим набор решений, понижающих ранг матрицы  $A_{ik}$ . Подставляя теперь каждое из этих решений по очереди в матрицу  $A_{ik}$ , получим матрицы меньшего ранга. Исследуя каждую из полученных матриц ранга  $r-1$  на дальнейшее уменьшение ранга, получим последовательно все допустимые симметрией соотношения между  $\eta_j$ , определяющие все более высокосимметричные фазы. Процедуру следует продолжать до  $r=0$ , пока в качестве решения уравнений состояния не будет получена самая высокосимметричная структура. Это наиболее конструктивный (в случае непрерывных групп  $L$  со сложной структурой) метод перечисления всех качественно различных решений уравнений состояния, описывающих фазы с разной симметрией и структурой.

Метод справедлив для системы уравнений типа (3) и в случае прямоугольной матрицы  $A_{ik}$ , т. е. для любой компактной группы  $L$ . Так, ранг матрицы  $A_{ik}$  размерности  $m \times n$  ( $n < m$ ) уменьшается тогда и только тогда, когда обратятся в нуль все миноры размерности  $n \times n$ , т. е. вместо одного уравнения типа (4) нужно получить общее решение системы  $C_m^n$  таких уравнений

<sup>2</sup> Заметим, что если группа симметрии задачи содержит и непрерывные преобразования, то энергетические характеристики не зависят от некоторых координат (называемых циклическими), вдоль которых группа действует непрерывно. Для непрерывных групп, порожденных отражениями, число независимых инвариантов равно размерности представления параметра порядка минус число циклических координат.

$$\det(M_{jn}^i) = 0.$$

(5)

Здесь  $M_{jn}^i$  —  $j$ -й минор матрицы  $A_{ik}$  ранга  $n$ ,  $C_m^n$  — число сочетаний из  $m$  по  $n$ .

Сделаем следующее, почти очевидное замечание. В этом методе перечисления фаз очевидно, что все симметрично различные упорядоченные структуры физической системы, инвариантной относительно группы  $G$ , являются подмножеством множества упорядоченных состояний системы, инвариантной относительно ее надгруппы  $G'$ , для которой матрица  $A_{ik}$  будет квадратной. Это очевидно, так как один из исследуемых миноров прямоугольной матрицы  $A_{ik}$  будет определителем матрицы  $A_{ik}$ , полученной для надгруппы  $G'$ . Формально переход от группы  $G$  к ее надгруппе  $G'$  можно осуществить, исключив из ЦРБИ этой группы алгебраически зависимые инварианты. Поскольку нужно искать совместные решения для уравнений (5), а одно из уравнений этой системы будет совпадать с уравнением (4), то все решения (5) будут содержаться среди решений уравнения (4).

3. Приведем конкретный расчет того, насколько могут различаться предсказания теории, основанной на модели с повышенной группой симметрии, от результатов, полученных для исходной задачи. С этой целью рассмотрим трехподрешеточный магнетик, у которого в парамагнитной фазе все три подрешетки, занимаемые магнитными ионами, принадлежат одной правильной системе точек. Такие системы рассматривались, во-первых, в связи с упорядочением [16], когда изучался скрытый антиферромагнетизм этого соединения [17]. Широко изучались трехподрешеточные перовскиты [18, 19]. Именно для таких антиферромагнетиков была предсказана известная киттелевская структура [19]. Из других структур в подсистеме трех спинов были разобраны еще три в работах, использующих неполную симметрию [20]. Перечисление фаз для полной симметрии дано в [21]. Рассмотрим задачу с симметрией, повышенной до  $G'$  последовательно. Введем векторы ферромагнитного момента  $M = 1/\sqrt{3} (S_1 + S_2 + S_3)$  и антиферромагнитных моментов  $E_1 = 1/\sqrt{6} (2S_1 - S_2 - S_3)$  и  $E_2 = 1/\sqrt{2} (S_2 - S_3)$ . Обменной группой симметрии трехподрешеточного магнетика будет группа  $C_{3v} \otimes SO(3) \otimes R$ . Полный базис инвариантов, составленный из компонент векторов  $M, E_1, E_2$  (или  $S_1, S_2, S_3$ ), будет состоять из девяти однородных полиномов [15]

$$J_1 = E_1^2 + E_2^2,$$

$$J_2 = (E_1^2 - E_2^2)^2 + 4(E_1, E_2)^2,$$

$$J_3 = (E_1^2 - E_2^2)^3 - 12(E_1^2 - E_2^2)(E_1, E_2)^2,$$

$$J_4 = M^2,$$

$$J_5 = (M, E_1)^2 + (M, E_2)^2,$$

$$J_6 = (E_1^2 - E_2^2)(M, E_1) - 2(E_1, E_2)(M, E_2),$$

$$J_7 = (M, E_1)^3 - 3(M, E_2)^2(M, E_1),$$

$$J_8 = (M, E_1)^2(E_1^2 - E_2^2) - (M, E_2)^2(E_1^2 - E_2^2) + 4(M, E_1)(M, E_2)(E_1, E_2),$$

$$J_9 = (E_1^2 - E_2^2)^2(M, E_1) - 4(E_1, E_2)^2(M, E_1) + 8(E_1, E_2)(E_1^2 - E_2^2)(M, E_2). \quad (6)$$

В этом примере полное число инвариантов в базисе больше размерности представления минус число циклических координат. Это означает, что три инварианта из (6) алгебраически зависимы. Действительно, три

вектора  $M$ ,  $E_1$ ,  $E_2$  в трехмерном изотропном пространстве можно задать всего шесть координатами. Легко показать, что шесть инвариантов базиса  $J_1, J_2, J_3, J_4, J_5, J_7$  можно принять в качестве алгебраически независимых. Эти шесть инвариантов и определяют надгруппу  $G'$  группы  $G$ . Для группы  $G'$  составим систему типа (3) для нахождения симметрично обусловленных структур







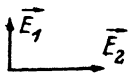

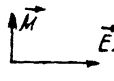
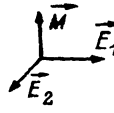
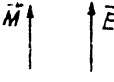


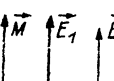
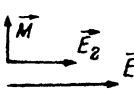
$$(\partial J_k / \partial \eta_i) \Phi_k = 0,$$

где  $J_k$  — набор алгебраически независимых инвариантов базиса  $J_1, J_2, J_3, J_4, J_5, J_7$ ;  $\eta_i$  — параметр порядка ( $E_{1y}, E_{1z}, E_{2x}, E_{2y}, E_{2z}, M_z$ ). Матрица  $\partial J_k / \partial \eta_i$  будет квадратной, так как число инвариантов равно числу независимых координат.


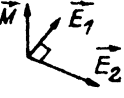
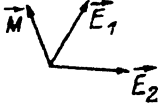
Теперь, для того чтобы перечислить все симметрично обусловленные фазы системы, инвариантной относительно группы  $G'$ , надо найти все решения, понижающие ранг матрицы первых производных  $\partial J_k / \partial \eta_i$ . Все эти решения перечислены в таблице уже в виде магнитных структур, возможных в рамках модели, инвариантной относительно группы симметрии  $G'$ . Заметим, что пары фаз 7, 8; 12, 13; 17, 18; 19, 20; 29, 30; 31, 32 являются антиизоструктурными. Есть и четверка «антиизоструктурных» фаз, стоящих под номерами 23—26. Они имеют одинаковую ориентацию, но качественно отличаются по структуре. Так, при выполнении знака равенства в неравенстве, определяющем различие между фазами 23 и 24 или 25 и 26, симметрия повышается, а такая структура перечислена под номером 11 в таблице. Если же потребовать выполнение равенства в неравенствах фазы 23 и 25 (или 24 и 26), то возникает структура повышенной симметрии, соответствующая фазе 17 (или 18).

На рис. 1, 2 для наглядности представлено несколько магнитных структур в спиновых переменных. Хотя все они выглядят одинаково приемлемыми с точки зрения здравого смысла, некоторые из них при последовательном учете симметрии не могут быть стабильными, т. е. реализоваться как равновесные. В полный базис (6), как отмечалось выше, кроме шести алгебраически независимых инвариантов, определяющих надгруппу  $G'$ , входят еще три инварианта  $J_6, J_8, J_9$ , связанных сизигиями с шестью учтенными. Из сделанного выше утверждения следует, что для группы  $G \subset G'$  все симметрично обусловленные магнитные структуры будут содержаться среди уже перечисленных в таблице магнитных структур системы, инвариантной относительно группы  $G'$ . Теперь задача состоит в том, чтобы из перечисленных решений найти фазы системы, инвариантной относительно группы  $G$ . Подставив эти решения в прямоугольную матрицу  $\partial J_k / \partial \eta_i$  ( $k = 1, \dots, 9, i = 1, \dots, 6$ ) или в уравнения состояния, найдем все симметрично обусловленные магнитные структуры системы, инвариантной относительно обменной группы  $G = C_3 \otimes SO(3) \otimes R$ . Эти магнитные структуры в таблице стоят под номерами 1, 3, 4, 5, 11, 12, 13, 15, 19, 23, 24, 25, 26, 33.

Выясним физический смысл этих упорядочений и причину отличия этих решений от результатов приведенных в [11]. Видно, что далеко не все фазы системы, инвариантной относительно группы  $G'$ , будут фазами системы, инвариантной относительно ее подгруппы  $G$ . Подробный анализ чисто антиферромагнитных фаз был приведен в работе [11]. В этой работе потенциал Ландау  $\Phi$  был выбран как функция только трех инвариантов  $\Phi(J_1, J_2, J_3)$ , т. е. ферромагнитный момент  $M$  мог возникать в этих фазах только как вынужденный за счет антиферромагнитного упорядочения или как несобственный. В результате было

1	$M = E_1 = E_2 = 0$		$S_1 = S_2 = S_3 = 0$
2	$M = 0; E_2 = 0; E_1 \neq 0$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3;  S_3 ^2 =  S_1 ^2;$ $S_1 = -(S_2 + S_3)$
3	$M = 0; E_1 = 0; E_2 \neq 0$		$S_1 = 0; S_2 = -S_3;  S_2 ^2 =  S_3 ^2$
4	$E_1 = 0; E_2 = 0; M \neq 0$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3;  S_1 ^2 =  S_2 ^2 =  S_3 ^2$
5	$M = 0; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 =  E_2 ^2$		$ S_1 ^2 =  S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_i, S_k) = \frac{1}{2} S^2$
6	$M = 0; E_1 \parallel E_2$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3; S_1 + S_2 + S_3 = 0$
7	$M = 0; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 >  E_2 ^2$		$S_1 + S_2 + S_3 = 0;  S_2 ^2 =  S_3 ^2;$ $ S_1 ^2 >  S_2 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3)$
8	$M = 0; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 <  E_2 ^2$		$S_1 + S_2 + S_3 = 0;  S_2 ^2 =  S_3 ^2;$ $ S_1 ^2 <  S_2 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3)$
9	$E_1 = 0; M \perp E_2$		$2S_1 = S_2 + S_3;  S_2 ^2 =  S_3 ^2;$ $(S_1, S_2) = (S_1, S_3)$
10	$E_2 = 0; M \perp E_1$		$S_2 = S_3;  S_1 ^2 - 2 S_2 ^2 + (S_1, S_2) = 0$
11	$M \perp E_1 \perp E_2 \perp M;  E_1 ^2 =  E_2 ^2$		$ S_1 ^2 =  S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_1, S_2) =$ $= (S_1, S_3) = (S_2, S_3)$
12	$E_2 = 0; M \parallel E_1; (ME_1) > 0$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3;  S_2 ^2 =  S_3 ^2;$ $ S_1 ^2 >  S_2 ^2$
13	$E_2 = 0; M \parallel E_1; (ME_1) < 0$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3;  S_2 ^2 =  S_3 ^2;$ $ S_1 ^2 <  S_2 ^2$
14	$M = 0; E_1 \neq 0; E_2 \neq 0$		$S_1 + S_2 + S_3 = 0$
15	$M \parallel E_1 \parallel E_2$		$S_1 \parallel S_2 \parallel S_3 = 0$

16	$E_1 \parallel E_2; E_2 \perp M$		$ S_2 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) - (S_1, S_3) = 0$ $ S_1 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) - (S_2, S_3) = 0$
17	$M \perp E_1 \perp E_2 \perp M;  E_1 ^2 >  E_2 ^2$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3);$ $ S_1 ^2 >  S_2 ^2$
18	$M \perp E_1 \perp E_2 \perp M;  E_1 ^2 <  E_2 ^2$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3);$ $ S_1 ^2 <  S_2 ^2$
19	$M \parallel E_1; E_1 \perp E_2; (M, E_1) > 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3);$ $ S_1 ^2 -  S_2 ^2 + (S_1, S_2) - (S_2, S_3) > 0$
20	$M \parallel E_1; E_1 \perp E_2; (M, E_1) < 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2; (S_1, S_2) = (S_1, S_3);$ $ S_1 ^2 -  S_2 ^2 + (S_1, S_2) - (S_2, S_3) < 0$
21	$M \parallel E_1; E_2 \neq 0$		$(S_1, [S_2 \times S_3]) = 0$
22	$M \perp E_1; M \perp E_2$		$ S_2 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) - (S_1, S_3) = 0;$ $ S_1 ^2 -  S_3 ^2 - (S_2, S_3) + (S_1, S_2) = 0$
23	$M \perp E_2; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 >  E_2 ^2;$ $(M, E_1) > 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2;  S_1 ^2 -  S_2 ^2 +$ $+(S_1, S_2) - (S_2, S_3) > 0;$ $(S_1, S_2) = (S_1, S_3);  S_1 ^2 -  S_2 ^2 >$ $> 2(S_1, S_2) - 2(S_2, S_3)$
24	$M \perp E_2; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 <  E_2 ^2;$ $(M, E_1) > 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2;  S_1 ^2 -  S_2 ^2 +$ $+(S_1, S_2) - (S_2, S_3) > 0;$ $(S_1, S_2) = (S_1, S_3);  S_1 ^2 -  S_2 ^2 <$ $< 2(S_1, S_2) - 2(S_2, S_3)$
25	$M \perp E_2; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 >  E_2 ^2;$ $(M, E_1) < 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2;  S_1 ^2 -  S_2 ^2 +$ $+(S_1, S_2) - (S_2, S_3) < 0;$ $(S_1, S_2) = (S_1, S_3);  S_1 ^2 -  S_2 ^2 >$ $> 2(S_1, S_2) - 2(S_2, S_3)$
26	$M \perp E_2; E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 <  E_2 ^2;$ $(M, E_1) < 0$		$ S_2 ^2 =  S_3 ^2;  S_1 ^2 -  S_2 ^2 +$ $+(S_1, S_2) - (S_2, S_3) < 0;$ $(S_1, S_2) = (S_1, S_3);  S_1 ^2 -  S_2 ^2 <$ $< 2(S_1, S_2) - 2(S_2, S_3)$
27	$E_1 \perp E_2; M \neq 0;  E_1 ^2 =  E_2 ^2$		$ S_3 ^2 -  S_2 ^2 + 2(S_1, S_2) -$ $- 2(S_1, S_3) = 0;$ $ S_1 ^2 -  S_2 ^2 - 2(S_1, S_3) +$ $+ 2(S_2, S_3) = 0$ $(S_1, [S_2 \times S_3]) = 0$
28	$M \neq 0; E_1 \neq 0; E_2 \neq 0;$ $([M \times E_1], E_2) = 0$		
29	$M \perp E_2; (M, E_1) > 0$		$ S_2 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) -$ $-(S_1, S_3) = 0$ $ S_1 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) -$ $-(S_2, S_3) > 0$

30	$M \perp E_2; (M, E_1) < 0$		$ S_2 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) -$ $-(S_1, S_3) = 0;$ $ S_1 ^2 -  S_3 ^2 + (S_1, S_2) -$ $-(S_2, S_3) < 0$
31	$E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 >  E_2 ^2$		$ S_3 ^2 -  S_2 ^2 + 2(S_1, S_2) -$ $-2(S_1, S_3) = 0;$ $ S_1 ^2 -  S_2 ^2 - 2(S_1, S_3) +$ $+2(S_2, S_3) > 0$
32	$E_1 \perp E_2;  E_1 ^2 <  E_2 ^2$		$ S_3 ^2 -  S_2 ^2 + 2(S_1, S_2) -$ $-2(S_1, S_3) = 0;$ $ S_1 ^2 -  S_2 ^2 - 2(S_1, S_3) +$ $+2(S_2, S_3) < 0$
33	$M \neq 0; E_1 \neq 0; E_2 \neq 0$		$S_1 \neq 0; S_2 \neq 0; S_3 \neq 0$

получено восемь различных магнитных структур. Все эти структуры входят в полный набор структур, полученных для группы  $G = C_3 \otimes SO(3) \otimes R$ . В таблице они перечислены под номерами 1, 3, 5, 12, 15, 19, 23, 33. Дополнительные фазы появляются из-за того, что в нашей постановке задачи вектор ферромагнитного момента  $M$  может возникать в результате упорядочения и как собственный, а не только как вынужденный антиферромагнитным упорядочением. Фаза 4 является фазой с собственным ферромагнетизмом, фаза 11 — фаза со скрытым антиферромагнетизмом [17]. Фазы 24, 25, 26 являются антиизоструктурными фазе 23. Такое ветвление решений обусловлено появлением независимого (собственного) ферромагнитного упорядочения, описываемого вектором  $M$  обменного происхождения. Число фаз при этом определяется возможными взаимными ориентациями всех трех векторов и соотношениями между их величинами.

Интересно перечислить и те стационарные магнитные структуры, которые предсказывает теория, оперирующая потенциалом четвертой степени. В этом случае не так просто определить надгруппу  $G'$  группы  $G$ . Кроме этого, нужно иметь в виду, что не все фазы, которые определяются при классификации по симметрии относительно  $G'$ , могут существовать как стабильные из-за того, что сам потенциал имеет низкую степень [20]. Прекрасный пример фаз, допустимых согласно симметричной классификации, дала дискуссия Гинзбурга с Девонширом [21, 22].

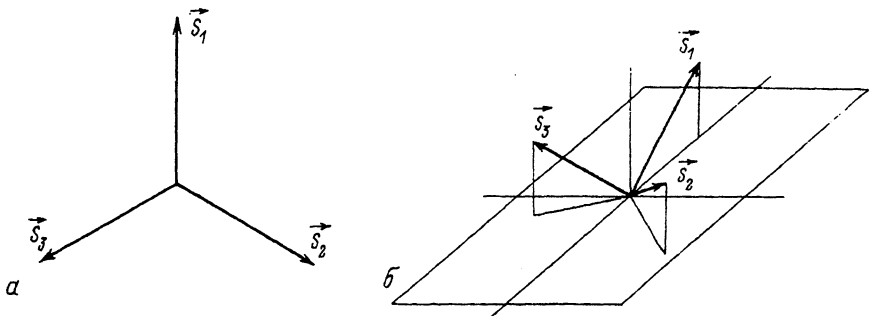


Рис. 1. Магнитные структуры в спиновых переменных, соответствующие фазам 5 (а) и 11 (б) из таблицы.



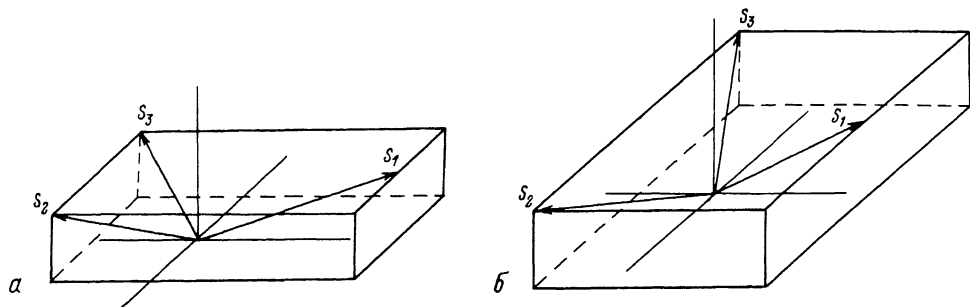


Рис. 2. Антиизоструктурные фазы 17 (а) и 18 (б) из таблицы в спиновых переменных.

Эти фазы не реализуются как равновесные, хотя и предсказываются теорией, не учитывающей алгебраически зависимых инвариантов, входящих в целый рациональный базис инвариантов.

Предлагаемая методика нахождения магнитных структур путем понижения ранга матрицы  $\partial J_k / \partial \eta_j$  и в случае потенциала четвертой степени позволяет решить задачу классификации, обходя вопрос о точном определении группы симметрии потенциала  $G''$ .

В рассматриваемом примере трехподрешеточного антиферромагнетика, если написать потенциал только до четвертой степени

$$\Phi = a_1 J_1 + a_2 J_1^2 + b J_2 + c_1 J_4 + c_2 J_4^2 + d J_5 + k J_6, \quad (7)$$

все возможные (в том числе и принципиально лабильные из-за низкой степени потенциала модели (7)) решения уравнений состояния описывают пятнадцать магнитных структур. Кроме парамагнитной фазы (1.  $M = 0$ ;  $E_1 = 0$ ;  $E_2 = 0$ ), ими будут

2.  $M \parallel E_1$ ;  $E_2 \neq 0$ ,
3.  $M \parallel E_1 \parallel E_2$ ,
4.  $M \parallel E_1$ ;  $E_2 = 0$ ,
5.  $M \parallel E_2$ ;  $E_1 = 0$ ,
6.  $M \neq 0$ ;  $E_1 = E_2 = 0$ ,
7.  $E_1 \neq 0$ ;  $E_2 = M = 0$ ,
8.  $E_2 = 0$ ;  $E_1 = M = 0$ ,
9.  $M \parallel E_1$ ;  $E_2 \perp E_1$ ,
10.  $M = 0$ ;  $E_1 \perp E_2$ ,
11.  $M = 0$ ;  $E_1 \perp E_2$ ;  $|E_1|^2 = |E_2|^2$ ,
12.  $E_1 \parallel E_2$ ;  $M \perp E_1$ ,
13.  $E_2 = 0$ ;  $M \neq 0$ ;  $E_1 \neq 0$ ,
14.  $M \perp E_1$ ;  $M \perp E_2$ ,
15.  $M \perp E_1 \perp E_2$ ;  $M \perp E_2$ ;  $|E_1|^2 = |E_2|^2$ .

Как видим, только семь из них, а именно: 1, 3, 6, 8, 9, 11, 15 присутствуют среди магнитных структур, полученных для группы  $G = C_{3v} \otimes SO(3) \otimes R$ , т. е. только для семи фаз из пятнадцати допустимых теорией возможна их физическая реализация. В таблице эти фазы стоят под номерами 1, 15, 4, 3, 19, 5 и 11 соответственно. Остальные 8 структур, разрешенных по симметрии (7), запрещены как стабильные симметрией физической задачи. Кроме этого, имеем еще семь фаз, которые, согласно симметрии физической задачи, могут реализоваться в природе, но запрещены даже как метастабильные согласно (7). Это связано с

тем, что в потенциале модели (7) нет инвариантов степени более чем четвертой, которые разделяют антиизоструктурные фазы.

В заключение заметим, что приведенный симметричный анализ проблемы ставит под сомнение физический смысл всех вычислений относительно симметрии структуры и физических свойств конденсата при  $d$ - и  $p$ -спаривании электронов [4,5,23], поскольку теория, построенная в этих работах, базируется на потенциале четвертой степени.

#### Список литературы

- [1] Ларионов Л. Н., Гейченко В. В., Фальченко Ф. М. Диффузионные процессы в упорядоченных сплавах, Киев: Наукова Думка, 1970. 240 с.
- [2] Смоленский Г. А., Боков В. А., Исупов В. А. и др. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Л.: Наука, 1971. 475 с.
- [3] Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.
- [4] Mermin N. D., Stare G. // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. P. 1135—1138.
- [5] Steward G. R. // Rev. Mod. Phys. 1984. V. 56. P. 756—764.
- [6] Боровик-Романов А. С. Антиферромагнетизм. Антиферромагнетизм и ферриты. Сер. физ.-мат. наук. Т. 4. М., ВИНТИ, 1962. 214 с.
- [7] Ма Ш. Современная теория критических явлений., М.: Мир, 1980. 302 с.
- [8] Бульбич А. А., Гуфан Ю. М. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 6. С. 121—129.
- [9] Birman J. L. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 17. N 4. P. 1216—1219.
- [10] Гуфан Ю. М. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 1. С. 225—230.
- [11] Гуфан Ю. М., Кутын Е. И., Лорман В. Л., Прохоров А. М., Рудашевский Е. Г. // Письма в ЖЭТФ. Т. 46. № 6. С. 228—230.
- [12] Прохоров А. М., Гуфан Ю. М., Рудашевский Е. Г., Широков В. Б. // ДАН СССР. 1988. Т. 302. № 3. С. 604—607.
- [13] Спенсер Э. Теория инвариантов. М.: Мир, 1974. 150 с.
- [14] Гуфан Ю. М., Сахненко В. П. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 6. С. 1915—1922.
- [15] Гуфан Ю. М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. 304 с.
- [16] Недлин Г. М. // ФТТ. 1964. Т. 6. № 10. С. 2708—2711.
- [17] Дзялошинский И. Е., Манько В. И. // ЖЭТФ. 1964. Т. 46. С. 1352—1361.
- [18] Kittel Ch. // Phys. Rev. 1952. V. 82. N 4. P. 565—581.
- [19] Oles A., Kajzar F., Kucab M., Sikora W. Magnetic Structures determined by neutron diffraction. Warszawa, Krakow, 1976. 427 p.
- [20] Гранкина А. И., Грудский И. М., Гуфан Ю. М. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 11. С. 3456—3459.
- [21] Гинзбург В. Л. // ЖЭТФ. 1945. Т. 15. № 2. С. 739—749.
- [22] Devonshire A. F. // Philos. Mag. 1949. V. 40. N 3. P. 1040—1063.
- [23] Минеев В. П. // УФН. 1983. Т. 139. № 2. С. 303—332.

Северо-Кавказский научный центр  
высшей школы

Поступило в Редакцию  
28 мая 1991 г.