

Генезис структур и магнитные упорядочения в соединениях типа ThCr_2Si_2

Б. Р. Гаджиев

*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка
Россия, 141980, г. Дубна, Московской области
E-mail: gadjiev@nf.jinr.ru*

Статья поступила в редакцию 11 апреля 2000 г., после переработки 10 июля 2000 г.

В рамках феноменологического подхода показано, что в соединениях типа ThCr_2Si_2 пространственная группа симметрии $I4/mmm$ парамагнитной фазы возникает в результате структурного фазового перехода из плотноупакованной прафазы с группой симметрии $Im3m$. Найдено, что реальные магнитные упорядочения в соединениях типа ThCr_2Si_2 описываются параметрами переходов, принадлежащими одному направлению, соединяющему точки максимальной симметрии в зоне Бриллюэна группы $I4/mmm$. Показано, что вариации модуля волнового вектора являются следствием изменения концентрации допирующего вещества. Получены пространственные зависимости параметра порядка в несоизмерных фазах для соответствующих классов универсальности.

В межах феноменологічного підходу показано, що у сполуках типу ThCr_2Si_2 просторова група симетрії $I4/mmm$ парамагнітної фази виникає внаслідок структурового фазового переходу з щільноупакованої прафази з групою симетрії $Im3m$. Знайдено, що реальні магнітні упорядкування у сполуках типу ThCr_2Si_2 описуються параметрами переходів, які належать одному напрямку, який поєднує точки максимальної симетрії в зоні Бріллюэна групи $I4/mmm$. Показано, що варіації модуля хвильового вектора є наслідком зміни концентрації допуючої речовини. Одержано просторові залежності параметра порядку в несоизомірних фазах для відповідних класів універсальності.

PACS: 75.25.+z

Введение

Нейтроннографическое исследование структур соединений с переменным составом показывает, что несмотря на то, что в достаточно широком температурном интервале пространственная группа симметрии кристалла остается неизменной, магнитное упорядочение в структурах претерпевает последовательность фазовых переходов типа парамагнитная–несоизмерная–соизмерная фазы [1–4]. В кристаллах с переменным составом, как показывают результаты нейтроннографических исследований, с изменением концентрации допирующего вещества x в интервале $0 \leq x \leq 1$ изменяется волновой вектор магнитной структуры [3,4]. Как правило, волновой вектор магнитной структуры меняется вдоль определенного направления в зоне Бриллюэна соответствующей пространственной группы симметрии структуры, а изменение значения волнового вектора происходит между точками зоны Бриллюэна, имеющими максимально высокую симметрию. Последнее по-

зволяет заключить, что группа симметрии волнового вектора понижается [3,4].

Рассмотрение этих изоструктурных соединений происходит в рамках концепции прафазы, когда реально существующая фаза представляется результатом слабого искажения некоей гипотетической высокосимметричной структуры (прафазы) [5,6]. Нейтроннографические исследования структур соединений UPd_2Si_2 , UPd_2Ge_2 , URh_2Si_2 и URh_2Ge_2 показывают, что эти кристаллы имеют структуру, общую для интерметаллических соединений типа ThCr_2Si_2 [1]. В парамагнитной фазе эти структуры имеют пространственную группу симметрии $I4/mmm$. Известно, что в таких изоструктурных соединениях магнитное упорядочение связано с атомами урана, и в кристаллах UPd_2Si_2 и UPd_2Ge_2 возникает несоизмерная фаза. Экспериментально показано, что в UPd_2Si_2 , UPd_2Ge_2 и URb_2Si_2 ниже температур 150, 140 и 137 К соответственно происходит антиферромагнитное упорядочение, при-

чем векторы волны намагниченности направлены вдоль оси c тетрагональной объемноцентрированной решетки. Волновыми векторами модуляции в соединениях UPd_2Si_2 , UPd_2Ge_2 являются $\mathbf{q} = (0, 0, 0,662 \pm 0,010)c^*$ и $\mathbf{q} = (0, 0, 0,748 \pm 0,010)c^*$, а при $T = 40$ К в UPd_2Si_2 возникает магнитный фазовый переход в соразмерную фазу с волновым вектором $\mathbf{q} = (0, 0, 1)c^*$. В указанных структурах модуляция является одномерной (типа продольной спиновой волны LSW [1]). Дальнейшие нейтронографические исследования выявили в UPd_2Ge_2 при температурах ниже $T_N \approx 135$ К последовательность модулированных магнитоупорядоченных фаз, причем при 80 К волновой вектор модуляции имеет соразмерное значение $\mathbf{q} = (0, 0, k_s = 3/4)$ [2,3]. Было показано, что замещение атомов Pd всего лишь 2% Fe при неизменной пространственной группе симметрии структуры радикально меняет магнитную структуру UPd_2Ge_2 [3,4]. Так, если в недопированном соединении магнитная структура при $T < 50$ К представляет собой фазу с квадратной модуляцией, то в $\text{U}(\text{Pd}_{0,98}\text{Fe}_{0,02})_2\text{Ge}_2$ ниже 65 К обнаружена «простая» антиферромагнитная фаза. В работе [7] изучена концентрационная зависимость температур фазовых переходов из парамагнитной в несоизмерную фазу (T_N) и из несоизмерной в соразмерную фазу (T_C). Показано, что увеличение концентрации допирующего элемента практически не влияет на зависимость $T_N(x)$, тогда как $T_C = T_C(x)$ увеличивается и достигает ~ 110 К. Кроме того, с ростом x величина волнового вектора модуляции изменяется, причем изменение \mathbf{q} происходит вдоль определенного направления зоны Бриллюэна.

При теоретическом описании магнитных фазовых переходов в кристаллах с переменным составом можно использовать аналогию с теорией фазовых переходов Ландау для сегнетоэлектриков—полупроводников [8]. В этом случае, по существу, коэффициенты термодинамического потенциала приобретают зависимость от концентрации допирующего вещества. Анализ показывает [4,9], что величина волнового вектора модуляции и температурная область существования несоизмерной фазы становятся функциями концентрации допирующего вещества. Так, с увеличением x температурный интервал существования несоизмерной фазы сужается и в пределе исчезает. Кроме того, с увеличением концентрации x \mathbf{q} стремятся к нулю. Последнее означает, что на x - T диаграмме должен наблюдаться фазовый переход порядок—порядок, а именно переход типа ферромагнитная—антиферромагнитная фаза.

Изложенное выше рассмотрение позволяет понять природу генезиса структур и магнитных фазовых переходов в кристаллах с переменным составом. Настоящая работа посвящена конкретному анализу последовательности магнитных фазовых переходов типа парамагнитная—несоразмерная—соразмерная фазы и возможных изменений фазовой диаграммы структуры с увеличением концентрации допирующего вещества.

Последовательность магнитных фазовых переходов в тетрагональных структурах

В теории фазовых переходов необходимость представления одних структур как производных от более высокосимметричных, как правило, обусловлена следующими двумя обстоятельствами [6]. Во-первых, если реально наблюдается обратимый переход между фазами с вырожденной и производной структурами, то выявление параметра порядка необходимо для определения функционала свободной энергии, который позволяет вычислить аномалии термодинамических функций. Во-вторых, в тех случаях, когда реально наблюдается только одна фаза, структура которой может быть представлена как производная от некоторой вырожденной, изучение симметричных свойств параметра порядка, связывающего вырожденную и производную структуры, позволяет понять целый ряд физических свойств, которые без этого кажутся случайными.

С точки зрения генезиса структур кристаллов с переменным составом необходимо отметить, что в общем случае симметрия сложных соединений, структура которых является производной от структуры плотных упаковок, обладающих одной из пространственных групп симметрии D_{6h}^4 , O_h^5 , O_h^9 парафаз, реально ниже, чем симметрия аналогичных структур, построенных из одинаковых шаров [6]. В теоретическое рассмотрение всегда можно ввести чисто геометрическую характеристику — параметр порядка, который описывает то или иное конкретное понижение симметрии. Подчеркнем, что по определению параметр порядка это чисто кристаллографическое понятие, позволяющее описать симметричное различие между плотностью вероятности распределения заряда или тока в вырожденной и производной структурах.

Как известно [8], при симметричном анализе магнитных структур предполагается, что любая магнитная структура может рассматриваться как результат магнитного фазового перехода из некоторой исходной фазы. Следовательно, при симметричном анализе магнитных структур может

быть использована теория фазовых переходов Ландау [4,8]. В частности, теория Ландау позволяет предсказать общие особенности фазовой диаграммы структур с переменным составом на плоскости концентрация — температура.

Пусть точки Γ и H зоны Бриллюэна обладают максимальной симметрией структуры G_0 . Это означает, что группой волновых векторов Γ и H является пространственная группа G_0 . Пусть волновой вектор \mathbf{q} определяет линию, соединяющую точки Γ и H . В этом случае группа симметрии G_q волнового вектора \mathbf{q} ниже, чем симметрия точек Γ и H , и является подгруппой группы G_0 . Очевидно, что точки направления \mathbf{q} являются внутренними точками зоны Бриллюэна. Таким образом, размерность неприводимых представлений пространственной группы симметрии G_0 , соответствующих точкам \mathbf{q} , больше или равна размерности неприводимых представлений группы G_0 , соответствующей точкам Γ и H . Неприводимые представления группы G_0 , соответствующие внутренним точкам зоны Бриллюэна, условию Лифшица не удовлетворяют [10]. Поскольку анализ Ландау основан на знании функционала свободной энергии, который составлен из целого рационального базиса инвариантов и определяет класс универсальности, изменение волнового вектора \mathbf{q} , обусловленное изменением концентрации допирующего вещества, вызывает изменение класса универсальности. Применительно к реальным структурам с переменным составом последнее утверждение означает, что при различных значениях концентрации допирующего вещества магнитные упорядочения в структуре могут существенно различаться [4].

Итак, изучение симметричных свойств параметра порядка, связывающего вырожденную и производную структуры, позволяет понять целый ряд физических свойств, которые без этого кажутся случайными.

Фазы симметрии $I4/mmm$ и $P4/mmm$, отвечающие реальным тетрагональным структурам, могут возникать в результате фазового перехода из прафазы с пространственной группой симметрии $Im\bar{3}m$ [5]. В этом случае переход из прафазы в соответствующие сверхструктуры описывается параметром порядка, который преобразуется по неприводимому представлению группы $Im\bar{3}m$, принадлежащему точке $\mathbf{k}_8 = (0, 0, 2\pi/na)$ (a — параметр кубической ячейки прафазы; n равно отношению объемов элементарных ячеек тетрагональной структуры и прафазы). Звезда вектора \mathbf{k}_8 содержит шесть лучей, и соответствующий параметр порядка преобразуется по шестимерно-

му неприводимому представлению $\tau_1(\mathbf{k}_8)$, индуцированному полносимметричным малым представлением группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}} = 4mm$. Фазы симметрии $I4/mmm$ и $P4/mmm$ возникают для нечетных и четных значений $n \geq 3$, когда активны только два луча \mathbf{k}_8 (например, $\mathbf{k}_8^{(1)}$ и $-\mathbf{k}_8^{(1)}$), т.е. отличны от нуля только две сопряженные компоненты параметра порядка.

Подчеркнем, что вектор \mathbf{k}_8 характеризует линию Δ , которая начинается в центре зоны Бриллюэна Γ и заканчивается в вершине H [11]. Группы волновых векторов, соответствующие точкам Γ и H , совпадают и являются $Im\bar{3}m$. Таким образом, точки Γ и H обладают максимальной симметрией структуры $Im\bar{3}m$, а на линии Δ симметрия понижается до $4mm$. Поскольку линия Δ является внутренней в зоне Бриллюэна, шестимерное неприводимое представление группы $Im\bar{3}m$, соответствующей линии Δ , является пассивным, следовательно, фазовый переход $Im\bar{3}m \rightarrow I4/mmm$ в общем случае осуществляется через несообразные фазы.

Рассмотрим структуру с пространственной группой симметрии $I4/mmm$ в парамагнитной фазе. В зоне Бриллюэна линия, характеризующаяся вектором $\mathbf{k}_{10} = (0, 0, 2\mu\pi/\tau_z)$, начинается в центре $\mathbf{k}_{14} = (0, 0, 0)$ и заканчивается в точке $\mathbf{k}_{15} = (0, 0, \pi/\tau_z)$ [4,12]. Группы волновых векторов \mathbf{k}_{14} и \mathbf{k}_{15} совпадают и обладают полной симметрией структуры $G_{\mathbf{k}} = I4/mmm$. Группой $G_{\mathbf{k}_{10}}$ волнового вектора \mathbf{k}_{10} является $I4mm$. Неприводимые представления малой группы $I4mm$ вектора $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ приведены ниже

| $I4mm$ | E | C'_2 | σ_h | σ_v | σ'_h | σ'_v | C_4 | C'_2 |
|--------|-----|--------|------------|------------|-------------|-------------|-------|--------|
| A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| A_2 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 |
| B_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| B_2 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| E | 1 0 | -1 0 | 1 0 | -1 0 | 0 1 | 0 -1 | 0 -1 | 0 1 |
| | 0 1 | 0 -1 | 0 -1 | 0 1 | 1 0 | -1 0 | 1 0 | -1 0 |

Следовательно, пространственная группа $I4/mmm$ имеет четыре двумерные и одно четырехмерное неприводимые представления, соответствующие волновому вектору $\mathbf{k}_{10} = (0, 0, 2\mu\pi/\tau_z)$. Пространственная группа $I4/mmm$ имеет восемь одномерных и два двумерных неприводимых представления $A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_g, A_{1u}, A_{2u}, B_{1u}, B_{2u}, E_u$, которые соответствуют центру зоны Бриллюэна [13]. Поскольку группа $I4/mmm$ является симморфной группой, неприводимые пред-

ставления $I4/mmm$, отвечающие точке $\mathbf{k}_{15} = (0, 0, \pi/\tau_2)$, определяются как [14]

$$D_{\mathbf{k}_{15},i}(\{\beta|\mathbf{b}\}) = \exp(-i\mathbf{k}_{15}\cdot\mathbf{b})\Gamma_i,$$

где \mathbf{b} — вектор обратной решетки и $\Gamma_i \in [A_{1g}, A_{2g}, B_{1g}, B_{2g}, E_g, A_{1u}, A_{2u}, B_{1u}, B_{2u}, E_u]$.

Непосредственным вычислением можно показать, что двумерное $\tau_4(\mathbf{k}_{15})$ и четырехмерное $\tau_5(\mathbf{k}_{15})$ неприводимые представления пространственной группы $I4/mmm$, индуцированные представлениями A_2 и E , также содержатся в магнитном представлении. Разложение псевдовекторного представления τ_{pv} по неприводимым представлениям группы $I4/mmm$ имеет вид

$$\tau_{pv} = A_{2g} \oplus E_g.$$

Далее мы обсудим последовательность магнитных фазовых переходов с несоизмерной фазой, связанных с одномерным $D_{\mathbf{k}_{15},2}$ и двумерным неприводимыми представлениями $\tau_4(\mathbf{k}_{15})$ группы $I4/mmm$, соответствующих векторам $\mathbf{q} = (0, 0, \pi/\tau_2)$ и $\mathbf{q} = (0, 0, 2\pi/\tau_2)$, которые содержатся в магнитном представлении. L -группа в случае одномерного неприводимого представления $D_{\mathbf{k}_{15},2}$ состоит из двух матриц, а именно, (1) и (-1) .¹⁵ В соответствии с условием инвариантности функционал термодинамического потенциала представляется выражением

$$\Phi_0 = \frac{1}{d} \int_0^d \tilde{\Phi}_0(z) dz,$$

$$\text{где } \tilde{\Phi}_0(z) = \frac{\alpha_0}{2} \eta^2(z) + \frac{\beta_0}{4} \eta^4(z) + \frac{\gamma_0}{6} \eta^6(z) + \frac{\delta_0}{2} (\eta')^2 + \frac{\lambda_0}{2} (\eta'')^2 + \frac{\chi_0}{2} \eta^2(\eta')^2, \quad (1)$$

здесь d — период $\tilde{\Phi}_0(z)$ и штрих означает производную по z [15].

Введем в выражение для термодинамического потенциала дополнительный член, характеризующий энергию электронной подсистемы E_g допируемых в структуру атомов. Тогда член mE_g (m — концентрация допируемых атомов) включает в себя изменение термодинамического потенциала электронной подсистемы за счет взаимодействия матрицы и допированных атомов. Полагая, что $E(\eta)$ инвариантно по отношению к тем же преобразованиям симметрии, можно написать

$$E_g(\eta) = E_0 + \frac{a}{2} \eta^2(z) + \frac{b}{4} \eta^4(z) + \frac{\gamma'}{6} \eta^6(z) + \frac{\delta'}{2} (\eta')^2 + \frac{\lambda'}{2} (\eta'')^2 + \frac{\chi'}{2} \eta^2(\eta')^2. \quad (2)$$

Следовательно, функционал термодинамического потенциала представляется выражением

$$\Phi = \frac{1}{d} \int_0^d \bar{\Phi}(z) dz,$$

где

$$\bar{\Phi}(z) = \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 + \frac{\delta}{2} (\eta')^2 + \frac{\lambda}{2} (\eta'')^2 + \frac{\chi}{2} \eta^2(\eta')^2, \quad (3)$$

здесь $\alpha = \alpha_0 + ma$; $\beta = \beta_0 + mb$; $\gamma = \gamma_0 + m\gamma'$; $\delta = \delta_0 + m\delta'$; $\lambda = \lambda_0 + m\lambda'$; $\chi = \chi_0 + m\chi'$.

Равновесные фазы системы определяются из условия минимума термодинамического потенциала. Так, для исходной парамагнитной фазы получаем

$$\eta = 0, \quad \Phi = 0. \quad (4)$$

В соразмерной антиферромагнитной фазе $\eta' = 0$ и, следовательно,

$$\Phi = \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6, \quad (5)$$

из условия минимума определяем, что

$$\eta_c = \pm \left(\frac{-\beta + (\beta^2 - 4\alpha\gamma)^{1/2}}{2\gamma} \right)^{1/2},$$

вследствие этого

$$\Phi_c = - \frac{6\alpha\beta\gamma - \beta^2 + (\beta^2 - 4\alpha\gamma)^{1/2}}{24\gamma^2}. \quad (6)$$

В несоизмерной фазе из уравнения Эйлера получаем уравнение для $\eta(z)$ и находим минимум Φ :

$$\lambda\eta^{(IV)} - \delta\eta'' - \chi[\eta^2\eta'' + \eta(\eta')^2] + \alpha\eta + \beta\eta^3 + \gamma\eta^5 = 0. \quad (7)$$

Последнее уравнение может иметь периодические решения с различным периодом d . Равновес-

ный период d определяется условием $\delta\Phi/\delta d = 0$, которое имеет вид

$$\lambda\eta'''\eta' - \frac{\lambda}{2}(\eta'')^2 - \frac{\delta}{2}(\eta')^2 - \frac{\chi}{2}\eta^2(\eta')^2 + \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{\lambda}{6}\eta^6 = 0. \quad (8)$$

Условию (8) можно придать другой вид, если проинтегрировать его по z от нуля до d и подставить выражение для Φ :

$$\int_0^d [2\lambda(\eta'')^2 + \delta(\eta')^2 + \chi(\eta')^2\eta^2] dz = 0. \quad (9)$$

В синусоидальном режиме несоразмерной фазы, где $\eta \rightarrow 0$, с помощью стандартных разложений в первом приближении находим

$$\eta = \rho_0 \cos(qx), \quad \rho_0^2 = \frac{4(\alpha_0 - \alpha)}{3\beta + 2\chi q_0^2},$$

$$q = q_0 \left(1 + \frac{\rho_0^2 \chi}{8\delta} \right), \quad \alpha_0 = \frac{\delta^2}{4\lambda},$$

$$q_0^2 = -\frac{\delta}{2\lambda}, \quad \Phi = -\frac{(\alpha_0 - \alpha)^2}{2(3\beta + 2\chi q_0^2)}. \quad (10)$$

Следовательно, волновой вектор модуляции является функцией температуры и концентрации допирующего вещества.

Точное решение уравнения (8) получим введением замены $Z = (\eta')^2$:

$$\frac{\lambda}{8} \left[4Z \frac{d^2 Z}{d\eta^2} - \left(\frac{dZ}{d\eta} \right)^2 \right] - \frac{\delta}{2} Z - \frac{\chi}{2} \eta^2 Z + \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\lambda}{6} \eta^6 = \Phi. \quad (11)$$

Если известно решение этого уравнения, то зависимость $\eta = \eta(z)$ находится из соотношения

$$\int [Z(\eta)]^{-1/2} d\eta = z - z_0. \quad (12)$$

Решение будем искать в виде

$$Z = \frac{\chi}{8\lambda} c\eta^4 + \frac{\beta}{\chi} g_1 \eta^2 + \frac{\beta^2 \lambda g_0}{\chi^3}, \quad (13)$$

где неизвестные константы c , g_0 и g_1 являются безразмерными.

Для определения c , g_0 и g_1 подставим (13) в (11) и получим следующие уравнения:

$$3c(c-1) + 8\gamma = 0,$$

$$2g_1(5c-4) = \delta c - 4,$$

$$g_0(2-3c) = 2(g_1^2 - \delta g_1 + \alpha), \quad (14)$$

$$\Phi = \frac{\beta^2 \lambda^2 g_0 (2g_1 - \delta)}{2\chi^4}.$$

Уравнение (12) дает действительное решение лишь при $Z > 0$. Интервал значений, при которых $Z > 0$, должен быть ограниченным, так как иначе величина η достигала бы бесконечных значений. В результате, в зависимости от знака χ и числа действительных корней уравнения $Z(\eta) = 0$ возможны три представляющих интерес случая.

I. При $\chi > 0$ и $\beta g_1 < 0$ многочлен $Z(\eta)$ имеет четыре действительных корня. Из уравнения (12) находим

$$\eta = \rho \operatorname{sn}(pz, k), \quad \rho^2 = -8 \frac{\beta \lambda k^2 g_1}{\chi^2 c (1+k^2)}, \quad (15)$$

$$p^2 = -\frac{\beta g_1}{\chi(1+k^2)}, \quad k^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - c g_0 / 2g_1^2}}{1 + \sqrt{1 - c g_0 / 2g_1^2}},$$

где $\operatorname{sn}(pz, k)$ — эллиптическая функция Якоби с модулем k ; p — волновой вектор.

II. При $\chi < 0$, если $g_0 < 0$, то многочлен $Z(\eta)$ имеет только два действительных корня. Имеется единственная область, где $Z > 0$, и после некоторых вычислений из уравнения (12) определяем:

$$\eta = \rho \operatorname{cn}(pz, k), \quad \rho^2 = \frac{8\beta \lambda k^2 \bar{g}_1}{\chi^2 c}, \quad (16)$$

$$p^2 = -\frac{\beta \bar{g}_1}{\chi}, \quad k^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{c g_0}{2g_1^2} \right)^{-1/2} \right],$$

где $\bar{g}_1 = g_1 / (1 - 2k^2)$ и, следовательно, $\beta \bar{g}_1 > 0$. Здесь $\operatorname{cn}(pz, k)$ — эллиптическая функция Якоби. Необходимо подчеркнуть, что фазы, соответствующие решениям I и II, разделены линией точек Лифшица, определяемой уравнением $\chi = 0$.

III. При $\chi < 0$, $\beta g_1 < 0$ многочлен $Z(\eta)$ имеет четыре действительных корня. В этом случае из уравнения (12) находим, что

$$\eta = \rho \operatorname{dn}(\rho z, k), \quad \rho^2 = -8 \frac{\lambda \beta g_1}{\chi_2 c (2 - k^2)},$$

$$\rho^2 = \frac{\beta g_1}{\chi(2 - k^2)}, \quad k^2 = \frac{2 \sqrt{1 - c g_0 / z g_1^2}}{1 + \sqrt{1 - c g_0 / 2 g_1^2}}. \quad (17)$$

Поскольку эллиптическая функция $\operatorname{dn}(\rho z, k) > 0$, в магнетиках такая несоразмерная фаза обладает средней намагниченностью, отличной от нуля.

Непосредственной подстановкой решений (15)–(17) в уравнение (9) определяются температурные зависимости параметра k в фазах I, II, III соответственно, причем $0 \leq k \leq 1$. Значение $k = 0$ соответствует температуре перехода из парамагнитной фазы в несоразмерную фазу (T_N) и $k = 1$ — температуре перехода из несоразмерной в соразмерную фазу (T_C). Кроме того, (9) определяет температурный интервал существования несоразмерной фазы. Вследствие концентрационной зависимости коэффициентов термодинамического потенциала температурный интервал $T_N - T_C$ зависит от m и с увеличением m сужается. Из явного вида решений (15) и (16) следует, что в фазах I и II магнитные моменты упорядочены антиферромагнитно. В фазе III упорядочение является ферромагнитным.

Необходимо подчеркнуть, что поскольку коэффициенты термодинамического потенциала являются функцией концентрации допирующего вещества, с изменением m на фазовой диаграмме $x - T$ возможна смена фаз I, II и III. Кроме того, соразмерная фаза, определяемая функционалом (3), является антиферромагнитно упорядоченной. Причем магнитная ячейка в соразмерной фазе удваивается.

Рассмотрим двумерное неприводимое представление пространственной группы $I4/mmm$, соответствующее вектору $\mathbf{q} = (0, 0, k_z)$, который является внутренней точкой зоны Бриллюэна [16,17]. Рассматриваемое неприводимое представление, очевидно, условию Лифшица не удовлетворяет, поэтому фазовый переход в системе описывается двухкомпонентным параметром порядка, а функционал термодинамического потенциала содержит инвариант Лифшица.

Предположим, что структура однородна в направлениях x и y , тогда функционал термодинамического потенциала представляется одномерным интегралом вдоль направления z .

В соответствии с симметричными соображениями функционал термодинамического потенциала представим выражением

$$F = \frac{1}{d} \int_0^d \tilde{f}(z) dz$$

где

$$\tilde{f}(z) = \frac{\alpha_0}{2} \rho^2 + \frac{\beta_0}{4} \rho^4 + \gamma_0 \rho^8 \cos 8\varphi - \delta_0 \rho^2 \varphi' + \frac{k_0}{2} \rho^2 (\varphi')^2 + \frac{\lambda_0}{2} \rho^2 (\varphi'')^2, \quad (18)$$

здесь ρ и φ — амплитуда и фаза параметра порядка.

С учетом (18) выражение для термодинамического потенциала примет вид

$$E_g = E_0 + \frac{a}{2} \rho^2 + \frac{b}{4} \rho^4 + \Gamma \rho^8 \cos 8\varphi - \Delta \rho^2 \varphi' + \frac{k'}{2} \rho^2 (\varphi')^2 + \frac{\lambda'}{2} \rho^2 (\varphi'')^2. \quad (19)$$

Теперь функционал термодинамического потенциала можно записать в виде

$$F = \frac{1}{d} \int_0^d f(z) dz,$$

$$f(z) = \frac{\alpha}{2} \rho^2 + \frac{\beta}{4} \rho^4 + \gamma \rho^8 \cos 8\varphi - \delta \rho^2 \varphi' + \frac{k}{2} \rho^2 (\varphi')^2 + \frac{\lambda}{2} \rho^2 (\varphi'')^2, \quad (20)$$

где $\alpha = \alpha_0 + am$; $\beta = \beta_0 + bm$; $\gamma = \gamma_0 + \Gamma m$; $\delta = \delta_0 + m\Delta$; $\lambda = \lambda_0 + m\lambda'$; $k = k_0 + mk'$.

Гармоническим решением, представляющим несоразмерную фазу, является $\varphi = kx$, и из условия равновесия термодинамического потенциала находим

$$k_0 = \frac{\delta}{k}, \quad \rho^2 = \frac{1}{\beta} (\alpha_0 - \alpha), \quad \alpha_0 = \frac{\delta^2}{k}. \quad (21)$$

Минимизация функционала термодинамического потенциала (20) относительно фазы приводит к уравнению Эйлера в виде

$$\lambda \varphi^{(IV)} - k \varphi'' - 16\gamma \rho^6 \sin 4\varphi \cos 4\varphi = 0. \quad (22)$$

Прежде чем решать уравнение (22), заметим, что на фазовой диаграмме системы, описываемой функционалом (20), линия точек Лифшица опре-

деляется уравнением $k(P, T, m) = 0$, где P — давление. Следовательно, линия точек Лифшица разделяет фазы с $k(P, T, m) < 0$ и $k(P, T, m) > 0$. Вначале определим решение уравнения (22), описывающее несоразмерную фазу, для которого $k(P, T, m) < 0$.

Первый интеграл уравнения (22) имеет форму

$$\lambda \left[\varphi' \varphi''' - \frac{1}{2} (\varphi'')^2 \right] - \frac{k}{2} (\varphi')^2 + 2\gamma\rho^6 \cos^2 4\varphi = \xi, \quad (23)$$

где ξ — постоянная интегрирования.

После подстановки

$$S(\varphi) = (\varphi')^2, \quad \cos 4\varphi = t \quad (24)$$

уравнение (23) может быть представлено в виде

$$\lambda \left[8(1 - t^2) S(t)S''(t) - 8t S(t)S'(t) - 2(1 - t^2)(S'(t))^2 \right] - \frac{k}{2} S(t) + 2\gamma\rho^6 t^2 = \xi. \quad (25)$$

Решение уравнения (25) будем искать в виде

$$S(t) = A + Bt. \quad (26)$$

Непосредственной подстановкой находим

$$(\varphi')^2 = A + B \cos 4\varphi, \quad (27)$$

где $A = -k/16\lambda$, $B = (w/6\lambda)^{1/2}$, $w = 2\gamma\rho^6$.

Решение уравнения (20) имеет вид

$$z = \int_0^\varphi \frac{dt}{(A + B \cos 4t)^{1/2}}. \quad (28)$$

Межсолитонное расстояние определяется выражением

$$z_0 = \frac{2}{\pi} K(k) d_0, \quad (29)$$

где ширина солитона представляется выражением

$$d_0 = \frac{\pi}{8(A + B)^{1/2}}. \quad (30)$$

Здесь $K(k)$ — эллиптический интеграл первого рода.

Несоразмерную фазу, описываемую решением (28) с $k(P, T, m) < 0$, будем называть несоразмерной фазой II.

Определим решение уравнение (22) при $k(P, T, m) > 0$ и в первом приближении будем считать λ/k малым. Тогда фаза параметра поряд-

ка определяется как решение одномерного уравнения синус-Гордона:

$$k\varphi'' + 16\gamma\rho^6 \sin 4\varphi \cos 4\varphi = 0. \quad (31)$$

Первый интеграл этого уравнения имеет вид

$$\frac{k}{2} (\varphi')^2 + 2\gamma\rho^6 \sin 4\varphi = \mu, \quad (32)$$

где μ — постоянная интегрирования.

После введения функции $g(u) = w \sin^2 u$, где $u = 4\varphi$, решение уравнения (32) представляется в виде

$$z = \frac{1}{4} \left(\frac{k}{2} \right)^{1/2} \int_0^{4\varphi} \frac{du}{[\mu - g(u)]^{1/2}}. \quad (33)$$

Несоразмерную фазу, описываемую решением (33), будем называть несоразмерной фазой I.

В соразмерной фазе выражение для магнитного момента в n -й элементарной ячейке кристалла через магнитный момент в первой ячейке имеет вид

$$\mathbf{M}_n = \mathbf{M}_1 \exp(ikt_n) + \mathbf{M}_1 \exp(-ikt_n).$$

Из этого выражения при $\mathbf{M}_1 = \frac{M}{2} (\mathbf{m}_1 + ip\mathbf{m}_2)$, $(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2) = 0$, $\mathbf{m}_1^2 = \mathbf{m}_2^2$, когда параметр эллиптичности $p \neq 0$, следует, что магнитный момент

$$\mathbf{M}_n = M [\mathbf{m}_1 \cos(kt_n) - p\mathbf{m}_2 \sin(kt_n)]$$

описывает в пространстве эллиптическую спираль.

Если положить $p = 0$, то получаем структуру типа спиновой волны, для которой

$$\mathbf{M}_n = M\mathbf{m}_1 \cos(kt_n).$$

При $\mathbf{m}_1 \parallel \mathbf{k}$ последнее выражение описывает структуру LSW, а при $\mathbf{m}_1 \perp \mathbf{k}$ структуру TSW. Изменение объема магнитной ячейки в соразмерной фазе определяется соразмерным значением волнового вектора.

Температурная ширина существования несоразмерной фазы определяется соотношением

$$\frac{E(k)}{k} = \frac{1}{a} \left[c + \frac{1}{1 + b(1 - T/T_N)} \right]^{-1} (1 - T/T_N)^{-3/2},$$

где $E(k)$ — эллиптический интеграл второго рода; $0 \leq k \leq 1$ и a, b, c — некоторые параметры термодинамического потенциала. Очевидно, что с ростом концентрации допирующего вещества темпе-

ратурная область существования несоразмерной фазы сужается.

Выводы

Тетрагональная структура с пространственной группой симметрии $I4/mmm$, являющаяся магнитной группой симметрии парамагнитной фазы, возникает в результате структурного фазового перехода из плотноупакованной прафазы с пространственной группой симметрии $Im\bar{3}m$. Трансформационные свойства параметра порядка, описывающего структурный фазовый переход $Im\bar{3}m \rightarrow I4/mmm$, определяются шестимерным неприводимым представлением группы $Im\bar{3}m$, соответствующим вектору $\mathbf{k} = (0, 0, 2\pi/na)$, причем фаза $I4/mmm$ возникает для нечетных значений $n \geq 3$, когда активны только два луча \mathbf{k}_8 , т.е. отличны от нуля только две сопряженные компоненты параметра порядка. Линия Δ характеризуется вектором \mathbf{k}_8 , группой волнового вектора которого является $I4mm$, начинается в центре и заканчивается в вершине H зоны Бриллюэна. Группы симметрии точек Γ и H являются максимальными в том смысле, что обладают максимальной симметрией структуры. Поскольку линия Δ является внутренней для зоны Бриллюэна, следовательно, шестимерное неприводимое представление является пассивным и условию Лифшица не удовлетворяет. Поэтому, в принципе, структурный фазовый переход $Im\bar{3}m \rightarrow I4/mmm$ осуществляется через промежуточную несоразмерную фазу, и $I4/mmm$ является симметрией соразмерной фазы.

В зоне Бриллюэна тетрагональной парамагнитной фазы с симметрией $I4/mmm$ максимальной симметрией обладают центр $\mathbf{k}_{14} = (0, 0, 0)$ и поверхностная точка $\mathbf{k}_{15} = (0, 0, \pi/\tau_2)$. Линия, соединяющая эти точки, характеризуется вектором $\mathbf{k}_{10} = (0, 0, 2\pi/\tau_2)$, группой волнового вектора которого является $4mm$. Одномерное неприводимое представление $D_{\mathbf{k}_{15}, 2}$ группы $I4/mmm$, соответствующее вектору \mathbf{k}_{15} , который входит в магнитное представление, определяет функционал термодинамического потенциала без инварианта Лифшица. Этот функционал описывает структуру типа LSW. Условия равновесия функционала определяют несоразмерные фазы с антиферромагнитным упорядочением типа $\eta = \rho \operatorname{sn}(pz, k)$ и $\eta = \rho \operatorname{cn}(pz, k)$ и фазу с ферромагнитным упорядочением типа $\eta = \rho \operatorname{dn}(pz, k)$. Соответствующая

этим фазам соразмерная фаза антиферромагнитно упорядочена, а магнитная ячейка удвоена.

Функционал термодинамического потенциала, составленный из инвариантов неприводимого представления группы $I4/mmm$, соответствующий вектору $\mathbf{k}_{10} = (0, 0, 2\pi/\tau_2)$, входящему в магнитное представление, содержит инвариант Лифшица. Минимизация этого функционала приводит к двум различным решениям, которые соответствуют различным несоразмерным фазам. На фазовой диаграмме эти фазы разделены линией точек Лифшица.

Отметим, что в магнетиках физической причиной возникновения инвариантов Лифшица является релятивистское взаимодействие Дзялошинского–Мория [8]. Для функционала с инвариантом Лифшица решение типа LSW возникает в том случае, когда параметр эллиптичности равен нулю и магнитные моменты направлены вдоль волнового вектора модуляции.

Кроме того, величина температурного интервала существования несоразмерной фазы в этих соединениях зависит от концентрации допирующего вещества. Магнитное упорядочение зависит от величины волнового вектора модуляции, с изменением которого магнитные группы симметрии в соразмерной фазе меняются. Так, удвоение магнитной ячейки соразмерной фазы наблюдается в кристаллах $U(\text{Pd}_{0,98}\text{Fe}_{0,02})_2\text{Ge}_2$. В соединениях $U(\text{Pd}_{1-x}\text{Fe}_x)_2\text{Ge}_2$ объем магнитной ячейки в соразмерной фазе учетверяется. Для детального сравнения полученных результатов необходимо проведение прецизионных экспериментов по уточнению взаимосвязи величины волнового вектора модуляции как функции концентрации допирующего вещества и магнитного упорядочения в этих семействах соединений.

Автор выражает благодарность проф. В. А. Аксенову и проф. В. П. Дмитриеву за плодотворное обсуждение результатов работы.

1. H. Ptasiwicz-Bak, J. Leciejewicz, and A. Zygmunt, *J. Phys.* **F11**, 1225 (1981).
2. G. Andre, F. Bouree, and A. Oles, *Solid State Commun.* **97**, 923 (1996).
3. А. М. Балагуров, В. В. Сиколенко, И. С. Любутин, Ж. Андре, Ф. Буре, Х. М. Ду, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 615 (1997).
4. В. А. Аксенов, Б. Р. Гаджиев, *Препринт ОИЯИ* P17-98-256 (1998).
5. В. П. Дмитриев, П. Толедано, *Кристаллография* **40**, 548 (1995).
6. Ю. М. Гуфан, В. П. Дмитриев, С. Б. Рошаль, В. И. Снежков, *Фазы Ландау в плотноупакованных структурах*, Изд-во Ростовского университета, Ростов-на-Дону (1990).

B. R. Gadjiev

7. H. M. Duh, I. S. Lyubutin, I. M. Jiang, G. H. Hwang, and K. D. Lain, *J. Magn. Magn. Mater.* **153**, 87 (1996).
8. В. М. Фридкин, *Сегнетоэлектрики – полупроводники*, Наука, Москва (1976).
9. Р. Ф. Мамин, Г. Б. Тейтельбаум, *ФТТ* **30**, 3536 (1988).
10. Г. Я. Любарский, *Теория групп в физике твердого тела*, Наука, Москва (1958).
11. Д. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп*, Наука, Москва (1986).
12. Ю. А. Изюмов, *Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах*, Энергоатомиздат, Москва (1997).
13. А. Пуле, Ж.-П. Матье, *Колебательные спектры и симметрия кристаллов*, Мир, Москва (1973).
14. Г. Штрайвольф, *Теория групп в физике твердого тела*, Мир, Москва (1971).
15. В. А. Головкин, *ЖЭТФ* **94**, 182 (1988).
16. Б. Р. Гаджиев, М.-Г. Ю. Сеидов, В. Р. Абдурахманов, *ФТТ* **38**, 3 (1996).
17. Б. Р. Гаджиев, М.-Г. Ю. Сеидов, В. Р. Абдурахманов, *ФНТ* **21**, 1241 (1995).

It has been shown within the framework of the phenomenological approach that in ThCr_2Si_2 type compounds the paramagnetic phase with a $I4/mmm$ space group occurs due to the structural phase transition from the bcc prototype phase with a $Im\bar{3}m$ symmetry group. It is found that the actual magnetic ordering in the ThCr_2Si_2 type compounds is described by the order parameters characterizing the single direction which connects the maximum symmetry points in the Brillouin zone of the $I4/mmm$ group. It is shown that the wave vector magnitude depends on dopant concentration. A spatial dependence of the order parameter in corresponding incommensurate phases is determined for different universality classes.