

Магнитная спираль в MnO_2

О. В. Ковалев

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

Статья поступила в редакцию 8 сентября 1998 г.

В работе преследуются две цели: продемонстрировать на практике принцип согласования базисов представлений и исследовать возможные магнитные несоизмеримые структуры на основе ранее развитой теории индуцированных представлений. Метод и результаты существенно отличаются от тех, которые были получены с использованием инвариантов Лифшица. Обнаружен эффект сглаживания обменного энергетического спектра при включении в рассмотрение необменного взаимодействия. Выяснена роль дипольного взаимодействия в ориентации магнитной спирали.

В роботі мається на меті дві цілі: продемонструвати на практиці принцип узгодження базисів зображень та дослідити можливі магнітні неспільномірні структури на основі раніше розробленої теорії індукованих зображень. Метод і результати суттєво відрізняються від тих, які було одержано з використанням інваріантів Лифшица. Виявлено ефект згладжування обмінного енергетичного спектра при включенні в розгляд необмінної взаємодії. З'ясовано роль дипольної взаємодії в орієнтації магнітної спиралі.

PACS: 75.10.Lp, 75.10.Nk

Проиллюстрируем на примере общие результаты работы [1] и тем самым достигнем лучшего понимания проблем, которые возникают в методе индуцированных представлений при описании энергетического спектра, и исследуем несоизмеримую магнитную структуру на основе работ [1–3] и более ранних работ автора (их список приведен в [3]). Предложено правило согласования базисных векторов (БВ) неприводимых копредставлений (НКП) в симметричных точках, получены и исследованы коэффициенты при инвариантных комбинациях (ИК), выяснена роль дипольного взаимодействия, введено понятие «сглаживания» энергетического спектра. Кристалл MnO_2 выбран, в частности, также с целью сравнить методику автора с методикой в работе [4]. Результаты существенно различаются. В [4] они основаны на принципиальной ошибке: существование несоизмеримой структуры связывается с инвариантом Лифшица, который в действительности равен нулю в точке \mathbf{k}_s , характеризующей спираль.

Далее используются сведения и обозначения из [1–3].

1. Рассмотрим данные о кристалле и приведем представления к нужному для расчетов виду. Ферродовская группа $G = D_{4h}^{14} = P4_2/mnm$ атомы Mn

в нулевой ячейке занимают позиции (1,0) и (2,0) с координатами $\mathbf{r}_1 = (0, \tau, \tau/2)$ и $\mathbf{r}_2 = (\tau, 0, 3\tau/2)$. Рассматриваются векторы (точки) $\mathbf{k}_0 = 0$, $\mathbf{k}_1 = (0, 0, k)$ и $\mathbf{k}_{19} = b_3/2$. Связанные с ними неприводимые представления (НП) обозначаем символами T, τ и t , а НКП — символами D, δ и d . Поскольку все перечисленные векторы содержат лишь Z -компоненты, далее опускаем X - и Y -компоненты векторов \mathbf{k} и трансляций $\boldsymbol{\alpha}$ в элементах $g = (\boldsymbol{\alpha}/h)$. Основные элементы группы G есть h_i и $(0, 0, \tau/h_j)$, где $i = 1, \dots, 4, 37, \dots, 40$ и $j = 13, \dots, 16, 25, \dots, 28$. Локальная группа $G(1,0) = mmm$ первой позиции содержит элементы g_i с $i = 1, 4, 37, 40, 13, 16, 25, 28$. Группа $H(\mathbf{k}_1)$ содержит повороты с номерами 1, 14, 4, 15, 26, 37, 27, 40, $G(\mathbf{k}_0) = G(\mathbf{k}_{19}) = G$. Все рассматриваемые далее НП порождают НКП типа a . Об НКП говорится тогда, когда подразумевается антиунитарная симметризация базисов (формула (19) в [3]).

Данные об индуцированных представлениях (ИП) возьмем из [3]. В обменном приближении следует использовать представления, которые индуцируются единичным представлением Γ_1 группы $G(1,0)$. А именно, $\Gamma_1 \rightarrow T^1 + T^7$; $\tau^1 + \tau^4$; t^3 соответственно для \mathbf{k}_0 , \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_{19} . Если речь идет о всех взаимодействиях (магнитный спектр), то

следует индуцировать все те НП группы $G(1,0)$, по которым преобразуются компоненты магнитного момента атома в позиции $(1,0)$. Для Z -компоненты имеем $G7 \rightarrow T^3 + T^5, \tau^2 + \tau^3, t^4$. Для компонент в XY -плоскости $G3 \rightarrow T^9, \tau^5, t^1$ и $G5 \rightarrow T^9, \tau^5, t^2$.

Таблица 1 — таблица вхождений по [1], разбитая на две части для обменных и магнитных представлений (строки, содержащие только нули, опущены, указаны номера НП, согласно [3]).

Таблица 1

τ	1	7	3	τ	3	5	9	1	2	4
1	1	0	1	2	1	0	0	0	0	1
4	0	1	1	3	0	1	0	0	0	1
				5	0	0	1	1	1	0

Во избежание недоразумений и забегая несколько вперед, сделаем следующее замечание: по НП $G3$ и $G5$ преобразуются не орты e_x и e_y , а орты e_1 и e_2 , направленные вдоль осей поворотов h_{13} и h_{16} . На первый взгляд, кажется, что эволюция БВ при движении от точки k_0 к точке k_{19} должна происходить двумя путями: 1) БВ НП $T^9 \rightarrow$ БВ НП $\tau^5 \rightarrow$ БВ НП t^1 ; 2) БВ НП $T^9 \rightarrow$ БВ НП $\tau^5 \rightarrow$ БВ НП t^2 . Снабдив НП T^9 и τ^5 дополнительными индексами 1 и 2, следовало бы это записать как $T^{91} \rightarrow \tau^{51} \rightarrow t^1$; $T^{92} \rightarrow \tau^{52} \rightarrow t^2$, и вопрос об эволюции базисов решался бы однозначно. Однако приведенные рассуждения (они, к сожалению, иногда встречаются в литературе) являются ошибочными, и вот почему. На всей линии k_1 , кроме единственной точки k_{19} , существует смешанная ИК второго порядка, в которую входят магнитные симметризованные координаты $m(5ik)$ при БВ двух одинаковых НП τ^5 (формула (1) в [2]) независимо от того, как выбраны базисы этих двух НП τ^5 . Истинные базисы на линии k_1 определяются не на основании соображений симметрии, а путем решения секулярного уравнения при приведении квадратичной формы к сумме квадратов. Смешивание базисов двух одинаковых НП начинается в точке k_0 , непрерывно продолжается вдоль линии k_1 , и лишь в точке k_{19} базисы определяются на основании требования о согласовании базисов в этой точке. В любой подобной задаче об энергетическом спектре (электронном, фононном, магнитном, экситонном) в точках согласования базисов осуществляется контроль вычислений, что особенно важно в приближенных расчетах.

Мы считаем, что предлагаемая методика может быть использована читателем и при решении других проблем. Поэтому приведем необходимый минимум табличного материала, тем более что дан-

ные [3] следует частично изменить. Сначала преобразуем матрицы НКП. Исходим из таблиц НКП T147, T119 и T159 в [3] для точек k_0, k_1 и k_{19} . Двумерные матрицы M в упомянутых таблицах заменяем матрицами

$$A_n^+ \hat{M}(h) A_n, A_n^+ M(Kg) A_n^* \quad (M = D, \delta, d),$$

где K — оператор комплексного сопряжения. Мы преследуем две цели. Во-первых, приводим T^9 и τ^5 к вещественному виду (это необязательное преобразование, но оно облегчает вычисления). Во-вторых, и это главное, в соответствии с рекомендациями в [1] получаем приведенный вид для ограничений $\hat{d}^3 \downarrow$ и $\hat{d}^4 \downarrow$ НКП \hat{d}^3 и \hat{d}^4 на подгруппу $G(k_1)$. Матрицы \hat{d}^1 и \hat{d}^2 преобразуются для того, чтобы ограничения этих НКП на $G(k_1)$ совпали с матрицам НКП δ^5 . Новые матрицы НКП для порождающих элементов и унитарные матрицы A даны в табл. 2, $\sqrt{2} \gamma_0 = 1, \sqrt{2} \gamma_1 = \exp(i\pi/4)$. В табл. 3 приведены правила преобразования позиций, указаны лишь Z -компоненты. Таблицы нужны для построения БВ и для выяснения соотношений между константами Φ обменного взаимодействия.

Таблица 2

	h_{14}	h_{26}	h_{25}	Kg_{25}	A_n
$\hat{\delta}^5, T^5$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\gamma_0 \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}$
\hat{d}^1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\gamma_1 \begin{pmatrix} 1 & i \\ -1 & i \end{pmatrix}$
\hat{d}^2	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\gamma_1^* \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}$
\hat{d}^3	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$
\hat{d}^4	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Таблица 3

p	$g_{1,4,37,40}$	$g_{14,15,26,27}$	$g_{2,3,38,39}$	$g_{13,16,25,28}$
1	r_1	r_2	$r_2 - a_3$	r_1
2	r_2	$r_1 + a_3$	$r_1 - a_3$	$r_2 - a_3$

Для вычисления магнитного энергетического спектра используем метод из работы [2]. Напомним основные моменты. Магнитную плотность записываем в трех видах:

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

$\alpha = x, y, z$; \mathbf{e}_α — магнитные орты; p — номер позиции в ячейке; $\varphi(p \mathbf{a})$ — функция координат, локализованная в позиции (p, \mathbf{a}) . Вторая сумма — это разложение $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ по БВ φ НКП, содержащихся в перестановочном копредставлении $P = I(\Gamma 1)$. При этом F — сорт эквивалентности (номер НКП в их полной таблице); j — номер НКП сорта F в P ; i — номер БВ малого НКП группы $G(\mathbf{k})$. Суммирование производится по всем возможным значениям индексов F, j, i , область которых обусловлена составом P . При отсутствии каких-либо ограничений, т.е. при произвольном векторе $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, во второй и третьей суммах имеются в виду все векторы \mathbf{k} из зоны Бриллюэна. Однако в нашей задаче о несоизмеримой структуре (иногда будем называть ее просто спиральной) в упомянутых суммах фигурируют всего два вектора: \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$. В третьей сумме нет разделения $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ на компоненты; $\psi(F j i k)$ — БВ магнитного копредставления $D_m = P \times V$, по V преобразуются орты \mathbf{e}_α . В третьей сумме набор индексов F, j, i определяется составом копредставления $D_m = I(\Gamma m)$, где Γm — копредставление локальной группы $G(1, 0)$, по которому преобразуются орты \mathbf{e}_α . В рассматриваемом кристалле $\Gamma m = \Gamma 3 + \Gamma 5 + \Gamma 7$. В дальнейшем случаи $\Gamma m x y = \Gamma 3 + \Gamma 5$ и $\Gamma m z = \Gamma 7$ рассматриваются по отдельности. Первый случай соответствует плотности $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \perp Z$, второй — $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \parallel Z$.

Переход в (1) от одной суммы к другой производится с помощью соотношений

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

$$\varphi(F j i k) = \sum R_3(p/F j i) \varphi(p \mathbf{k}),$$

$$\varphi(\alpha p \mathbf{k}) = \mathbf{e}_\alpha \varphi(p \mathbf{k}), \quad (3)$$

$$\psi(F j i k) = \sum R_{21}(\alpha p/F j i) \psi(\alpha p \mathbf{k}),$$

$$\varepsilon(p) = \exp i \mathbf{k} [(\mathbf{r}(p, 0) - \alpha_0/2)], \quad (4)$$

α_0 — трансляция в антиунитарном элементе $a_0 = K g_0 = K(\alpha_0/h_0)$; ниже $g_0 = g_{25}$. Благодаря множителю ε матрицы R_3, R_{21} не зависят аналитически от вектора \mathbf{k} .

Величины $\mu(\alpha p \mathbf{a})$ можно назвать локальными магнитными координатами, величины $\mu(\alpha F j i k)$ и $m(F j i k)$ — симметризованными. Если в $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ входят лишь БВ ψ с фиксированными значениями F и \mathbf{K} , то энергия имеет вид

$$H(F \mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum \varphi(j i/j' i'; \mathbf{k}) m(F j i k)^* m(F j' i' k), \quad (5)$$

$$\varphi(j i/j' i') = \varphi(j 1/j' 1) =$$

$$= \sum D(\alpha p/\alpha' p') R_{21}(\alpha p/j 1)^* R_{21}(\alpha' p'/j' 1), \quad (6)$$

$$D(\dots) = \varepsilon(p)^* \varepsilon(p') \sum \Phi(\alpha p \mathbf{a}/\alpha' p' 0) \exp(-i \mathbf{k} \mathbf{a}), \quad (7)$$

$$\varphi = \varphi^+, \quad D = D^+, \quad D(-\mathbf{k}) = D(\mathbf{k})^*, \quad (8)$$

$$\varphi(j i/j' i') = 0 \text{ при } i \neq i'.$$

В обменном приближении, т.е. при $\alpha = \alpha'$, $\Phi(\alpha p \mathbf{a}/\alpha' p' \mathbf{a}') = \varphi(p \mathbf{a}/p' \mathbf{a}')$

$$H_e(F \mathbf{K}) = \frac{1}{2} \sum \varphi_e(j 1/j' 1) \sum_{\alpha, i} \mu(\alpha F j i k)^* \mu(\alpha F j' i' k), \quad (9)$$

$$\varphi_e(\dots) = \sum D_e(p/p') R_3(p/j 1)^* R_3(p'/j' 1), \quad (10)$$

$$D_e(\dots) = \varepsilon(p)^* \varepsilon(p') \sum \Phi(p \mathbf{a}/p' 0) \exp(-i \mathbf{k} \mathbf{a}). \quad (11)$$

Предположим, что фазовый магнитный переход связан с некоторой одной звездой \mathbf{K} и одним сортом F эквивалентности. Определив путем минимизации термодинамического потенциала значения вторых сумм в (9), следует уточнить результат за счет включения в рассмотрение необменных взаимодействий.

2. Обратимся к нашему конкретному случаю. Функции $\varphi(p \mathbf{k})$ суть

$$\varphi(1 \mathbf{k}) = n^{-1} \sum \varphi(1 \mathbf{a}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{a}), \quad (12)$$

$$\varphi(2 \mathbf{k}) = n^{-1} \mu \sum \varphi(2 \mathbf{a}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{a}),$$

где $\varepsilon(1) = 1$, $\varepsilon(2) = \mu = \exp(i \mathbf{k} \tau)$; БВ $\varphi'(F j i k)$ НП τ^1 и τ^4 получим по формулам

$$\varphi'(111 \mathbf{k}) \sim \sum t^3 (g_{11}^*)^* g \varphi(1 \mathbf{k}), \quad (13)$$

$$\varphi'(411 \mathbf{k}) \sim \sum t^3 (g_{21}^*)^* g \varphi(1 \mathbf{k}),$$

где $g \in G(\mathbf{k}_{10})$, $F = 1$ и 4 , $j = i = 1$. Применяется соотношение $g \varphi(p \mathbf{a}) = \varphi[g(\mathbf{r}_p + \mathbf{a})]$. После антиунитарной симметризации и нормировки приходим к БВ НКП δ^1 и δ^4 :

$$\sqrt{2} \varphi(111 \mathbf{k}) = \varphi(2 \mathbf{k}) + \varphi(1 \mathbf{k}), \quad (14)$$

$$\sqrt{2} \varphi(411 \mathbf{k}) = \varphi(2 \mathbf{k}) - \varphi(1 \mathbf{k}).$$

Из (14) следует значение матрицы R_3 :

$$R_3(p/F j i; \mathbf{k}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

В формулах (13) содержится предложение автора для случая индуцированных представлений, а именно, строить БВ НП и НКП в несимметричной точке точно по тем правилам, по которым строятся БВ НП и НКП в симметричной точке. При этом принимаются во внимание соотношения совместности (табл. 1). Этим достигается согласование базисов и правильная физическая картина. Конкретные правила (матрицы R) в общем случае могут оказаться различными для окрестностей точек \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_{19} .

По формулам (17)–(19) из [2] находим ветви обменной энергии. В нашем случае $j = j' = 1$, $i = i' = 1$, так что первая сумма в (17) сводится к одному слагаемому. Вторую записанную там сумму по $\alpha = x, y, z$ обозначим через $c_1 c_1^*$ для $F = 1$ и через $c_4 c_4^*$ для $F = 4$. Окончательно получим

$$H_e(1\mathbf{K}) = \varphi_1 c_1 c_1^*, \quad H_e(4\mathbf{K}) = \varphi_4 c_4 c_4^*, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{1,4} = \sum \Phi(1\mathbf{a}/10) \cos \mathbf{k}\mathbf{a} \pm \\ \pm \Phi(2\mathbf{a}/10) \cos \mathbf{k}(\mathbf{a} + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3). \end{aligned} \quad (16)$$

Напоминаем, что $\Phi(p\mathbf{a}/p'0)$ — величина обменного взаимодействия между атомами в позициях (p, \mathbf{a}) и $(p', 0)$. Используются соотношения

$$\begin{aligned} \Phi(p\mathbf{a}/p'\mathbf{a}') = \Phi(p'\mathbf{a}'/p\mathbf{a}), \\ \Phi(\mathbf{r}_p + \mathbf{a}/\mathbf{r}_{p'} + \mathbf{a}') = \Phi[g(\mathbf{r}_p + \mathbf{a})/g(\mathbf{r}_{p'} + \mathbf{a}')] \end{aligned} \quad (17)$$

Проанализируем (15), (16): функции φ_1 и φ_4 вектора \mathbf{k} — ветви энергетического спектра, так что их зависимость от \mathbf{k} может быть показана графически, если придать какие-либо значения константам Φ .

а. $\varphi_1(\mathbf{k}_{19}) = \varphi_4(\mathbf{k}_{19})$, т.е. две ветви спектра пересекаются в точке \mathbf{k}_{19} . Это является наглядной иллюстрацией соотношений совместности. Кроме того, видно, что в \mathbf{k}_{19} величина энергии определяется лишь взаимодействием между атомами в позициях $(1, \mathbf{a})$.

б. Звезда \mathbf{K}_1 содержит два луча: \mathbf{k}_1 и $-\mathbf{k}_1$. Как можно проверить, справедливы равенства

$$\psi(111, -\mathbf{k}_{19}) = -\psi(411, \mathbf{k}_{19}),$$

$$\psi(411, -\mathbf{k}_{19}) = -\psi(111, \mathbf{k}_{19}).$$

Они объясняют результат работы [1]: в симметричных точках возникает линейная зависимость между БВ соприкасающихся полных НП (НКП).

в. Из (15) и (16) следует, что

$$\frac{\partial}{\partial k} \varphi_1(\mathbf{k}_0) = \frac{\partial}{\partial k} \varphi_4(\mathbf{k}_0) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial k} \varphi_1(\mathbf{k}_{19}) = -\frac{\partial}{\partial k} \varphi_4(\mathbf{k}_{19}) \neq 0.$$

В точке \mathbf{k}_0 обе ветви имеют экстремумы, в точке \mathbf{k}_{19} экстремумы отсутствуют, т.е. не может существовать магнитная структура, характеризуемая вектором \mathbf{k}_{19} . По-видимому, этот факт и то, что в $\varphi_1(\mathbf{k}_{19})$ и $\varphi_4(\mathbf{k}_{19})$ отсутствуют взаимодействия между атомами в позициях $(1, \mathbf{a})$ и $(2, \mathbf{a}')$, являются тесно связанными. Данный вопрос мы, однако, не исследовали.

г. Существование спиральной структуры определяется значениями величин $\Phi(p\mathbf{a}/p'0)$, а возможная магнитная структура в обменном приближении описывается либо НКП δ^1 , либо НКП δ^4 , но не одновременно этими двумя НКП; δ^1 -спираль при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_0$ вырождается в ферромагнетизм, эту спираль назовем ферромагнитной. Аналогично δ^4 -спираль назовем антиферромагнитной, так как при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_0$ справедливы равенства $\mu(1, \mathbf{a}) = -\mu(2, \mathbf{a}')$.

д. Предположим для определенности, что $\varphi_1 < \varphi_4$ во всем интервале значений вектора \mathbf{k}_1 , кроме точки \mathbf{k}_{19} . Если в (16) принимается во внимание небольшое число позиций, то на кривой φ_1 может не быть минимума при $k > 0$. Поэтому отсутствие минимума в точке \mathbf{k}_{19} вовсе не означает, что спираль существует. Существование спирали является следствием сравнительно сильного взаимодействия далеко отстоящих атомов. В случае нескольких минимумов спирали соответствует абсолютный минимум. Возможна ситуация, когда при какой-то температуре в некоторой точке \mathbf{k}_{s1} имеется абсолютный минимум, в другой точке \mathbf{k}_{s2} — относительный. Однако при другой температуре ситуация может оказаться обратной. Соответственно можно говорить о скачкообразном изменении параметра \mathbf{k}_s спирали, фазовом переходе первого рода, метастабильных состояниях, доменной спиральной структуре и т.п. Разумеется, возможно и плавное изменение параметра спирали при варьировании внешних параметров. Оказывается, почти все зависит от величин Φ .

Отметим, что для получения параметра \mathbf{k}_s спирали следует в действительности минимизировать не энергию, а термодинамический потенциал. Формально это означает, что нужно, по меньшей мере, минимизировать выражение, содержащее ИК высокого порядка. В рассматриваемом обменном приближении речь должна идти об ИК, составленных из величин c_1 (или c_4), записанных в (4). Выполняя построение ИК по принятой здесь

методике, мы получаем коэффициенты при ИК в виде сумм по \mathbf{a} выражений, линейно содержащих косинусы и, возможно, синусы $\mathbf{k}\mathbf{a}$ и $\mathbf{k}(\mathbf{a} + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3)$. Задача становится практически неразрешимой. Однако намного ниже температуры магнитного упорядочения магнитные моменты атомов близки к возможным предельным значениям и допустимо исключение минимизации по s . Роль ИК высоко-го порядка формально сведется к перенормировке величин Φ в сумме (16), причем более заметной для больших векторов \mathbf{a} . Следовательно, ниже температуры магнитного упорядочения возникает дополнительная тенденция к изменению вектора \mathbf{k}_s . Возможно, это объясняет тот факт, что во многих кристаллах спираль появляется ниже температуры фазового перехода из парамагнитного состояния в магнитное.

е). В принципе можно допустить пересечение кривых φ_1 и φ_4 . Нетрудно выяснить, к каким ситуациям это может привести.

3. Обратимся к общему магнитному спектру. Магнитная ХУ-плотность на линии \mathbf{k}_1 преобразуется по НКП δ^{51} и δ^{52} . Их БВ являются линейными комбинациями функций

$$\begin{aligned} \varphi(x1) &= \mathbf{e}_x\varphi(1, \mathbf{k}), \quad \varphi(x2) = \mathbf{e}_x\varphi(2, \mathbf{k}), \\ \varphi(y1) &= \mathbf{e}_y\varphi(1, \mathbf{k}), \quad \varphi(y2) = \mathbf{e}_y\varphi(2, \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (19)$$

Эти линейные комбинации в точке \mathbf{k}_{19} и точке \mathbf{k}_s , характеризующей спираль, целесообразно выбрать по-разному.

В \mathbf{k}_{19} потребуем согласования базисов. Пусть в \mathbf{k}_{19} БВ НКП δ^{51} превращаются в БВ НКП d^1 , а БВ НКП δ^{52} — в БВ НКП d^2 . Действуем следующим образом:

оператор проектирования на пространство НКП d^1 применяем к какой-либо из функций (19), взятой при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{19}$. Используются матрицы d^1 из табл. 2, суммирование проводится по основным элементам группы $G(\mathbf{k}_{19})$. Полученные БВ антиунитарно симметризуем и нормируем. Аналогично определяем БВ НКП d^2 ;

найденную матрицу $R_{21}(\alpha p/Fji; \mathbf{k}_{19})$ непосредственно применяем для записи БВ НКП δ^{51} и δ^{52} .

Заметим, что в связи с тем, что в работе [2] в формулу (2) был введен множитель $\epsilon(p)$, элементы матриц R являются просто числами, но не функциями вектора \mathbf{k} . К этим числам предъявляются только два требования: R — унитарная матрица; матрица R обеспечивает переход к БВ соответствующих НКП.

Согласованные в \mathbf{k}_{19} БВ НКП δ^{51} и δ^{52} имеют вид

$$\begin{aligned} 2\psi(511)_{19} &= \varphi(x1) + \varphi(x2) - \varphi(y1) + \varphi(y2), \\ 2\psi(512)_{19} &= \varphi(x1) - \varphi(x2) - \varphi(y1) - \varphi(y2), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} 2\psi(521)_{19} &= \varphi(x1) + \varphi(x2) + \varphi(y1) - \varphi(y2), \\ 2\psi(522)_{19} &= \varphi(x2) - \varphi(x1) - \varphi(y1) - \varphi(y2). \end{aligned} \quad (21)$$

Выбор согласованных базисов имеет важную особенность. Поскольку предельные БВ НКП δ^{51} и δ^{52} осуществляют неэквивалентные НКП d^1 и d^2 , коэффициент при смешанной ИК в точке \mathbf{k}_{19} должен обращаться в нуль. Но если взяты несогласованные базисы, то указанный коэффициент не обращается в нуль и для получения ветвей спектра в точке \mathbf{k}_{19} необходимо решать секулярное уравнение.

В окрестностях точек \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_s выберем базисы в соответствии с прямыми произведениями $\tau^{51} = \tau^1 \times V^1$ и $\tau^{52} = \tau^4 \times V^1$, где V^1 — представление, по которому преобразуются \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y :

$$\sqrt{2} \psi(511) = \varphi(x1) + \varphi(x2), \quad (22)$$

$$\sqrt{2} \psi(512) = -\varphi(y1) - \varphi(y2);$$

$$\sqrt{2} \psi(521) = \varphi(y2) - \varphi(y1), \quad (23)$$

$$\sqrt{2} \psi(522) = -\varphi(x2) + \varphi(x1).$$

При этом мы позаботились о том, чтобы матрицы НКП имели такой же вид, как в табл. 2.

Разумеется, результат вычисления энергетического спектра не зависит от выбора базисов НКП δ^{51} и δ^{52} . Объясним, почему в некоторых случаях выбор (22), (23) оказывается предпочтительным. Обратимся к общим формулам (12)-(15) из [2]. Поскольку во все выражения вектор \mathbf{k} входит через множители вида $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, то переход от вектора \mathbf{k} к вектору $-\mathbf{k}$ эквивалентен операции комплексного сопряжения. В рассматриваемом случае звезда содержит только векторы \mathbf{k}_1 и $-\mathbf{k}_1$. Выражение для энергии H_{xy} , связанной с ХУ-плотностью, приобретает вид

$$H_{xy} = \varphi_{11}i_{11} + \varphi_{12}i_{12} + \varphi_{21}i_{21} + \varphi_{22}i_{22}, \quad (24)$$

$$\varphi_{jj'} = \varphi(j1/j'1), \quad i_{jj'} = \sum m(jik)^* m(jik). \quad (25)$$

Истинные ветви спектра соответствуют корням λ_1 и λ_2 секулярного уравнения, которое возникает при приведении H_{xy} к сумме квадратов. Тем самым определяются и базисы НКП δ^{51} и δ^{52} , принадлежащие корням λ_1 и λ_2 для конкретного значения вектора \mathbf{k}_1 . При выборе (22), (23) коэффициенты φ_{12} и φ_{21} содержат только необменные взаимодействия, а коэффициенты φ_{11} и

φ_{22} включают в себя также обменные взаимодействия. Поэтому в точке \mathbf{k}_0 и в точках \mathbf{k}_s , соответствующих спирали,

$$|\varphi_{11} - \varphi_{22}| \approx |\varphi_1 - \varphi_4| \gg |\varphi_{12}|.$$

Если для определенности предположить, что $\varphi_{11} < \varphi_{22}$ и $\lambda_1 < \lambda_2$, то в упомянутых точках $\lambda_1 \approx \varphi_1$, $\lambda_2 \approx \varphi_4$. Включение необменной энергии приводит лишь к малому сдвигу уровней. Истинные базисы НКП δ^{51} и δ^{52} , соответствующие корням λ_1 и λ_2 , незначительно отличаются от базисов (22) и (23).

Приведенное выше неравенство не выполняется лишь вблизи точки \mathbf{k}_{19} и точек, в которых ветви φ_1 и φ_4 пересекаются. Здесь обменное взаимодействие приводит к своеобразному эффекту «сглаживания» уровней и к существенной перестройке базисов НКП.

При выборе (20), (21) имеем

$$\varphi_{11,22} = \sum [\Phi(x1\mathbf{a}/x10) \mp \Phi(y1\mathbf{a}/x10)] \cos \mathbf{k}\mathbf{a}, \quad (26)$$

$$\varphi_{12} = \varphi_{21} = \sum \Phi(x2\mathbf{a}/x10) \cos \mathbf{k}(\mathbf{a} + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3). \quad (27)$$

При выборе (22), (23)

$$\begin{aligned} \varphi'_{11,22} = \sum \Phi(x1\mathbf{a}/x10) \cos \mathbf{k}\mathbf{a} \pm \\ \pm \Phi(x2\mathbf{a}/x10) \cos \mathbf{k}(\mathbf{a} + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\varphi'_{12} = \varphi'_{21} = \sum \Phi(y1\mathbf{a}/x10) \cos \mathbf{k}\mathbf{a}. \quad (29)$$

Использовались соотношения

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha, \mathbf{r}_p + \mathbf{a}/\alpha', \mathbf{r}_{p'} + \mathbf{a}') = \\ = H(h)_{\beta\alpha} H(h)_{\beta'\alpha'} \Phi[\beta, g(\mathbf{r}_p + \mathbf{a})/\beta', g(\mathbf{r}_{p'} + \mathbf{a}')] , \end{aligned} \quad (30)$$

$$\Phi(\alpha p \mathbf{a} / \alpha' p' \mathbf{a}') = \Phi(\alpha' p' \mathbf{a}' / \alpha p \mathbf{a}), \quad (31)$$

где $H(h)$ — матрица поворота h . Условие (31) — предположение.

Из (26)–(29) следует, что $\varphi_{12}(\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{19}) = 0$; $\lambda_1 \neq \lambda_2$ при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_{19}$; φ'_{12} содержит только обменные взаимодействия.

Можно проверить, что производные по \mathbf{k} от корней λ_1 и λ_2 обращаются в нуль не только в точке \mathbf{k}_0 , но также и в точке \mathbf{k}_{19} . Это эффект «сглаживания» (сравнить с (18)).

Обратимся к Z -плотности. На линии \mathbf{k}_1 она разлагается по БВ НКП δ^2 и δ^3 . БВ последних равны

$$\varphi(21) \sim \mathbf{e}_z(\varphi(2\mathbf{k}) + \varphi(1\mathbf{k})),$$

$$\psi(31) \sim \mathbf{e}_z(\varphi(2\mathbf{k}) - \varphi(1\mathbf{k})).$$

В точке \mathbf{k}_0 предельные значения этих векторов преобразуются по НКП D^3 и D^5 соответственно; Z -плотность порождает два уровня

$$\begin{aligned} H_{2z} = \varphi_{2z} i_2, \quad H_{3z} = \varphi_{3z} i_3, \quad i_2 = m(211)^* m(211), \\ i_3 = m(311)^* m(311). \end{aligned} \quad (32)$$

Величины φ_{2z} и φ_{3z} получаются при формальной замене в (16) обменных констант на магнитные. Во избежание недоразумений отметим, что константы $\Phi(\alpha p \mathbf{a} / \alpha' p' \mathbf{a}')$ при $\alpha = \alpha'$ содержат обменные взаимодействия, а при $\alpha \neq \alpha'$ — не содержат. Уровень φ_{2z} слегка сдвинут относительно уровня φ_1 , уровень φ_{3z} — относительно уровня φ_4 . Ветви φ_{2z} и φ_{3z} могут пересекаться, в точке \mathbf{k}_{19} они соприкасаются и удовлетворяют неравенствам, аналогичным (18).

Формулы (26)–(29), (32) соответствуют наиболее корректному подходу, но они содержат фактически неизвестные величины Φ . Кроме того, разделение взаимодействий на обменные и обменные невозможно произвести однозначно.

4. Мы можем сделать заключение относительно ориентации спирали в предположении, что обменное взаимодействие сводится в основном к дипольному. Для этого вычисляем четыре величины: $\varphi_{dz}(\varphi_1)$, $\varphi_{dx}(\varphi_1)$, $\varphi_{dz}(\varphi_4)$ и $\varphi_{dx}(\varphi_4)$. Первую и третью находим по (16), заменив фигурирующие там величины Φ на $R^{-5}(R^2 - R_z^2)$, где \mathbf{R} — вектор между позициями; $\varphi_{dx}(\varphi_1)$ и $\varphi_{dx}(\varphi_4)$ вычисляем по (28), заменив величины Φ на $R^{-5}(R^2 - R_x^2)$; $\varphi_{dz}(\varphi_1)$ и $\varphi_{dx}(\varphi_1)$ — добавки к уровню φ_1 , $\varphi_{dz}(\varphi_4)$, $\varphi_{dx}(\varphi_4)$ — к уровню φ_4 . Абсолютные значения этих добавок в нашей задаче не играют роли, важны лишь их знаки и относительные величины для различных точек на линии \mathbf{k}_1 . Периоды кристаллической решетки $a = 4,44 \text{ \AA}$ и $a_3 = c = 2,89 \text{ \AA}$. Мы учли 428 позиций, расположенных в сфере радиусом $\approx 14 \text{ \AA}$ вокруг позиции (1,0) (впрочем, без уверенности, что этого достаточно). Приводим некоторые выводы.

Если $\varphi_4 < \varphi_1$ и спираль обусловлена минимумом уровня φ_4 , то почти всюду $\varphi_{dx}(\varphi_4) < \varphi_{dz}(\varphi_4)$. Следовательно, магнитные моменты атомов вращаются в плоскости XU при любом значении \mathbf{k}_1 . Такова же ориентация спирали, если $\varphi_1 < \varphi_4$ и $k_s \tau > 50^\circ$. При $\varphi_1 < \varphi_4$ и $k_s \tau < 50^\circ$ имеем $\varphi_{dx}(\varphi_1) > \varphi_{dz}(\varphi_1)$. В этом случае трудно сказать, какова спираль. Возможно, реализуется циклоидальная эллиптическая спираль и оси поворота моментов лежат в

плоскости XU . В подобных сомнительных случаях следует привлечь ИК высоких порядков. Оставляем этот вопрос открытым.

5. Эффект «сглаживания» спектра состоит в следующем. Напомним: $\varphi_1(\mathbf{k}_{19}) = \varphi_4(\mathbf{k}_{19})$; производные по k уровней λ_1 и λ_2 в \mathbf{k}_{19} обращаются в нуль; вдали от точки \mathbf{k}_{19} $\lambda_1 \approx \varphi_1$, $\lambda_2 \approx \varphi_4$. Таким образом, $\lambda_1 \neq \lambda_2$ в точке \mathbf{k}_{19} . Верхняя из кривых λ около \mathbf{k}_{19} отклоняется вверх, в \mathbf{k}_{19} наблюдается минимум. Другая кривая отклоняется вниз, в \mathbf{k}_{19} имеется максимум (подразумеваются отклонения от соответствующих кривых φ_1 и φ_4). Как следует из (24), (27), в \mathbf{k}_{19}

$$|\lambda_1 - \lambda_2| = |\varphi_{22} - \varphi_{11}| = \sum \Phi(y1\mathbf{a}/x10) \cos \mathbf{k}_{19}\mathbf{a} .$$

Если кривые φ_1 и φ_4 пересекаются в некоторой точке \mathbf{k}'_1 , то в \mathbf{k}'_1 возникает аналогичное «сглаживание». В \mathbf{k}'_1 истинные уровни λ_1 и λ_2 не пересекаются, а просто сближаются. Сама точка \mathbf{k}'_1 оказывается точкой нулевого наклона. Заметим, что в MnO_2 для дипольного взаимодействия $\Phi(y\mathbf{pa}/x\mathbf{p}'0) = 0$. Это, в частности, означает, что существование эффекта и его величина зависят от принятой модели.

Эффект «сглаживания» должен наблюдаться и в других энергетических спектрах, например в электронном при переходе от бесспиновой теории к теории электрона со спином. Эффект отмечался в частных случаях другими авторами, например, в таком плане: в первом приближении считается, что пересекаются уровни, принадлежащие одинаковым НКП. В следующем приближении вводятся смешанные ИК, пересечение устраняется. Здесь эффект связывается с симметрией, а именно: он существует, если в первом приближении уровни относятся к неэквивалентным НКП, в следующем — к эквивалентным.

6. Компоненты $\mu(\alpha\mathbf{pa})$ атомных магнитных моментов определяются по формулам (8) из [2]. В сумму (8) входят магнитные симметризованные координаты $m(Fj\mathbf{ik})$, которые должны быть определены при минимизации разложения энергии по ИК. Коэффициенты при ИК не поддаются вычислению и их целесообразно рассматривать как параметры. Будем считать, что эти параметры удовлетворяют условиям, при которых реализуется несоизмеримая структура с вектором $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_s$. Рассмотрим случай магнитной XU -плотности, которая описывается НКП δ^5 (т.е. либо δ^{51} , либо δ^{52}) и попытаемся получить максимум сведений об атомных моментах.

В нашем случае $F = 5$, $j = 1$ или 2 , $i = 1, 2$. Положим

$$m(5j1, \mathbf{k}) = m_{1k} = c \cos \theta \exp(iv_1) ,$$

$$m(5j2; \mathbf{k}) = m_{2k} = c \sin \theta \exp(iv_2) , \quad (33)$$

$$m(5ji, -\mathbf{k}) = m_{i-k} = g_{25}m(5ji, \mathbf{k}) , \quad c > 0 .$$

Эти четыре координаты преобразуются согласно матрицам НКП Δ группы $G + KG$ (считается, что малое НКП δ^5 приводит к полному НКП Δ^5). Инвариантные комбинации порядка N можно получить следующим образом: к произведению $(m_{1k})^{s_1}(m_{1-k})^{s_2}(m_{2k})^{t_1}(m_{2-k})^{t_2}$ применяем оператор проектирования на единичное представление группы и полученное выражение антиунитарно симметризуем по (19) из [3]. В результате имеем

$$I_N = c^N (\cos^{s_1+s_2} \theta \sin^{t_1+t_2} \theta + \cos^{t_1+t_2} \theta \sin^{s_1+s_2} \theta) \cos(s_1 - s_2) v , \quad (34)$$

где $s_1 + s_2 + t_1 + t_2 = N$; $s_1 + t_1 = s_2 + t_2$; $s_i, t_i = 0, 1, \dots, N$, $s_1 + s_2, t_1 + t_2$ — четные положительные числа; $v = v_1 - v_2$. Придавая числам s_i и t_i возможные значения, получаем все ИК порядка N .

Если не выполняются равенства $s_1 + s_2 = 0$ или $t_1 + t_2 = 0$, то в (34) можно вынести за скобки $\sin 2\theta$ в некоторой четной степени, в скобках останется сумма $\cos^l \theta + \sin^l \theta$, где l — некоторое четное число. Если же справедливо одно из упомянутых равенств, то в скобках окажется сумма $\cos^N \theta + \sin^N \theta$. С другой стороны, если L — четное число, то сумма $\cos^L \theta + \sin^L \theta$ является некоторым полиномом от $\sin^2 2\theta$.

Из приведенных рассуждений следует, что минимизация разложения энергии приводит к двум сериям частных решений (стационарных):

$$\theta = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2} n_1 , \quad v = \frac{\pi}{2} n_2 \quad \text{и} \quad \theta = \frac{\pi}{2} n_3 . \quad (35)$$

Определим вид магнитной плотности. В формуле (8) из [2] суммирование проводится по векторам \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$. Матрицу R_{21} выбираем согласно (22) и (23), используя определения (33). Получаем

$$\mu(x1\mathbf{a}) \sim \cos \theta \cos(\mathbf{ka} + v_1) ,$$

$$\mu(x2\mathbf{a}) \sim \pm \cos \theta \cos(\mathbf{ka} + k\tau + v_1) ,$$

$$(36)$$

$$\mu(y1\mathbf{a}) \sim \mp \sin \theta \cos(\mathbf{ka} + v_2) ,$$

$$\mu(y2\mathbf{a}) \sim -\sin \theta \cos(\mathbf{ka} + k\tau + v_2) ,$$

где верхние знаки соответствуют НКП Δ^{51} , нижние — НКП Δ^{52} . Стационарные решения получаются при подстановке в (36) значений (35). Для

$\mathbf{k} = \mathbf{k}_s$ смешанная ИК существует, коэффициент при ней порядка отношения необменной энергии к обменной, т.е. очень мал. Тем не менее реальная магнитная плотность должна быть соответствующей суперпозицией плотностей, описываемых НКП Δ^{51} и Δ^{52} .

Кроме стационарных, возможны также решения более общего вида, когда условия (35) не выполняются, значения величин θ , v_1 , v_2 сильно зависят от внешних параметров. Нам кажется, что соответствующие структуры могут быть экспериментально установлены только в том случае, когда они являются промежуточными между стационарными.

Мы не исследуем магнитную Z -плотность, а также случаи, когда одновременно отличны от нуля XU - и Z -плотности.

Несоизмеримые магнитные структуры в MnO_2 феноменологически изучались в [5]. Метод работы [5] использован и здесь (определение вида коэффициентов при ИК, согласование базисов, антиунитарная симметризация, «сглаживание» спектра и т.д.). В [5] указано (возможно, впервые) на эллиптичность спирали, высказана мысль, что инварианты Лифшица практически не имеют отношения к возможности возникновения спиральной структуры.

7. Магнитная спиральная структура в MnO_2 была описана в работе [4] с помощью инварианта Лифшица $I_L = \psi_1 \nabla \psi_2 - \psi_2 \nabla \psi_1$. Как указано выше, ψ_1 и ψ_2 — это предельные значения БВ $\psi(1..)$ и $\psi(4..)$ НКП δ^1 и δ^4 . В точке \mathbf{k}_s либо $\psi(1..) \neq 0$, $\psi(4..) = 0$, либо $\psi(1..) = 0$, $\psi(4..) \neq 0$. Следовательно, хотя инвариант I_L существует, он не имеет отношения к вопросу о несоизмеримой структуре. Как объяснялось в пунктах г и д, вопросы реализации магнитных несоизмеримых структур и переходов между ними определяются значениями величин Φ в формуле (16). Возможно, методика работы [4] оправдана в случае, когда одно НКП d в симметричной точке согласуется (совместно) только с одним НКП той же размерности в несимметричной точке. Если ограничение НКП из P для симметричной точки раз-

лагается, например, на два НКП δ и δ' для несимметричной точки, то в [4] предлагается находить БВ НКП δ и δ' по теории возмущений путем разложения по разности $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_s$. Но, во-первых, некорректно говорить о разложении в ряд по \mathbf{k} сумм вида (2). Во-вторых, такое разложение требует также выполнения неравенства $|\mathbf{k}| \ll |\mathbf{b}|$. В экспериментально установленных спиральных структурах это неравенство не выполняется (фактически они не являются длиннопериодическими). Ветви обменного спектра, соответствующие δ и δ' , в точке \mathbf{k}_s разделены интервалом порядка обменной энергии. Если НКП δ и δ' неэквивалентны, то смешанная ИК имеет релятивистское происхождение, ею можно пренебречь. Если δ и δ' эквивалентны, то смешанная ИК имеет обменный характер и играет важную, иногда определяющую, роль в образовании несоизмеримой структуры [6,7].

1. О. В. Ковалев, *ФНТ* **25**, 177 (1999).
2. О. В. Ковалев, *ФТТ* **32**, 2981 (1990).
3. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
4. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **46**, 1420 (1964).
5. О. В. Ковалев, *ФТТ* **7**, 103 (1965).
6. О. В. Ковалев, *ФТТ* **36**, 2074 (1994).
7. О. В. Ковалев, *ФТТ* **37**, 3382 (1995).

Magnetic helix in MnO_2

O. V. Kovalev

Two targets are aimed at in this study: (i) to show how the consistency principle basis of representations operates in practice, and (ii) to investigate possible magnetic incommensurate structures using the earlier theory of induced representations. The method and the results are considerably different from those obtained on the basis of the Lifshits invariants. The effect of smoothing the exchange energy spectrum on involving non-exchange interaction is found. The role of the dipole interaction in the orientation of the magnetic helix is revealed.