

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

3526/82

2/viii-82

P17-82-219

Х.Конвент, Н.М.Плакида

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СТРУКТУРНЫХ  
И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ  
В КРИСТАЛЛЕ  $KMnF_3$

Формулировка модели

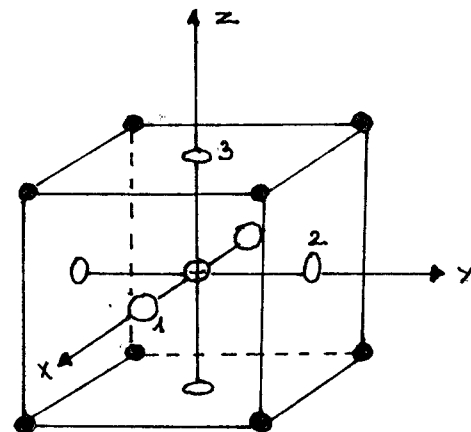
Направлено в журнал "Acta Physica Polonica"

1982

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема взаимодействия структурных и магнитных фазовых переходов /ФП/ в кристаллах привлекает в последнее время внимание большого числа исследователей. Одним из наиболее изученных кристаллов, испытывающих последовательность структурных и магнитных ФП, является кристалл фторида калия-марганца  $\text{KMnF}_3$  со структурой перовскита. Исследование его позволяет проследить эффекты взаимного влияния структурных и магнитных ФП на примере относительно простой системы, достаточно подробно изученной экспериментально. Приведем далее основные результаты этих экспериментальных исследований кристалла  $\text{KMnF}_3$ .

Первый структурный переход при  $T_R = 186,6 \text{ K}$  из кубической фазы  $O_h^1$  ( $Pm\bar{3}m$ ) в тетрагональную  $D_{4h}^{18}$  ( $I4/mcm$ ) обусловлен конденсацией мягкой моды симметрии  $R_{25}$  в точке R зоны Бриллюэна  $q_R = (\pi/a)(111)$ ,  $a$  - постоянная кубической ячейки/. Этот переход аналогичен хорошо изученному переходу в титанате стронция -  $\text{SrTiO}_3$  - при  $T = 105 \text{ K}$  /см.<sup>1,2/ / . Второй структурный переход при  $T_M = 91,5 \text{ K}$  из фазы  $D_{4h}^{18}$  в другую, также тетрагональную фазу  $D_{4h}^5$  ( $P4/mbm$ ), связан с неустойчивостью кристалла относительно моды симметрии  $M_3$  в точке M зоны Бриллюэна  $q_M = (\pi/a)(011)$  /см.<sup>2,3/ / . Оба перехода - первого порядка, близкие ко второму:  $T_C - T_0 = 0,5 \text{ K}^{1/2}$  для первого перехода ( $T_R$ ) и  $T_C - T_0 = 1,2 \text{ K}^{1/2}$  - для второго ( $T_M$ ). Для дальнейшего теоретического анализа важно отметить, что обе мягкие моды  $R_{25}$  и  $M_3$  связаны только со смещениями ионов F в плоскости грани куба, которые приближенно можно представить как вращение октаэдров  $\text{MnF}_6$  вдоль одной из кубических осей. В плоскости, перпендикулярной оси вращения, повороты октаэдров происходят в противофазе; вдоль оси вращения повороты противофазны для моды  $R_{25}$  и синфазны - для моды  $M_3$  /см.<sup>1-3/ / и рисунок/. Колебания ионов F в моде  $R_{25}$  сильноангармоничны и происходят со значительно большей амплитудой, чем смещения других ионов /4/. Как показывают нейтронные эксперименты /2,5,6/, частоты мягких мод  $R_{25}$  и  $M_3$  почти линейно уменьшаются с температурой и имеют плоскую дисперсионную зависимость вдоль направления R-M. Малая дисперсия фононов вдоль этого направления указывает на необычайно слабую связь между октаэдрами вдоль оси вращения. Эта особенность кристалла  $\text{KMnF}_3$  приводит к квазидвухмерному характеру ФП при  $T \geq T_R$ , непосредственно наблюдаемому по</sup></sup></sup>



диффузному рассеянию рентгеновских лучей /7/. В работе /6/, проведенной с более высоким разрешением, было показано, что помимо мягкой моды  $R_{25}$ , переторможенной уже далеко до точки ФП /  $T - T_R < 40 \text{ K}$  /, имеется квазиупругий центральный пик, который свидетельствует о наличии дополнительного механизма релаксации критической моды в области низких частот /8/. Интенсивность центрального пика в  $\text{KMnF}_3$  меньше, чем при аналогичном переходе в  $\text{SrTiO}_3$ , исследованию которого посвящено большое число работ /см.<sup>11/ / .</sup>

Исследование критической динамики  $\text{KMnF}_3$  методами поглощения ультразвука /9/ позволило установить, что в критической области выше  $T_R$  критическая экспонента для коэффициента поглощения имеет значение  $\rho = 1,87 \pm 0,05$ , а его частотная зависимость следует закону  $\omega^2$ . Это указывает, что модель, описывающая вызванное флуктуациями поглощение ультразвука, принадлежит к классу универсальности трехмерной модели Гейзенберга ( $n=d=3$ ), а критическая экспонента для анизотропного кроссовера равна  $\Phi = 1,26$ . Экспериментальное определение динамической скейлинговой функции позволило оценить характерное время релаксации  $\tau$  упорядоченных кластеров выше  $T_R$  /  $\tau \approx 1,4 \cdot 10^{-9} \text{ с}$  при  $T - T_C^0 = 1 \text{ K}$  / и тем самым оценить ширину центрального пика  $\Gamma = \hbar/2\tau \approx 0,23 \text{ мэВ}$ .

Исследования инфракрасных /10/ и рамановских /11/ спектров кристаллов  $\text{KMnF}_3$  с привлечением теоретико-группового анализа подтверждают основные выводы нейтронных исследований, но указывают также, что симметрия фазы ниже  $91,5 \text{ K}$  -  $D_{4h}^5$  - только приближенно согласуется с результатами этих работ.

Исследования статических свойств кристаллов  $\text{KMnF}_3$  в окрестности их структурных переходов менее систематичны. Измерения параметра порядка /угла поворота октаэдров  $\text{MnF}_6$  / методом спонтанного двупреломления ниже  $T_R$  /12/ дают значение критического индекса  $\beta = 0,32 \pm 0,01$  и показывают, что критическая область распространяется до  $20 \text{ K}$  ниже точки перехода. Такое значение критического индекса, близкое к значению для модели Изинга ( $\beta = 0,31$ ), а не изотропной модели Гейзенберга ( $\beta = 0,38$ ), может быть вызвано внутренними одноосными напряжениями, как и в случае кристаллов  $\text{SrTiO}_3$  /см.<sup>13/ / . Исследо-</sup>

вания температурного поведения теплоемкости кристаллов  $\text{KMnF}_3$  в окрестности  $T_R$ <sup>/14,15/</sup> обладали недостаточной точностью для проведения анализа критического поведения. Отметим только, что в работе<sup>/15/</sup> установлено, что второй структурный переход в  $\text{KMnF}_3$  при температуре  $T_M$  является типичным переходом первого рода со скрытой теплотой перехода  $\Delta Q = 15 \pm 0,5$  Дж/моль и скачком энтропии  $\Delta S = 0,158 \pm 0,005$  Дж/моль·К.

При комнатных температурах  $\text{KMnF}_3$  является парамагнетиком с эффективным спином иона  $\text{Mn}^{2+}$   $S = 5/2$  /орбитальный момент  $L = 0$  /, который можно считать хорошо локализованным<sup>/16/</sup>. При температуре  $T_N = 88,8$  К ниже второго структурного перехода происходит магнитный ФП второго рода в антиферромагнитную фазу типа G с намагниченностью подрешеток вдоль тетрагональной оси<sup>/17,18/</sup>. При температуре  $T_F = 81,5$  К происходит фазовый переход первого рода, смешанного магнитно-структурного типа, в результате которого магнитные моменты подрешеток ложатся в базисную плоскость<sup>/17,18/</sup>. Из-за их небольшого отклонения от направления кристаллографических осей возникает слабый ферромагнетизм.

Сделаем несколько замечаний о магнитных свойствах кристалла  $\text{KMnF}_3$ . Из экспериментальных данных следует, что их можно описать в рамках изотропной модели Гейзенберга с взаимодействием ближайших соседей. Это подтверждается, например, характером спектра спиновых волн, который согласно<sup>/19/</sup> при  $T = 4,2$  К является типичным для слегка "схлопнутого" антиферромагнетика Гейзенберга с обменными интегралами между первыми и вторыми соседями, равными соответственно  $I_1/k_B = 3,80 \pm 0,04$  К,  $I_2/k_B = 0,11 \pm 0,02$  К, и энергией анизотропии  $E_A/k_B = 0,41 \pm 0,05$  К /после анизотропии  $H_A = 3,1 \pm 0,4$  кЭ/. Двухмагнитное рассеяние света в  $\text{KMnF}_3$ <sup>/20/</sup> указывает, что отклонения от идеальной кубической структуры, являющиеся результатом структурных переходов, слабо влияют на магнитные свойства кристалла, которые вплоть до температуры  $0,8 T_N$  можно описывать, считая кристалл кубическим. Согласно данным по квазиупругому магнитному рассеянию нейтронов в окрестности антиферромагнитного перехода /в этом случае  $T_N = 88,06 \pm 0,02$  К/<sup>/21/</sup> теория Ван-Хова удовлетворительно описывает эксперимент в области температур  $1,002 < T/T_N < 1,1$ , а определенный на основе формулы Орнштейна-Цернике критический индекс восприимчивости равен  $\gamma = 1,33 \pm 0,05$ . Из измерений высоты пика интенсивности рассеянных нейтронов при  $T < T_N$  можно было установить, что критический индекс для намагниченности подрешеток равен  $\beta = 0,37$ . Детали антиферромагнитного перехода позволили вскрыть точные измерения магнитной части теплоемкости, проведенные на монокристаллах хорошего качества, в которых температура перехода оказалась равной  $T_N = 88,19 \pm 0,03$  К<sup>/22/</sup>. В области температур  $4 \cdot 10^{-3} < |t| < 2 \cdot 10^{-1}$ ,

$t = (T - T_N)/T_N$ , теплоемкость кристалла хорошо описывается формулой  $C_p = (A_{\pm}/a)(|t|^{-\alpha} - 1) + Et + B_{\pm}$  с отрицательным критическим индексом  $\alpha = -0,19 \pm 0,05$  /было принято  $a = a'$  /, то есть кристалл ведет себя как трехмерный гейзенберговский антиферромагнетик с близкодействием<sup>/23/</sup>. По мере приближения к  $T_N$  критический индекс  $\alpha$  возрастает и стремится к положительному значению, которое характерно для систем, принадлежащих к классу универсальности трехмерной модели Изинга с близкодействием<sup>/23/</sup>. В работе приводится оценка температуры кроссовера<sup>/23/</sup>, которая оказалась равной  $|t_x| = 1,3 \cdot 10^{-2}$ .

Представленные выше экспериментальные данные не дают достаточно ясной картины о поведении кристалла ниже точек структурного и магнитных ФП, на сложный характер которых указывают измерения магнитной восприимчивости в окрестности температур магнитных ФП<sup>/24/</sup> и аномалии, наблюдаемые в антиферромагнитном резонансе<sup>/25/</sup>. Желательно было бы проведение дальнейших исследований магнитных и структурных ФП на одних и тех же образцах высокого качества, как это было сделано для кристаллов  $\text{BaMnF}_4$ <sup>/26/</sup> имеющих несоизмеримые структурные и магнитные ФП.

Теоретическому описанию последовательности ФП в кристалле  $\text{KMnF}_3$  посвящено небольшое число работ, в основном феноменологического характера. В работах<sup>/27/</sup> /см. также книгу<sup>/28/</sup> на основе симметричного анализа и разложения Ландау для свободной энергии были исследованы структурные переходы аналогично тому, как это было сделано ранее для  $\text{SrTiO}_3$ <sup>/29/</sup>. В работе<sup>/30/</sup> приводятся оценки для параметров феноменологического разложения в предположении о релаксационном характере мягкой моды  $R_{25}$ . Полный симметричный анализ структурных и магнитных ФП в  $\text{KMnF}_3$  представлен в работе<sup>/31/</sup>. Там же записано разложение свободной энергии по параметру порядка первого структурного перехода и параметру порядка антиферромагнитного перехода без учета взаимодействия их с деформацией. В работе делается вывод, что учет взаимодействия магнитного параметра порядка со структурным для моды  $R_{25}$  приводит к расщеплению магнитного ФП на два: первый - с ориентацией антиферромагнитного вектора вдоль тетрагональной оси, а второй - перпендикулярно тетрагональной оси. При этом в работе<sup>/31/</sup> высказывается гипотеза, что второй структурный переход с модой  $M_3$  не оказывает существенного влияния на тип магнитного упорядочения.

Критическое поведение системы при структурных переходах с мягкой модой на границе зоны Бриллюэна рассматривалось в работах<sup>/13,32/</sup> на основе эффективного гамильтониана Гинзбурга-Ландау. Отметим здесь вывод работы<sup>/32/</sup> о том, что первородность первого структурного перехода в  $\text{KMnF}_3$  может быть объяснена влиянием флуктуаций, большая роль которых в этом кристалле обусловлена аномально малой дисперсией моды  $R_{25}$  в направлении R-M.

Микроскопический подход к изучению взаимодействия структурных и магнитных ФП был предложен в нашей работе<sup>/33/</sup>, где был дан качественный анализ последовательности ФП в  $\text{KMnF}_3$  для упрощенной модели кристалла. В основе этого подхода лежит представление о взаимодействии локальной нормальной координаты<sup>/34,31/</sup> с магнитной подсистемой спинов.

В<sup>/35-38/</sup> был развит модельный подход к описанию структурных ФП в кристаллах  $\text{ABX}_3$ , индуцированных мягкими модами типа  $R_{25}$  и  $M_3$ . В этих работах было получено явное представление смещения ионов X в плоскости грани куба через локальную нормальную координату, описывающую вращение октаэдра  $\text{BX}_6$  /см. ниже формулу /11//. При построении эффективного гамильтониана учитывается локальная симметрия положения ионов и экспериментальная информация о характере их движения в примитивной ячейке. Хотя этот подход носит модельный характер /о связи его со стандартной теорией динамики решетки см.<sup>/35,39/</sup> /, он позволяет с помощью небольшого числа микроскопических параметров, имеющих простой физический смысл, дать единое описание структурных переходов, связанных с модами  $R_{25}$  и  $M_3$ , не привлекая большого числа подгоночных параметров феноменологического характера.

В настоящей работе и ряде последующих формулируется микроскопическая теория структурных и магнитных ФП в кристалле  $\text{KMnF}_3$ . В ней используется модельное описание динамики решетки при структурных переходах, который был развит в<sup>/35-38/</sup>, и описание магнитной системы спинов на ионах  $\text{Mn}^{+2}$  с помощью модели Гейзенберга. Учет взаимодействия спиновой подсистемы с решеткой проведен на основе симметричного подхода, развитого в работах<sup>/40-42/</sup>.

В следующем разделе формулируется микроскопический гамильтониан модели. В разделе 3 вводится локальная нормальная координата, описывающая вращения октаэдров  $\text{MnF}_6$ , с помощью которой в дальнейшем исследуются мягкие моды  $R_{25}$  и  $M_3$ , их взаимодействие с деформацией решетки, акустическими фононами и магнитной подсистемой спинов ионов Mn. Вычисление свободной энергии и анализ ФП будут проведены в следующих работах.

## 2. ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ

При построении микроскопического модельного гамильтониана для кристалла  $\text{KMnF}_3$  будем исходить из следующих предположений, являющихся обобщением экспериментальных фактов: а/ в кристалле  $\text{KMnF}_3$  можно выделить подсистему атомов-октаэдров  $\text{MnF}_6$ , движение которых связано с мягкой модой, индуцирующей структурный фазовый переход; динамику решетки кристалла можно удовлетворительно описать в рамках метода, предложенно-

го в работах<sup>/35-38/</sup>; б/ магнитную подсистему в  $\text{KMnF}_3$  можно описать в рамках изотропной модели Гейзенберга; в/ взаимодействие активных в структурном переходе атомов с упругими деформациями кристалла и с магнитной подсистемой, а также магнитоупругие взаимодействия играют важную роль в определении свойств кристаллов; г/ симметрия кристалла в высокотемпературной фазе определяется пространственной группой  $O_h^1 - \text{Pm}\bar{3}\text{m}$ , а местная /локальная/ симметрия ионов K и Mn - точечной группой  $m\bar{3}\text{m}$ , а ионов F - группой  $4/m\bar{3}\text{m}$ .

Исходя из этих предположений, полный гамильтониан системы запишем в виде

$$H = H_R + H_e + H_S + H_{R-e} + H_{R-S} + H_{S-e} \quad /1/$$

В гамильтониане решеточных колебаний  $H_R$  принимаем во внимание только смещение ионов фтора F в плоскости грани кубической ячейки:

$$H_R = \sum_{l\kappa\alpha} \frac{1}{2m} p_\alpha^2(l\kappa) + \frac{1}{2} \sum_{ll'} \sum_{\kappa\kappa'} \Phi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\beta}(l-l') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') + \frac{d_1}{4} \sum_{l\kappa\alpha} u_\alpha^4(l\kappa) + \frac{d_2}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{\alpha \neq \beta} u_\alpha^2(l\kappa) u_\beta^2(l\kappa), \quad /2/$$

где  $u_\alpha(l\kappa)$  и  $p_\alpha(l\kappa)$  - смещение и импульс иона F с номером  $\kappa = 1, 2, 3$  в  $l$ -й примитивной кубической ячейке;  $m$  - его масса. Обозначая оси координат  $\alpha = x, y, z$  цифрами 1, 2, 3 /см. рисунок/, считаем  $u_\alpha(l\kappa) = 0$  для  $\alpha = \kappa$ .  $\Phi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\beta}(l-l')$  - гармоническая матрица силовых постоянных ионов F и  $d_1, d_2$  - константы локального ангармонического взаимодействия ионов F с остальными ионами решетки, которые находятся в своих равновесных положениях.

Гамильтониан длинноволновых акустических фононов удобно выразить с помощью локальных компонент тензора деформаций  $e_{\alpha\beta}(l)$ <sup>/35/</sup>:

$$H_e = \frac{1}{2} \sum_{l\alpha} M u_\alpha^2(l) + \frac{1}{2} c_{11} \sum_{l\alpha} e_{\alpha\alpha}^2(l) + c_{12} \sum_l \sum_{\alpha > \beta} e_{\alpha\alpha}(l) e_{\beta\beta}(l) + 2c_{44} \sum_l \sum_{\alpha > \beta} e_{\alpha\beta}^2(l), \quad /3/$$

где  $c_{\mu\nu}$  - коэффициенты жесткости кубического кристалла;  $M$  - масса элементарной ячейки. Взаимодействие локальной деформации  $e_{\alpha\beta}(l\kappa)$  со смещением иона F  $u_\alpha(l\kappa)$  может быть записано в виде разложения<sup>/32/</sup>:

$$H_{R-e} = \sum_{\ell\kappa} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} G_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa) e_{\alpha\beta}(\ell\kappa) u_{\gamma}(\ell\kappa) u_{\delta}(\ell\kappa), \quad /4/$$

где тензор взаимодействия  $G_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa)$  для каждого иона F сорта  $\kappa$ , находящегося в тетрагональной позиции  $4/mmm$ , в общем случае имеет шесть независимых компонент. Учитывая ограничение на смещения ионов F только в плоскости грани ( $u_{\alpha}(\ell\alpha) = 0$ ), а также симметрию к перестановке неэквивалентных ионов в кубической ячейке, получаем лишь 4 независимые компоненты для тензора  $G_{\alpha\beta\gamma\delta} = G_{\gamma\delta\alpha\beta}$ :

$$G_{11} = G_{3333} (1) = G_{2222} (1) = G_{3333} (2) = \\ = G_{1111} (2) = G_{1111} (3) = G_{2222} (3),$$

$$G_{12} = G_{2233} (1) = G_{3311} (2) = G_{1122} (3),$$

/5/

$$G_{13} = G_{1133} (1) = G_{1122} (1) = G_{2211} (2) = \\ = G_{2233} (2) = G_{3311} (3) = G_{3322} (3),$$

$$G_{66} = G_{2323} (1) = G_{1313} (2) = G_{1212} (3).$$

Отметим, что в гамильтониане /2/-/4/ не учитывается взаимодействие смещений ионов F со смещениями других ионов, кроме взаимодействия с акустическими модами. Это приближение помимо модельных соображений может быть оправдано экспериментальными данными, например /4/, согласно которым отношение среднеквадратичных тепловых смещений ионов F в плоскости грани  $u_{11}(F)$  намного превышает эти смещения перпендикулярно плоскости грани  $u_{33}(F)$  и смещения других ионов, например ионов Mn,  $u(Mn)$ :

$$\frac{u_{11}(F)}{u_{33}(F)} = \frac{u_{11}(F)}{u(Mn)} = 7. \quad /6/$$

Большая величина этого отношения позволяет учитывать только колебания ионов F в плоскости грани, что и обосновывает принятую модель.

Для описания спиновой подсистемы, состоящей из локализованных на ионах Mn спинов  $S = 5/2$ , примем изотропную модель Гейзенберга, хорошо описывающую экспериментальные данные /19,20/

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_{\ell\ell'} J(\ell-\ell') S_{\alpha}(\ell) S_{\alpha}(\ell') - \mu \sum_{\ell\alpha} H_{\alpha} S_{\alpha}(\ell), \quad /7/$$

где  $S_{\alpha}(\ell)$  -  $\alpha$ -компонента спина иона Mn в  $\ell$ -й примитивной ячейке;  $H_{\alpha}$  - внешнее магнитное поле. Обменный интеграл  $J(\ell-\ell')$  описывает короткодействующее антиферромагнитное взаимодействие.

Гамильтониан спин-фононного взаимодействия в  $KMnF_3$  не может содержать линейных по операторам спина членов, которые существуют в системах со спин-орбитальной связью /40/, так как электроны, являющиеся источником магнитного момента на ионах Mn, находятся в состоянии с нулевым орбитальным моментом /16/. Поэтому взаимодействие спинов с колебаниями решетки может определяться лишь симметризованным произведением операторов спина:

$$S_{\alpha\beta}(\ell) = \frac{1}{2} \{ S_{\alpha}(\ell) S_{\beta}(\ell) + S_{\beta}(\ell) S_{\alpha}(\ell) \}, \quad /8/$$

которое имеет те же трансформационные свойства, что и тензор деформации решетки  $e_{\alpha\beta}(\ell)$ . Следовательно, гамильтониан спин-фононного взаимодействия может быть записан в следующем общем виде:

$$H_{S-R} + H_{S-e} = \sum_{\ell} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} K_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa) S_{\alpha\beta}(\ell) u_{\gamma}(\ell\kappa) u_{\delta}(\ell\kappa) + \\ + \sum_{\ell} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} D_{\alpha\beta\gamma\delta} S_{\alpha\beta}(\ell) e_{\gamma\delta}(\ell), \quad /9/$$

где тензор  $K_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa)$  имеет те же свойства симметрии, что и тензор  $G_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa)$  в /4/ и определяется лишь четырьмя независимыми константами  $k_{11}$ ,  $k_{12}$ ,  $k_{13}$  и  $k_{66}$ , аналогично соотношениям /5/. Тензор магнитоупругого взаимодействия  $D_{\alpha\beta\gamma\delta}$  для кубического кристалла имеет лишь две независимые компоненты, которые можно легко определить, если воспользоваться записью магнитоупругого взаимодействия в виде разложения по базисным функциям неприводимых представлений точечной группы  $m\bar{3}m$  /41,42/:

$$H_{S-e} = -\frac{b_1}{4} \sum_{\ell} \{ 3[e_{11}(\ell) - e_{22}(\ell)] [S_{11}(\ell) - S_{22}(\ell)] + \\ + [2e_{33}(\ell) - e_{11}(\ell) - e_{22}(\ell)] [2S_{33}(\ell) - S_{11}(\ell) - S_{22}(\ell)] - \\ - \frac{b_2}{2} \sum_{\ell} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha\beta}(\ell) e_{\alpha\beta}(\ell) \}. \quad /10/$$

Сравнивая /10/ с /9/ и учитывая свойства симметрии тензора

$$D_{\alpha\beta\gamma\delta} = D_{\beta\alpha\gamma\delta} = D_{\alpha\beta\delta\gamma} = D_{\gamma\delta\alpha\beta},$$

а также соотношения для его компонент

$$\frac{1}{2} D_{1111} + D_{1122} = 0,$$

которые следуют из условия отсутствия тривиальных инвариантов  $\vec{S}(\ell) \cdot \vec{S}(\ell) = S(S+1)$  в /9/, находим следующие соотношения симметрии для этого тензора в кубическом кристалле:

$$D_{1111} = D_{2222} = D_{3333} = -2D_{1122} = -2D_{2233} =$$

$$= -2D_{1133} = -b_1,$$

$$D_{1212} = D_{2323} = D_{1313} = -\frac{1}{4} b_2.$$

Таким образом, мы получаем модельный гамильтониан /1/-/4/, /7/, /9/, содержащий лишь небольшое число микроскопических параметров, которые могут быть либо вычислены для определенной модели взаимодействия ионов кристалла, либо определены из эксперимента.

### 3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ НОРМАЛЬНОЙ КООРДИНАТЫ

Изучение динамики решетки и структурных переходов можно значительно упростить, если воспользоваться представлением локальной нормальной координаты /34,35/. В случае мягкой моды  $R_{25}$  или  $M_3$ , связанной с вращением октаэдров  $MnF_6$ , в качестве такой координаты удобно выбрать вектор с компонентами  $R_\lambda(\ell)$ , определяющий поворот октаэдра относительно оси  $\lambda = 1, 2, 3$ . Смещение ионов  $u_\alpha(\ell, \kappa)$  можно выразить с его помощью в виде /35/:

$$u_\alpha(\ell, \kappa) = \frac{1}{2\sqrt{2ma^2}} [\vec{\xi}(\kappa) \times (\vec{R}(\ell + \kappa) - \vec{R}(\ell))]_\alpha =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2m}} \sum_\lambda e_{\alpha\kappa\lambda} (R_\lambda(\ell + \kappa) - R_\lambda(\ell)), \quad /11/$$

где векторное произведение во второй строке записано с помощью полностью антисимметричного тензора Леви-Чивита  $e_{\alpha\beta\gamma}$ . Вектор  $\vec{\xi}(\kappa)$  имеет компоненты  $\xi_\alpha(\kappa) = a\delta_{\alpha\kappa}$  и определяет расстояние между эквивалентными ионами в соседних примитивных ячейках,  $R_\lambda(\ell + \kappa) = R_\lambda(\ell + \vec{\xi}(\kappa))$ .

Подставляя теперь /11/ в гамильтониан /1/, перепишем его отдельные слагаемые. Гамильтониан решеточных колебаний /2/, описывающий вращение октаэдров, принимает вид

$$H_R = \frac{1}{2} \sum_{\ell\ell'\kappa} I_\lambda(\ell, \ell') \dot{R}_\lambda(\ell) \dot{R}_\lambda(\ell') +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\ell\ell'} \sum_{\lambda\lambda'} v_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') R_\lambda(\ell) R_{\lambda'}(\ell') + \quad /12/$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_{\ell\ell'} \sum_{\lambda\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') [R_\lambda(\ell) - R_\lambda(\ell')]^2 [R_{\lambda'}(\ell) - R_{\lambda'}(\ell')]^2,$$

где введены: нелокальный момент инерции

$$I_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') = \frac{1}{N} \sum_q I_\lambda(q) e^{iq(\vec{\ell}' - \vec{\ell})}, \quad /13/$$

$$I_\lambda(q) = \frac{1}{4} [2 + \cos q_\lambda a - \sum_{\mu=1}^3 \cos q_\mu a];$$

гармоническая матрица силовых постоянных

$$v_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') = \frac{1}{N} \sum_q v_{\lambda\lambda'}(q) e^{iq(\vec{\ell}' - \vec{\ell})},$$

$$v_{\lambda\lambda'}(q) = \frac{1}{8m} \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{\alpha\beta} \Phi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\beta}(q) e_{\alpha\kappa\lambda} e_{\beta\kappa\lambda'} \times \quad /14/$$

$$\times [1 - \exp(-iq_\kappa a)] [1 - \exp(iq_{\kappa'} a)]$$

и матрица ангармонического взаимодействия

$$\Gamma_{\lambda\lambda'}(\ell, \ell') = \frac{1}{N} \sum_q \Gamma_{\lambda\lambda'}(q) e^{iq(\vec{\ell}' - \vec{\ell})}, \quad /15/$$

$$\Gamma_{\lambda\lambda'}(q) = \frac{1}{16} \Gamma_1 \delta_{\lambda\lambda'} \sum_{\kappa \neq \lambda} \cos q_\kappa a + (1 - \delta_{\lambda\lambda'}) \cdot \frac{1}{8} \Gamma_2 \cos q_\lambda a,$$

здесь  $\Gamma_1 = d_1/4m^2$ ,  $\Gamma_2 = d_2/4m^2$ .

Соотношение /13/ показывает, что

$$I_\lambda(q_R) = I_\lambda(q_M^{(\lambda)}) = 1, \quad I_\lambda(q_M^{(\mu \neq \lambda)}) = \frac{1}{2}, \quad /16/$$

где

$$q_M^{(1)} = (\pi/a)(011), \quad q_M^{(2)} = (\pi/a)(101), \quad q_M^{(3)} = (\pi/a)(110).$$

Матрица  $v_{\lambda\lambda'}(q)$  /14/ определяется фурье-компонентой гармонической матрицы  $\Phi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\beta}(q)$  в /2/. Согласно /14/  $v_{\lambda\lambda'}(q=0) = 0$ , а в точ-

как R и M определяет трехкратно вырожденные моды с частотами  $\omega_R^2$  и  $\omega_M^2$  соответственно:

$$v_{\lambda\lambda'}(q_R) = \delta_{\lambda\lambda'} \omega_R^2, \quad v_{\lambda\lambda'}(q_M^{(\lambda)}) = \omega_M^2 \delta_{\lambda\lambda'}. \quad /17/$$

Структурный переход в точках R и M возникает при условии неустойчивости решетки в гармоническом приближении, т.е. при  $\omega_R^2 < 0$  и  $\omega_M^2 < 0$ . В дальнейшем эти частоты, как и в работах /35-38/, рассматриваются как подгруппочные параметры теории. Ангармоническое взаимодействие согласно /15/ имеет свойства  $\Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}-\vec{q}_R) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}) = \Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}-\vec{q}_M^{(\lambda)})$  и, в частности,

$$\Gamma_{\lambda\lambda'}(0) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(q_R) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(q_M^{(\lambda)}) = \frac{1}{8} [\Gamma_1 \delta_{\lambda\lambda'} + \Gamma_2 (1 - \delta_{\lambda\lambda'})]. \quad /18/$$

Гамильтониан взаимодействия вращений октаэдров с деформацией /4/ удобно представить в виде

$$H_{R-e} = \sum_{\ell\ell'} \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\ell, \ell') e_{\alpha\beta} \times \\ \times [R_\lambda(\ell) R_\mu(\ell') + R_\mu(\ell) R_\lambda(\ell')], \quad /19/$$

где тензор взаимодействия

$$G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\ell, \ell') = \frac{1}{4m} \sum_{\kappa\gamma\delta} G_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa) \gamma_\kappa(\ell, \ell') e_{\gamma\kappa\lambda} e_{\delta\kappa\mu}. \quad /20/$$

Здесь введена функция

$$\gamma_\kappa(\ell, \ell') = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{\ell}-\vec{\ell}')} \gamma_\kappa(q), \quad /21/$$

$$\gamma_\kappa(q) = \frac{1}{2} (1 - \cos q_\kappa a).$$

Учитывая свойства симметрии /5/ для констант  $G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\kappa)$  и вводя новые постоянные:

$$g_{ij} = \frac{1}{2m} G_{ij}, \quad /22/$$

взаимодействие /19/ представим в виде

$$H_{R-e} = g_{12} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) R_a(\ell) R_a(\ell') \sum_{\beta \neq a} \gamma_\beta(\ell, \ell') + \\ + g_{13} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) \gamma_a(\ell, \ell') \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell) R_\beta(\ell') +$$

$$+ g_{11} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell) R_\beta(\ell') \gamma_\delta(\ell, \ell') - \\ - g_{66} \sum_{\ell\ell'} \sum_{\alpha \neq \beta} e_{\alpha\beta}(\ell) [R_\alpha(\ell) R_\beta(\ell') + R_\alpha(\ell') R_\beta(\ell)] \gamma_\delta(\ell, \ell'). \quad /23/$$

Здесь в суммах по  $\beta \neq a$  индекс  $\delta \neq (a, \beta)$ . Отметим, что при выводе /19/ или /23// было использовано приближение

$$e_{\alpha\beta}(\ell, \kappa) = e_{\alpha\beta}(\vec{\ell} \pm \frac{1}{2} \vec{\xi}(\kappa)) \approx e_{\alpha\beta}(\ell), \quad /24/$$

которое справедливо лишь для деформации, медленно меняющейся в пространстве. Для спиновых операторов  $S_{\alpha\beta}(\ell)$  /8/ приближение /24/ не может быть использовано, и поэтому спин-фононное взаимодействие  $H_{S-R}$  в /9/ не удается представить в форме, аналогичной /19/. Поэтому запишем /9/, после подстановки /11/, в виде однократной суммы по узлам решетки:

$$H_{S-R} = \sum_{\ell a} S_{aa}(\ell) \{ k_{12} \sum_{\beta \neq a} R_a(\ell, \beta) R_a(\ell, \beta) + \\ + k_{13} \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell, a) R_\beta(\ell, a) + k_{11} \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell, \delta) R_\beta(\ell, \delta) - \\ - 2k_{66} \sum_{\ell} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha\beta}(\ell) R_\alpha(\ell, \delta) R_\beta(\ell, \delta), \quad /25/$$

где индекс  $\delta \neq (a, \beta)$  и для сокращения записи введены операторы

$$R_a(\ell, \kappa) = \frac{1}{2} [R_a(\vec{\ell} + \vec{\xi}(\kappa)) - R_a(\vec{\ell})]. \quad /26/$$

Четыре независимые константы взаимодействия

$$k_{ij} = \frac{1}{2m} K_{ij} \quad /27/$$

определяются из соотношений симметрии для тензора  $K_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa)$ , которые имеют тот же вид, что и соотношения /5/ для констант  $G_{ij}$ .

Полный гамильтониан модели, определяемый формулами /12/, /23/, /7/, /10/ и /25/, удобно преобразовать к фурье-представлению, пользуясь разложением для соответствующих операторов в виде

$$R_\lambda(\ell) = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}\vec{\ell}} R_\lambda(q), \quad /28/$$

$$S_\alpha(\ell) = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}\vec{\ell}} S_\alpha(q), \quad /29/$$

как R и M определяет трехкратно вырожденные моды с частотами  $\omega_R^2$  и  $\omega_M^2$  соответственно:

$$v_{\lambda\lambda'}(q_R) = \delta_{\lambda\lambda'} \omega_R^2, \quad v_{\lambda\lambda'}(q_M^{(\lambda)}) = \omega_M^2 \delta_{\lambda\lambda'}. \quad /17/$$

Структурный переход в точках R и M возникает при условии неустойчивости решетки в гармоническом приближении, т.е. при  $\omega_R^2 < 0$  и  $\omega_M^2 < 0$ . В дальнейшем эти частоты, как и в работах /35-38/, рассматриваются как подгочные параметры теории. Ангармоническое взаимодействие согласно /15/ имеет свойства  $\Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}-\vec{q}_R) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}) = \Gamma_{\lambda\lambda'}(\vec{q}-\vec{q}_M^{(\lambda)})$  и, в частности,

$$\Gamma_{\lambda\lambda'}(0) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(q_R) = -\Gamma_{\lambda\lambda'}(q_M^{(\lambda)}) = \frac{1}{8} [\Gamma_1 \delta_{\lambda\lambda'} + \Gamma_2 (1 - \delta_{\lambda\lambda'})]. \quad /18/$$

Гамильтониан взаимодействия вращений октаэдров с деформацией /4/ удобно представить в виде

$$H_{R-e} = \sum_{\ell\ell'} \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\ell, \ell') e_{\alpha\beta} \times \\ \times [R_\lambda(\ell) R_\mu(\ell') + R_\mu(\ell) R_\lambda(\ell')], \quad /19/$$

где тензор взаимодействия

$$G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\ell, \ell') = \frac{1}{4m} \sum_{\kappa\gamma\delta} G_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa) \gamma_\kappa(\ell, \ell') e_{\gamma\kappa\lambda} e_{\delta\kappa\mu}. \quad /20/$$

Здесь введена функция

$$\gamma_\kappa(\ell, \ell') = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{\ell}-\vec{\ell}')} \gamma_\kappa(q), \quad /21/$$

$$\gamma_\kappa(q) = \frac{1}{2} (1 - \cos q_\kappa a).$$

Учитывая свойства симметрии /5/ для констант  $G_{\alpha\beta\lambda\mu}(\kappa)$  и вводя новые постоянные:

$$g_{ij} = \frac{1}{2m} G_{ij}, \quad /22/$$

взаимодействие /19/ представим в виде

$$H_{R-e} = g_{12} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) R_a(\ell) R_a(\ell') \sum_{\beta \neq a} \gamma_\beta(\ell, \ell') + \\ + g_{13} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) \gamma_a(\ell, \ell') \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell) R_\beta(\ell') +$$

$$+ g_{11} \sum_{\ell\ell'} e_{aa}(\ell) \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell) R_\beta(\ell') \gamma_\delta(\ell, \ell') - \\ - g_{66} \sum_{\ell\ell'} \sum_{\alpha \neq \beta} e_{\alpha\beta}(\ell) [R_\alpha(\ell) R_\beta(\ell') + R_\alpha(\ell') R_\beta(\ell)] \gamma_\delta(\ell, \ell'). \quad /23/$$

Здесь в суммах по  $\beta \neq a$  индекс  $\delta \neq (a, \beta)$ . Отметим, что при выводе /19/ или /23// было использовано приближение

$$e_{\alpha\beta}(\ell, \kappa) = e_{\alpha\beta}(\vec{\ell} \pm \frac{1}{2} \vec{\xi}(\kappa)) \approx e_{\alpha\beta}(\ell), \quad /24/$$

которое справедливо лишь для деформации, медленно меняющейся в пространстве. Для спиновых операторов  $S_{\alpha\beta}(\ell)$  /8/ приближение /24/ не может быть использовано, и поэтому спин-фононное взаимодействие  $H_{S-R}$  в /9/ не удается представить в форме, аналогичной /19/. Поэтому запишем /9/, после подстановки /11/, в виде однократной суммы по узлам решетки:

$$H_{S-R} = \sum_{\ell a} S_{aa}(\ell) \{ k_{12} \sum_{\beta \neq a} R_a(\ell, \beta) R_a(\ell, \beta) + \\ + k_{13} \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell, a) R_\beta(\ell, a) + k_{11} \sum_{\beta \neq a} R_\beta(\ell, \delta) R_\beta(\ell, \delta) - \\ - 2k_{66} \sum_{\ell} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha\beta}(\ell) R_\alpha(\ell, \delta) R_\beta(\ell, \delta), \quad /25/$$

где индекс  $\delta \neq (a, \beta)$  и для сокращения записи введены операторы

$$R_a(\ell, \kappa) = \frac{1}{2} [R_a(\vec{\ell} + \vec{\xi}(\kappa)) - R_a(\vec{\ell})]. \quad /26/$$

Четыре независимые константы взаимодействия

$$k_{ij} = \frac{1}{2m} K_{ij} \quad /27/$$

определяются из соотношений симметрии для тензора  $K_{\alpha\beta\gamma\delta}(\kappa)$ , которые имеют тот же вид, что и соотношения /5/ для констант  $G_{ij}$ .

Полный гамильтониан модели, определяемый формулами /12/, /23/, /7/, /10/ и /25/, удобно преобразовать к фурье-представлению, пользуясь разложением для соответствующих операторов в виде

$$R_\lambda(\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{i\vec{q}\vec{\ell}} R_\lambda(q), \quad /28/$$

$$S_\alpha(\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{i\vec{q}\vec{\ell}} S_\alpha(q), \quad /29/$$



$$e_{\alpha\beta}(\vec{l}) = e_{\alpha\beta} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q u_{\alpha\beta}(q) e^{i\vec{q}\vec{l}}, \quad /30/$$

где  $e_{\alpha\beta}$  - тензор однородной деформации, а

$$u_{\alpha\beta}(q) = \frac{1}{2} \sum_j [e_j^\alpha(q) q_\beta + e_j^\beta(q) q_\alpha] Q_j(q). \quad /31/$$

Здесь  $e_j^\alpha(q)$  и  $Q_j(q)$  - вектор поляризации и нормальная координата длинноволновых акустических фононов с поляризацией  $j=1,2,3$ .

Подставляя эти фурье-разложения для операторов в гамильтониан модели, для отдельных слагаемых в /1/ получаем следующие выражения. Гамильтониан /12/, описывающий вращение октаэдров, принимает вид

$$H_R = \sum_{\lambda} \frac{1}{2I_\lambda} P_\lambda(q) P_\lambda(-q) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} v_{\lambda\mu}(q) R_\lambda(q) R_\mu(-q) + \frac{1}{4N} \sum_{\lambda\mu} \sum_{q_1 \dots q_4} \Gamma_{\lambda\mu}(q_1, q_2, q_3, q_4) R_\lambda(q_1) R_\lambda(q_2) R_\mu(q_3) R_\mu(q_4), \quad /32/$$

где

$$P_\lambda(q) = I_\lambda(q) R_\lambda(q) \quad /33/$$

и взаимодействие

$$\Gamma_{\lambda\mu}(q_1, q_2, q_3, q_4) = \Lambda(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \frac{1}{N} \sum_p \sum_q \Gamma_{\lambda\mu}(q) \times e^{i\vec{q}\vec{l}} (1 - e^{-i\vec{q}_1\vec{l}}) (1 - e^{-i\vec{q}_2\vec{l}}) (1 - e^{-i\vec{q}_3\vec{l}}) (1 - e^{-i\vec{q}_4\vec{l}}). \quad /34/$$

Здесь  $\Lambda(\vec{q}) = 1$  для векторов  $\vec{q}$ , равных нулю или вектору обратной решетки, и  $\Lambda(\vec{q}) = 0$  в остальных случаях.

Энергия однородной деформации решетки имеет вид

$$\frac{1}{N} H_e = \frac{1}{2} c_{11} \sum_a e_{aa}^2 + c_{12} \sum_{\alpha>\beta} e_{\alpha\alpha} e_{\beta\beta} + 2c_{44} \sum_{\alpha>\beta} e_{\alpha\beta}^2. \quad /35/$$

Гамильтониан, связанный с неоднородной деформацией /31/, удобно записать в виде энергии акустических фононов:

$$H_u = \sum_{qj} \left\{ \frac{1}{2M} P_j(q) P_j(-q) + \frac{M\omega_j^2(q)}{2} Q_j(q) Q_j(-q) \right\}, \quad /36/$$

где  $P_j(q) = M\dot{Q}_j(q)$ , а частоты фононов определяются из уравнения

$$\omega_j^2(q) e_j^\alpha(q) = \sum_\beta \mathcal{D}_{\alpha\beta}(q) e_j^\beta(q). \quad /37/$$

Динамическая матрица в длинноволновом пределе имеет вид

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}(q) = \frac{1}{M} \{ \delta_{\alpha\beta} [2c_{44} (q^2 - q_\alpha^2) + c_{11} q_\alpha^2] + (1 - \delta_{\alpha\beta}) (c_{12} + 2c_{44}) q_\alpha q_\beta \}. \quad /38/$$

Взаимодействие  $R_{25}$  моды с деформацией решетки выпишем лишь для тензора  $u_{\alpha\beta}(q)$ , поскольку соответствующие взаимодействия для однородной деформации  $e_{\alpha\beta}$  легко получить, пользуясь формальной подстановкой:  $u_{\alpha\beta}(q) \rightarrow \sqrt{N} e_{\alpha\beta} \Delta(\vec{q})$ . Учитывая /28/, /30/, получаем

$$H_{R-u} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q\alpha} u_{\alpha\alpha}(q) \{ \varepsilon_{12} R_\alpha(-q_1) R_\alpha(q_1 - q) \sum_{\beta \neq \alpha} \gamma_\beta(q_1 - q) + \sum_{\beta \neq \alpha} R_\beta(-q_1) R_\beta(q_1 - q) [ \varepsilon_{13} \gamma_\alpha(q_1 - q) + \varepsilon_{11} \gamma_\delta(q_1 - q) ] \} - \frac{\varepsilon_{66}}{\sqrt{N}} \sum_{q\alpha} \sum_{\alpha \neq \beta} u_{\alpha\beta}(q) R_\alpha(-q_1) R_\beta(q_1 - q) [ \gamma_\delta(q_1 - q) + \gamma_\delta(q_1) ]. \quad /39/$$

Для спиновой подсистемы получаем

$$H_s = \frac{1}{2} \sum_{q\alpha} J(q) S_\alpha(q) S_\alpha(-q) - \mu \sqrt{N} \sum_a H_a S_a(0), \quad /40/$$

$$H_{S-R} = \frac{1}{N} \sum_{q_1 \dots q_4} \Lambda(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \times \{ \sum_a S_{\alpha\alpha}(q_1, q_2) [ k_{12} R_\alpha(q_3) R_\alpha(q_4) \sum_{\beta \neq \alpha} d_\beta(q_3, q_4) + \sum_{\beta \neq \alpha} R_\beta(q_3) R_\beta(q_4) (k_{13} d_\alpha(q_3, q_4) + k_{11} d_\delta(q_3, q_4)) ] - \} \quad /41/$$

$$- 2k_{66} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha\beta}(q_1, q_2) R_\alpha(q_3) R_\beta(q_4) d_\delta(q_3, q_4) \},$$

где  $\delta \neq (\alpha, \beta)$  и введены функции

$$S_{\alpha\beta}(q_1, q_2) = \frac{1}{2} [ S_\alpha(q_1) S_\beta(q_2) + S_\beta(q_2) S_\alpha(q_1) ], \quad /42/$$

$$d_\alpha(q, q') = \frac{1}{4} [ \exp(iq_\alpha a) - 1 ] [ \exp(iq'_\alpha a) - 1 ]. \quad /43/$$

Для магнитоупругого взаимодействия /10/ получаем

$$H_{S-u} = - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q_1 q_2 q_3} \Lambda(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3) \times$$

$$\times \left\{ \frac{b_2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} S_{\alpha\beta}(q_1, q_2) u_{\alpha\beta}(q_3) + \right. \\ \left. + \frac{b_1}{2} \sum_{\alpha} S_{\alpha\alpha}(q_1, q_2) [2u_{\alpha\alpha}(q_3) - \sum_{\beta \neq \alpha} u_{\beta\beta}(q_3)] \right\}. \quad /44/$$

Взаимодействие с однородной деформацией  $e_{\alpha\beta}$  описывается формулой /44/ при подстановке  $u_{\alpha\beta}(q) \rightarrow \sqrt{N} e_{\alpha\beta} \Delta(q)$ . Формулы /32/, /35/, /36/, /39/-/41/ и /44/ дают наиболее общую запись гамильтониана модели.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ

Полученный в работе микроскопический модельный гамильтониан, содержащий лишь небольшое число параметров, может служить основой для исследования разнообразных свойств  $KMnF_3$ : изучения структурных и магнитных фазовых переходов, их взаимного влияния, изучения динамики решетки при фазовых переходах, в том числе затухания ультразвука с учетом спин-фононных взаимодействий, а также при анализе нейтронных экспериментов при структурных и магнитных фазовых переходах. Некоторые из этих проблем будут рассмотрены в следующих работах. Подчеркнем, что в отличие от феноменологического подхода, принятого в работе /31/ для описания структурного и магнитных фазовых переходов, в нашей модели все параметры имеют вполне определенный микроскопический смысл и не зависят от температуры.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bruce A.D., Cowley R.A. Structural Phase Transitions. Taylor and Francis, London, 1981; Scott J.F. Rev.Mod. Phys., 1974, 46, p.83; Shirane G. Rev.Mod.Phys., 1974, 46, p.437.
2. Minkiewicz V.J., Shirane G. J.Phys.Soc.Jap., 1969, 26, p.674; Shirane G., Minkiewicz V.J., Linz A. Solid State Comm., 1970, 8, p.1941.
3. Hidaka M. J.Phys.Soc.Jap., 1975, 39, p.180.
4. Hutton J., Nelmes R.J. J.Phys.C: Solid State Phys., 1981, 14, p.1713; Hutton J. et al. J.Phys.C: Solid State Phys., 1979, 12, p.5393.
5. Gesi K. et al. Phys.Rev. B, 1972, 5, p.1933.
6. Shapiro S.M. et al. Phys.Rev. B., 1972, 6, p.4332.
7. Comes R. et al. Phys.Lett. A, 1971, 34, p.65.
8. Schwabl F. Z.Phys., 1972, 254, p.57; Phys.Rev.Lett., 1972, 28, p.500; Phys.Rev. B, 1973, 7, p.2039.

9. Fossheim K., Holt R.M. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, p.730; Phys.Rev. B, 1981, 24, p.2680.
10. Strobel K., Geick R. J.Phys.C: Solid State Phys., 1979, 12, p.3855.
11. Lockwood D.J., Torrie B.H. J.Phys.C: Solid State Phys., 1974, 7, p.2729.
12. Hirotsu S., Sawada S. Solid State Comm., 1973, 12, p.1003.
13. Aharony A. Ferroelectrics, 1980, 24, p.313.
14. Furukawa M., Fujimori Y., Hirakawa K. J.Phys.Soc.Jap., 1970, 29, p.1528.
15. Хлюстов В.Г. и др. ФТТ, 1972, 14, с.175.
16. Cowley R.A., Buyers W.J.L. Rev.Mod.Phys., 1972, 44, p.406.
17. Hidaka M. J.Phys.Soc.Jap., 1975, 39, p.103.
18. Hidaka M. et al. Solid State Comm., 1975, 16, p.1121.
19. Pickart S.J., Collins M.G., Windsor C.G. J.Appl.Phys., 1966, 37, p.1054.
20. Lockwood D.J., Coombs G.J. J.Phys.C: Solid State Phys., 1975, 8, p.4062.
21. Cooper M.J., Mathans R. J.Appl.Phys., 1966, 37, p.1041.
22. Akutsu N., Ikeda H. J.Phys.Soc.Jap., 1981, 50, p.2865.
23. Fisher M.E. Rev.Mod.Phys., 1974, 46, p.597.
24. Maartensee J., Searle C.W. Phys.Rev. B, 1972, 6, p.894; Maartensee J. Solid State Comm., 1973, 12, p.1133.
25. Jakubowski P. Acta Phys.Pol. A, 1978, 54, p.397.
26. Cox D.E. et al. Phys.Rev. B, 1979, 19, p.5754.
27. Александров К.С. и др. Изв. АН СССР, сер.физ., 1971, 35, с.1820; Зиненко В.И. ФТТ, 1975, 17, с.1064.
28. Александров К.С. и др. Фазовые переходы в кристаллах галоидных соединений  $ABX_3$ . "Наука", Новосибирск, 1981.
29. Slonczewski J.C., Thomas H. Phys.Rev. B, 1970, 1, p.3599.
30. Гуфан Ю.М., Садков А.Н. ФТТ, 1979, 21, с.3066.
31. Изюмов Ю.А., Кассан-Оглы Ф.А., Найш В.Е. ФММ, 1981, 51, с.500.
32. Nattermann T. J.Phys.C: Solid State Phys., 1976, 9, p.3337.
33. Konwent H., Plakida N.M. Acta Phys.Pol. A, 1980, 57, p.119.
34. Thomas H. In: Structural Phase Transitions and Soft Modes (Eds. E.J.Samuelsen, E.Anderson, J.Feder). Universitetsforlaget, Oslo, 1971, p.15.
35. Pytte E., Feder J. Phys.Rev., 1969, 187, p.1077.
36. Feder J., Pytte E. Phys.Rev. B, 1970, 1, p.4803.
37. Pytte E. Phys.Rev.B, 1970, 1, p.924.
38. Feder J. In: Structural Phase Transitions and Soft Modes (Eds. E.J.Samuelsen, E.Anderson, J.Feder). Universitetsforlaget, Oslo, 1971, p.171.

39. Tindemans- van Eijidhoven J.C.M., Kroese C.J. J.Phys.C: Solid State Phys., 1975, 8, p.3963.  
 40. Izyumov Yu.A., Gurin O.B., Petrov S.B. J.Magn.Magn.Mat., 1981, 24, p.291.  
 41. Callen E., Callen H.B. Phys.Rev.A, 1965, 139, p.455.  
 42. Lines M.E. Phys.Rep., 1979, 55, p.135.

Конвент Х., Плакида Н.М.

P17-82-219

Микроскопическая теория структурных и магнитных фазовых переходов в кристалле  $\text{KMnF}_3$ .  
 Формулировка модели

Предложена микроскопическая модель для описания последовательности структурных и магнитных фазовых переходов в кристалле  $\text{KMnF}_3$ . На основе представления локальной нормальной координаты для мягких мод симметрии  $R_{25}$  и  $M_3$  учитывается взаимодействие этих мод с деформацией решетки и с системой антиферромагнитно связанных спинов марганца. Модель содержит небольшое число микроскопических параметров, позволяющих описать различные физические свойства кристалла.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Konwent H., Plakida N.M.

P17-82-219

A Microscopic Theory of Structural and Magnetic Phase Transitions in  $\text{KMnF}_3$  Crystal.  
 Formulation of the Model

A microscopic model for the description of structural and magnetic phase transitions in  $\text{KMnF}_3$  crystal is proposed. In the framework of the local normal mode approach to the soft lattice modes of the symmetry  $R_{25}$  and  $M_3$ , the interactions of these modes with the lattice elastic deformations and with the antiferromagnetically coupled spins of manganese ions are taken into account. The model includes a small number of microscopic parameters, which allows one to describe various physical properties of  $\text{KMnF}_3$  crystal.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.

Рукопись поступила в издательский отдел  
 23 марта 1982 года.